Universidade do Minho

Aplicações e métodos para programação semi-infinita e optimização multi-local

A. Ismael F. Vaz

Departamento de Produção e Sistemas

Escola de Engenharia, Universidade do Minho

aivaz@dps.uminho.pt

Edite M.G.P. Fernandes

Eugénio C. Ferreira

Luís N. Vicente

Trabalhos parcialmente suportados pela FCT (POCI/MAT/58957/2004, POCI/MAT/59442/2004) e centro de investigação Algoritmi

Universidade do Minho

Conteúdo

- Programação semi-infinita (PSI)
  - Definição e notação
  - Métodos para PSI
- Casos práticos
  - Poluição atmosférica
  - Controlo óptimo
- Optimização global e multi-local
  - Colónia de partículas (*Particle Swarm*) em optimização global
  - Colónia de partículas em optimização multi-local

Conteúdo

Conteúdo
❖ Conteúdo

- Programação semi-infinita (PSI)
  - Definição e notação
  - Métodos para PSI
- Casos práticos
  - Poluição atmosférica
  - Controlo óptimo
- Optimização global e multi-local
  - Colónia de partículas (*Particle Swarm*) em optimização global
  - Colónia de partículas em optimização multi-local

Universidade do Minho

Conteúdo

- Programação semi-infinita (PSI)
  - Definição e notação
  - Métodos para PSI
- Casos práticos
  - Poluição atmosférica
  - Controlo óptimo
- Optimização global e multi-local
  - Colónia de partículas (*Particle Swarm*) em optimização global
  - Colónia de partículas em optimização multi-local

Programação semi-infinita

Notação

Um problema de PSI tem a seguinte formulação

$$\min_{x \in R^n} \; f(x)$$

$$s.a \;\; g_i(x,t) \leq 0, \; i = 1, \ldots, m$$

$$\forall t \in T \subset R^p,$$

onde $f(x)$ é a função objectivo e $g_i(x,t)$, $i = 1, \ldots, m$, são as funções das restrições infinitas.

Notação

Universidade do Minho

Um problema de PSI tem a seguinte formulação

$$\min_{x \in R^n} \; f(x)$$
$$s.a \;\; g_i(x,t) \leq 0, \; i = 1, \ldots, m$$
$$\forall t \in T \subset R^p,$$

onde $f(x)$ é a função objectivo e $g_i(x,t)$, $i = 1, \ldots, m$, são as funções das restrições infinitas.

Um ponto admissível ($\bar{x}$) tem que satisfazer:

$$g_i(\bar{x},t) \leq 0, \; i = 1, \ldots, m, \; \forall t \in T$$

significando que máximo global de g_i tem de ser menor ou igual a zero.

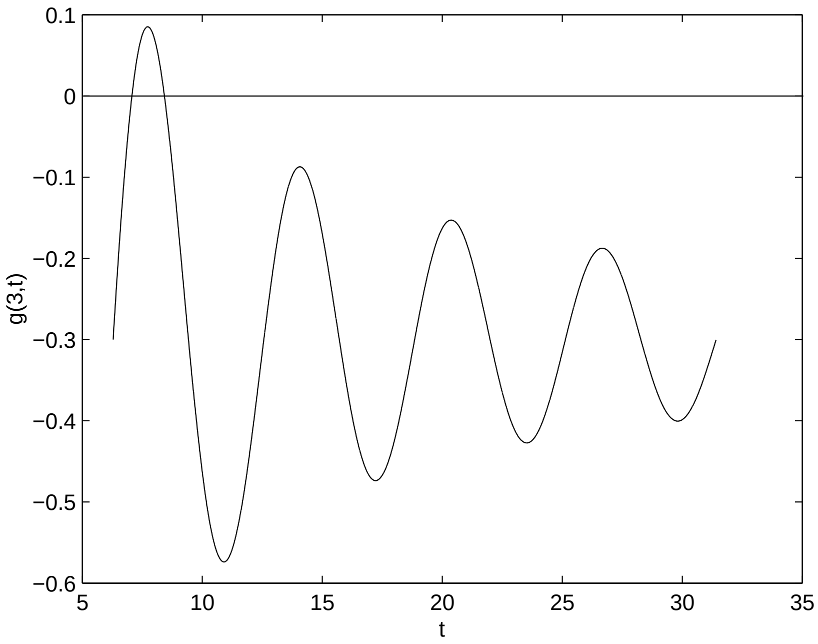
Um exemplo simples ($n = 1$, $m = 1$ e $p = 1$)

Universidade do Minho

$$\min_{x \in R^n} \; x^2$$

$$s.a \;\; \frac{x}{t}\sin(t) - \frac{x}{10} \le 0$$

$$\forall t \in [2\pi, 10\pi]$$



$$g(3,t) = \frac{3}{t}\sin(t) - \frac{3}{10}$$

$\bar{x} = 3$ é admissível?

Um exemplo simples - conclusões

A simples verificação de admissibilidade implica a resolução (aproximada) de m problemas de optimização global

$$\max_{t \in T} g_i(\bar{x}, t)$$

Universidade do Minho

Um exemplo simples - conclusões

A simples verificação de admissibilidade implica a resolução (aproximada) de m problemas de optimização global

$$\max_{t \in T} g_i(\bar{x}, t)$$

Optimização Global

Um exemplo simples - conclusões

Universidade do Minho

A simples verificação de admissibilidade implica a resolução (aproximada) de m problemas de optimização global

$$\max_{t \in T} g_i(\bar{x}, t)$$

Optimização Global

Para garantir a convergência de alguns métodos para PSI é necessário calcular todos os óptimos (máximos) locais dos problemas anteriores.

Um exemplo simples - conclusões

A simples verificação de admissibilidade implica a resolução (aproximada) de m problemas de optimização global

$$\max_{t \in T} g_i(\bar{x}, t)$$

Optimização Global

Para garantir a convergência de alguns métodos para PSI é necessário calcular todos os óptimos (máximos) locais dos problemas anteriores.

Optimização Multi-Local

Métodos para PSI

Métodos de discretização - São métodos que discretizam o domínio T, por exemplo, numa grelha de pontos. No exemplo anterior, a discretização do domínio $[2\pi, 10\pi]$ com um passo de grelha de 0.01 origina um problema finito com $\frac{10\pi - 2\pi}{0.01} \approx 21513$ restrições. (Uma única restrição do tipo infinito!!!)

Universidade do Minho

Métodos para PSI

Métodos de discretização - São métodos que discretizam o domínio T, por exemplo, numa grelha de pontos. No exemplo anterior, a discretização do domínio $[2\pi, 10\pi]$ com um passo de grelha de 0.01 origina um problema finito com $\frac{10\pi - 2\pi}{0.01} \approx 21513$ restrições. (Uma única restrição do tipo infinito!!!)

Métodos das trocas - São métodos que resolvem aproximadamente o problema multi-local incluindo e/ou removendo (trocas) restrições do problema finito. (Inserindo planos de corte - Programação linear).

Universidade do Minho

Métodos para PSI

Métodos de discretização - São métodos que discretizam o domínio T, por exemplo, numa grelha de pontos. No exemplo anterior, a discretização do domínio $[2\pi, 10\pi]$ com um passo de grelha de 0.01 origina um problema finito com $\frac{10\pi - 2\pi}{0.01} \approx 21513$ restrições. (Uma única restrição do tipo infinito!!!)

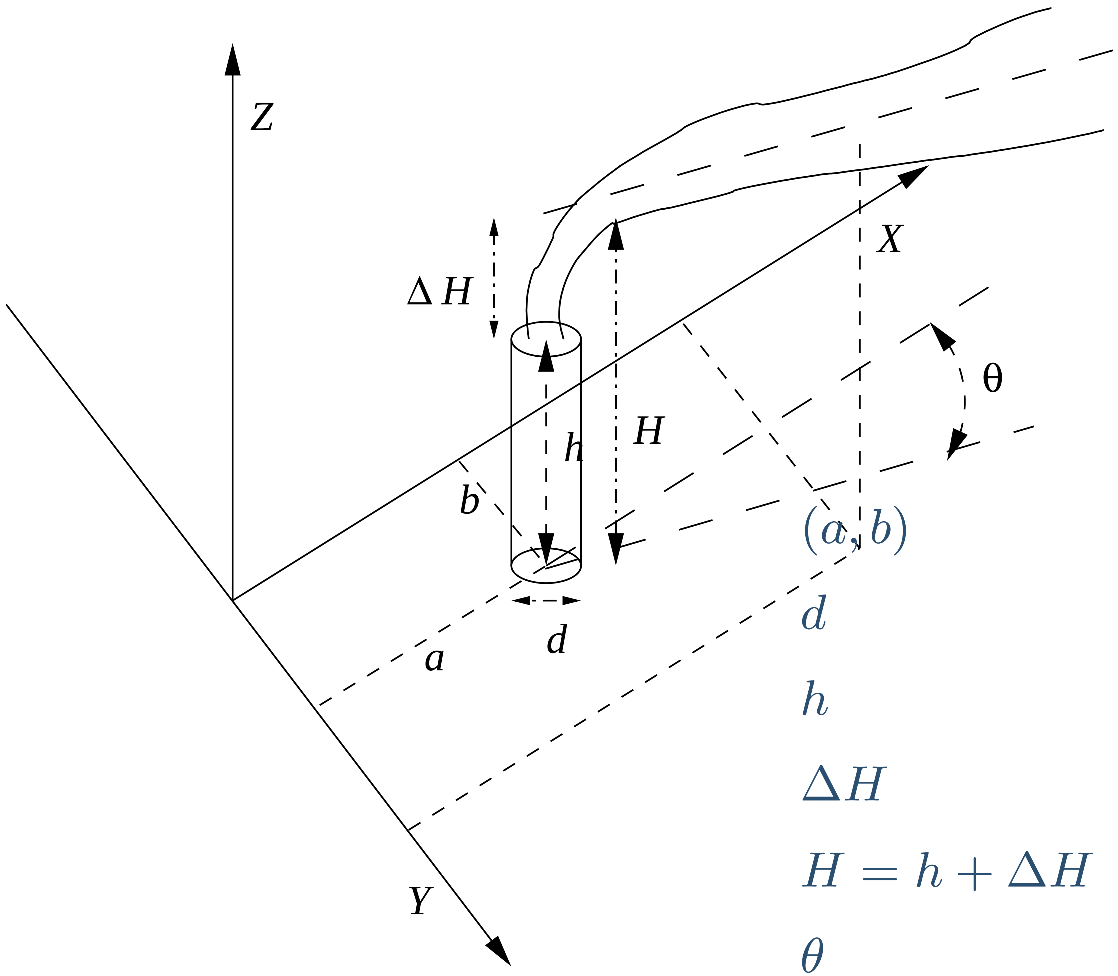
Métodos das trocas - São métodos que resolvem aproximadamente o problema multi-local incluindo e/ou removendo (trocas) restrições do problema finito. (Inserindo planos de corte - Programação linear).

Métodos de redução - São métodos que resolvem o problema multi-local e usam as soluções como restrições no problema finito. No exemplo anterior com 5 máximos (atenção ao extremo!) resolveria um problema com 5 restrições.

Casos de estudo

Universidade do Minho

Redução da poluição



(a, b)	posição da chaminé
d	diâmetro interno
h	altura
ΔH	elevação do penacho
$H = h + \Delta H$	altura efectiva
θ	direcção do vento

Universidade do Minho

Modelo de dispersão

Assumindo uma dispersão com distribuição Gaussiana, a concentração da poluição nas posições x, y e z de uma fonte emissora contínua com altura efectiva da chaminé de $\mathcal{H}$, é dada por

$$\mathcal{C}(x,y,z,\mathcal{H}) = \frac{\mathcal{Q}}{2\pi\sigma_y\sigma_z\mathcal{U}} e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{\mathcal{Y}}{\sigma_y}\right)^2} \left(e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z-\mathcal{H}}{\sigma_z}\right)^2} + e^{-\frac{1}{2}\left(\frac{z+\mathcal{H}}{\sigma_z}\right)^2}\right)$$

onde $\mathcal{Q}$ (gs^{-1}) é a taxa de emissão uniforme da poluição, $\mathcal{U}$ (ms^{-1}) é a velocidade média do vento, σ_y (m) e σ_z (m) são os desvios padrões no plano horizontal e vertical, respectivamente. $\mathcal{Y} = (x-a)\sin(\theta) + (y-b)\cos(\theta)$ indica uma deslocação da fonte para a posição (a,b) e uma rotação de θ (direcção do vento, $0 \leq \theta \leq 2\pi$).

σ_y e σ_z são dependentes de $\mathcal{X}$ dado por $\mathcal{X} = (x-a)\cos(\theta) - (y-b)\sin(\theta)$.

Suposições

- Elevação do penacho dado pela equação de Holland;
- Assumindo n fontes distribuídas numa região;
- $\mathcal{C}_i$ é a contribuição da fonte i para a concentração total;
- Gás quimicamente inerte.

Formulação

Minimizando a redução da poluição enquanto se mantém o nível da concentração da poluição abaixo de um patamar pode ser formulado como o seguinte problema de PSI

$$\min_{u \in R^n} \sum_{i=1}^{n} p_i r_i$$

$$s.a \quad g(u, v \equiv (x, y)) \equiv$$

$$\sum_{i=1}^{n} (1 - r_i)\mathcal{C}_i(x, y, 0, \mathcal{H}_i) \leq \mathcal{C}_0$$

$$\forall v \in \mathcal{R} \subset R^2,$$

Atenção à notação	
Formulação	PSI
u	x
x	t_1
y	t_2
v	t

where $u = (r_1, \ldots, r_n)$ é a redução da poluição e p_i, $i = 1, \ldots, n$, é o custo associado à fonte i (limpar ou não produzir).

Formulação geral

Universidade do Minho

O problema de controlo óptimo na forma geral é

$$\begin{array}{rl} \max & J(t_f) \\ s.a & \dot{x} = f(x,u,t) \\ & \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x} \\ & \underline{u} \leq u(t) \leq \overline{u} \\ & \forall t \in [t_0, t_f] \end{array}$$

em que x são as variáveis de estado, u são as variáveis de controlo (funções do tempo t), t_0, t_f são o tempo inicial e final, respectivamente, e

$$J(t_f) = \varphi(x(t_f), t_f) + \int_{t_0}^{t_f} \phi(x,u,t)dt,$$

onde φ é o índice de desempenho das variáveis de estado no tempo final t_f e ϕ é o índice de desempenho integrada durante a operação.

Caso particular de processo semi-contínuo

Problema de optimização do processo semi-contínuo de produção de Etanol.
O problema de optimização é: ($t_0 = 0$ e $t_f = 61.2$ dias)

$$\max_{u(t)} \quad J(t_f) \equiv x_3(t_f)x_4(t_f)$$

$$\begin{aligned} s.a \quad & \frac{dx_1}{dt} = g_1 x_1 - u\frac{x_1}{x_4} \\ & \frac{dx_2}{dt} = -10 g_1 x_1 + u\frac{150 - x_2}{x_4} \\ & \frac{dx_3}{dt} = g_2 x_1 - u\frac{x_3}{x_4} \\ & \frac{dx_4}{dt} = u \\ & 0 \leq x_4(t_f) \leq 200 \\ & 0 \leq u(t) \leq 12 \\ & \forall t \in [t_0, t_f] \end{aligned}$$

com

$$g_1 = \left(\frac{0.408}{1 + x_3/16}\right)\left(\frac{x_2}{0.22 + x_2}\right)$$

$$g_2 = \left(\frac{1}{1 + x_3/71.5}\right)\left(\frac{x_2}{0.44 + x_2}\right)$$

onde x_1, x_2 e x_3 são as concentrações da massa celular, substrato e produto (g/L), e x_4 é o volume (L). As condições iniciais são:

$$x(t_0) = (1, 150, 0, 10)^T.$$

Abordagem para a resolução

Universidade do Minho

- As restrições nas variáveis de estado são incluídas na função objectivo através de uma função de penalidade infinita.

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{if } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- As restrições nas variáveis de controlo são aproximadas por splines lineares

$$\underline{u} \leq w_i \leq \overline{u}.$$

em que w_i são os nós da spline linear.
(O problema deixa de ser semi-infinito.)

- Solução da equação diferencial com o CVODE.
- Problemas codificados em AMPL.

Abordagem para a resolução

- As restrições nas variáveis de estado são incluídas na função objectivo através de uma função de penalidade infinita.

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{if } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- As restrições nas variáveis de controlo são aproximadas por splines lineares

$$\underline{u} \leq w_i \leq \overline{u}.$$

em que w_i são os nós da spline linear.
(O problema deixa de ser semi-infinito.)

- Solução da equação diferencial com o CVODE.
- Problemas codificados em AMPL.

Universidade do Minho

Universidade do Minho

Abordagem para a resolução

- As restrições nas variáveis de estado são incluídas na função objectivo através de uma função de penalidade infinita.

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{if } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- As restrições nas variáveis de controlo são aproximadas por splines lineares

$$\underline{u} \leq w_i \leq \overline{u}.$$

  em que w_i são os nós da spline linear.
  (O problema deixa de ser semi-infinito.)
- Solução da equação diferencial com o CVODE.
- Problemas codificados em AMPL.

Abordagem para a resolução

- As restrições nas variáveis de estado são incluídas na função objectivo através de uma função de penalidade infinita.

$$\hat{J}(t_f) = \begin{cases} J(t_f) & \text{if } \underline{x} \leq x(t) \leq \overline{x}, \forall t \in [t_0, t_f] \\ -\infty & \text{caso contrário} \end{cases}$$

- As restrições nas variáveis de controlo são aproximadas por splines lineares

$$\underline{u} \leq w_i \leq \overline{u}.$$

em que w_i são os nós da spline linear.
(O problema deixa de ser semi-infinito.)

- Solução da equação diferencial com o CVODE.
- Problemas codificados em AMPL.

Optimização global e multi-local

O Paradigma da colónia de partículas (CP)

Universidade do Minho

Os algoritmos baseados em colónia de partículas tentam imitar o comportamento social de uma população (colónia) de indivíduos (partículas).

O comportamento de um indivíduo é uma combinação da sua experiência passada (influência cognitiva) e da experiência da sociedade (influência social).

No contexto da optimização, uma partícula p, no instante t, é representada pela sua posição actual ($x^p(t)$), a sua melhor posição de sempre ($y^p(t)$) e uma velocidade de *viagem* ($v^p(t)$).

Nova posição e velocidade

A nova posição da partícula é actualizada por

$$x^p(t+1) = x^p(t) + v^p(t+1),$$

onde $v^p(t+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(t+1) = \iota(t) v_j^p(t) + \mu\omega_{1j}(t)\left(y_j^p(t) - x_j^p(t)\right) + \nu\omega_{2j}(t)\left(\hat{y}_j(t) - x_j^p(t)\right),$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(t)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(t)$ e $\omega_{2j}(t)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

Nova posição e velocidade

Universidade do Minho

A nova posição da partícula é actualizada por

$$x^p(t+1) = x^p(t) + v^p(t+1),$$

onde $v^p(t+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(t+1) = \iota(t)v_j^p(t) + \mu\omega_{1j}(t)\left(y_j^p(t) - x_j^p(t)\right) + \nu\omega_{2j}(t)\left(\hat{y}_j(t) - x_j^p(t)\right),$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(t)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(t)$ e $\omega_{2j}(t)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

Nova posição e velocidade

A nova posição da partícula é actualizada por

$$x^p(t+1) = x^p(t) + v^p(t+1),$$

onde $v^p(t+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(t+1) = \iota(t)v_j^p(t) + \mu\omega_{1j}(t)\left(y_j^p(t) - x_j^p(t)\right) + \nu\omega_{2j}(t)\left(\hat{y}_j(t) - x_j^p(t)\right),$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(t)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(t)$ e $\omega_{2j}(t)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

Universidade do Minho

Nova posição e velocidade

A nova posição da partícula é actualizada por

$$x^p(t+1) = x^p(t) + v^p(t+1),$$

onde $v^p(t+1)$ é a nova velocidade dada por

$$v_j^p(t+1) = \iota(t)v_j^p(t) + \mu\omega_{1j}(t)\left(y_j^p(t) - x_j^p(t)\right) + \nu\omega_{2j}(t)\left(\hat{y}_j(t) - x_j^p(t)\right),$$

para $j = 1, \ldots, n$.

- $\iota(t)$ é o factor de inércia
- μ é o parâmetro *cognitivo* e ν é o parâmetro *social*
- $\omega_{1j}(t)$ e $\omega_{2j}(t)$ são números aleatórios obtidos da distribuição uniforme $(0, 1)$.

A melhor partícula da colónia

$\hat{y}(t)$ é a posição da partícula com melhor valor de sempre da função objectivo, *i.e.*,

$$\hat{y}(t) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} f(a)$$

$$\mathcal{A} = \left\{ y^1(t), \ldots, y^s(t) \right\}.$$

onde s é o tamanho da população.

A melhor partícula da colónia

$\hat{y}(t)$ é a posição da partícula com melhor valor de sempre da função objectivo, *i.e.*,

$$\hat{y}(t) = \arg\min_{a \in \mathcal{A}} f(a)$$
$$\mathcal{A} = \left\{ y^1(t), \ldots, y^s(t) \right\}.$$

onde s é o tamanho da população.

Do ponto de vista algorítmico apenas é necessário guardar o índice da partícula que obteve o melhor valor da função objectivo.

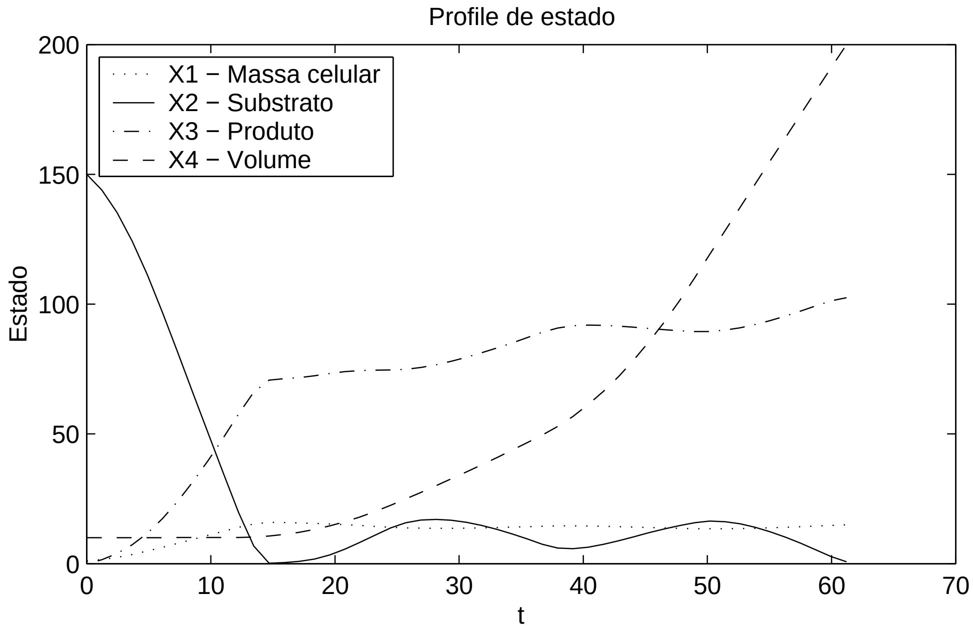
Resultados

Problemas de controlo óptimo em processos semi-contínuos.

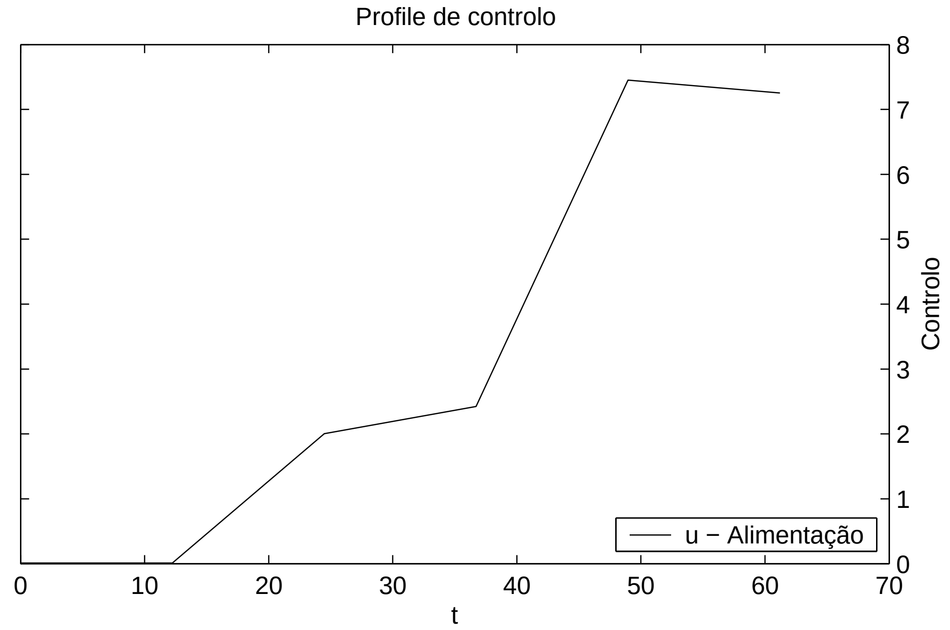
Problem	NT	MLOCPSOA		Reportados	
		$\hat{J}(t_f)$	t_f	$\hat{J}(t_f)$	t_f
`penicillin`	1	121.63	132.00	87.99	132.00
`ethanol`	1	20490.40	61.20	20839.00	61.17
`chemotherapy`	1	16.28	84.00	17.48	84.00
`hprotein`	1	18.73	15.00	32.40	15.00
`rprotein`	2	2.77	10.00	0.80	10.00

Resultados numéricos com o *solver* MLOCPSOA (sem optimização multi-local).

Profiles



Profile de estado
X1 − Massa celular
X2 − Substrato
X3 − Produto
X4 − Volume
Estado
t
0
50
100
150
200
10
20
30
40
60
70



Profile de controlo
u − Alimentação
Controlo
t
0
1
2
3
4
5
6
7
8
10
20
30
40
50
60
70

Universidade do Minho

MLPSO

❖ CP para optimização multi-local

CP para optimização multi-local

A equação da velocidade é modificada para

$$v_j^p(t+1) = \iota(t) v_j^p(t) + \mu \omega_{1j}(t) \left(y_j^p(t) - x_j^p(t) \right) + \nu \omega_{2j}(t) \left(\mathcal{D} \right) ,$$

para $j = 1, \ldots, n$, em que $\mathcal{D}$ é uma direcção de subida (descida).

A inclusão da direcção de subida local na equação da velocidade permite que cada partícula seja conduzida para um óptimo local.

PSwarm - Pattern Swarm

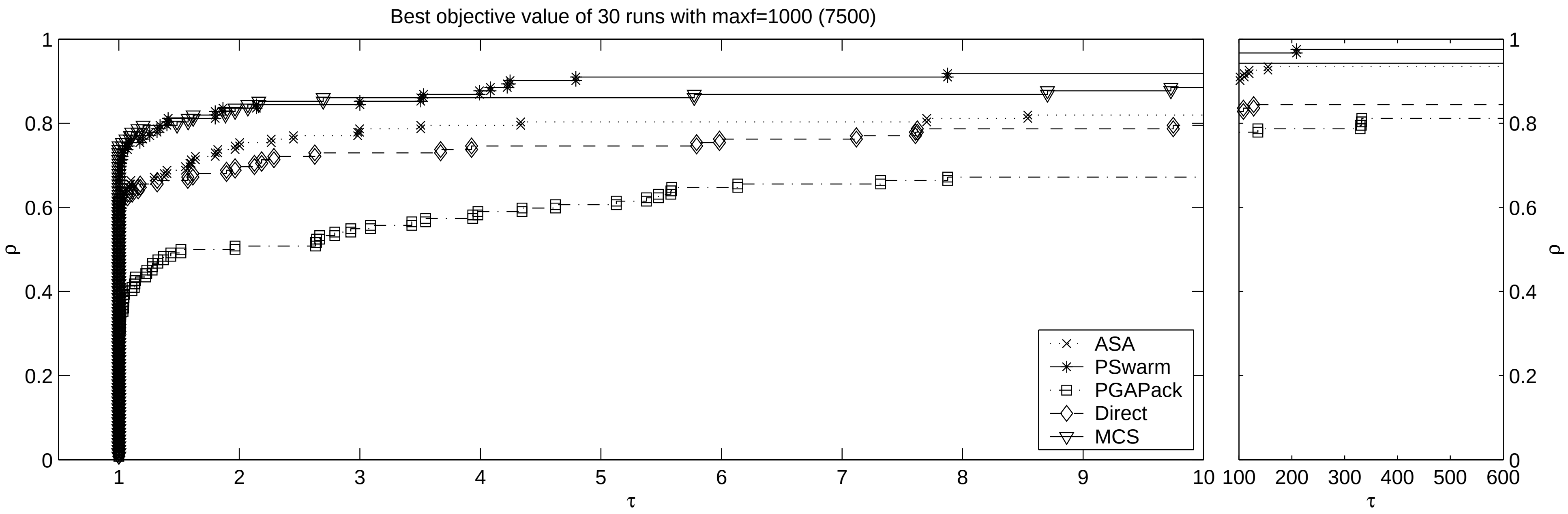
Universidade do Minho

PSwarm é um algoritmo que combina a técnica de colónia de partículas com a procura em padrão.

Quando a colónia de partículas não é capaz de progredir a procura em padrão é utilizada para refinar a solução.

Resultados

Universidade do Minho



Contribuições

Publicações

- 20 palestras em conferências nacionais e internacionais.
- 18 resumos em conferências nacionais e internationais
- 19 trabalhos completos (revistas nacionais e internacionais - conferências internacionais).

Futuro

- *A particle swarm pattern search method for bound constrained nonlinear optimization* - ISMP 2006.
- *Optimal control in fed-batch fermentation processes with particle swarm optimization* - SEIO 2006.

Entre outros em progresso.

Universidade do Minho

Trabalho futuro

- Controlo óptimo - Splines cúbicas para aproximar as trajectórias (é um problema de PSI);
- Optimização multi-local - Novas direcções de procura local;
- PSwarm - Paralelismo e inclusão de restrições.

Universidade do Minho

Trabalho futuro

- Controlo óptimo - Splines cúbicas para aproximar as trajectórias (é um problema de PSI);
- Optimização multi-local - Novas direcções de procura local;
- PSwarm - Paralelismo e inclusão de restrições.

Trabalho futuro

- Controlo óptimo - Splines cúbicas para aproximar as trajectórias (é um problema de PSI);
- Optimização multi-local - Novas direcções de procura local;
- PSwarm - Paralelismo e inclusão de restrições.

Universidade do Minho

Fim

email: aivaz@dps.uminho.pt

Web http://www.norg.uminho.pt/