PQI-5884 - Programação Inteira Mista aplicada à Otimização de Processos
3º Período 2020

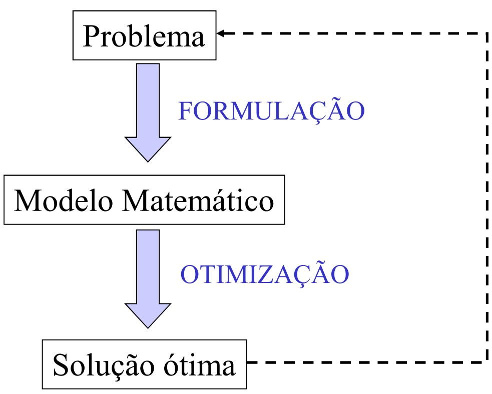
Data	Atividade	Conteúdo
17/09	Aula 1	Introdução, formulação, classes, representação
24/09	Aula 2	Condições de otimalidade
01/10	Aula 3	Condições KKT, multiplicadores
08/10	Aula 4	Otimização irrestrita
15/10	Aula 5	LP
22/10	Aula 6	NLP
29/10	Aula 7	MILP
05/10	Aula 8	MILP, problemas clássicos
12/11	Aula 9	MILP, problema de scheduling
19/11	Aula 10	MINLP, problema de síntese
26/11	Aula 11	Apresentações
03/12	-	-

Avaliação

M = 70% *P* + 30% *L*, sendo *P* médias de atividades e *L* nota da monografia

Otimização → Metodologia/Procedimento para melhora (projeto, sistema, decisão)

Abordagem deste curso: Programação Matemática



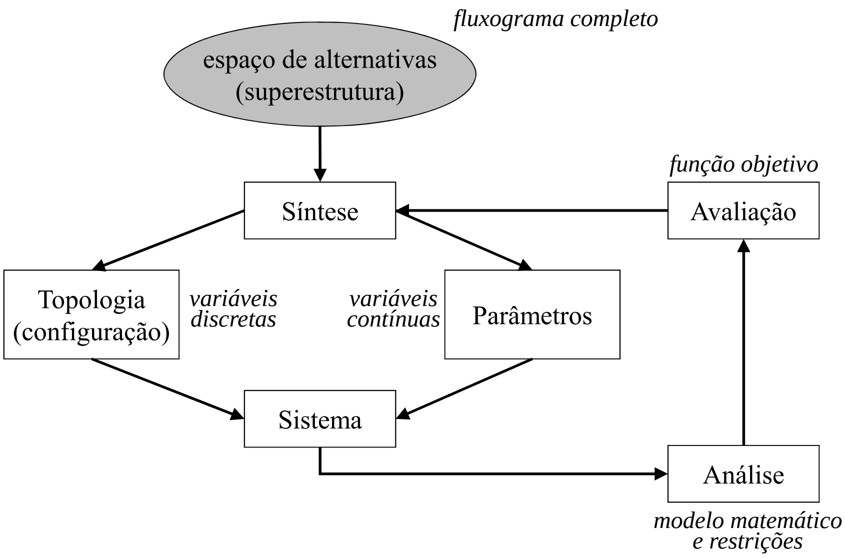
Conteúdo:

1) <u>Introdução</u>: Abordagem de programação matemática. Aplicações em processos químicos. Formulação. Graus de liberdade. Representações em árvore e rede. Conceitos básicos de otimização. Condições de Karush-Kuhn-Tucker.
2) <u>Otimização contínua</u>: Programação Linear (LP), algoritmo simplex. Programação não-linear (NLP), algoritmos de programação linear sucessiva (SLP), programação quadrática sucessiva (SQP) e gradiente reduzido generalizado (GRG). Estratégias para formulação de modelos.
3) <u>Otimização discreta</u>: Modelagem de decisões discretas usando variáveis binárias, lógica proposicional. Programação mista inteira e linear (MILP), problemas clássicos MILP, algoritmo branch & bound. Programação mista inteira e não-linear (MINLP), algoritmos de decomposição.
4) <u>Aplicações em otimização de processos</u>: Planejamento e programação de produção (planning and scheduling). Síntese de processos (process synthesis).

Otimização:
Aplicações em Processos Químicos

1) Projeto
2) Síntese
3) Planejamento e programação
4) Controle e operação
5) Ajuste de modelos

Síntese de processos



Formulação em Programação Matemática

min $f(\underline{x},\underline{y})$		função objetivo escalar	
sujeito a:	$\underline{h}(\underline{x},\underline{y}) = 0$	m equações	restrições
	$\underline{g}(\underline{x},\underline{y}) \leq 0$	r inequações	
	$\underline{x} \in X$	n variáveis contínuas	
	$\underline{y} \in Y$	d variáveis discretas	

- Minimizar(f) equivalente à maximizar($-f$)
- Restrições definem um espaço de dimensão NGL
- Caso contínuo: NGL = n - m

Múltiplos objetivos?

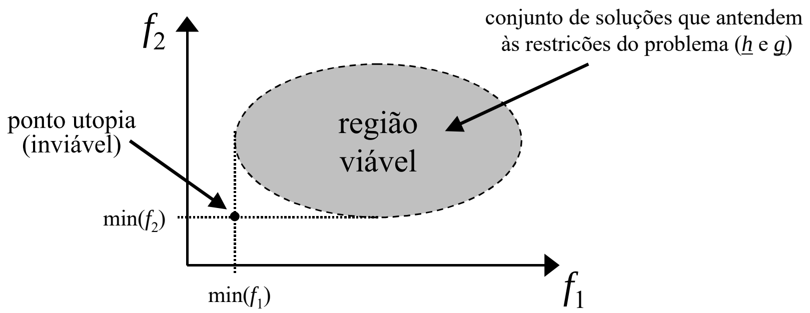
$$\min f_1(\underline{x},\underline{y}),\ f_2(\underline{x},\underline{y}),\ \dots\ f_s(\underline{x},\underline{y})$$

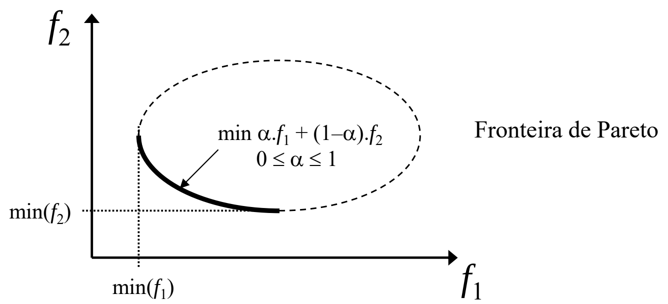
a) Escolher um objetivo principal e restringir os outros objetivos a valores toleráveis:

$$\min z = f_q(\underline{x},\underline{y})$$
$$\text{s.a.}\ \ f_i(\underline{x},\underline{y}) \le f_i^{UP} \qquad i = 1, 2, \dots s;\ \text{com } i \ne q$$

b) Ponderar os objetivos em uma função única

$$\min z = \sum_{i=1}^{s} w_i \cdot f_i\ (\underline{x},\underline{y})$$





Classes de problemas de programação matemática

Classe	Função objetivo e restrições (f, g e h)	Variáveis (x e y)	Algumas opções de solução	OBS
LP Linear Programming	lineares	contínuas	- Simplex - Métodos de ponto interior	Solução (vértice da região viável) é o ótimo global, pois o problema é convexo
MILP Mixed-Integer Linear Programming		contínuas e discretas	- Branch and bound - Planos cortantes	
NLP Non-Linear Programming	lineares e não-lineares	contínuas	- Condições de Kuhn-Tucker - Gradiente reduzido generalizado - Programação quadrática sucessiva	Solução é um ótimo local. Será o ótimo global se o problema for convexo.
MINLP Mixed-Integer Non-Linear Programming		contínuas e discretas	- Outer approximation - Generalized Benders decomposition	

Exemplo de Formulação (pág.6)

Desejo investir R$ 1.000,00. Posso investir em Poupança (0,5 % ao mês) ou em CDB (0,6 % ao mês).

Definir variáveis e unidades:

x_1 = valor investido em poupança (R$)

x_2 = valor investido em CDB (R$)

Definir função objetivo: Retorno após 1 mês (R$)

Maximizar: $R = 0{,}005.\ x_1 + 0{,}006.\ x_2$

Definir restrições:

$x_1 + x_2 = 1000$

$x_1 \geq 0 \qquad x_1 \in \Re^1$

$x_2 \geq 0 \qquad x_2 \in \Re^1$

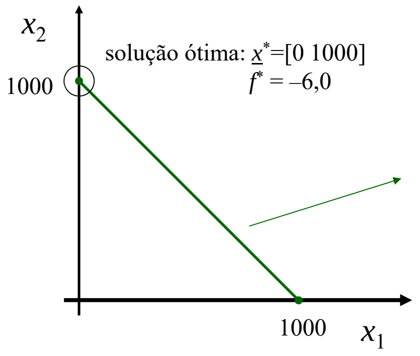
min $\quad f(\underline{x}) = -\,0{,}005.x_1 - 0{,}006.x_2$

s.a. $\quad h_1(\underline{x}): \quad x_1 + x_2 - 1000 = 0$

$g_1(\underline{x}): \quad -x_1 \le 0$

$g_2(\underline{x}): \quad -x_2 \le 0$

$x_1, x_2 \in \Re^1$



Região viável, espaço
de dimensão NGL = 2 – 1 = 1
Contém infinitas soluções
para o problema

min $\quad f(\underline{x}) = -\,0{,}005.x_1 - 0{,}006.x_2$

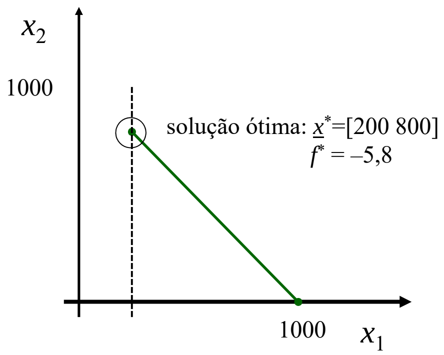
s.a. $\quad h_1(\underline{x}): \quad x_1 + x_2 - 1000 = 0$

$g_1(\underline{x}): \quad -x_1 \le 0$

$g_2(\underline{x}): \quad -x_2 \le 0$

$g_3(\underline{x}): \quad -x_1 + 200 \le 0$

Nova restrição:
Mínimo de R$200 em poupança

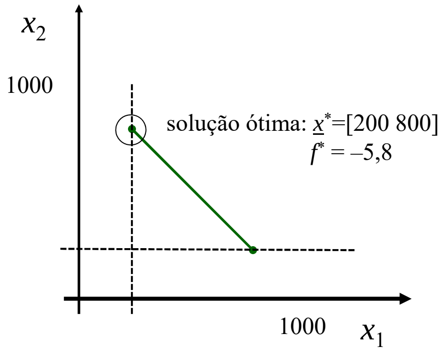


g_3: restrição ativa

g_1 e g_2: restrições inativas

$$
\begin{array}{lll}
\min & f(\underline{x}) = -\,0{,}005.x_1 - 0{,}006.x_2 & \\
s.a. & h_1(\underline{x}): & x_1 + x_2 - 1000 = 0 \\
 & g_1(\underline{x}): & -\,x_1 \le 0 \\
 & g_2(\underline{x}): & -\,x_2 \le 0 \\
 & g_3(\underline{x}): & -\,x_1 + 200 \le 0 \\
 & g_4(\underline{x}): & -\,x_2 + 200 \le 0
\end{array}
$$

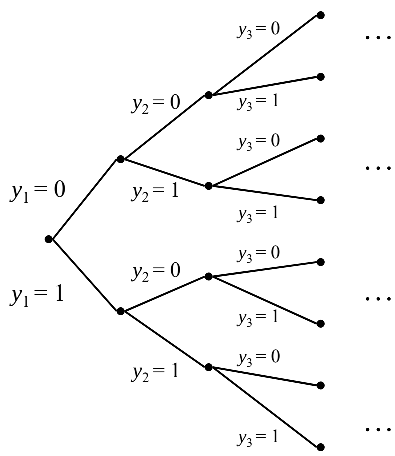
Nova restrição:
Mínimo de R$200 em CDB



g_3: restrição ativa
g_1, g_2 e g_4: restrições inativas

Representação de problemas inteiro mistos

Árvore: Variáveis binárias



Representação de problemas misto-inteiros

Rede: Super-estrutura

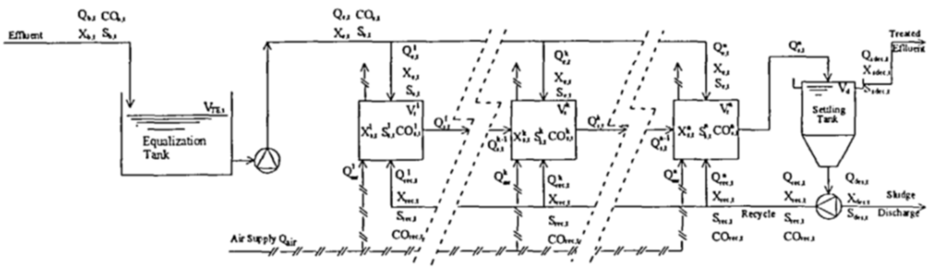
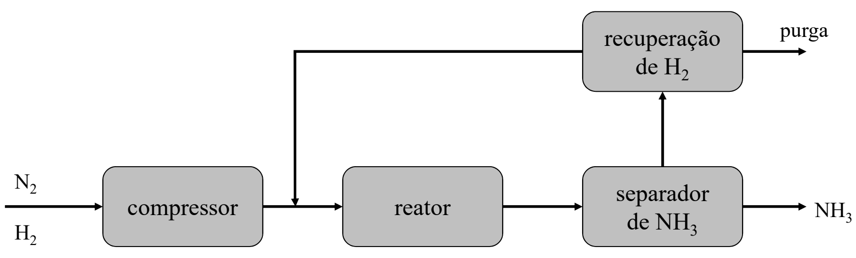


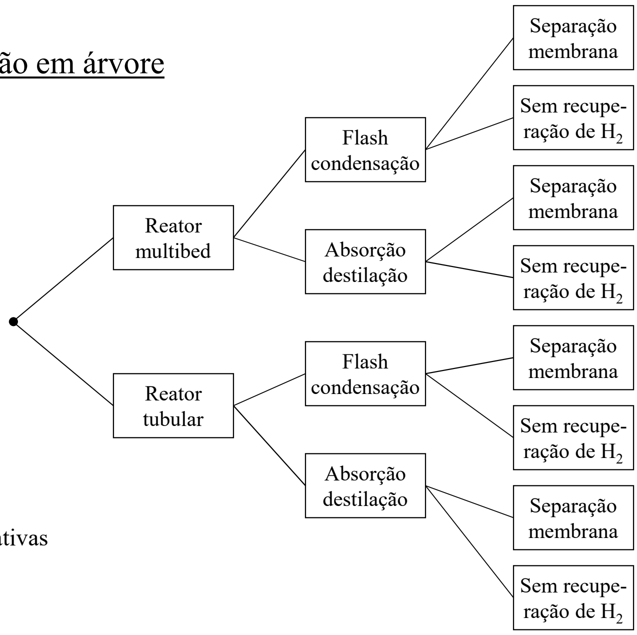
Figure 2 - Activated sludge treatment plant with cell representation of the aeration tank

Exemplo: Planta de tratamento de efluentes por lodo ativado
(Gouveia e Pinto, 1999)

Produçao de amônia: principais componentes



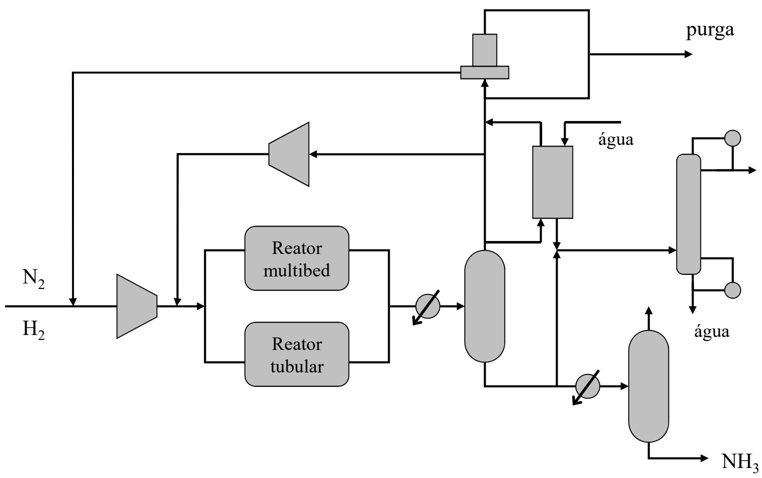
Representação em árvore



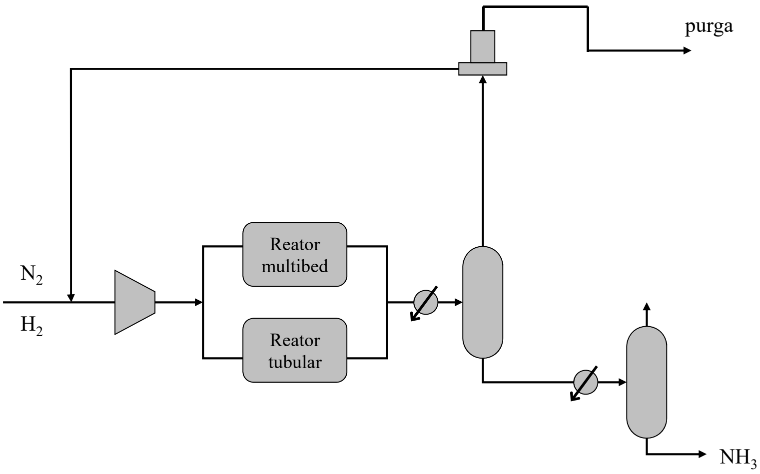
$2^3 = 8$ alternativas

Decisão: 1 2 3

Representação em rede (superestrutura)

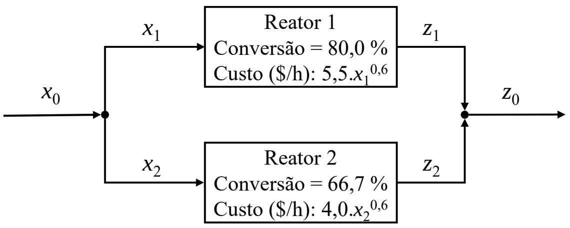


Uma possível solução:



Exemplo: Seleção de Reatores (pág.14)

Deseja-se fabricar o produto B com uma produção de 10 kmol/h, a partir da matéria-prima A (custo de 5,0 \$/kmol). Tem-se dois reatores disponíveis, já existentes: 1 e 2. O reator 1 tem um custo operacional maior, mas fornece uma conversão molar de 80,0% de A em B, enquanto o reator B tem menor custo operacional e conversão de 66,7%.



Variáveis contínuas positivas definidas para a modelagem:

x_0	entrada do reagente A (kmolA/h)
x_1	alimentação do reator 1 (kmolA/h)
x_2	alimentação do reator 2 (kmolA/h)
z_1	produção do reator 1 (kmolB/h)
z_2	produção do reator 2 (kmolB/h)
z_0	saída do produto B (kmolB/h)

Modelagem

Função objetivo: custo operacional ($/h)

c = custo op. reator 1 + custo op. reator 2 + custo de A

$c = c_1 + c_2 + c_A$

$c = 5,5.x_1^{0,6} + 4,0.x_2^{0,6} + 5,0.x_0$

Modelagem do processo:

$x_0 = x_1 + x_2$	balanço de A na derivação
$z_0 = z_1 + z_2$	balanço de B na mistura
$z_1 = 0,800.x_1$	conversão no reator 1
$z_2 = 0,667.x_2$	conversão no reator 2

Restrição de demanda:

$z_0 = 10$

Formulação NLP - Programação Não Linear

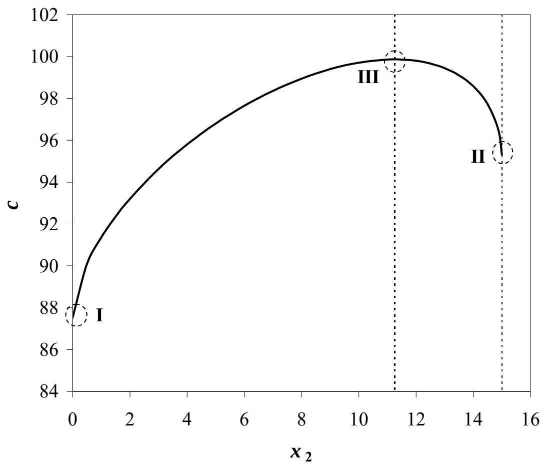
$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & c = 5,5.x_1^{0,6} + 4,0.x_2^{0,6} + 5,0.x_0 \\
\text{s.a.:} \quad & x_0 - x_1 - x_2 = 0 \\
& z_0 - z_1 - z_2 = 0 \\
& z_1 - 0,800.x_1 = 0 \\
& z_2 - 0,667.x_2 = 0 \\
& z_0 - 10 = 0 \\
& x_0, x_1, x_2, z_0, z_1, z_2 \geq 0, \in \Re^1
\end{aligned}
$$

NGL = 6 – 5 = 1

Formulação NLP

min $\quad c = 5{,}5.(12{,}5 - 0{,}83.x_2)^{0,6} + 4{,}0.x_2^{0,6} + 5{,}0.(12{,}5 + 0{,}17.x_2)$

s.a. $\quad x_2 \geq 0$



I) Usar reator 1 (mínimo global)

II) Usar reator 2 (mínimo local)

III) Usar reatores 1 e 2 (máximo global)