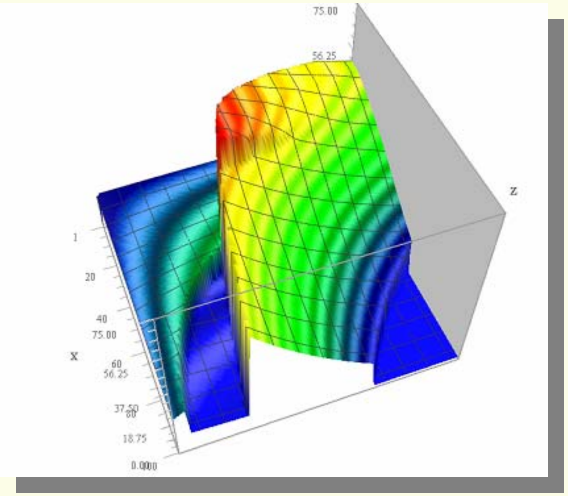
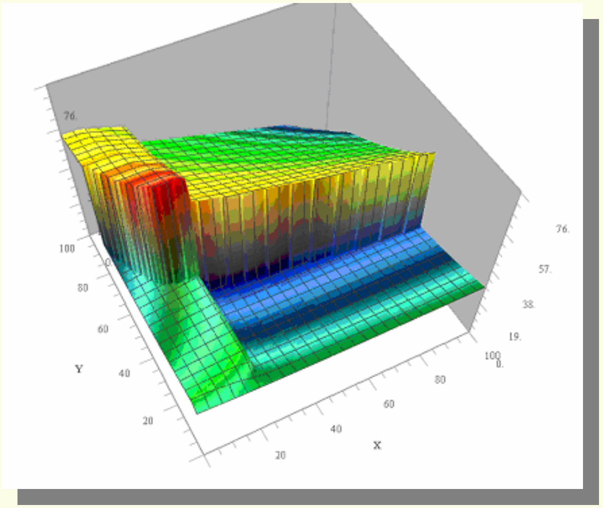
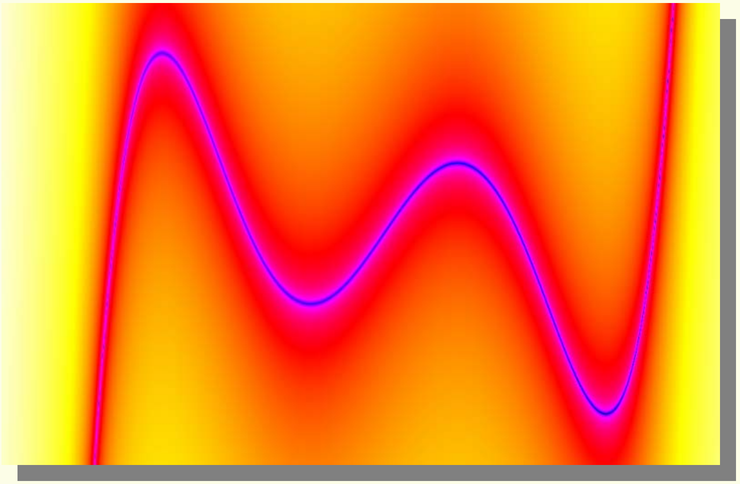
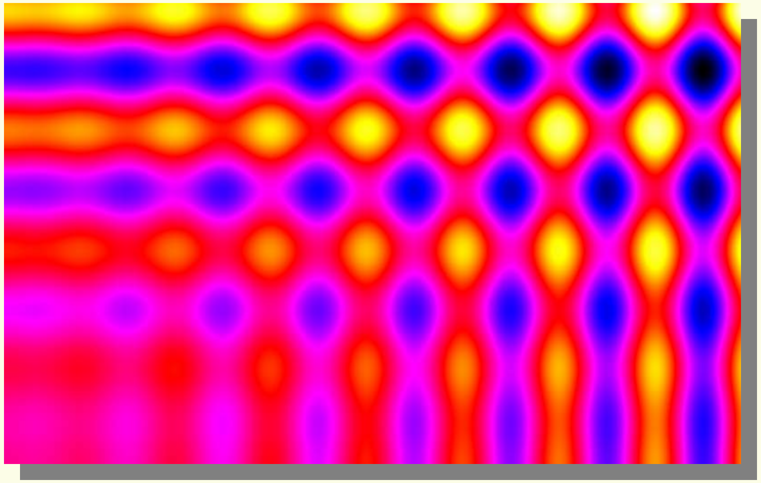
Introduzione all'Ottimizzazione









Ottimizzazione

- Esistono tre ambiti distinti per "*fare*" ottimizzazione
  - **Progettazione**
    - Progettazione di processi o di apparecchiature specifiche
    - Conceptual Design
    - Specifiche delle apparecchiature
    - Condizioni operative nominali
  - **Conduzione**
    - Conduzione di impianto
    - Controllo di processo
    - Utilizzo delle materie prime (blending, ...)
    - Minimizzazione del dispendio energetico (HEN, ...)
  - **Management**
    - Valutazione dei progetti
    - Selezione del prodotto ottimale
    - Decisione se investire in ricerca o in produzione
    - Realizzazione di nuovi impianti
    - Supervisione tra più realtà produttive
    - Filiera produttiva – Supply Chain Management

Posizione del problema

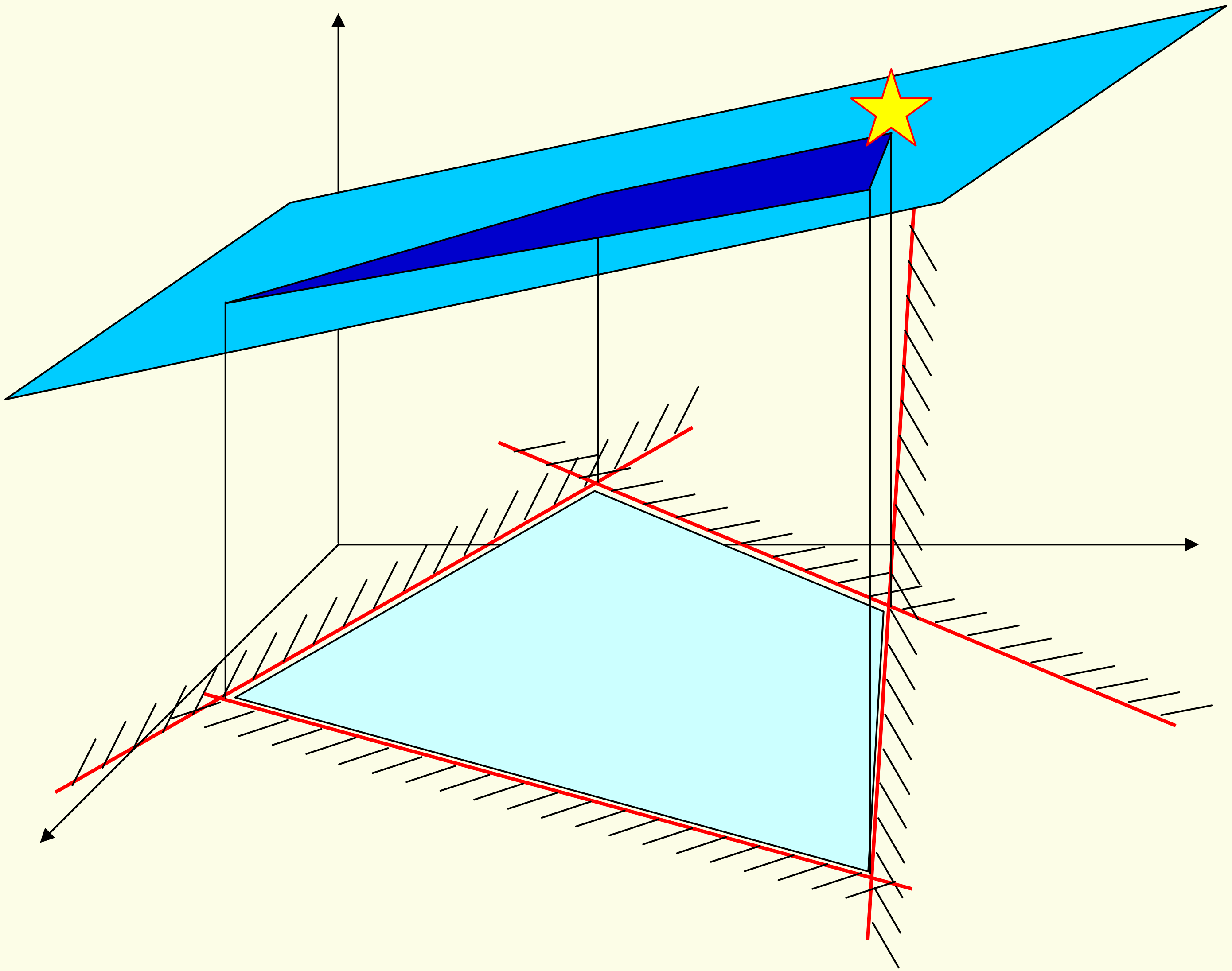
- Un problema di ottimizzazione è caratterizzato da:
  - Funzione obiettivo
  - Vincoli di uguaglianza (opzionali)
  - Vincoli di disuguaglianza (opzionali)
- I vincoli possono essere:
  - Lineari
  - Non lineari

  - Violabili
  - Inviolabili

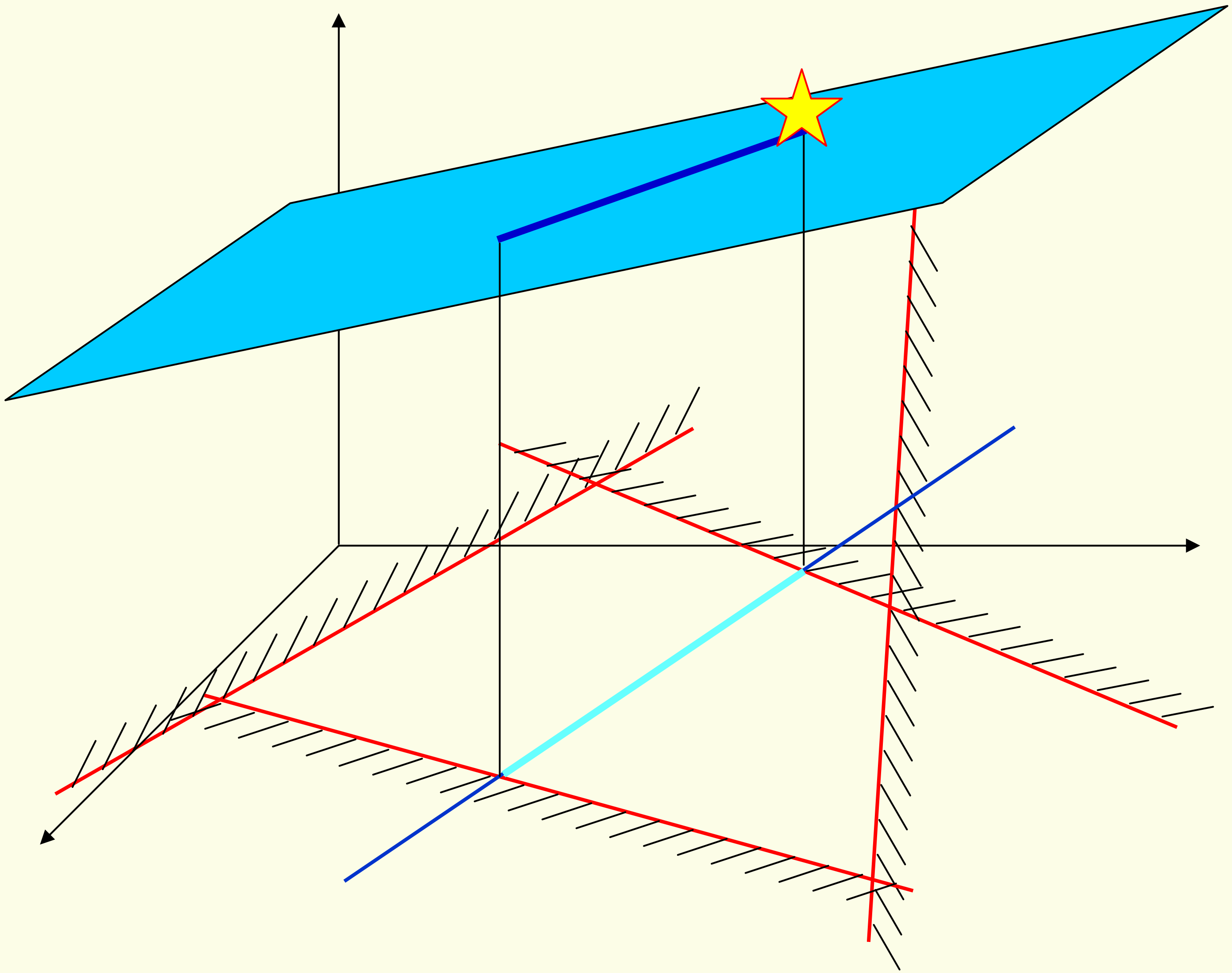
  - Veri e propri
  - Estremi inferiori e superiori sui gradi di libertà
- Le variabili di ottimizzazione vengono anche dette: *gradi di libertà* (gdl)
- Matematicamente si scrive:

$$\begin{cases} \underset{\mathbf{x}}{Min} & f(\mathbf{x}) \\ s.t. & h(\mathbf{x}) = \mathbf{0} \\ & g(\mathbf{x}) \geq \mathbf{0} \end{cases}$$

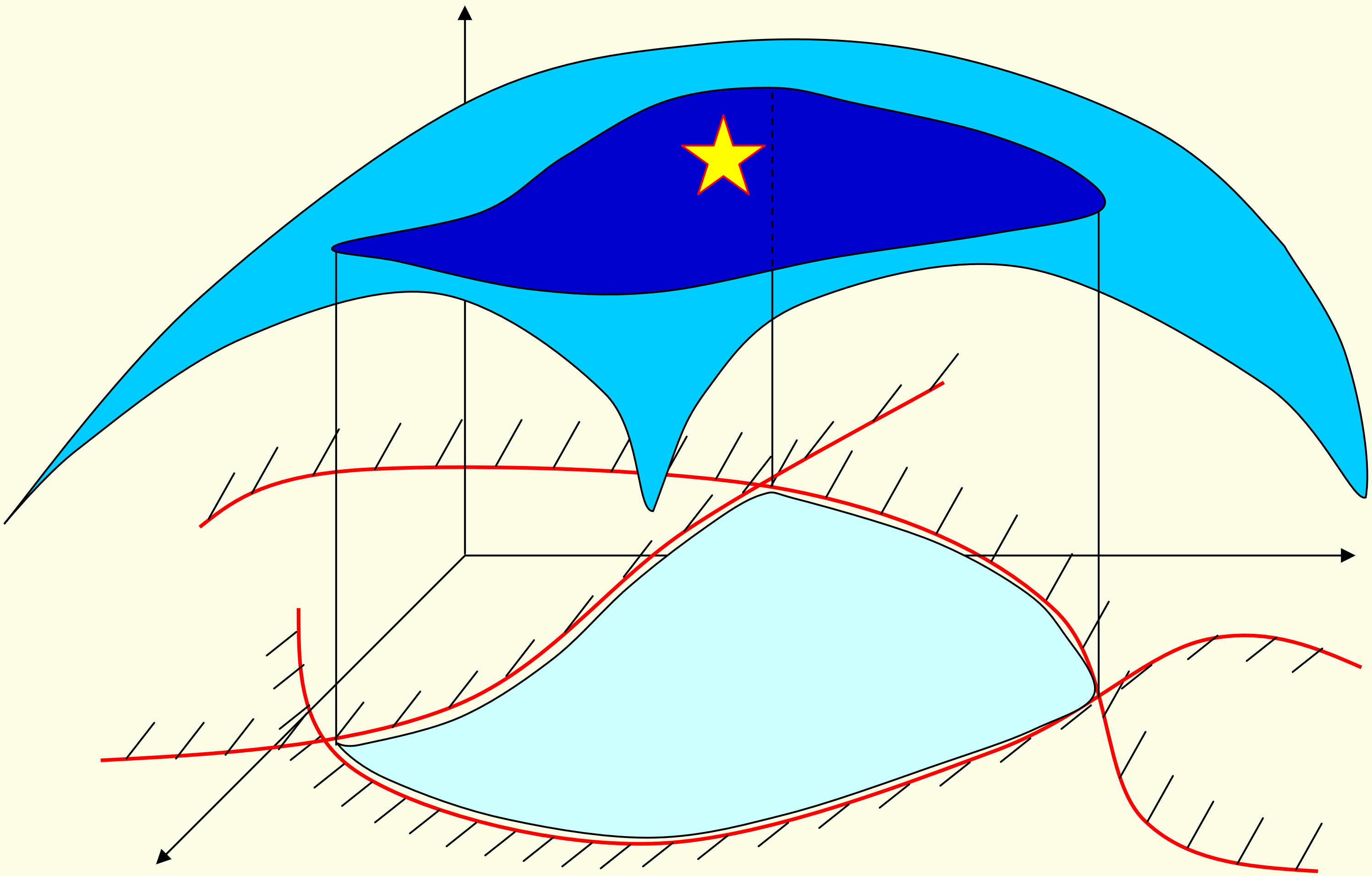
Funzione e Vincoli lineari



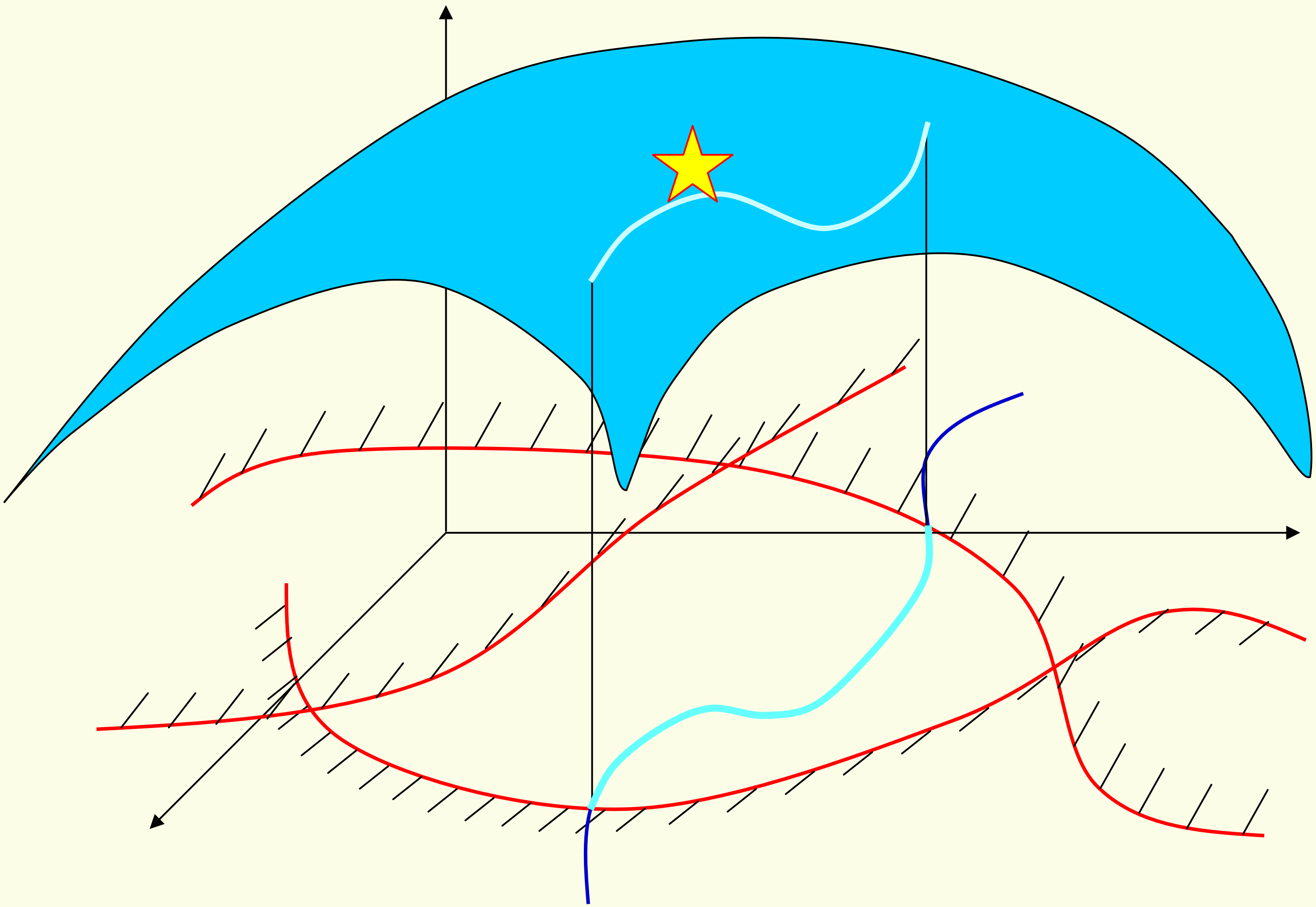
Funzione e Vincoli lineari



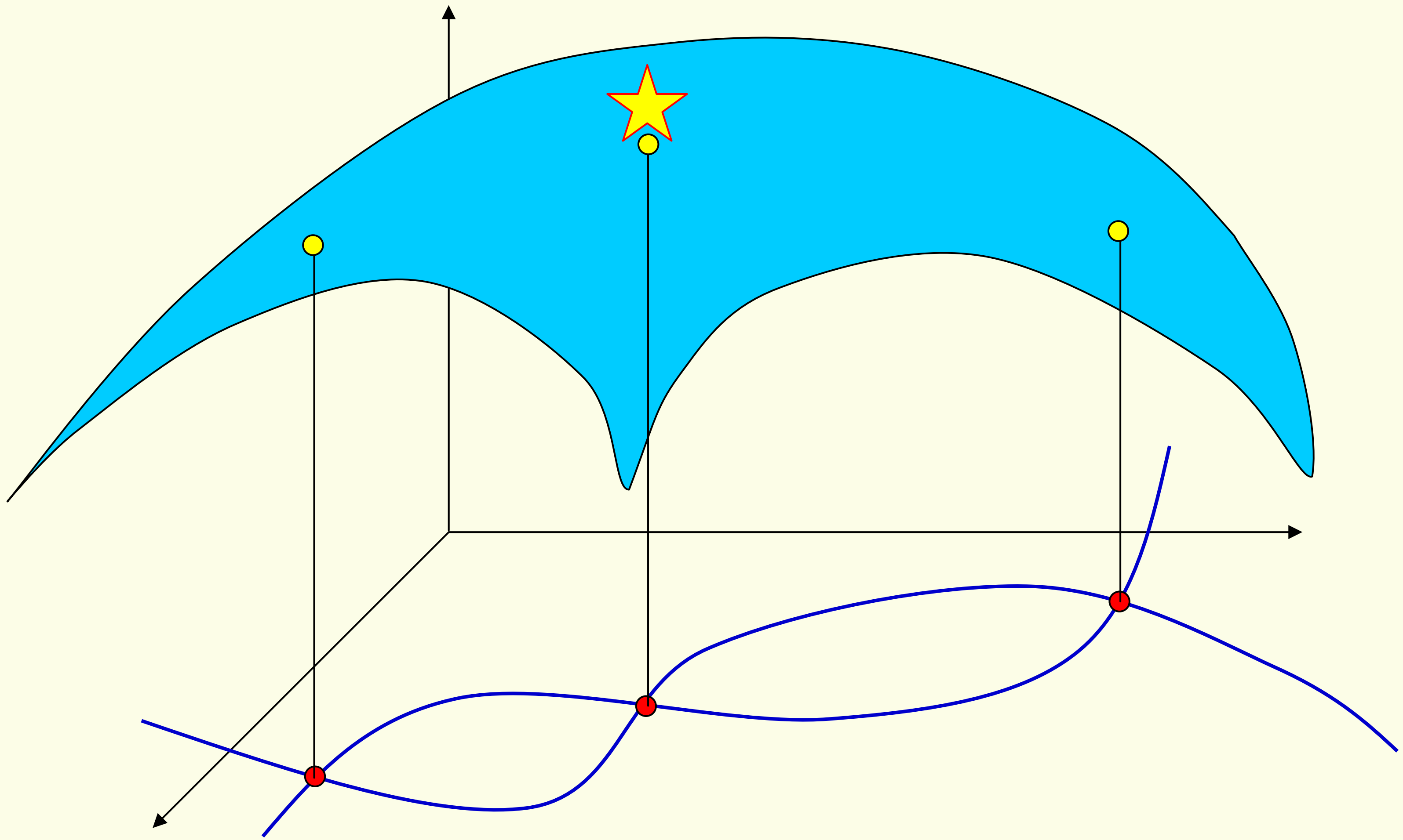
Funzione e Vincoli non lineari



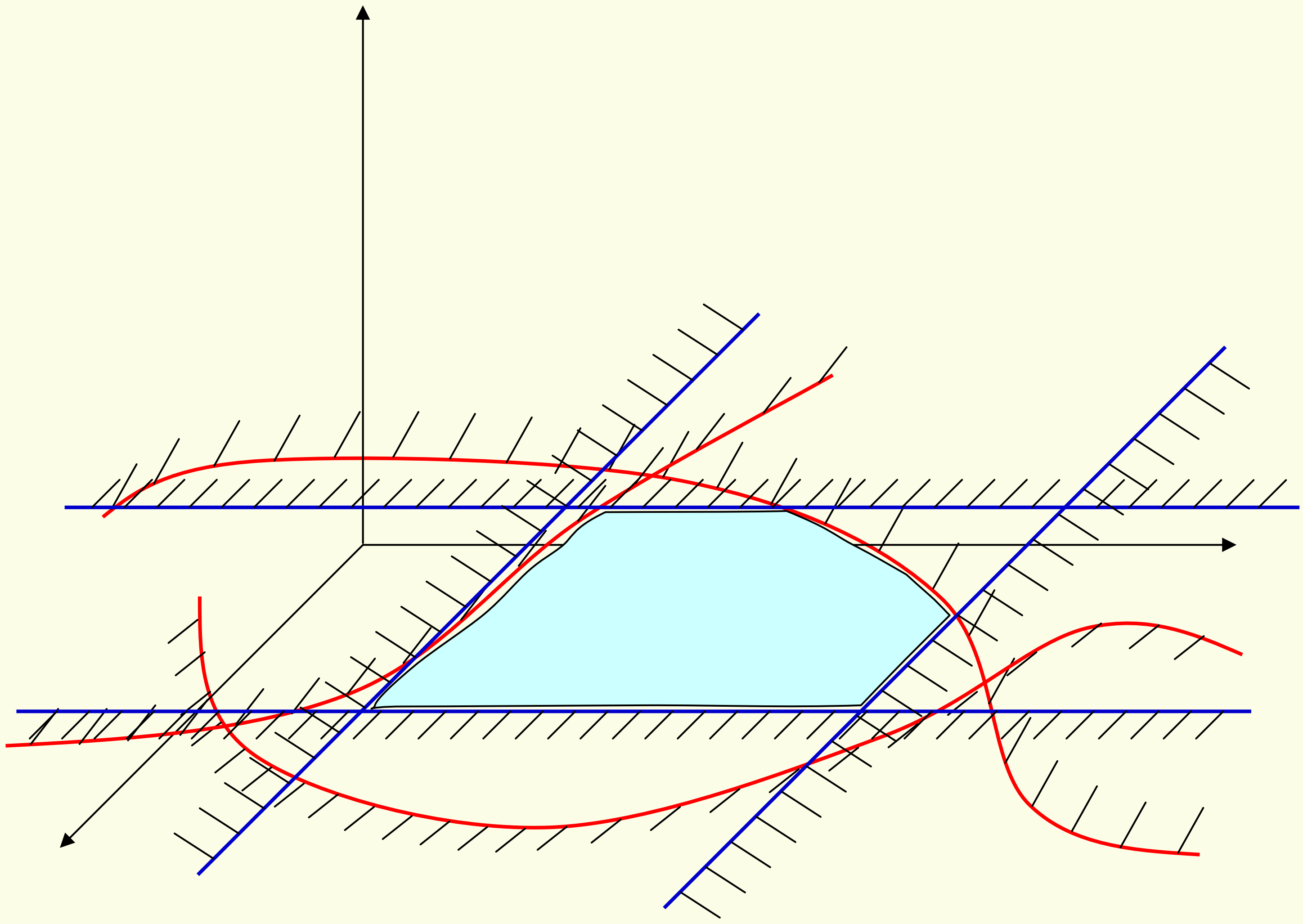
Funzione e Vincoli non lineari



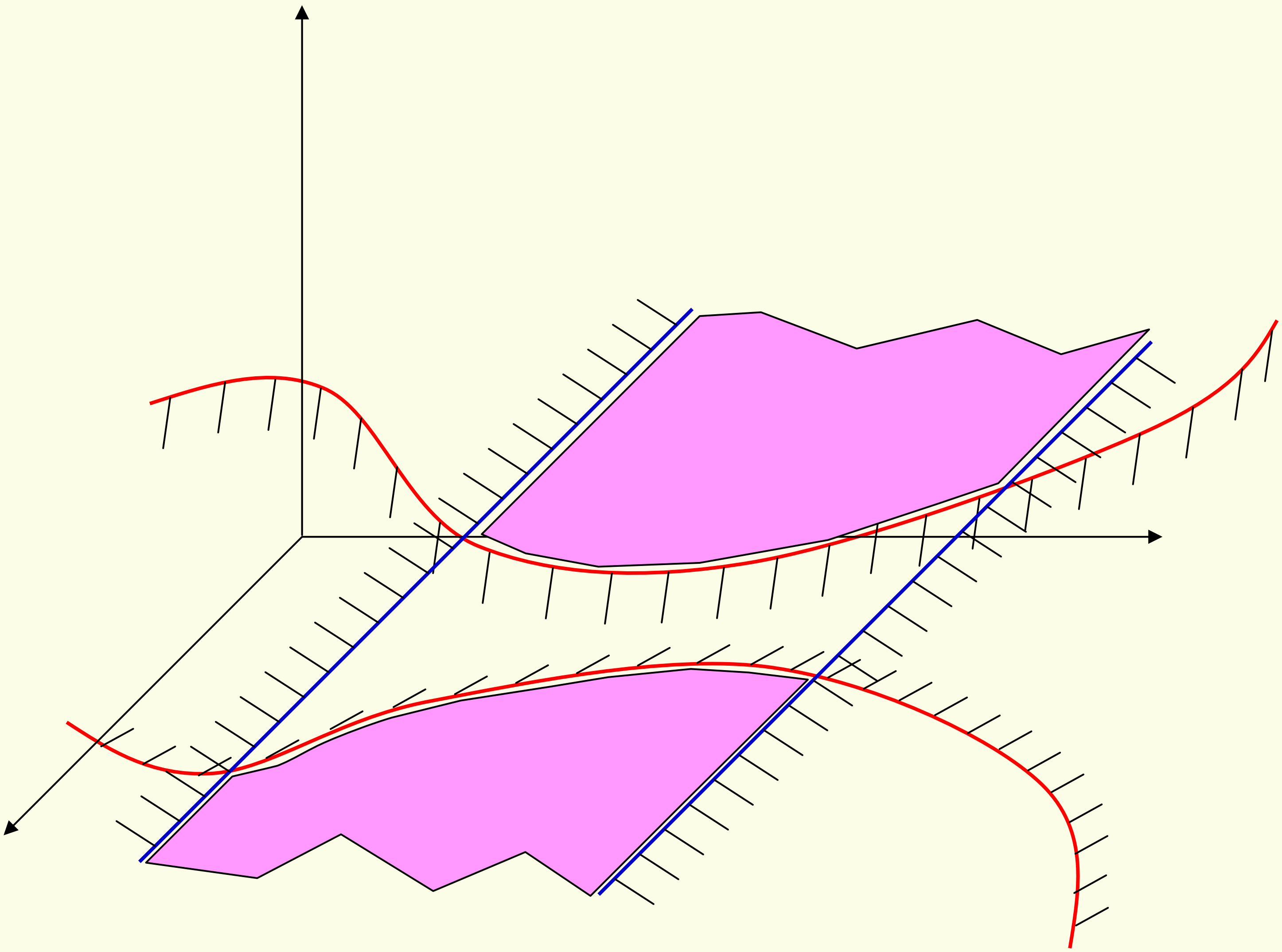
Funzione e Vincoli non lineari



Vincoli non lineari e lower/upper bounds



Infeasible region



Vincoli

- I vincoli di uguaglianza e disuguaglianza possono comprendere il modello del processo da ottimizzare nonché i limiti di legge e processistici ed i limiti sui gradi di libertà.
- I vincoli individuano la regione di *"fattibilità"* all'interno della quale muovere i gradi di libertà nella ricerca dell'ottimo.
- Occorre che i vincoli siano consistenti al fine di definire una regione *"fattibile"* di ricerca.
- Non c'è limite teorico al numero di vincoli di disuguaglianza.

Vincoli

- Se il numero di vincoli di uguaglianza è uguale al numero di *gdl* allora le soluzioni di tale problema (se esistono) individuano l'insieme di punti rispetto cui valutare la funzione obiettivo. In tal caso si seleziona alla fine il punto che produce il valore migliore.
- Se si hanno più variabili che vincoli di uguaglianza allora il problema è SOTTODETERMINATO ed occorre procedere alla ricerca effettiva dell'ottimo della funzione obiettivo.
- Se si hanno più vincoli di uguaglianza che gdl il problema è SOVRADETERMINATO e NON esiste una soluzione che soddisfi in modo preciso tutti i vincoli. Questo è un tipico esempio di Riconciliazione in senso classico.

Caratteristiche dei problemi di Ottimizzazione

- Se la funzione obiettivo ed i vincoli sono lineari il problema è detto LINEARE
- Se la funzione obiettivo e/o i vincoli sono NON lineari rispetto ai gradi di libertà il problema è detto NON lineare
- Un problema di ottimizzazione NON lineare è più complicato di uno lineare
- Un problema lineare ha una sola soluzione se fattibile
- Un problema NON lineare può avere più punti di ottimo locale

Caratteristiche dei problemi di Ottimizzazione

- La ricerca dell'ottimo assoluto può essere molto complicata. Spesso non ha successo
- Raramente si è interessati all'ottimo assoluto soprattutto qualora si stia operando un'ottimizzazione di processo in linea
- La ricerca del punto di ottimo è condizionata pesantemente dalle eventuali discontinuità della funzione obiettivo e/o dei vincoli
- Se esiste interazione tra i gdl, la ricerca dell'ottimo è fortemente condizionata. Per esempio: $f_{obj}\left(x_1, x_2\right) = 3x_1^3\sqrt{x_2}$

Struttura della funzione obiettivo

- Tipicamente la funzione obiettivo è di tipo economica: $\sum$(ricavi – costi), ma può basarsi anche su criteri di minimizzazione degli inquinanti o sulla massimizzazione di conversioni, rendimenti, produzioni energetiche
- Se nell'ambito del processo ci si riferisce soltanto a costi operativi e si tralasciano i costi di investimento allora si parla di problemi di SUPERVISIONE, CONTROLLO in SUPERVISIONE
- È anche possibile dover considerare contemporaneamente costi di esercizio e di investimento. È questo il campo del *"Conceptual Design"*. Occorre individuare una base comune di riferimento rispetto cui effettuare il confronto. Infatti i costi di investimento vengono misurati in [€] mentre quelli di esercizio in [€/y].

Metodi risolutivi

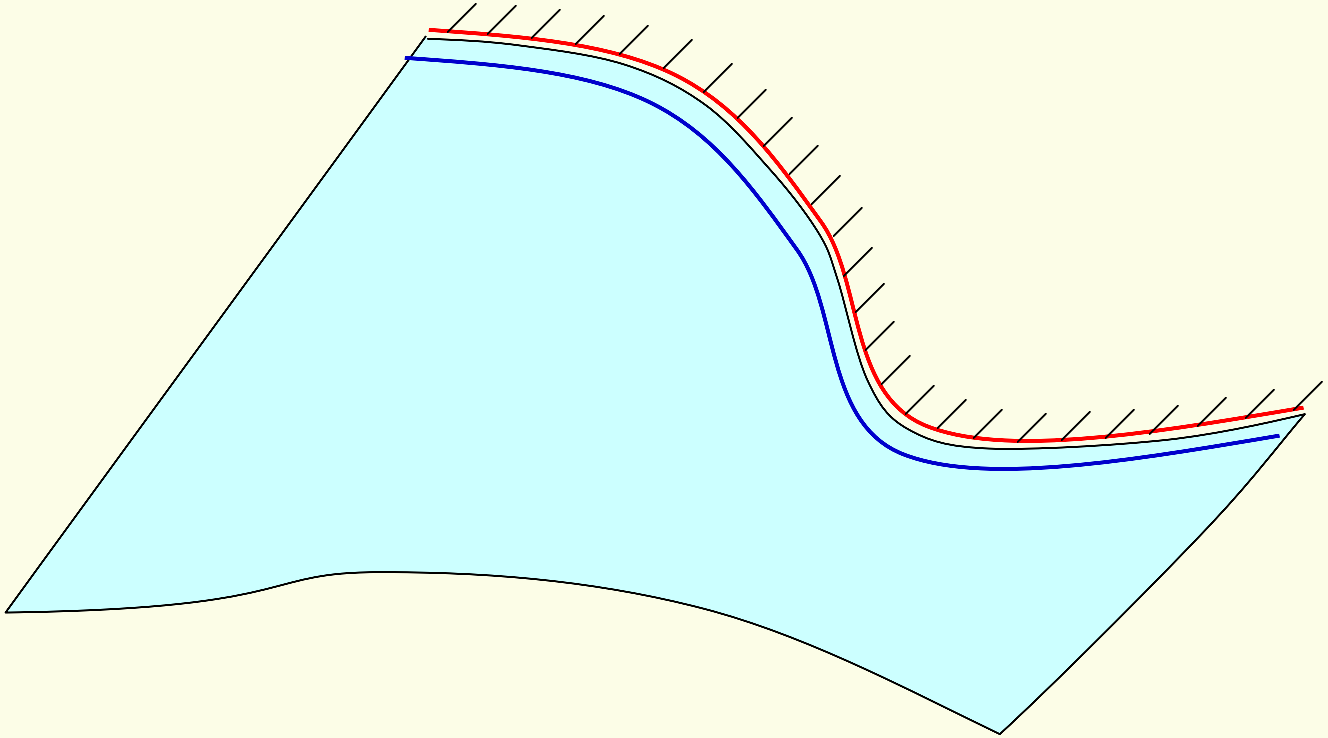
- Il problema: $Max \;\; f(\mathbf{x})$ è sempre riconducibile a: $Min \;\; f(\mathbf{x})$ cambiando di segno alla funzione obiettivo
- Il problema di ottimizzazione può essere posto secondo due approcci distinti:
  - Equation oriented: cioè basato su un approccio globale che descrive il modello del processo tramite un unico sistema di equazioni (in generale algebrico-differenziali) che viene risolto insieme al problema considerandolo come una serie di vincoli
  - Black-box o Sequenziale modulare: il modello del processo viene interrogato dalla routine di ottimizzazione e fornisce i dati necessari alla valutazione della funzione obiettivo e degli eventuali vincoli processistici e/o di legge

- Il modello di simulazione può poi lavorare in termini di FEASIBLE PATH o INFEASIBLE PATH a seconda che le equazioni relative alle correnti di riciclo siano risolte ad ogni chiamata o che la consistenza dei ricicli sia introdotta come vincolo lineare nella struttura del problema di ottimizzazione

Ottimizzazione multidimensionale vincolata

- **Metodo dei moltiplicatori di Lagrange**

  I vincoli di disuguaglianza, $g(\mathbf{x}) \geq 0$ qualora violati, vengono riscritti come vincoli di uguaglianza tramite l'introduzione di *slack variables*: $g(\mathbf{x}) - \sigma^2 = 0$



Ottimizzazione multidimensionale vincolata

- **Metodo dei moltiplicatori di Lagrange**

La funzione obiettivo viene riformulata per contenere sia i vincoli di uguaglianza che quelli di disuguaglianza:

$$L(\mathbf{x},\boldsymbol{\omega},\boldsymbol{\sigma}) = f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{NVU} \omega_i h_i(\mathbf{x}) + \sum_{i=NVU+1}^{NVTOT} \omega_i \left[g_i(\mathbf{x}) - \sigma_i^2 \right]$$

vengono definite delle condizioni necessarie e sufficienti (Karush–Kuhn–Tucker, KKT) per individuare il punto di ottimo che soddisfi contemporaneamente i vincoli imposti.

È facile vedere come la dimensionalità del problema aumenti.

Ottimizzazione multidimensionale vincolata

- **Metodo della Funzione di Penalizzazione**

  Si modifica la funzione obiettivo sommandole dei termini di penalizzazione che quantificano la violazione dei vincoli di uguaglianza o disuguaglianza:

$$Min\left[f(\mathbf{x}) + \mu h^2(\mathbf{x}) + \eta \left| \min\{0, g(\mathbf{x})\} \right| \right]$$

Più in generale: $$Min\left[f(\mathbf{x}) + \sum_{i=1}^{NVU} \phi\left(h_i(\mathbf{x})\right) + \sum_{i=NVU+1}^{NVTOT} \varphi\left(g_i(\mathbf{x})\right) \right]$$

$$\phi(y) = y^{2n} \qquad \varphi(y) = \left[\min(0, y)\right]^{2n}$$

Ottimizzazione multidimensionale vincolata

- **Metodo SQP (<u>S</u>uccessive <u>Q</u>uadratic <u>P</u>rogramming)**

  La funzione obiettivo f(**x**) viene approssimata iterativamente tramite una quadrica, mentre i vincoli vengono linearizzati ed introdotti in una funzione obiettivo risultante. In formule abbiamo:

$$\begin{cases} Min \quad f(\mathbf{x}) = Min \quad \mathbf{c}^T\mathbf{x} + \frac{1}{2}\mathbf{x}^T\mathbf{B}\mathbf{x} \\ s.t. \qquad \qquad \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \end{cases}$$

  la ricerca del punto di ottimo viene effettuata in una direzione *s* (individuata dal vettore **x**) rispetto cui la funzione obiettivo ed i vincoli sono stati riformulati.

  La matrice **B** indicata nelle formule è un'approssimazione della matrice Hessiana **H** e in genere viene calcolata tramite le formule BFGS (Broyden, Fletcher, Goldfarb, Shanno).

Bibliografia

- Bartels R. H., N. Mahdabi-Amiri, “On generating test problems for nonlinear programming algorithms”, SIAM J. Sci. Stat. Comput., 7, 769, (1986)
- **Edgar T. F., D. M. Himmelblau, “Optimization of Chemical Processes”, McGraw Hill, Singapore, (1989)**
- Fletcher R., “Practical methods of optimization”, John Wiley, New York, (1981)
- Gill P.E., W. Murray W., M.H. Wright, “Practical Optimization”, Academic press, London, (1981)
- Luenberger D.G., “Linear and Nonlinear programming”, Addison Wesley, Amsterdam, (1984)
- Nelder J.A., R. Mead, “A Simplex method for function minimization”, Comp. J., 7, 308, (1965)
- Ostrovsky G.M., M.C. Ostrovsky, T.A. Berezhinsky, “Optimization of Chemical Plants with Recycles”, Comp. Chem. Eng., 12, 289, (1988)
- Palacios Gomez F., L. Lasdon, M. Engquist, “Nonlinear Optimization by Successive Linear Programming”, Management Science, 28, 1106, (1982)
- Peters M.S., K.D. Timmerhaus, E. West, “Plant Design and Economics for Chemical Engineers, McGraw Hill, New York, (2002)

Bibliografia

- Rangaiah G.P., "Studies in Constrained Optimization of Chemical Process Problems", Comp. Chem. Eng., 9,395, (1985)
- Reklaitis G. V., A. Ravindran, K.M. Ragsell, "Engineering Optimization", John Wiley, New York, (1983)
- Stadtherr M.A., H.S. Chen, "Numerical Techniques for Process Optimization by Successive Quadratic Programming", III Int. Conf. on Computers and Chemical Eng., (1993)
- Thompson, G. L., S. P. Sethi, "Optimal Control Theory", Martinus Nijhoff Publishing, Boston, (1994)