

Comparación de Relajaciones de Términos Bi-Lineales: Aplicación al Problema de Programación de Mezclado Multi-Período

Danilo A. Figueroa P., Rafael R. A. Vargas, Aldo R. Vecchietti y José Espinosa

INGAR, Instituto de Desarrollo y Diseño,
Avellaneda 3657, S3002GJC Santa Fe, Argentina
<http://www.ingar.santafe-conicet.gov.ar>

Resumen En los modelos de muchas aplicaciones industriales en las que se realizan procesos de mezclado surgen frecuentemente términos que incluyen el producto de dos variables continuas. Estos términos, denominados bi-lineales, generan no-convexidades que dificultan la optimización de dichos procesos. En particular el problema de Pooling y sus derivados, se caracterizan por contener muchas restricciones con dicho tipo de términos. En la literatura contemporánea se encuentran diversas aproximaciones, cuyo objetivo es encontrar una solución eficiente a este tipo de problemas. Algunos de estos enfoques, cuyas soluciones se contrastan en el presente estudio, se basan en la aproximación por tramos de los términos bilineales con envolturas de McCormick y la descomposición multiparamétrica de alguna de las variables.

Palabras Clave: Relajación de McCormick con Dominio Particionado, Desagregación Multiparamétrica, Términos Bilineales

1 Introducción

Un problema común que se presenta en procesos del campo de la ingeniería tales como refinerías de petróleo y sistemas de suministro y tratamiento de agua, es maximizar la utilidad, sujeto a restricciones de disponibilidad de suministros, capacidad intermedia de almacenamiento, demanda y especificaciones de producto. Tal problema recibe el nombre de “pooling” [1]. En este problema básico se supone una configuración definida de la red del proceso, debiendo seleccionarse los flujos entre los distintos nodos, siendo modelado a través de un Programa No Lineal (NLP).

Se denomina problema de “Pooling Generalizado” a la variante del problema descrito anteriormente, en el cual se debe seleccionar la configuración óptima de la red, eligiendo las interconexiones entre los nodos fuente, intermedios y salida, mediante decisiones discretas, generando un Programa Mixto Entero No Lineal (MINLP) que exhibe múltiples soluciones localmente óptimas.

Los problemas descriptos incorporan la suposición de una operación en estado estacionario, es decir que la variación temporal en los suministros y demandas de productos no son modeladas. El “Problema de Programación de Mezclado Multi-período”, de importancia en las industrias de refinería y petroquímica, puede entenderse como un problema de pooling generalizado que incorpora la operación no estacionaria del proceso al considerar múltiples periodos discretos. Consecuentemente,

el tamaño del modelo se incrementa sustancialmente al tener en cuenta un mayor número de decisiones discretas.

El problema de pooling y sus derivados son ampliamente estudiados debido a que conllevan una gran dificultad para encontrar un óptimo global. Su complejidad es causada por la no-convexidad generada por los términos bi-lineales presentes en las restricciones que describen los procesos de mezclado, y en el caso específico de pooling generalizado y programación de mezclado multi-periodo se incrementa aún más su dificultad debido a la toma de decisiones discretas por medio de variables binarias. Para la resolución de estos programas matemáticos los resolvedores locales no garantizan la optimalidad global de la solución mientras que resolvedores globales suelen fallar al converger u obtener una solución factible [2].

La formulación y resolución de este tipo de problemas, pueden abordarse de distintas maneras. Una aproximación clásica es el uso de envolturas de McCormick, [3],[11], para los términos bi-lineales, aunque más recientemente se han presentado envolturas alternativas como las de Ruiz y Grossmann [4]. Estos últimos también buscaron aplicar la programación disyuntiva generalizada para acotar las bi-linealidades [5]. Karuppiah y Grossmann demostraron la utilidad de agregar restricciones redundantes de balance de masa como un mecanismo para ajustar el acotamiento en las envolturas de McCormick y aplicaron esta técnica al problema de las redes de agua [8]. Wicaksono y Karimi han propuesto un nuevo método para obtener sub y sobre estimadores para programas bi-lineales basados en el particionado del dominio [7]. Estos autores resaltan la importancia de esta técnica en el área de síntesis de procesos. Recientemente varios refinamientos de las aproximaciones anteriores han sido desarrolladas por Misener, Tompson y Floudas, [1], especialmente usando envolturas de McCormick en conjunto con aproximaciones por tramos de los términos bi-lineales. Dado que un término bi-lineal tiene dos variables en su composición se presentan tres alternativas de particionado, dos de ellas corresponden al particionado de sólo una de las variables, tratamiento al cual se llama particionado uni-variado, en tanto que el particionado de ambas variables a la vez se denomina bi-variado [2]. Por lo general las formulaciones utilizan un particionado uni-variado, [7],[2], sin embargo Karuppiah y Grossmann mencionan la posibilidad de usar un particionado bi-variado, aunque prefieren segmentar una sola variable en sus estudios, argumentando que la adición de variables continuas y binarias podrían incrementar el esfuerzo computacional hasta un límite inaceptable [8]. Wikaksono y Karimi reportan una mejora en la calidad de la relajación usando un particionado bi-variado pero presentan poca información acerca del desempeño [7].

Kolodziej et al. [9] presentaron un algoritmo que utiliza una relajación MILP del problema original, basada en la técnica de descomposición multi-paramétrica y envolturas de McCormick. Esta técnica ofrece una cota superior (maximización) cuyo ajuste puede ser mejorado incrementando la precisión de la descomposición. Además, señalaron su eficiente desempeño comparando dicho algoritmo con resolvedores globales [9].

La propuesta de este trabajo consiste en la utilización de dos técnicas: McCormick particionado y descomposición multiparamétrica con el objetivo de obtener una relajación MILP de problemas de programación de mezclado multiperiodo. El desempeño de los modelos MILP será medido tanto por la calidad de la relajación como por la carga computacional resultante; esto permitirá realizar una evaluación que

mostrará las ventajas o desventajas de la aplicación de cada una de las técnicas.

2 Planteo del Problema

El problema de programación de mezclado multiperiodo se representa por una red de nodos; cada nodo $n \in N$ simboliza un tanque.

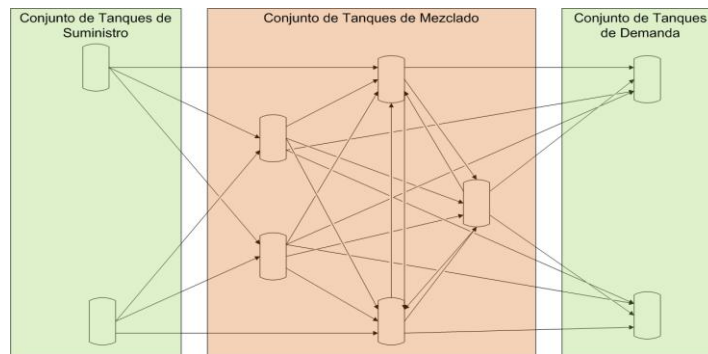


Figure 1: Esquema de una red en un problema de pooling.

Se consideran tres subconjuntos de tanques, diferenciados según su función, sea de suministro $n \in S$, mezclado $n \in B$ ó demanda $n \in D$; siendo $N = S \cup B \cup D$. Las corrientes que van desde un tanque a otro se muestran como interconexiones entre nodos $nn' \in CNN$, particularmente estas corrientes se dan en una sola dirección y siempre desde un tanque de suministro a mezclado, suministro a demanda, mezclado a mezclado ó mezclado a demanda. La programación secuencial de mezclado se realiza considerando múltiples periodos discretos, $t \in T$, en los cuales se efectúan las operaciones de transporte, llenado, mezclado y vaciado. Se asume que un tanque de mezclado no se puede llenar y vaciar en el mismo periodo de tiempo. El contenido de cada tanque por periodo se maneja como un inventario $I_{n,t}$ el cual puede estar limitado por una capacidad máxima y mínima de cada tanque I_n^{LO} y I_n^{UP} . El flujo que va desde un tanque a otro en cada periodo de tiempo $F_{n,n',t}$ está restringido por los valores $F_{n,n',t}^{LO}$ y $F_{n,n',t}^{UP}$; además, los flujos de suministro y demanda son especificados en cada periodo de tiempo por $F_{n,t}^{IN}$, $n \in S$ y $F_{n,t}^{OUT}$, $n \in D$; éstos tienen asociado un costo unitario para el suministro $\beta s d_n$, $n \in S$ y un precio unitario para la demanda βd_n , $n \in D$. La concentración, $C_{q,n,t}$, asociada a un componente o especie, $q \in Q$, se maneja para cada uno de los tanques y periodos. Por simplicidad la composición para los tanques de suministro se mantiene fija en todos los periodos, en un valor dado por $C_{q,n}^{IN}$, $n \in S$, mientras que la composición en los tanques de demanda pueden variar entre $C_{q,n}^{LO}$ y $C_{q,n}^{UP}$, $n \in D$ para cumplir con los estándares deseados. La decisión de usar una determinada interconexión se realiza activando la variable binaria $Y_{n,n',t}$, lo

que conlleva un costo fijo $\alpha_{n,n'}$ y un costo de circulación $\beta_{n,n'}$. Finalmente, la utilidad del proceso se genera por la venta de la producción demandada menos el consumo de suministros y costos operativos. El objetivo por tanto es maximizar la utilidad seleccionando adecuadamente las interconexiones y el valor de flujo en cada periodo, cumpliendo con las restricciones de la operación del proceso. En la figura (1) se representa una red de tanques de suministro, mezclado y demanda y sus posibles conexiones.

3 Formulación del Modelo

Una de las formulaciones del problema de programación de mezclado multiperíodo, descrito anteriormente, es la representada por las ecuaciones (1) a (15), que definen un modelo MINLP. La ecuación (1) es la función objetivo que maximiza el valor de la utilidad calculado como la venta de una cantidad de producto demandado menos los costos por suministros consumidos y los costos de operación fijos y variables por circulación de flujos.

$$\max \sum_{t \in T} \left[\sum_{n \in S \cup B} \sum_{n' \in D} \beta s d_{n'} \cdot F_{n,n',t} - \sum_{n \in S} \sum_{n' \in B \cup D} \beta s d_n \cdot F_{n,n',t} \right] - \sum_{t \in T} \sum_{n,n' \in CNN} \alpha_{n,n'} \cdot Y_{n,n',t} + \beta_{n,n'} \cdot F_{n,n',t} \quad (1)$$

El modelo se encuentra sujeto a las restricciones expresadas de (2) a (15).

$$F_{n,n',t} \leq F_{n,n',t}^{UP} \cdot Y_{n,n',t} \quad \forall n,n' \in CNN; t \in T \quad (2)$$

$$F_{n,n',t} \geq F_{n,n',t}^{LO} \cdot Y_{n,n',t} \quad \forall n,n' \in CNN; t \in T \quad (3)$$

Las ecuaciones (2) y (3) limitan el flujo $F_{n,n',t}$ entre su cota superior $F_{n,n',t}^{UP}$ e inferior $F_{n,n',t}^{LO}$. Las variables binarias $Y_{n,n',t}$ son iguales a 1 cuando la conexión existe, 0 en caso contrario.

$$C_{q,n,t-1} \leq C_{q,n'}^{UP} + M (1 - Y_{n,n',t}) \quad \forall q \in Q; n \in B; n' \in D; t \in T \quad (4)$$

$$C_{q,n,t-1} \geq C_{q,n'}^{UP} - M (1 - Y_{n,n',t}) \quad \forall q \in Q; n \in B; n' \in D; t \in T \quad (5)$$

Las ecuaciones (4) y (5) obligan a que en cada período t cualquier flujo que sea introducido a los tanques de demanda satisfaga los valores de concentración límites especificados. Estas restricciones son del tipo BigM, las cuales deben satisfacerse cuando $Y_{n,n',t}$ es igual a 1 y la conexión entre tanques existe, si no la variable se hace 0 y la restricción es redundante en el modelo. Para el caso del período $t=0$ los valores de las variables continuas toman valores constantes, determinados por las condiciones iniciales del sistema que se está representando.

$$I_{n,t} = I_{n,t-1} + F_{n,t}^{IN} - \sum_{n' \in (B \cup D)} F_{n,n',t} \quad \forall n \in S; t \in T \quad (6)$$

$$I_{n,t} = I_{n,t-1} + \sum_{n' \in S \cup B} F_{n',n,t} - \sum_{n' \in B \cup D} F_{n,n',t} \quad \forall n \in B; t \in T \quad (7)$$

$$I_{n,t} = I_{n,t-1} + \sum_{n' \in S \cup B} F_{n',n,t} - F_{n,t}^{OUT} \quad \forall n \in D; t \in T \quad (8)$$

Las ecuaciones (6) a (8) son los balances de materia total sobre los tanques de suministro, mezclado y demanda, respectivamente. Esta restricción indica que el contenido de los tanques en un periodo t , es igual al contenido en el periodo anterior, más los flujos de entrada, menos los de salida.

$$I_{n,t} \cdot C_{q,n,t} = I_{n,t-1} \cdot C_{q,n,t-1} + \sum_{n' \in S} F_{n',n,t} \cdot C_{q,n'}^{IN} + \sum_{n' \in B} F_{n',n,t} \cdot C_{q,n',t-1} - \sum_{n' \in B \cup D} F_{n,n',t} \cdot C_{q,n,t-1} \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (9)$$

La ecuación (9) representa el balance material individual por componente en cada tanque de mezclado. Se observa en esta restricción el contenido de los términos bi-lineales $F_{n,n',t} \cdot C_{q,n,t-1}$ y $I_{n,t} \cdot C_{q,n,t}$, los cuales son la fuente de complejidad en este problema. Para poder resolver eficientemente el problema se requieren relajaciones lineales de estos términos.

$$Y_{n,n',t} + Y_{n',n'',t} \leq 1 \quad \forall n \in S \cup B; n' \in B; n'' \in B \cup D; t \in T \quad (10)$$

La ecuación (10) asegura que en un mismo periodo no puedan realizarse cargas y descargas en un cierto tanque de mezclado.

$$I_n^{LO} \leq I_{n,t} \leq I_n^{UP} \quad \forall n \in S \cup B \cup D; t \in T \quad (11)$$

$$Y_{n,n',t} \in 0,1 \quad \forall n, n' \in CNN; t \in T \quad (12)$$

$$F_{n,n',t} \geq 0 \quad \forall n, n' \in CNN; t \in T \quad (13)$$

$$I_{n,t} \geq 0 \quad \forall n \in S \cup B \cup D; t \in T \quad (14)$$

$$0 \leq C_{q,n,t} \leq 1 \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (15)$$

Las restricciones del (11) al (15) especifican el dominio de las variables continuas y binarias del modelo.

4 Aproximaciones Lineales

El contenido de términos bi-lineales en un modelo causa no-convexidades. Una forma de convexificar el problema es realizar una relajación lineal mediante envolturas de McCormick, la cual se obtiene reemplazado un término bi-lineal $x \cdot y$ por una variable

continua z y restringiéndola por las inecuaciones (16) a (19). En donde los parámetros x^L , x^U , y^L y y^U son los límites inferior y superior de las variables x e y del dominio del problema.

$$z \geq x \cdot y^L + x^L \cdot y - x^L \cdot y^L \quad (16)$$

$$z \geq x \cdot y^U + x^U \cdot y - x^U \cdot y^U \quad (17)$$

$$z \leq x \cdot y^L + x^U \cdot y - x^U \cdot y^L \quad (18)$$

$$z \leq x \cdot y^U + x^L \cdot y - x^L \cdot y^U \quad (19)$$

$$\frac{x^U - x^L}{4} \quad \frac{y^U - y^L}{4} \quad (20)$$

Esta relajación posee una máxima separación entre el término bi-lineal y su envoltura, definida por la ecuación (20) [3]. Así, un dominio de menor tamaño ofrece una menor separación y por tanto mejor ajuste. Por otra parte, el enfoque de Descomposición Multiparamétrica [12] se basa en la discretización de una variable continua representada como una función de potencias de una base numérica, aproximando el valor de dicha variable en función de variables binarias. Tal como se expresa en la ecuación (21). Donde R es un número natural no nulo, que define la base sobre la que se desea descomponer la variable continua x . P y p definen la mayor y menor potencia de la base que se utilizarán en la aproximación y $VB_{k,l}$ es una variable binaria que determina los valores que toma la variable continua que se desea discretizar.

$$x = \sum_{l=p}^P \sum_{k=0}^{R-1} R^l \cdot k \cdot VB_{k,l} \quad (21)$$

La variable binaria $VB_{k,l}$ tomara el valor unitario en la representación cuando se tengan k unidades en la posición correspondiente a R^l del número representado. Una característica especial de este enfoque es que al incrementar una cifra significativa la precisión de la discretización, aumenta linealmente la cantidad de variables binarias necesarias.

4.1 Relajación Lineal usando envolturas de McCormick con dominio particionado

Como se mencionó anteriormente la disminución del dominio sobre el que se aplican las envolturas de McCormick es beneficiosa debido a que aumenta el ajuste de la relajación. Para realizar esto se recurre a la división del dominio original en subdominios. Esto se puede lograr a través de un modelado con decisiones discretas. Nos referimos a esta relajación como Relajación por envolturas de McCormick Particionado (RMP). Para implementar la relajación con envolturas de McCormick en cada subdominio, se apoyó el modelado mediante el uso de programación disyuntiva.

La formulación se realizó reemplazando los términos bi-lineales $F_{n,n',t} \cdot C_{q,n,t-1}$ y $I_{n,t} \cdot C_{q,n,t}$ por su variable de aproximación $W_{q,n,t}^1$ y $W_{q,n,n',t,t'}^2$ respectivamente, cambiando la restricción (9) por la (22) y adicionando las disyunciones (23) y (24), dando como resultado un modelo disyuntivo generalizado.

$$W_{q,n,t}^1 = W_{q,n,t'}^1 + \sum_{n' \in S} F_{n',n,t} \cdot C_{q,n'}^{IN} + \sum_{n' \in B} W_{q,n',n,t,t'}^2 - \sum_{n' \in B \cup D} W_{q,n,n',t,t'}^2 \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T; t' = t - 1 \quad (22)$$

El balance de materia por componente en cada tanque de mezclado queda ahora expresado linealmente como lo muestra la ecuación (22).

$$\forall p \in P \quad \left[\begin{array}{l} K_{p,q,n,t}^1 \\ W_{q,n,t}^1 \geq I_{n,t} \cdot C_p^L + I_n^{LO} \cdot C_{q,n,t} - I_n^{LO} \cdot C_p^L \\ W_{q,n,t}^1 \geq I_{n,t} \cdot C_p^U + I_n^{UP} \cdot C_{q,n,t} - I_n^{UP} \cdot C_p^U \\ W_{q,n,t}^1 \leq I_{n,t} \cdot C_p^L + I_n^{UP} \cdot C_{q,n,t} - I_n^{UP} \cdot C_p^L \\ W_{q,n,t}^1 \leq I_{n,t} \cdot C_p^U + I_n^{LO} \cdot C_{q,n,t} - I_n^{LO} \cdot C_p^U \\ I_n^{LO} \leq I_{n,t} \leq I_n^{UP} \\ C_p^L \leq C_{q,n,t} \leq C_p^U \end{array} \right] \quad \forall q \in Q; \quad (23)$$

$$\forall p \in P \quad \left[\begin{array}{l} K_{p,q,n,n',t,t'}^2 \\ W_{q,n,n',t,t'}^2 \geq F_{n,n',t} \cdot C_p^L + F_{n,n',t}^{LO} \cdot C_{q,n,t'} - F_{n,n',t}^{LO} \cdot C_p^L \\ W_{q,n,n',t,t'}^2 \geq F_{n,n',t} \cdot C_p^U + F_{n,n',t}^{UP} \cdot C_{q,n,t'} - F_{n,n',t}^{UP} \cdot C_p^U \\ W_{q,n,n',t,t'}^2 \leq F_{n,n',t} \cdot C_p^L + F_{n,n',t}^{UP} \cdot C_{q,n,t'} - F_{n,n',t}^{UP} \cdot C_p^L \\ W_{q,n,n',t,t'}^2 \leq F_{n,n',t} \cdot C_p^U + F_{n,n',t}^{LO} \cdot C_{q,n,t'} - F_{n,n',t}^{LO} \cdot C_p^U \\ F_{n,n',t}^{LO} \leq F_{n,n',t} \leq F_{n,n',t}^{UP} \\ C_p^L \leq C_{q,n,t'} \leq C_p^U \end{array} \right] \quad \forall q \in Q; \quad (24)$$

En las disyunciones (23) y (24), los parámetros C_p^L y C_p^U son los límites de concentración en el subdominio p . Las variables de decisión $K_{p,q,n,t}^1$ y $K_{p,q,n,n',t,t'}^2$ se activan cuando la concentración $C_{q,n,t}$ se encuentra dentro de los límites correspondientes a la partición p , forzando a que las variables $W_{q,n,t}^1$ y $W_{q,n,n',t,t'}^2$ sean acotadas por las envolturas de McCormick. La implementación se realizó utilizando restricciones tipo Big-M para obtener un modelo MILP. Por lo que se agregan para cada término bi-lineal tantas variables binarias de decisión como número de subdominios hayan.

La división del dominio original en subdominios se realiza usando un particionado univariado. La variable seleccionada fue la concentración, ya que participa a la vez en los términos bilineales $F_{n,n',t} \cdot C_{q,n,t-1}$ y $I_{n,t} \cdot C_{q,n,t}$ de la restricción (9). Se dividió en segmentos de igual longitud y el número de divisiones van desde 2 hasta 5, cuyas

distribuciones de subdominios obtenidas se denominan U2, U3, U4 y U5.

4.2 Relajación lineal basada en descomposición multiparamétrica y envolturas de McCormick

La relajación MILP presentada por Kolodziej [9] se desarrolla tomando la aproximación discreta por descomposición multiparamétrica de una de las variables que intervienen en el término bilineal y adicionando una holgura continua acotada dentro del nivel de precisión de la descomposición, con lo que se obtiene una aproximación continua de la variable discretizada. Luego al desarrollar el producto de la aproximación continua y la variable restante, surgen nuevos términos bilineales, los cuales son acotados mediante envolturas de McCormick para obtener una relajación MILP del problema original. A esta aproximación la denominaremos Relajación por Descomposición Multiparamétrica (RDM). La aplicación de este método al problema de programación de mezclado multiperiodo se presenta en [10]. La formulación del problema MILP se obtiene a partir del MINLP formulado originalmente, cambiando la restricción (9) por (25), y agregando las restricciones definidas por las ecuaciones (26) a (38).

$$W_{q,n,t}^{IC} = W_{q,n,t-1}^{IC} + \sum_{n' \in S} F_{n',n,t} \cdot C_{q,n'}^{IN} + \sum_{n'' \in B} W_{q,n'',n,t}^{FC} - \sum_{n''' \in (B \cup D)} W_{q,n,n''',t}^{FC} \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (25)$$

La ecuación (25) es la linealización de la ecuación de balance de materia por componentes. Donde las variables $W_{q,n,t}^{IC}$ y $W_{q,n'',n,t}^{FC}$ reemplazan a los términos lineales $I_{n,t} \cdot C_{q,n,t}$ y $F_{n,n',t} \cdot C_{q,n,t-1}$ respectivamente.

$$C_{q,n,t} = \sum_{l=p}^P \sum_{k=0}^9 10^l \cdot k \cdot Z_{k,l,q,n,t} + \sum_{k=0}^1 10^p \cdot k \cdot \tilde{Z}_{k,q,n,t} \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (26)$$

El primer término del segundo miembro de la ecuación (26), expresa la aproximación discreta de la concentración. Se observa la presencia de la variable binaria $Z_{k,l,q,n,t}$ que toma valor 1 cuando se encuentra el entero k en el lugar decimal 10^l del número representado. Según esta expresión el valor de concentración más pequeño representable es 10^p , por lo tanto p define la precisión de la discretización. En tanto que P limita el máximo número representable 10^P . El término restante del segundo miembro representa la holgura, que puede tomar valores entre 0 y 10^p . Siendo $Z_{k,q,n,t}$ una variable auxiliar continua acotada entre 0 y 1.

$$W_{q,n,n',t}^{FC} = \sum_{l=p}^P \sum_{k=0}^9 10^l \cdot k \cdot \hat{F}_{k,l,q,n,n',t} + \sum_{k=0}^1 10^p \cdot k \cdot \tilde{F}_{k,q,n,n',t} \quad \forall q \in Q; n \in B; n' \in (B \cup D); t \in T \quad (27)$$

$$W_{q,n,t}^{IC} = \sum_{l=p}^P \sum_{k=0}^9 10^l \cdot k \cdot \hat{I}_{k,l,q,n,t} + \sum_{k=0}^1 10^p \cdot k \cdot \tilde{I}_{k,q,n,t} \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (28)$$

En forma similar a la restricción (26), las restricciones (27) y (28) definen los valores de $W_{q,n,n',t}^{FC}$ y $W_{q,n,t}^{IC}$, expresándolas como la suma de una aproximación discreta del producto bilineal y una holgura continua. Para realizar esto se introducen variables auxiliares, continuas y positivas F , F , I e I . Las ecuaciones (29) a (38) completan el modelo, acotando las variables auxiliares.

$$\hat{F}_{k,l,q,n,n',t} \leq F_{n,n'}^U \cdot Z_{k,l,q,n,t} \quad \forall l \in p, \dots, P; k \in 0, \dots, 9; q \in Q; n \in B; n' \in (B \cup D); t \in T \quad (29)$$

$$\hat{I}_{k,l,q,n,t} \leq I_{n,t}^U \cdot Z_{k,l,q,n,t} \quad \forall l \in p, \dots, P; k \in 0, \dots, 9; q \in Q; n \in B; t \in T \quad (30)$$

$$\tilde{F}_{k,q,n,n',t} \leq F_{n,n'}^U \cdot \tilde{Z}_{k,q,n,t} \quad \forall k \in 0, 1; q \in Q; n \in B; n' \in (B \cup D); t \in T \quad (31)$$

$$\tilde{I}_{k,q,n,t} \leq I_{n,t}^U \cdot \tilde{Z}_{k,q,n,t} \quad \forall k \in 0, 1; q \in Q; n \in B; t \in T \quad (32)$$

$$\sum_{k=0}^9 \hat{F}_{k,l,q,n,n',t} = F_{n,n',t} \quad \forall l \in p, \dots, P; q \in Q; n \in B; n' \in (B \cup D); t \in T \quad (33)$$

$$\sum_{k=0}^9 \hat{I}_{k,l,q,n,t} = I_{n,t} \quad \forall l \in p, \dots, P; q \in Q; n \in B; t \in T \quad (34)$$

$$\sum_{k=0}^1 \tilde{F}_{k,q,n,n',t} = F_{n,n',t} \quad \forall q \in Q; n \in B; n' \in (B \cup D); t \in T \quad (35)$$

$$\sum_{k=0}^1 \tilde{I}_{k,q,n,t} = I_{n,t} \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (36)$$

$$\sum_{k=0}^9 Z_{k,l,q,n,t} = 1 \quad \forall l \in p, \dots, P; q \in Q; n \in B; t \in T \quad (37)$$

$$\sum_{k=0}^1 \tilde{Z}_{k,q,n,t} = 1 \quad \forall q \in Q; n \in B; t \in T \quad (38)$$

4.3 Comparación del tamaño de los problemas relajados

El número de variables binarias que utiliza cada relajación se muestra en la Tabla 1. Donde CNN es el conjunto de conexiones entre los distintos tanques, CBD son las conexiones entre los tanques de mezclado y entre los de mezclado y demanda. Así mismo b es el conjunto de tanques de mezclado, t el de periodos considerados, q las características de calidad controladas, p las particiones usadas en la aproximación por tramos, k y l los coeficientes que multiplican y los exponentes que se utilizan en la descomposición multiparamétrica.

Tabla 1: Estimación de variables binarias

Estrategia de aproximación	Variable Binaria	Cantidad de variables binarias utilizadas
RMP	$Y_{n,n',t}$	$ CNN \cdot t $
	$K_{p,q,n,t}^1$	$ p \cdot b \cdot q \cdot t $
	$K_{p,q,n,n',t,t'}^2$	$ p \cdot CBD \cdot q \cdot t $
RDM	$Y_{n,n',t}$	$ CNN \cdot t $
	$Z_{q,k,l,q,b,t}$	$ b \cdot l \cdot k \cdot q \cdot t $

Como se observa, en el caso de la RMP el número de variables binarias se incrementa linealmente con la cantidad de particiones p . No obstante, se ha informado que se requiere un incremento exponencial en la cantidad de variables binarias para aumentar el número de cifras significativas en el valor óptimo de la función objetivo, asimismo, un comportamiento similar ocurre con el número total de variables y restricciones [9].

Sin embargo, Kolodziej destaca en [9] que con la técnica de descomposición multiparamétrica el número de variables binarias se incrementa logarítmicamente respecto a la cantidad de puntos discretos. Y además el aumento de precisión en una cifra significativa en el valor de la función objetivo óptima es acompañado con un crecimiento lineal de variables binarias.

En la Tabla (1) se puede observar que en ambas aproximaciones la cantidad de variables $Y_{n,n',t}$ es idéntica, ya que éstas forman parte del problema original. Siendo $K_{p,q,n,t}^1$ y $K_{p,q,n,n',t,t'}^2$ las variables binarias que se agregan en la formulación por tramos y $Z_{k,l,q,b,t}$ las definidas siguiendo el enfoque de descomposición multiparamétrica. Respecto de la aproximación RMP se tiene que el número de variables $K_{p,q,n,n',t,t'}^2$ es proporcional a la cantidad de conexiones alternativas entre los tanques de mezclado y entre los de mezclado y de demanda, mientras que para $K_{p,q,n,t}^1$ se tiene una proporcionalidad con la cantidad de nodos. En cambio para la RDM, las variables agregadas $Z_{k,l,q,b,t}$ son sólo proporcionales a la cantidad de nodos. Como los problemas de Pooling se caracterizan por tener muchas conexiones entre los distintos tanques, al agregar un nuevo tanque de mezclado a un cierto problema, el incremento en la cantidad de conexiones será aproximadamente proporcional a la cantidad de nodos inicial. Esto hace que el tamaño del conjunto CBD crezca en forma aproximadamente exponencial respecto de la cantidad de tanques. A causa de esto el enfoque RDM es más apropiado para problemas con un gran número de tanques, ya que tendrá un menor incremento de variables binarias auxiliares que la RMP, facilitando la resolución de los problemas.

5 Metodología

En este trabajo se probarán tres problemas de programación de mezclado multi-periodo presentados en [10], específicamente los problemas B.4 8T-3P-2-721, B.2 8T-3P-2Q-146 y B.5 8T-4P-2Q-480, a los cuales denominamos P0, P1 y P2

respectivamente. Todos los modelos fueron implementados en el lenguaje de modelado GAMS 23.7.3 [13] y ejecutados en una computadora personal con un procesador Intel Core i7-2600(@3.4 GHz), 8 GB de RAM y con sistema operativo Windows7 x 64 bits.

Cada problema MILP se resolvió hasta un 0% de gap relativo o una duración máxima de 5h, usando el resolvidor lineal GUROBI. Al finalizar se recopilan el valor de la solución, el tiempo de cómputo y el gap relativo.

6 Resultados y Discusión

En la Tabla 2 se presentan los resultados de los problemas relajados que se ensayaron. En los casos P0 y P1, que se pudieron resolver hasta optimalidad con la RMP en el tiempo establecido (excepto para P1 con 5 particiones), se observa que la función objetivo tiende muy lentamente al óptimo global con los incrementos en la cantidad de particiones; sin embargo los tiempos de cómputo aumentan de manera significativa. Por esto último no fue viable realizar relajaciones con más de 5 particiones. Por otra parte, respecto de RDM se observa que con una precisión de 10^{-1} para la concentración el problema relajado converge al óptimo global, mientras que el problema P2 lo hace con una precisión de 10^{-2} dentro del tiempo establecido. En cambio P1 con una precisión de 10^{-2} obtiene una sobre-estimación de la función objetivo óptima y con mayor precisión no se encontró el óptimo dentro de el tiempo previsto.

Por medio de relajación basada en descomposición multiparamétrica se obtuvo la convergencia al óptimo global en los problemas P0 y P2 dentro del tiempo estipulado, y para el P1 se obtuvo una cota para la función objetivo óptima con un error relativo de 0,001. Mientras que la relajación basada en partición del dominio y envolturas de McCormick sólo se obtuvo la solución óptima, en el tiempo establecido, en el problema P0. Para los problemas P1 y P2 las mejores cotas obtenidas RMP tuvieron un error relativo de 0,03 en ambos casos, es decir un orden de magnitud mayor a la obtenida por RDM.

En la Tabla 3 se presentan la cantidad de restricciones y variables que resultan luego del preprocesamiento del modelo. Se puede observar que para la RMP, un incremento de subdominios en el particionado univariado aumenta el número de variables binarias y restricciones, en forma aproximadamente lineal. La comparación entre los problemas P0 y P1 con P2, que se diferencian principalmente en que los primeros poseen 3 períodos y el último tiene 4, muestra que para ambas aproximaciones ocurre un incremento de aproximadamente 33% en la cantidad de variables y restricciones, lo que está de acuerdo a lo antes expuesto sobre la proporcionalidad del tamaño del modelo respecto de la cantidad de períodos. En la figura (2) se observa el máximo número de binarias que pueden requerir problemas similares a los abordados, pero con un número creciente de tanques de mezclado. Estas cantidades de binarias fueron calculadas con las formulas presentadas en la tabla (1), suponiendo dos problemas hipotéticos en el que todos los tanques de mezclado se conectan entre si (caso más desfavorable). El problema hipotético 2S-2D-3P-2Q tiene en cuenta 2 características de calidad, 2 tanques de suministro, 2 de demanda y entre 4 y 16 de mezclado, con 3 periodos de tiempo. Mientras que el problema 2S-2D-4P-2Q difiere únicamente en que posee 4

periodos de tiempo. Al igual que lo observado en el cuadro (3), también en la figura se encuentra una proporcionalidad entre la cantidad de binarias y la cantidad de periodos, para ambos modelos. En tanto que se distingue en el caso de la RMP un incremento relativo mucho más grande en la cantidad de variables binarias al aumentar el número de tanques de un problema, que el que experimenta la RDM.

Tabla 2: Resultados obtenidos mediante relajaciones RDM y RMP

Problema	RDM (con precisión 10^p)		RMP (con N particiones)				
		p= -1	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
P0	Func. Obj. MIP	13,5268	14,3266	14,0109	13,6450	13,6450	13,5268
Opt. gob. 13,5268	Tiempo MIP [s]	30,2	0,23	2,3	37,5	50,8	5687
	GAP MIP	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %
	Error Relativo	0,000	0,056	0,035	0,009	0,009	0,000
P1		p= -2	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
	Func. Obj. MIP	45,3412	47,4912	47,2235	47,2589	46,7141	46,0977
Opt. gob. 45,2966	Tiempo MIP [s]	2870	0,25	1,8	66,9	1572	18002
	GAP MIP	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %	0,00 %	1,74 %
	Error Relativo	0,001	0,046	0,041	0,042	0,030	0,017
P2		p= -2	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
	Func. Obj. MIP	9,2266	9,7058	9,5125	9,4462	9,2120	9,2148
Opt. gob. 9,2266	Tiempo MIP [s]	3601	1371	506	14409	18002	18004
	GAP MIP	0,00 %	0,00 %	0,00 %	1,70 %	11,28 %	15,34 %
	Error Relativo	0,000	0,049	0,030	0,023	-0,002	-0,001

Tabla 3: Estadísticas para los distintos modelo.

Problema	RDM (con precisión 10^p)		RMP (con N particiones)				
		p= -1	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
P0	Restricciones	9749	655	1295	2023	2335	3271
	Variables Continuas	8442	214	222	222	222	222
	Variables Binarias	1513	73	177	385	489	593
P1		p= -2	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
	Restricciones	9661	636	1279	2005	2631	3257
	Variables Continuas	8383	214	223	223	223	223
	Variables Binarias	1512	72	176	384	488	592
P2		p= -2	N= 1	N= 2	N= 3	N= 4	N= 5
	Restricciones	12661	916	1849	2913	3825	4737
	Variables Continuas	10942	301	310	310	310	310
	Variables Binarias	2015	95	247	551	703	855

Los problemas resueltos a optimalidad global fueron del tamaño que podría presentarse en una pequeña refinería, para estos modelos se reportaron convergencias muy lentas con la utilización de resolutores globales comerciales [11]. El modelado mediante RMP expresado en forma disyuntiva es más sencillo de interpretar al RDM,

pero su implementación fue igual de compleja, ya que se lo tradujo a un MILP mediante restricciones Big-M. Los rendimientos computacionales fueron mucho mejores en el caso del modelo RDM. Por otra parte, la complejidad de realizar la implementación de estos modelos en el lenguaje de modelado GAMS es relativamente baja, ya que se realiza en base al modelo MINLP, reemplazando la única ecuación que contiene términos bilineales por un conjunto de ecuaciones lineales, posibilitando obtener soluciones globales de un problema con muchas no-convexidades. Por lo tanto, los modelos RDM poseen una mejor relación entre costo computacional y complejidad de implementación.

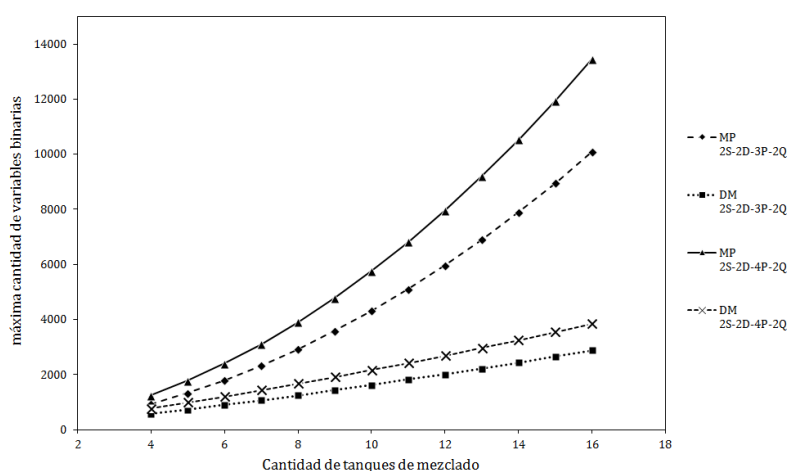


Figura 2: Cantidad máxima de binarias en función del número de tanques de mezclado.

7 Conclusiones

En este artículo se contrastó el desempeño de las relajaciones RMP y RDM en el problema de Programación de Mezclado Multiperíodo, comparando su costo computacional y el ajuste de las soluciones obtenidas.

En los problemas analizados, el rendimiento de la RMP fue peor que el obtenido con RDM, aún cuando la cantidad de restricciones, variables continuas y binarias de RMP fueron apenas una fracción de las utilizadas por RDM. Lo cual indica que el problema generado mediante RMP es más complejo.

En el modelamiento de un nuevo problema de programación de mezclado multiperíodo que requiera la adición más tanques, periodos o características de calidad, el tamaño del problema formulado por RMP crecerá de manera exponencial por cada tanque añadido y linealmente por cada periodo o calidad agregada. En contraste, la relajación RDM incrementará linealmente el tamaño para cada tanque, periodo o característica de calidad adicionados.

Teniendo en cuenta las observaciones anteriores se considera que el enfoque de la relajación basada en desagregación multiparamétrica es más apto para la formulación de este tipo de problemas que la basada en envolturas de McCormick y particionado del dominio.

8 Agradecimientos

Este trabajo fue financiado con fondos del proyecto PIP 688 de CONICET.

References

1. Misener, R., Thompson, J. P., Floudas, C. A.: Apogee: Global optimization of standard, generalized, and extended pooling problems via linear and logarithmic partitioning schemes. *Comput. Chem. Eng.*, 35:876-892, 2011.
2. Faruque Hasan, M. M., Karimi, I. A.: Piecewise linear relaxation of bilinear programs using bivariate partitioning. *AIChE J.*, 56(7):1880-1893, 2010.
3. McCormick, G. P.: Computability of global solutions to factorable nonconvex programs: Part 1- convex underestimating problems. *Mathematical Programming*, 10:147-175, 1976.
4. Al-Khayyal F.A., Falk J.E.: Jointly constrained biconvex programming. *Math Oper Res.*, 8:273-286, 1983.
5. Ruiz, J. P., Grossmann, I. E.: Exploiting vector space properties to strengthen the relaxation of bilinear programs arising in the global optimization of process networks. *Optimization Letters*, 5:1-11, 2011.
6. Ruiz, J. P., Grossmann, I. E.: Strengthening of lower bounds in the global optimization of bilinear and concave generalized disjunctive programs. *Comput. Chem. Eng.*, 34:914-930, 2010.
7. Karuppiah, R., Grossmann, I. E.: Global optimization for the synthesis of integrated water systems in chemical processes. *Comput. Chem. Eng.*, 30:650-673, 2006.
8. Wicaksono, D. S., Karimi, I. A.: Piecewise milp under- and overestimators for global optimization of bilinear programs. *AIChE Journal*, 54:991-1008, 2008.
9. Kolodziej, S., Castro, P. M., Grossmann, I. E.: Global optimization of bilinear programs with a multiparametric disaggregation technique. *Journal of Global Optimization*, <http://dx.doi.org/10.1007/s10898-012-0022-1>, 2013.
10. Teles, J. P., Castro, P. M., Matos H. A.: Multiparametric Disaggregation Technique for Global Optimization of Polynomial Programming Problems. *J. Glob. Optim.* doi 10.1007/s10898-011-9809-8, 2011.
11. Kolodziej, S., Grossmann, I. E., Furman, K. C., Sawaya, N. W.: A discretization-based approach for the optimization of the multiperiod blend scheduling problem. *Comput. Chem. Eng.*, 53:122-142, 2013.
12. Brook, A., Kendrick, D., Meeraus, A.: GAMS: A user's guide. *The Scientific Press Series*, 1983.