PQI-5884 - Programação Inteira Mista aplicada à Otimização de Processos
3º Período 2023

Data	Atividade	Conteúdo
14/set	Aula 1	Introdução, formulação, classes, representação
21/set	Aula 2	Condições de otimalidade
28/set	Aula 3	Condições KKT, multiplicadores
06/out*	Aula 4	Otimização irrestrita
19/out	Aula 5	LP
26/out	Aula 6	NLP
09/out	Aula 7	MILP
16/nov	Aula 8	MILP, problemas clássicos
23/nov	Aula 9	MILP, problema de scheduling
30/nov	Aula 10	MINLP, problema de síntese
07/dez	-	Apresentações

Avaliação

M = 70% P + 30% L, sendo P médias de atividades e L nota da monografia
(Monografia 20% trabalho + 10% apresentação)
(atividades: exercícios semanais no Moodle, total de 10)

Atividades semanais

- Após cada aula serão fornecidos exercícios para estudo.
- Dentre eles, alguns para entrega e avaliação.
- A entrega será feita no sistema Moodle eDisciplinas.
- Entrega individual.
- Resolução do exercício organizada (enunciado, desenvolvimento, solução), feita a mão ou no computador.
- Código de programação organizado e comentado.

Trabalho final do curso (Monografia)

- Escolher um **artigo publicado em revista científica indexada** que faça uso de programação matemática (LP, NLP, MILP, MINLP) para resolver um problema de otimização. Preferencialmente uma publicação ligada à sua pesquisa.
- O artigo selecionado deve ser enviado no máximo até a aula 7 (09/out) para aprovação.
- Com base no conteúdo deste curso, apresente um caso de otimização desta publicação, organizado em: 1) Apresentação do problema, 2) Modelagem e otimização, 3) Resultados e discussão.
- Entrega da monografia até a aula 10 (30/nov).
- Apresentações (15 min + 5 min perguntas) em 07/dez. Entrega do arquivo da apresentação.

Bibliografia

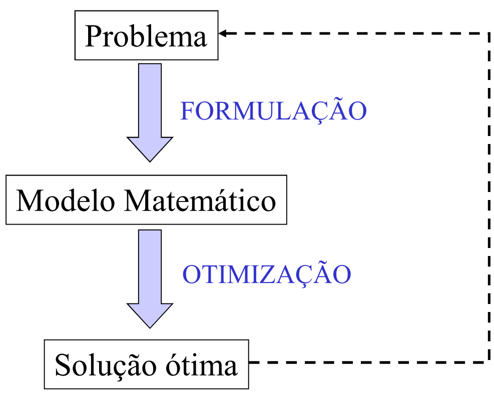
- **Livro Texto:** Gut, J.A.W. Programação matemática para otimização de processos. Edusp, 2021.
- Avriel, M.; Golany, B. Mathematical Programming for Industrial Engineers. Marcel Dekker, 1996.
- Bazaraa, M.S.; Jarvis, J.J.; Sherali, H.D. Linear Programming and Network Flows. 4.ed. Wiley, 2010.
- Bazaraa, M.S.; Sherali, H.D.; Shetty, C.M. Nonlinear Programming. 3.ed. Wiley, 2006.
- Biegler, L.T. Nonlinear Programming, Society for Industrial and Applied Mathematics, 2010.
- Biegler, L.T.; Grossmann, I.E.; Westerberg, A.W. Systematic Methods of Chemical Process Design. Prentice Hall, 1997.
- Chong, E.K.P.; Zak, S.H. An Introduction to Optimization. 2.ed. John Wiley & Sons, 2001.
- Edgar, T.F.; Himmelblau, D.M.; Lasdon, L.S. Optimization of Chemical Processes. 2.ed. McGraw-Hill, 2001.
- Fletcher, R. Practical Methods of Optimization. 2.ed. Chichester, Wiley, 2000.
- Floudas, C.A. Nonlinear and Mixed-Integer Optimization. Oxford University Press, 1995.
- Gill, P.E.; Murray, W.; Wright, M.W. Practical Optimization. Elsevier, 2004.
- Minoux, M. Mathematical Programming. Wiley, 1986.
- Nash, S.G.; Sofer, A. Linear and Nonlinear Programming. McGraw-Hill, 1996.
- Nemhauser, G.L.; Rinnooy-Kan, A.H.G.; Todd, M.J. Handbooks In Operations Research And Management Science 1: Optimization. Elsevier, 1989.
- Nemhauser, G.L.; & Wolsey, L.A. Integer and Combinatorial Optimization. Wiley, 1999.
- Rao, S.S. Engineering Optimization: Theory and Practice. 4.ed. Wiley, 2009.
- Ravindran, A.; Ragsdell, K.M.; Reklaitis, G.V. Engineering Optimization. 2.ed. John Wiley & Sons, 2006.
- Taha, H.A. Operations Research: An Introduction. 9.ed. Prentice Hall, 2011.
- Turton, R.; Bailie, R.C.; Whiting, W.B.; Shaeiwitz, J.A. Analysis, Synthesis and Design of Chemical Processes. 4.ed. Prentice Hall, 2012.
- Winston, W.L. Introduction to Mathematical Programming: Applications and Algoritms. 2.ed. Duxbury, 1995.
- Winston, W.L. Operations Research: Applications and Algorithms. 4.ed. Thomson Books, 2004.

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

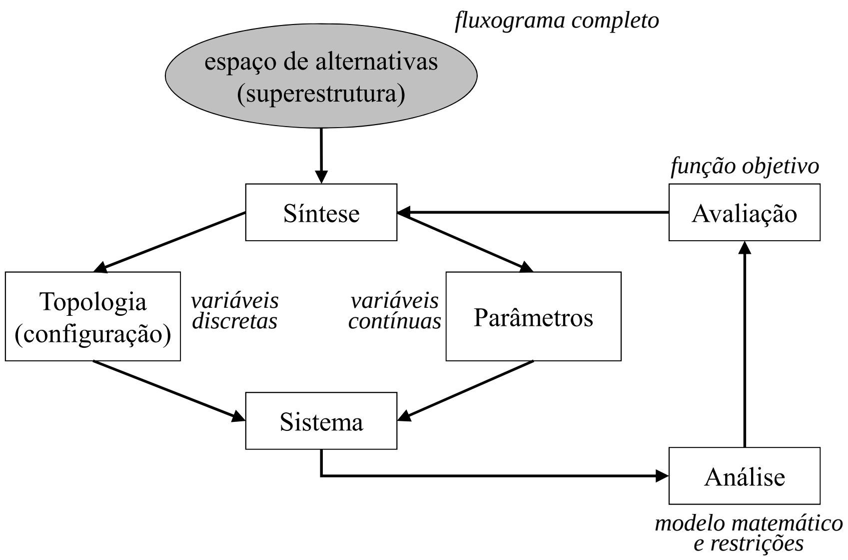
Abordagem deste curso: Programação Matemática



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

$$
\begin{array}{lll}
\min f(\underline{x},\underline{y}) & & \text{função objetivo escalar} \\
\text{sujeito a:} & \underline{h}(\underline{x},\underline{y}) = 0 & m \text{ equações} \\
 & \underline{g}(\underline{x},\underline{y}) \leq 0 & r \text{ inequações} \\
 & \underline{x} \in X & n \text{ variáveis contínuas} \\
 & \underline{y} \in Y & d \text{ variáveis discretas}
\end{array}
\left.\vphantom{\begin{array}{l}a\\a\\a\\a\end{array}}\right\}\ \text{restrições}
$$

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

Múltiplos objetivos?

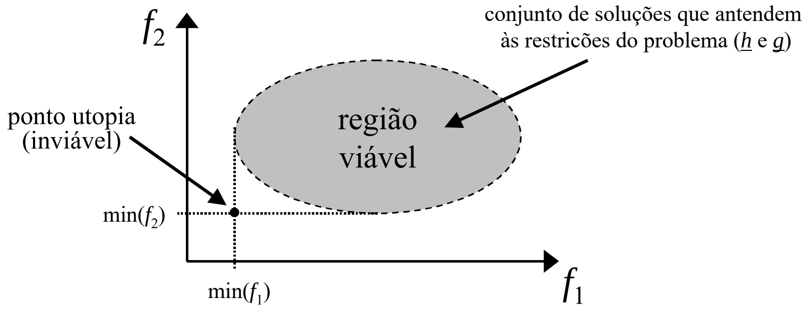
$$\min f_1(\underline{x},\underline{y}),\ f_2(\underline{x},\underline{y}),\ \ldots\ f_s(\underline{x},\underline{y})$$

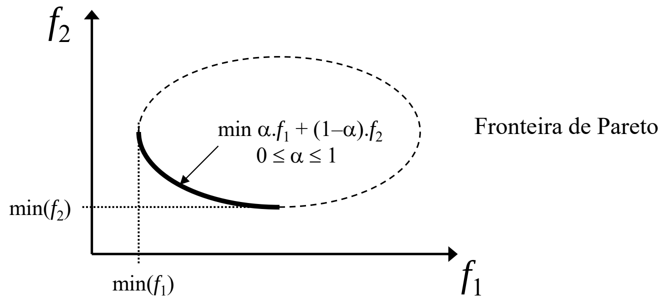
a) Escolher um objetivo principal e restringir os outros objetivos a valores toleráveis:

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

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 aproximation - Generalized Benders decomposition	

Exemplo de Formulação (Cap.3)

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$)
x_2 = valor investido em CDB (R$)

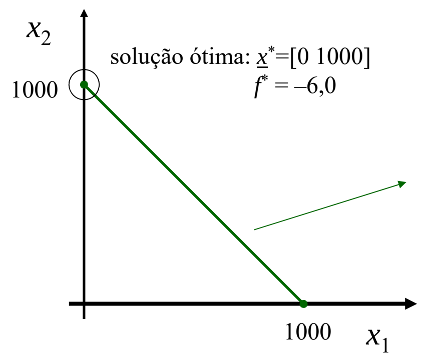
Definir função objetivo: Retorno após 1 mês (R$)

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

Definir restrições:

$x_1 + x_2 = 1000$
$x_1 \geq 0 \qquad x_1 \in \Re^1$
$x_2 \geq 0 \qquad x_2 \in \Re^1$

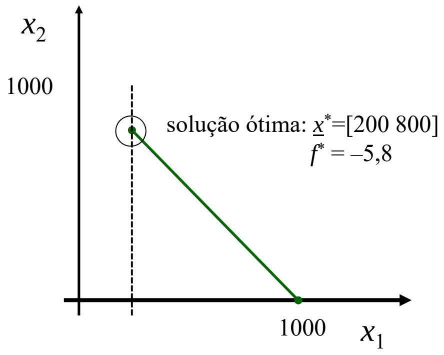
$$\begin{array}{ll} \min & f(\underline{x}) = -\,0{,}005.x_1 - 0{,}006.x_2 \\ s.a. & h_1(\underline{x}):\quad x_1 + x_2 - 1000 = 0 \\ & g_1(\underline{x}):\quad -\,x_1 \leq 0 \\ & g_2(\underline{x}):\quad -\,x_2 \leq 0 \\ & x_1, x_2 \in \Re^1 \end{array}$$



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

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

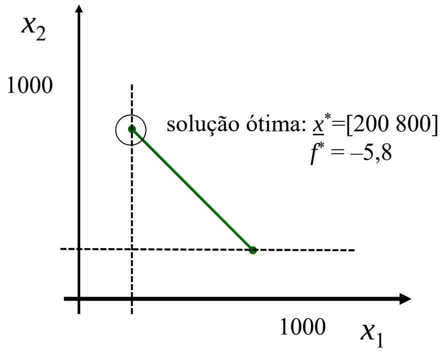
Nova restrição:
Mínimo de R$200 em poupança



g_3: restrição ativa
g_1 e g_2: restrições inativas

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

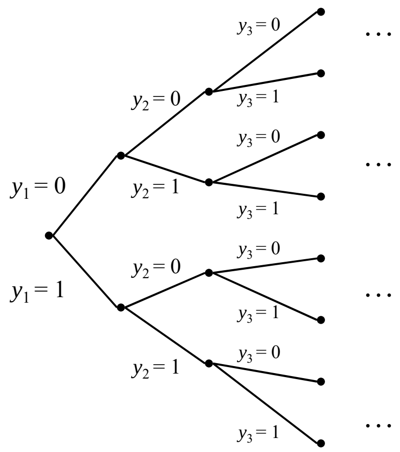
Nova restrição:
Mínimo de R$200 em CDB



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

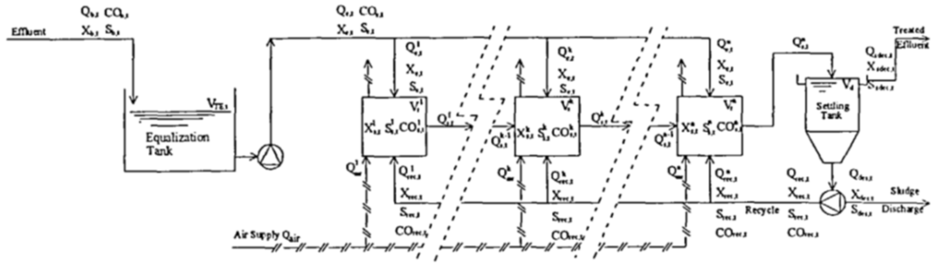
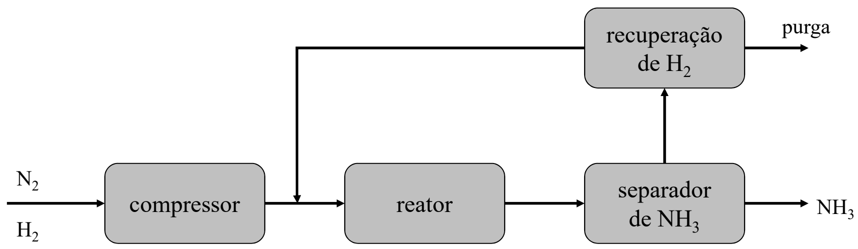


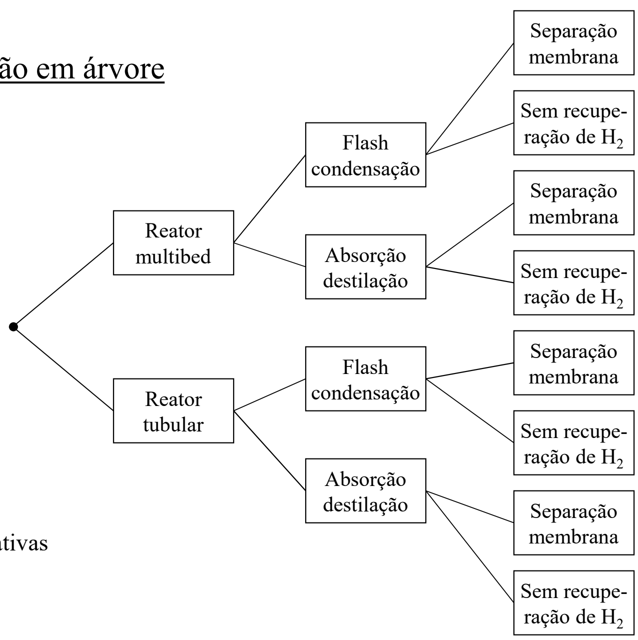
Figure 2 - Activated sludge treatment plant with cell representation of the aeration tank

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

Produçao de amônia: principais componentes



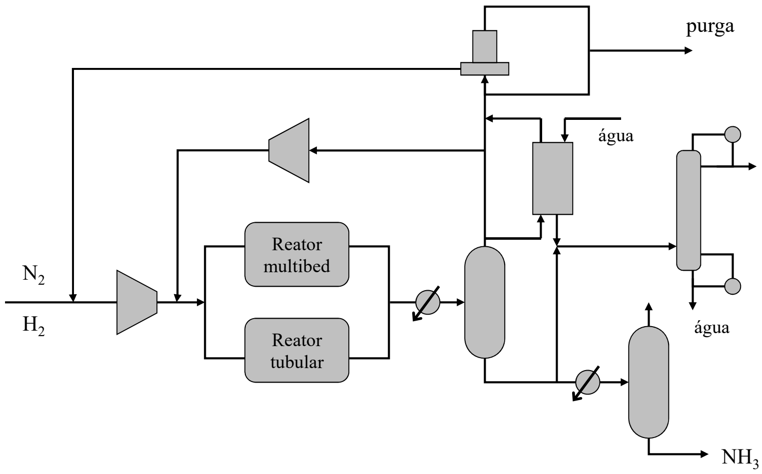
Representação em árvore



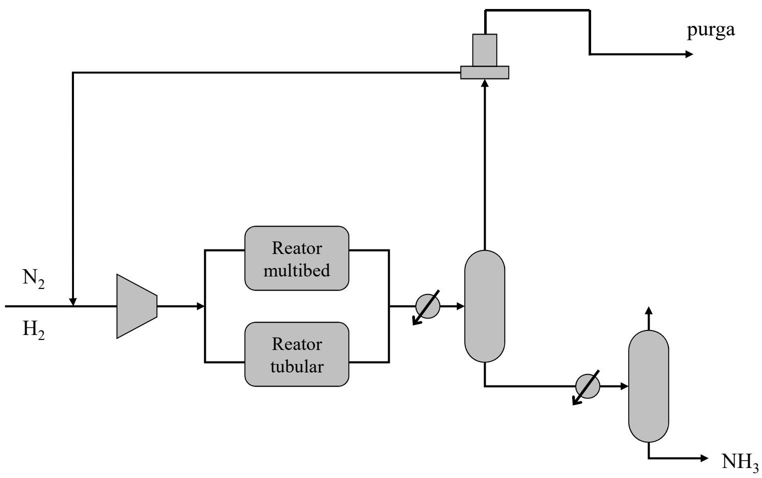
$2^3 = 8$ alternativas

Decisão: 1 2 3

Representação em rede (superestrutura)

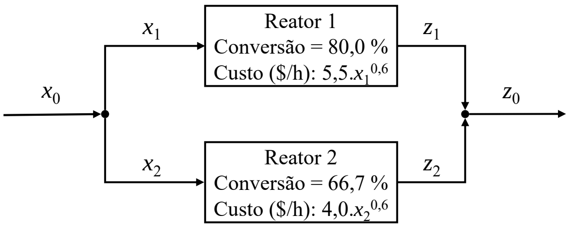


Uma possível solução:



Exemplo: Seleção de Reatores (p.169-182)

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:

$z_0 = 10$

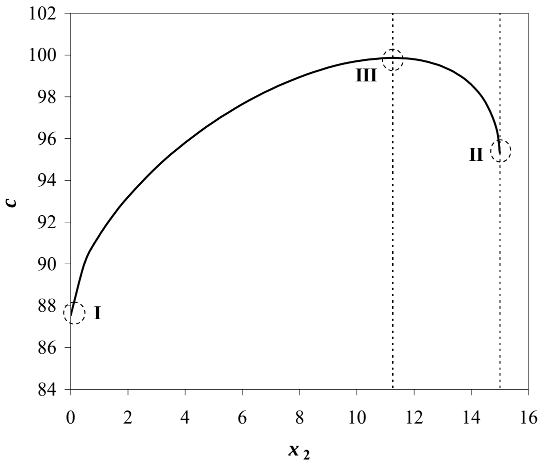
Formulação NLP - Programação Não Linear

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

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)

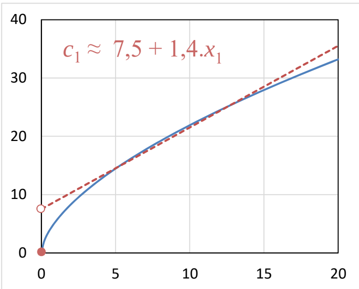
II) Usar reator 2
(mínimo local)

III) Usar reatores 1 e 2
(máximo global)

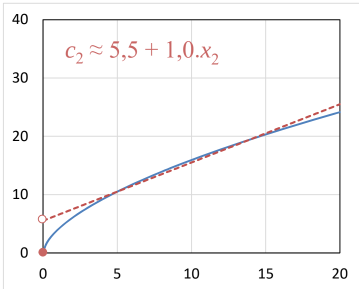
Formulação MILP - Programação Linear Inteira Mista

Linearização dos custos

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



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



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

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

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

$y_1 = \{1, 0\}$
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

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

MILP

$$
\begin{array}{ll}
\text{min} & c = 7{,}5.y_1 + 6{,}4.x_1 + 5{,}5.y_2 + 6{,}0.x_2 \\
\text{s.a.} & 0{,}800.x_1 + 0{,}667.x_2 = 10 \\
 & \left.\begin{array}{l} x_1 - 20.y_1 \leq 0 \\ x_2 - 20.y_2 \leq 0 \end{array}\right\} \\
 & y_1 + y_2 \geq 1 \\
 & x_1, x_2 \geq 0 \\
 & y_1, y_2 = \{0, 1\}
\end{array}
$$

balanço de massa

$y=0 \Rightarrow x=0$

lógica