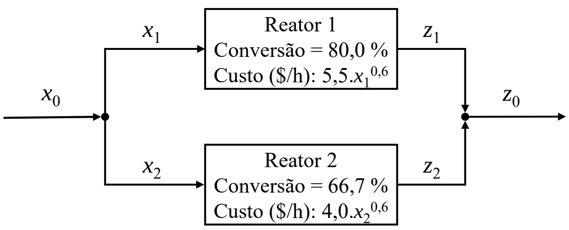
PQI-5884 - Programação Inteira Mista aplicada à Otimização de Processos
3º Período 2020

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	-	-

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)

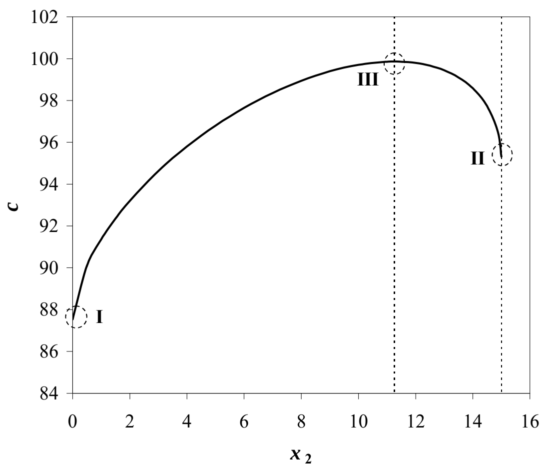
Formulação NLP - Programação Não Linear

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

NGL = 6 – 5 = 1

Formulação NLP

$$
\begin{array}{ll}
\text{min} & c = 5{,}5.(12{,}5 - 0{,}83.x_2)^{0{,}6} + 4{,}0.x_2^{0{,}6} + 5{,}0.(12{,}5 + 0{,}17.x_2) \\
\text{s.a.} & x_2 \geq 0
\end{array}
$$



I) Usar reator 1 (mínimo global)

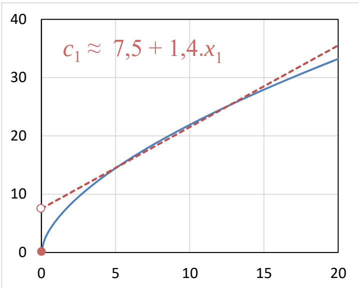
II) Usar reator 2 (mínimo local)

III) Usar reatores 1 e 2 (máximo global)

Formulação MILP - Programação Linear Inteira Mista

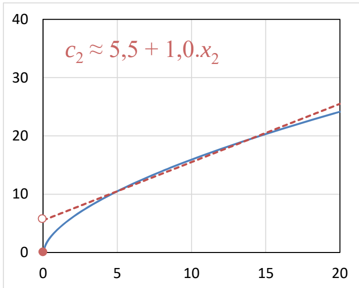
Linearização dos custos

Reator 1: $c_1 = 5{,}5.x_1^{0{,}6}$



$c_1 = 7{,}5.y_1 + 1{,}4.x_1$

Reator 2: $c_2 = 4{,}0.x_2^{0{,}6}$



$c_2 = 5{,}5.y_2 + 1{,}0.x_2$

$c_1 = 7{,}5.y_1 + 1{,}4.x_1$

$y_1 = \{1, 0\}$
Usar ou não reator 1

$0 \le x_1 \le 20.y_1$

$y_1 = 1$: $0 \le x_1 \le 20$, $c_1 = 7{,}5 + 1{,}4.x_1$

$y_1 = 0$: $x_1 = 0$, $c_1 = 0$

$c_2 = 5{,}5.y_2 + 1{,}0.x_2$

$y_1 = \{1, 0\}$
Usar ou não reator 2

$0 \le x_2 \le 20.y_2$

$y_2 = 1$: $0 \le x_2 \le 20$, $c_2 = 5{,}5 + 1{,}0.x_2$

$y_2 = 0$: $x_2 = 0$, $c_2 = 0$

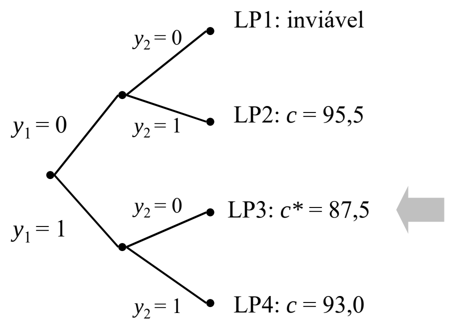
Restrição lógica: $y_1 + y_2 \ge 1$

Formulação MILP

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & c = (7{,}5.y_1 + 1{,}4.x_1) + (5{,}5.y_2 + 1{,}0.x_2) + 5{,}0.x_0 \\
\text{s.a.:} \quad & x_0 - x_1 - x_2 = 0 \\
& z_0 - z_1 - z_2 = 0 \\
& z_1 - 0{,}800.x_1 = 0 \\
& z_2 - 0{,}667.x_2 = 0 \\
& z_0 - 10 = 0 \\
& x_1 - 20.y_1 \le 0 \\
& x_2 - 20.y_2 \le 0 \\
& 1 - y_1 - y_2 \le 0 \\
& x_0, x_1, x_2, z_0, z_1, z_2 \ge 0, \in \Re^1 \\
& y_1, y_2 = \{0, 1\}
\end{aligned}
$$

MILP

$$
\begin{aligned}
\text{min} \quad & c = 7{,}5.y_1 + 6{,}4.x_1 + 5{,}5.y_2 + 6{,}0.x_2 \\
\text{s.a.} \quad & 0{,}800.x_1 + 0{,}667.x_2 = 10 && \text{balanço de massa} \\
& \left.\begin{array}{l} x_1 - 20.y_1 \le 0 \\ x_2 - 20.y_2 \le 0 \end{array}\right\} && y=0 \Rightarrow x=0 \\
& y_1 + y_2 \ge 1 && \text{lógica} \\
& x_1, x_2 \ge 0 \\
& y_1, y_2 = \{0, 1\}
\end{aligned}
$$



Conceitos Básicos de Otimalidade

pág.17

Problema NLP

min	$f(\underline{x})$	função objetivo escalar	
s.a.:	$\underline{h}(\underline{x}) = 0$	m equações	restrições
	$\underline{g}(\underline{x}) \leq 0$	r inequações	
	$\underline{x} \in \Re^n$	n variáveis contínuas	

Região viável do problema:
Espaço F = $\{\underline{x} \mid \underline{x} \in \Re^n, \underline{h}(\underline{x}) = 0, \underline{g}(\underline{x}) \leq 0\}$

$f(\underline{x})$ é função convexa?
F é um espaço convexo?

Hessiano de $f(\underline{x})$:

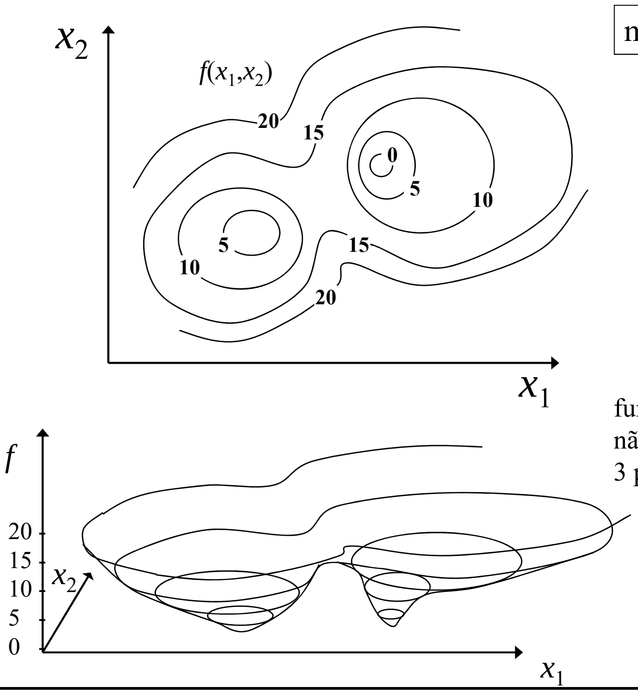
$$\underline{\underline{H}}(f) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f}{\partial x_1 x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_1 x_2} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_1 x_n} \\ \frac{\partial f}{\partial x_2 x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_2 x_2} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_2 x_n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f}{\partial x_n x_1} & \frac{\partial f}{\partial x_n x_2} & \cdots & \frac{\partial f}{\partial x_n x_n} \end{bmatrix}$$

matriz quadrada simétrica

Sinal de uma matriz quadrada

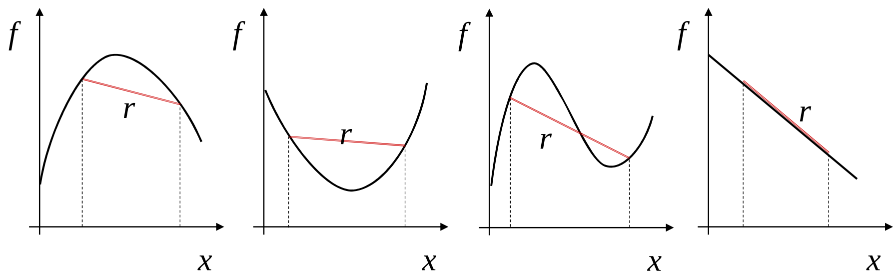
Matriz H	Condição	Autovalores
Positiva definida	$\underline{x}^T.\underline{\underline{H}}.\underline{x} > 0$, para $\forall\ \underline{x} \neq 0$	$\lambda'_i > 0$
Positiva semi-definida	$\underline{x}^T.\underline{\underline{H}}.\underline{x} \geq 0$, para $\forall\ \underline{x} \neq 0$	$\lambda'_i \geq 0$
Negativa definida	$\underline{x}^T.\underline{\underline{H}}.\underline{x} < 0$, para $\forall\ \underline{x} \neq 0$	$\lambda'_i < 0$
Negativa semi-definida	$\underline{x}^T.\underline{\underline{H}}.\underline{x} \leq 0$, para $\forall\ \underline{x} \neq 0$	$\lambda'_i \leq 0$
Indefinida		

min $f(x_1,x_2)$



função objetivo
não convexa
3 pts estacionários

Convexidade de função, exemplos em $\Re^1$

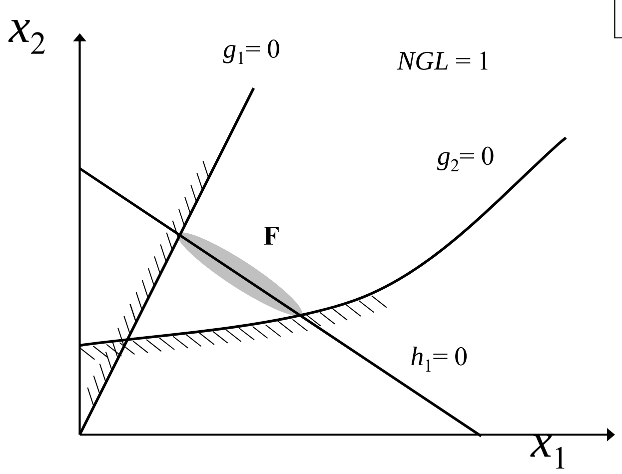


Estritamente côncava	Estritamente convexa	Concavidade indefinida	Convexa ou côncava
$\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} < 0$	$\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} > 0$		$\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} = 0$

Ponto estacionário: $\dfrac{\partial f}{\partial x} = 0$

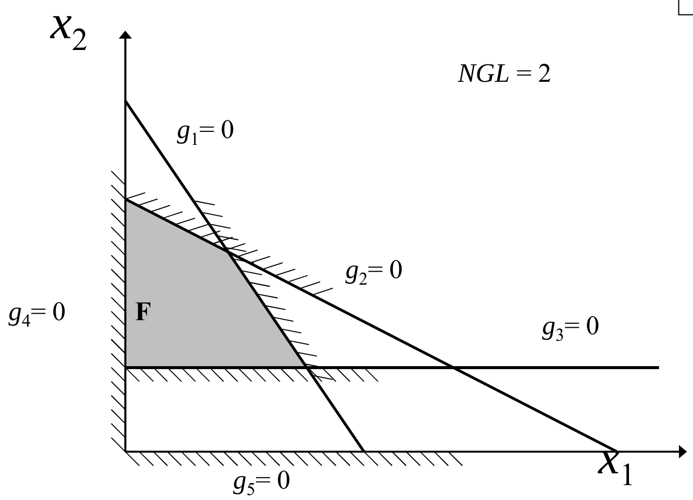
Região Viável (exemplo 1)

min $f(x_1, x_2)$
s.a.: $h = 0$
$g_1 \leq 0$
$g_2 \leq 0$



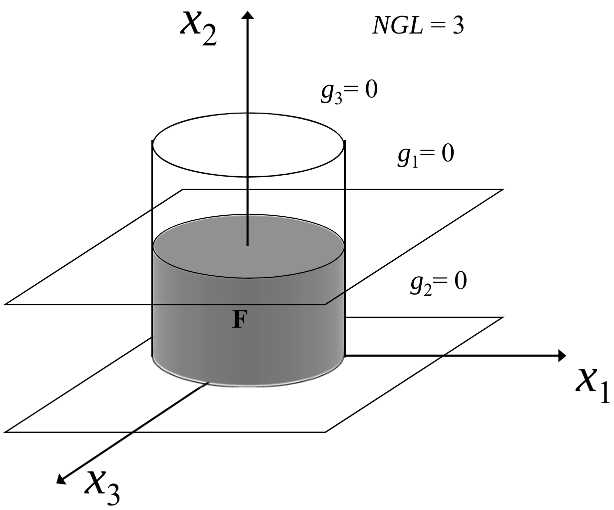
Região Viável (exemplo 2)

min $f(x_1,x_2)$
s.a.: $g_i \leq 0$
$i = 1, 2 \ldots 5$



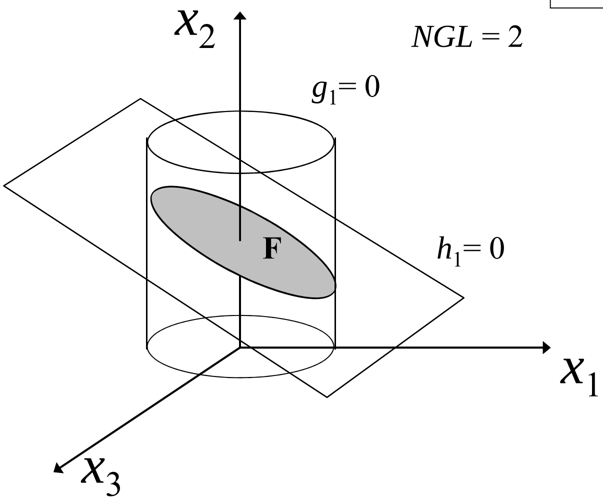
Região Viável (exemplo 3)

min $f(x_1,x_2,x_3)$
s.a.: $g_i \leq 0$
$i = 1, 2, 3$

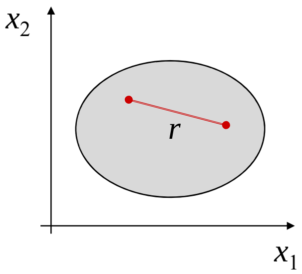


Região Viável (exemplo 4)

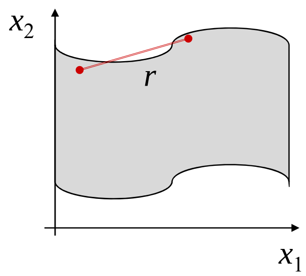
min $f(x_1,x_2,x_3)$
s.a.: $h_1 = 0$
$g_1 \leq 0$



Convexidade de espaço, exemplos em $\Re^2$



Convexo



Não convexo

Importante: Se $\underline{h}(\underline{x}) = 0$ é linear e $\underline{g}(\underline{x}) \leq 0$ é convexa (linear ou não linear), então F é uma região viável convexa.

II.3. Condições de Otimalidade

II.3.1. Problema de otimização sem restrições

Seja o problema de otimização:

min $\quad f(\underline{x})$
sujeito a: $\quad \underline{x} \in \Re^n$

Condição necessária para um mínimo local $\underline{x}^*$

$$\nabla f(\underline{x}^*) = \underline{0}$$

Condição suficiente para um mínimo local $\underline{x}^*$

$\underline{\underline{H}}(f(\underline{x}^*))$ deve ser positiva definida

II.3.2. Problema de otimização com restrições de igualdade

Seja o problema de otimização:

min $\quad f(\underline{x})$
sujeito a: $\quad \underline{h}(\underline{x}) = 0 \qquad$ *m* equações
$\quad \underline{x} \in \Re^n$

Condições necessárias para um mínimo local $\underline{x}^*$

$$\nabla f\left(\underline{x}^*\right) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j . \nabla h_j\left(\underline{x}^*\right) = 0 \qquad \textit{dependência linear de gradientes}$$

$$\underline{h}\left(\underline{x}^*\right) = 0 \qquad \textit{viabilidade}$$

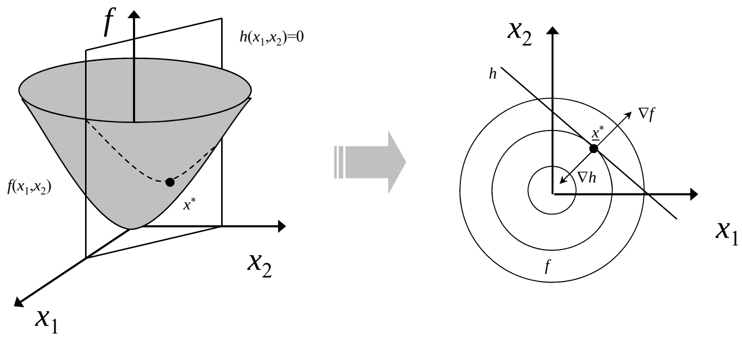
Condição suficiente para um mínimo local $\underline{x}^*$

$\underline{\underline{H}}_{xx}(L(\underline{x}^*,\underline{\lambda}))$ deve ser positiva definida

sendo $L(\underline{x},\underline{\lambda}) = f(\underline{x}) + \Sigma\, \lambda_j.h_j(\underline{x})$ a função Lagrangeano

Exemplo de dependêcia linear de gradientes:

min $f(x_1,x_2)$
s.a.: $h = 0$



II.3.3. PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO COM RESTRIÇÕES DE DESIGUALDADE

Seja o problema de otimização:

r inequações

min $f(\underline{x})$

sujeito a: $\underline{g}(\underline{x}) \leq 0$

$\underline{x} \in \Re^n$

Condições necessárias para um mínimo local $\underline{x}^*$

$$\nabla f\left(\underline{x}^*\right) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j . \nabla g_j\left(\underline{x}^*\right) = 0$$ *dependência linear de gradientes*

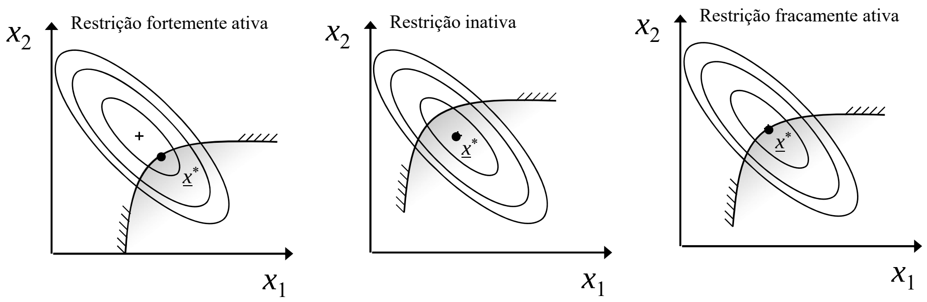
$$\mu_j . g_j\left(\underline{x}^*\right) = 0 \qquad \mu_j \geq 0$$ *complementariedade*

Condição suficiente para um mínimo local $\underline{x}^*$

$\underline{\underline{H}}_{xx}(L(\underline{x}^*,\underline{\mu}))$ deve ser positiva definida

sendo $L(\underline{x},\underline{\mu}) = f(\underline{x}) + \Sigma\, \mu_j . g_j(\underline{x})$ a função Lagrangeano

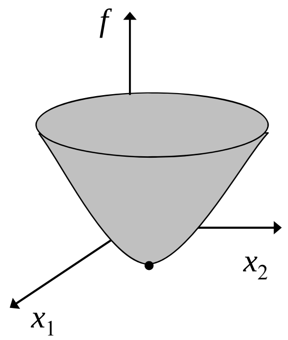
min $f(x_1,x_2)$
s.a.: $g \leq 0$

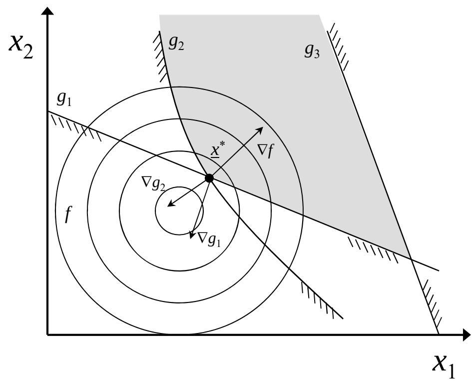


Classificação:

a)	$g(\underline{x})$ ativa (fortemente)	$g_j(\underline{x}^*) = 0$	e	$\mu_j > 0$
b)	$g(\underline{x})$ ativa (fracamente)	$g_j(\underline{x}^*) = 0$	e	$\mu_j = 0$
c)	$g(\underline{x})$ inativa	$g_j(\underline{x}^*) < 0$	e	$\mu_j = 0$

min $f(x_1,x_2)$
s.a.: $g_i \leq 0$
$i = 1, 2, 3$





Condições KKT (Karush-Kuhn-Tucker)

1- Dependência linear dos gradientes

$$\nabla f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^{m} \lambda_j . \nabla h_j(\underline{x}) + \sum_{j=1}^{r} \mu_j . \nabla g_j(\underline{x}) = 0$$

λ_j : multiplicadores de Lagrange
μ_j : multiplicadores de Kuhn-Tucker

2 - Viabilidade das restrições

$h_j(\underline{x}) = 0 \qquad 1 \le j \le m$

3 - Condições de complementaridade

$\mu_j . g_j(\underline{x}) = 0 \qquad 1 \le j \le r$
$\mu_j \ge 0$

sistema não-linear de
$n + m + r$ equações e variáveis

Solução:
ponto KKT (mínimo local)

verificar convexidade

25