MCTA017 – Programação Matemática

EPR202 – Métodos de Otimização Aplicados à Eng. de Produção

Aula 1

Introdução à Otimização Linear

(Parte I)

Prof. Dr. Aritanan Gruber

Centro de Matemática, Computação e Cognição
Universidade Federal do ABC

Quadrimestre Suplementar 2020

Outline

Notas Iniciais

Introdução à Otimização

Alguns Modelos Lineares

Do Que Se Trata?

Programação Matemática:

- Programação, neste contexto, significa ‘planejamento;’
- Literalmente, 'modelos matemáticos para planejamento;'
- Também chamados de modelos de otimização.
- Foco: modelagem, teoria e algoritmos de otimização.

Métodos de Otimização:

- Um nome mais direto;
- Métodos, neste contexto, engloba modelagem, teoria e algoritmos.

São largamente usados como sinônimos na literatura.

Notas sobre os Dois Cursos

- Programação Matemática é um curso de graduação do BCC.
- Métodos de otimização Aplicados à Eng. de Produção é um curso do mestrado em Eng. de Produção.

Os cursos não são iguais (exemplos, profundidade de cobertura dos tópicos e velocidade de exposição variam), mas, claramente, possuem uma parte em comum.

Para estas partes comuns, vamos utilizar os mesmos vídeos e slides. Para as partes específicas, cada curso terá os seus próprios vídeos e slides.

Avaliações e atendimentos são específicos para cada curso.

Notas sobre os Slides

- Escritos para aulas e não apresentações;
- Logo, cada slide possui mais texto e mais informação;
- O tempo de escrita obviamente não ocorre no vídeo (ao contrário das aulas em lousas);
- De qualquer forma, vou (tentar) controlar o passo para não avançarmos muito rápido e sofrermos com um transbordamento de conteúdo (= cobrir muito mais material do que seria possível em uma aula presencial);
- Como? Limitando superiormente cada aula a 90min.

Outline

Notas Iniciais

Introdução à Otimização

Alguns Modelos Lineares

Problemas de Otimização

Versão de Minimização

Formulação genérica:

Dados: um funcional *objetivo* f e um conjunto de *pontos viáveis* $S \subseteq \mathrm{dom}(f)$.

Determinar:

- se $S = \emptyset$, implicando que o problema é *inviável*, ou
- se $\inf \{f(\boldsymbol{x}) \ : \ \boldsymbol{x} \in S\} = -\infty$, implicando que o problema é *ilimitado*, ou
- um $\boldsymbol{x}^* \in \mathrm{arginf}\,\{f(\boldsymbol{x}) \ : \ \boldsymbol{x} \in S\}$, implicando que $\boldsymbol{x}^*$ é uma *solução ótima* (de valor $f(\boldsymbol{x}^*) > -\infty$).

Note que as possibilidades acima são mutuamente exclusivas.

Uma instância do problema é dita um *programa de otimização*.

Problemas de Otimização

Versão de Minimização

Estamos interessados em soluções algorítmicas (modelo uniforme), que recebem instâncias e devolvem as respostas apropriadas.

Acrescentamos à nossa "lista de desejos:"

- Algoritmos *eficientes*, cujo consumo de tempo é polinomial no tamanho das instâncias, para determinar as soluções;
- obtenção de "certificados" (sucintos) que atestem a veracidade das respostas fornecidas.

Nota: como $\sup_S\{f\} = -\inf_S\{-f\}$, problemas de maximização também estão contemplados.

Problemas de Otimização

Como introduzido, o problema é tão geral que engloba desde

- problemas *simples*, com soluções analíticas fechadas
  (ex. mínimos quadrados em duas variáveis), a
- problemas que sabemos resolver "eficientemente"
  (ex. emparelhamentos máximos), a
- problemas que são, potencialmente, "intratáveis"
  (ex. minimização de expressões Booleanas), a
- problemas *incomputáveis*, para os quais não existem algoritmos
  (ex. equações diofantinas não lineares).

Vamos evitar o último tipo e nos concentrarmos nos três primeiros.

Problemas de Otimização

Especificação

A função objetivo f e o conjunto de pontos viáveis S podem ser fornecidos

- explicitamente (*white-box*), via formas algébrica/analítica ou combinatória, ou
- implicitamente (*black-box*), via oráculos de valor e pertinência.

Vamos trabalhar, primeiro, no regime white-box.

Problemas de Otimização

Especificação

$$
\begin{aligned}
\min_{x_i} \quad & f(x_1, x_2, \ldots, x_n) \\
\text{s.t.} \quad & f_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) \leq 0 \quad \forall\, j \in M_1 \\
& f_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) = 0 \quad \forall\, j \in M_2 \\
& f_j(x_1, x_2, \ldots, x_n) \geq 0 \quad \forall\, j \in M_3 \\
& x_i \geq 0 \quad \forall\, i \in N_1 \\
& x_i \leq 0 \quad \forall\, i \in N_2
\end{aligned}
$$

em que

- f e $f_1, f_2, \ldots, f_m$ são funções especificadas algebricamente;
- M_1, M_2, M_3 são conjuntos finitos e disjuntos de índices;
- N_1, N_2 são conjuntos finitos e disjuntos de índices;
- $x_1, x_2, \ldots, x_n$ são variáveis de decisão (sobre $\mathbb{R}$, $\mathbb{Q}$, ou $\mathbb{Z}$).

Problemas de Otimização

- Por não usarmos desigualdades estritas ($<$ e $>$), podemos focar em $\min$ e $\max$ em vez de $\inf$ e $\sup$;
- Vamos nos concentrar em $f, f_j : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$, com $\mathbb{Q}$ e $\mathbb{Z}$ no lugar de $\mathbb{R}$ em certas circunstâncias;
- f é a função objetivo;
- As desigualdades $f_j \{\leq, =, \geq\} 0$ e $x_i \{\leq, \geq\} 0$ descrevem o conjunto viável S; são chamadas *restrições*;
- $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n$ é viável se satisfaz as restrições.

Problemas de Otimização

Mínimos locais e globais

Um vetor $\boldsymbol{x}$ viável é um

- *mínimo local* se

$$f(\boldsymbol{x}) \leq f(\boldsymbol{y}) \quad \text{para todo} \quad \boldsymbol{y} \in \mathcal{B}(\boldsymbol{x}, \varepsilon),$$

  em que $\mathcal{B}(\boldsymbol{x}, \varepsilon) := \big\{\boldsymbol{y} : \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| \leq \varepsilon\big\}$ é a "bola" de raio $\varepsilon > 0$ em torno de $\boldsymbol{x}$;

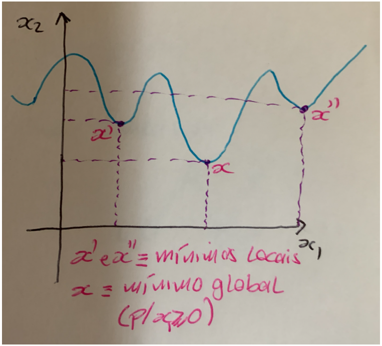
- *mínimo global* se

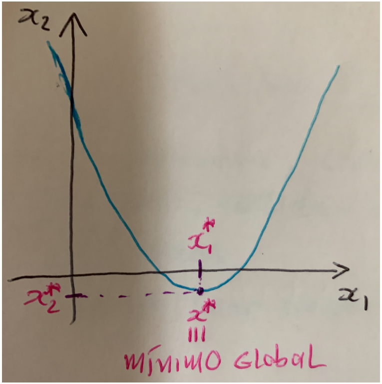
$$f(\boldsymbol{x}) \leq f(\boldsymbol{y}) \quad \text{para todo} \quad \boldsymbol{y} \in S.$$

Se $\boldsymbol{x}$ é mínimo global, então $\boldsymbol{x}$ é mínimo local; a recíproca, geralmente, não é verdadeira.

Problemas de Otimização

Mínimos locais e globais

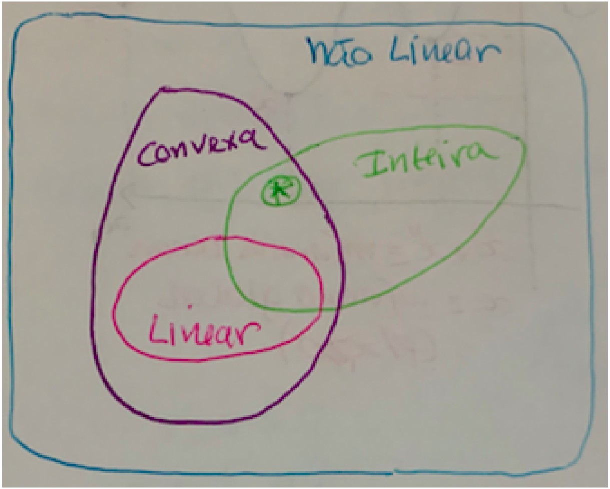




Em certas situações (ex., funções convexas sobre conjuntos convexos) todo mínimo local é um mínimo global.

Problemas de Otimização

Panorama



Nota: As noções de convexidade contínua e discreta são diferentes, mas "coincidem."

Outline

Notas Iniciais

Introdução à Otimização

Alguns Modelos Lineares

Otimização Linear — Exemplo clássico: dieta

Dada a tabala nutricional abaixo, queremos planejar um jantar com os ingredientes de forma que os requisitos de vitaminas e fibras alimentares sejam satisfeitos e o custo da refeição seja o menor possível.

Ingredientes	(a) Cenoura	(b) Repolho	(c) Pepino	Requerido
(1) Vitamina A [mg/kg]	35	0.5	0.5	0.5 mg
(2) Vitamina C [mg/kg]	60	300	10	15 mg
(3) Fibras [g/kg]	30	20	10	4 g
Preço [$/kg]	0.75	0.5	0.15	—

Sejam $x_a, x_b, x_c \geq 0$ variáveis de decisão em $\mathbb{R}$ tais que x_j representa a quantidade de ingrediente (j) a ser usado na refeição. Um modelo:

$$
\begin{aligned}
\min_{x_a, x_b, x_c} \quad & 0.75x_a + 0.5x_b + 0.15x_c \\
\text{s.t.} \quad & 35x_a + 0.5x_b + 0.5x_c \geq 0.5 \\
& 60x_a + 300x_b + 10x_c \geq 15 \\
& 30x_a + 20x_b + 10x_c \geq 4 \\
& x_a, x_b, x_c \geq 0
\end{aligned}
$$

Otimização Linear — Exemplo clássico: dieta

Uma "solução" para o modelo apresentado fornece as quantidades de cenoura, repolho e pepino que devem ser usadas para uma refeição balanceada ao menor custo possível.

Podemos deixar o problema mais interessante (e realista). Suponha que temos um orçamento W que não pode ser ultrapassado na confecção da refeição.

Estendemos o modelo para:

$$
\begin{array}{cr}
\displaystyle\min_{x_a, x_b, x_c} & 0.75x_a + 0.5x_b + 0.15x_c \\
\text{s.t.} & 35x_a + 0.5x_b + 0.5x_c \geq 0.5 \\
& 60x_a + 300x_b + 10x_c \geq 15 \\
& 30x_a + 20x_b + 10x_c \geq 4 \\
& 0.75x_a + 0.5x_b + 0.15x_c \leq W \\
& x_a, x_b, x_c \geq 0
\end{array}
$$

Otimização Linear — Exemplo clássico: dieta

Os modelos que fornecemos capturam as relações existentes, e que devem ser satisfeitas, em tomadas de decisão. No caso, as quantidades mínimas de ingredientes (pois estamos estamos minimizando o custo da refeição) que devem ser utilizadas e ainda satisfazer os requerimentos nutricionais.

Observe que, neste caso, nossos modelos são concretos: todos os dados estão codificados no modelo (a menos do parâmetro W); são, essencialmente, instâncias.

Não é difícil perceber que podemos generalizá-las a n ingredientes e m compostos (vitaminas, sais minerais, etc.).

Nota: O problema fica computacionalmente mais difícil se as quantidades forem inteiras.

Otimização Linear — Exemplo clássico: dieta

Para isso, suponha que são dados:

- uma matriz $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, em que a entrada $A_{i,j}$ descreve a quantidade do composto i no ingrediente j, nas unidades escolhidas;
- um vetor $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^m$, em que b_i é o requerimento do composto i;
- um vetor $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^n$, em que c_j é o custo por unidade escolhida do ingrediente j.

Seja $\boldsymbol{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$ um vetor de variáveis reais de decisão; x_j representa a quantidade de ingrediente j a ser usado.

Modelo:

$$\begin{aligned} \min_{\boldsymbol{x}} \quad & \boldsymbol{c}^\top \boldsymbol{x} \\ \text{s.t.} \quad & \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geq \boldsymbol{b} \\ & \boldsymbol{x} \geq 0 \end{aligned}$$

Otimização Linear — Exemplo: mochila contínua

Estamos em uma loja que vende produtos alimentícios à granel, como arroz, feijão, aveia, farinha, nozes, castanhas, etc.

Suponha que são vendidos $n \geq 0$ produtos. Cada grama de produto i custa $c_i \geq 0$ e possui, para você, uma utilidade v_i. Você tem um orçamento de W para realizar uma compra.

Problema: selecionar quantidades x_i de cada produto i tal que o custo total não ultrapasse W e a utilidade obtida seja máxima.

Modelo:

$$
\begin{aligned}
\max_{x_i} \quad & \sum_{i=1}^{n} v_i x_i \\
\text{s.t.} \quad & \sum_{i=1}^{n} c_i x_i \leq W \\
& x_i \geq 0 \quad \forall\, i \in [n]
\end{aligned}
$$

Otimização Linear — Exemplo: fluxos máximos

Precisamos transportar água de centros produtores ($S \neq \emptyset$) a consumidores ($T \neq \emptyset$). Existem, ainda, centros de distribuição (D) que não fornecem nem absorvem água.

O escoamento da água é feito por tubulações entre certos pares de centros. Para centros $i \neq j$ que estão conectados, a tubulação possui capacidade para escoamento de $u(i, j) \geq 0$ litros (por unidade de tempo; não importante neste problema).

Podemos supor que não há perdas (vazamentos) na rede e que cada tubulação é usada em um único sentido.

Objetivo: escoar a maior quantidade possível de água dos centros produtores aos consumidores, respeitando as capacidades das tubulações.

Otimização Linear — Exemplo: fluxos máximos

Claramente, este é um problema de fluxos em digrafos: o famoso problema do fluxo máximo.

Um digrafo $G = (S \uplus T \uplus D, E)$ descreve uma rede de abastecimento de água: um arco $(i,j) \in E$ se existe uma tubulação do centro i ao centro j, com $i \neq j$.

Sem perda de generalidade, suponha que não há arcos (i,s) para $s \in S$ e (t,j) para $t \in T$. Podemos ter, simultaneamente, arcos (i,j) e (j,i) para $i,j \in D$, com $i \neq j$.

Um vetor $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^E$ descreve as capacidades dos arcos (tubulações); $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$ é um vetor de variáveis de decisão – uma para cada arco – que tomam valores reais não negativos: fluxo que será escoado por cada arco.

Otimização Linear — Exemplo: fluxos máximos

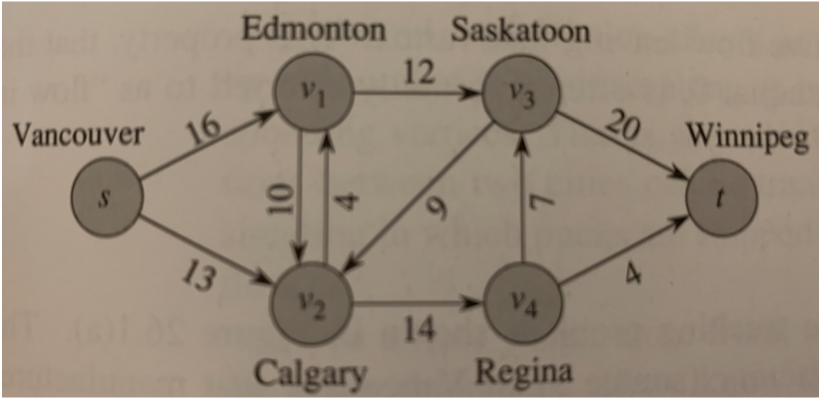
$$
\begin{array}{lll}
\max\limits_{\boldsymbol{x}} & \sum \{x(s,j) : s \in S,\, (s,j) \in E\} & \\
\text{s.t.} & \sum\limits_{(i,j)\in E} x(i,j) - \sum\limits_{(j,i)\in E} x(j,i) = 0 & \forall\, i \in D \quad (\bullet) \\
& 0 \le x(i,j) \le u(i,j) & \forall\, (i,j) \in E
\end{array}
$$

- As restrições $(\bullet)$ garantem a conservação de fluxo nos centros de distribuição: a quantidade de fluxo que entra é igual à que sai (lei de Kirchhoff);
- O problema é trivial se G for bipartido ($D = \emptyset$);
- Obtemos o mesmo resultado com

$$\sum \{x(i,t) : t \in T,\, (i,t) \in E\}$$

como função objetivo (prove!).

Otimização Linear — Exemplo: fluxos máximos



(extraída de Cormen-Leiserson-Rivest-Stein)

$S = \{s\}$, $T = \{t\}$, $D = \{v_1, v_2, v_3, v_4\}$.

Otimização Linear — Exemplo: fluxos máximos

$$
\begin{aligned}
\max \quad & x(s,v_1) + x(s,v_2) \\
\text{s.t.} \quad & x(v_1,v_2) + x(v_1,v_3) - x(s,v_1) - x(v_2,v_1) = 0 \\
& x(v_2,v_1) + x(v_2,v_4) - x(s,v_2) - x(v_1,v_2) - x(v_3,v_2) = 0 \\
& x(v_3,t) + x(v_3,v_2) - x(v_1,v_3) - x(v_4,v_3) = 0 \\
& x(v_4,t) + x(v_4,v_3) - x(v_2,v_4) = 0 \\
& 0 \le x(s,v_1) \le 16 \\
& 0 \le x(s,v_2) \le 13 \\
& 0 \le x(v_1,v_2) \le 10 \\
& 0 \le x(v_1,v_3) \le 12 \\
& 0 \le x(v_2,v_1) \le 4 \\
& 0 \le x(v_2,v_4) \le 14 \\
& 0 \le x(v_3,t) \le 20 \\
& 0 \le x(v_3,v_2) \le 9 \\
& 0 \le x(v_4,t) \le 4 \\
& 0 \le x(v_4,v_3) \le 7
\end{aligned}
$$

Otimização Linear — Ex: fluxo de custo mínimo

Queremos, agora, transportar água de centros produtores ($S \neq \emptyset$) a consumidores ($T \neq \emptyset$). Cada centro $i \in S$ fornece $b(i) > 0$ litros de água e cada centro $i \in T$ absorve $b(i) < 0$ litros.

Existem, ainda, centros de distribuição (D) que não fornecem nem absorvem água: $b(i) = 0$ para todo $i \in D$.

O escoamento da água é feito por tubulações entre certos pares de centros. Podemos supor que não há perdas (vazamentos) na rede e que cada tubulação é usada em um único sentido.

Para centros $i \neq j$ que estão conectados, a tubulação possui capacidade para escoamento de $u(i, j) \geq 0$ litros por unidade de tempo, a um custo $c(i, j) \geq 0$.

Otimização Linear — Ex: fluxo de custo mínimo

Objetivo: escoar água dos centros produtores aos consumidores, respeitando as capacidades das tubulações e incorrendo no menor custo possível.

Este é outro problema de fluxo sobre digrafos: fluxo de custo mínimo.

Um digrafo $G = (S \uplus T \uplus D, E)$ descreve uma rede de abastecimento de água: um arco $(i, j) \in E$ se existe uma tubulação do centro i ao centro j, com $i \neq j$.

Sem perda de generalidade, suponha que não há arcos (i, s) para $s \in S$ e (t, j) para $t \in T$. Podemos ter, simultaneamente, arcos (i, j) e (j, i) para $i, j \in D$, com $i \neq j$.

Vetores $\boldsymbol{u} \in \mathbb{R}^E$ e $\boldsymbol{c} \in \mathbb{R}^E$ descrevem as capacidades e custos de uso dos arcos (tubulações); $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^E_{\geq 0}$ é um vetor de variáveis de decisão: fluxo que será escoado por cada arco.

Otimização Linear — Ex: fluxo de custo mínimo

$$
\begin{array}{lll}
\min\limits_{\boldsymbol{x}} & \displaystyle\sum_{(i,j)\in E} c(i,j)x(i,j) & \\
\text{s.t.} & \displaystyle\sum_{(i,j)\in E} x(i,j) - \sum_{(j,i)\in E} x(j,i) = b_i & \forall\, i \in S \uplus T \uplus D \quad (\star) \\
& 0 \le x(i,j) \le u(i,j) & \forall\, (i,j) \in E
\end{array}
$$

- As restrições $(\star)$ garantem que as demandas são satisfeitas;
- Se $\sum_{s\in S} b_s \neq -\sum_{t\in T} b_t$, o problema é inviável;
- Mais do que isso, caso exista $\emptyset \neq R \subset S \uplus T \uplus D$ tal que

$$
\sum_{\substack{r\in R \\ (i,r)\in E}} u(i,r) < -\sum_{r\in R} b_r,
$$

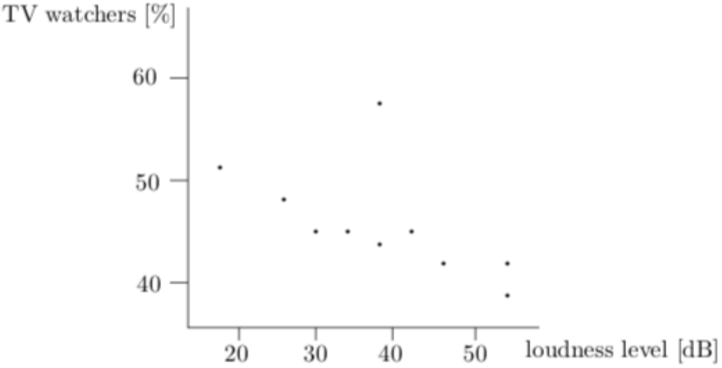
o problema é inviável.

Otimização Linear — Ex: regressão ℓ_1 em 2 vars.

Suponha que temos uma coleção de pontos no plano $\mathbb{R}^2$:

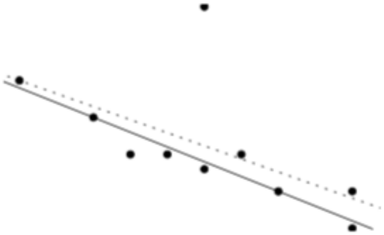
$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \ldots, (x_n, y_n).$$

Como na figura abaixo, extraída de Matoušek-Gärtner (pg. 19).



Otimização Linear — Ex: regressão ℓ_1 em 2 vars.

Queremos determinar uma reta $y = ax + b$ que "melhor aproxime" os pontos dados.



Várias possibilidades de solução. Escolhemos a busca pela reta que minimiza a norma ℓ_1:

$$\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} |ax_i + b - y_i|.$$

Otimização Linear — Ex: regressão ℓ_1 em 2 vars.

Problema: a função objetivo não é linear.

Mas é linear por partes! Podemos assim, *reformular* o modelo em uma versão linear.

Temos que $|ax_i + b - y_i| \geq 0$ implica em $ax_i + b - y_i \geq 0$ ou $-(ax_i + b - y_i) \geq 0$. Logo, introduzindo uma variável auxiliar e_i (erro no ponto i) tal que

$$\begin{aligned} e_i &\geq ax_i + b - y_i \\ e_i &\geq -(ax_i + b - y_i) \end{aligned}$$

obtemos que

$$e_i \geq \max\{ax_i + b - y_i, -(ax_i + b - y_i)\} = |ax_i + b - y_i|.$$

Otimização Linear — Ex: regressão ℓ_1 em 2 vars.

Temos, então, a reformulação linear:

$$\begin{aligned} \min_{a,b,e_i} \quad & \sum_{i=1}^{n} e_i \\ \text{s.t.} \quad & e_i \geq ax_i + b - y_i && \forall\, i \in [n] \\ & e_i \geq -(ax_i + b - y_i) && \forall\, i \in [n] \end{aligned}$$

Nota: A regressão ℓ_2 (norma euclidiana), conhecida como mínimos quadrados consiste em uma função objetivo quadrática

$$\min_{a,b} \sum_{i=1}^{n} (ax_i + b - y_i)^2,$$

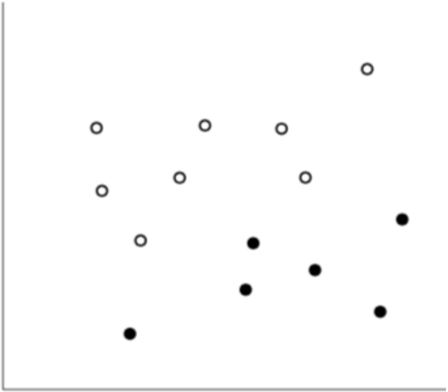
e necessita diferentes técnicas para resolução.

Otimização Linear — Ex: separação em $\mathbb{R}^2$

Suponha que temos duas coleções de pontos no plano $\mathbb{R}^2$, uma de pontos brancos e outra de pontos pretos:

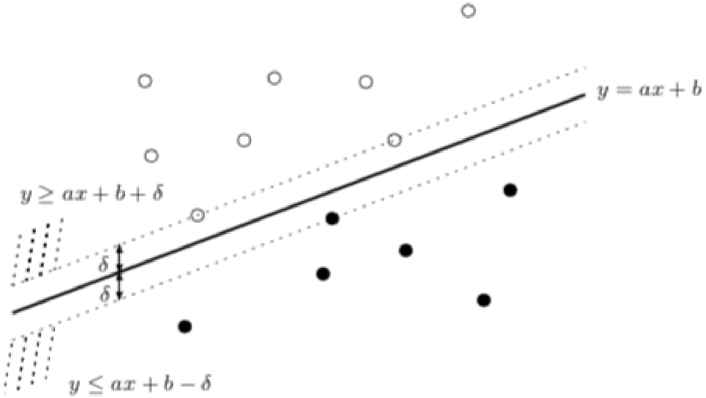
$$(r_1, s_1), (r_2, s_2), \ldots, (r_m, s_m) \quad \text{e} \quad (w_1, z_1), (w_2, z_2), \ldots, (w_n, z_n).$$

Como na figura abaixo, extraída de Matoušek-Gärtner (pg. 21).



Otimização Linear — Ex: separação em $\mathbb{R}^2$

Queremos determinar uma reta $y = ax + b$ que “separe“ os pontos dados. De preferência, deixando uma “margem” de segurança.



Atente para o fato de que o problema pode não ter solução.

Otimização Linear — Ex: separação em $\mathbb{R}^2$

Um ponto (p_i, q_i) está de um "lado" da reta se $q_i > ap_i + b$ e do "outro" se $q_i < ap_i + b$.

Introduzimos uma variável auxiliar δ para representar a margem e "fechar o espaço" entre as desigualdades estritas.

$$
\begin{array}{lll}
\max\limits_{a,b,\delta} & \delta & \\
\text{s.t.} & s_i \geq ar_i + b + \delta & \forall\, i \in [m] \\
 & z_j \leq aw_j + b - \delta & \forall\, j \in [n]
\end{array}
$$

Por Que Estudar Otimização Linear?

- De certa forma, é uma extensão natural de álgebra linear, envolvendo desigualdades e máximos/mínimos;
- Não obstante, várias ideias interessantes foram e ainda são desenvolvidas na área; muitas delas, foram generalizadas para outros domínios e casos não lineares;
- Dualidade é uma ferramenta poderosa na prova de teoremas e desenvolvimento de algoritmos, tanto exatos quanto aproximados;
- Serve como ferramenta para resolução de problemas maiores mais complexos;
- Possui inúmeras aplicações teóricas e práticas, direta ou indiretamente, em uma miríade de campos:
  - Aprendizado de máquina
  - Biologia e neurociência
  - Economia e finanças
  - Engenharias
  - Física
  - Matemática
  - Química
  - Teoria da computação