UNIVERSIDAD TÉCNICA FEDERICO SANTA MARÍA
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y AMBIENTAL
SANTIAGO-CHILE

"IMPLEMENTACIÓN DEL MÉTODO DE ADAPTACIÓN DE MODIFICADORES ANIDADOS PARA LA OPTIMIZACIÓN EN TIEMPO REAL CON PERTURBACIONES"

JAVIER BARROS MONROY

MEMORIA DE TITULACIÓN PARA OPTAR AL TITULO DE
INGENIERO CIVIL QUÍMICO

PROFESOR GUÍA: **DR. DANIEL NAVIA LÓPEZ**
PROFESOR CORREFERENTE: **M. SC. PAULINA QUINTANILLA**

AGOSTO 2018

Agradecimientos

Agradecer al proyecto Fondecyt de Iniciación 11160203 por el apoyo económico

Agradecer a mi padre y mi hermano, Christian y Felipe, por todas las lecciones de vida que me han dado y desde el comienzo de esta etapa han estado ahí para apoyarme y motivarme a seguir superándome.

A mis madres y mis hermanas, Solange, Paola, Mané y Antonia quienes siempre han estado ahí para ayudarme y sacarme una sonrisa.

Al profesor Daniel Navia, quien hace dos años me recibió con las puertas abiertas al solicitar ser su ayudante, por su constante apoyo, motivación y consejos en este último tiempo, además de ser el principal guía de esta investigación.
A Paulina Quintanilla por los consejos, la ayuda y guiar esta investigación.

A toda mi familia, siempre me han apoyado y motivado en las decisiones que he tomado.

A mis amigos de la vida, Franco, Neira y Yerko, por todos los buenos momentos que hemos compartido y también por los que nos han tenido que contar.

A mis amigos de la universidad, Juan, Félix, Cristóbal, Cony, Carla y Felipe, porque la amistad perdure y pasen a ser amigos de la vida.

A los caídos, Sebastián y Sebastián, a pesar de todo, la amistad sigue en pie.

A mis compañeros de generación, por todas esas horas de estudio, desvelo y de ansias, pero también de mucha entretención, alegrías y sonrisas.

A los profesores y al apoyo académico del departamento de Ingeniería Química y Ambiental, por la paciencia y la formación entregada.

A la Universidad Técnica Federico Santa María y al departamento de Ingeniería Química y Ambiental por permitir el desarrollo de esta investigación.

Agradecer a todas las personas que conocí y compartí en esta hermosa etapa que fue la Universidad, las que me ayudaron y me pidieron ayuda, probablemente sin su paso por mi vida no estaría donde estoy.

A mi padre y mi hermano: Christian y Felipe.

Resumen

La presente investigación tiene como objetivo estudiar el efecto de las perturbaciones en la metodología de Optimización en Tiempo Real (RTO) con Adaptaciones de Modificadores (MA), y proponer una metodología basada en la optimización anidada que posea capacidad de respuesta frente a estos cambios. Para esto se utilizará el problema de Otto Williams bajo la influencia de perturbaciones en el flujo de alimentación. Esta información no estará disponible para la capa de optimización de procesos.

La RTO es utilizada para encontrar puntos de operación óptimos en procesos que presentan tanto incertidumbre paramétrica como estructural en el modelo que lo describe. Para alcanzar el punto óptimo, la idea es utilizar las medidas disponibles del proceso para actualizar el modelo erróneo. Existen dos metodologías que han alcanzado con éxito el óptimo del proceso, aún en presencia de la incertidumbre ya mencionada, estas son la Adaptación de Modificadores (MA) y el Método Anidado con Adaptación de Modificadores (NMA). Ambos actualizan las condiciones necesarias de optimalidad del problema de optimización basado en modelo (NCO). La diferencia está en cómo se calcula los parámetros que actualizan las NCO, ya que el MA lo realiza mediante la estimación iterativa de gradientes experimentales de la función objetivo y de las restricciones de desigualdad, mientras que el NMA actualiza las NCO utilizando una capa superior de optimización, la cual puede ser implementada con un algoritmo libre de derivadas. Hasta el momento no se ha estudiado el efecto que tiene las incertidumbres de proceso, i.e., perturbaciones, en las propiedades de convergencia de ambos algoritmos, y puesto que las perturbaciones continuamente afectan a los procesos, su análisis es mandatorio. En el caso del MA el efecto de las perturbaciones se ve reflejado en el mal cálculo de los gradientes experimentales si no se conoce su valor. En el caso de NMA, las perturbaciones pueden localizar el óptimo del proceso en un punto previamente descartado, lo que generaría estancamiento.

Es por esto que se propone implementar un sistema de RTO basado en la metodología de los modificadores anidados, y estudiar el desempeño de distintos algoritmos de búsqueda en la capa superior de optimización, cuando un proceso se encuentra sujeto a cambios continuos como consecuencia de las perturbaciones.

Para estudiar el efecto de las perturbaciones, se utiliza el ejemplo del reactor de Otto Williams, suponiendo que el flujo de alimentación de una de las materias primas es desconocido y cambia de acuerdo a dos comportamientos esperados: (1) perturbación determinista con forma de rampa, y (2) perturbación con componente estocástica simulada mediante un modelo ARIMA.

La metodología existente basada en gradientes no logra encontrar el óptimo del proceso ante la presencia de perturbaciones agregadas a frecuencias menores a 3 ciclos de ejecución de la

capa de RTO. Esto se debe a que al utilizar la información pasada para estimar los gradientes experimentales, y al no estar disponible la información de la perturbación, la estimación de la derivada del proceso con respecto a las variables de decisión es errónea. Cuando las perturbaciones tiene una frecuencia de cambio menor a 3 ciclos de ejecución de la RTO, los gradientes se calculan de manera adecuada, obteniendo resultados con errores de detección del óptimo del proceso menores al 15%.

El método NMA con algoritmo de Nelder Mead presenta estancamiento, lo cual comprueba lo señalado por la literatura. Este estancamiento es generado por las estrategias realizadas por este algoritmo, en donde al no encontrar un punto que mejore la función objetivo da paso al encogimiento, realizando este procedimiento de manera constante.

La metodología propuesta logra seguir la trayectoria óptima del proceso con la inclusión de perturbaciones para todos los casos en estudio. Los resultados muestran que para el ejemplo estudiado, los errores de detección del óptimo del proceso son menores al 10%, incluyendo casos que presentan errores cercanos a 0.

Finalmente, se realiza una propuesta para llevar a cabo el experimento de la RTO en el problema de Otto Williams en el laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María.

Abstract

The objective of this research is to study the effect of the disturbances in the existing methodology of the Real-Time Optimization (RTO) with Modifier Adaptation (MA), and to propose a methodology based on the Nested Optimization that will be robust against these changes. The Otto-Williams reactor problem will be used, where the changes or disturbances are going to be added to the feed flow, and this information it is not going to be available for the layer of process optimization.

The RTO is used to find the optimum operational points in the process that present structural and parametric uncertainty for the model which describes. To reach the optimal point, it is necessary to use measurements from the process in order to update the model with mismatch. There are two methodologies that have successfully reached the optimum of the process, even in the presence of uncertainty, which corresponds to Modifier Adaptation (MA) and the Nested Method with Modifier Adaptation (NMA). Both update the necessary condition of optimality (NCO) from the problem of optimization based on the model. The difference is in how the parameters are calculated which update the NCO, the MA does it through the iterative estimation of the experimental gradients of the objective function and the inequality constraints, while the NMA update the NCO using an upper optimization layer, which can be implemented using a derivate free optimization. Until now, it has not been studied the effect that will make the process uncertainty, i.e., disturbances, in the properties of convergence of both algorithms, and since the disturbances continuously affect the process, the analysis is mandatory. In the case of MA, the effects of the disturbances are reflected in the bad calculation of the experimental gradients if the value of the disturbance are unknown. In the case of NMA, the disturbances can track the optimum of the process in a previously discarded point, which would generate stagnation.

According to above, it is proposed a system of RTO based on the methodology of nested modifier methodology, and to study the performance of different algorithms in the upper optimization layer, when the process is subject to continuous changes as a consequence of the disturbances.

To study the effect of the disturbances, it is used the example of the Otto-Williams reactor, assuming that the feed flow of a raw material is unknown, and changes according to expected behaviors: (1) deterministic disturbances in the form of a step, and (2) disturbances with stochastic component simulated through an ARIMA model.

The existing methodology based on gradients cannot find the optimum of the process in the presence of disturbances, which were added in a frequency lower than 3 cycles of the RTO layer executions. This can be explained because the methodology uses past information to estimate the experimental gradients, and when the disturbance information is not available,

the estimation of the process gradients with respect of the decision variables is erroneous. When the disturbances have a frequency of change higher than 3 cycles of the RTO layer executions, the gradients are calculated in an appropriate way, obtaining a result with errors of detection of the optimum of the process less than 15%.

The NMA methodology with the Nelder Mead algorithm present stagnation, which confirms the theory from the literature. This stagnation is generated by the strategies used for this algorithm, due to not being able to find a point that improves the objective function gives way to shrinkage, performing this procedure consistently.

The proposed methodology can follow the trajectory of the process in presence of the disturbances, for all the cases. The errors obtained were less than 10%, and in some cases they were close to zero.

Finally, a proposal is made to set up the Otto Williams Reactor at the Optimization Laboratory at Universidad Técnica Federico Santa María, in order to obtain experimental results using the RTO methodology.

Índice de contenido

1. Introducción 1
2. Objetivos 2
2.1 Objetivo General 2
2.2 Objetivos específicos 2
3. Antecedentes Generales 3
3.1 Control de procesos 3
3.2 Optimización en Tiempo Real 5
3.2.1 Optimización en Tiempo Real de dos etapas 5
3.2.2 Metodología de adaptación de modificadores (MA) 6
3.2.3 Método de adaptación de modificadores dual (DMA) 9
3.2.4 Adaptación de modificadores anidados (NMA) 10
3.3 Optimización libre de gradientes 12
3.3.1 Nelder Mead 13
3.3.2 Pattern Search 14
3.4 Perturbaciones 16
4. Metodología 17
4.1 Propuesta de manejo de perturbaciones 17
4.2 Modelo Otto-Williams 18
4.2.1 Optimización modelo de Otto-Williams 21
4.3 Implementación de las perturbaciones 23
4.4 Propuesta de implementación experimental. 26
5. Resultados 30
5.1 Simulación Otto Williams sin perturbaciones. 30
5.2 Perturbaciones tipo escalón 32
5.2.1 Perturbación escalón cada un ciclo. 32
5.2.2 Perturbación escalón cada dos ciclos 38
5.2.3 Perturbación escalón cada 3 ciclos o más. 44
5.3 Perturbaciones con modelo ARIMA 49
5.3.1 Perturbación modelo ARIMA cada 1 ciclo 49
5.3.2 Perturbación modelo ARIMA cada dos ciclos 54
5.3.3 Perturbación modelo ARIMA cada 3 o más iteraciones 57
5.4 Propuesta de implementación experimental 62

6. Conclusiones 67
7. Recomendaciones a trabajos futuros 69
Referencias 70
Apéndice 72
Apéndice A 72
Apéndice B 74

Índice de figuras

Figura 1: Esquema general de un proceso. 3
Figura 2: Estructura jerárquica del control con optimización. 4
Figura 3: Algoritmo de RTO de dos etapas. 6
Figura 4: Algoritmo de RTO con MA. 8
Figura 5: Algoritmo de RTO con adaptación de modificadores anidados. 12
Figura 6: Estrategias utilizadas por el algoritmo de Nelder Mead. 13
Figura 7: Estrategias utilizadas por los métodos de Pattern Search. 15
Figura 8: Diagrama para incluir las perturbaciones a los sistemas RTO. 17
Figura 9: Diagrama del reactor Otto-Williams. 19
Figura 10: Porcentaje de cambio de las variables de decisión al variar el flujo de A. 23
Figura 11: Perturbaciones escalón realizadas al flujo de A. 24
Figura 12: Perturbaciones con modelo ARIMA (1,0,2). 25
Figura 13: P&ID del equipo experimental 27
Figura 14: Foto real del equipo experimental. 27
Figura 15: Resultados obtenidos para las variables de decisión utilizando las tres metodologías. 31
Figura 16: Resultados de las composiciones obtenidas utilizando las tres metodologías. 31
Figura 17: Resultados obtenidos con el método dual. 32
Figura 18: Resultado de las composiciones con el método dual. 33
Figura 19: Resultados obtenidos con NMA usando Nelder Mead. 34
Figura 20: Resultados de las composiciones con NMA usando Nelder Mead. 34
Figura 21: Resultados obtenidos con NMA usandoGSSNp1. 35
Figura 22: Resultados de las composiciones con NMA usando GSSNp1. 36
Figura 23: Resultados obtenidos con NMA usando MADS2N. 37
Figura 24: Resultados de las composiciones con NMA usando MADS2N. 37
Figura 25: Resultados obtenidos por el método dual. 38
Figura 26: Resultados de las composiciones con el método dual. 39
Figura 27: Resultados obtenidos por NMA usando Nelder Mead. 40
Figura 28: Resultados de las composiciones con NMA usando Nelder Mead. 40
Figura 29: Mejor resultado obtenido por la metodología propuesta. 41
Figura 30: Composiciones obtenidas por el mejor resultado de la metodología propuesta. 42
Figura 31: Peor resultado obtenido por la metodología propuesta. 43
Figura 32: Composiciones obtenidas para el peor resultado de la metodología propuesta. . 43

Figura 33: Resultados de las variables de decisión para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO. 44
Figura 34: Resultados de la función objetivo para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO. 45
Figura 35: Resultados de las composiciones para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO. 45
Figura 36: Mejores resultados para las variables de decisión utilizando metodología propuesta. 46
Figura 37: Mejores resultados para la función objetivo utilizando la metodología propuesta. 47
Figura 38: Mejores resultados de las composiciones obtenidas utilizando la metodología propuesta. 47
Figura 39: Resultados obtenidos por el método dual. 50
Figura 40: Composiciones obtenidas por el método dual. 50
Figura 41: Resultados obtenidos por NMA utilizando Nelder Mead. 51
Figura 42: Composiciones obtenidas por NMA utilizando Nelder Mead. 52
Figura 43: Resultados obtenidos por la metodología propuesta. 53
Figura 44: Composiciones obtenidas con el mejor resultado por la metodología propuesta. 53
Figura 45: Resultados obtenidos por el método dual. 54
Figura 46: Composiciones obtenidas por el método dual. 55
Figura 47: Resultados obtenidos por la metodología propuesta. 56
Figura 48: Composiciones obtenidas por la metodología propuesta. 56
Figura 49: Resultados de las variables de decisión obtenidos por el método dual. 57
Figura 50: Resultados de la función objetivo obtenidos por el método dual. 58
Figura 51: Resultados de las composiciones obtenidos por el método dual. 58
Figura 52: Resultados de las variables de decisión obtenidos por la metodología propuesta. 59
Figura 53: Resultados de la función objetivo obtenidos por la metodología propuesta. 60
Figura 54: Resultados de las composiciones obtenidos por la metodología propuesta. 61
Figura 55: Resultados obtenidos al utilizar los parámetros escalados en una RTO sin perturbaciones. 66
Figura 56: Camino 1 del modelo ARIMA. 72
Figura 57: Camino 2 del modelo ARIMA. 73
Figura 58: Camino 3 del modelo ARIMA. 73
Figura 59: Camino 4 del modelo ARIMA. 74
Figura 60: Camino 5 del modelo ARIMA. 74

Índice de tablas

Tabla 1: Valores utilizados para modelar el reactor de Otto-Williams (Navia López, 2013). 21
Tabla 2: Valores de las restricciones utilizadas en el problema de optimización (Rodríguez-Blanco et al., 2017). 23
Tabla 3: Descripción de la simbología utilizada en el P&ID 28

Tabla 4: Instrumentos que se encuentran conectados a cada módulo. 28
Tabla 5: Modelo de los equipos utilizados 29
Tabla 6: Errores obtenidos para las metodologías utilizadas. 48
Tabla 7: Resultados obtenidos por los métodos utilizados..... 62
Tabla 8: Obtención de los flujos de A y B escalados. 64
Tabla 9: Resultados obtenidos para el escalamiento de la temperatura. 64
Tabla 10: Características del computador para realizar las simulaciones. 75

1. Introducción

La industria de procesos se encuentra constantemente en busca de mejoras continuas, ya sea para aumentar su beneficio, aprovechar de mejor manera los recursos o disminuir las pérdidas, solo por nombrar algunas. Para lograr estas mejoras existen diferentes herramientas, como por ejemplo la programación matemática, que permite resolver un problema de optimización utilizando un modelo, sujeto a restricciones.

Uno de los problemas de la programación matemática es que los modelos disponibles no necesariamente representan los fenómenos que describen los procesos, lo que puede implicar que la solución obtenida es sub-óptima e incluso no factible cuando se aplica al proceso real, a esto se le conoce como incertidumbre en el modelado. Para sobreponerse a la incertidumbre de modelado, la Optimización en Tiempo Real (RTO, por sus siglas en inglés) utiliza las medidas disponibles del proceso para actualizar el problema de programación matemática, de tal forma que se encuentre el óptimo real de un proceso de manera iterativa. En particular, la RTO con adaptación de modificadores (MA, por sus siglas en inglés) permite encontrar el óptimo de un proceso incierto cuando la incertidumbre del modelo es estructural.

En los procesos productivos, es esperable que variables no controladas afecten las salidas, a estas variables se les llama perturbaciones. Puesto que las perturbaciones pueden cambiar el valor de las variables de salida de un proceso, también pueden modificar la ubicación de su óptimo. Tomando esto en cuenta, es necesario estudiar el efecto que tienen las perturbaciones en la RTO con MA.

2. Objetivos

2.1 Objetivo General

- El objetivo general de este trabajo es estudiar el efecto que tienen los cambios en las perturbaciones en la RTO con adaptación de modificadores y proponer una metodología que sea robusta frente a estos cambios.

2.2 Objetivos específicos

- Definir un proceso base para la implementación de un sistema RTO con perturbaciones
- Evaluar el desempeño de métodos existentes en la RTO, considerando cambios en las perturbaciones del sistema.
- Implementar un sistema de RTO basado en el paradigma de la optimización de modificadores anidados, y evaluar su desempeño considerando cambios en las perturbaciones.
- Proponer una metodología para desarrollar un sistema experimental.

3. Antecedentes Generales

3.1 Control de procesos

Hoy todo proceso debe cumplir con una serie de requerimientos, ya sean medioambientales, de producción, seguridad o económicos, entre otros. Para asegurar el cumplimiento de estos requerimientos, es necesario contar con técnicas fiables que permitan su operación con una alta eficiencia y grado de flexibilidad.

Los sistemas de control tienen como objetivo actuar sobre las variables que se puedan manipular, con el propósito de cumplir con los requerimientos de funcionamiento, o mantener un sistema estable ante la presencia de fuentes de cambios que puedan afectar al proceso (Bordóns Alba, 2000), tal como se presenta en la Figura 1.

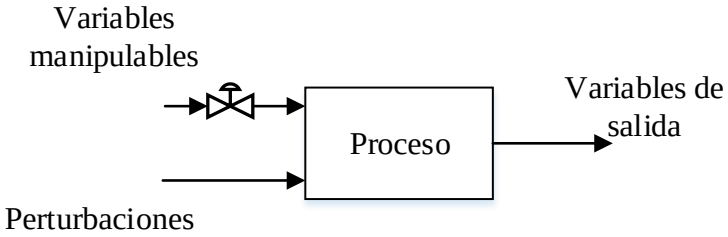

Figura 1: Esquema general de un proceso.

El objetivo principal de los sistemas de control es la mantención de los procesos a un nivel seguro, evitando comportamientos indeseados o riesgosos, y disminuyendo la variabilidad en la calidad del producto final.

Luego de cumplir estos dos puntos, es posible mejorar el rendimiento añadiendo una capa que incluya una metodología de optimización de procesos que actúen por sobre la capa de control (Tatjewski, 2008). Esta capa utiliza información del proceso para actualizar las consignas del control de manera de mejorar los resultados obtenidos.

La estructura de control con una capa de optimización se presenta en la Figura 2.

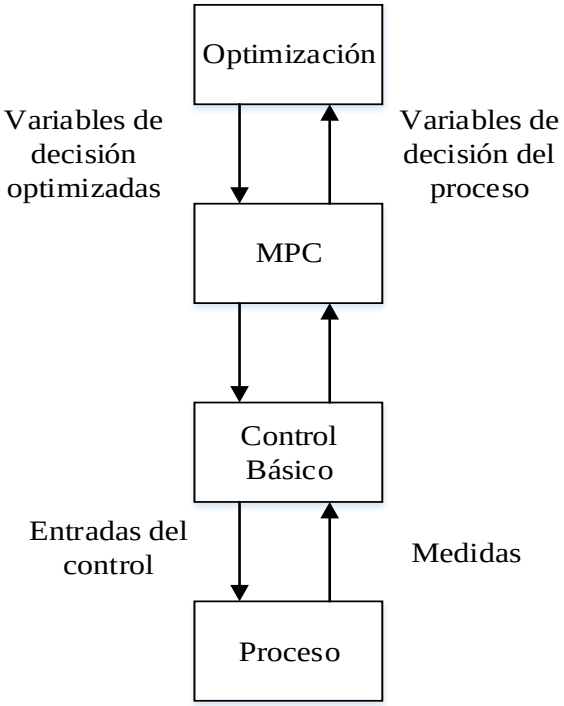

Figura 2: Estructura jerárquica del control con optimización.

La mayoría de los problemas en la ingeniería de procesos cuenta con una innumerable cantidad de soluciones, siendo necesario definir un objetivo y luego optimizar, con el fin de obtener la mejor solución posible.

La optimización es un método que busca resolver problemas de minimización o maximización de alguna función objetivo que puede estar relacionada con variables operacionales, reducción de costos o disminución de tiempos, entre otros. Para utilizar esta herramienta se debe contar con ciertos elementos. El primero de ellos es la función objetivo, la que proporciona una medida de rendimiento que usualmente corresponde al beneficio del proceso. Para relacionar la función objetivo con las variables de decisión de un proceso, se necesita de un modelo que describa el comportamiento (Biegler, 2010), además las variables de decisión pueden tener límites, o las variables de salida deban cumplir requerimientos, esto correspondería a las restricciones del problema . De esta forma, la optimización busca definir la mejor solución de las variables relacionadas con el proceso que maximicen o minimicen el objetivo, cumpliendo las restricciones del problema.

Sin embargo, el problema en la implementación de esta metodología se encuentra en la formulación del modelo del proceso, ya que este puede no representar la realidad del fenómeno ocurrido y por tanto las consignas entregadas pueden ser erróneas o diferir de la mejor solución (Chaves, López, Zapata, Robayo, & Niño, 2016).

3.2 Optimización en Tiempo Real

La optimización en tiempo real es una herramienta de optimización que permite sobreponerse a la incertidumbre de modelado, permitiendo alcanzar el óptimo de un proceso incierto.

El objetivo es encontrar la mejor solución de algún proceso en estado estacionario, mientras se satisfacen las restricciones del sistema, otorgando puntos de operación que mejoren el beneficio.

El problema de optimización para un sistema en estado estacionario se puede formular según la Ecuación (1), en donde el subíndice p representa una medida o estimación del proceso:

$$\begin{aligned} &\min_{u} \phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{u}) \\ &s.t.\ \ \boldsymbol{g_p}(\boldsymbol{u}) \leq \boldsymbol{0} \\ &\boldsymbol{u^L} \leq \boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{u^U} \end{aligned} \tag{1}$$

Siendo $\phi_p \in \mathbb{R}$ la función de costo a minimizar, $\boldsymbol{g_p} \in \mathbb{R}^{n_g}$ las restricciones de desigualdad del proceso, $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^{n_u}$ las variables de decisión, y $\boldsymbol{u^L}$ y $\boldsymbol{u^U}$ sus límites inferiores y superiores respectivamente.

Dado que es muy difícil conocer una fiel representación del proceso real al problema de la Ecuación (1), se utiliza la aproximación de este, que está representado por la Ecuación (2):

$$\begin{aligned} &\min_{u} \phi_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) \\ &s.t.\ \ \boldsymbol{g_m}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) \leq \boldsymbol{0} \\ &\boldsymbol{u^L} \leq \boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{u^U} \end{aligned} \tag{2}$$

Donde ϕ_m y $\boldsymbol{g_m}$ representan la función de costo y restricciones del modelo, $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^{n_\alpha}$ son los parámetros del modelo utilizado.

El objetivo de la Ecuación (1) es encontrar el punto óptimo de operación del proceso ($\boldsymbol{u_p^*}$), que minimice la función de costo y se encuentre dentro de la región que cumpla con las restricciones del proceso, mientras que al resolver la Ecuación (2), se encuentra el valor óptimo del modelo ($\boldsymbol{u}^*$), los cuales pueden diferir producto de las incertidumbres de modelado.

3.2.1 Optimización en Tiempo Real de dos etapas

La RTO tiene sus inicios a finales de la década de los 70, con un algoritmo de dos etapas que busca solucionar la incertidumbre relacionada con el modelo (Bamberger & Isermann, 1978). El método se divide en dos etapas, estimación de parámetros y optimización económica, las

que se resuelven de manera iterativa. En la primera etapa se actualizan los parámetros $\boldsymbol{\alpha}$ del modelo con las medidas disponibles del proceso, tomando en consideración las incertezas existentes. Esta etapa se logra resolviendo la Ecuación (3):

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{\alpha}} \ (\boldsymbol{y_p} - \boldsymbol{y_m})^{\boldsymbol{T}} (\boldsymbol{y_p} - \boldsymbol{y_m}) \\ &s.t. \ \boldsymbol{y_m} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) \\ &\boldsymbol{\alpha^L} \leq \boldsymbol{\alpha} \leq \boldsymbol{\alpha^U} \end{aligned} \tag{3}$$

Siendo $\boldsymbol{y_p}$ mediciones del proceso, $\boldsymbol{y_m}$ las predicciones del modelo y $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha})$ corresponde al modelo utilizado para obtener las predicciones.

Una vez alcanzado el estado estacionario, los parámetros actualizados obtenidos de la Ecuación (3), son utilizados para resolver la Ecuación (2), para luego implementar el resultado en el proceso. Este procedimiento se aplica de manera iterativa de acuerdo al algoritmo resumido en la Figura 3.

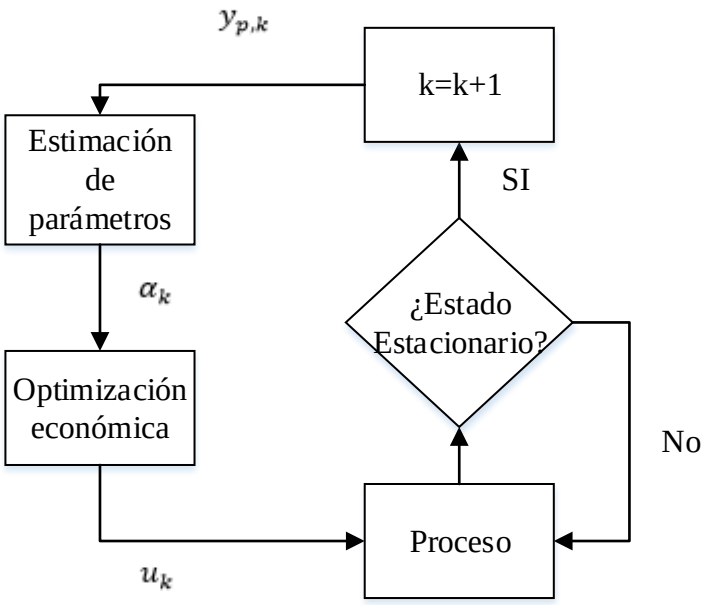

Figura 3: Algoritmo de RTO de dos etapas.

3.2.2 Metodología de adaptación de modificadores (MA)

La desventaja del algoritmo de RTO en dos etapas es que el óptimo del proceso puede no ser alcanzado si la incertidumbre del modelo no es solo paramétrica, sino también estructural. Se define incertidumbre estructural cuando el modelo disponible no considera las relaciones entre las variables de decisión y las variables de salida, que sí tiene el proceso real. Esto puede implicar que no existe un conjunto de parámetros $\boldsymbol{\alpha}$ que al ser aplicado al modelo, permita encontrar $\boldsymbol{u_p^*}$.

Para tomar en cuenta las incertidumbres estructurales surge el método "*Integrated System Optimization Parameter Estimation*" (ISOPE) realizado por Roberts (1979). En este método se agrega una corrección de primer orden a la función objetivo del problema de optimización basado en modelo que hace que el gradiente de la función de costo del modelo se iguale a la del proceso bajo el supuesto de convergencia del algoritmo de RTO, lo que para problemas no restringidos implica que las condiciones necesarias de optimalidad (NCO) del modelo y del proceso son las mismas. La generalización del método ISOPE para problemas restringidos corresponde al algoritmo de Adaptación de Modificadores (MA, por sus siglas en inglés), el cual fue presentado por Chachuat (2009) y formalizado por Marchetti (2009), realizando modificaciones para asegurar la convergencia a un punto de operación que cumpla con las condiciones de optimalidad del proceso con restricciones.

En esta metodología en vez de actualizar los parámetros del modelo, es tomada en consideración la incertidumbre de modelado, mediante la adición de modificadores que corrigen la función objetivo y las restricciones tal como lo muestra la Ecuación (4).

$$\begin{aligned} &\min_{u} \phi_m = \phi_m(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}) \\ &s.t \quad \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{m}} = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}} - \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k-1}}) + \boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}} \leq 0 \\ &\boldsymbol{u}^{\boldsymbol{L}} \leq \boldsymbol{u} \leq \boldsymbol{u}^{\boldsymbol{U}} \end{aligned} \tag{4}$$

En donde los modificadores $\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}^{n_u}, \boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}^{n_g \times n_u}$ y $\boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} \in \mathbb{R}^{n_g}$ son estimados a partir del punto de operación actual del proceso dados por la Ecuación (5).

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{u}} \phi_p(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \phi_m(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha}) \\ &\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}}^{\boldsymbol{T}} = \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha}) \\ &\boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{m}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha}) \end{aligned} \tag{5}$$

A pesar de conseguir alcanzar el óptimo de la planta, el algoritmo de MA puede hacerlo siguiendo un camino no factible, por esto, se recomienda utilizar el filtro de la Ecuación (6) para así suavizar los cambios y seguir un camino factible:

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\lambda}})\boldsymbol{\lambda}_{\boldsymbol{k-1}} + \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\lambda}}(\boldsymbol{\nabla}_{\mathbf{u}} \phi_p(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \phi(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha})) \\ &\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k}} = \left(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\gamma}}\right)\boldsymbol{\gamma}_{\boldsymbol{k-1}} + \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\gamma}}(\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{g}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{u}} \boldsymbol{g}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha})) \\ &\boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{k}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\epsilon}})\boldsymbol{\epsilon}_{\boldsymbol{k-1}} + \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\epsilon}}(\boldsymbol{g}_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^*, \boldsymbol{\alpha})) \end{aligned} \tag{6}$$

Siendo $\boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\lambda}}, \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\gamma}}, \boldsymbol{K}_{\boldsymbol{\epsilon}}$ las ganancias de los filtros con valores en el intervalo [0,1].

El problema de la Ecuación (4) es resuelto iterativamente, entregando las consignas $\boldsymbol{u_k^*}$ al proceso hasta alcanzar el nuevo estado estacionario para actualizar los modificadores. El algoritmo de esta metodología se presenta en la Figura 4 .

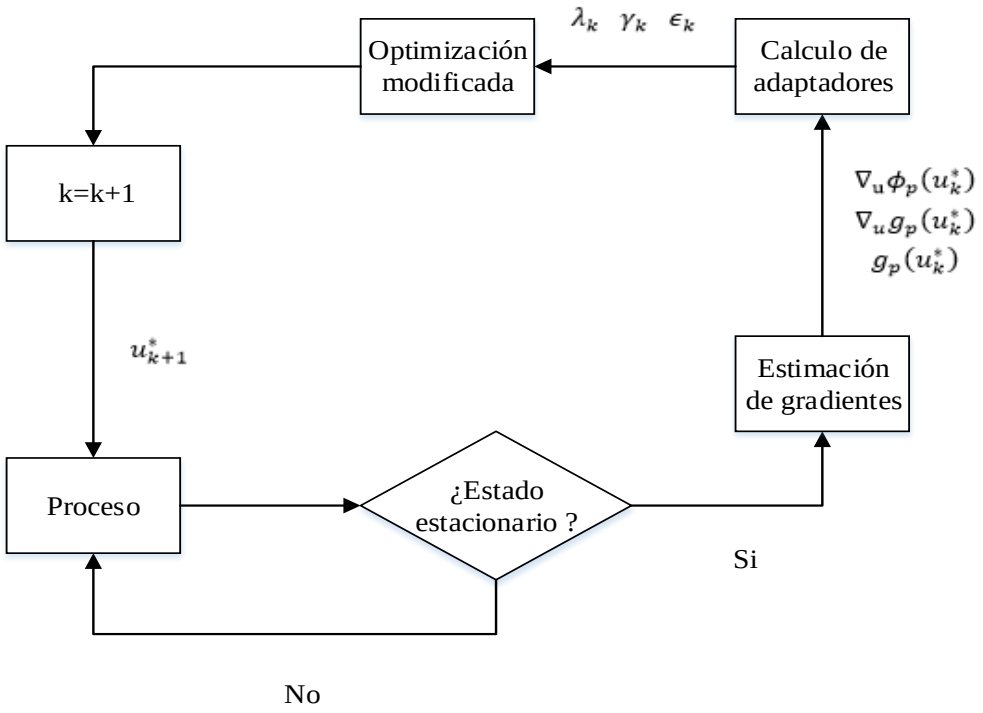

Figura 4: Algoritmo de RTO con MA.

La principal dificultad de esta metodología corresponde a la estimación de los gradientes del proceso de la función objetivo y las restricciones para el cálculo de los modificadores $\boldsymbol{\lambda_k}$ y $\boldsymbol{\gamma_k}$, puesto que no se conoce el mapeo exacto del proceso y solo se pueden utilizar métodos basados en perturbaciones, o que relacionen datos pasados. La etapa de estimación de los gradientes experimentales se indica en la Figura 4. En este trabajo se estimaron los gradientes de un proceso incierto mediante un método basado en perturbaciones, utilizando una aproximación con diferencias finitas, y una aproximación de las derivadas parciales mediante el cálculo de derivadas direccionales (método dual).

La implementación del método perturbado basado en diferencias finitas (Roberts, 1979), corresponde a la metodología más sencilla para la estimación de los gradientes experimentales. Consiste en aplicar aproximaciones de primer orden a las derivadas parciales. Por lo tanto, es necesario realizar perturbaciones lo suficientemente grandes para no ser confundidas con el ruido del proceso, presentándose como un problema para sistemas grandes con una gran cantidad de variables de decisión.

Para el cálculo de los gradientes, presentada en la Ecuación (7), se deberá contar con un número de perturbaciones $\boldsymbol{\Delta u_i} = \boldsymbol{u_k} - \boldsymbol{u_{k-1}}$ igual al número de variables de decisión que se tenga.

$$\begin{aligned} &\frac{\partial \phi_{p,k}}{\partial u_i} = \frac{\left(\phi_{p,k} - \phi_{p,k-1}\right)}{\left(u_{i,k} - u_{i,k-1}\right)} \\ &\frac{\partial \boldsymbol{g_{p,k}}}{\partial \boldsymbol{u_i}} = \frac{\left(\boldsymbol{g_{p,k}} - \boldsymbol{g_{p,k-1}}\right)}{u_{i,k} - u_{i,k-1}} \\ &\forall\ i = 1,2, \dots, n_u \end{aligned} \tag{7}$$

En el caso de un sistema real cada perturbación correspondería a la espera de un estado estacionario para poder realizar la medida.

3.2.3 Método de adaptación de modificadores dual (DMA)

El hecho de tener que perturbar el sistema en cada iteración RTO es un problema para aquellos sistemas que tienen muchas variables de decisión. Por esto, surge una metodología basada en la aproximación de las derivadas parciales, utilizando derivadas direccionales. Mediante esta metodología se utiliza el punto actual y los n_u puntos anteriores para calcular el gradiente del proceso, eliminando así la necesidad de perturbar el sistema constantemente (Brdys & Tatjewski, 2005; Brdyś & Tatjewski, 1994). Puesto que los datos anteriores deben tener suficiente energía para estimar el gradiente del sistema experimental, es necesario añadir una restricción extra al problema de optimización de la Ecuación (4), que garantice un nivel de excitabilidad adecuado. A esta restricción se le denomina “dual”. En este trabajo se utilizó la restricción dual propuesta por Brdys y Tatjewsks (1994).

Se define el vector de diferencias con respecto a medidas previas según la Ecuación (8).

$$\boldsymbol{s_{ki}} = \boldsymbol{u_{k-i}} - \boldsymbol{u_k} \quad \forall\ i = 1, \dots, n_u \tag{8}$$

Donde cada vector $\boldsymbol{s_{ki}}$ es linealmente independiente. A partir de los vectores de diferencia, se define la matriz cuadrada no singular $\boldsymbol{S_k} \in \mathbb{R}^{n_u \times n_u}$, formada los vectores $\boldsymbol{s_{ki}}$, con respecto a n_u periodos anteriores, presentada en la Ecuación (9).

$$\boldsymbol{S_k} = \left[\boldsymbol{s_{ki}} \dots \boldsymbol{s_{kn_u}}\right]^T \tag{9}$$

Los gradientes del proceso pueden ser estimados a partir de aproximación de la definición de derivadas direccionales a derivadas parciales, de acuerdo a la Ecuación (10).

$$\nabla\phi_p = (\boldsymbol{S_k})^{-1}\begin{bmatrix}\phi_{p,k-1} - \phi_{p,k} \\ \cdots \\ \phi_{p,k-n_u} - \phi_{p,k}\end{bmatrix}$$
$$\nabla\boldsymbol{g_p} = (\boldsymbol{S_k})^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{g_{p,k-1}} - \boldsymbol{g_{p,k}} \\ \cdots \\ \boldsymbol{g_{p,k-n_u}} - \boldsymbol{g_{p,k}}\end{bmatrix} \quad \textbf{(10)}$$

Para asegurar suficiente excitabilidad en la estimación de los gradientes, es necesario asegurar que la matriz S_k sea linealmente independiente y que tenga la suficiente energía para que el gradiente estimado no sea sensible al ruido de medición. Lo anterior se puede conseguir imponiendo la restricción dual de la Ecuación (11).

$$\delta(\boldsymbol{S_{k+1}}) \geq \delta^L \quad \textbf{(11)}$$

Siendo $\delta(\boldsymbol{S_{k+1}})$ el inverso del número de condición de la matriz, y δ^L el parámetro que indica el mínimo grado de excitación del proceso.

Esta metodología es muy sensible al valor de δ^L ya que un valor alto implica una mayor excitación llevando al proceso a un camino no factible. Por otro lado, un valor muy pequeño provoca que el cálculo de los gradientes sea incorrecto. Es por esta razón que dicho valor debe seleccionarse de forma cuidadosa, y generalmente se realiza esta metodología probando distintos valores de δ^L.

3.2.4 Adaptación de modificadores anidados (NMA)

La estimación de los gradientes puede ser un problema, ya que implica mantener constantemente una excitación en el sistema, lo que podría generar problemas económicos o de seguridad. Para evitar el cálculo de los gradientes en la estimación de los modificadores λ y γ, en 2013 se presenta la reformulación del algoritmo de MA como una optimización anidada, evitando el cálculo de los gradientes del sistema (Navia López, 2013).

La estructura de este algoritmo es similar a la del MA, pero se reemplaza la etapa de cálculo de los gradientes de proceso mediante una capa de optimización superior, la cual tiene como variables de decisión a λ y γ, mientras que su función objetivo corresponde al Lagrangiano del proceso asociado al problema de la Ecuación (1), tal como lo muestra la Ecuación (12).

$$L_p(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\mu}) = \phi_p(\boldsymbol{u}) + \boldsymbol{\mu}^T \boldsymbol{g_p}(\boldsymbol{u}) \quad \textbf{(12)}$$

Siendo $\boldsymbol{\mu}$ los multiplicadores de Lagrange.

Dada una variable de decisión $\boldsymbol{u}_{k+1}^{*}$ obtenido para cada iteración $k > 0$ y para todo $\boldsymbol{\Lambda} = (\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\gamma})$, siendo $\boldsymbol{u_k}(\boldsymbol{\Lambda})$ y $\boldsymbol{\mu_k}(\boldsymbol{\Lambda})$ la solución del multiplicador asociado al problema optimización modificada viene dado por la Ecuación (13).

$$\begin{aligned} &\min_{\boldsymbol{u}(\boldsymbol{\Lambda})} \phi_m = \phi_m(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\lambda}^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{u}) \\ &s.t. \\ &\boldsymbol{g_m} = \boldsymbol{g_m}(\boldsymbol{u}, \boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\gamma}^{\boldsymbol{T}}(\boldsymbol{u} - \boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^{*}) + \boldsymbol{g_p}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^{*}) - \boldsymbol{g}(\boldsymbol{u}_{\boldsymbol{k}}^{*}, \boldsymbol{\alpha}) \leq 0 \end{aligned} \tag{13}$$

Por lo tanto, el problema de optimización de la capa superior queda definido como:

$$\min_{\Lambda} L_p\left(\boldsymbol{u}_{\infty}^{*}(\boldsymbol{\Lambda}), \boldsymbol{\mu}_{\infty}^{*}(\boldsymbol{\Lambda})\right) \tag{14}$$

El problema de la Ecuación (14) no puede resolverse de manera analítica, puesto que no se conoce el mapeo exacto del proceso. Debido a lo anterior, se propone una solución iterativa donde cada estado estacionario alcanzado por el proceso corresponde a un valor de $\boldsymbol{\Lambda_k}$, propuesto por la capa de optimización superior, el cual se utiliza para resolver la Ecuación (13) y obtener un estimador del Lagrangiano del procesos mediante la Ecuación (12). Este valor se ingresa a la capa de optimización superior, y el algoritmo implementado actualiza los valores de $\boldsymbol{\Lambda}_k$.

El algoritmo utilizado para resolver esta metodología se presenta en la Figura 5

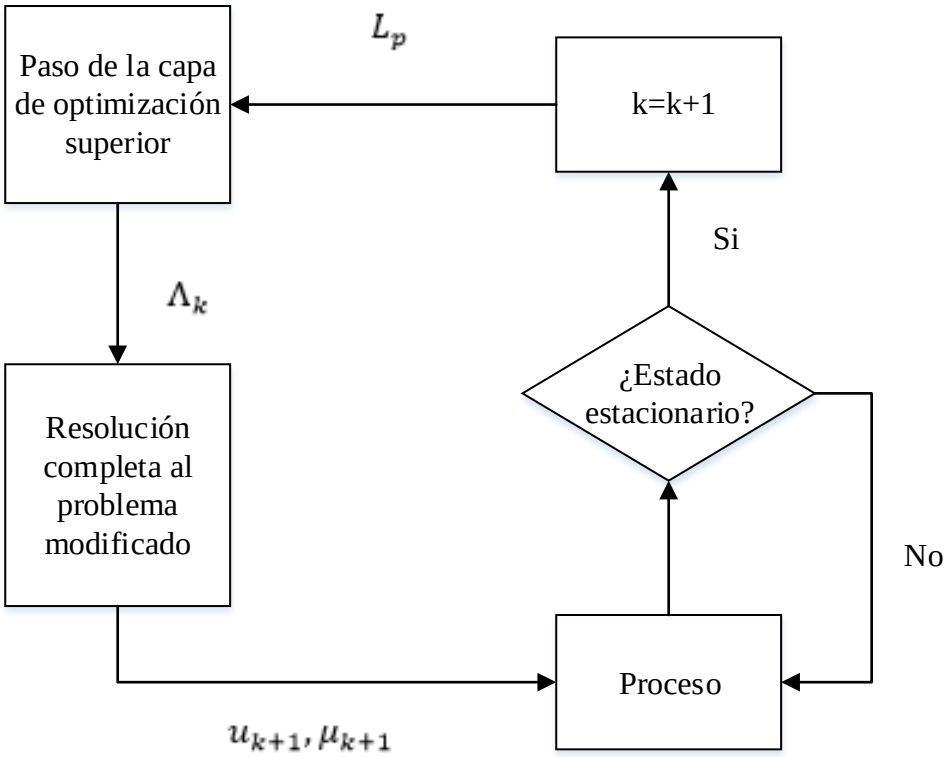

Figura 5: Algoritmo de RTO con adaptación de modificadores anidados.

Para evitar el cálculo de los gradientes experimentales, se utilizan algoritmos libres de derivadas en la capa superior de optimización, los cuales tienen otros criterios para actualizar los valores de **Λ** como geométricos y heurísticos, entre otros. Hasta el momento se ha utilizado el algoritmo de Nelder Mead, pero es posible la utilización de otros algoritmos libres de derivadas en la capa superior de optimización.

3.3 Optimización libre de gradientes

Los algoritmos de optimización libres de gradientes corresponden a un subconjunto de algoritmos de optimización, que no requieren del cálculo de derivadas para actualizar las variables de decisión.

Los algoritmos libres de gradientes son utilizados en diferentes áreas tales como problemas médicos, científicos y de ingeniería.

Aun cuando existen una gran cantidad de algoritmos libres de gradientes, para efectos de esta investigación los métodos de búsqueda local fueron analizados con mayor detalle, ya que este tipo de algoritmos utiliza puntos cercanos al iterador actual en búsqueda de un punto que mejore la función objetivo, sin descartar puntos o áreas de la región de búsqueda, además de ser simples en la forma que llevan a cabo la búsqueda.

Los algoritmos descartados realizan particiones en el área de búsqueda, modelos que son actualizados a medida que es llevada a cabo la búsqueda o descartan regiones del área de muestreo. Los problemas se presentan en este tipo de algoritmos, debido a que al cambiar de lugar el óptimo, el orden de las particiones estaría constantemente actualizándose y en el caso de los modelos llevaría a realizar cambios en la función de manera continua. El mayor problema se presentaría en el caso de descartar las regiones, ya que debido a las perturbaciones el óptimo podría moverse a una región antes recorrida.

Los métodos de búsqueda local examinan mediante puntos pruebas la región de búsqueda (Rios & Sahinidis, 2013).

3.3.1 Nelder Mead

El algoritmo de Nelder Mead (Nelder & Mead, 1965) comienza con la construcción de un simplex con $n + 1$ vértices alrededor del punto de entrada.

En cada iteración se evalúan la función objetivo en cada uno de vértices del simplex ordenando los puntos del peor al mejor. El peor punto es reemplazado por un nuevo vértice generando un nuevo simplex. El punto nuevo es obtenido mediante la transformación del peor vértice mediante operaciones realizadas al centroide del simplex: reflexión, expansión y contracciones internas y externas. En el caso en que llegue a fallar las operaciones anteriores el simplex se encoge alrededor del mejor vértice. Las estrategias realizadas por este algoritmo se encuentran en la Figura 6.

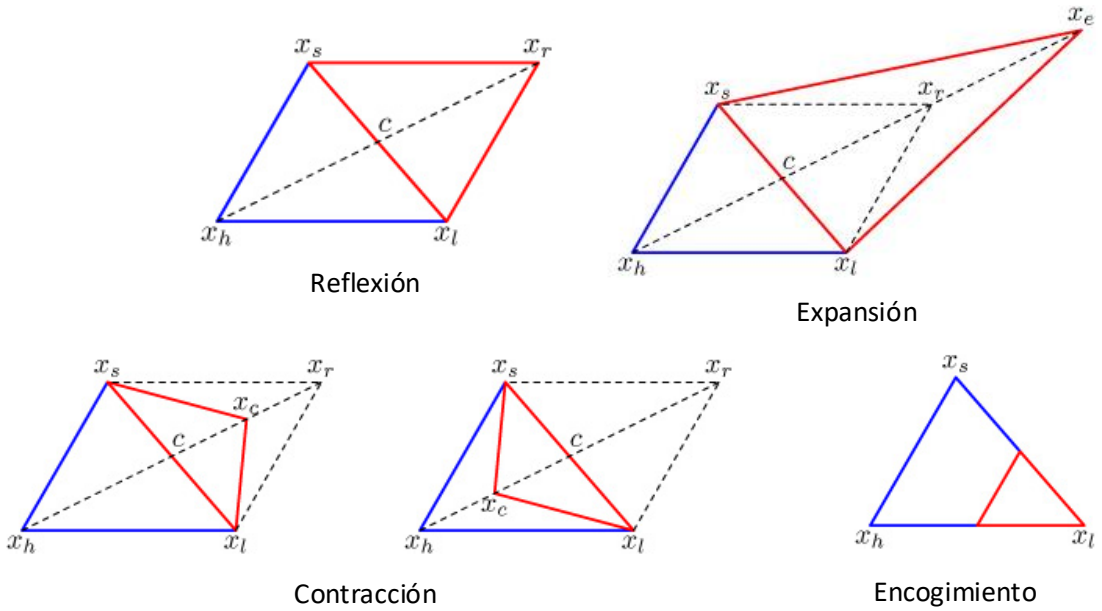

Figura 6: Estrategias utilizadas por el algoritmo de Nelder Mead.

Este algoritmo termina de tres formas, cuando algunos o todos los vértices son cercanos; los valores de la función objetivo son cercanos o no existe la convergencia y se excede el límite máximo de iteraciones.

3.3.2 Pattern Search

Los métodos de optimización tipo Pattern Search, realizan la búsqueda del óptimo elaborando diferentes puntos que generan una malla o patrón alrededor del iterador actual. El primero de estos algoritmos corresponde a "*Generalized Pattern Search*" (GPS) (Torczon Siam Optim, 1997) del cual luego se desprendieron "*Generating Set Search*" (GSS) (Kolda, Lewis, & Torczon, 2003) que considera las restricciones de desigualdad para llevar a cabo la malla, y "*Mesh Adaptive Direct Search*" (MADS) (Audet & Dennis, 2006) que lleva a cabo un paso adicional de búsqueda.

El proceso de búsqueda de estos algoritmos corresponde a la generación de una malla alrededor del punto de iteración actual, donde cada punto de esta malla corresponde a una evaluación de la función objetivo. Si se encuentra un punto que mejora la función objetivo, este pasa a ser el nuevo iterador. Si no es posible encontrar puntos mejores, el iterador se mantiene y la malla generada es modificada para así evaluar puntos más lejanos o cercanos con respecto al iterador.

En el caso de GPS y GSS funcionan de la misma manera, pero el segundo considera las restricciones de desigualdad para la generación de la malla de búsqueda además de favorecer la dirección del último iterador, mientras que el primero no puede ser utilizado con restricciones de desigualdad. En MADS, además de considerar las restricciones de desigualdad, realiza un paso adicional, ya que, en caso de fallar en la búsqueda de un mejor punto, se realiza un "*paso de sondeo*" (Poll Step), generando un marco alrededor del actual iterador, es decir realiza una última exploración cercana al iterador.

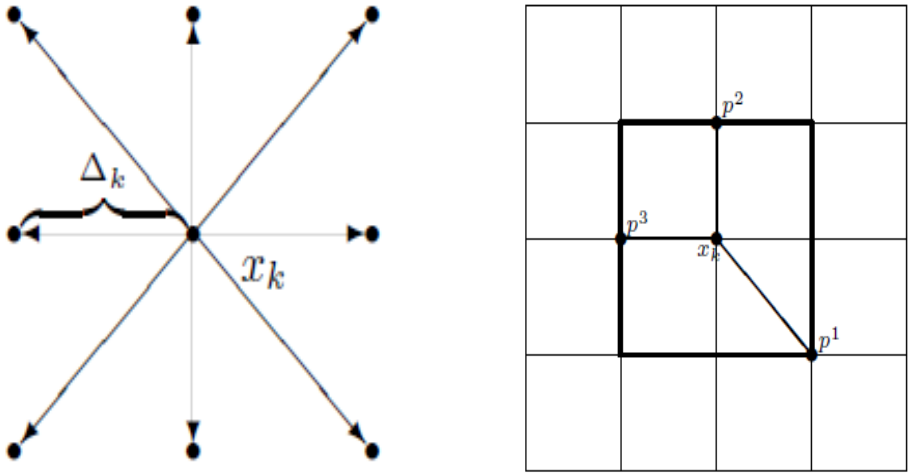

Figura 7: Estrategias utilizadas por los métodos de Pattern Search.

En la Figura 7, la primera imagen corresponde a GPS y GSS, donde el punto central corresponde al iterador y el resto de puntos es la malla generada por el algoritmo. La segunda imagen corresponde a MADS siendo el punto central el actual iterador, mientras que el resto de puntos vendría a ser la malla y, el marco generado sería el paso de sondeo.

A cada iteración k, se define un punto de prueba de la forma $x_k^i = x_k + s_k^i$ siendo x_k el actual iterador, mientras que s_k^i corresponde al paso prueba quedando definido según la ecuación (15).

$$s_k^i = \Delta_k \boldsymbol{B} \boldsymbol{c_k^i} \tag{15}$$

Donde $\Delta_k \in \mathbb{R}, \Delta_k > 0$ corresponde a la longitud del paso, $\boldsymbol{B} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ corresponde a la matriz base que debe ser no singular y $\boldsymbol{c_k^i}$ denota la columna utilizada de $\boldsymbol{C_k}$, siendo esta una matriz generadora con $\boldsymbol{C_k} \in \mathbb{Z}^{n \times p}$ donde $p > 2n$. La dimensión de las variables de decisión en este caso está representada por n.

Para MADS el marco es realizado de acuerdo a la ecuación (16).

$$F_k = \{x_k + \Delta_k \boldsymbol{d} : \boldsymbol{d} \in \boldsymbol{D}_k\} \subset \boldsymbol{M_k} \tag{16}$$

Donde $\boldsymbol{D}_k$ es un set de expansión positivo tal que $0 \notin \boldsymbol{D_k}$ y para todo $\boldsymbol{d} \in \boldsymbol{D_k}$. Se define un parámetro de sondeo Δ_k^p donde $\Delta_k \leq \Delta_k^p$, este parámetro define la magnitud de la distancia en donde el marco es generado.

3.4 Perturbaciones

Las fuentes de incertidumbre se encuentran siempre presentes en los procesos industriales, siendo tomadas en cuenta para el diseño y optimización de los procesos.
La incertidumbre corresponde al desconocimiento de algo, siendo en el caso de incertidumbres de proceso, aquellas variables que afectan al sistema pero que no pueden ser controladas (Bequette, 2003).

De acuerdo a la literatura existen cuatro clasificaciones para describir las incertidumbres (Zhang, Monder, & Fraser Forbes, 2002), las cuales son: Incertidumbre de mercado, de proceso, de medida y de modelo. La primera se refiere al desconocimiento de la economía del proceso, relacionada con la disponibilidad de las materias primas, demanda del producto, entre otras. Las incertezas del proceso se refieren al conocimiento impreciso de la operación debido a perturbaciones, como por ejemplo variaciones no medidas. Luego las incertidumbres de medida corresponden al conocimiento impreciso de las variables del proceso medidas, producto al ruido o sesgo de la medición. Finalmente, las incertezas del modelo se refieren a predicciones imprecisas del modelo, debido a diferencias estructurales o paramétricas.

Las variaciones que causan la incertidumbre del proceso son a menudo consideradas de naturaleza estocástica, y afecta tanto a la función objetivo como a las restricciones de un problema de optimización, lo que podría dar una solución no factible si no es tratada adecuadamente (Zhang et al., 2002).

Por otra parte, las incertidumbres presentan otras características, tal como la frecuencia de cambio, la cual podría afectar a los sistemas de RTO cuando sea mayor a la de la capa de la RTO, es decir, una vez realizada una búsqueda de los óptimos del proceso se realicen cambios en el sistema. Siendo estas las perturbaciones con las cuales se trabajará.

Las incertidumbres del proceso vendrían a ser las perturbaciones, las cuales afectarían negativamente a las variables de salida del sistema real, ya que, podrían modificar las condiciones que se tienen del problema, o que se infrinjan restricciones.

4. Metodología

4.1 Propuesta de manejo de perturbaciones

Para incluir el efecto de la incertidumbre del proceso en los problemas de optimización, se agregarán perturbaciones las cuales consistirán en cambios en alguna de las variables de entrada, donde sólo el proceso tendrá disponible esta información. Esto es presentado en la Figura 8, utilizando como ejemplo el algoritmo de NMA.

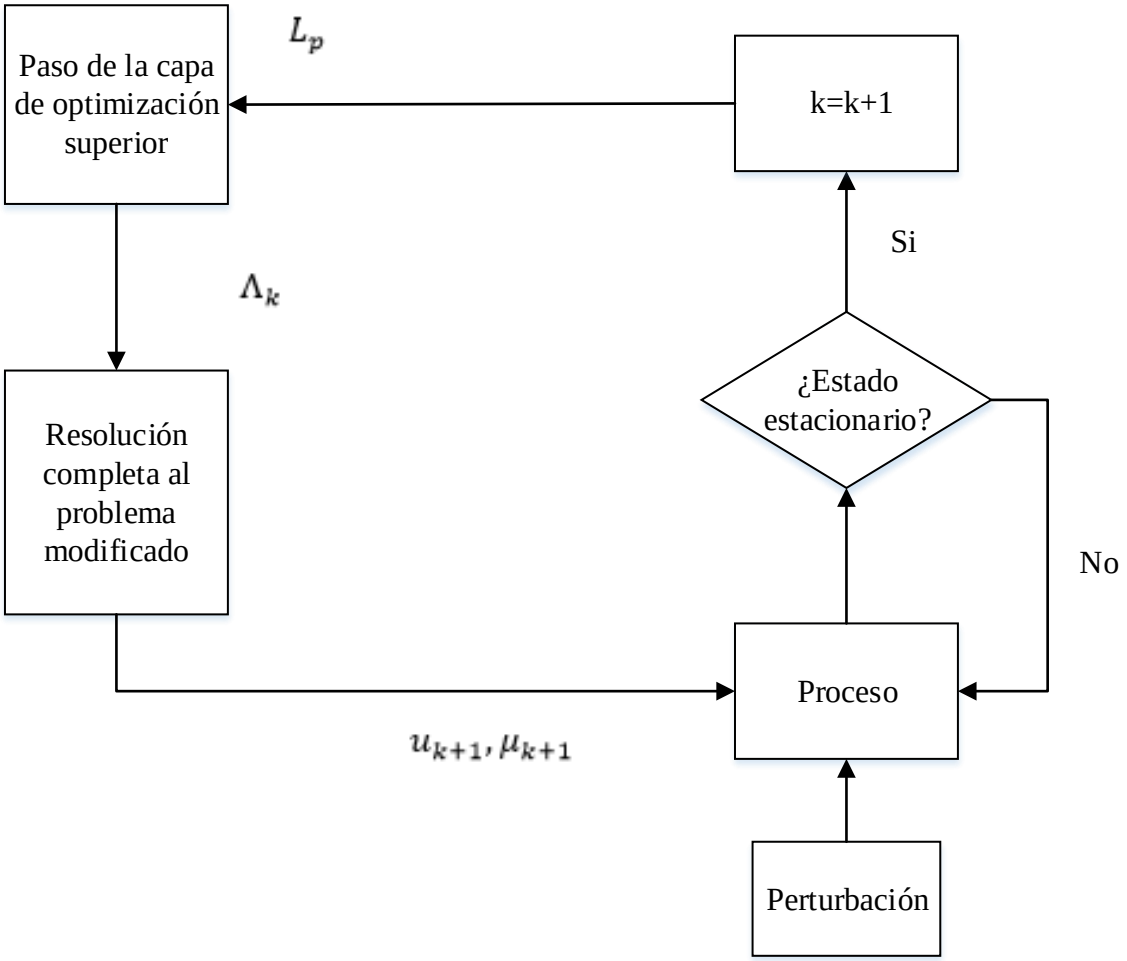

Figura 8: Diagrama para incluir las perturbaciones a los sistemas RTO.

Respecto al desempeño de los métodos que existen en literatura en procesos bajo la influencia de perturbaciones, es de esperar que MA no logre encontrar el óptimo del proceso, ya que los métodos de estimación de gradientes experimentales utilizan la información previa de las variables de decisión y las medidas de proceso, sin considerar que existen otras variables que también pueden afectar las salidas. Por lo tanto, si las perturbaciones no se pueden medir, no

se podría estimar de manera adecuada el gradiente experimental de un sistema real, supuesto principal para la propiedad de convergencia al óptimo del proceso del método MA.

Con respecto al NMA, en literatura solo se reporta el uso del método de Nelder Mead para actualizar los modificadores, el cual podría presentar la característica de estancarse (Rios & Sahinidis, 2013), lo que llevaría a no actualizar las variables de decisión y, por lo tanto, no cumplir con el objetivo de la RTO.

Es por esto que se propone la implementación de un algoritmo Pattern Search en la capa superior del en el método de NMA para mejorar la capacidad de búsqueda del óptimo del proceso de la RTO, cuando se ve afectado por perturbaciones. Lo anterior se justifica en el hecho que NMA no requiere estimar gradientes del proceso, por lo que la influencia de las perturbaciones en este cálculo es nula, y el algoritmo de Pattern Search, no presenta el estancamiento que sí presenta la metodología de Nelder Mead.

Para poner a prueba las metodologías mencionadas se utilizará el problema de la optimización del reactor de Otto-Williams, que se ha utilizado como *benchmark* en la implementación de otros métodos de RTO.

4.2 Modelo Otto-Williams

Para evaluar la capacidad de detección del óptimo de la RTO, se simulará el reactor CSTR dentro del sistema de Otto-Williams (Williams & Otto, 1960), que a su vez presentará incertidumbre estructural, utilizando el modelo propuesto por Forbes y Marlin (1996). Este modelo ha sido utilizado ampliamente en literatura para probar estrategias de optimización en tiempo real (J. Fraser Forbes & Marlin, 1994; Marchetti et al., 2009; Navia López, 2013; Roberts, 1979; Rodríguez-Blanco, Sarabia, Navia, & de Prada, 2017; Zhang & Fraser Forbes, 2000). Adicionalmente, se agregará una perturbación que cambie la ubicación del óptimo entre cada ejecución de la RTO, y se evaluará la capacidad de convergencia al óptimo del método MA basado en gradientes utilizando el método dual, y de la metodología NMA utilizando los algoritmos descritos en la Sección 3.3.

La Figura 9 muestra el diagrama del reactor de Otto-Williams.

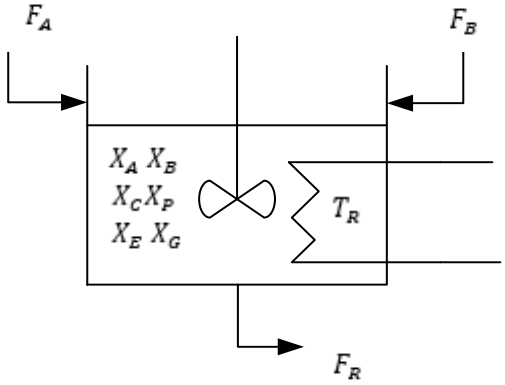

Figura 9: Diagrama del reactor Otto-Williams.

Los reactantes iniciales corresponden a A y B, los cuales son alimentados en dos flujos distintos F_A y F_B. Dentro del reactor se forman los productos C, E, G y P. Estos productos son descargados junto con el remanente de los reactantes en un flujo F_R.
Las composiciones se encuentran expresadas como X_i siendo i los componentes dentro del reactor y T_R representa la temperatura del reactor.

Dentro del reactor Otto-Williams ocurren tres reacciones en paralelo dadas por la Ecuación (17).

$$\begin{aligned} A + B &\xrightarrow{k_1} C \\ C + B &\xrightarrow{k_2} P + E \\ P + C &\xrightarrow{k_3} G \end{aligned} \qquad \textbf{(17)}$$

El balance de materia para cada componente en el reactor en estado estacionario estado dado por la Ecuación (18).

$$F_A = F_B + F_R \qquad \textbf{(18)}$$

$$0 = -F_R X_P + V_R r_2 \frac{M_P}{M_B} - V_R r_3 \frac{M_P}{M_C}$$

Siendo V_R el volumen del reactor, X_i la composición para cada componente i, M_i el peso molecular para cada componente i y r_j la cinética de reacción para cada reacción j con respecto al reactivo limitante. La relación de los pesos moleculares se debe a que los balances se presentan en base másica, donde $M_A = M_B = M_P = 100; M_C = M_E = 200; M_G = 300$.

La cinética de reacción puede ser calculada de acuerdo a la Ecuación (19)

$$\begin{aligned} r_1 &= K_1 X_A X_B \\ r_2 &= K_2 X_B X_C \\ r_3 &= K_3 X_C X_P \end{aligned} \tag{19}$$

Donde k_j es la constante cinética para la reacción j que puede ser calculada utilizando Arrhenius, dado por la Ecuación (20).

$$K_j = k_j \exp\left(-\frac{EA_j}{T_R}\right) \tag{20}$$

Siendo EA_j la energía de activación de la reacción j.

Para la incertidumbre estructural se consideran 5 componentes, eliminando C, ya que la cinética de la reacción de descomposición de C es un orden de magnitud más rápida que el resto. Por lo tanto, el modelo de Otto-Williams con incertidumbre estructural considera solo dos reacciones en paralelo, según la Ecuación (21).

$$\begin{aligned} A + 2B &\xrightarrow{\widetilde{k_1}} P + E \\ A + B + P &\xrightarrow{\widetilde{k_2}} G \end{aligned} \tag{21}$$

El balance de materia en estado estacionario para este modelo viene dado por la Ecuación (22)

$$F_R = F_P + F_E \tag{22}$$

$$0 = -F_R X_P + V_R \widetilde{r_1} - V_R \widetilde{r_2}$$

Las cinéticas de reacción del modelo, quedan definidas según la Ecuación (23).

$$\begin{aligned} \widetilde{r_1} &= \widetilde{K_1} X_A X_B^2 \\ \widetilde{r_2} &= K_2 X_A X_B X_P \end{aligned} \quad \textbf{(23)}$$

Mientras que la constante de reacción del modelo, queda definida de manera similar, según la Ecuación (24).

$$\widetilde{K_J} = \widetilde{k_J} \exp\left(-\frac{\widetilde{EA_J}}{T_R}\right) \quad \textbf{(24)}$$

Los valores utilizados para realizar la simulación se encuentran en la Tabla 1.

Tabla 1: Valores utilizados para modelar el reactor de Otto-Williams (Navia López, 2013).

Variable	Valor	Unidades
F_A	1,8725	kg/s
V_R	2.105	kg
k_1	$1{,}6599 \cdot 10^6$	$kmol/Ls$
k_2	$7{,}2177 \cdot 10^8$	$kmol/Ls$
k_3	$2{,}6745 \cdot 10^{12}$	$kmol/Ls$
EA_1	$-6.666{,}7$	$-$
EA_2	$-8.333{,}3$	$-$
EA_3	-11.111	$-$
$\widetilde{k_1}$	$2{,}611 \cdot 12^{12}$	$kmol/Ls$
$\widetilde{k_2}$	$1{,}655 \cdot 10^8$	$kmol/Ls$
$\widetilde{EA_1}$	$-8.077{,}6$	$-$
$\widetilde{EA_2}$	$-12.438{,}5$	$-$

Para efectos de este trabajo de memoria, F_A se considerará una perturbación que cambia cada cierto número de ejecuciones de la capa de RTO, por lo que el valor que aparece en Tabla 1 corresponde al valor nominal informado en literatura.

4.2.1 Optimización modelo de Otto-Williams

La idea de ambos casos es optimizar el beneficio en estado estacionario del reactor. Para esto se define una función según las ganancias obtenidas por los flujos de los productos P y E, y

el costo de obtención de los flujos A y B iniciales. La función a optimizar se presenta en la Ecuación (25).

$$f = F_R(X_P P_P + X_E P_E) - F_A X_A C_A - F_B X_B C_B \quad \textbf{(25)}$$

Siendo P_j el precio del producto j y C_j el costo del componente j.

Para optimizar es necesario definir las variables que serán modificadas de manera de maximizar la Ecuación (25) las cuales son llamadas variables de decisión. Para este problema, se definen como variables de decisión F_B y la temperatura del reactor T_R. Estas dos variables de decisión tendrán un límite inferior y superior lo que restringirá su valor. Además, se utilizaran dos restricciones (Rodríguez-Blanco et al., 2017), las cuales requieren que las composiciones de los componentes A y G sean menor a un límite definido.

Por lo tanto, el problema de optimización para el proceso queda definido según la Ecuación (26).

$$\begin{aligned}
&\min_{F_B, T_R} -f_p \\
&s.t: \\
&Modelo\ de\ la\ ecuación\ (21) \\
&g_{p,1} = X_A - \lim_A \leq 0 \\
&g_{p,2} = X_G - \lim_G \leq 0 \\
&F_B \in [F_B^L, F_B^U] \quad T_R \in [T_R^L, T_R^U]
\end{aligned} \quad \textbf{(26)}$$

Mientras que el problema de optimización para el modelo queda definido en la Ecuación (27).

$$\begin{aligned}
&\min_{F_B, T_R} -f_m + \lambda_k^T(u_k) \\
&s.t: \\
&Modelo\ de\ la\ ecuación\ (25) \\
&g_{m,1} = X_A - \lim_A + \gamma_{k,1}(u_k - u_{k-1}) + \epsilon_{k,1} \leq 0 \\
&g_{m,2} = X_G - \lim_G + \gamma_{k,2}(u_k - u_{k-1}) + \epsilon_{k,2} \leq 0 \\
&F_B \in [F_B^L, F_B^U] \quad T_R \in [T_R^L, T_R^U]
\end{aligned} \quad \textbf{(27)}$$

Los valores de las variables se encuentran en la Tabla 2.

Tabla 2: Valores de las restricciones utilizadas en el problema de optimización (Rodríguez-Blanco et al., 2017).

Variable	Valor	Unidades
lim_A	0,085	–
lim_G	0,105	–
F_B^L	3	kg/s
F_B^U	6	kg/s
T_R^L	373	K
T_R^U	343	K

4.3 Implementación de las perturbaciones

Para poner a prueba la RTO con incertidumbre de proceso se implementarán perturbaciones que afecten la ubicación del óptimo del sistema real. Para evaluar la influencia de F_A, primero se realizó un análisis al valor óptimo de las variables de decisión al cambiar este flujo. El resultado se muestra en Figura 10.

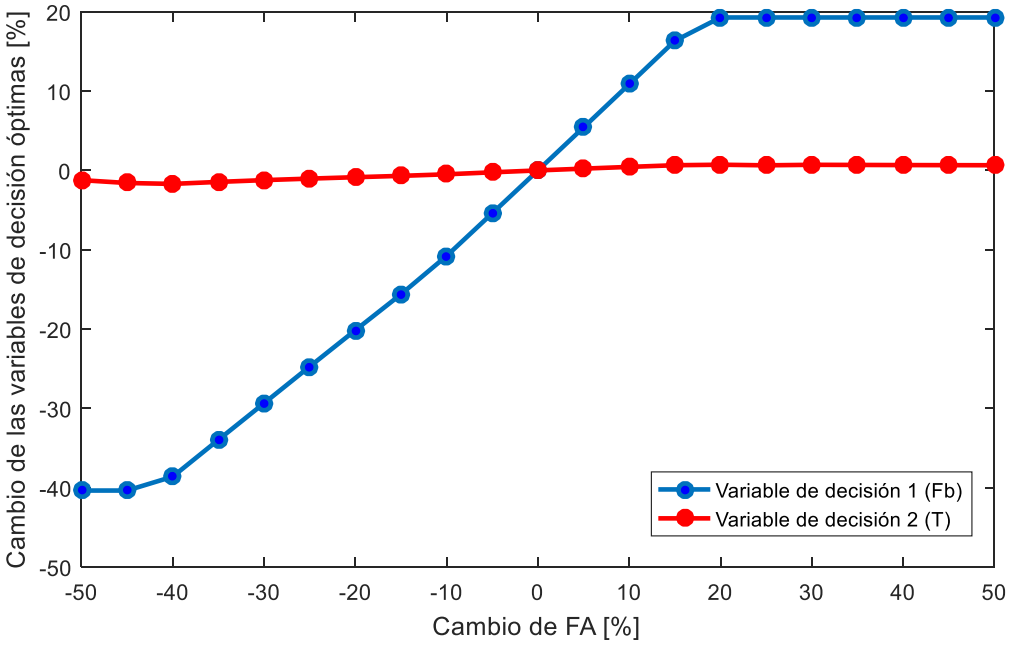

Figura 10: Porcentaje de cambio de las variables de decisión al variar el flujo de A.

En la Figura 10 los cambios son considerados con respecto a la optimización del proceso con el valor nominal de F_A. Se observa que variar el flujo de A desde un rango del -45% hasta un 20%, se modifica el valor óptimo de las variables de decisión, siendo la principal variable afectada el flujo de B variando desde un -40% hasta un 20%. En contraposición, se observa que la temperatura no se ve afectada en gran medida, variando entre un -2% hasta un 1%.

Con base en lo anterior, las perturbaciones son definidas en un rango del flujo de A entre los valores de $[1{,}0299\ ,2{,}2470]$, realizando estas perturbaciones en dos modalidades.

La primera consiste en realizar saltos escalones de $1{,}05$ hasta alcanzar la máxima variación, luego saltos de 0,95 hasta alcanzar la mínima variación y nuevamente saltos de 1,05 hasta alcanzar el valor nominal, definiendo una perturbación tipo rampa, tal como se muestra en Figura 11.

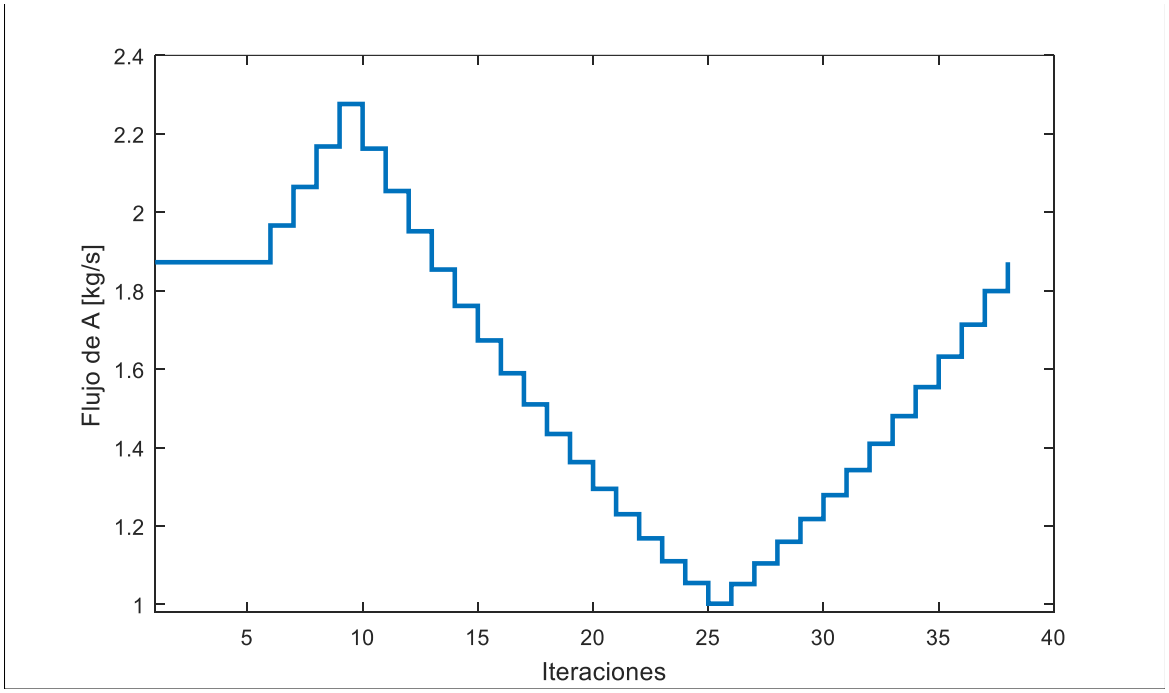

Figura 11: Perturbaciones escalón realizadas al flujo de A.

La segunda implementación de las perturbaciones considera una componente estocástica, simulándolas mediante modelo autorregresivo integrado de promedio móvil (p, d, q) o por sus siglas en ingles ARIMA (p, d, q). Siendo los valores entre paréntesis la parte autorregresivo (p), la de promedio móvil (q), y la integrada (d).

Los valores de (p, d, q) fueron ajustados hasta obtener un resultado que fluctuará alrededor del valor nominal de manera que utilizará la mayor parte de la región donde afecta a las variables de decisión. El valor de la parte integrativa fue eliminado para que el modelo a obtener no presentará tendencia, dando como resultado los valores de (1,0,2). Una explicación más detallada de este modelo se encuentra en el Apéndice A.

Un ejemplo de las perturbaciones realizadas de acuerdo a este modelo se encuentra en la Figura 12.

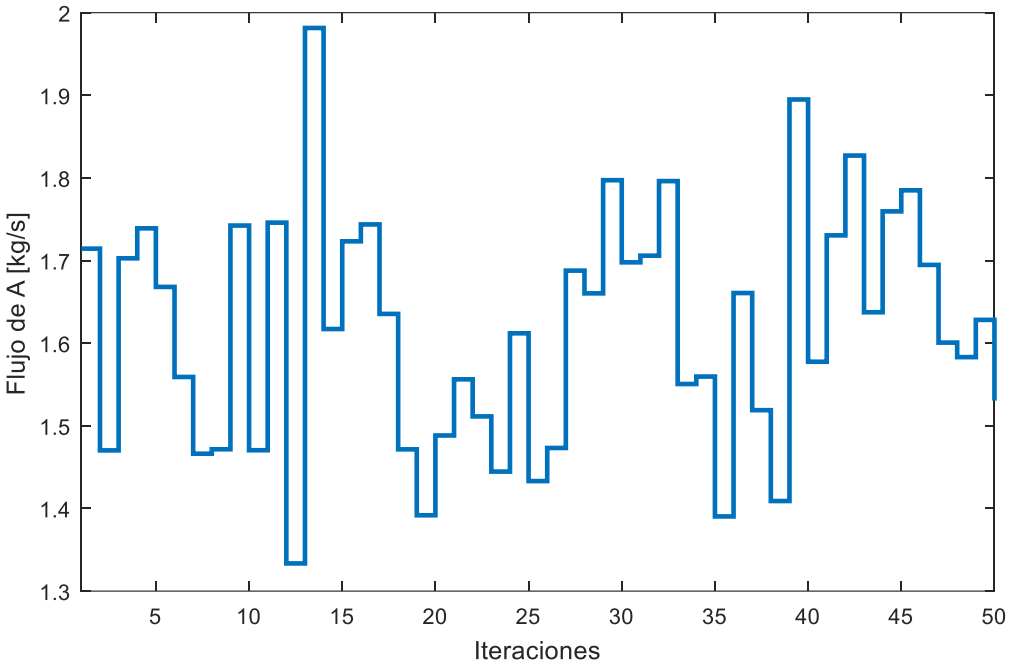

Figura 12: Perturbaciones con modelo ARIMA (1,0,2).

La Figura 12 es un ejemplo de uno de las realizaciones de la variable estocástica, realizada por el modelo ARIMA. El total de las realizaciones que se utilizaron en este trabajo se pueden encontrar en el Apéndice A. Se utilizaron en total 5 realizaciones de las perturbaciones con componente estocástica. Para cada una de las realizaciones, se modificó la frecuencia de cambio desde 1 hasta 3 iteraciones de RTO.

Se realizaron estas dos formas debido a que la primera es una manera sencilla de ver el comportamiento de los algoritmos propuestos y la metodología ya existente. Por otro lado, el modelo ARIMA podría beneficiar el método dual debido a que hay una tendencia entre cada perturbación, además, utilizar este modelo permite acercar la simulación a un proceso real, debido a su componente estocástica.

Las perturbaciones son de tipo no medido, esto implica que solamente se dispone de este valor para simular el proceso. En el caso de la RTO, este valor no está disponible y solo se utiliza el valor nominal de F_A de la Tabla 3.
Las perturbaciones fueron agregadas al realizar un ciclo o más de la RTO, variando el flujo de A del proceso.

4.4 Propuesta de implementación experimental.

Se propone implementar un sistema experimental del reactor Otto Williams a escala laboratorio, específicamente en el Laboratorio de Optimización del Departamento de Ingeniería Química y Ambiental de la Universidad Técnica Federico Santa María, Campus San Joaquín. En este laboratorio se cuenta con un recipiente de acero, el cual tiene una altura de 27,5 cm y un diámetro de 23 cm, que posee dos válvulas, una a 1,5 cm del fondo y la otra a 21 cm del fondo. Para alimentar y descargar el reactor, se utilizan dos bombas peristálticas. Por otro lado, para mantener el sistema a una temperatura deseada se utiliza un serpentín por el cual circula agua refrigerada a 5ºC, a través de una tercera bomba peristáltica que toma dicha agua desde un baño termorregulado, además de una resistencia que simula el calor de reacción. Las mediciones de la temperatura se toman con una PT100, y para homogenizar el sistema se utiliza un agitador mecánico con RPM ajustables.

El fluido utilizado para el reactor corresponde a agua potable, la cual simula la corriente utilizada en el reactor de Otto Williams, tanto para la alimentación como para la descarga. Se simulan dos flujos para la entrada (F_A y F_B), como también es simulada las reacciones y, finalmente, para la descarga obtienen los remanentes de los flujos de entrada, junto con el producto de la reacción.

En la Figura 13, se muestra el P&ID del sistema descrito, donde las líneas celeste corresponde al sistema de refrigeración, las verdes a la entrada al sistema y las rojas la salida del sistema y Figura 14 una foto real del sistema.

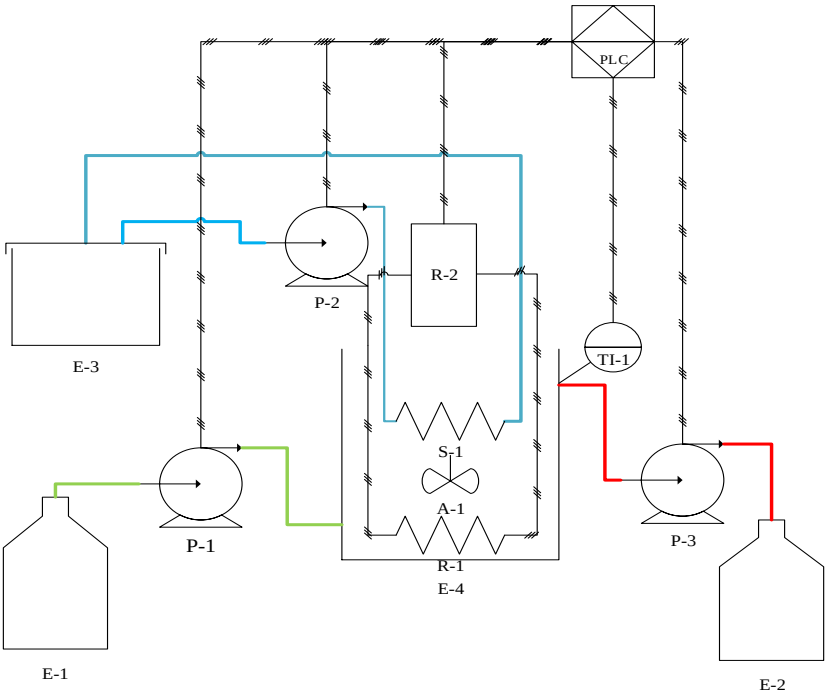

Figura 13: P&ID del equipo experimental

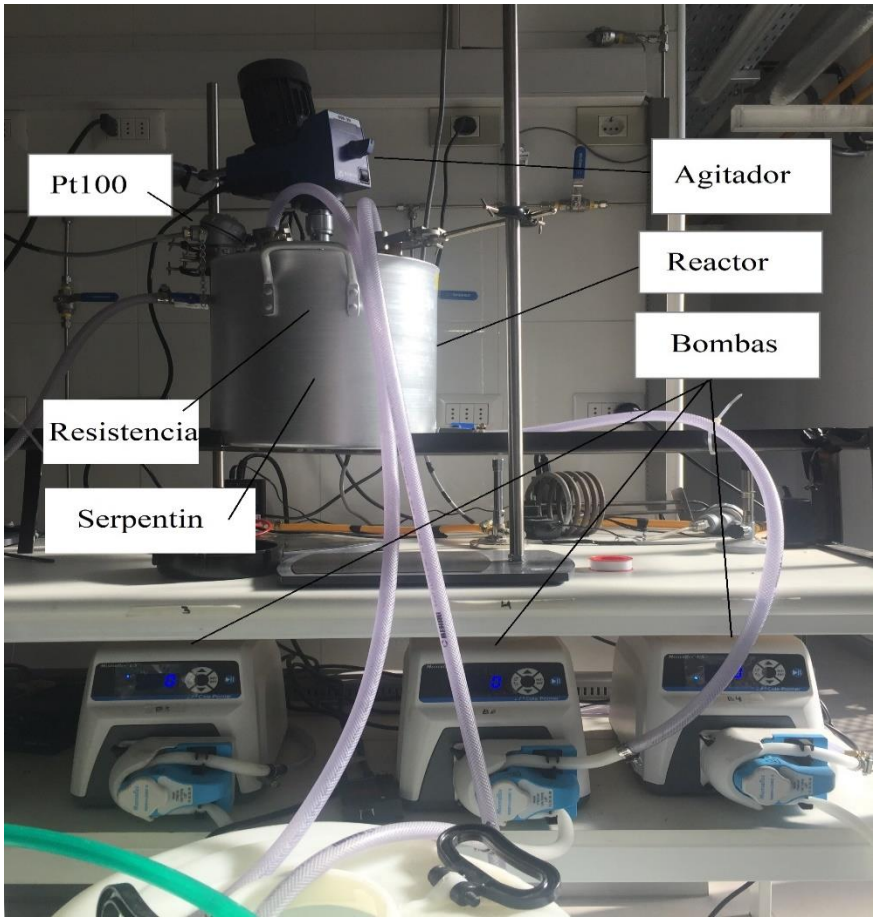

Figura 14: Foto real del equipo experimental.

En la Tabla 3 se encuentra el detalle de la simbología utilizada en el P&ID.

Tabla 3: Descripción de la simbología utilizada en el P&ID

Simbología	Equipo o Instrumento	Uso
A-1	Agitador	Homogenizar
E-1	Estanque	Agua para alimentación
E-2	Estanque	Estanque de descarga
E-3	Baño termorregulador	Agua de refrigeración
E-4	Reactor	Reactor
P-1	Bomba peristáltica	Bomba de alimentación
P-2	Bomba peristáltica	Bomba de serpentín
P-3	Bomba peristáltica	Bomba de descarga
R-1	Resistencia	Entregar calor al reactor
S-1	Serpentín	Retirar calor del reactor
TI-1	PT100	Medidor de temperatura
R-2	Relé	Conexión de la resistencia

La capa de control puede ser implementada utilizando un PLC FATEK FBs-20MAR-2AC, la cual está conectada a 5 unidades adicionales siendo estas: FBs RTD6, FBs 6DA y tres FBs 4DA. En la Tabla 4 se encuentran las conexiones de estos módulos.

Tabla 4: Instrumentos que se encuentran conectados a cada módulo.

Módulo	Conexión
FBs RTD6	PT100
FBs 6DA	6 bombas
FBs 4DA	Resistencia

Con este PLC se pueden tomar las medidas de la PT100 y se pueden controlar las bombas peristálticas y la resistencia.

El agitador y el baño termorregulado deben ser configurados manualmente, donde al primero es necesario ajustar las RPM, y al segundo se le debe setear la temperatura deseada que necesita del fluido del interior refrigerante.

En la Tabla 5, se lista el modelo de los equipos que se encuentran en el laboratorio.

Tabla 5: Modelo de los equipos utilizados

Equipo	Modelo	Cantidad
Bomba peristáltica	Masterflex 07528-10, cabeza 77800-52	3
Agitador	Boeco OSD-20 S65	1
Resistencia	Helical 2000W/220V	1
PT100	VT-DKSGD-100L-1	1

El objetivo de esta propuesta de implementación experimental es para llevar a cabo la experimentación de los sistemas de optimización en tiempo real, de manera de observar lo que ocurre durante la espera de los estados estacionarios, lo cual no puede ser observado mediante las simulaciones.

5. Resultados

Para comparar el desempeño de los algoritmos implementados se definió el índice error de la Ecuación (28). El error se define como la diferencia porcentual entre el último valor de las variables de decisión entregado por la RTO $(\boldsymbol{u_m^*})$ y el valor de las variables de decisión al optimizar el proceso real $(\boldsymbol{u_p^*})$.

$$\%e = \frac{(\boldsymbol{u_p^*} - \boldsymbol{u_m^*})}{\boldsymbol{u_p^*}} \cdot 100 \qquad \textbf{(28)}$$

Al observar la Figura 10 se puede notar que la variable de decisión u_2 tiene un porcentaje de variación muy pequeño, generando que el porcentaje obtenido de este error sea menor a un 3%, por lo que solo se considerará el error de F_b

Los algoritmos de Pattern Search en MatLab cuentan con dos opciones para ser utilizados, Np1 y 2N. La diferencia se encuentra en la forma que realizan la malla de búsqueda, Np1 toma en cuenta $N + 1$ vectores y 2N $2 + N$ vectores, en donde N representa las variables de decisión que son utilizadas para la búsqueda. Por ejemplo, en esta memoria se utilizan dos variables de decisión por lo que Np1 tomaría 3 vectores, mientras que $2N$ utilizaría 4 vectores. Es por esto que los algoritmos de Pattern Search son diferenciados con Np1 y 2N.

5.1 Simulación Otto Williams sin perturbaciones.

La simulación de Otto Williams es realizada inicialmente sin perturbaciones utilizando la metodología existente. Además, se realiza la primera prueba para observar el comportamiento de los algoritmos de Pattern Search.

Para el método dual el valor utilizado para el parámetro δ^L es 0,01. Este valor se obtuvo mediante un procedimiento de prueba y error.

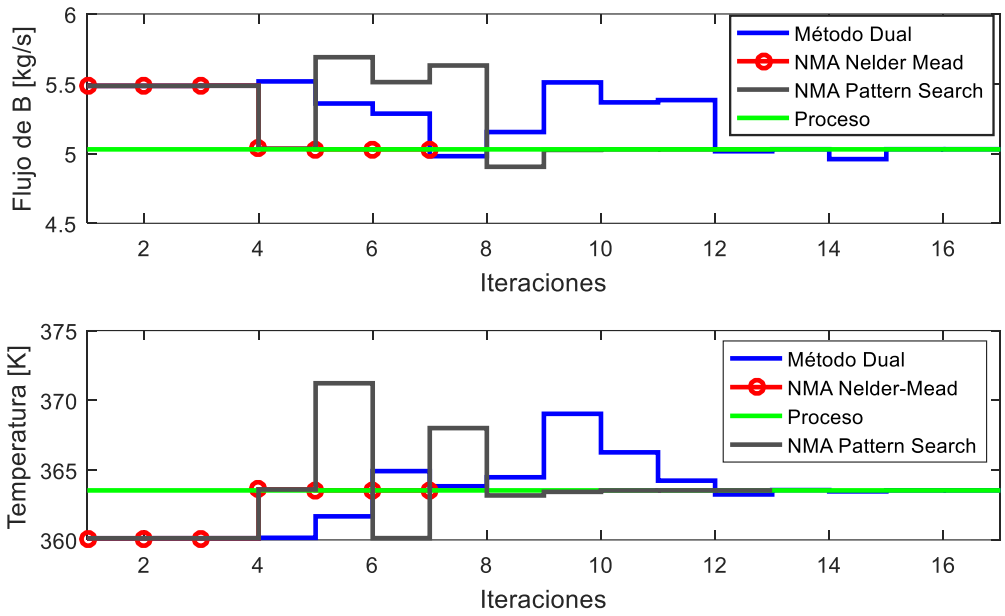

Figura 15: Resultados obtenidos para las variables de decisión utilizando las tres metodologías.

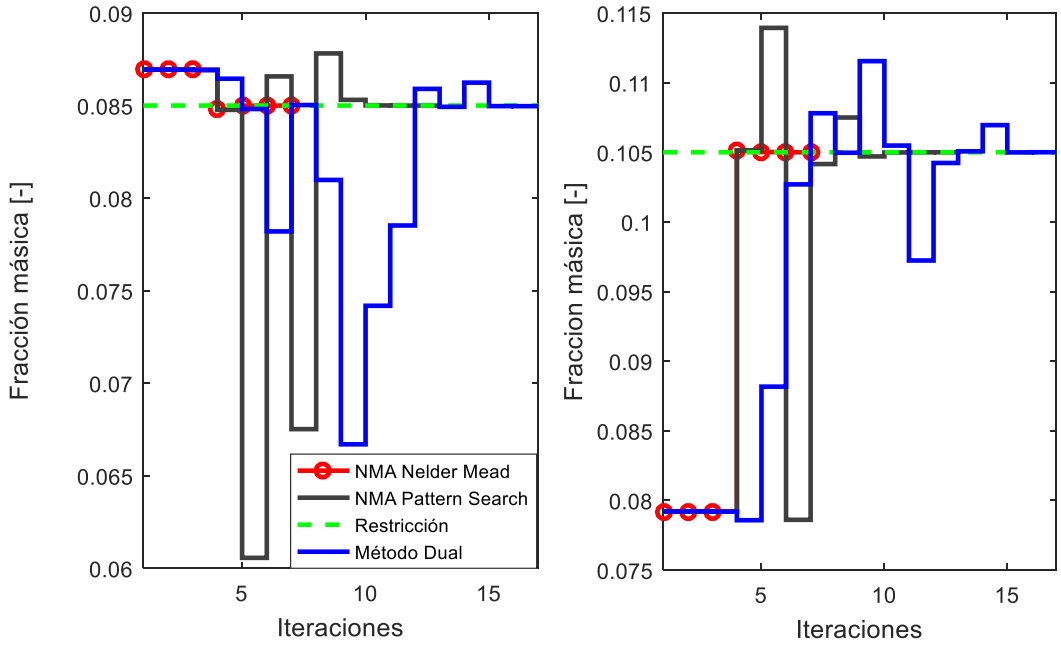

Figura 16: Resultados de las composiciones obtenidas utilizando las tres metodologías.

De la Figura 15 se puede observar que el método anidado con el algoritmo de Nelder Mead alcanza el óptimo del proceso en el menor número de iteraciones, tomando solo 7 estados estacionarios, mientras que el método dual es el que más iteraciones realiza con un total de 16. Para la metodología propuesta, que en este caso se utilizó el MADSNp1, el problema convergió en 12 iteraciones. En la Figura 16 se observa que el método dual y NMA con

Pattern Search infringen las restricciones de las composiciones, entregando puntos infactibles al proceso. En el caso de NMA con Nelder Mead se tiene que los iteradores iniciales entregados al algoritmo infringen las restricciones.

A partir de la comparación de los resultados para el sistema nominal, se puede indicar que tanto el algoritmo de MA como el de NMA son capaces de encontrar el óptimo del proceso bajo condiciones nominales de la perturbación.

5.2 Perturbaciones tipo escalón

Las perturbaciones tipo escalón están resumidas en la Figura 11.

Esta modalidad presenta una tendencia determinista, lo que podría beneficiar al método dual por la forma en que calcula los gradientes, ya que la variación realizada tiene directa relación con las variables anteriores.

5.2.1 Perturbación escalón cada un ciclo.

En la Figura 17 y Figura 18 se muestran los resultados obtenidos por el método dual.

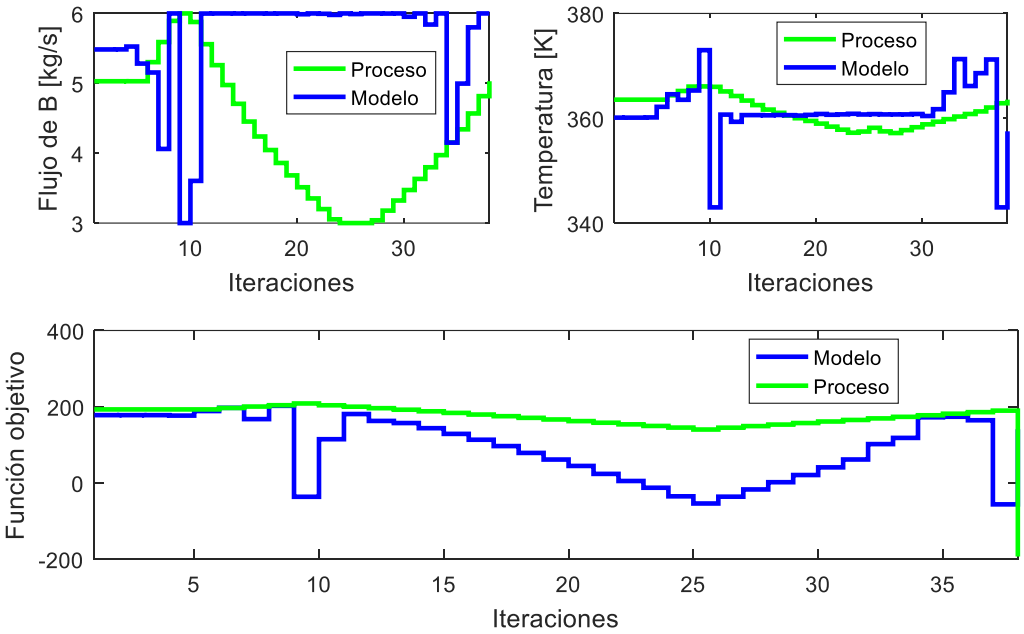

Figura 17: Resultados obtenidos con el método dual.

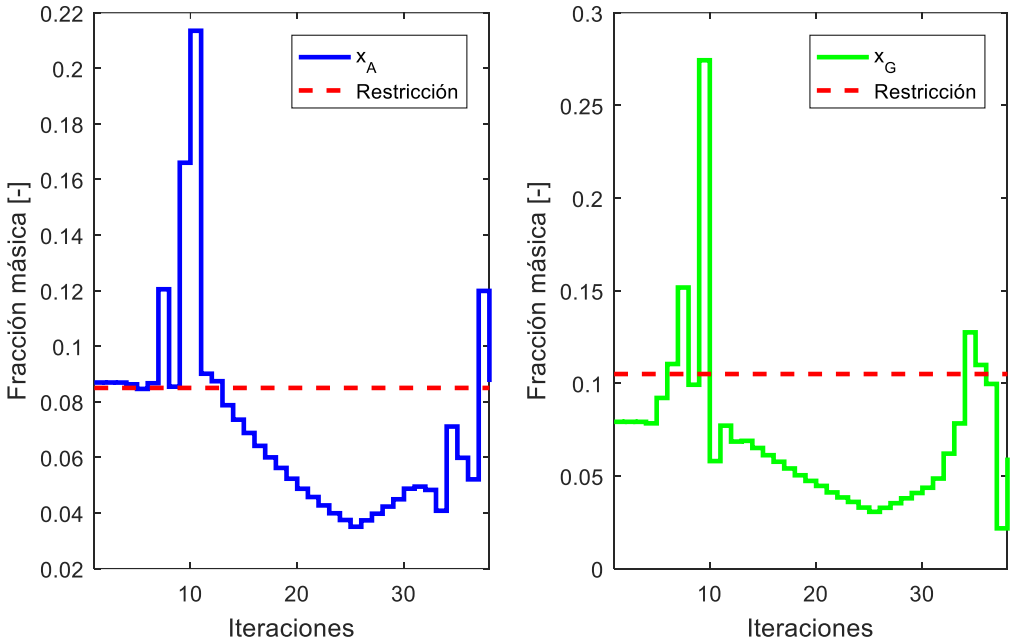

Figura 18: Resultado de las composiciones con el método dual.

En la Figura 17 se puede observar que las perturbaciones afectan negativamente la detección de la trayectoria optima del proceso. Esto se debe a que la metodología dual utiliza información pasada para obtener los gradientes, y dado que la perturbación cambia en cada iteración de la RTO, afectando a las salidas del proceso, no es posible identificar a cabalidad qué parte del cambio en las variables de salida es producto de las perturbaciones y cuál es debido a las variables de decisión, ya que sólo se están considerando los valores anteriores de las variables de decisión y variables medidas para la estimación del gradiente, lo que implica que éste no sea calculado de forma adecuada.

En la Figura 18 se puede observar que pese a cumplir los límites de las variables de decisión, las restricciones de las composiciones pueden ser infringidas entregando puntos infactibles operacionalmente. Esto provocaría que la diferencia entre los gradientes de las restricciones del proceso aumente aún más.

En la Figura 19 y Figura 20 se presenta los resultados obtenidos a partir del método anidado utilizando el algoritmo de Nelder Mead.

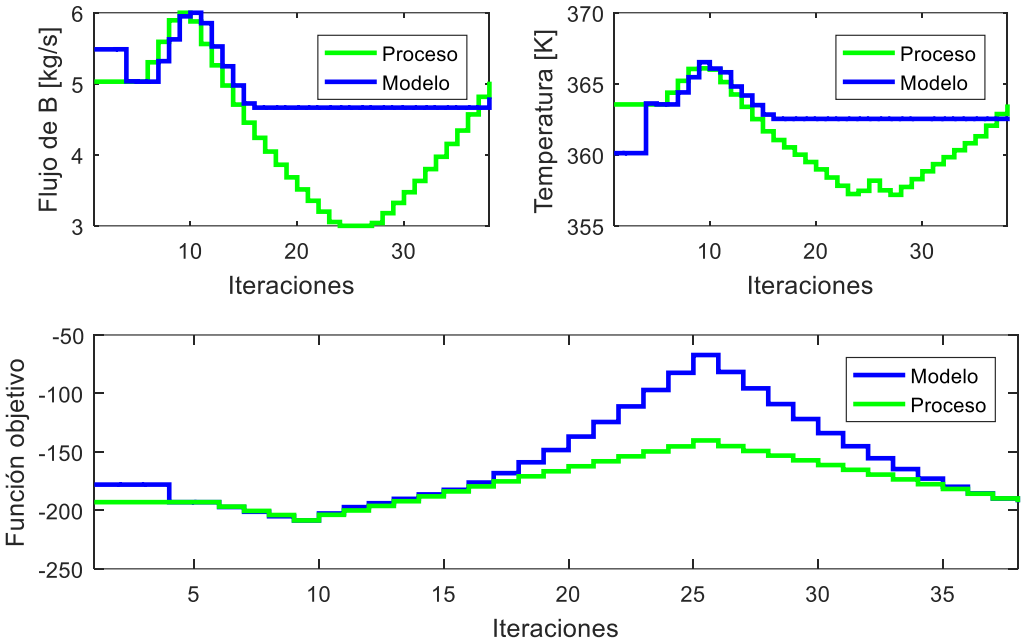

Figura 19: Resultados obtenidos con NMA usando Nelder Mead.

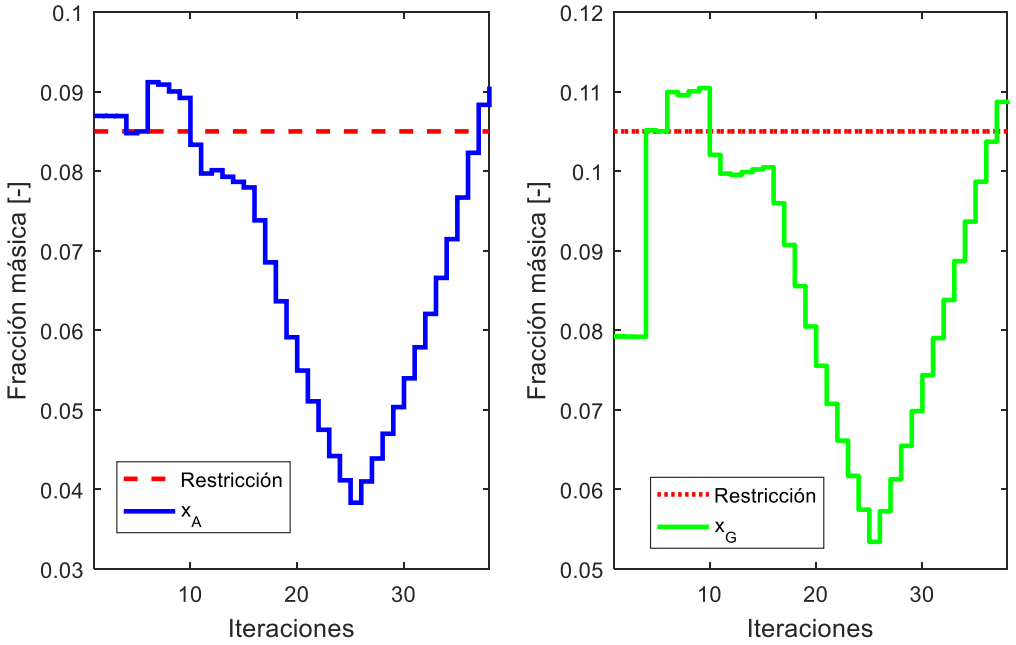

Figura 20: Resultados de las composiciones con NMA usando Nelder Mead.

En la Figura 19 se puede observar que en un comienzo la metodología logra continuar la trayectoria del óptimo, pero cercana a la iteración 15 queda estancado. Próximo a la iteración 15 la función objetivo disminuye de manera continua, esto provoca que las estrategias utilizadas por este algoritmo no obtengan el punto que mejore la función objetivo. Dejando

así la última alternativa que corresponde a disminuir de tamaño el simplex, es probable que esta disminución sea pequeña lo que generaría el estancamiento del algoritmo en un esfuerzo para obtener el óptimo. El estancamiento del algoritmo de Nelder Mead cuando la función objetivo no mejora ya se ha reportado en literatura, por lo que este resultado es esperable.

En la Figura 20 se observa que antes de la iteración 15 ya se han generado puntos infactibles en el proceso producto de las restricciones. Esto indicaría que las perturbaciones llevan a la metodología a seguir puntos infactibles, ya que, de acuerdo a la literatura, este método logra el óptimo del proceso siguiendo un camino que no infrinja las restricciones.

En la Figura 21 y Figura 22 se presenta el resultado obtenido por el algoritmo de GSSNp1, el cual obtuvo el error más cercano a 0 de los algoritmos de Pattern Search.

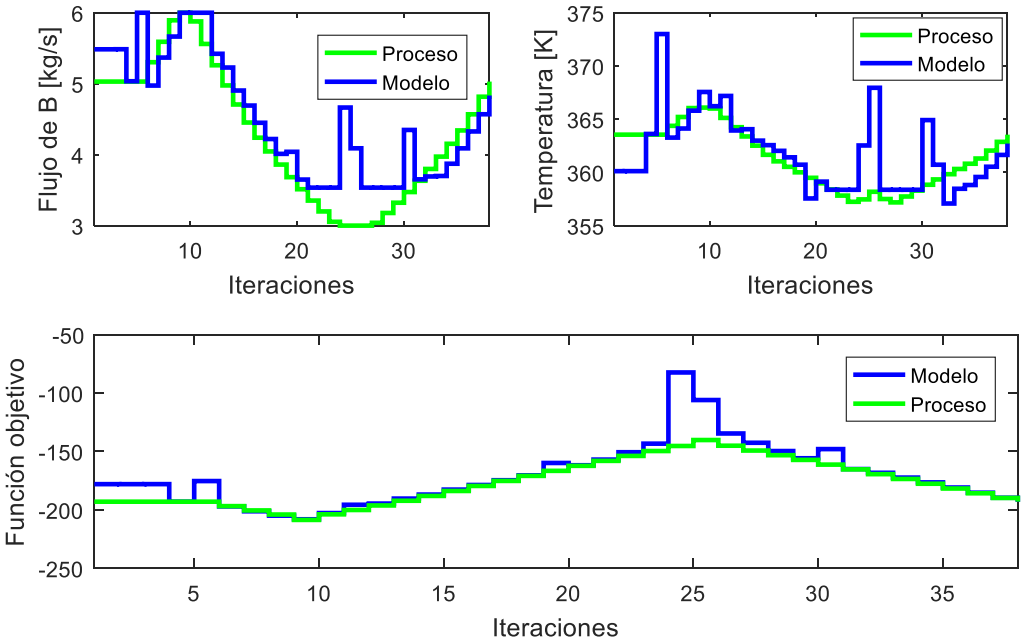

Figura 21: Resultados obtenidos con NMA usandoGSSNp1.

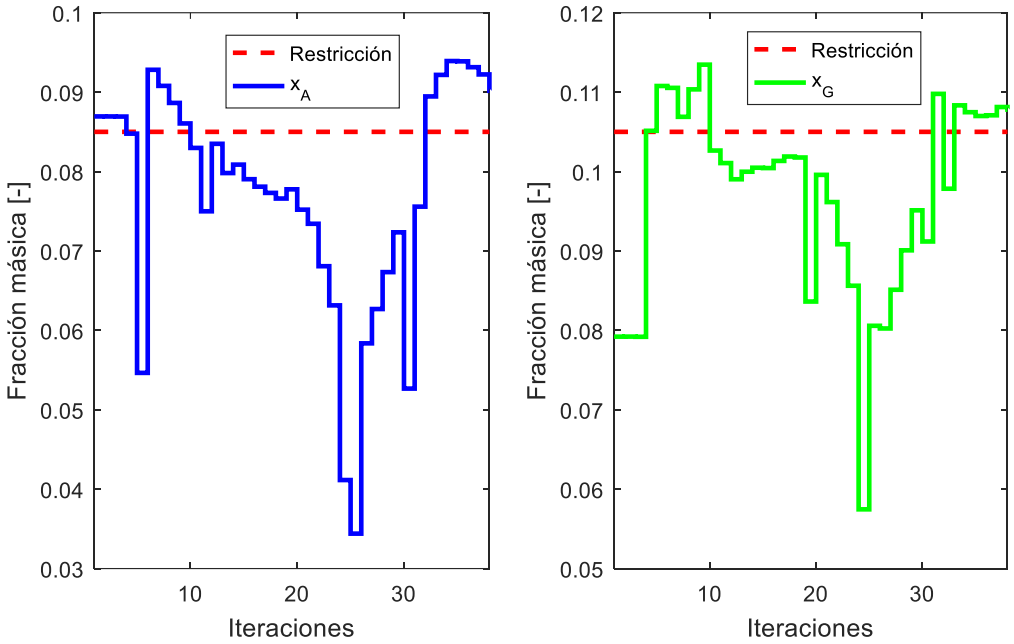

Figura 22: Resultados de las composiciones con NMA usando GSSNp1.

En este caso se observa que se logra seguir la trayectoria del óptimo, teniendo pequeños errores. Este resultado se debe a que el algoritmo GSS utiliza para el siguiente punto de prueba la misma dirección con la que tuvo éxito en encontrar un punto nuevo en la iteración anterior. Cercano a la iteración 25 se puede observar en las variables de decisión que los puntos del óptimo son muy cercanos, esto podría llevar al algoritmo a no encontrar un punto que mejore el beneficio respecto al iterador actual, modificando el tamaño de la malla, lo que provocaría los saltos que son observados en las figuras. Respecto a las composiciones, las restricciones son infringidas, lo que demostraría que las perturbaciones provocan que la metodología obtenga puntos infactibles en el proceso, pese a los buenos resultados obtenidos.

En la Figura 23 y Figura 24 se presentan los resultados obtenidos por el algoritmo de MADS2N, el cual obtuvo el mayor error en comparación al resto de algoritmos de Pattern Search.

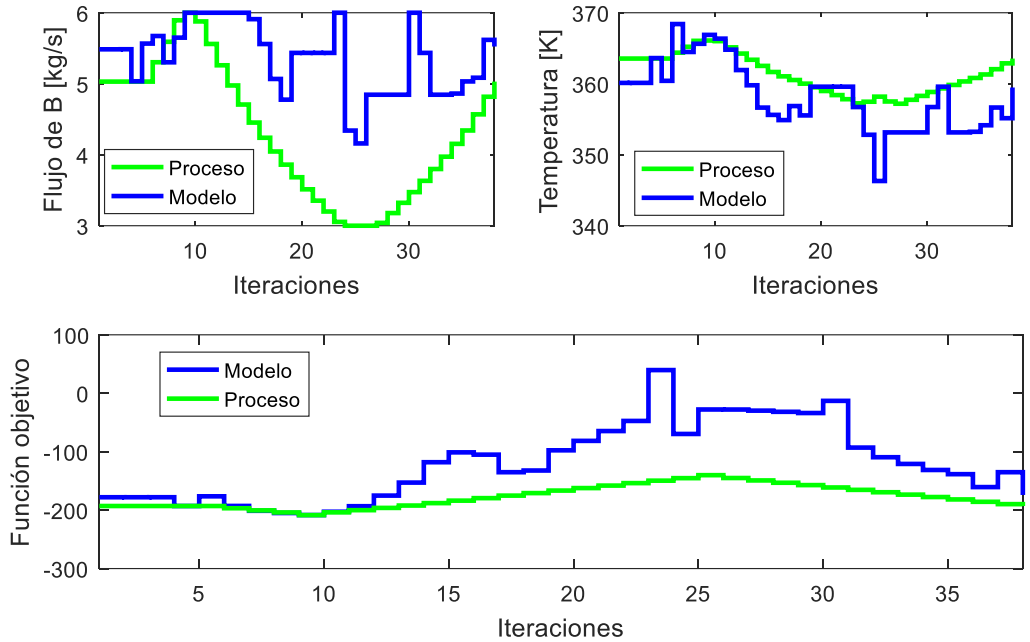

Figura 23: Resultados obtenidos con NMA usando MADS2N.

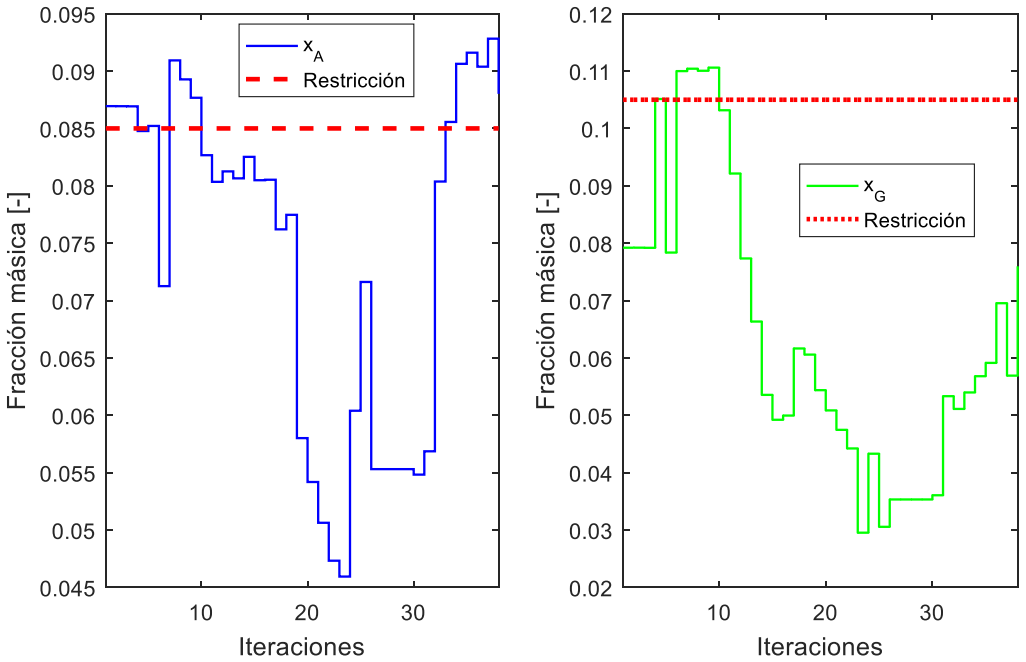

Figura 24: Resultados de las composiciones con NMA usando MADS2N.

En la Figura 23 se observa un comportamiento errático que intenta seguir la tendencia del óptimo del proceso, pero que no lo logra. Cercano a la iteración 10 se puede observar que el algoritmo se estanca, esto podría deberse a la última estrategia que realiza antes de modificar la malla, correspondiente al paso de sondeo que mantiene el actual iterador en busca de un

punto que mejore la función objetivo. Luego al continuar con este paso y no encontrar puntos que mejoren, se realiza la modificación de la malla lo que generaría los saltos que son apreciados. En la Figura 24 pese a los malos resultados presentados en las variables de decisión, las restricciones no son infringidas en su totalidad, siendo algo inevitable producto de las variaciones en los flujos y la temperatura.

Respecto a los errores obtenidos el mejor resultado y peor resultado de la metodología propuesta tiene un 9,6% y 32% respectivamente, mientras que el algoritmo de Nelder Mead, y el método dual tienen un 21% y 49% respectivamente, dejando en evidencia que el método dual corresponde al peor resultado, producto de la incorrecta estimación de los gradientes.

5.2.2 Perturbación escalón cada dos ciclos

En la Figura 25 se presentan los resultados obtenidos por el método dual.

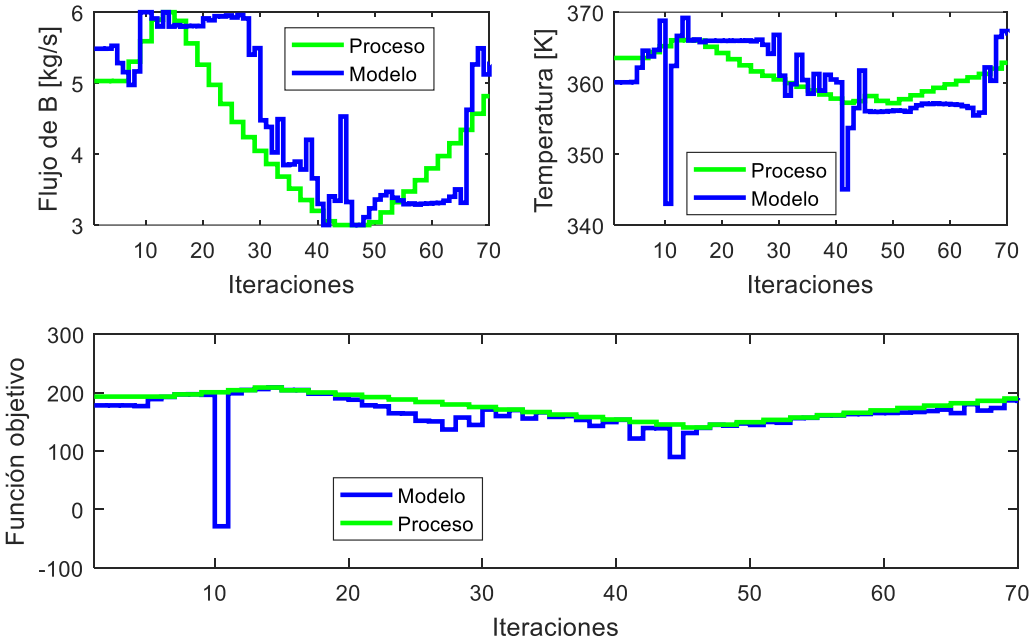

Figura 25: Resultados obtenidos por el método dual.

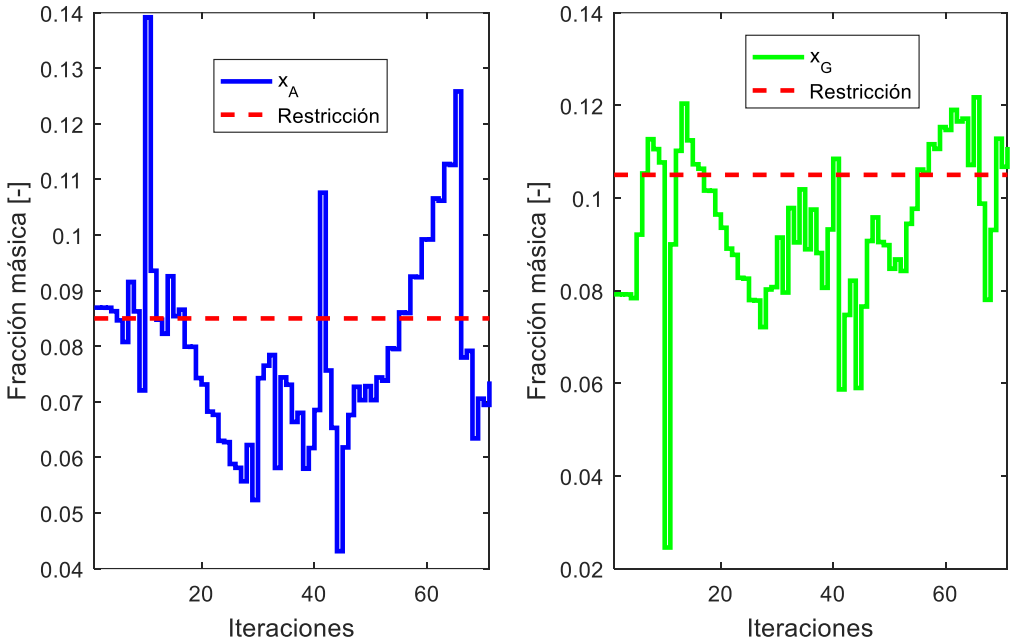

Figura 26: Resultados de las composiciones con el método dual.

El resultado obtenido mejora con respecto al caso anterior de esta misma metodología, pero sigue siendo un resultado malo. Esta mejora se debe a que se cuenta con una iteración más en donde se mantiene el mismo de valor de F_A, teniendo información pasada con el mismo valor. Esto provoca que los gradientes obtengan mejores resultados, ya que al menos dos datos cuentan con el mismo valor del flujo. Es de esperar que los resultados obtenidos por esta metodología mejoren cuando las perturbaciones sean añadidas a un número mayor de ciclos. Pese a que los resultados mejoran, la cantidad de veces que son infringidas las restricciones de las composiciones aumentan.

En la Figura 27 y Figura 28 se presentan los resultados obtenidos por el algoritmo de Nelder Mead.

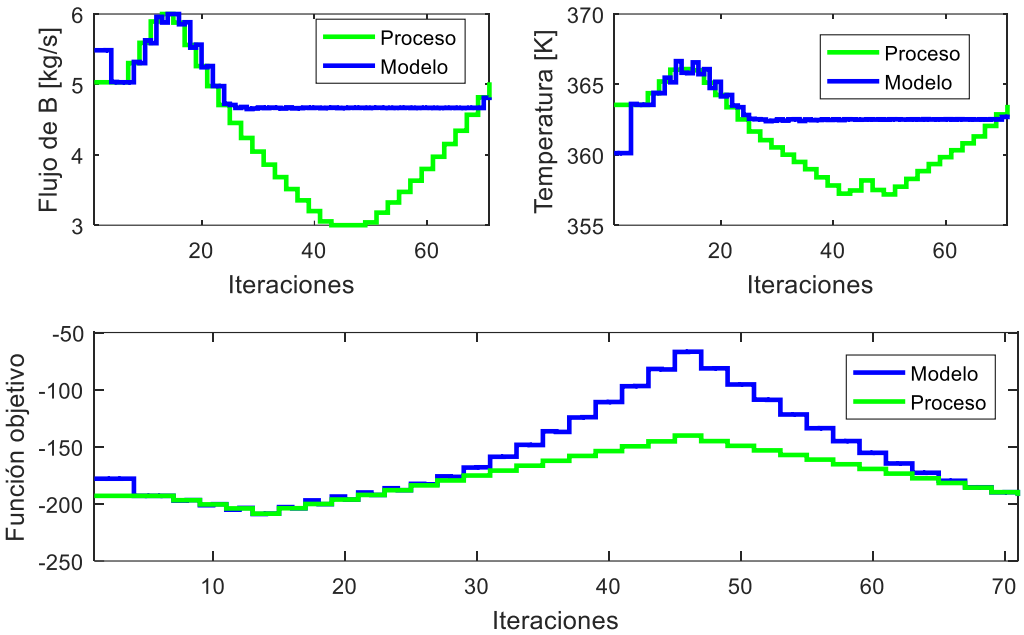

Figura 27: Resultados obtenidos por NMA usando Nelder Mead.

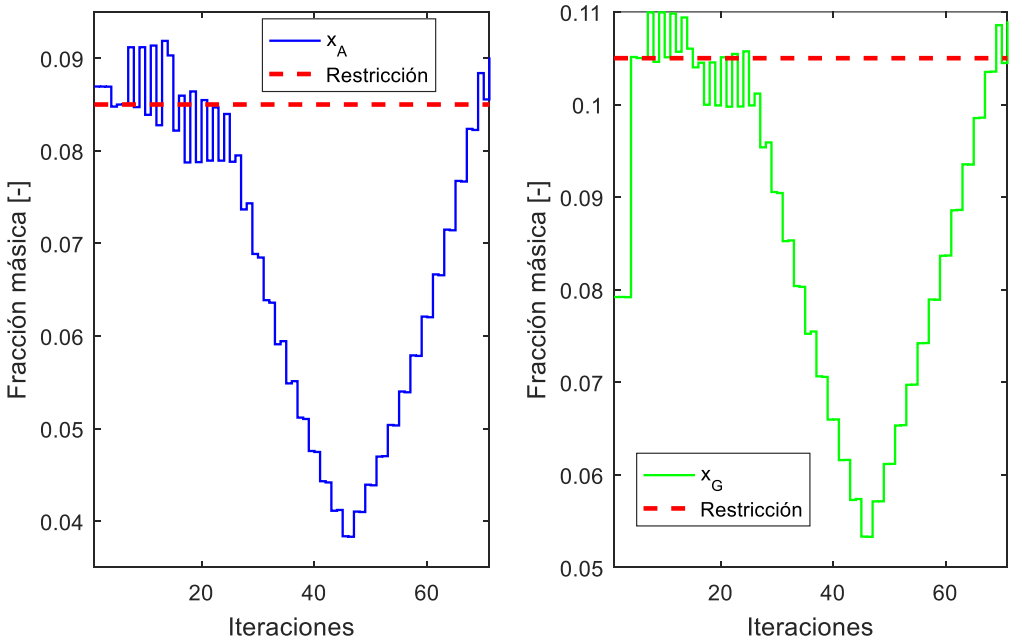

Figura 28: Resultados de las composiciones con NMA usando Nelder Mead

El comportamiento obtenido por NMA utilizando Nelder Mead es igual al caso anterior, produciéndose el estancamiento en el mismo punto. Pese a que tiene mayor número de iteraciones se vuelve a repetir el mismo comportamiento, comprobando así la existencia del problema que presenta este algoritmo. Este resultado es repetido en los casos siguientes para este tipo de perturbaciones, en donde son añadidas a un mayor número de iteraciones, por lo

que no serán mostrados. Respecto a las composiciones obtenidas, en el segmento donde el algoritmo logra seguir el óptimo del proceso ocurre el incumplimiento de las restricciones, lo que demostraría que las perturbaciones llevarían a la metodología a obtener puntos infactibles en el proceso.

El mejor resultado obtenido por la metodología propuesta es presentado en la Figura 29 y Figura 30.

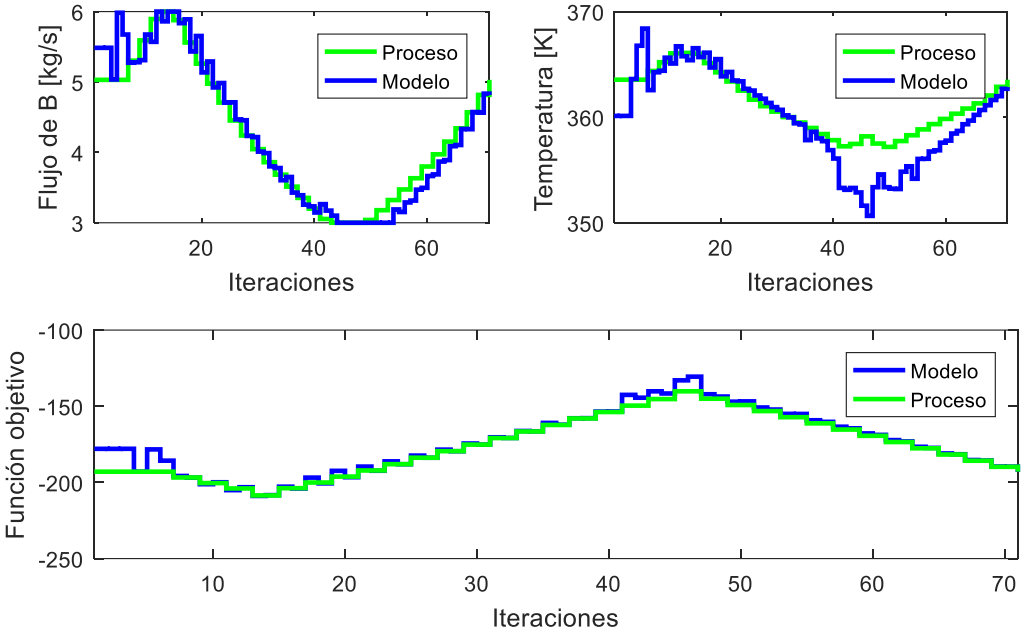

Figura 29: Mejor resultado obtenido por la metodología propuesta.

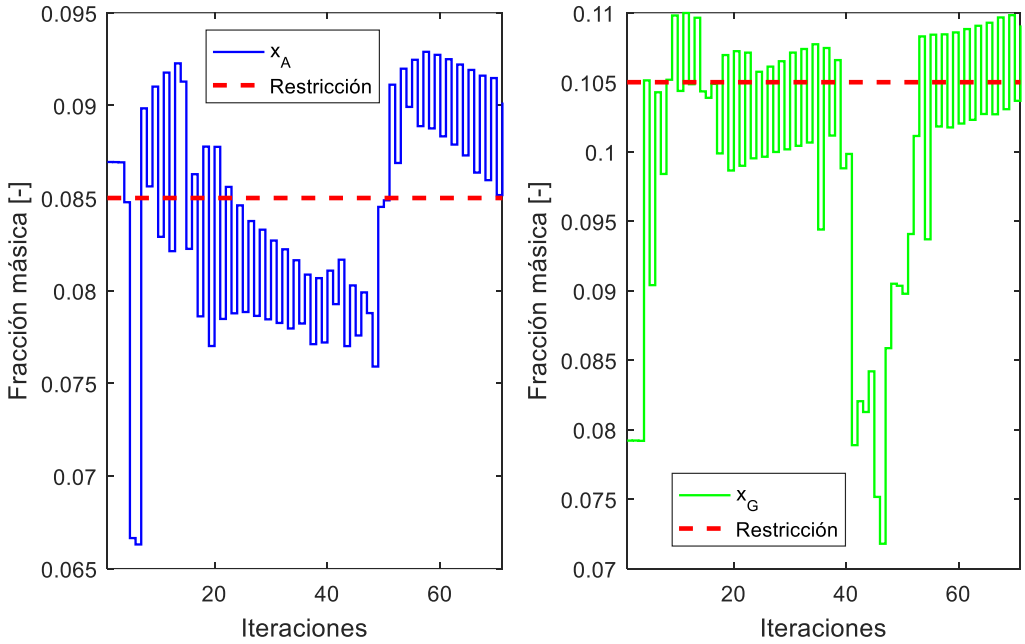

Figura 30: Composiciones obtenidas por el mejor resultado de la metodología propuesta.

En este caso el algoritmo que obtuvo el mejor resultado corresponde a MADS2N. Se observa que el modelo logra seguir adecuadamente la trayectoria del óptimo del proceso. Este resultado es explicado debido al paso de sondeo que realiza este algoritmo antes de modificar la malla. En este caso se cuenta con una iteración más, lo que le permite al algoritmo realizar el paso de sondeo sin que cambie el óptimo del proceso llevando a cabo una última exploración en el actual iterador, lo que llevaría a acercarse aún más al óptimo del proceso. En caso de no contar con este paso, la malla podría ser modificada en un esfuerzo para obtener un mejor punto. Pese al resultado obtenido, se observa que las restricciones son infringidas en su mayoría antes de la iteración 15, que es donde las variables de decisión se encuentran en constante aumento. Esto indicaría que infringir las restricciones vendría a ser algo propio del problema de manera de obtener el óptimo del proceso, cuando F_A aumenta en determinado valor.

El peor resultado obtenido por la metodología propuesta es presentado en la Figura 31 y Figura 32.

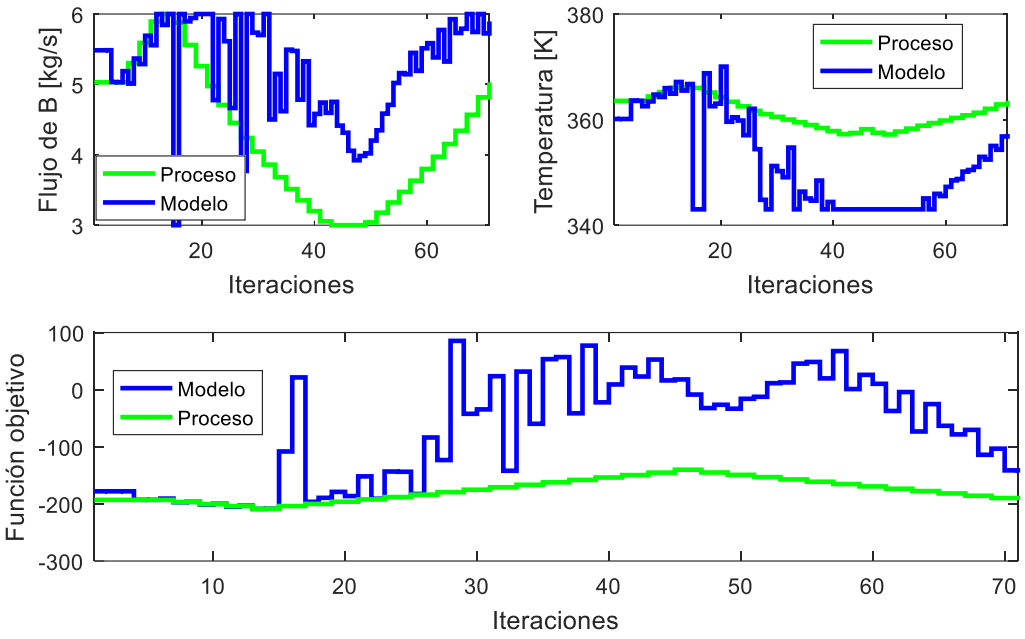

Figura 31: Peor resultado obtenido por la metodología propuesta.

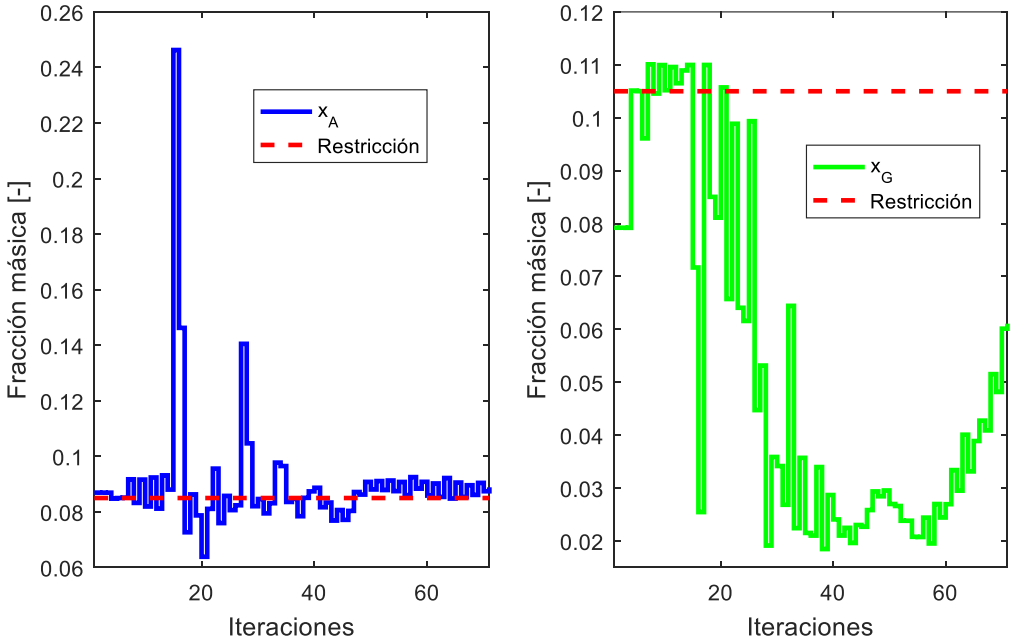

Figura 32: Composiciones obtenidas para el peor resultado de la metodología propuesta.

El algoritmo utilizado en esta ocasión corresponde a GPS2N. Dentro de los algoritmos de Pattern Search, GPS corresponde al más básico ya que los otros dos realizan modificaciones utilizando como base el algoritmo mencionado. Se observa que en un principio el algoritmo logra seguir de buena manera a la trayectoria del proceso, pero al momento de aumentar el valor de la función objetivo del proceso, se comienzan a obtener los errores. Esto se debe a

que los puntos generados son pequeños en comparación al aumento de la función objetivo, lo que provocaría la modificación de la malla, realizando los saltos que se observan. Luego al continuar el algoritmo tampoco encuentra un mejor punto realizando nuevamente una modificación en la malla. Este procedimiento es repetido en varias ocasiones debido a que en algunas iteraciones logra ajustarse a la trayectoria del proceso. Es de esperar que con los resultados presentados los límites de las composiciones sean sobrepasados, siendo en el caso de x_A más notorio.

Respecto a los errores obtenidos para la metodología propuesta, el mejor y peor resultado corresponden errores de 2% y 29% respectivamente, mientras que el método dual y el algoritmo de Nelder Mead presentan errores de 11% y 20%. Es por esto que se concluye que el método dual disminuye considerablemente el error obtenido, respecto al caso con frecuencia de cambio cada una RTO. El peor error es presentado por la metodología propuesta con el algoritmo de GPS2N.

5.2.3 Perturbación escalón cada 3 ciclos o más.

En la Figura 33, Figura 34 y la Figura 35 se muestran los resultados obtenidos por el método dual cada 3 o más ciclos de RTO.

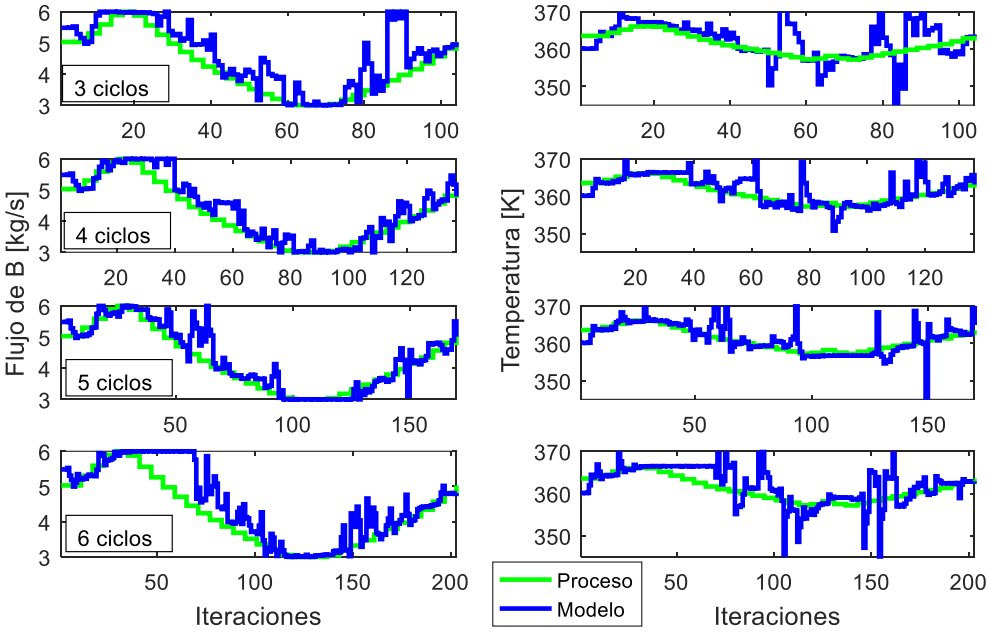

Figura 33: Resultados de las variables de decisión para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO.

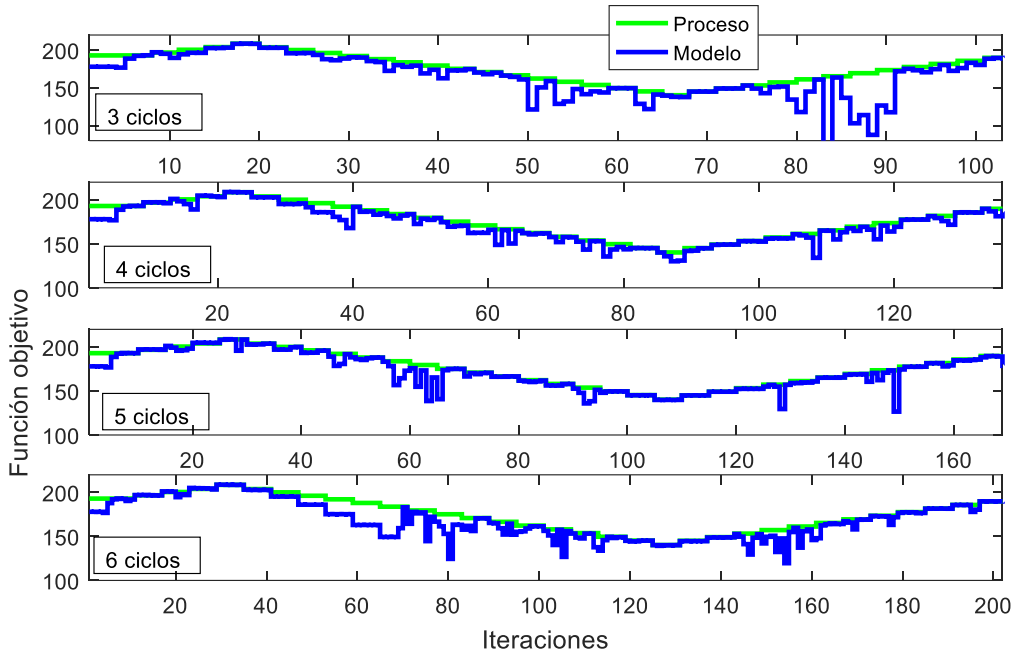

Figura 34: Resultados de la función objetivo para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO.

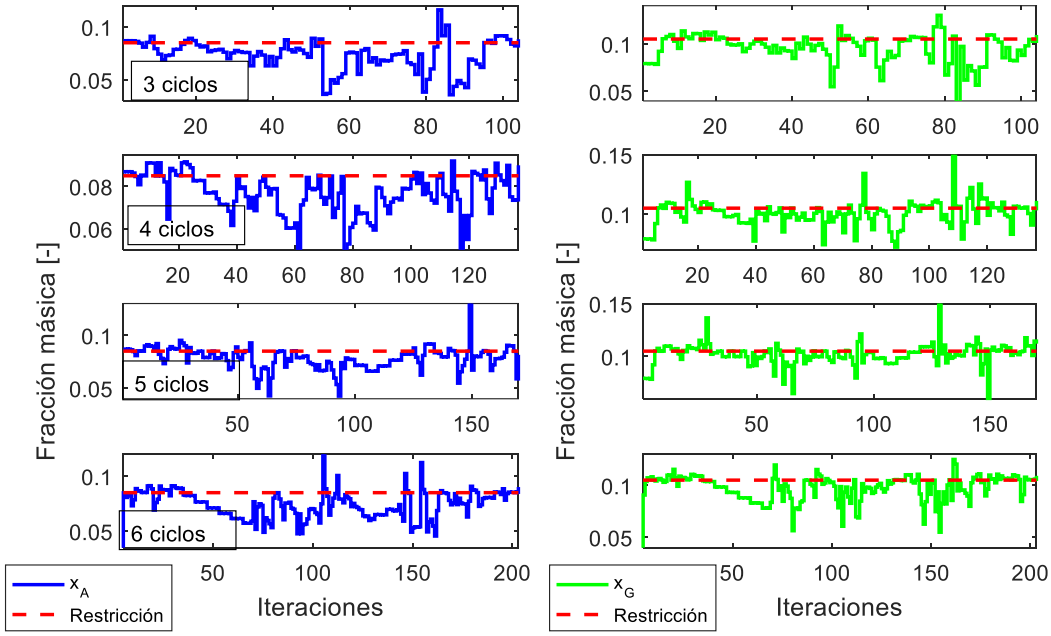

Figura 35: Resultados de las composiciones para el método dual cada 3 o más ciclos de RTO.

Como se comentó, a medida que la frecuencia de cambio de las perturbaciones es menor, los resultados mejoran considerablemente para el método dual. Esto se debe a que al agregar las perturbaciones cada 3 ciclos o más, el F_A se mantiene fijo durante ese periodo, provocando que la información pasada para la estimación de los gradientes sea la adecuada para obtener

un buen cálculo de estos. No obstante, al agregar la perturbación los gradientes vuelven a tener diferencias con respecto a F_A, esto provoca los saltos que son observados en las figuras.

A medida que las perturbaciones son agregadas a una mayor cantidad de ciclos, los resultados obtenidos por el método dual son más cercanas a la trayectoria óptima del proceso, debido a que los gradientes cuentan con los ciclos necesarios para ajustarse y disminuir el error producto de los cambios. En algunos casos ocurre que la metodología se aleja del óptimo producto de la cercanía que tiene con el proceso, de manera de encontrar un mejor punto, esto puede ser apreciado en el caso que las perturbaciones son agregadas cada 6 ciclos.

Respecto a las composiciones, se puede observar que debido a la mejoría en los resultados de la función objetivo y las variables de decisión, los limites no son superados en la mayoría de las iteraciones. Esto podría llegar a ser evitado cambiando el valor del parámetro que indica el nivel mínimo de excitación por uno más pequeño, o utilizar filtros para suavizar los cambios de manera que los puntos obtenidos por la metodología sean factibles en el proceso.

En la Figura 36, Figura 37 y Figura 38 se presenta los resultados obtenidos para la metodología propuesta.

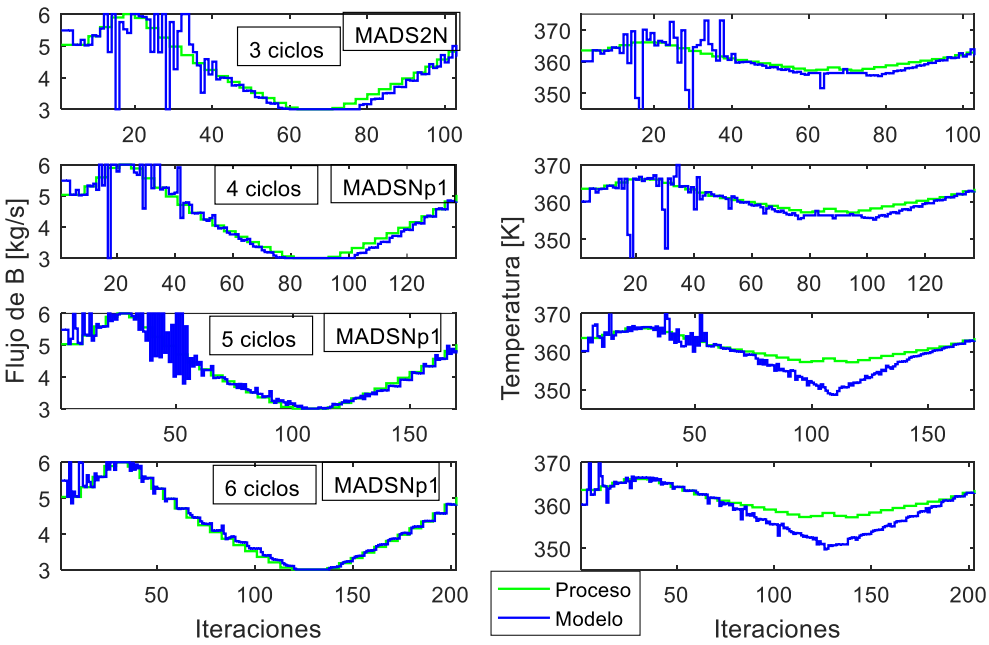

Figura 36: Mejores resultados para las variables de decisión utilizando metodología propuesta.

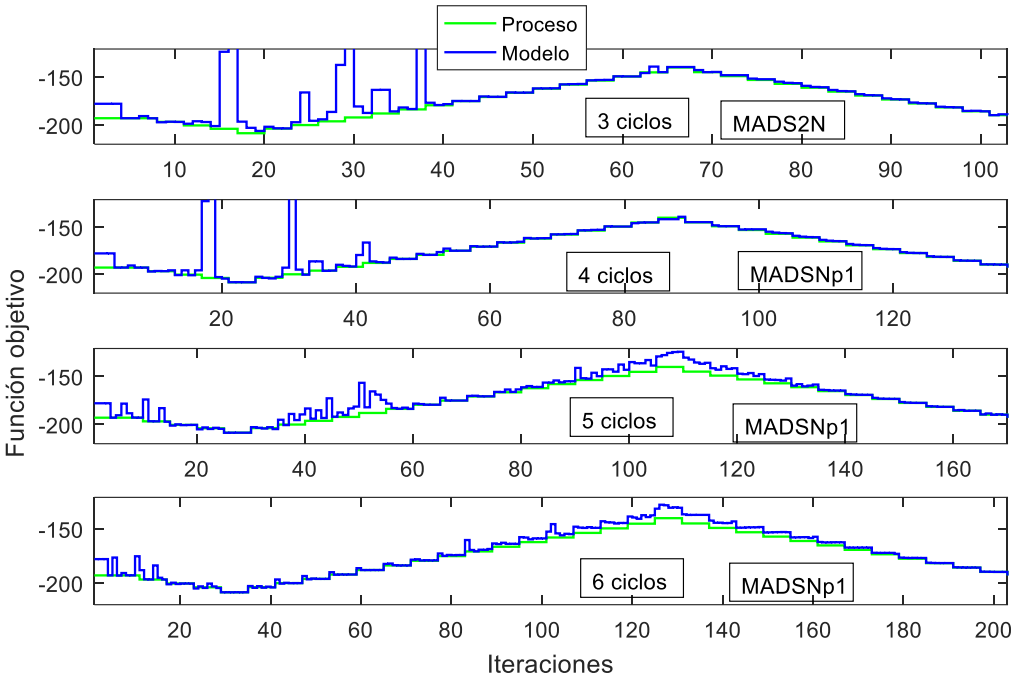

Figura 37: Mejores resultados para la función objetivo utilizando la metodología propuesta.

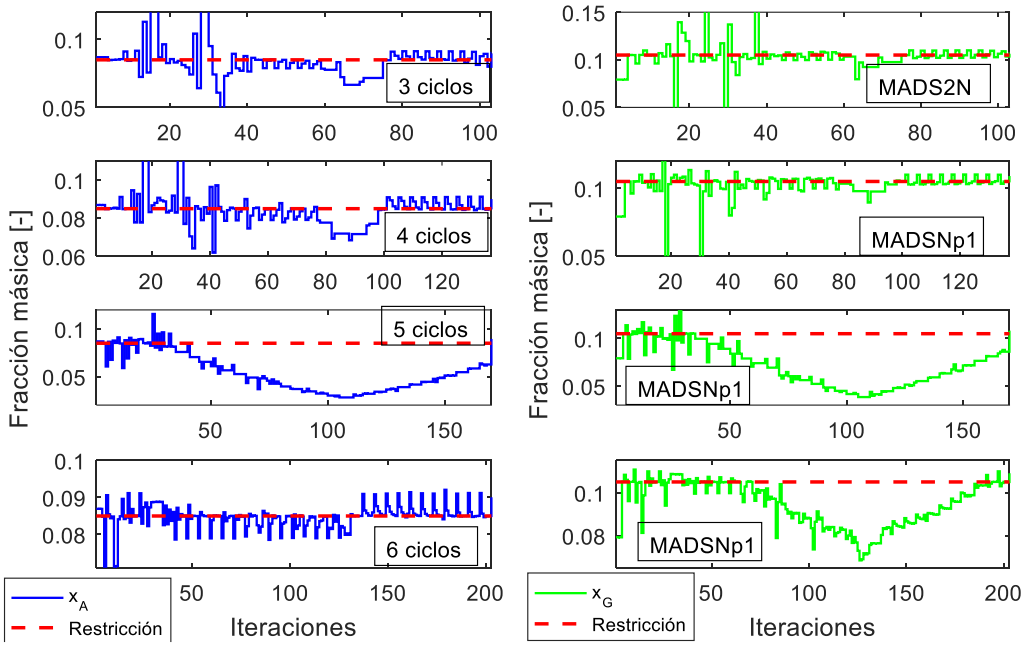

Figura 38: Mejores resultados de las composiciones obtenidas utilizando la metodología propuesta.

Se observa que los resultados obtenidos siguen de la trayectoria óptima del proceso, donde MADS deja en evidencia que el paso de sondeo que realiza resulta beneficioso. También se observa que, al tener una menor frecuencia de cambio en las perturbaciones, se presentan ciertos saltos en el seguimiento del proceso. Esto se explica ya que, al contar con una mayor

cantidad de ciclos en los cuales la función objetivo óptima no cambia, el iterador actual logra acercarse demasiado al óptimo, provocando que la próxima búsqueda no se encuentre un punto que mejore la función. De esta manera, la siguiente estrategia correspondería a la modificación de la malla. Con el fin de evitar este comportamiento, se debería implementar un filtro de pasa baja en las variables de decisión del proceso que entrega el optimizador anidado para disminuir los saltos observados. A pesar de los buenos resultados y la cercanía con el óptimo del proceso, la metodología sigue entregando puntos infactibles debido a que se infringen los límites de las composiciones, producto del efecto combinado en el cambio de las variables de decisión y la perturbación agregada, la cual es desconocida por el modelo.

De manera similar a los casos anteriores utilizando los algoritmos de Pattern Search, para las composiciones en varias iteraciones los límites son superados, principalmente en los saltos que son llevados a cabo. Esto demostraría que el uso de filtros para esta metodología sería una buena alternativa.

Los resultados de los errores porcentuales obtenidos para F_B se encuentran en la Tabla 6

Tabla 6: Errores obtenidos para las metodologías utilizadas.

Caso / Método	3 ciclos	4 ciclos	5 ciclos	6 ciclos
GPS2N	4,9%	2,2%	7,5%	34%
GPSNp1	14%	18%	20%	28%
GSS2N	21%	4,0%	4,2%	20%
GSSNp1	14%	18%	20%	28%
MADS2N	2,6%	14%	14%	5,8%
MADSNp1	4,9%	0,82%	3,6%	6,5%
Nelder Mead	20%	21%	21%	21%
Método Dual	10%	5,6%	4,3%	6,5%

En la Tabla 7 se puede observar que para el método dual su error va disminuyendo, lo que demostraría que a una menor frecuencia de las perturbaciones se logra cumplir con el objetivo de la RTO.

La metodología de NMA utilizando el algoritmo de Nelder Mead, comprueba la existencia del estancamiento mencionado por la literatura. Esto se produce debido a que la función objetivo del proceso comienza a disminuir su valor, y los puntos a los cuales tendría que llegar se encuentran dentro del simplex, dejando como única alternativa el encogimiento del simplex. Este encogimiento es muy pequeño, provocando que nunca se llegue al óptimo del proceso.

La metodología propuesta presenta ambos resultados, donde MADS tiene los errores más pequeños y GPS en algunos casos los más grandes. La diferencia obtenida de los algoritmos de Pattern Search pueden ser explicados debido a las pequeñas diferencias que tienen estos. En el caso de MADS se comprueba que resulta beneficioso realizar el paso de sondeo, mientras que GSS al favorecer la última dirección donde se obtuvo un mejor iterador puede tener efectos negativos. Por otra parte, los errores grandes pueden ser explicados por el acercamiento existente a la trayectoria del proceso, esto provoca que el próximo punto se aleje producto de no encontrar una menor evaluación en la función objetivo, lo que modificaría la malla de búsqueda alejándose del proceso.

Por último, dado que MatLab cuentan con dos maneras para la generación de las mallas de los algoritmos de Pattern Search, se comprueba que los vectores utilizados para llevar a cabo la malla influyen en la detección del óptimo del proceso. Esto puede ser observado en los errores ya que, utilizando un mismo algoritmo con diferentes maneras en la generación de la malla, se obtienen resultados distintos.

5.3 Perturbaciones con modelo ARIMA

De modo de obtener una perturbación similar a lo que se podría encontrar en la industria se utiliza un modelo ARIMA, que corresponden a modelos que explican la variable de estudio de acuerdo a sus valores anteriores, un término independiente, una sucesión de errores de periodos anteriores y cierta tendencia.

En este caso la tendencia fue eliminada de manera de obtener perturbaciones alrededor del valor nominal de F_A.

Se utilizaron 5 realizaciones de la variable incierta, los cuales fueron utilizados en los casos que frecuencia de las perturbaciones va desde 1 ciclo hasta los 3 ciclos, para el resto se utilizó solo una realización de la variable incierta.

Es de esperar que los resultados empeoren, ya que en este caso las perturbaciones añadidas tienen cambios mayores a un 5% para F_A.

5.3.1 Perturbación modelo ARIMA cada 1 ciclo

En la Figura 39 y Figura 40 se presentan los resultados para el método dual.

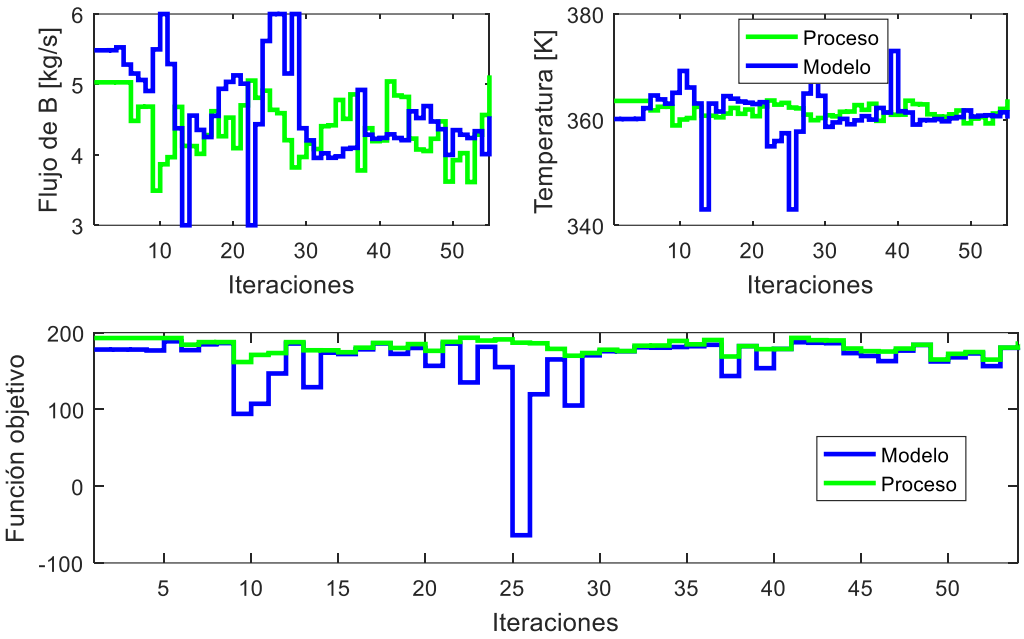

Figura 39: Resultados obtenidos por el método dual.

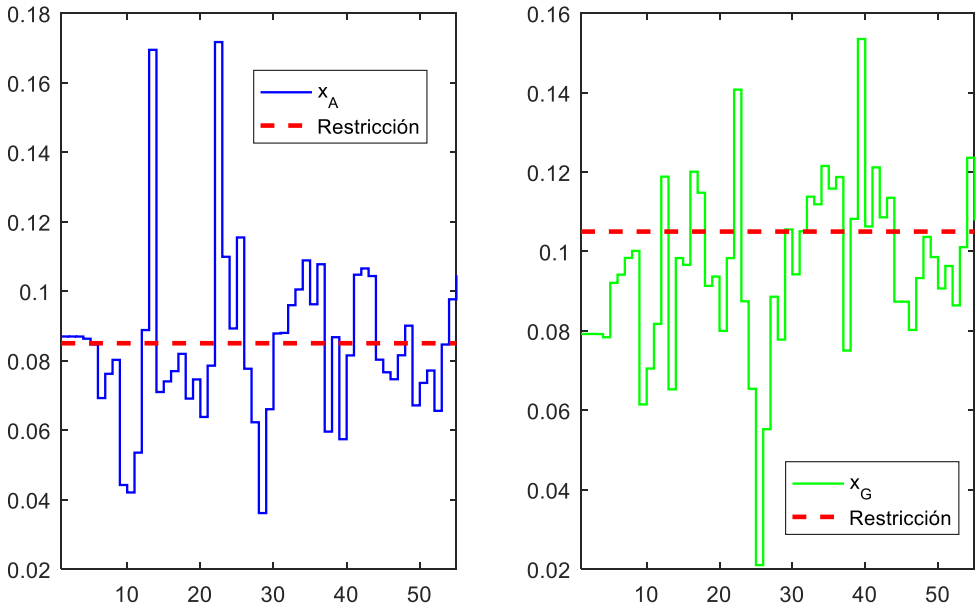

Figura 40: Composiciones obtenidas por el método dual.

Con este resultado se comprueba que el método dual no logra responder bien ante las perturbaciones que son añadidas cada 1 ciclo de la RTO, ya que la estimación de los gradientes utiliza información pasada. Al estar variando constantemente, no es posible una correcta estimación del gradiente, además en este caso los cambios en el F_A son mayores

logrando que la utilización de derivadas no sea adecuada debido a que el cambio entre el punto actual con el anterior es mayor.

Producto de que no se logra seguir la trayectoria del óptimo, es de esperar que se siga un camino infactible debido a los límites en las composiciones, en donde se observa que en muchos casos se infringe la restricción, lo que afectaría negativamente a los gradientes de la restricción.

Los resultados obtenidos por NMA utilizando Nelder Mead se presentan en la Figura 41.

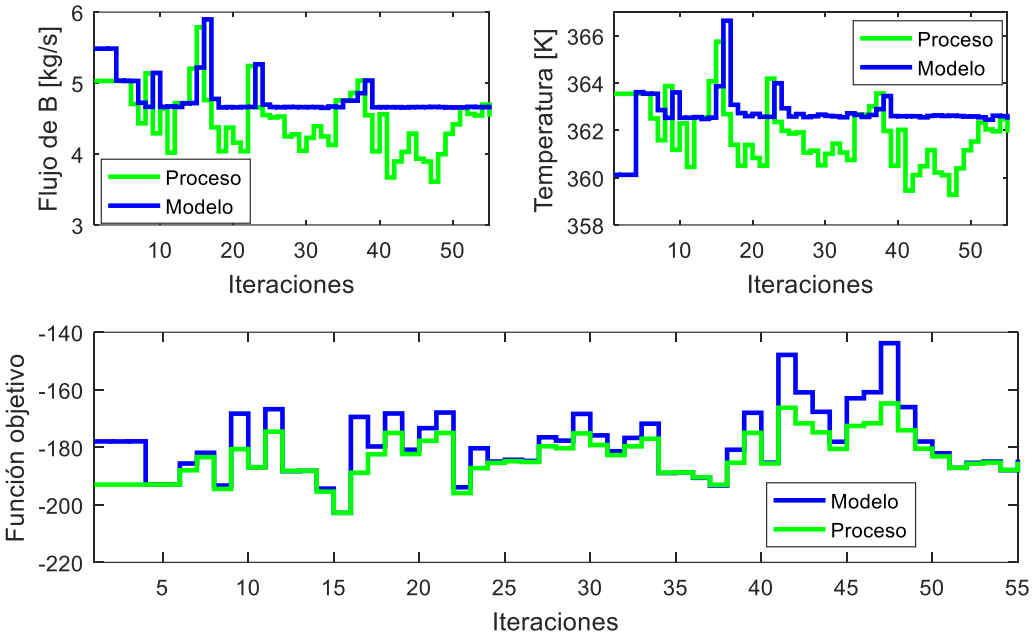

Figura 41: Resultados obtenidos por NMA utilizando Nelder Mead.

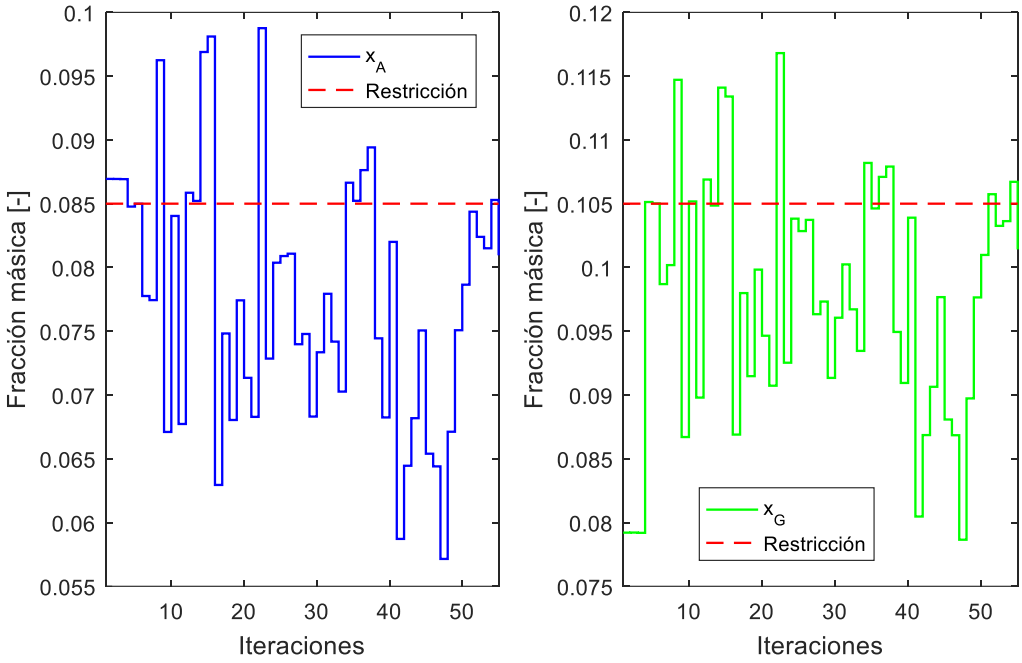

Figura 42: Composiciones obtenidas por NMA utilizando Nelder Mead.

La metodología de NMA utilizando Nelder Mead, vuelve a quedar en estancamiento, producto de que la trayectoria que sigue el proceso se encuentran dentro del simplex generado por el algoritmo, lo que lleva a realizar el encogimiento. No obstante, se puede observar que cuando los valores de las variables de decisión son mayores que el punto de estancamiento se logra seguir el óptimo del proceso. Respecto a las composiciones tienen una menor cantidad de iteraciones en que el límite es superado, en este caso este comportamiento es exclusivamente de los cambios en F_A, lo que indicaría que el infringir las restricciones podría deberse al desconocimiento del modelo de los cambios de F_A.

El resultado obtenido se repite en los siguientes casos, teniendo la misma explicación. Por lo que en los casos siguientes no se incluirá la metodología NMA usando Nelder Mead.

La Figura 43 y Figura 44 presenta el mejor resultado obtenido por la metodología propuesta.

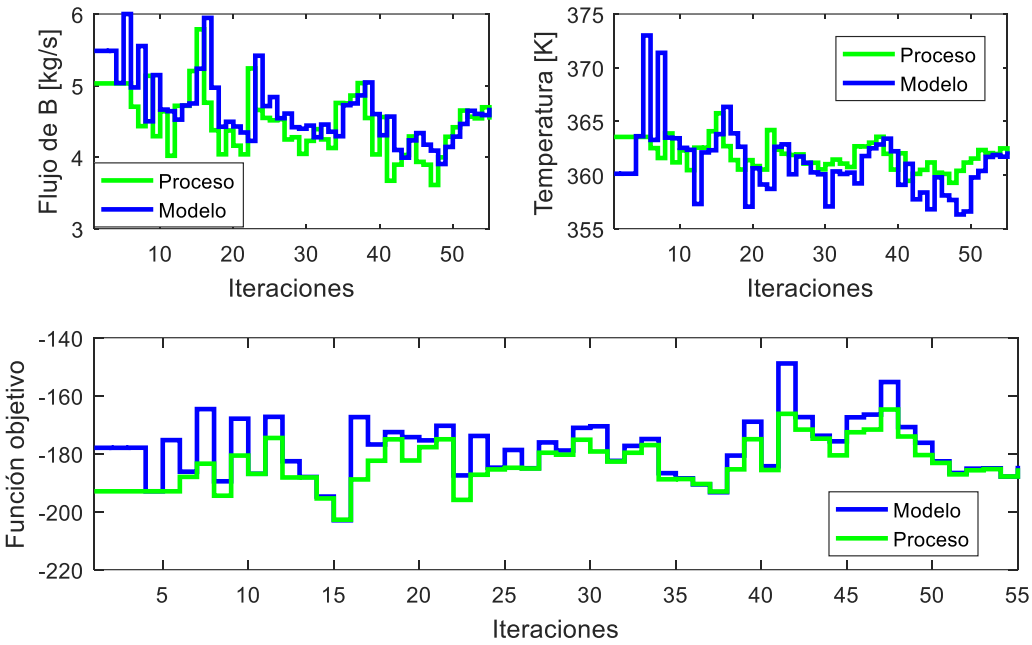

Figura 43: Resultados obtenidos por la metodología propuesta.

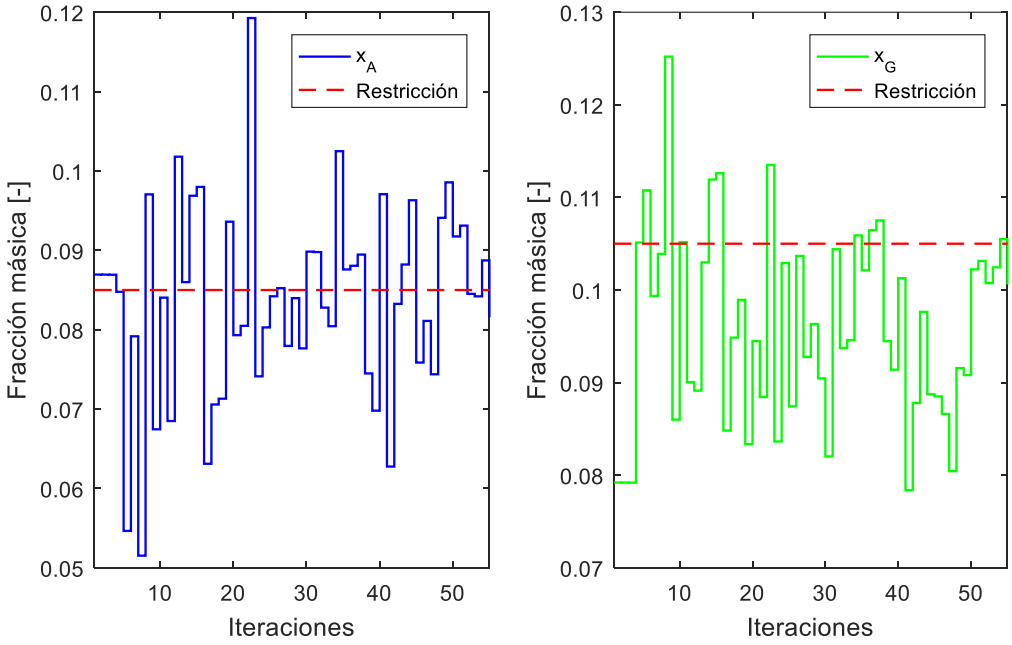

Figura 44: Composiciones obtenidas con el mejor resultado por la metodología propuesta.

En este caso los algoritmos de Pattern Search presentan resultados similares, siendo el mejor el presentado en la Figura anterior, que corresponde al algoritmo de GSSNp1, donde se observa que se logra intentar seguir la tendencia que tiene la trayectoria del proceso. También en ciertos puntos logra adecuarse a la trayectoria del proceso, lo que genera la modificación

de la malla alejándose de la trayectoria del proceso, lo que indicaría una vez más que el uso de filtros para los resultados obtenidos podría mejorar los resultados.

Respecto a los errores para la metodología propuesta el error más pequeño y el más grande corresponde a 10,7% y 12,9% respectivamente, siendo muy similares. Para el de Nelder Mead y el método dual se obtienen errores promedios de 10,7%y 21%, lo que situaría nuevamente al método dual como la peor metodología cuando la frecuencia de cambio es igual a la de la actualización de la RTO, producto de no disponer de información pasada con perturbación constante para la estimación de los gradientes con respecto a las variables de decisión.

5.3.2 Perturbación modelo ARIMA cada dos ciclos

Los resultados obtenidos por el método dual se presentan en la Figura 45

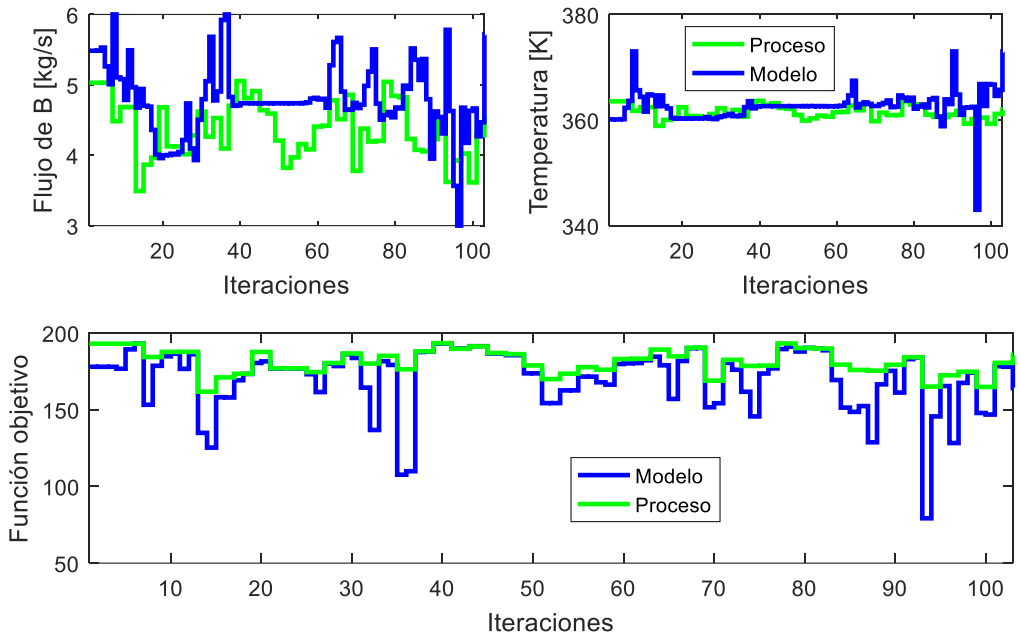

Figura 45: Resultados obtenidos por el método dual.

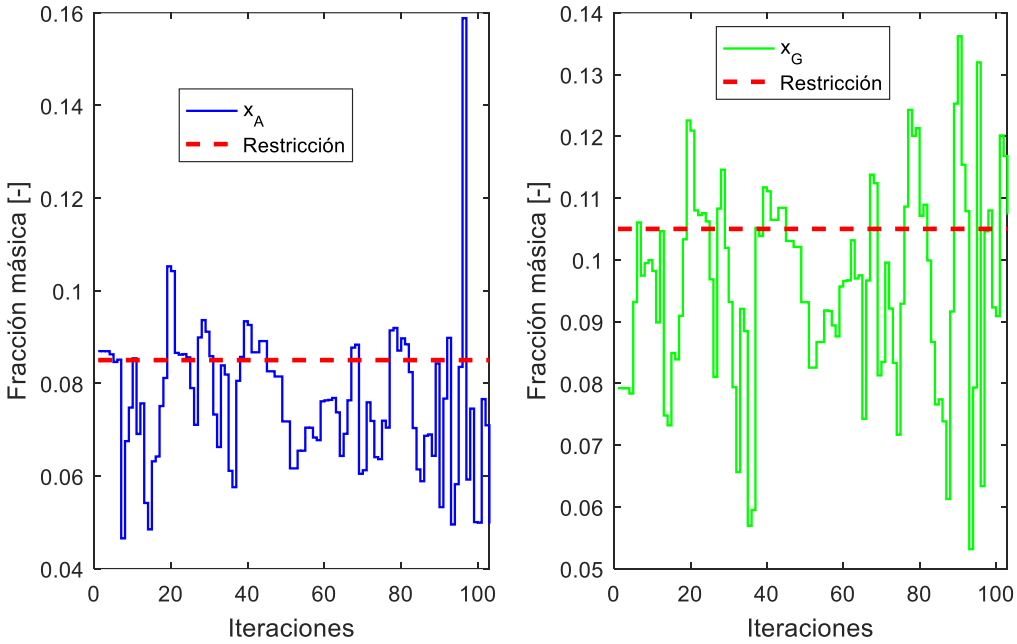

Figura 46: Composiciones obtenidas por el método dual.

De acuerdo a los resultados anteriores con las perturbaciones tipo escalón, es de esperar que los resultados mejoren al tener más ciclos con el mismo valor de F_A. No obstante, se observa que el comportamiento empeora producto de que las perturbaciones tienen variaciones más grandes, y como ya se mencionó afectaría a los gradientes. Esto se debe a que es necesario que las diferencias entre los puntos tomados para obtener los gradientes sea lo más pequeño posible, y en caso de ser grandes se obtienen errores en la estimación de estos. Una solución a esto sería cambiar el valor del parámetro del nivel de excitación mínimo a uno que se adecue más al problema, pero debido a que los cambios en F_A son aleatorios sería difícil hallarlo. Respecto a las composiciones se observa que en un gran número de iteraciones los límites son superados, lo que provocaría aumentaría el error obtenido por esta metodología.

El mejor resultado por la metodología propuesta se presenta en la Figura 47 y Figura 48.

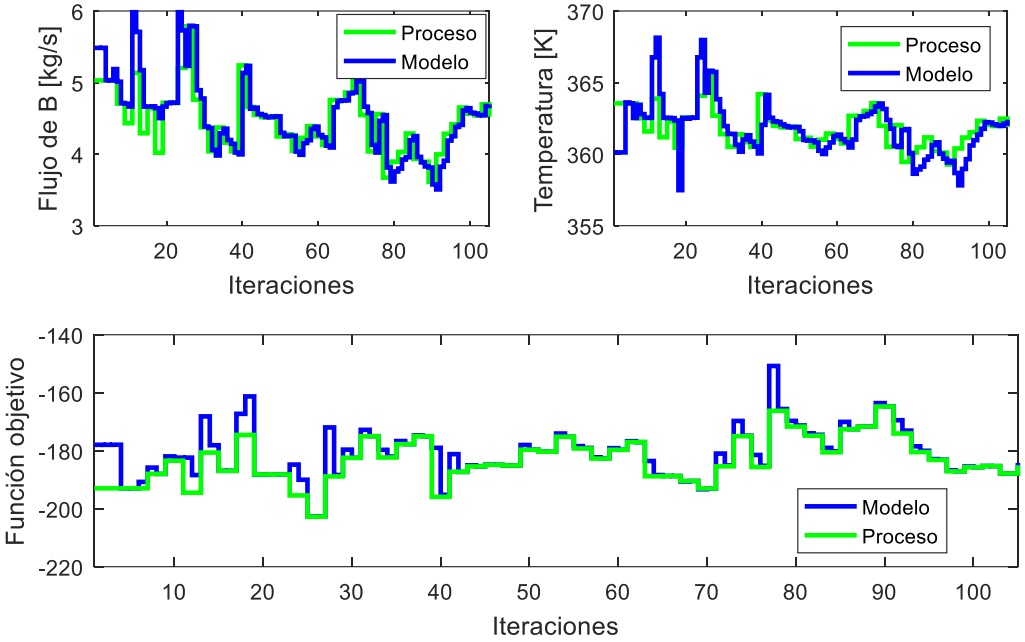

Figura 47: Resultados obtenidos por la metodología propuesta.

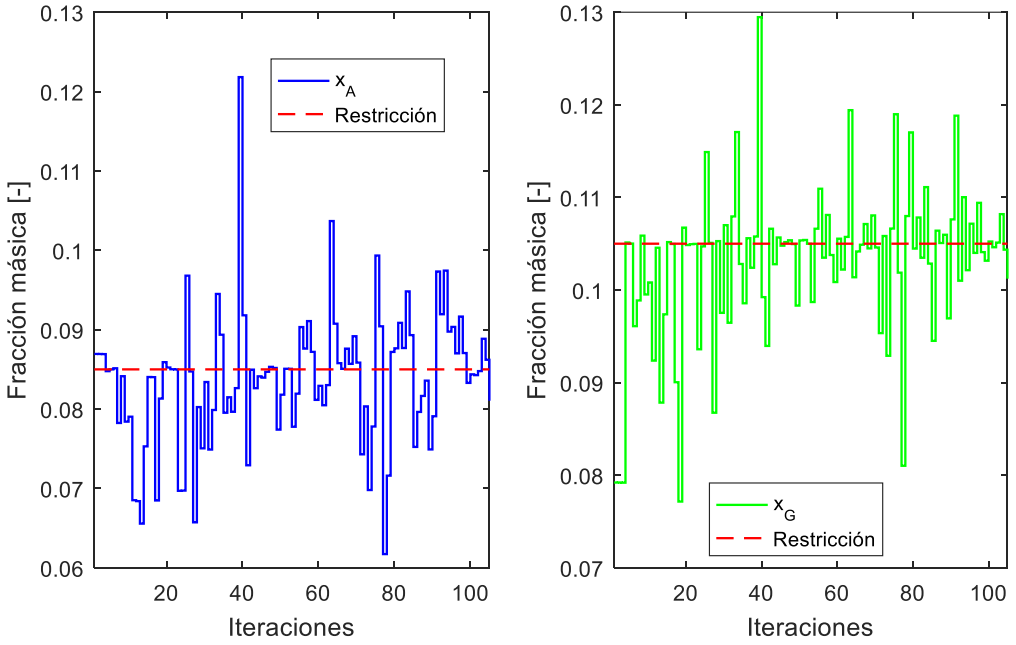

Figura 48: Composiciones obtenidas por la metodología propuesta.

Para este caso los algoritmos Pattern Search presentan resultados similares con errores promedio menores al 10%.

A pesar de los grandes cambios que son generados en F_A producto de las perturbaciones, los algoritmos de Pattern Search logran seguir la trayectoria del proceso, en donde el caso presentado corresponde a GSS2N, el cual tiene el error más cercano a 0. Esto se explica ya que al generar la malla cuentan con puntos prueba en todas las direcciones respecto al actual iterador, lo que permite no caer en estancamiento y obtener los resultados mostrados. En el caso de las restricciones, el desconocimiento del modelo de los cambios de F_A produciría que los límites de las composiciones sean superados, obteniendo puntos infactibles pese a los bueno resultados.

Respecto a los errores promedios obtenidos, el error más pequeño y más grande para la metodología propuesta corresponde a 4% y 7% respectivamente. El de Nelder Mead y el método dual presentan errores del 8% y 20%, respectivamente, siendo el peor el método dual, producto de los cambios mayores presentados en F_A lo que lleva a una mala estimación de los gradientes.

5.3.3 Perturbación modelo ARIMA cada 3 o más iteraciones

En la Figura 49, Figura 50 y Figura 51 se presentan los resultados obtenidos por el método dual.

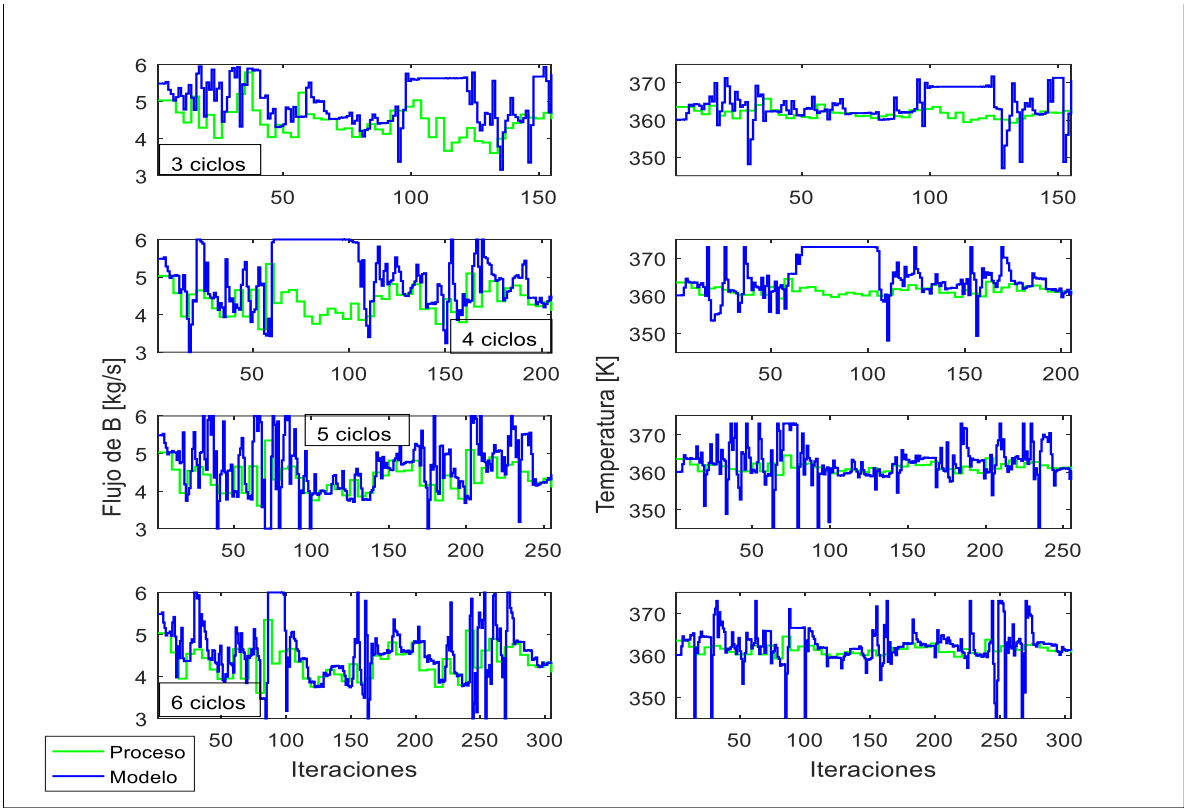

Figura 49: Resultados de las variables de decisión obtenidos por el método dual.

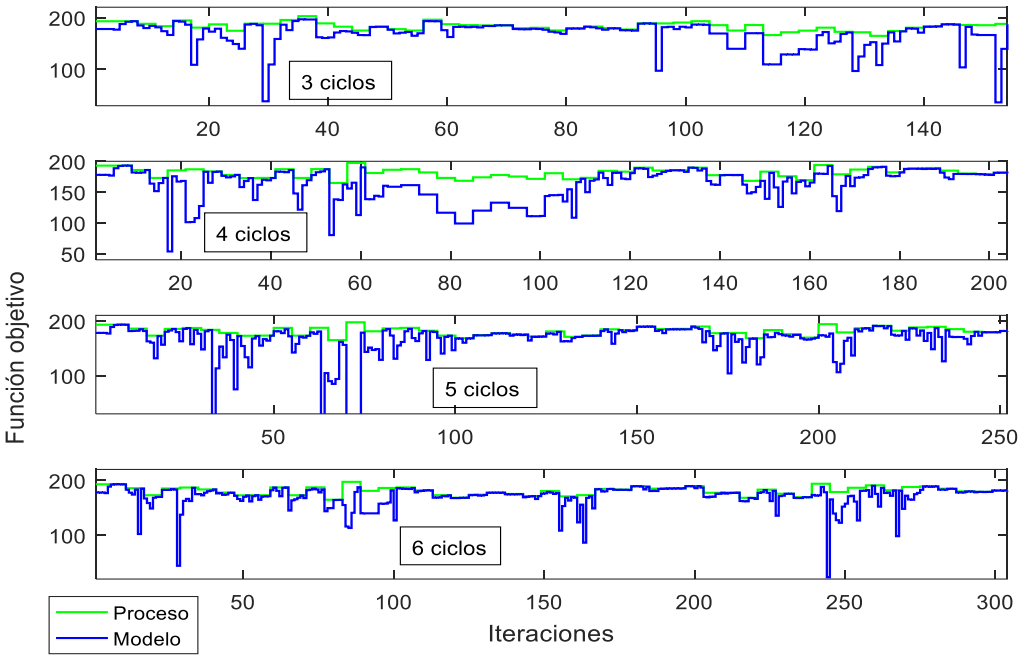

Figura 50: Resultados de la función objetivo obtenidos por el método dual.

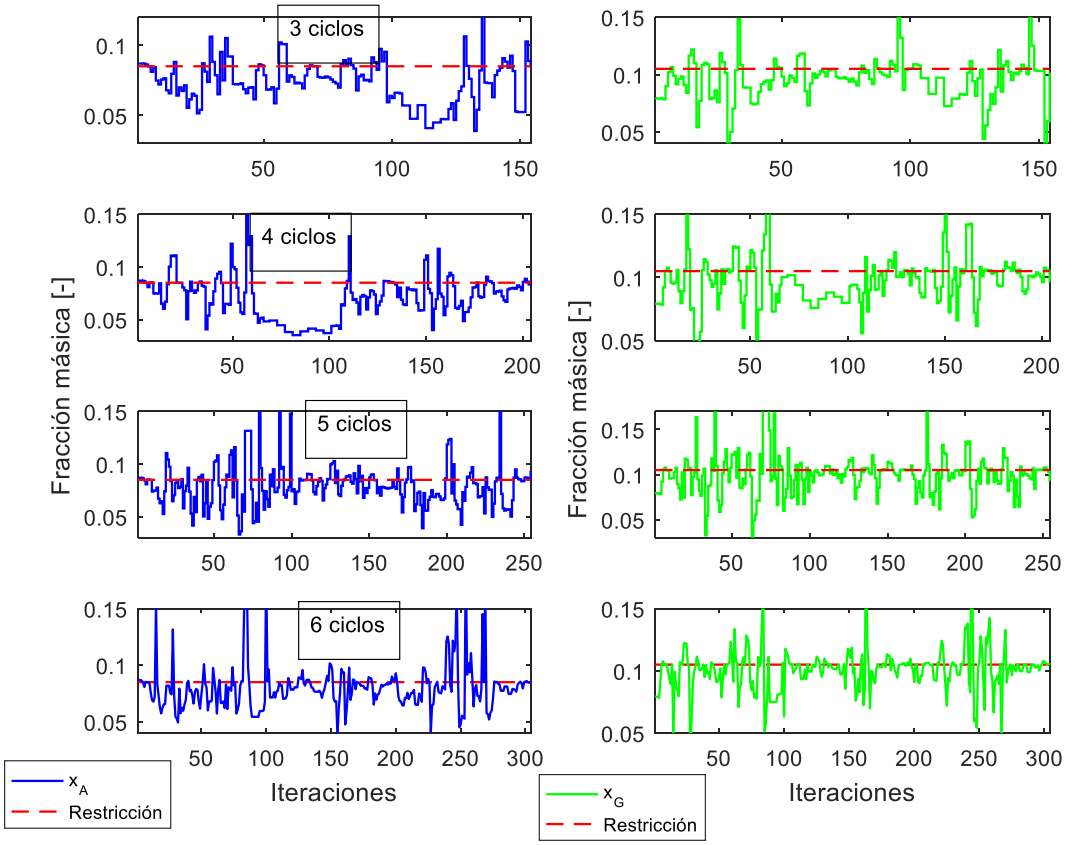

Figura 51: Resultados de las composiciones obtenidos por el método dual.

Se observa que a medida que las perturbaciones son añadidas a una menor frecuencia de cambio, el seguimiento de la función objetivo del proceso presenta mejores resultados para el método dual. Esto comprueba los resultados anteriores para esta misma metodología, lo que se explica producto que se mantiene por más iteraciones el mismo F_A. Por otra parte, tener variaciones mayores en las perturbaciones provoca los saltos grandes que son observados, dado que cambia la información en los gradientes. Esto comprueba que perturbaciones con cambios más pronunciados afectan negativamente el desempeño de esta metodología. Respecto a las composiciones, en muchas ocasiones los límites son superados y presentan el mismo comportamiento que las variables de decisión, lo que produciría problemas en los gradientes de las restricciones. La utilización de un filtro que suavice los cambios podría resultar beneficioso, disminuyendo la variación de los saltos y que los puntos entregados por la RTO no sean infactibles.

Los resultados obtenidos por la metodología propuesta se presentan en la Figura 52.

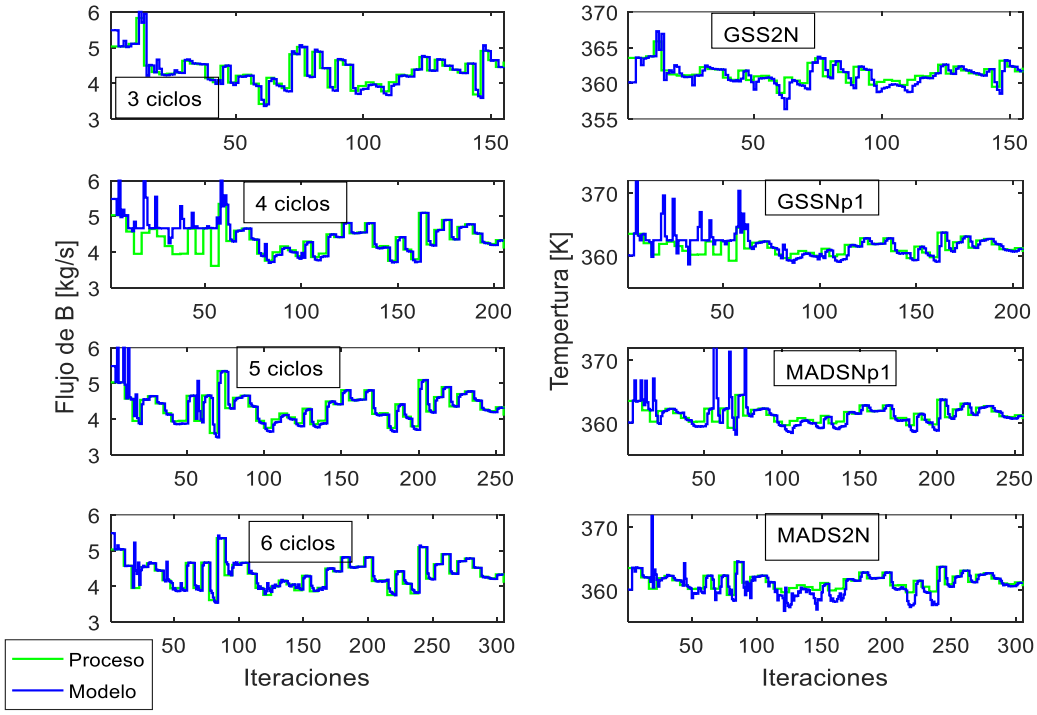

Figura 52: Resultados de las variables de decisión obtenidos por la metodología propuesta.

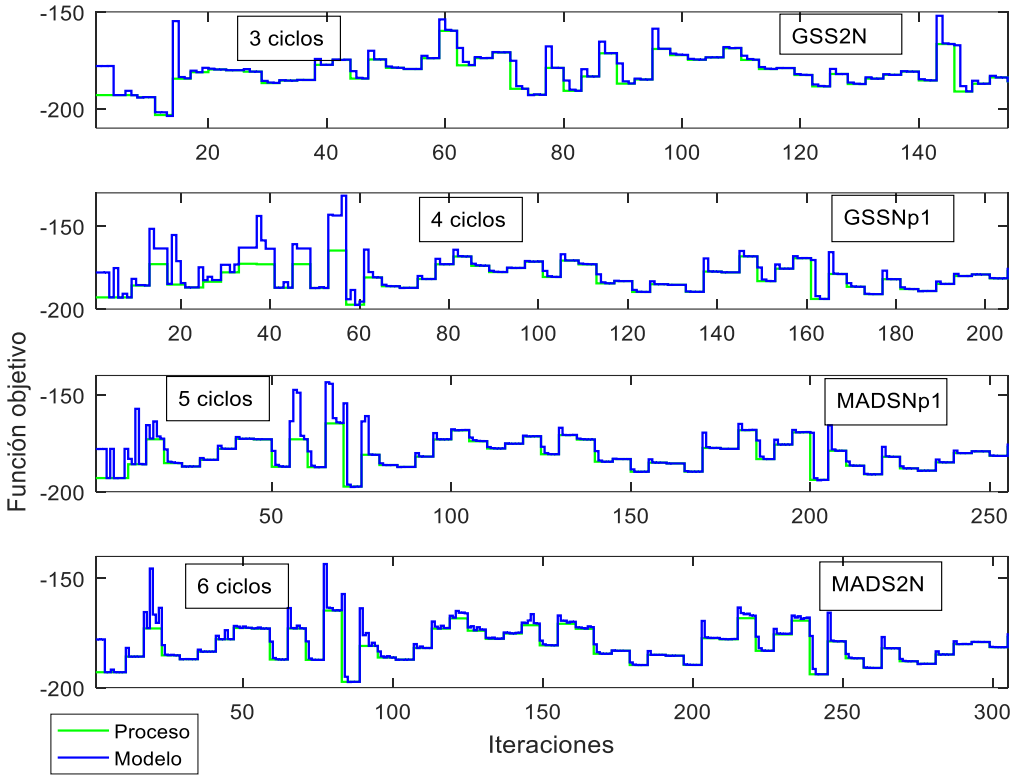

Figura 53: Resultados de la función objetivo obtenidos por la metodología propuesta.

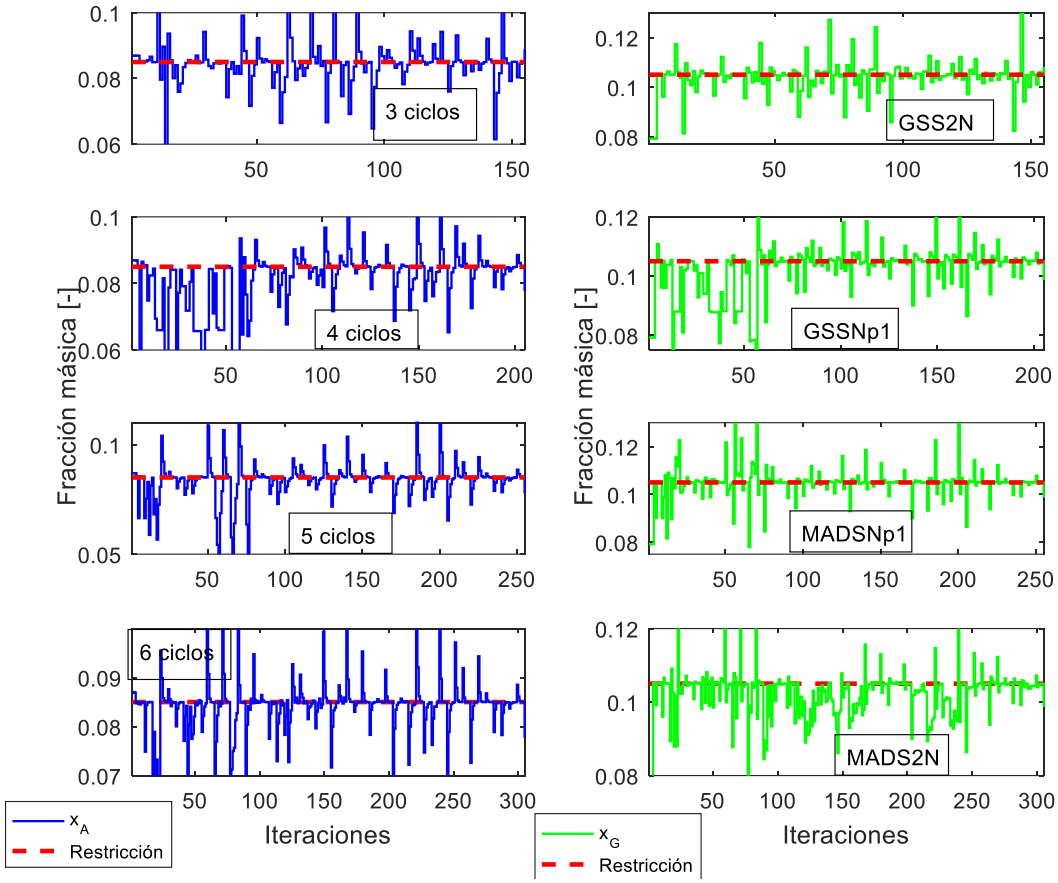

Figura 54: Resultados de las composiciones obtenidos por la metodología propuesta.

De acuerdo a los resultados obtenidos se tiene que la metodología propuesta se adecua bien a las perturbaciones, ya que logra seguir la trayectoria del proceso, obteniendo incluso mejores resultados que las perturbaciones escalón. La explicación de esto se debe a que los cambios de las perturbaciones son más pronunciados, lo que genera que la búsqueda por el algoritmo sea más gradual. Provocando así, que la modificación en la malla no sea llevada a cabo en tantas ocasiones. De manera similar a lo anterior, pese a los buenos resultados obtenidos se siguen obteniendo puntos infactibles ya que se superan los límites en las restricciones, lo que indicaría que esto vendría a ser un problema producto de las perturbaciones. Una posible solución sería añadir estimadores que permitan aproximar el valor de los cambios de F_A para el modelo.

En la Tabla 7 se presenta un resumen de los errores obtenidos de cada método utilizado.

Tabla 7: Resultados obtenidos por los métodos utilizados

Caso / Método	3 Iteraciones	4 Iteraciones	5 Iteraciones	6 Iteraciones
GPS2N	10%	7,8%	8,3%	8,1%
GPSNp1	10%	3,5%	11%	10%
GSS2N	4,5%	6,4%	4,3%	9,1%
GSSNp1	10%	3,5%	11%	10%
MADS2N	6,8%	9,0%	8,7%	0,82%
MADSNp1	8,3%	8,3%	1,2%	3,03%
Nelder Mead.	19%	9,1%	9,1%	9,1%
Método Dual	14%	15%	13%	7,7%

De la Tabla 7 se desprende que, el método dual al tener una menor frecuencia de cambio en las perturbaciones, logra adecuarse a los cambios obteniendo mejores resultados producto de una mejor estimación en los gradientes del proceso.

La metodología NMA con Nelder Mead nuevamente presenta el estancamiento, lo que comprobaría el problema que presenta este algoritmo según la literatura. Esto podría llegar a ser evitado si la estrategia de encogimiento fuese mayor.

Los algoritmos de Pattern Search logran obtener buenos resultados, en donde se muestra comportamiento más cercano a la trayectoria del proceso. Esto podría deberse a que los cambios debido a las perturbaciones son más pronunciados, lo que lleva al algoritmo a no modificar la malla tantas veces.

5.4 Propuesta de implementación experimental

Para la propuesta de implementación experimental es necesario escalar los parámetros relacionados con la reacción, de manera de obtener resultados similares en el rango deseado de trabajo del sistema experimental.

Para esto primero se calibraron las bombas del laboratorio de manera de escalar el flujo de alimentación y descarga, en donde el flujo máximo de una de estas bombas fue cercano a los $28{,}5\ mL/s$. Debido a que no se quiere trabajar al flujo máximo, se definió un máximo de un 70% con respecto al flujo mencionado, es decir, un valor cercano a los $20\ mL/s$,y que el recipiente siempre se encuentra con un flujo alimentación, definiendo como mínimo $5\ mL/s$.

Se estudió el comportamiento de la temperatura que es modificada a través de un baño termorregulado, el cual cumple la función de enfriar el reactor a través de un serpentín de cobre. Luego de realizar varias pruebas, se concluye que no se logra llegar a temperaturas bajo a los $14°C$ dado que el agua dentro del baño comienza a aumentar su temperatura, lo

que podría resultar en un tiempo de espera excesivo para llegar a temperaturas menores a $15°$. Este problema podría ser solucionado agregando otro tanque con agua destilada, en donde fuera descargada el agua que enfriará el reactor, de manera que recibiría el golpe térmico el tanque y no el baño termorregulado.

La resistencia eléctrica fue probada hasta alcanzar temperaturas cercanas a los $40°C$ del agua en el recipiente, teniendo una alimentación y descarga alrededor de los $10\ mL/s$ en todo momento. Es necesario considerar que se está trabajando con agua potable, por lo que podrían precipitar las sales en suspensión afectando la transferencia de calor del sistema. También es necesario tener en cuenta el calor a retirar por el baño termorregulado a temperaturas muy altas elevará la temperatura del agua utilizada para enfriar lo que demoraría mucho tiempo en enfriar el agua. Por estas razones y de manera de que el control no demore demasiado en alcanzar el estado estacionario, se definió una temperatura máxima de $20°C$.

Por lo tanto, los parámetros de trabajo para el flujo de alimentación quedan en límites de $[5,20]mL/s$ mientras que la temperatura de trabajo queda en $[15,20]°C$.

Los supuestos realizados para llevar a cabo el escalamiento, fue que la proporción que se tiene en el proceso real debe mantenerse en el escalamiento, de esta manera se obtuvo la proporción de F_A y F_B, y fue aplicada al máximo y mínimo del flujo de alimentación propuesto, luego se llevaron a cabo la misma cantidad de perturbaciones partiendo desde el flujo máximo hasta alcanzar el flujo mínimo.

Los resultados obtenidos son mostrados en la Tabla 8, en donde F_{Areal} y F_{Breal} corresponden a los flujos del proceso y $F_{Ae}\ y\ F_{Be}$ corresponden a los escalamientos. Los valores en negrita son los valores nominales.

Tabla 8: Obtención de los flujos de A y B escalados.

$F_{A_{real}}$	F_{A_e}	Flujo de alimentaciónkg/s	Proporción Fb y Fa	$F_{B_{real}}$	F_{B_e}
2,25	0,54	0,020	27,25	6,00	1,46
2,15	0,49	0,018	26,90	5,85	1,32
2,06	0,44	0,016	26,97	5,58	1,18
1,97	0,39	0,014	27,05	5,30	1,05
$\mathbf{1,87}$	$\mathbf{0,35}$	0,013	$\mathbf{27,13}$	$\mathbf{5,03}$	$\mathbf{0,94}$
1,78	0,31	0,011	27,21	4,76	0,83
1,69	0,28	0,010	27,30	4,49	0,74
1,59	0,25	0,009	27,27	4,24	0,67
1,50	0,22	0,008	27,17	4,02	0,60
1,40	0,20	0,007	27,06	3,79	0,54
1,31	0,18	0,007	26,95	3,55	0,48
1,22	0,16	0,006	26,82	3,32	0,44
1,12	0,14	0,005	26,68	3,09	0,39
1,03	0,13	0,005	25,56	3,00	0,37

El mismo proceso se realizó para la temperatura obteniendo los resultados de la Tabla 9.

Tabla 9: Resultados obtenidos para el escalamiento de la temperatura.

Temperatura proceso	Temperatura escalada
363,49	20,00
363,39	19,56
361,71	19,13
360,76	18,72
$\mathbf{360,12}$	18,31
359,44	17,91
358,73	17,51
357,99	17,13
357,20	16,76
356,37	16,39
355,49	16,03
354,55	15,68
353,55	15,34
352,60	15,00

Con estos datos y los del proceso se realizó la simulación del reactor Otto Williams, en donde se busca optimizar la diferencia cuadrática entre los resultados obtenidos con los datos

escalados y los del proceso real variando los parámetros de la reacción, teniendo el problema de optimización de la Ecuación (29).

$$\min_{k_1,k_2,k_3,EA_1,EA_2,EA_3} \left(x_{i_{real}} - x_{i_{escalado}}\right)^2 \tag{29}$$

La carga de optimizar utilizando seis variables de decisión fue difícil de determinar, dado que el resultado depende altamente de los iteradores iniciales, obteniendo inicialmente grandes diferencias. Finalmente, luego de utilizar distintos iteradores se obtiene una evaluación de la función objetivo cercana a los $0{,}0018$ siendo este el mejor resultado alcanzado.
Los parámetros obtenidos para el proceso real escalado se encuentran en la ecuación (30)

$$\begin{aligned} k_1 &= 1{,}66 \cdot 10^5 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ k_2 &= 7{,}22 \cdot 10^7 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ k_3 &= 2{,}68 \cdot 10^{11} \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ EA_1 &= -3719 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ EA_2 &= -5021 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ EA_3 &= -7253 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \end{aligned} \tag{30}$$

El mismo proceso se realizó para el modelo con incertidumbre simulando los resultados en el reactor Otto Williams modificado, dando una evaluación de la función objetivo de $0{,}026$ y obteniendo los parámetros presentados en la ecuación (31).

$$\begin{aligned} k_{1m} &= 1{,}034 \cdot 10^7 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ k_{2m} &= 1{,}63 \cdot 10^{12} \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ EA_{1m} &= -4822 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \\ EA_{2m} &= -8357 \left[\frac{kmol}{L \cdot s}\right] \end{aligned} \tag{31}$$

Dado que la evaluación de las funciones objetivos no son 0, existen errores con respecto a las variables de trabajo que se utilizaron, en donde el resultado de los rangos de las variables

para el proceso se encuentra entre $[0{,}34, 1{,}56]\ kg/s$ para F_B siendo bastante cercano a lo que se requería y de $[5, 30]°C$ para la temperatura del proceso. Mientras que el modelo con incertidumbre tiene rangos de $[0{,}7, 1{,}45]$ y $[-5, 11{,}59]$ para F_B y T_R, respectivamente.
Si bien los valores no son exactamente los mismos, estos podrían ser ajustado entregando límites a las variables de decisión, en donde para F_B no existe ningún problema, pero para la temperatura podría definirse límites de $[5{,}20]$ o $[10{,}20]$ de manera de alcanzar estos estados en el laboratorio.

Al realizar pruebas simples de RTO utilizando el algoritmo de Pattern Search se obtiene el resultado deseado en donde el modelo tiende al proceso, lo que se muestra en la Figura 55.

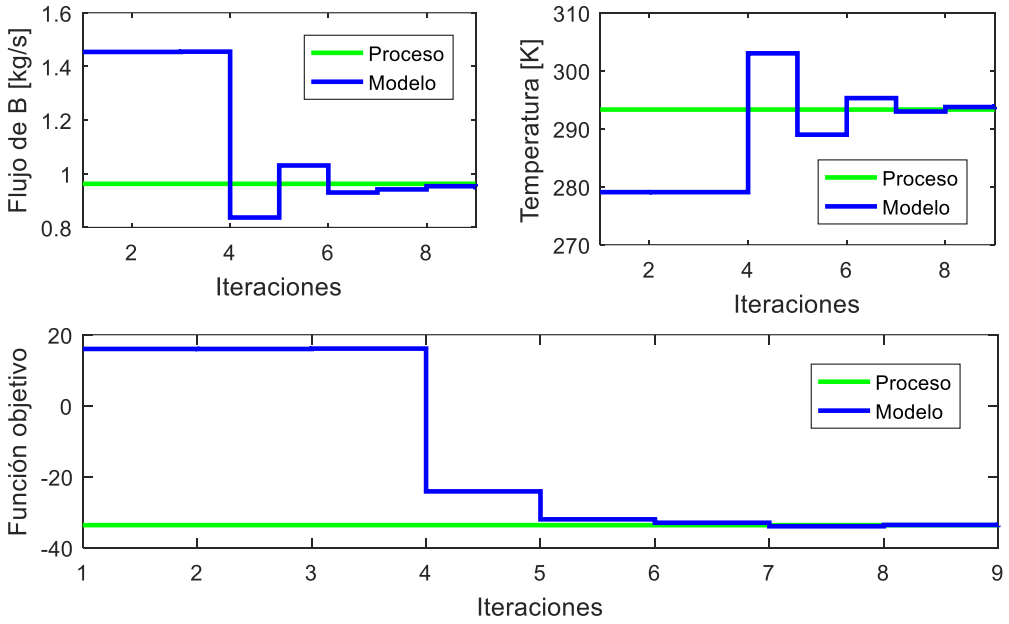

Figura 55: Resultados obtenidos al utilizar los parámetros escalados en una RTO sin perturbaciones.

Por lo que este escalamiento podría ser utilizado en un laboratorio para comprobar el comportamiento de este tipo de sistemas, de manera de observar lo que ocurre en los estados estacionarios, ya que esto no es posible en la simulación del proceso.

6. Conclusiones

El sistema de Otto-Williams pone a prueba los sistemas de RTO, ya que cuenta con incertidumbre estructural. En este trabajo se agregó el efecto de la incertidumbre de proceso a la RTO, implementando perturbaciones que continuamente modifican la ubicación del óptimo del proceso. La implementación de las perturbaciones fue realizada a distintas frecuencias de cambio, siendo incluidas de dos maneras: perturbaciones deterministas tipo rampa, y otra perturbación estocástica mediante la simulación de un modelo ARIMA. Estos dos tipos de perturbaciones, más las distintas frecuencias de cambio a las que fueron implementadas permite evaluar el comportamiento de los sistemas RTO basados en gradientes y en optimizaciones libres de derivadas. Por lo tanto, el sistema de Otto-Williams se presenta como un adecuado proceso base para incluir perturbaciones a la RTO.

El método basado en la estimación de gradientes presenta problemas en la detección de la trayectoria óptima del proceso, cuando existen perturbaciones que modifican las variables de salida del proceso. Esto, debido a que los métodos de estimación de gradientes experimentales solo utilizan información anterior de las variables de decisión para el cálculo de los gradientes, lo que no permite aislar el efecto que tienen las variables de decisión sobre los cambios en las de salida y, por lo tanto, estimar de manera errónea los gradientes experimentales. Esto se observó con los resultados erróneos obtenidos cuando la frecuencia de cambio de las perturbaciones era menor a 3 ciclos. Lo anterior implica que cuando disminuye la frecuencia de cambio en las perturbaciones, el error en la estimación de los gradientes experimentales disminuye, lo que se observó en simulación al mejorar la capacidad de detección de la trayectoria óptima del proceso. El algoritmo de Nelder Mead para todos los casos queda estancando en el mismo punto. Esto se debe a que, al momento de alcanzar el punto de estancamiento, las estrategias utilizadas por este algoritmo no son suficientes para alcanzar un punto que mejore la función objetivo, dando paso a la estrategia de encogimiento. En conclusión, para frecuencias de cambio rápidas de las perturbaciones, la estimación de los gradientes hace inviable la implementación de un método dual en el ejemplo en estudio, mientras que un aumento en la función objetivo óptima del proceso, como consecuencia de las perturbaciones, generaría estancamiento en el método de NMA con el algoritmo de Nelder Mead, no pudiendo converger a la trayectoria óptima del proceso.

La implementación de métodos de búsqueda directa tipo Pattern Search permiten identificar la trayectoria óptima del proceso, cuando este está sujeto a perturbaciones que modifican la ubicación del óptimo para el ejemplo en estudio. Los resultados muestran que, en la mayoría de los casos se alcanza el óptimo del proceso. Esto se debe a las estrategias que utilizan los algoritmos de Pattern Search para la búsqueda del óptimo, como favorecer la dirección en la que fue encontrado el iterador actual, o realizar el paso de sondeo, evitan caer en el estancamiento. Pese a los buenos resultados obtenidos, debido a las restricciones de las

composiciones, algunos de los puntos entregados son infactibles en el proceso ya que se infringen los límites. De esta manera, se concluye que para el ejemplo implementado, la metodología propuesta logra seguir la trayectoria óptima de un proceso, siguiendo un camino infactible producto de las restricciones.

Para la propuesta del sistema experimental se utilizaron los equipos e instrumentos que se encuentran en el Laboratorio de Optimización de la Universidad Técnica Federico Santa María, logrando escalar los parámetros relacionados con la reacción, de manera que los resultados tengan consistencia con las variables a utilizar. Por lo tanto, se concluye que esta metodología podría llevarse a cabo en el laboratorio para realizar pruebas con los sistemas de RTO.

7. Recomendaciones a trabajos futuros

Implementar una metodología de búsqueda que considere la posibilidad de un aumento de la función objetivo, como consecuencia de un cambio en variables no controladas, dado que en este caso se utilizaron algoritmos de optimización para sistemas estáticos.

Con el escalamiento realizado se puede llevar a cabo el experimento de la optimización en tiempo real para el reactor Otto-Williams a escala laboratorio de manera de contrastar los resultados.

Referencias

Audet, C., & Dennis, J. E. (2006). Mesh Adaptive Direct Search Algorithms for Constrained Optimization. *SIAM Journal on Optimization*, *17*(1), 188–217. https://doi.org/10.1137/040603371

Bamberger, W., & Isermann, R. (1978). Adaptive on-line steady-state optimization of slow dynamic processes. *Automatica*. https://doi.org/10.1016/0005-1098(78)90087-0

Bequette, B. W. (2003). *Process control : modeling, design, and simulation*. Prentice Hall PTR. Retrieved from https://www.safaribooksonline.com/library/view/process-control-modeling/0133536408/

Biegler, L. T. (2010). *Nonlinear Programming*. Society for Industrial and Applied Mathematics. https://doi.org/10.1137/1.9780898719383

Bordóns Alba, C. (2000). *Control Predictivo: metodología, tecnología y nuevas perspectivas*. Sevilla. Retrieved from https://control-ps2316-sept2009.wikispaces.com/file/view/CONTROL+PREDICTIVO.pdf

Brdys, M. A., & Tatjewski, P. (2005). *Iterative Algorithms for Multilayer Optimizing Control*. PUBLISHED BY IMPERIAL COLLEGE PRESS AND DISTRIBUTED BY WORLD SCIENTIFIC PUBLISHING CO. https://doi.org/10.1142/p372

Brdyś, M. A., & Tatjewski, P. (1994). An Algorithm for Steady-State Optimizing Dual Control of Uncertain Plants. *IFAC Proceedings Volumes*, *27*(11), 215–220. https://doi.org/10.1016/S1474-6670(17)47650-6

Chachuat, B., Srinivasan, B., & Bonvin, D. (2009). Adaptation strategies for real-time optimization. *Computers and Chemical Engineering*, *33*(10), 1557–1567. https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2009.04.014

Chaves, I. D. G., López, J. R. G., Zapata, J. L. G., Robayo, A. L., & Niño, G. R. (2016). Process Optimization in Chemical Engineering. In *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering* (pp. 343–369). Cham: Springer International Publishing. https://doi.org/10.1007/978-3-319-14812-0_7

de Arce, R., & Mahía, R. (n.d.). MODELOS ARIMA. Retrieved from http://www.uam.es/personal_pdi/economicas/rarce/pdf/Box-Jenkins.PDF

Forbes, J. F., & Marlin, T. E. (1994). Model Accuracy for Economic Optimizing Controllers: The Bias Update Case. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, *33*(8), 1919–1929. https://doi.org/10.1021/ie00032a006

Forbes, J. F., & Marlin, T. E. (1996). Design cost: a systematic approach to technology selection for model-based real-time optimization systems. *Computers & Chemical Engineering*, *20*(6–7), 717–734. https://doi.org/10.1016/0098-1354(95)00205-7

Kolda, T. G., Lewis, R. M., & Torczon, V. (2003). Optimization by Direct Search: New Perspectives on Some Classical and Modern Methods. *SIAM Review*, *45*(3), 385–482. https://doi.org/10.1137/S003614450242889

Marchetti, A., Chachuat, B., & Bonvin, D. (2009). Modifier-Adaptation Methodology for

Real-Time Optimization. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 6022–6033. https://doi.org/10.1021/ie801352x

Navia López, D. A. (2013). Handling Uncertainties in Process Optimization. Retrieved from http://uvadoc.uva.es/handle/10324/3008

Nelder, J. A., & Mead, R. (1965). A Simplex Method for Function Minimization. *The Computer Journal*, *7*(4), 308–313. https://doi.org/10.1093/comjnl/7.4.308

Rios, L. M., & Sahinidis, N. V. (2013). Derivative-free optimization: a review of algorithms and comparison of software implementations. *Journal of Global Optimization*, *56*(3), 1247–1293. https://doi.org/10.1007/s10898-012-9951-y

Roberts, P. D. (1979). An algorithm for steady-state system optimization and parameter estimation. *International Journal of Systems Science*. https://doi.org/10.1080/00207727908941614

Rodríguez-Blanco, T., Sarabia, D., Navia, D., & de Prada, C. (2017). Efficient Nested Modifier Adaptation for RTO using Lagrangian functions. *Computer Aided Chemical Engineering*, *40*, 1723–1728. https://doi.org/10.1016/B978-0-444-63965-3.50289-0

Tatjewski, P. (2008). Advanced control and on-line process optimization in multilayer structures. *Annual Reviews in Control*, *32*(1), 71–85. https://doi.org/10.1016/J.ARCONTROL.2008.03.003

Torczon Siam Optim, V. J. (1997). ON THE CONVERGENCE OF PATTERN SEARCH ALGORITHMS *, *7*(1), 1–25. Retrieved from https://pdfs.semanticscholar.org/9c0e/a0a1f1e9f3c4cfbaea19021726dca9ae576f.pdf

Williams, T. J., & Otto, R. E. (1960). A generalized chemical processing model for the investigation of computer control. *Transactions of the American Institute of Electrical Engineers, Part I: Communication and Electronics*, *79*(5), 458–473. https://doi.org/10.1109/TCE.1960.6367296

Zhang, Y., & Fraser Forbes, J. (2000). Extended design cost: a performance criterion for real-time optimization systems. *Computers & Chemical Engineering*, *24*(8), 1829–1841. https://doi.org/10.1016/S0098-1354(00)00561-5

Zhang, Y., Monder, D., & Fraser Forbes, J. (2002). Real-time optimization under parametric uncertainty: a probability constrained approach. *Journal of Process Control*, *12*(3), 373–389. https://doi.org/10.1016/S0959-1524(01)00047-6

Apéndice

Apéndice A

El modelo ARIMA tiene como significado Modelo Autorregresivo Integrado de Promedio Móvil (de Arce & Mahía, n.d.).
Se define un modelo autorregresivo si la variable en estudio en un periodo t puede ser explicada por los valores anteriores añadiendo un error, es decir puede ser expresada como una combinación lineal de sus valores pasados.
Mientras que un modelo de promedio móvil es aquel que la variable en estudio en un periodo t es determinada de acuerdo a un término independiente y una sucesión de errores de periodos anteriores, ponderados convenientemente.
Por último, la parte Integrada es utilizada cuando el modelo presenta cierta tendencia.

Caminos utilizados del modelo ARIMA.

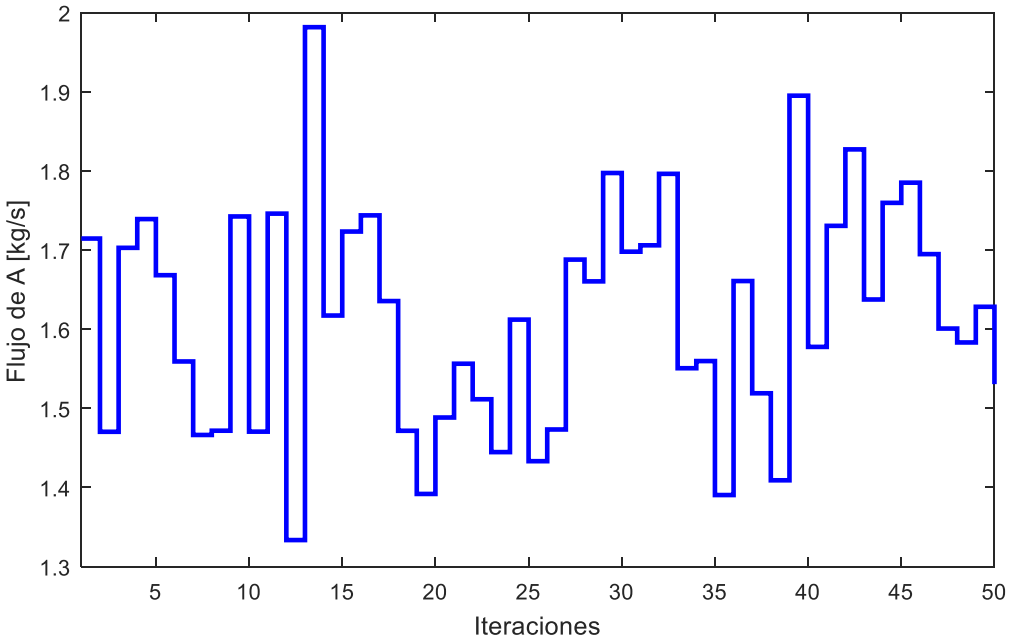

Figura 56: Camino 1 del modelo ARIMA.

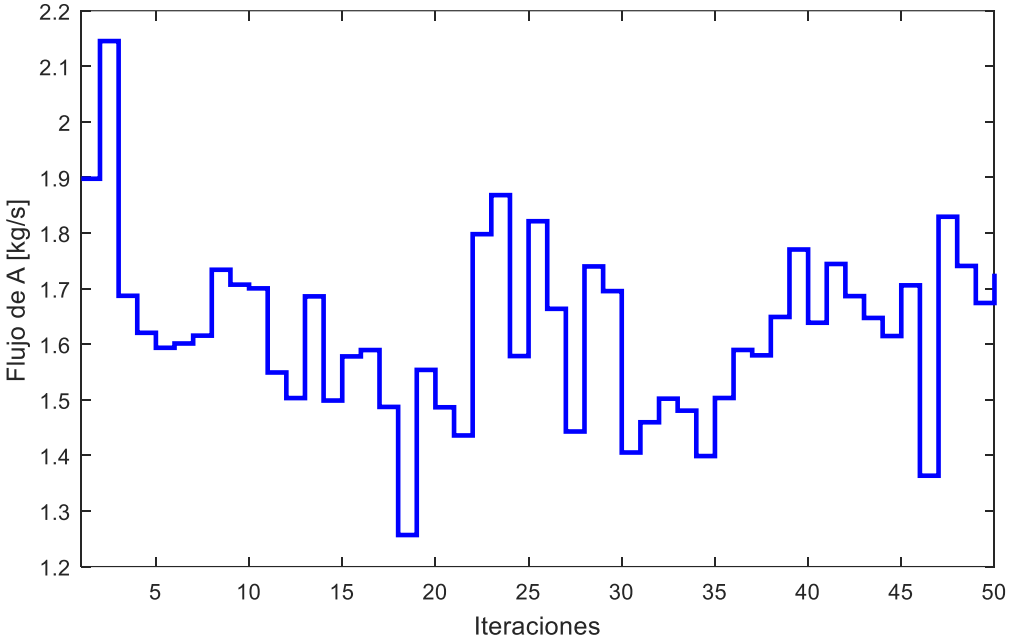

Figura 57: Camino 2 del modelo ARIMA.

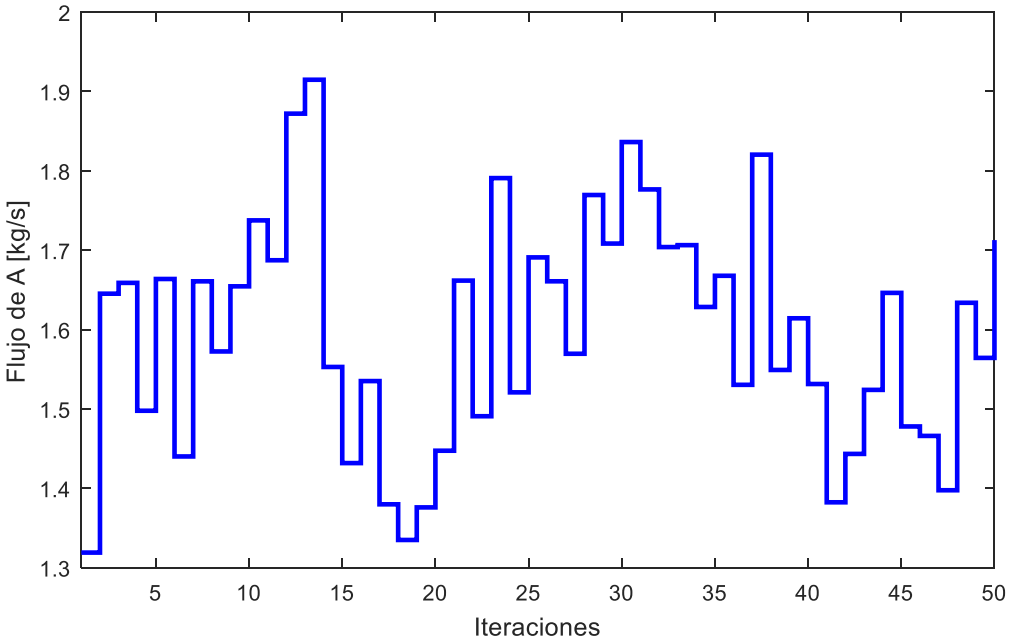

Figura 58: Camino 3 del modelo ARIMA.

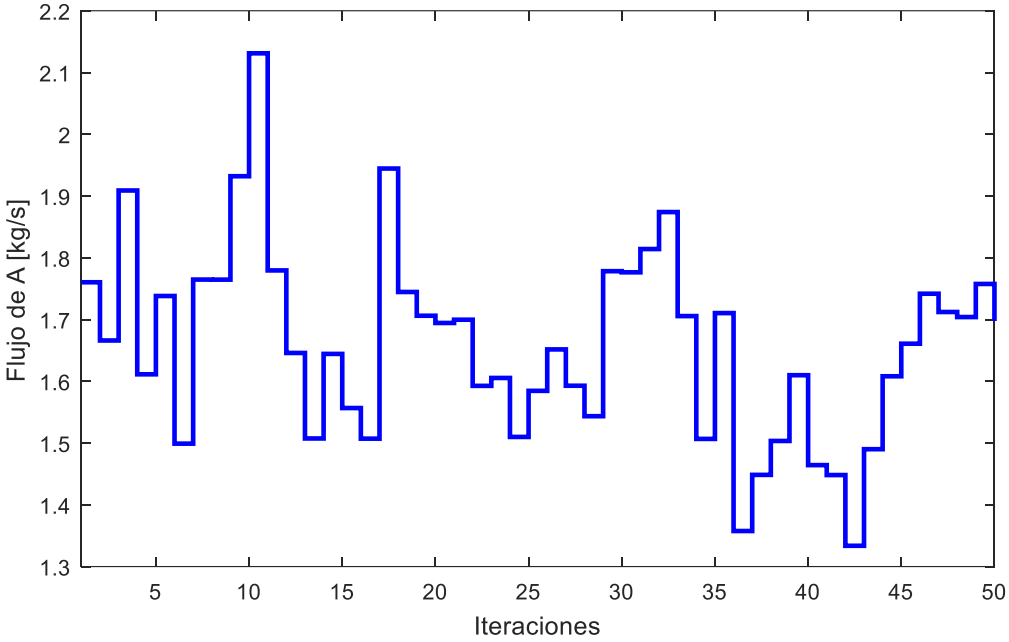

Figura 59: Camino 4 del modelo ARIMA.

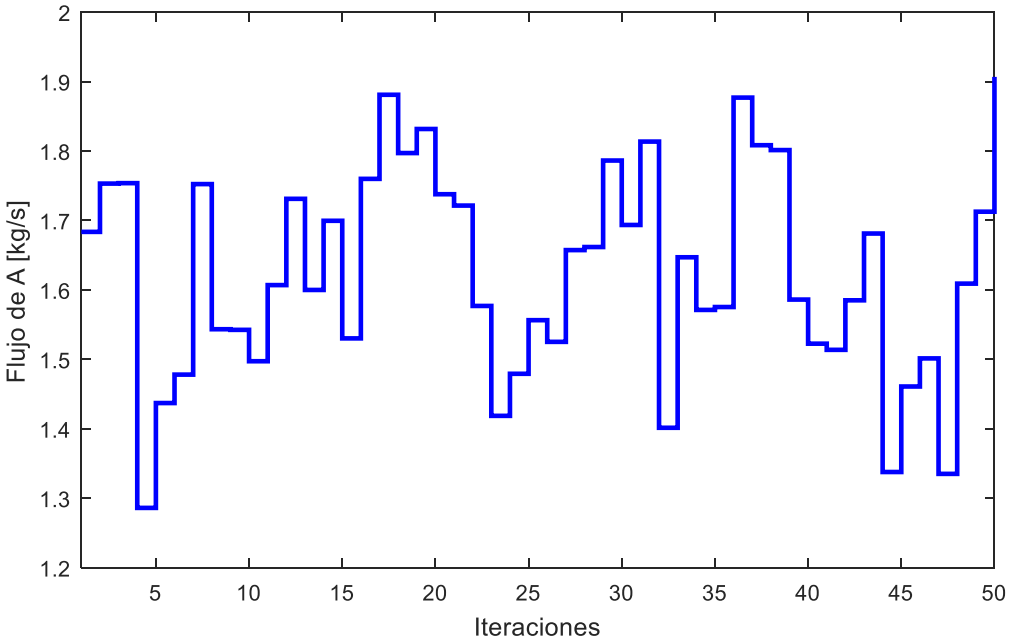

Figura 60: Camino 5 del modelo ARIMA.

Apéndice B

Las características de los computadores utilizados para llevar a cabo esta investigación son presentadas en la Tabla 10.

Tabla 10: Características del computador para realizar las simulaciones.

Procesador	Intel Core i7-7700
RAM	8 GB DDR4
Sistema Operativo	Windows 10
HDD	1 TB