

PROGRAMA DE CURSO

MODELAMIENTO Y OPTIMIZACIÓN PARA INGENIERÍA DE PROCESOS

A. Antecedentes generales del curso:

Departamento	Ingeniería Química Biotecnología y Materiales					
Nombre del curso	Modelamiento y Optimización para Ingeniería de procesos	Código	IQ3111	Créditos	6	
Nombre del curso en inglés	<i>Modeling and optimization for chemical engineering and biotechnology</i>					
Horas semanales	Docencia	3	Auxiliares	1,5	Trabajo personal	5,5
Carácter del curso	Obligatorio	X		Electivo		
Requisitos	IQ3311: Análisis de procesos					

B. Propósito del curso

El curso tiene como propósito que los y las estudiantes identifiquen problemas de optimización en la ingeniería de procesos y que construyan modelos que permitan formalizar la toma de decisiones en ámbitos estratégicos (ej. estructura de un proceso), tácticos (ej. sustitución de equipos o proveedores) y operativos de un proceso (ej. condiciones de operación). Para resolver dichos problemas, los y las estudiantes utilizan herramientas de modelación y algoritmos computacionales diseñados para obtener soluciones de problemas de optimización, que permiten proponer mejoras a procesos químicos y biotecnológicos.

El curso tributa a las siguientes competencias específicas (CE) y genéricas (CG):

CE2: Modelar y simular procesos industriales, aplicando herramientas de las ciencias, a fin de analizar la prefactibilidad técnica de los procesos.

CE5: Planificar y gestionar la operación y producción de procesos industriales en distintas escalas de tiempo, considerando aspectos técnicos, restricciones operacionales tales como disponibilidad de materias primas, recursos humanos, horizontes de producción, energía, entre otros.

CE6: Optimizar y adaptar la operación de procesos industriales frente a nuevos escenarios productivos, considerando modificación de materias primas, normativas, y aspectos de sustentabilidad de procesos.

CG1: Comunicación académica y profesional

Comunicar en español de forma estratégica, clara y eficaz, tanto en modalidad oral como escrita, puntos de vista, propuestas de proyectos y resultados de investigación fundamentados, en situaciones de comunicación compleja, en ambientes sociales, académicos y profesionales.

CG6: Innovación

Concebir ideas viables y novedosas que generen valor para resolver necesidades latentes, materializadas en productos, servicios o en mejoras a procesos dentro de un sistema u organización, considerando el contexto sociocultural y económico y los beneficios para el usuario.

C. Resultados de aprendizaje:

Competencias específicas	Resultados de aprendizaje
CE2, CE5, CE6	RA1: Analiza y resuelve problemas de optimización relacionados con el diseño de procesos o mejoras a la eficiencia en la gestión y operación, considerando variables y restricciones a las cuales están sujetos dichos problemas.
	RA2: Modela, a través de una formulación matemática, problemas de optimización lineales y no lineales considerando restricciones, variables, lista de conjuntos, entre otros, para proponer posibles mejoras a procesos químicos y biotecnológicos o a sus condiciones de operación.
CE6	RA3: Selecciona algoritmos de optimización según el tipo de problema y formulación matemática, considerando la pertinencia de dicha elección en base a su implementación y solución computacional.
CE5, CE6	RA4: Diseña propuestas de solución a problemas de optimización para un proceso o condiciones de operación, considerando el planteamiento de supuestos, una formulación matemática, su resolución e implementación computacional, así como el análisis de dicha solución.
Competencias genéricas	Resultados de aprendizaje
CG1	RA5: Comunica, en forma oral o escrita, sobre el proceso trabajado para resolver problemas de optimización, considerando una interpretación fisicoquímica y biológica del modelo, el contexto en que fue estructurado, su formulación matemática, resolución e implementación computacional.
CG6	RA6: Analiza ejemplos reales en los que la optimización se podría haber utilizado como herramienta para apoyar propuestas de innovación en la ingeniería de procesos.

D. Unidades temáticas:

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
1	RA1, RA6	Introducción a la optimización de procesos	2 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
1.1. Introducción a optimización de procesos: 1.2. Optimización en ingeniería. Historia de la optimización y ramas de la optimización. Incidencia de la optimización en la ingeniería de procesos. Nociones básicas y estructura de problemas de optimización. Tipos de problema de optimización: Problemas lineales, no lineales y enteros 1.3. Formulación matemática de un problema. 1.4. Resolución de problemas simples de programación lineal, programación entera y programación no-lineal. Introducción al uso de softwares de optimización. 1.5. Análisis de un modelo de optimización y su respuesta. Ejemplos de problemas reales en ingeniería de procesos.		El/la estudiante: 1. Explica la importancia de la optimización y sus ramas, considerando su relevancia para la toma de decisiones, en el contexto de la ingeniería de procesos. 2. Distingue tipos de problemas de optimización en ingeniería de procesos, considerando restricciones y variables a las que estos están sujetos. 3. Identifica y analiza ejemplos reales de la ingeniería de procesos en donde se podrían haber utilizado herramientas de optimización para apoyar propuestas de innovación. 4. Formula matemáticamente y resuelve por inspección problemas simples de optimización, considerando las restricciones, las variables, lista de conjuntos y funciones objetivo.	
Bibliografía de la unidad		(1) Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W., Part II, Chapter 9; (2) Floudas, C. A., Introduction; (3) Biegler, L. T., Chapter 1.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
2	RA1, RA2, RA3, RA6	Programación lineal	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>2.1. Programación lineal:</p> <p>2.1.1. Identificación de situaciones en que se puede usar programación lineal.</p> <p>2.1.2. Formulación de problemas lineales en la ingeniería de procesos.</p> <p>2.1.3. Conceptos de geometría de poliedros y su relación en la optimización lineal.</p> <p>2.1.4. Búsqueda de la solución óptima en un problema lineal - SIMPLEX.</p> <p>2.1.5. Análisis e interpretación de los resultados obtenidos y su coherencia con respecto al modelo planteado y el contexto.</p> <p>2.2. Programación convexa.</p> <p>2.2.1. Conceptos de convexidad y separación de convexos. Teorema de Farkas.</p> <p>2.2.2. Condiciones de optimalidad de 1er. y 2do. orden. Definiciones: dirección admisible, dirección de descenso. Teorema de Karush-Kuhn-Tucker.</p> <p>2.2.3. Interpretación geométrica de las condiciones de optimalidad para un problema convexo.</p> <p>2.2.4. Análisis de estrategias de resolución basadas en gradiente.</p> <p>2.2.5. Formulación de problemas convexos en ingeniería de procesos y aplicación de condiciones de optimalidad.</p> <p>2.2.6. Teoría de dualidad y su aplicación en la resolución de problemas.</p> <p>2.2.7. Algoritmos de resolución de problemas.</p> <p>2.2.8. Análisis e interpretación de los resultados y su relación con los criterios de detención para cada algoritmo.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Verifica, a partir de ejemplos, si el problema de optimización es lineal. 2. Formula matemáticamente un problema de optimización lineal ligado a la ingeniería de procesos, definiendo variables, restricciones, parámetros, conjuntos y funciones objetivo. 3. Selecciona un algoritmo para modelos lineales, a partir de la distinción de los conceptos básicos sobre poliedros. 4. Explica la búsqueda del óptimo, utilizando nociones geométricas. 5. Informa de manera clara y coherente sobre la construcción de modelos para la optimización de problemas lineales, analizando según el contexto, la solución obtenida. 6. Resuelve problemas de optimización, utilizando herramientas computacionales específicas para problemas lineales. 7. Formula y resuelve el dual de un programa lineal, considerando las restricciones y variables del problema primal. 	
Bibliografía de la unidad		(1) Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W., Part II, Chapter 9; (2) Floudas, C. A., Part 1, Chapter 2; (3) Biegler, L. T., Chapter 4.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
3	RA1, RA2, RA3, RA4, RA6	Problemas mixtos	4 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>3.1. Acercamiento a problemas no convexos - programación entera:</p> <p>3.1.1. Introducción a problemas mixtos en ingeniería de procesos (selección y disjunción).</p> <p>3.1.2. Modelación con variables enteras y binarias.</p> <p>3.1.3. Formulación de relaciones entre variables del problema.</p> <p>3.1.4. Formulación de un problema de optimización lineal entero en ingeniería de procesos.</p> <p>3.1.5. Relajación y consideraciones para resolver problemas enteros.</p> <p>3.1.6. Método de ramificación y acotamiento (Branch & Bound). Concepto de "GAP" y su relación en la solución del problema.</p> <p>3.1.7. Cortes y métodos de planos cortantes.</p> <p>3.2. Análisis del resultado de las variables enteras y sus implicancias en la solución.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> Decide si para resolver un problema debe usar variables enteras. Formula un problema de variable mixta (variable entera y continua) a partir de ejemplos de ingeniería de procesos. Utiliza el algoritmo de ramificación y acotamiento en la resolución de problemas de optimización para mejorar un proceso o sus condiciones de operación. Evalúa la solución de un problema de variable mixta desde el punto de vista de la estructura y operación de un proceso químico o biotecnológico. 	
Bibliografía de la unidad		(1) Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W., Part IV, Chapter 15; (2) Floudas, C. A., Part 2, Chapter 5.	

Número	RA al que tributa	Nombre de la unidad	Duración en semanas
4	RA1, RA2, RA3, RA4, RA5, RA6	Problemas no lineales	5 semanas
Contenidos		Indicador de logro	
<p>4.1. Programación no convexa en ingeniería de procesos.</p> <p>4.1.1. Introducción a modelos no convexos en la ingeniería de procesos.</p> <p>4.1.2. Estrategias para enfrentar un problema no convexo: Relaxaciones y linealizaciones.</p> <p>4.1.3. Nociones geométricas de las estrategias utilizadas en problemas no convexos (solvers globales).</p> <p>4.2. Programación no lineal continua y mixta en la ingeniería de procesos.</p> <p>4.2.1. Análisis de problemas no lineales (continuos y mixtos) y uso de solvers para su resolución.</p> <p>4.2.2. Interpretación de las soluciones entregadas por los solvers.</p>		<p>El/la estudiante:</p> <ol style="list-style-type: none"> 1. Identifica problemas no convexos en ingeniería de procesos, considerando conceptos geométricos que permiten caracterizar soluciones. 2. Aplica estrategias para enfrentar problemas no convexos a ejemplos ligados a ingeniería de procesos. 3. Determina cuándo es necesario plantear un modelo de optimización no lineal, considerando el contexto del problema, función objetivo y restricciones a las cuales está sujeto. 4. Formula modelos no lineales (continuos y mixtos) ligados a problemas de ingeniería de procesos. 5. Resuelve problemas de optimización no lineales (continuos y mixtos), utilizando herramientas computacionales y considerando las características del problema para elegir un solver adecuado. 6. Informa de manera clara y coherente la solución obtenida y su pertinencia en el contexto industrial, explicando la estrategia utilizada para obtenerla. 	
Bibliografía de la Unidad		(1) Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W., Part IV; (2) Floudas, C. A., Part 2, Chapter 6; (3) Biegler, L. T., Chapter 4 – 5 – 7.	

E. Estrategias de enseñanza – aprendizaje:

El curso considera las siguientes estrategias:

- Clases expositivas.
- Resolución de problemas.
- Análisis de caso.

F. Estrategias de evaluación:

Al inicio del semestre, el cuerpo académico informará sobre la propuesta de evaluación, considerando tipo de evaluación, cantidad, ponderaciones asignadas y fechas.

El curso considera las siguientes instancias de evaluación:

- Tareas asociadas al análisis de caso (formulación, implementación y análisis de los resultados obtenidos).
- Examen.

En algunas de las tareas debe justificar por escrito sus resultados, considerando claridad y precisión en su exposición y argumentación.

G. Recursos bibliográficos:

Bibliografía obligatoria:

- (1). Biegler, L. T., Grossmann, I. E., & Westerberg, A. W. (1997). *Systematic methods for chemical Process design*.
- (2) Floudas, C. A. (1995). *Nonlinear and mixed-integer optimization: fundamentals and applications*. Oxford University Press.

Bibliografía complementaria:

- (3) Biegler, L. T. (2010). *Nonlinear programming: concepts, algorithms, and applications to chemical processes*. Society for Industrial and Applied Mathematics.
- (4) Sun, W., & Yuan, Y. X. (2006). *Optimization theory and methods: nonlinear programming (Vol. 1)*. Springer Science & Business Media.

H. Datos generales sobre elaboración y vigencia del programa de curso:

Vigencia desde:	Primavera, 2021
Elaborado por:	J. Cristian Salgado, Felipe Díaz Alvarado, Guillermo Valenzuela
Validado por:	CTD de Ingeniería Química, Biotecnología y Materiales (IQBM)
Revisado por:	Área de Gestión Curricular