Programación mixta-entera

Prof. Cesar de Prada
ISA –UVA
prada@autom.uva.es

Indice

- Problemas híbridos
- Tipos de problemas mixto-enteros
- Algoritmo Branch and Bound
- Ejemplos
- Software

Problemas híbridos

- Muchos problemas de decisión involucran no solo variables que pueden representarse por valores reales, sino decisiones de tipo discreto que están representadas de forma natural por variables enteras o binarias.
- Otras veces, el planteamiento del problema involucra, junto a los modelos cuantitativos, reglas o condiciones lógicas adicionales
- Estos problemas de optimización híbridos con variables reales y enteras se denominan de programación mixta entera
- Si las decisiones son solo de tipo entero el problema se denomina de programación entera

Ejemplo: Banda de ladrones

Una banda de ladrones asalta un almacén donde hay N objetos distintos. Cada objeto j tiene un peso p_j y un valor v_j. Disponen de una camioneta que puede transportar como máximo un peso P. ¿Qué objetos deben seleccionar los ladrones para obtener el máximo beneficio de su acción?

Definiendo una variable binaria y_j para indicar si un objeto ha sido o no seleccionado:

$$\max_{\mathbf{y}} \sum_{j=1}^{N} y_j v_j \quad \text{sujeto a} \quad \sum_{j=1}^{N} y_j p_j \le P$$

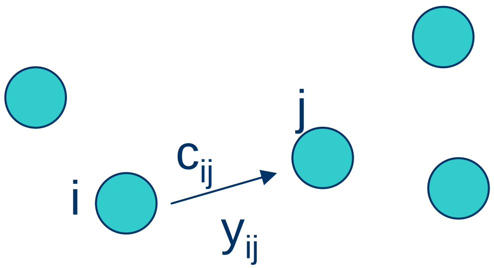
$$y_j = \begin{cases} 0 & \text{el objeto j no ha sido seleccionado} \\ 1 & \text{el objeto j si ha sido seleccionado} \end{cases}$$

Problema ILP integer linear programming

Ejemplo: El problema del viajante

Un viajante debe partir de su ciudad y recorrer N ciudades volviendo a la ciudad de origen sin repetir ninguna. La distancia entre la ciudad i y la j es c_{ij}. ¿Cual es la ruta que debe seguir para recorrer una distancia mínima?.

Podemos asociar una variable binaria y_{ij} a cada par de ciudades i , j



$$\min_{\mathbf{y}} \sum_{i=1}^{N}\sum_{j=1}^{N} c_{ij} y_{ij} \qquad y_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{el viajante no va de la ciudad i a la j} \\ 1 & \text{el viajante va de la ciudad i a la j} \end{cases} \qquad y_{ii} = 0$$

$$\sum_{i=1}^{N} y_{ij} = 1 \qquad \mathrm{j} = 1,\ldots,\mathrm{N} \qquad \text{debe llegar una vez y solo una de la ciudad j}$$

$$\sum_{j=1}^{N} y_{ij} = 1 \qquad 1 = 1,\ldots,\mathrm{N} \qquad \text{debe partir una vez y solo una de la ciudad i}$$

Tipos de problemas mixto enteros

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathbf{y}} \mathbf{c}'\mathbf{y} \\ \mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b} \\ \mathbf{y} \in Z \end{cases}$$

ILP Integer

Linear Programming

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathbf{x},\mathbf{y}} \mathbf{c}'\mathbf{x} + \mathbf{d}'\mathbf{y} \\ \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b} \\ \mathbf{E}\mathbf{y} = \mathbf{e} \\ \mathbf{0} \le \mathbf{x} \in R^n, \mathbf{y} \in Z \end{cases}$$

MILP Mix-Integer

Linear Programming

$$\begin{cases} \min\limits_{\mathbf{x},\mathbf{y}} J(\mathbf{x},\mathbf{y}) \\ \mathbf{h}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \mathbf{0} \\ \mathbf{g}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \le \mathbf{0} \\ \mathbf{x} \in R^n, \mathbf{y} \in Z \end{cases}$$

MINLP Mix-Integer

Non-Linear Programming

Pueden re-convertirse igualdades y desigualdades usando variables de holgura, al igual que problemas min en max

Métodos de solución

- La aproximación de tratar las variables enteras como reales y luego aproximarlas al entero mas próximo suele dar resultados erróneos, excepto quizás cuando el número de valores posibles de una variable entera es alto. Rara vez con variables binarias
- Pueden enumerarse todas las combinaciones de variables enteras posibles y resolver para cada una el problema, posiblemente NLP, de variables reales asociado, escogiendo luego el de mejor J, ya que son un número finito. Pero el número de combinaciones crece exponencialmente con el número de variables enteras.
- Examen inteligente de alternativas enteras: Branch and Bound (B&B)
- Ajuste de cotas inferior y superior: Outer Approximation (OA), Generalised Benders decomposition (GBD)

Branch and Bound (B&B)

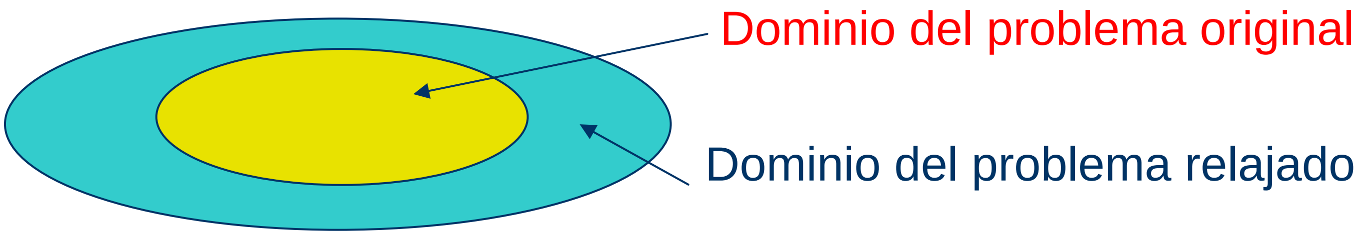
El método proporciona una búsqueda inteligente del óptimo combinando la comparación de distintas alternativas función de las variables enteras, con un procedimiento para eliminar combinaciones que no pueden conducir al óptimo y para determinar las condiciones de óptimo basándose en cotas del mismo.

Está basado en tres ideas principales:

- ✓ **Relajación**, que proporciona cotas del problema
- ✓ **Ramificación**, que examina las distintas alternativas de variables enteras en un punto dado del árbol de decisión.
- ✓ **Poda**, que permite eliminar determinados grupos de combinaciones de variables enteras simplificando la búsqueda

Relajación

Una **relajación** de un problema MILP o MINLP consiste en suponer que las variables binarias y_j pueden tomar valores reales en el intervalo $0 \leq y_j \leq 1$. (De forma similar se trata el caso de variables enteras) Por tanto en el problema relajado todas las variables, **x** e **y**, son reales y resulta un problema de tipo LP o NLP.



Lógicamente, al ampliar el espacio de búsqueda, la solución del problema relajado es una cota inferior (o superior en el caso de maximización) al problema original MILP o MINLP. El cálculo de esta cota es el objetivo que se busca al resolver el problema relajado.

Algoritmo Branch and Bound (B&B)

Ejemplo ILP (Himmelblau)

Max $J = 86\, y_1 + 4\, y_2 + 40\, y_3$

Sujeto a

$774\, y_1 + 76\, y_2 + 42\, y_3 \leq 875$

$67\, y_1 + 27\, y_2 + 53\, y_3 \leq 875$

y1, y2, y3 $\in$ 0,1

1
Relajación

1

$0 \leq y_1 \leq 1$
$0 \leq y_2 \leq 1$
$0 \leq y_3 \leq 1$
$y^* = (1,\ 0.776,\ 1)$
$J_r^* = 129.1$

LP

$y_2 = 0$

2
Ramificación

$y_2 = 1$

El problema relajado es LP y su resolución proporciona una cota superior Jr* de J*: $J^* \leq 129.1$

A continuación se examinan las dos alternativas posibles para $y_{2,}$ única variable real de la solución relajada

Algoritmo Branch and Bound (B&B)

Max $J = 86\, y_1 + 4\, y_2 + 40\, y_3$

Sujeto a

$774\, y_1 + 76\, y_2 + 42\, y_3 \leq 875$

$67\, y_1 + 27\, y_2 + 53\, y_3 \leq 875$

y1, y2, y3 $\in$ 0,1

Nodo nº

1

$0 \leq y_1 \leq 1$
$0 \leq y_2 \leq 1$
$0 \leq y_3 \leq 1$
$y^*=(1,\ 0.776,\ 1)$
$J_r^*=129.1$

LP

1 Relajación

2 Ramificación

$y_2 = 0$

$y_2 = 1$

3 Relajación

LP

2

$0 \leq y_1 \leq 1$
$y_2 = 0$
$0 \leq y_3 \leq 1$
$y^*=(1,\ 0,\ 1)$
$J_r^*=126.0$

4 Poda

Mejor solución factible hasta el momento (incumbente):
Cota inferior de J*

No se puede seguir ramificando en el nodo 2. El BB termina si la diferencia de cotas superior e inferior es menor que una tolerancia

$$\frac{\left|\text{Cota}_{\text{sup}} - \text{cota}_{\text{inf}}\right|}{1 + \left|\text{cota}_{\text{inf}}\right|} \leq tol$$

B&B

1
Relajación
LP

1
$0 \le y_1 \le 1$
$0 \le y_2 \le 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0.776, 1)$
$J_r^*=129.1$

129.1
J*
-∞

$y_2= 0$

2
Ramificación

$y_2= 1$

Cota superior en esta rama:

129.1
J*
126.0

2
$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 0$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0, 1)$
$J_r^*=126.0$

Relajaciones

3
$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0.978,1, 1)$
$J_r^*=128.11$

128.11
J*
126.0

Candidato
No hay mas ramificación en este nodo

Poda

$y_1= 0$

Ramificación

$y_1= 1$

El valor del candidato es una cota inferior para todo el problema

Si el hueco, o diferencia de cotas superior e inferior, en el nodo 3 es superior a la tolerancia, debe seguirse ramificando. En caso contrario el BB termina y el candidato actual es el óptimo.

B&B

1 Relajación

LP

1

$0 \le y_1 \le 1$
$0 \le y_2 \le 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0.776, 1)$
$J_r^*=129.1$

129.1
J*
-∞

Cota superior en esta rama:

$y_2= 0$

2 Ramificación

$y_2= 1$

129.1
J*
126.0

2

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 0$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0, 1)$
$J_r^*=126.0$

Relajaciones

3

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0.978,1, 1)$
$J_r^*=128.11$

128.11
J*
126.0

Candidato
No hay mas ramificación en este nodo

Poda

$y_1= 0$

Ramificación

$y_1= 1$

Cada solución factible proporciona una cota inferior para cualquier rama

Cada ramificación proporciona cotas superiores menores en esa rama

Pueden usarse los valores de las cotas para podar ramas sin calcular sus valores

B&B

LP

1 Relajación

1

$0 \le y_1 \le 1$
$0 \le y_2 \le 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0.776, 1)$
$J_r^*=129.1$

129.1
J*
-∞

$y_2 = 0$

2 Ramificación

$y_2 = 1$

129.1
J*
126.0

2

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 0$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1, 0, 1)$
$J_r^*=126.0$

Candidato

Relajaciones

3

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0.978, 1, 1)$
$J_r^*=128.11$

128.11
J*
126.0

$y_1 = 0$

Ramificación

$y_1 = 1$

4

$y_1 = 0$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0, 1, 1)$
$J_r^*=44.0$

Relajación

Nueva solución factible, pero inferior a la del candidato actual por lo que este no cambia

No se puede seguir ramificando este nodo

Poda

B&B

1 Relajación

LP

1

$0 \le y_1 \le 1$

$0 \le y_2 \le 1$

$0 \le y_3 \le 1$

$y^*=(1,\ 0.776,\ 1)$

$J_r^*=129.1$

129.1

J*

-∞

$y_2 = 0$

2 Ramificación

$y_2 = 1$

129.1

J*

126.0

Candidato

2

$0 \le y_1 \le 1$

$y_2 = 0$

$0 \le y_3 \le 1$

$y^*=(1,\ 0,\ 1)$

$J_r^*=126.0$

Relajaciones

3

$0 \le y_1 \le 1$

$y_2 = 1$

$0 \le y_3 \le 1$

$y^*=(0.978, 1,\ 1)$

$J_r^*=128.11$

128.11

J*

126.0

$y_1 = 0$

Ramificación

$y_1 = 1$

4

$y_1 = 0$

$y_2 = 1$

$0 \le y_3 \le 1$

$y^*=(0, 1,\ 1)$

$J_r^*=44.0$

Poda

El valor de J^*_r es inferior a la cota inferior del candidato, cualquier ramificación daría un valor menor, puede podarse el nodo

5

$y_1 = 1$

$y_2 = 1$

$0 \le y_3 \le 1$

$y^*=(1,\ 1,\ 0.595)$

$J_r^*=113.81$

Relajación

Poda

B&B

1 Relajación

LP

1

$0 \le y_1 \le 1$
$0 \le y_2 \le 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1,\ 0.776,\ 1)$
$J_r^*=129.1$

129.1
J*
$-\infty$

$y_2 = 0$ | 2 Ramificación | $y_2 = 1$

129.1
J*
126.0

Candidato

2

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 0$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1,\ 0,\ 1)$
$J_r^*=126.0$

3

$0 \le y_1 \le 1$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0.978,1,\ 1)$
$J_r^*=128.11$

128.11
J*
126.0

$y_1 = 0$ | Ramificación | $y_1 = 1$

4

$y_1 = 0$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(0,1,\ 1)$
$J_r^*=44.0$

Poda

El candidato actual, nodo 2, es el óptimo al haberse podado ya todas las ramas

5

$y_1 = 1$
$y_2 = 1$
$0 \le y_3 \le 1$
$y^*=(1,\ 1,\ 0.595)$
$J_r^*=113.81$

Poda

Ejemplo: Fábrica de pinturas

Una fábrica de pinturas tiene tres unidades de producción de un cierto tipo de pintura con capacidades que se indican en la tabla adjunta. Igualmente se muestran en la misma los costos de puesta en marcha de cada unidad y los costes por Kg de pintura producido. Si una unidad se pone en funcionamiento, debe producir en un periodo toda su capacidad

Unidad	Costes de puesta en marcha €	Costes por Kg de pintura producida €	Capacidad, Kg
1	2800	5	1900
2	2000	3	1700
3	1900	8	2900

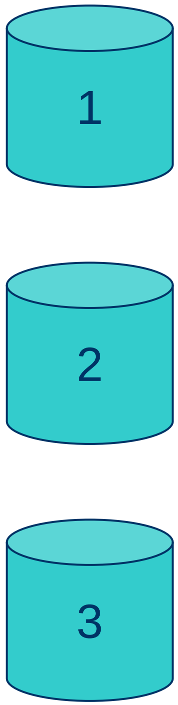
Fábricas de pinturas

Las unidades pueden ponerse en marcha al principio de la mañana o al principio de la tarde. Lógicamente, si una unidad se puso en marcha por la mañana y sigue operando por la tarde solo genera costos de puesta en marcha por la mañana. Todas las unidades se apagan por la noche y las decisiones de puesta en marcha para el día se toman por la mañana cada día de acuerdo a los pedidos existentes.

Si un determinado día deben servirse 2500 kg de pintura por la mañana y 3500 kg por la tarde, ¿Qué unidades deben ponerse en funcionamiento y cuando para incurrir en los menores costos posibles?

¿Cómo varia la solución si la demanda de la tarde se incrementa en 100 Kg?

Fábrica de pinturas



Variables:

i número del proceso (1, 2, 3)

j número del periodo de trabajo: 1 mañana 2 tarde

y_{ij} variable binaria: vale 1 si el proceso i funciona en el periodo j

c_i costes de puesta en marcha de la unidad i

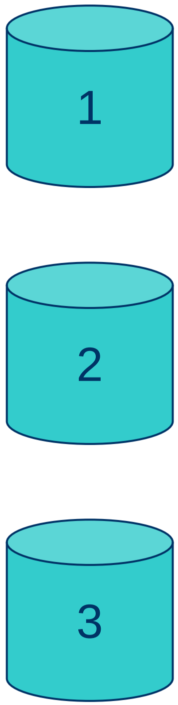
p_i costes de producción de un Kg en el proceso i

w_i capacidad de producción de la unidad i por periodo

D_j demanda de pintura en el periodo j

z_i variable binaria auxiliar , vale 1 si y_{i1} o y_{i2} es 1

Fábrica de pinturas



$$\min_{y_{ij},z_i} \sum_{i=1}^{3} c_i z_i + p_i w_i (y_{i1} + y_{i2})$$

$$\sum_{i=1}^{3} w_i y_{ij} \ge D_j \qquad j = 1,2$$

$$z_i \ge y_{ij} \qquad i = 1,2,3 \quad j = 1,2$$

Excel

La variable z_i vale 1 si se ha arrancado la unidad i por la mañana o por la tarde

Si por la mañana no puede haber mas de una unidad funcionando simultáneamente: $\sum_{i=1}^{3} y_{i1} \le 1$

Formulación en GAMS

```
sets   i   unidades / u1, u2, u3 /
       j  periodos    /  m, t /

parameters costea(i)  coste de arrancar una unidad
                        / u1=2800, u2=2000, u3=1900 /
           costeKg(i) coste por kg por periodo / u1=5 , u2=3, u3=8 /
           capacidad(i) capacidad /u1=1900, u2=1700, u3=2900/
           demanda(j) demanda por periodo / m= 2500, t = 3500/;

variables    y(i,j)    funciona o no la unidad I en el periodo j
             z(i)      arranca la unidad i ese dia
             coste     coste total de la produccion del dia
binary variables y, z;
```

Formulación en GAMS

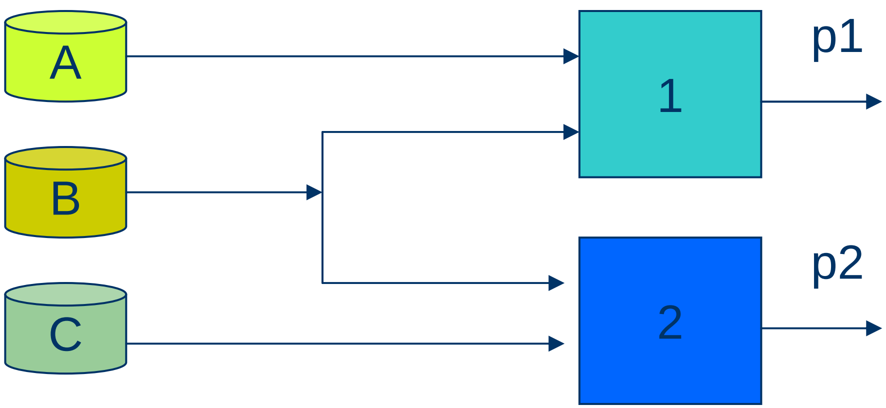
```
equations produccion(j) produccion en cada periodo
          restriccion(i,j)    limites en z
          costetotal    calculo del coste;

        produccion(j)..  sum(i, y(i,j)*capacidad(i)) =g= demanda(j);
        restriccion(i,j).. z(i) =g= y(i,j);
        costetotal..     coste =e= sum(i,
                costea(i)*z(i)+costeKg(i)*capacidad(i)*sum(j,y(i,j)));


model  pinturas planificacion de la produccion / all /;
solve   pinturas  minimizing coste using mip;
display  coste.l
```

Mezcla con lotes discretos

Unidad	Capacidad kg/dia
1	8000
2	10000

Cada unidad trabaja con lotes de 2000Kg

Kg de materias primas necesarias	A	B	C	Beneficio € / Kg
Para hacer p1	0.4	0.6	0	0.16
Para hacer p2	0	0.3	0.7	0.2
Disponibilidad		6000		



¿Qué cantidad de p1 y p2 deben producirse para maximizar el beneficio?

Mezcla con lotes discretos

Variables:

x_1 cantidad producida por día de p1

x_2 cantidad producida por día de p2

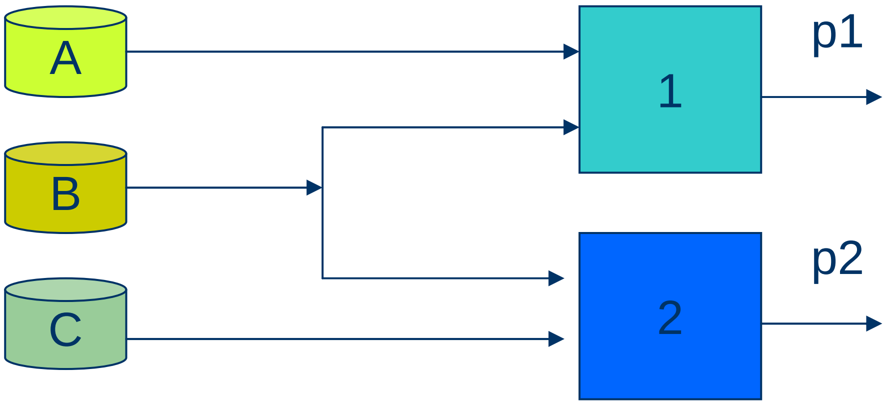
$$\max \ 0.16x_1 + 0.2x_2$$

$$0.6x_1 + 0.3x_2 \le 6000$$

$$x_i = 2000 y_i \quad i = 1, 2$$

$$0 \le y_1 \le 4 \qquad 0 \le y_2 \le 5$$

$$y_i \quad \text{entera}$$



x_i tiene que tomar valores múltiplos de 2000 Kg, el tamaño del lote

Algoritmo Branch and Bound (B&B)

$$\max \ \ 0.16x_1 + 0.2x_2$$
$$0.6x_1 + 0.3x_2 \le 6000$$
$$x_i = 2000y_i \quad i = 1, 2$$
$$0 \le y_1 \le 4 \qquad 0 \le y_1 \le 5$$
$$y_i \quad \text{entera}$$

1
Relajación

$0 \le y_1 \le 4$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^*=(2.5, 5)$
$J_r^*=2800$

LP

$y_1 \le 2$

2
Ramificación

$y_1 \ge 3$

El problema relajado es LP y su resolución proporciona una cota superior Jr* de J*:
$J^* \le 2800$

A continuación se examinan las dos alternativas posibles para $y_{1,}$ única variable real de la solución relajada

Algoritmo Branch and Bound (B&B)

$$\max \;\; 0.16x_1 + 0.2x_2$$
$$0.6x_1 + 0.3x_2 \le 6000$$
$$x_i = 2000y_i \quad i = 1, 2$$
$$0 \le y_1 \le 4 \qquad 0 \le y_1 \le 5$$
$$y_i \quad \text{entera}$$

Nodo nº

LP

1

$0 \le y_1 \le 4$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^* = (2.5, 5)$
$J_r^* = 2800$

1 Relajación

$y_1 \le 2$

2 Ramificación

$y_1 \ge 3$

3 Relajación

LP

2

$0 \le y_1 \le 2$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^* = (2,5)$
$J_r^* = 2640$

Mejor solución factible hasta el momento (incumbente):
Cota inferior de J*

4 Poda

No se puede seguir ramificando en el nodo 2. El BB terminaría si la diferencia de cotas superior e inferior fuera menor que la tolerancia

B&B

1
Relajación

LP

1
$0 \le y_1 \le 4$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^*=(2.5, 5)$
$J_r^*=2800$

2800
J*
-∞

$y_1 \le 2$

2
Ramificación

$y_1 \ge 3$

2800
J*
2640

2
$0 \le y_1 \le 2$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^*=(2, 5)$
$J_r^*=2640$

Relajaciones

3
$3 \le y_1 \le 4$
$0 \le y_2 \le 5$
$y^*=(3,4)$
$J_r^*=2560$

Candidato

No hay mas ramificación en este nodo al dar una solución entera

Poda

Poda

Tambien da solución entera, pero es inferior al nodo 2

Por tanto la solución es: $y^*=(2, 5)$, $x^*=(4000, 10000)$

Y el beneficio óptimo 2640 €

Variables enteras y binarias

Hay formas sencillas de hacer que una variable z tome valores enteros entre 0 y n, usando solo variables binarias, esto es, variables que solo toman valores 0, 1

$$z = y_1 + 2\, y_2 + 3\, y_3 + \ldots. + n\, y_n$$

$$1 \geq y_1 + y_2 + y_3 + \ldots. + y_n$$

$$y = \{0 , 1\}$$

Modelado con variables binarias

Seleccionar una alternativa y solo una

$$\sum_{i=1}^{N} y_i = 1$$

Seleccionar no mas de una alternativa

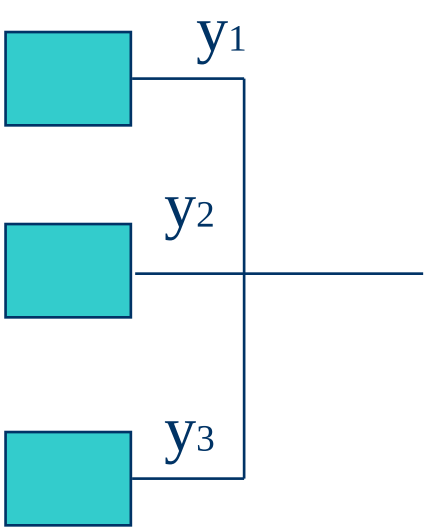
$$\sum_{i=1}^{N} y_i \le 1$$

Seleccionar al menos una alternativa

$$\sum_{i=1}^{N} y_i \ge 1$$

Seleccionar la alternativa j solo si se ha seleccionado la i

$$y_j - y_i \le 0$$



Activación de variables continuas

Para eliminar ó activar la variable continua x usando la variable binaria y

q variable continua , p.e. flujo
L limite inferior
U limite superior

$$L_i y_i \le q_i \le U_i y_i$$

$$\text{si } y_i = 0 \quad 0 \le q_i \le 0 \Rightarrow q_i = 0$$

$$\text{si } y_i = 1 \quad L_i \le q_i \le U_i$$

Modelado con variables continuas y 0-1

Activación y desactivación de restricciones asociadas a una corriente o unidad

$$\text{restricciones} \quad h(x) = 0 \quad g(x) \le 0$$

$$\text{variables} \quad \text{de} \quad \text{holgura} \quad s, v$$

$$h(x) + s - v = 0$$

$$s + v \le U_1(1 - y) \qquad\qquad U, \quad \text{limite} \quad \text{amplio}$$

$$g(x) - U_2(1 - y) \le 0$$

$$s \ge 0, \quad v \ge 0$$

$$\text{si} \quad y = 0 \quad h(x) \quad y \quad g(x) \quad \text{no} \quad \text{estan} \quad \text{limitadas}$$

$$\text{si} \quad y = 1 \quad s = 0, \quad v = 0, \quad h(x) = 0, \quad g(x) \le 0$$

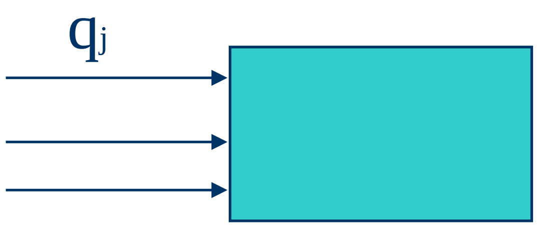
Modelado con variables continuas y 0-1

m corrientes dirigidas al mismo nodo i

$$\sum_{j=1}^{m} q_j - U y_i \le 0$$

$$q_j \ge 0 \quad j = 1,2,\dots,m$$

$$\text{si} \quad y = 0, \quad \Rightarrow q_j = 0$$



U límite superior al flujo total

Modelado de expresiones lógicas

$P_1 \vee P_2 \vee P_3$	$y_1 + y_2 + y_3 \geq 1$
$P_1 \wedge P_2 \wedge P_3$	$y_1 \geq 1, \quad y_2 \geq 1 \quad y_3 \geq 1$
$P_1 \Rightarrow P_2$	$1 - y_1 + y_2 \geq 1 \quad \text{o} \quad y_1 - y_2 \leq 0$
P_1 si y solo si P_2	$y_1 = y_2$
uno entre P_1, P_2, P_3	$y_1 + y_2 + y_3 = 1$
$P_1 \vee P_2 \Rightarrow P_3$	$y_1 - y_3 \leq 0 \quad y_2 - y_3 \leq 0$

Usando estas equivalencias, puede convertirse cualquier expresión lógica a expresiones en *y*, si la expresión lógica se escribe en su forma conjuntiva normal

Forma normal conjuntiva

$$Q_1 \wedge Q_2 \wedge \cdots \wedge Q_n$$

Donde las Q son expresiones de P escritas como disyunciones

Procedimiento de obtención:

1 Reemplazar la implicación por su expresión equivalente

$$P_1 \Rightarrow P_2 \Leftrightarrow \overline{P_1} \vee P_2$$

2 Aplicar las leyes de Morgan para desplazar dentro las negaciones

$$\overline{(P_1 \wedge P_2)} \Leftrightarrow \overline{P_1} \vee \overline{P_2} \qquad \overline{(P_1 \vee P_2)} \Leftrightarrow \overline{P_1} \wedge \overline{P_2}$$

3 Utilizar la propiedad distributiva para dar la forma normal

$$(P_1 \wedge P_2) \vee P_3 \Leftrightarrow (P_1 \vee P_3) \wedge (P_2 \vee P_3)$$

Ejemplo (1)

$$(P_1 \wedge P_2) \vee P_3 \Rightarrow (P_4 \vee P_5)$$

Paso 1

$$\overline{\left[(P_1 \wedge P_2) \vee P_3\right]} \vee (P_4 \vee P_5)$$

Paso 2

$$\left[(\overline{P_1} \vee \overline{P_2}) \wedge \overline{P_3}\right] \vee (P_4 \vee P_5)$$

Paso 3

$$\left[(\overline{P_1} \vee \overline{P_2}) \vee (P_4 \vee P_5)\right] \wedge \left[\overline{P_3} \vee (P_4 \vee P_5)\right]$$

$$\left[\overline{P_1} \vee \overline{P_2} \vee P_4 \vee P_5\right] \wedge \left[\overline{P_3} \vee P_4 \vee P_5\right]$$

Ejemplo (2)

$$\left[\overline{P_1} \vee \overline{P_2} \vee P_4 \vee P_5\right] \wedge \left[\overline{P_3} \vee P_4 \vee P_5\right]$$

$$Q_1 \wedge Q_2$$

$$Q_1 = \overline{P_1} \vee \overline{P_2} \vee P_4 \vee P_5 \quad \rightarrow \quad 1 - y_1 + 1 - y_2 + y_4 + y_5 \geq 1$$

$$Q_2 = \overline{P_3} \vee P_4 \vee P_5 \quad \rightarrow \quad 1 - y_3 + y_4 + y_5 \geq 1$$

luego $Q_1 \wedge Q_2$ resulta ser

$$y_1 + y_2 - y_4 - y_5 \leq 1 \qquad (P_1 \wedge P_2) \vee P_3 \Rightarrow (P_4 \vee P_5)$$

$$y_3 - y_4 - y_5 \leq 0$$

Ejemplo de la producción de acetona

(Raman y Grossmann, CACHE)

Se necesita producir acetona. La materia prima disponible es el alcohol etílico (CH_3CH_2OH) y el metano (CH_4). A continuación se muestran las posibles reacciones. Suponemos que el catalizador que se requiere para todas las reacciones y los compuestos inorgánicos están disponibles excepto para CrO_3 y O_3. Determinar la factibilidad para la producción de acetona a partir de estos productos. Si es factible, especificar un camino de reacción.

$$CH_3CO_2C_2H_5 \xrightarrow{NaOC_2H_5/C_2H_5OH} CH_3COCH_2CO_2C_2H_5$$

$$CH_3COCH_2CO_2C_2H_5 \xrightarrow{H_3O^+} CH_3COCH_3 + C_2H_5OH + CO_2$$

$$CH_3CN + CH_3MgI \xrightarrow{Et_2O} CH_3C(NMgI)CH_3 \xrightarrow{H_2O/HCl} CH_3COCH_3$$

Ejemplo de la producción de acetona
(Raman y Grossmann, CACHE)

$$CH_3CHO + CH_3MgI \xrightarrow{Et_2O/H_3O^+} CH_3CHOHCH_3$$

$$CH_3CHOHCH_3 \xrightarrow{CrO_3/H_2SO_4} CH_3COCH_3$$

$$CH_2 = C(CH_3)_2 \xrightarrow{O_3/H_2O/H_2O_2} CH_3COCH_3 + HCO_2H$$

$$CH_3I \xrightarrow{Mg/Er_2O} CH_3MgI \xrightarrow{CH_3CO_2CH_3} (CH_3)_3COH$$

$$(CH_3)_3COH \rightarrow CH_2 = C(CH_3)_2$$

$$CH_4 + I_2 \rightarrow CH_3I + HI$$

$$CH_4 + Cl_2 \rightarrow CH_3Cl + HCl$$

$$CH_3CH_2OH + O_2 \xrightarrow{Cr_2O_3/Cu} CH_3CHO$$

$$CH_3Cl + NaCN \xrightarrow{H_2O} NaCl + CH_3CN$$

$$CH_3COOH + C_2H_5OH \rightarrow CH_3CO_2C_2H_5$$

$$CH_3CHO + O_2 \rightarrow CH_3COOH$$

Ejemplo de la producción de acetona
(Raman y Grossmann, CACHE)

Formulación

De todas las reacciones químicas posibles, se tiene que verificar dónde se puede sintetizar la acetona a partir de la materia prima y catalizadores dados.

Para llegar a la conclusión final utilizando programación matemática, lo primero que debemos hacer es expresar todas las reacciones en la forma de lógica proposicional, utilizando los principales operadores:

$$\vee \text{ (OR)}, \wedge \text{ (and)}, \Rightarrow \text{ (implicación), y } \neg \text{(negación)}$$

I.

$$A + B \rightarrow C + D$$

$$A \xrightarrow{M} B$$

se puede expresar como

$$A \wedge B \Rightarrow C \wedge D$$

$$A \wedge M \Rightarrow B$$

Ejemplo de la producción de acetona

(Raman y Grossmann, CACHE)

II. Expresar estas proposiciones lógicas en su forma conjuntiva normal, utilizando los pasos sgtes:

1. Eliminar la implicación

$$A \Rightarrow B \quad \text{esto es equivalente} \quad \neg A \vee B$$

2. Mover la negación al interior

$$\neg(A \wedge B) \Leftrightarrow (\neg A) \vee (\neg B)$$

$$\neg(A \vee B) \Leftrightarrow (\neg A) \wedge (\neg B)$$

3. Distribuir el OR sobre el AND de forma recursiva

$$(A \wedge B) \vee C \Leftrightarrow (A \vee C) \wedge (B \vee C)$$

Ejemplo

$$A \wedge B \Rightarrow C \wedge D$$

$$\neg(A \wedge B) \vee (C \wedge D)$$

$$\neg A \vee \neg B \vee (C \wedge D)$$

$$(\neg A \vee \neg B \vee C) \wedge (\neg A \vee \neg B \vee D)$$

( ) cláusula

Ejemplo de la producción de acetona
(Raman y Grossmann, CACHE)

III. Convertir cada cláusula por separado en desigualdades lineales. Para ello, se asigna a cada variable una variable entera (binaria) *y*. Cada negación se sustituye por *1-y*, donde *y* es la variable correspondiente.

$$(\neg A \vee \neg B \vee C) \wedge (\neg A \vee \neg B \vee D)$$

$$1 - y_A + 1 - y_B + y_C \geq 1$$
$$1 - y_A + 1 - y_B + y_D \geq 1$$

$$\boxed{\begin{aligned} y_A + y_B - y_C &\leq 1 \\ y_A + y_B - y_D &\leq 1 \end{aligned}}$$

Ejemplo de la producción de acetona
(Raman y Grossmann, CACHE)

$$CH_3CHO + O_2 \rightarrow CH_3COOH$$

$$CH_3CHO \wedge O_2 \Rightarrow CH_3COOH$$
$$\neg(CH_3CHO \wedge O_2) \vee CH_3COOH$$
$$(\neg CH_3CHO \vee \neg O_2) \vee CH_3COOH$$
$$(\neg CH_3CHO \vee CH_3COOH) \wedge (\neg O_2 \vee CH_3COOH)$$

$$y_1 = CH_3CHO$$
$$y_2 = O_2$$
$$y_3 = CH_3COOH$$

$$1 - y_1 + y_3 \geq 1$$
$$1 - y_2 + y_3 \geq 1$$

$$\Longleftrightarrow$$

$$y_1 - y_3 \leq 0$$
$$y_2 - y_3 \leq 0$$

Ejemplo de la producción de acetona

(Raman y Grossmann, CACHE)

$$\min \; y_u$$

$$s.a.$$

$$Ay \geq a$$

$$y_r \in \{0,1\}^n, \; r = 1,\ldots,R$$

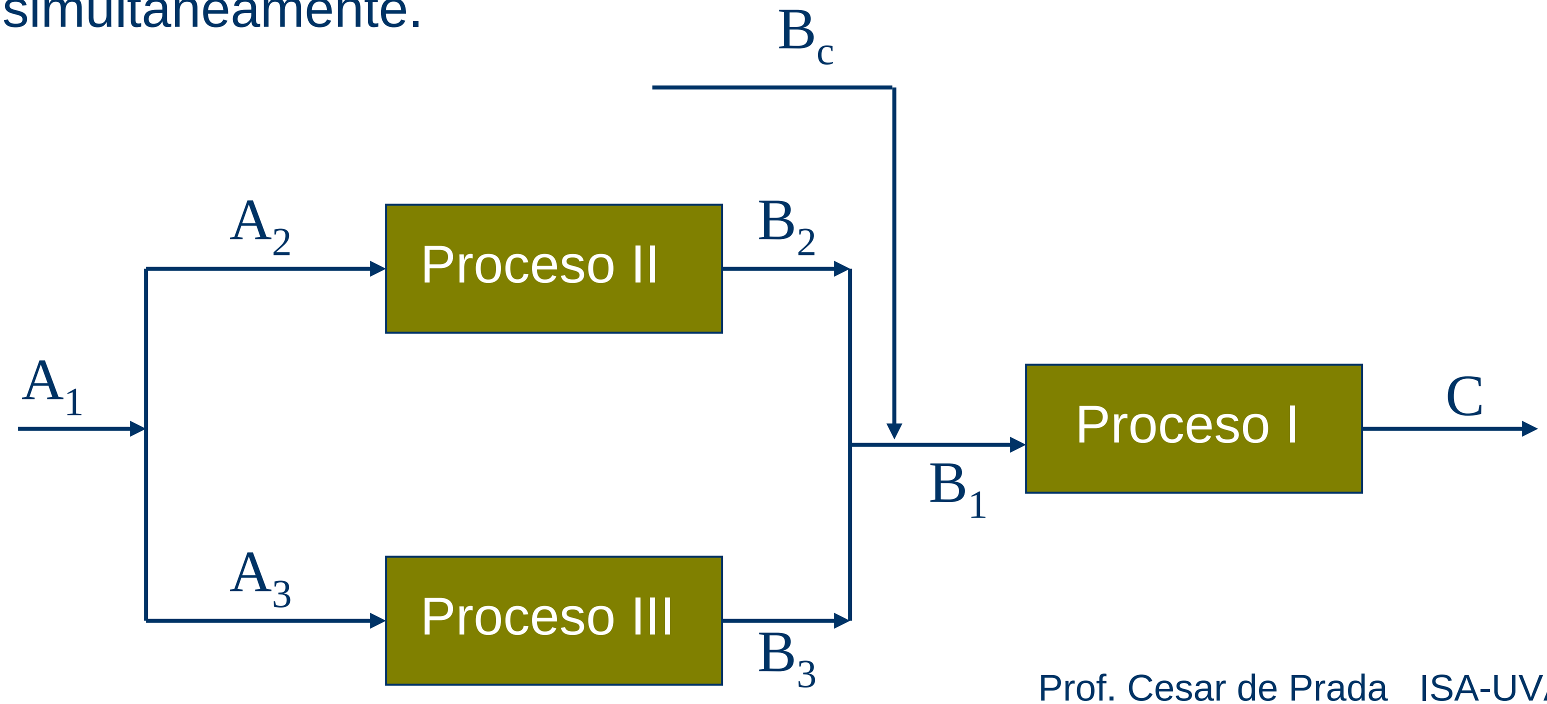
y_u: variables binarias asignadas a los productos que se desean obtener

Y_r : variables binarias asignadas a la materia prima y los catalizadores disponibles

Si y_u =1, significa que el producto se puede sintetizar y que se dispone de materia prima

Ejemplo 1: Planteamiento
(Grossmann)

Representación de alternativas para producir producto C a partir de los productos A y B, a través de los Procesos I, II, III. El producto C puede ser producido sólo a través del proceso I; los procesos I y III, y los procesos I y II. Los procesos II y III no pueden realizarse simultáneamente.



Ejemplo 1: Datos

Conversiones:

Proceso I: $C = 0.9B$

Proceso II: $B = \ln(1 + A)$

Proceso III: $B = 1.2\ln(1 + A)$

Capacidad máxima

Proceso I: 2 ton/h de C

Proceso II: 5 ton/h de B

Proceso III: 4 ton/h de B

Precios

A: 1.800 $/ton

B: 7.000 $/ton

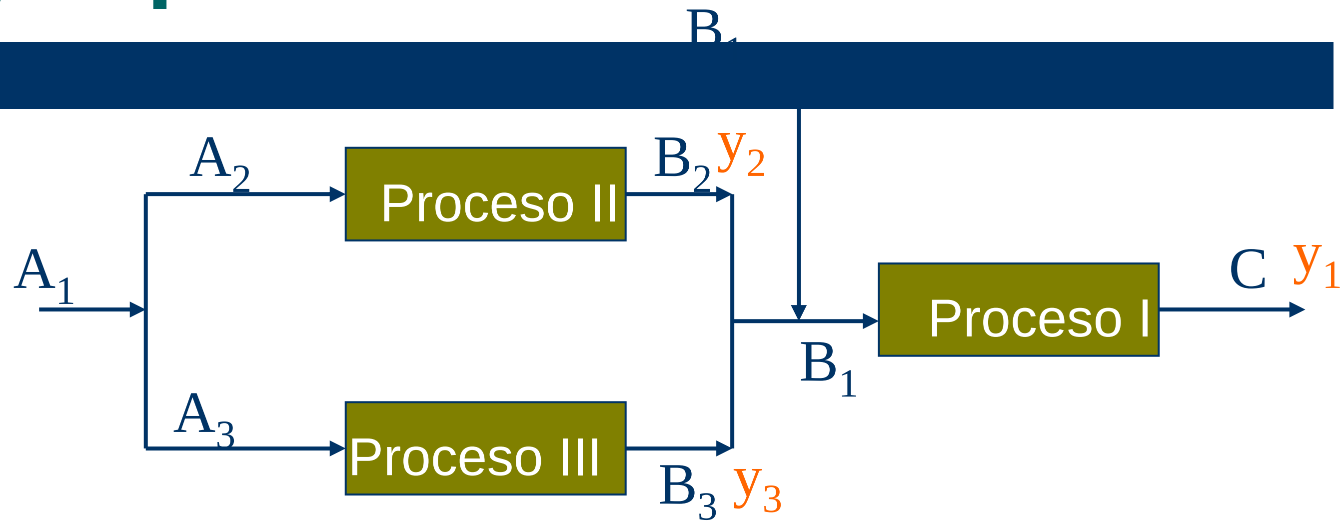
C: 13.000 $/ton

Coste de Inversión

	Fijo (10^3 \$/h)	Variable (10^3 \$/ton)
Proceso I:	3.5	2
Proceso II:	1	1
Proceso III:	1.5	1.2

Demanda de C: 1 ton/h máximo

Ejemplo 1: Formulación



max PR = $13C - 1.8A_2 - 1.8\ A_3 - 7B_1 - 3.5y_1 - 2C - 1.0y_2 - 1B_2 - 1.5y_3 - 1.2B_3$

s .a.

Balances

PI: $C - 0.9(B_1 + B_2 + B_3) = 0$

PII: $B_2 - \ln(1 + A_2) = 0$

PIII: $B_3 - 1.2\ln(1 + A_3) = 0$

$B_1 = B_2 + B_3 + B_c$

$$B_2 \leq 5y_2$$

$$B_3 \leq 4y_3$$

$$c \leq 2y_1$$

Límites

$C, A_2, A_3, B_1, B_2, B_3 >= 0$

$y_1, y_2, y_3 = 0,1$

$y_2 + y_3 \leq 1$

GAMS

```
Positive Variables
      a2 materia prima para el proceso 2
      a3 materia prima para el proceso 3
      b2 produccion de producto B en el proceso 2
      b3 produccion de producto B en el proceso 3
      bc cantidad de producto B que se puede adquirir en el mercado
      b1 cantidad de producto B que se consume en el proceso 1
      c1 capacidad de produccion del producto c en el proceso 1 ;
Binary Variables
      y1 existencia del proceso 1
      y2 existencia del proceso 2
      y3 existencia del proceso 3 ;
Variable
pr beneficio total en millones de $ por ano ;
```

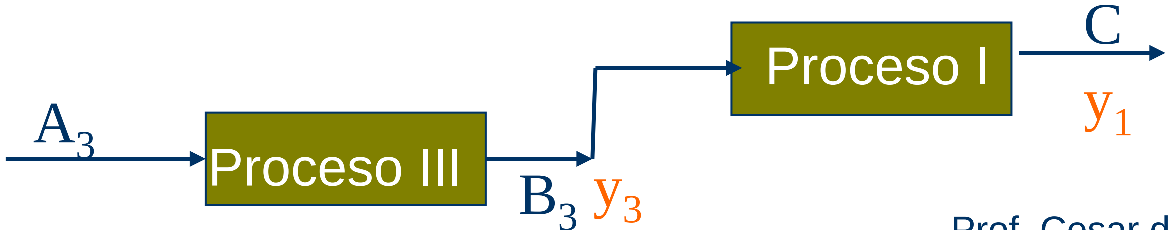
GAMS

- las restricciones inout2 e inout3 se han convexificado

```
inout1.. c1 =e= 0.9*b1 ;
inout2.. exp(b2) - 1 =e= a2 ;
inout3.. exp(b3/1.2) - 1 =e= a3 ;
mbalb.. b1 =e= b2 + b3 + bp ;
log1.. c1 =l= 2*y1 ;
log2.. b2 =l= 4*y2 ;
log3.. b3 =l= 5*y3 ;
```

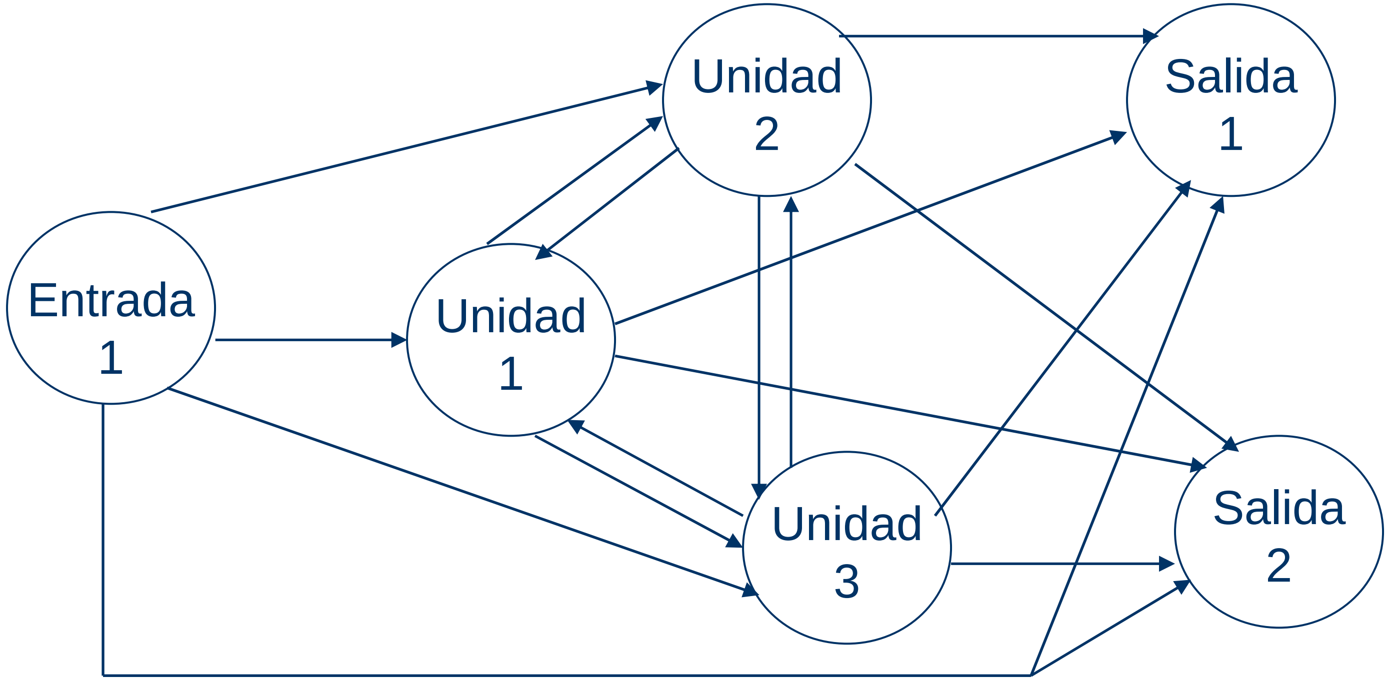
GAMS

y1.L = 1.000 existencia del proceso 1
y2.L = 0.000 existencia del proceso 2
y3.L = 1.000 existencia del proceso 3
c1.L = 1.000 capacidad de produccion del producto c en el proceso 1
b1.L = 1.111 cantidad de producto B que se consume en el proceso 1
b2.L = 0.000 produccion de producto B en el proceso 2
b3.L = 1.111 produccion de producto B en el proceso 3
bc.L = 0.000 cantidad de producto B que se puede adquirir en el mercado
a2.L = 0.000 materia prima para el proceso 2
a3.L = 1.524 materia prima para el proceso 3

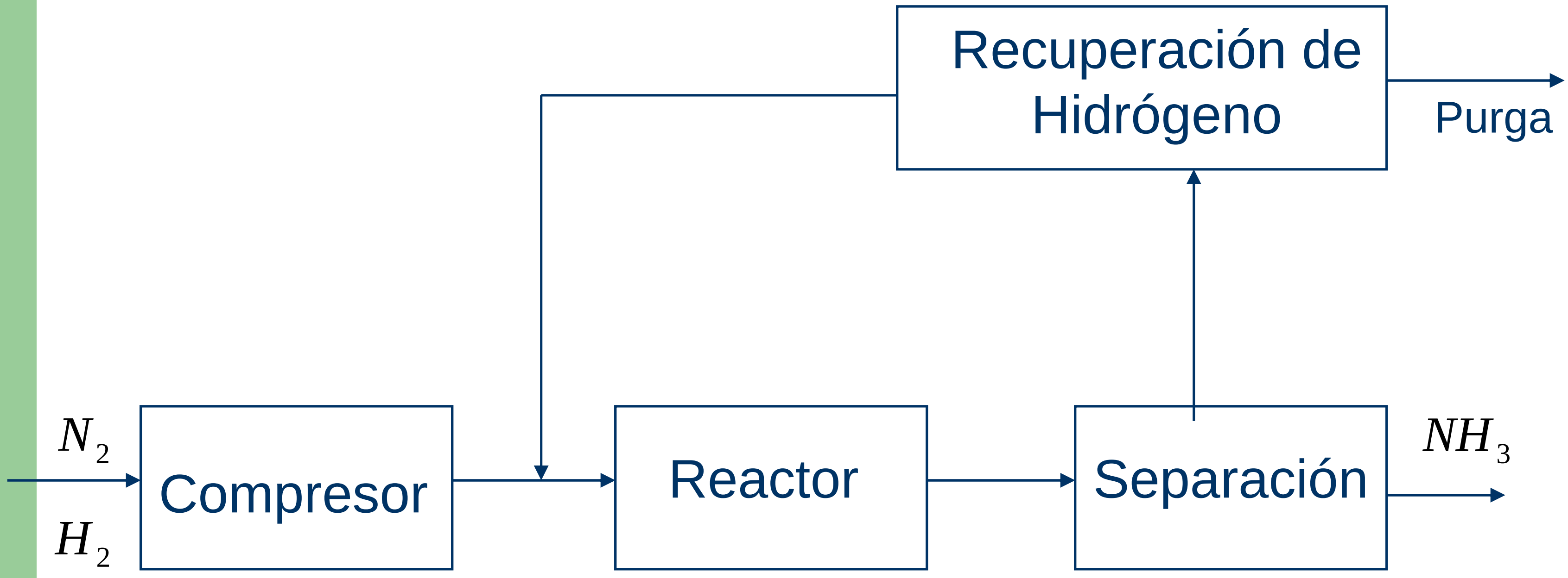


Representación de Alternativas: Superestructuras, Floudas 1995

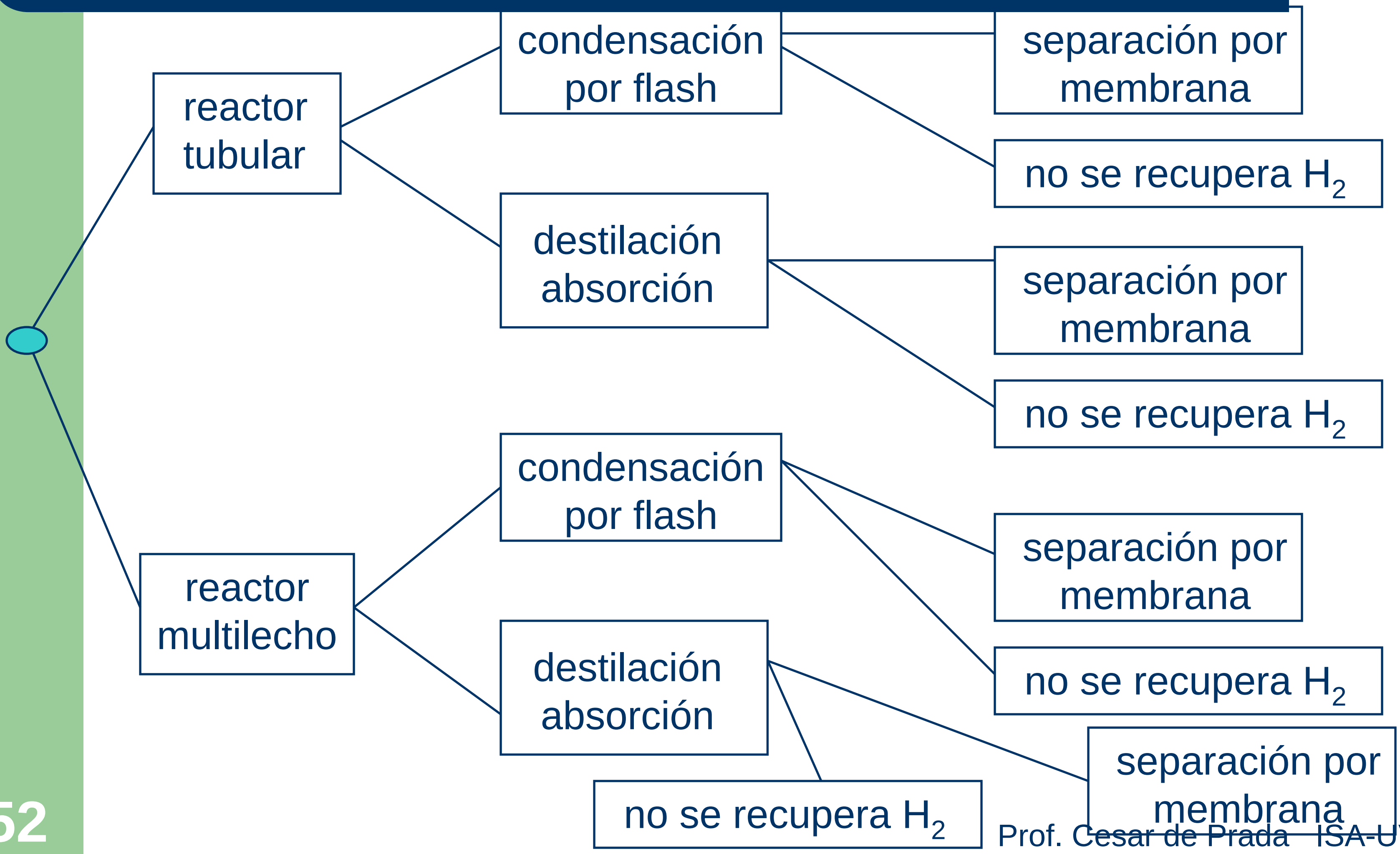
En una ***superestructura***, se engloban todas las posibles estructuras alternativas, que además, son candidatas a la solución factible u óptima del proceso



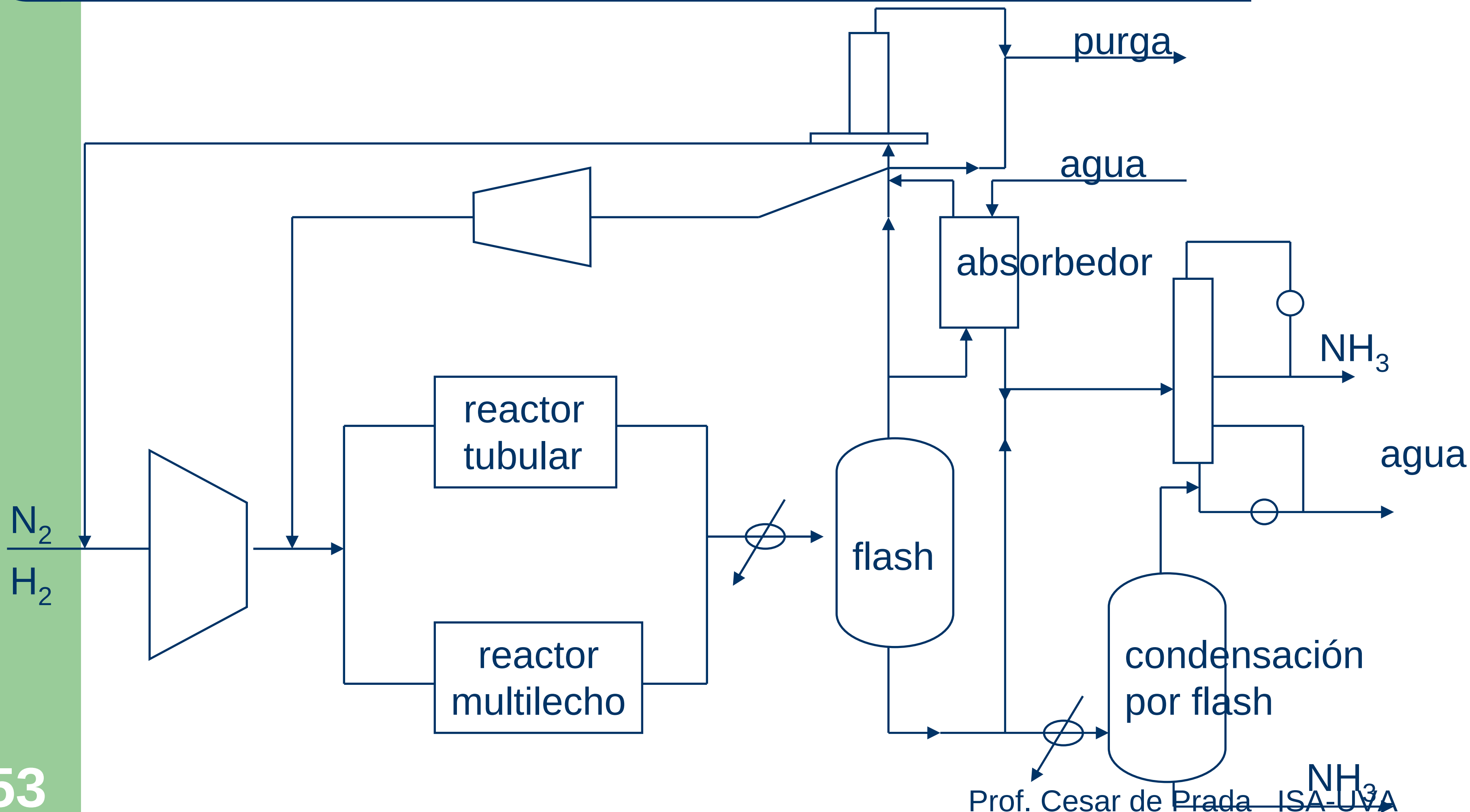
Ejemplo de producción de amoníaco, Biegler et all, 1997.



Ejemplo de producción de amoníaco (árbol de alternativas)

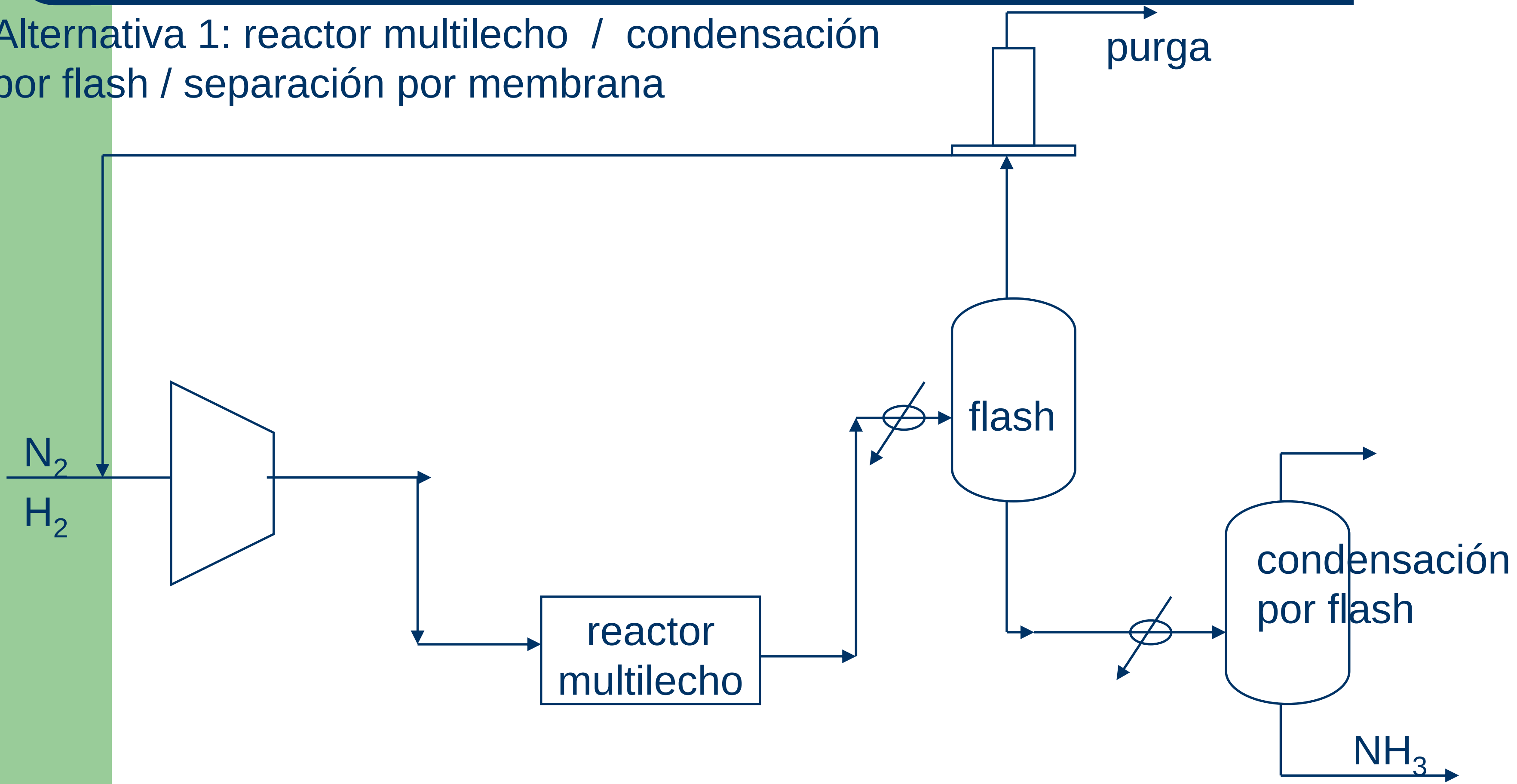


Ejemplo de producción de amoníaco (superestructura)

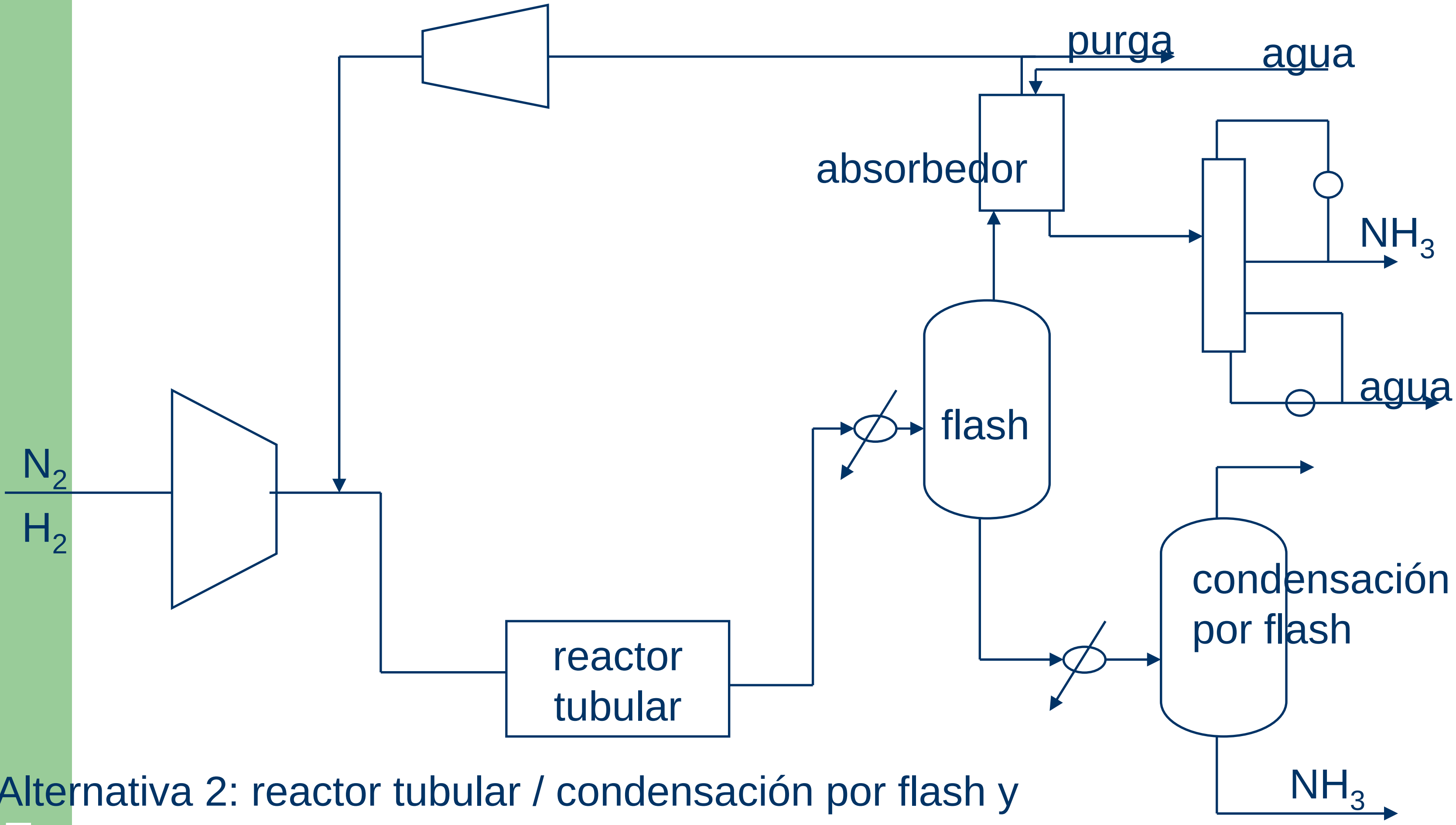


Alternativa del reactor multilecho

Alternativa 1: reactor multilecho / condensación por flash / separación por membrana

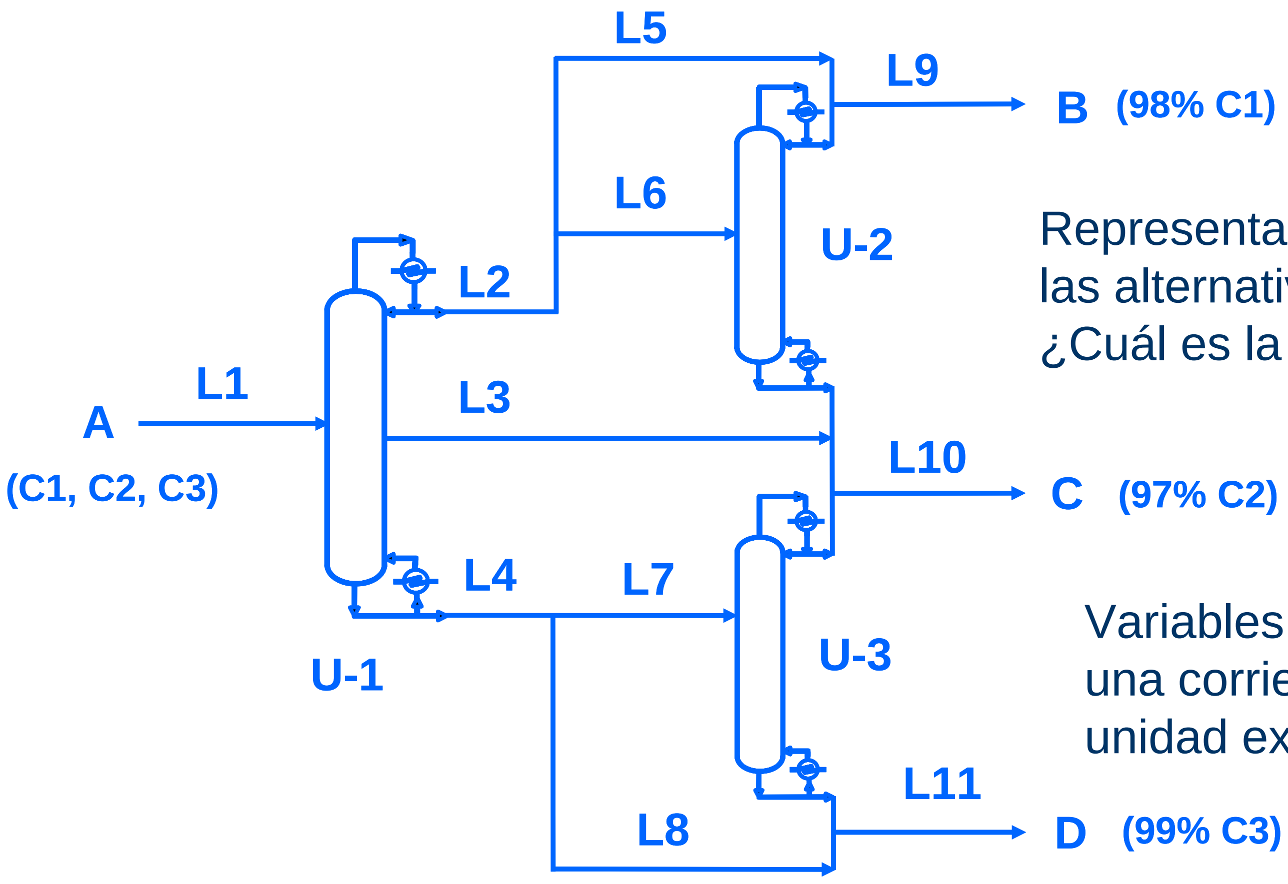


Alternativa para el reactor tubular



Alternativa 2: reactor tubular / condensación por flash y destilación por absorción / separación por membrana

Superestructuras



Representación de todas las alternativas posibles. ¿Cuál es la mejor?

Variables 0-1 indican si una corriente o una unidad existen o no

Asignación de tareas

En un taller trabajan n personas capaces de realizar diversas tareas. Debido a sus diferentes habilidades y experiencia cada una tarda un tiempo diferente en hacer cada una de las tareas, el cual es conocido. Se deben realizar n de esas tareas para completar un determinado trabajo. ¿Cómo debe asignarse el personal para realizar el tiempo total empleado?

Variables

i personas

j tareas

t_{ij} tiempo que la persona i tarda en hacer la tarea j

y_{ij} variable binaria, vale 1 si a la persona i se le asigna la tarea j

Asignación de tareas

$$\min_{\mathbf{x}} \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} t_{ij} y_{ij}$$

Tiempo total empleado

sujeto a

$$\sum_{i=1}^{n} y_{ij} = 1 \qquad j = 1,\ldots,n$$

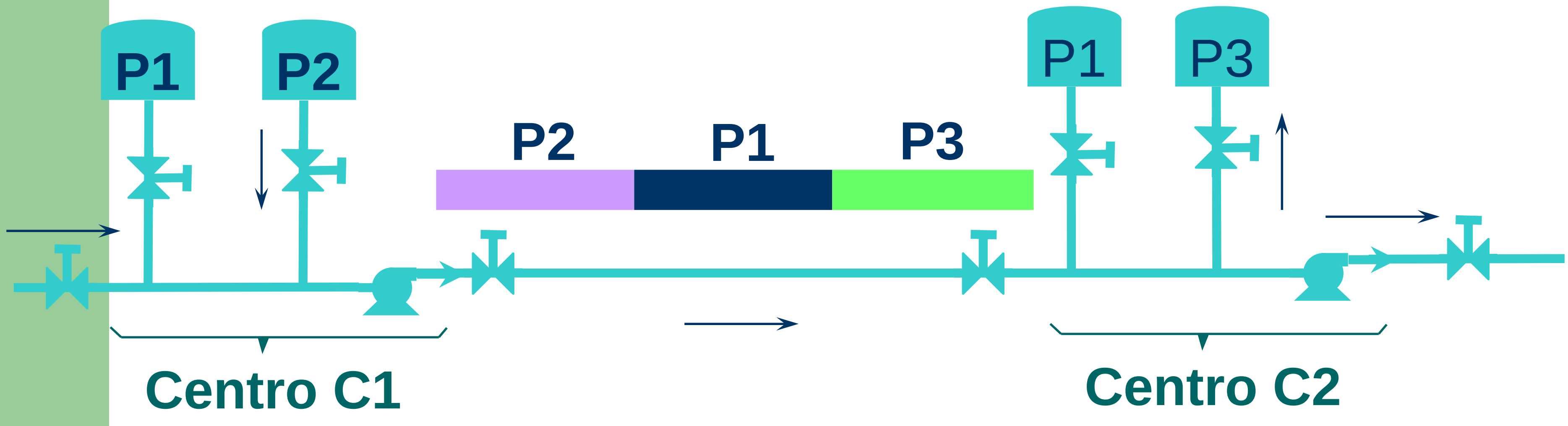
Cada persona tiene que tener asignada una tarea y una sola

$$\sum_{j=1}^{n} y_{ij} = 1 \qquad i = 1,\ldots,n$$

Cada tarea debe haber sido asignada a una persona y a una sola

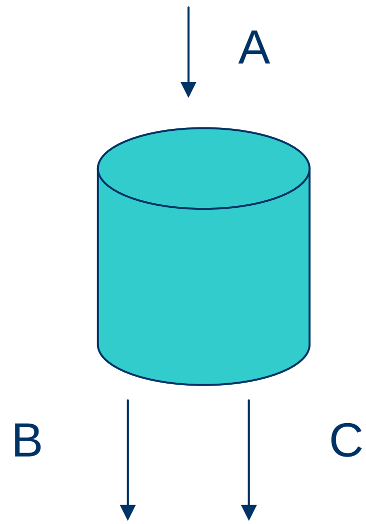
y_{ij} binaria

Oleoducto



¿En que orden debo enviar los productos para minimizar costos, satisfacer restricciones (dos tipos determinados de productos no deben ir juntos) y satisfacer las demandas en tiempo?

Reactor batch



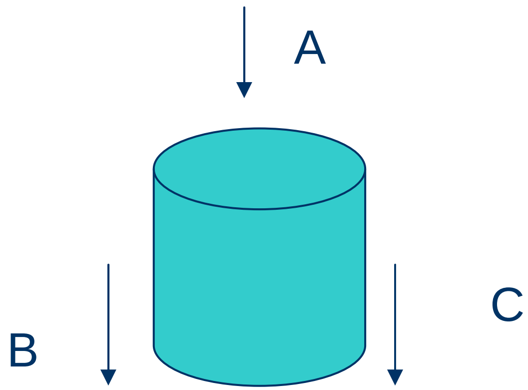
Un reactor opera en forma batch en periodos de trabajo de una hora. Se alimenta de un producto A que da lugar a dos reacciones paralelas A $\rightarrow$ B y A $\rightarrow$ C pero solo el producto B tiene valor comercial. Las velocidades de reacción son:

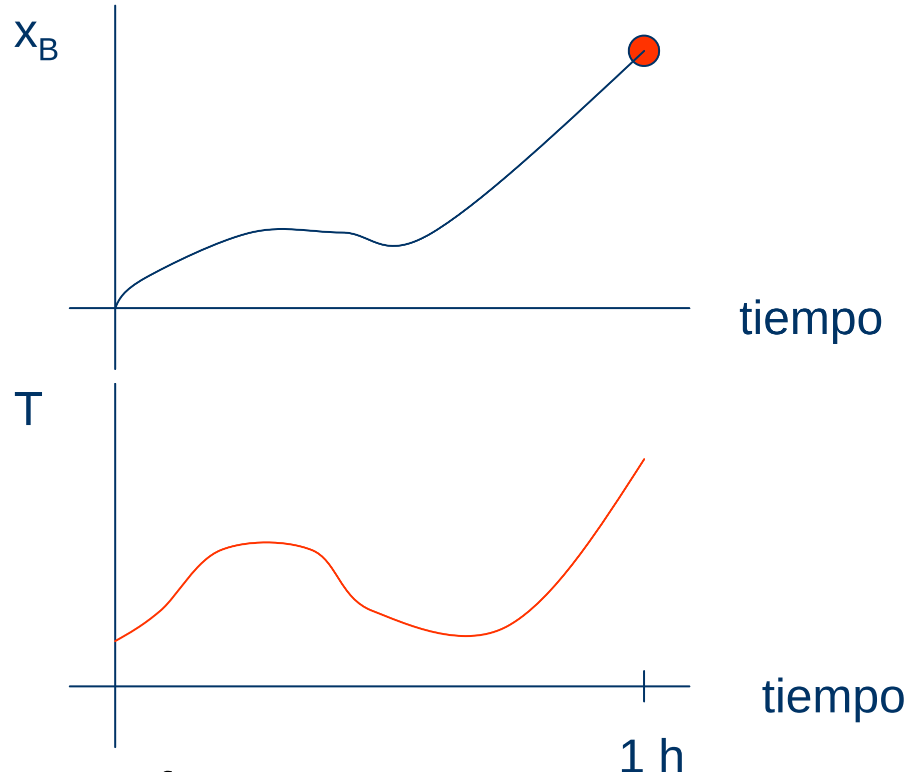
$$k_B = 10^6 \exp(10000/RT)$$

$$k_C = 5*10^{11} \exp(20000/RT)$$

Encontrar el perfil de temperatura que maximiza la producción final de B, sabiendo que esta debe ser inferior en todo momento a 139 ºC

Optimización dinámica





$$\max_{T(t)} \quad x_B(1)$$

$$\frac{dx_A}{dt} = -(k_B + k_C)x_A \qquad x_A(0) = A_0$$

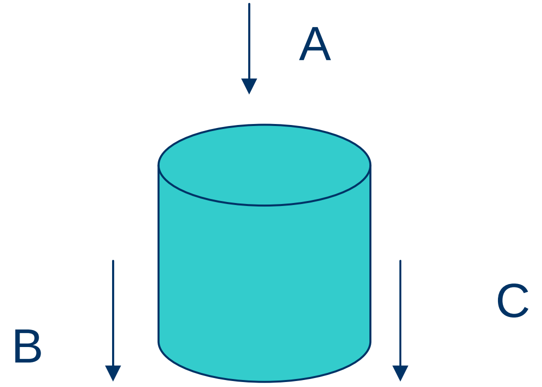
$$\frac{dx_B}{dt} = k_B x_A \qquad x_B(0) = 0$$

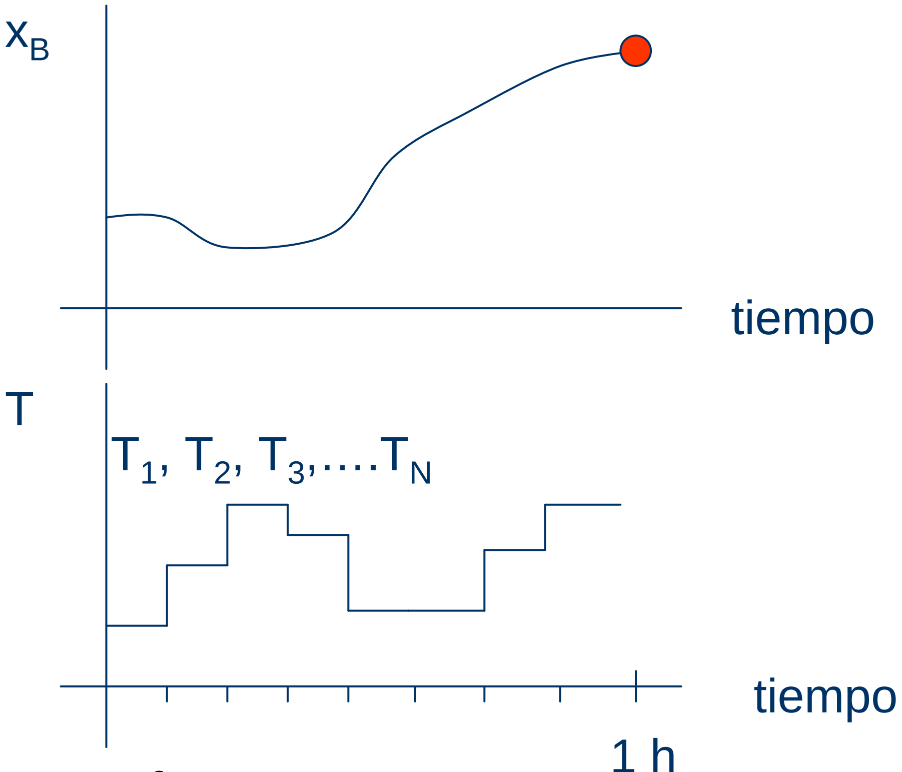
$$T(t) \leq 139$$

$$k_B = 10^6 \exp(10000 / RT)$$

$$k_C = 5 * 10^{11} \exp(20000 / RT)$$

Parametrización de las variables de decisión





$$\max_{T_i} \quad x_B(1)$$

$$\frac{dx_A}{dt} = -(k_B + k_C)x_A \qquad x_A(0) = A_0$$

$$\frac{dx_B}{dt} = k_B x_A \qquad\qquad x_B(0) = 0$$

$$T_i \leq 139$$

$$k_B = 10^6 \exp(10000/RT)$$

$$k_C = 5*10^{11} \exp(20000/RT)$$

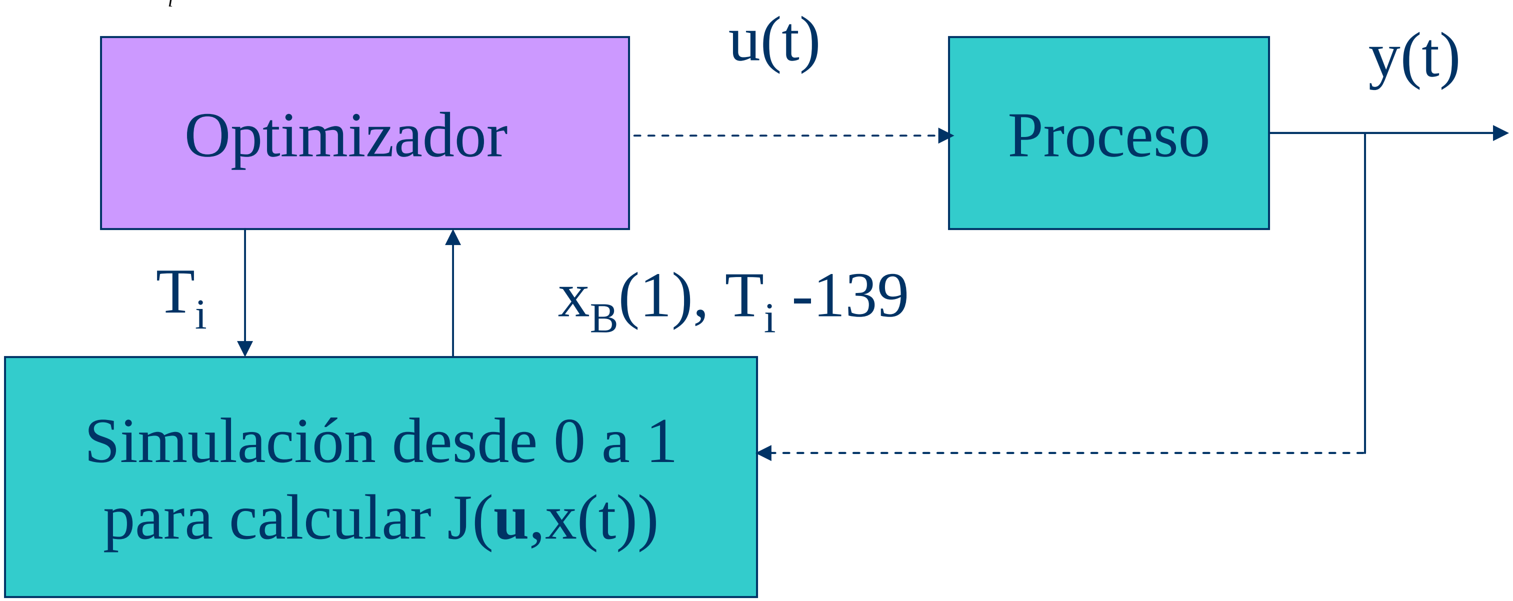
Resolución con simulación

$$\max_{T_i} \quad x_B(1)$$

$$\frac{dx_A}{dt} = -(k_B + k_C)x_A \qquad x_A(0) = A_0$$

$$\frac{dx_B}{dt} = k_B x_A \qquad x_B(0) = 0$$

$$T_i \leq 139$$



Optimización dinámica secuencial

$$\min_{u} \mathrm{J}(x,u)$$

$$\dot{x}(t) = f(x(t),u(t)) \qquad \mathrm{y(t)=g(x(t),u(t)}$$

$$\underline{y} \le y(t) \le \overline{y} \qquad \underline{u} \le u(t) \le \overline{u}$$