ALVARO MARCELO ACEVEDO PEÑA

**Avaliação de técnicas de decomposição para a otimização em tempo real de
uma unidade de produção de propeno**

São Paulo
(2015)

ALVARO MARCELO ACEVEDO PEÑA

**Avaliação de técnicas de decomposição para a otimização em tempo real de
uma unidade de produção de propeno**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em
Ciências

Orientador: Prof. Dr. Galo Carrillo Le Roux

São Paulo
(2015)

ALVARO MARCELO ACEVEDO PEÑA

**Avaliação de técnicas de decomposição para a otimização em tempo real de
uma unidade de produção de propeno**

Dissertação apresentada à Escola
Politécnica da Universidade de São Paulo
para obtenção do título de Mestre em
Ciências

Área de Concentração: Engenharia
Química

Orientador: Prof. Dr. Galo Carrillo Le Roux

São Paulo
(2015)

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, de janeiro de 2015.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

Catálogo-na-publicação

Acevedo Peña, Alvaro Marcelo

**Avaliação de técnicas de decomposição para a otimização em tempo real de uma unidade de produção de propeno / A.M. Acevedo Peña. – versão corr. -- São Paulo, 2015.
117 p.**

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

1.Tempo real (Otimização) 2.Otimização econômica 3.Técnicas de decomposição 4.Refínarias de petróleo I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

A minhas avós, Yolanda (in memoriam) e Juana, que contribuíram diretamente na minha formação como pessoa, sempre com amor incondicional, e que sempre torceram pela realização de meus objetivos. Vocês estão no meu coração.

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Carlos e Gioconda, pelo carinho, amor e dedicação durante todos os anos da minha vida e que sempre me deram exemplos de honestidade, responsabilidade e amor. Sem vocês nada disto teria sido possível. Agradeço também aos meus irmãos, Gonzalo e Carlos, pelo apoio incondicional.

Ao Prof. Galo Carrillo Le Roux, pela orientação deste trabalho, por acreditar no meu potencial como profissional e pela oportunidade de participar do projeto RTO.

Agradeço a José Luís, Gabriela, Nicole, Eliana e Lourdes, minha família no Brasil, por todo o apoio e por me fazer sentir em casa.

A Gabriela Burgulla, pelo apoio, companheirismo e sobretudo pela paciência, força e amor que me dá dia a dia para superar os todos os obstáculos.

A Bruno Faccini, pela revisão de português desta dissertação e a José Otavio e David, pelos conselhos na redação.

Aos professores Ardson dos Santos, Darci Outloak, Jorge Gut e doutores Marcel Joly, Antonio Carlos Zanin e Lincoln Moro pela dedicação na leitura da dissertação e pelas sugestões de melhorias dadas tanto durante o exame de qualificação quanto durante a defesa.

E por último, mas não por isso menos importante, agradeço a todos meus amigos do laboratório e da Bolívia pelos conselhos, risadas e momentos incríveis que fizeram destes dois anos momentos inesquecíveis.

RESUMO

Estratégias de otimização em tempo real (RTO: *Real Time Optimization*) são utilizadas para avaliar e determinar as condições ótimas operacionais de uma planta em estado estacionário, maximizando a produtividade econômica do processo sujeita a restrições operacionais. Esse problema de otimização engloba toda a planta e pode ser resolvido utilizando um só modelo para todo o processo que maximize o lucro bruto operacional considerando os preços de mercado das correntes de entrada e saída do processo. No entanto, na prática, essa abordagem centralizada muitas vezes não pode ser aplicada, devido ao tamanho e complexidade do problema de otimização, a que é muito difícil que todas as unidades da planta estejam em estado estacionário ao mesmo tempo e a que as unidades de processo não estão sincronizadas já que em muitos processos não existe armazenamento intermediário. Uma solução é utilizar uma estrutura distribuída, na qual o problema de otimização deve ser decomposto em subproblemas com reduzida complexidade numérica. Tal decomposição, no entanto, exige que o preço das correntes de entrada e saída de cada subproblema sejam adequadamente determinados. Com este propósito, neste trabalho, serão aplicadas técnicas de decomposição em uma unidade de produção de propeno da refinaria REPLAN (Refinaria de Paulínia, São Paulo) da PETROBRAS. Essa unidade será modelada, simulada e otimizada no software orientado a equações EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*). Com o objetivo de testar as técnicas de decomposição, a unidade será decomposta em três divisões que são: depropanizadora, deetanizadora e C3 splitter. Mostra-se que duas técnicas tradicionais chamadas de *relaxação Lagrangiana* e *Lagrangeano aumentado* não conseguem convergir em uma solução devido a duas causas. A primeira causa é que o processo estudado contém divisões indiferentes, o que significa que não existe dependência linear entre a função objetivo e as restrições complicadoras. A segunda causa é que os subproblemas de otimização que representam cada uma das divisões da unidade têm funções objetivos lineares, neste caso, a restrição ativa de cada subproblema irá ser sempre a capacidade de produção máxima ou mínima de cada divisão e não uma vazão intermediária. Uma técnica alternativa, Pricing Interprocess Streams Using Slack Auctions, também foi aplicada ao processo estudado. Essa técnica define uma folga de recurso entre as correntes

intermediárias das divisões e utiliza leilões para ajustar o preço dos produtos intermediários. Mostra-se que esse último abordagem também apresenta problemas na sua aplicação, porque todas as divisões estudadas têm dois produtos diferentes, isso significa que a técnica produzirá sempre a vazão máxima do produto final (vazão que tem preço de mercado) de cada divisão e não assim do produto intermediário (vazão que vai de uma divisão para outra). Identificados os problemas nessas técnicas de decomposição, é proposta uma modificação do algoritmo de relaxação Lagrangeana. Para o qual é considerada uma nova variável denominada *limite de produção disponível* (LPD) e uma restrição para as vazões de carga de cada uma das divisões, a qual será atualizada a cada iteração. Essa modificação no algoritmo consegue superar os problemas apresentados para a resolução do problema de otimização para a unidade estudada considerando uma estrutura distribuída.

Palavras-Chave: Otimização em tempo real. Otimização econômica. Técnicas de decomposição. Refinaria de petróleo.

ABSTRACT

Real time optimization strategies (RTO) are used to evaluate and determine the optimum operating conditions of a plant, maximizing the economic productivity of the process which is subject to operational constraints. This optimization framework encompasses the entire plant, and can be solved using one model for the entire process that maximizes the operating gross profit considering the market prices of input and output stream's process. However, in practice this centralized approach often cannot be applied due to the size and complexity of the optimization problem. One solution is to use a distributed structure, in which the optimization problem must be broken into sub-problems with reduced numerical complexity. Such decomposition, however, requires that the price of input and output stream of each sub-problem should be adequately determined. With this purpose, in this work, decomposition techniques is applied in a propylene production unit at the refinery REPLAN (Refinaria de Paulínia, São Paulo) owned by PETROBRAS. This unit is modeled, simulated and optimized in an equation oriented software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization). In order to test the decomposition techniques, the unit is decomposed into three divisions, which are depropanizer, deethanizer and C3 splitter. It is shown that two traditional techniques called *Lagrangian relaxation* and *augmented Lagrangian* cannot converge on a solution due to two causes. The first cause is that the studied process contains indifferent divisions, which means that there is no linear dependence between the objective function and the complicating constraints. The second cause is that the optimization sub-problem that represent each divisions has linear objective functions, in this case, the active constraint of each sub-problem will always be the maximum or minimum production capacity of each division and not an intermediate flow rate. An alternative technique *Pricing Interprocess Streams Using Slack Auctions* was also applied to the studied process. This technique defines a resource slack between the intermediary streams and use auctions for adjusting the price of intermediary products. It is shown that this technique also presents problems in its applications because all divisions studied has two different products, this means that this technique will always produce the maximum flow rate of the final product (flow rate that has a market price) of each division, and not the intermediate product (flow rate that goes from one division another). Identified problems in these decomposition

techniques, the proposed approach extended the Lagrangian relaxation algorithm, in which a new variable called "available production limit" (LPD) and a restriction to the feed flow rate from each divisions are considered, which will be updated at every iteration. This change in the algorithm can overcome the issues presented for solving the optimization problem for the unit studied considering a distributed structure.

Keywords: Real time optimization. Economic optimization. Decomposition techniques. Petroleum Refinery.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 2.1	– Hierarquia de atividades no refino de petróleo.....	18
Figura 2.2	– Tipos de decisões a serem tomadas numa refinaria.....	21
Figura 2.3	– Estrutura e o mecanismo clássico de atuação dos sistemas RTO.....	23
Figura 2.4	– Otimização modular para divisões independentes da planta..	28
Figura 2.5	– Divisões da planta interagem pelas correntes intermediárias entre processos.....	28
Figura 2.6	– Divisões da planta necessitam conhecer os preços das correntes intermediárias.....	29
Figura 2.7	– Otimização centralizada vs distribuída.....	33
Figura 3.1	– Interpretação geométrica para a dependência linear dos gradientes.....	40
Figura 3.2	– Interpretação geométrica para a dependência linear dos gradientes.....	42
Figura 3.3	– Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de decomposição Lagrangeana.....	55
Figura 3.4	– Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de Lagrangeano aumentado.....	63
Figura 3.5	– Definição impropria das correntes intermediárias entre processos.....	66
Figura 3.6	– Remodelando o microcadeia de suprimento usando recursos de folga.....	67
Figura 3.7	– Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de Slack Auctions.....	70
Figura 4.1	– Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno.....	72
Figura 5.1	– Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno decomposta em três subproblemas.....	80
Figura 5.2	– Problema de convergência da decomposição Lagrangeana..	85
Figura 5.3	– Dependência linear dos gradientes.....	86
Figura 5.4	– Dependência linear dos gradientes para o problema	87

	estudado.....	
Figura 5.5	– Vazão Corrente intermediaria 5S1-5S2.....	88
Figura 5.6	– Vazão Corrente intermediaria 17S2-17S3.....	89
Figura 5.7	– Pricing interprocess streams using slack auctions aplicado ao processo de produção conjunta - função objetivo dos subproblemas.....	94
Figura 5.8	Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno -algoritmo proposto.....	95
Figura 5.9	Fluxograma do algoritmo proposto.....	96
Figura 5.10	Convergência do algoritmo proposto.....	100
Figura 5.11	Vazão da corrente intermediaria 5S1 - 5S2 utilizando o algoritmo proposto.....	101
Figura 5.12	Vazão da corrente intermediaria 17S2 - 17S3 utilizando o algoritmo proposto.....	102

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1	– Composição da carga (GLP) para a seção da Depropanizadora.....	73
Tabela 4.2	– Resultados da simulação e a otimização do processo estudado.....	78
Tabela 5.1	– Respostas da relaxação Lagrangeana.....	84
Tabela 5.2	– Respostas pricing interprocess streams using slack auctions.....	92
Tabela 5.3	– Respostas da proposta de modificação do algoritmo de relaxação Lagrangeana.....	99
Tabela 5.4	– Respostas do problema considerando uma estrutura centralizada e distribuída.....	102

LISTA DE ABREVIATURA E SIGLAS

RTO	Real Time Optimization
PID	Process and Instrumentation Diagram
MCP	Model Predictive Control
LPD	Limite de Produção Disponível
EMSO	Environment for modeling, simulation and optimization
IPOPT	Interior Point OPTimizer
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo

LISTA DE SIMBOLOS

v	Contador das iterações
ε	Diferencia aceitável entre os multiplicadores de Lagrange de duas iterações consecutivas
x	Variável de decisão
y	Variável dual
z	Função objetivo
h(x)	Restrições de igualdade
g(x)	Restrições de desigualdade
φ	Função dual
$\lambda_i^{(v)}$	Multiplicador de Lagrange das restrições de igualdade
M	Multiplicador de Lagrange das restrições de desigualdade
L	Função Lagrangeana
Θ	Vetor dos multiplicadores de Lagrange
$s^{(v)}$	Subgradiente na iteração v
K	Tamanho de passo na direção $s^{(v)}$
D_i	Demanda de recursos da corrente i
S	Oferta total de recursos
$P_i^{(v)}$	Preço da vazão i na iteração v
$E^{(v)}$	Excesso de demanda na iteração v
T-i	Coluna de destilação i
SR_i	Splitter de refluxo
SB_i	Splitter de reboiler
SC1	Splitter do compressor
S-i	Divisão de processo i
Pr_i	Preço do produto i
Pc	Preço da corrente de carga
Cop_{s-i}	Custo operacional da divisão i
Cl_{u,d}	Corrente intermediária de upstream e downstream
LPD_i^(v)	Limite de produção disponível i na iteração v

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	12
1.1	MOTIVAÇÃO.....	12
1.2	OBJETIVOS.....	15
1.3	ESTRUTURA DA TESE.....	16
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	17
2.1	HIERARQUIA DAS DECISÕES NA INDÚSTRIA DE REFINO DE PETRÓLEO.....	17
2.2	OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL (RTO).....	21
2.3	OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO - OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA.....	27
2.4	DECOMPOSIÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO.....	31
3	TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO NA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS.....	36
3.1	TÉCNICAS DE RELAXAÇÃO E DECOMPOSIÇÃO.....	36
3.2	RELAXAÇÃO LAGRANGEANA E DUALIDADE.....	38
3.2.1	Condições de Otimalidade.....	38
3.2.2	Dualidade.....	44
3.3	DECOMPOSIÇÃO LAGRANGEANA.....	51
3.3.1	Atualização do Multiplicador de Lagrange.....	55
3.3.1.1	Método do Subgradiente.....	56
3.3.1.2	Cutting Plane Method.....	57
3.3.1.3	Bundle Method.....	57
3.3.1.4	Trust Region Method.....	59
3.4	LAGRANGEANO AUMENTADO.....	60
3.5	PRICING INTERPROCESS STREAMS USING SLACK AUCTIONS...	64
4	APRESENTAÇÃO DO PROCESSO ESTUDADO.....	71
4.1	DESCRIÇÃO DO PROCESSO ESTUDADO.....	71
4.2	MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO ESTUDADO (EMSO).....	75
5	APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO AO PROCESSO ESTUDADO.....	79

5.1	TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO APLICADAS AO PROCESSO ESTUDADO.....	79
5.1.1	Decomposição Lagrangeana aplicada ao processo estudado.....	81
5.1.2	Pricing interprocess streams using slack auctions aplicada ao processo estudado.....	90
5.1.3	Proposta modificação do algoritmo de relaxação Lagrangeana	94
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	104
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	107

1. INTRODUÇÃO

Desde a revolução industrial, os processos produtivos pelos quais a humanidade obtém os seus bens e produtos de consumo vêm experimentando um avanço considerável. Diversos são os fatores que levam os processos produtivos a se desenvolverem tão velozmente. O aumento da demanda de produtos impelido pelo crescimento da população mundial, a forte concorrência pelo mercado, os elevados custos de produção, a escassez de recursos naturais para a produção de energia e matéria-prima e a conscientização sobre a preservação do meio ambiente obrigaram as indústrias a aprimorar seus processos produtivos, levando estes a operar mais próximos ao limite de sua capacidade. Em uma época em que se exigem produtos reunindo conceitos tão antagônicos como mais qualidade e menor preço, nenhuma indústria pode desperdiçar matéria-prima e energia, ou gerar rejeitos industriais sem restrições sob pena de ser aniquilada, seja pela legislação vigente, seja pela concorrência.

Este conjunto de fatores faz com que os processos industriais se tornem mais complexos devido à necessidade de integração mássica e energética, tornando seus comportamentos menos intuitivos e com maior dificuldade de prever qual a melhor condição operacional. Por essa razão, tecnologias de otimização vêm sendo aplicadas aos processos químicos há várias décadas, na busca contínua da máxima exploração do potencial das unidades de processo. Grande parte destes métodos, consolidados em ferramentas de otimização, controle e automação de processos, foram destinados ao setor de petróleo e petroquímica.

1.1. MOTIVAÇÃO

A elevada competitividade dos processos na indústria do refino de petróleo, definidos por características como elevada variabilidade no mercado, exigentes restrições dos produtos, elevados custos operacionais e constantes mudanças nos preços dos produtos, impõe a constante necessidade de implantar estratégias e métodos mais sofisticados de controle e otimização de processos industriais. Tais estratégias e métodos de otimização são desenvolvidos na busca contínua da máxima exploração do potencial das unidades que compõem a refinaria. A obtenção

de melhores resultados econômicos em uma refinaria depende, em grande medida, de tomar as decisões certas no momento certo (Hartmann, 1998). Essas decisões são geralmente tomadas em diferentes níveis hierárquicos (controle avançado de processo, otimização em tempo real, programação da produção, planejamento da produção e planejamento estratégico) e em diferentes horizontes de tempo (segundos, minutos, horas, dias, semanas, meses e anos). A justificativa para que estes métodos sejam aplicados na indústria do petróleo é a elevada escala de produção: o grande volume de produtos gerados, o elevado consumo de energia e insumos fazem com que pequenas melhorias na eficiência dos processos se traduzam em ganhos expressivos no lucro operacional (Carvalho, 2007). Neste contexto, a otimização em tempo real (RTO: *Real Time Optimization*) torna-se uma importante ferramenta no incremento da rentabilidade da empresa. O principal objetivo da RTO é poder operar a planta, em cada instante de tempo, o mais próximo possível das condições ótimas operacionais (Sequeira et al., 2002). O ciclo clássico da RTO inclui múltiplas etapas entre as quais estão a detecção do estado estacionário, tratamento de erros grosseiros, reconciliação de dados e estimação de parâmetros, otimização econômica e implementação dos pontos ótimos no sistema de controle (White, 1997).

Os problemas de otimização que surgem neste contexto baseiam-se essencialmente em modelos matemáticos do processo estudado e em algoritmos de otimização através dos quais busca-se determinar o ponto operacional que melhor satisfaça o critério de desempenho econômico do processo produtivo. A busca de descrições mais completas e precisas dos processos ou sistemas a serem otimizados leva à concepção de modelos matemáticos de complexidade crescente, tornando a atividade de otimização de processos também crescentemente complexa. Isto leva a problemas de elevado número de restrições e variáveis, o que pode torná-los inviáveis computacionalmente devido à dimensão, comprometendo a utilidade do modelo (Carvalho, 2007). Além disso, mesmo que o poder de computação disponível seja suficiente para resolver estes problemas, muitas vezes para modelar e operar diferentes unidades de uma mesma refinaria são utilizados softwares de empresas diferentes e incompatíveis, fazendo com que a integração e centralização das unidades de uma refinaria seja ainda mais difícil (Jose e Ungar, 2000).

No entanto, considerando que o problema de otimização engloba toda a refinaria, uma única unidade ou divisão otimizada cobre apenas um subconjunto do problema e como tal, não necessariamente fornece uma resposta válida. Ainda assim, a modelagem de uma refinaria completa é muito complexa de ser feita, então é mais vantajoso utilizar otimizações locais (modelos para cada divisão) que conseguem atingir (em seu conjunto) um lucro similar ao de toda a refinaria considerando só um modelo (Friedman, 1995). Para este propósito podem-se utilizar técnicas de decomposição para problemas de otimização em que são determinados adequadamente os preços das correntes intermediárias que permitam maximizar o lucro de toda a refinaria.

A ideia geral das técnicas de decomposição é relaxar as restrições globais, que conectam duas ou mais partes relativamente independentes de um problema de otimização. Para este fim, existem diversas formas de se realizar esta tarefa. O mecanismo base em todos os princípios de decomposição é decompor o problema original em subproblemas menores, que são coordenados por um problema mestre em que um procedimento iterativo é usado para buscar a convergência para uma solução global (Gunnerud, 2010).

Estratégias de decomposição para problemas de otimização são um campo maduro em pesquisa operacional em que, baseadas nas funções dual e primal, destacam-se duas alternativas: relaxação Lagrangeana e o Lagrangeano aumentado (Neiro, 2004). Além disso, também existem abordagens alternativas de decomposição, capazes de resolver problemas que essas técnicas clássicas apresentam, mas sua aplicabilidade depende da estrutura do problema em questão (Jose e Ungar, 2000).

O presente trabalho centra-se no estudo e avaliação de técnicas de decomposição para problemas de otimização que podem ser ligados a um sistema RTO, com este propósito, será considerada uma estrutura distribuída da unidade de produção de propeno (escala industrial) da refinaria REPLAN da PETROBRAS. Essa unidade é composta por três colunas de destilação: depropanizadora, deetanizadora e a fraccionadora de propeno. As três divisões serão modeladas, simuladas e otimizadas em EMSO "Environment for Modeling, Simulation and Optimization" (Soares e Secchi, 2003), que é um software de modelagem orientado a equações (EO). A escolha deste software foi realizada levando-se em conta suas vantagens

como a eficiência de cálculo, boa flexibilidade na especificação de graus de liberdade para a simulação, uma interface mais natural e numericamente adequada para os problemas de otimização e uma maior autonomia para criar e manipular o modelo (Mendoza et al., 2013). Este trabalho é uma contribuição ao projeto “Desenvolvimento de Solução em Tempo Real Utilizando uma Abordagem Orientada a Equações com Implantação em Unidade Industrial” que visa ao desenvolvimento, como projeto de pesquisa, de tecnologia básica de RTO.

1.2. OBJETIVOS

De acordo com a discussão da seção anterior sobre a otimização dos processos da indústria petroleira, mais concretamente do refino do petróleo, o principal objetivo do presente trabalho é o de avaliar, aplicar e interpretar economicamente as técnicas de decomposição mais relevantes para problemas de otimização que possam ser acopladas num sistema de RTO, considerando uma unidade de processamento a escala industrial como uma estrutura descentralizada. Para que dessa forma, seja possível decompor eficientemente o problema original em subproblemas que sejam resolvidos separadamente por meio da relaxação das restrições complicadoras, que são coordenados por um problema mestre que garante uma solução global.

Com este fim, o trabalho foca-se nos seguintes objetivos específicos:

- Estudar técnicas de decomposição clássicas e alternativas para problemas de otimização que possam ser aplicadas a processos industriais de grande porte, reduzindo a complexidade e o tempo computacional consumido na sua resolução e que gerem preços dos produtos intermediários adequados para tomada de decisões.
- Modelar, simular e otimizar a unidade de produção de propeno da refinaria REPLAN da PETROBRAS, utilizando o ambiente orientado a equações EMSO. O modelagem e simulação deste processo servirá como plataforma para que as técnicas possam ser aplicadas e testadas.
- Dirigir um estudo de avaliação e aplicação das técnicas de decomposição para a unidade de produção de propeno, no qual sejam mostrados os problemas de eficácia que essas técnicas, clássicas e alternativas, apresentam.

- Propor uma modificação no algoritmo de resolução das técnicas de decomposição que consiga superar os problemas de eficácia encontrados na aplicação destas técnicas.

1.3. ESTRUTURA DO DOCUMENTO

Este texto é composto de seis seções. Na segunda seção é apresentada uma revisão bibliográfica geral da RTO e sua relação com a decomposição de problemas de otimização. A seção 3 apresenta uma revisão sucinta das técnicas de decomposição, que podem ser aplicadas para gerar uma estrutura distribuída de problemas de otimização de grande porte encontradas na indústria petroleira. Na seção 4 é detalhado o processo considerado como caso de estudo, que é a unidade de produção de propeno composta por suas 3 divisões (depropanizadora, deetanizadora e fraccionadora de propeno). A unidade será modelada, simulada e otimizada no software EMSO. Na seção 5 é apresentado um estudo das técnicas de decomposição que são aplicadas na unidade de produção de propeno na qual são explicadas as razões pelas quais essas técnicas são ineficazes para resolver o problema de otimização do processo estudado. Nesta seção também é apresentada uma proposta de modificação no algoritmo de resolução da relaxação Lagrangeana, essa modificação é testada e consegue resolver os problemas que as técnicas de decomposição descritas na seção 3 apresentam. A seção 6 resume as conclusões e apresenta propostas de continuação de trabalho.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Numa operação industrial, além da segurança operacional é necessário também fazer com que sua rentabilidade atinja o máximo possível. Isto é alcançado somente quando por meio de algum método ou algoritmo a partir do qual se determinam as condições operacionais ótimas do processo. Nesta seção será discutida a fundamentação teórica relevante em que se evidencia que a otimização em sequência dos processos de refino de petróleo é de vital importância para a aplicação de uma ferramenta de RTO nessa indústria.

2.1. HIERARQUIA DAS DECISÕES NA INDÚSTRIA DE REFINO DE PETRÓLEO

Em função da grande complexidade da estrutura de refino, o emprego da otimização (do ponto de vista econômico) na indústria do petróleo é realizado em vários níveis, como mostra a figura 2.1 baseada em Edgar et al., (2001), Romagnoli e Sánchez (2000), Guerra e Le Roux (2011) e Kreipl e Pinedo (2004). Nesta figura, as operações da planta podem ser divididas em cinco camadas hierárquicas:

- Planejamento Estratégico.
- Planejamento da Produção.
- Programação da Produção.
- Otimização de Unidades de Processo.
- Controle e Monitoramento do Processo.

As cinco camadas trabalham em conjunto de forma integrada. A tarefa para cada camada é diferente, mas todas são parte de um controle de forma decrescente composto de um objetivo, que é o de maximizar o desempenho econômico da planta, mantendo um produto de qualidade e gerando o maior lucro possível. As camadas se comunicam, transmitindo a informação de forma crescente.

De acordo com Kreipl e Pinedo (2004), a interação entre os diferentes níveis da hierarquia em refinarias pode ser complicada, principalmente porque os modelos de hierarquia superior abrangem horizontes de tempo muito maiores do que aqueles considerados nos modelos de nível inferior. Por outro lado, à medida que a ordem hierárquica das decisões é aumentada, diminui a informação disponível e o lucro

(ganho) é aumentado com menor esforço na modelagem de níveis hierárquicos que consideram maiores horizontes de tempo e, portanto, espera-se que os esforços computacionais sejam menores (Guerra e Le Roux, 2011). Isto faz com que os resultados de um modelo de elevada ordem hierárquica (planejamento da produção) sejam menos confiáveis do que aqueles de modelos de menores ordens (programação da produção), conforme mostra a figura 2.1.

Fonte: Elaboração própria, baseada em Edgar et al., (2001), Romagnoli e Sánchez (2000), Guerra e Le Roux (2011) e Kreipl e Pinedo (2004).

Baseado em Carvalho (2007), Moro et al. (1998) e Guerra e Le Roux (2011) é apresentada a seguir uma breve descrição dos níveis que compõem a hierarquia de decisões em refinarias de petróleo.

Planejamento Estratégico

Essa atividade é realizada no nível administrativo das empresas e se baseia em cenários de médio e longo prazo, revistos a cada um ou dois anos. O problema principal do planejamento estratégico é determinar quais são as oportunidades ou necessidades de investimento prioritárias, levando em consideração definições estratégicas, tendências mercadológicas, alterações em legislações, cenários políticos e disponibilidade de capital. A partir dessa avaliação de oportunidades pode

ocorrer a construção ou aquisição de novas plantas ou unidades de processo, ampliações, incorporação de novas tecnologias, etc.

Planejamento da produção

O planejamento da produção tem metas econômicas e se dá em dois níveis. No nível corporativo, decisões são tomadas considerando toda a estrutura da empresa (logística, distribuição, transporte e produção), projeções de demanda e preços de produtos, disponibilidade e custo de matéria-prima. É nesse nível que são definidos os volumes e tipos de petróleo a serem comprados no mercado para posterior refino, aproveitando-se da escolha para obter melhores preços. As ferramentas de otimização utilizadas neste nível baseiam-se em modelos simplificados (em geral lineares) do processo, em função do elevado grau de complexidade do problema. O planejamento neste nível considera, tipicamente, horizontes de seis meses com atualização mensal. Já no nível operacional das plantas de petróleo (por exemplo, refinarias), o mesmo problema é resolvido em escala menor. Neste caso, o modelo contempla apenas os processos da unidade em questão e a parte da cadeia logística utilizada pela mesma. A previsão de demanda é mais precisa que no caso corporativo e busca-se refinar a estratégia prevista no planejamento corporativo para maximizar os lucros. Muitas ferramentas especializadas de otimização são oferecidas no mercado (PIMS™ Aspen Technology, RPMS® Honeywell Process Solutions, etc.) para solucionar os problemas de planejamento de produção.

Programação da Produção

O problema de programação da produção é de grande complexidade já que tem como objetivo produzir um agendamento viável das operações, sendo resolvido no nível das unidades de uma empresa. Seu objetivo é programar as operações a serem realizadas, de forma a atender às demandas no prazo, minimizando o armazenamento de matéria-prima e produtos. Assim, a programação de produção consiste em um problema dinâmico que define tempos e volumes envolvidos em cada operação. Normalmente em refinarias, o horizonte considerado para programação varia de dois a sete dias, com atualização diária. Atualmente, as ferramentas disponíveis comercialmente ou citadas na literatura para programação da produção baseiam-se em modelos bastante complexos, que podem ser lineares ou não, envolvendo variáveis discretas e contínuas simultaneamente. Em função da

complexidade do problema, essas ferramentas podem não ser utilizadas para determinar a solução ótima do ponto de vista matemático, mas auxiliam o usuário a chegar à uma programação viável. As atividades de planejamento e programação da produção são realizadas com estreita relação entre si, pois o modelo de planejamento fornece informação (plano de produção) para o modelo de programação (este modelo define o programa de produção). Se os resultados do modelo de programação de produção não são compatíveis com o plano de produção, devem-se revisar os dados de produção como disponibilidade de matérias-primas e disponibilidade de unidades. Esse procedimento é repetido até que haja coerência entre os resultados dos dois modelos.

Otimização de unidades de processo

No nível das unidades de processo, o objetivo da otimização é determinar o valor apropriado para as variáveis do processo que proporcionam máximo desempenho, dentro do perfil de produção definido pelas camadas superiores. Embora esta decisão possa ser tomada a partir da experiência e conhecimentos dos técnicos responsáveis pela operação da unidade, muitas vezes a determinação do ponto ótimo de operação exige a utilização de ferramentas de apoio. Entre as ferramentas mais sofisticadas para a otimização de unidades de processo estão os sistemas de RTO. Esta técnica baseia-se na associação de modelos matemáticos rigorosos do processo a algoritmos de otimização, que buscam continuamente a determinação do ponto operacional que gere o maior lucro possível para a empresa.

Controle Preditivo Multivariável

A implementação de um ponto ótimo operacional definido por um sistema de RTO não pode, em geral, ser realizada de forma instantânea. Variações drásticas poderiam levar a unidade de processo a oscilações indesejáveis ou mesmo à instabilidade. Frequentemente, a solução do problema dinâmico de como conduzir o processo ao novo ponto operacional com segurança e confiabilidade é deixada a cargo dos controladores preditivos multivariáveis. Uma vez implementado o ponto ótimo, o controlador deverá ainda rejeitar eventuais perturbações, tomando ações que minimizem as flutuações do processo em torno do ponto ótimo definido. A atuação do Controle Preditivo Multivariável sobre o processo é feito através do envio de set-points às malhas de controle regulatório da unidade de processo.

Feita uma breve descrição dos níveis hierárquicos das decisões nas refinarias, na figura 2.2 (Hartmann, 1998) mostra-se em resumo o tipo de decisões a serem tomadas em uma refinaria, assim como o tipo de modelo utilizado para auxiliar a tomada de decisões e os objetivos usados para avaliar as diferentes opções disponíveis. Neste trabalho vamos focar na otimização de unidades de processo, onde, de acordo com a figura 2.2, a decisão é feita em termos de “como operar” e “como produzir”. Para este propósito tem que ser feito um modelo para a operação, considerando uma função objetivo econômica para a otimização das unidades de processo, a principal ferramenta de apoio utilizada é o RTO que será descrita a seguir.

Fonte: Adaptado de Hartmann (1998).

2.2. OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL (RTO)

A camada de otimização de um processo industrial surgiu com o avanço e o crescimento das estruturas de controle. Primordialmente, o controle de processos procura manter o processo funcionando através de um controle regulatório responsável por enviar ações de controle a atuadores simples baseadas nos

objetivos (set-points) especificados para níveis, pressões e temperaturas dos processos. Isto não é o suficiente, pois exige dos operadores um trabalho considerável para, baseados nestas variáveis de controle, tomar decisões para manter a qualidade dos produtos.

Eis que surge então o conceito de controle supervisório. O controle supervisório veio complementar a automação dos processos industriais no sentido de tornar as tomadas de decisão em relação às variáveis controladas mais intuitivas e visíveis ao operador. Com este advento passou-se a controlar diretamente os objetivos finais dos processos como, por exemplo, a especificação dos produtos. O controle supervisório articula-se com o controle regulatório sendo uma malha de controle superior a este na ordem hierárquica.

Contudo, uma nova necessidade surgiu no âmbito industrial em termos dos objetivos finais de se controlar um processo. Certamente é desejável que se tenham produtos sobre especificados sendo gerados dentro do processo, mas seria este o objetivo final de uma empresa como uma entidade econômica? Na verdade, um dos fins de qualquer empresa é inegavelmente o lucro, e entre se ter produtos sobre especificados e lucro existe um gap conceitual. Nem sempre um produto especificado é sinônimo de lucro e um esforço adicional se torna necessário neste sentido. Por este motivo tornou-se necessário desenvolver uma camada de otimização que não trabalhasse somente com modelos lineares, mas sim com modelos mais completos e não-lineares do processo, capazes de descrever com maior precisão o comportamento da unidade industrial em um dado instante. Surgiu assim o conceito de RTO (Duraiski, 2009).

Por tudo isso, a atualização permanente dos parâmetros deste modelo é fundamental para que a determinação do ótimo seja eficaz. Portanto, o termo RTO é usado para designar o algoritmo capaz de avaliar e alterar continuamente as condições de operação do processo, enviando objetivos ótimos automaticamente para o controle avançado, de modo que a produtividade econômica do processo seja maximizada sujeita a restrições operacionais (Jang et al., 1987).

A aplicação clássica de uma ferramenta de RTO utiliza a otimização em estado estacionário para obter as condições operacionais que gerem o maior lucro possível para a indústria. Os benefícios que Latour (1979) destaca de uma otimização em estado estacionário, são:

- Melhor qualidade e rendimento do produto.
- Redução do consumo de energia e dos custos.
- Aumento da capacidade dos equipamentos.
- Menores custos de manutenção das equipes do processo.
- Menores custos de processo para projetos que incluem um sistema RTO.

As ferramentas de otimização em tempo real baseiam-se na associação de um modelo matemático do processo a um algoritmo de otimização que periodicamente determina o ponto ótimo operacional a ser perseguido. Porém, para assegurar a confiabilidade dos resultados, as aplicações industriais de RTO envolvem uma série de etapas preliminares antes do equacionamento do problema de otimização econômica propriamente dito. A figura 2.3 ilustra a estrutura e o mecanismo clássico de atuação dos sistemas RTO. Baseado em Naysmith et al., (1995) e Hanmandlu et al., (1985) é apresentada a seguir uma breve descrição dos componentes clássicos de um sistema RTO.

Figura 2.3 - Estrutura e o mecanismo clássico de atuação dos sistemas RTO.

Fonte: Naysmith et al., (1995)

Detecção do estado estacionário:

A implementação de um procedimento para determinar se o processo está suficientemente próximo do estado estacionário torna-se necessária já que a realização de simulações baseadas em dados obtidos durante o transiente pode levar a resultados inconsistentes (Jiant et al., 2003). Em geral define-se um intervalo de tempo do passado a ser analisado (imediatamente anterior ao do início do procedimento de otimização), em que são coletados dados referentes aos sinais de um conjunto de variáveis de processo selecionadas para representar a condição estacionária do mesmo. A partir destes dados, a variabilidade das variáveis em questão é quantificada e comparada com parâmetros previamente definidos por meio de testes estatísticos ou heurísticos que definem se o processo pode ou não ser considerado estacionário (Carvalho, 2007).

Reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros:

Todos os valores medidos estão sujeitos a erros que podem comprometer a precisão da solução do problema de otimização. A reconciliação de dados consiste em um procedimento de otimização através do qual um conjunto de dados é confrontado com um modelo matemático considerado confiável – em geral um modelo fenomenológico baseado nas leis de conservação de massa, energia e quantidade de movimento e modelos rigorosos para a descrição de fenômenos como o equilíbrio de fases e o mecanismo de sistemas reacionais. Com base nos valores estimados para as variáveis através deste procedimento e análise estatística prévia da sua variabilidade típica, verifica-se se os valores fornecidos pelos instrumentos de medição são aceitáveis dentro de certo grau de probabilidade. O problema de otimização decorrente caracteriza-se por uma função objetivo que leva em consideração os desvios entre os valores medidos e estimados (pelo modelo) para as variáveis de processo, tendo como variáveis de decisão as variáveis independentes do modelo. Contudo, erros de predição podem surgir ainda se o modelo do processo não tiver condições de representá-lo com a precisão necessária. Frequentemente, o processo sofre alterações em seu comportamento (por exemplo, em função de alterações na composição da carga de uma unidade ou da desativação de um catalisador), e torna-se necessário corrigir parâmetros do modelo matemático para garantir resultados satisfatórios (Carvalho, 2007). Assim, a

detecção dos erros grosseiros toma ações corretivas adequadas para corrigir eventuais erros encontrados nas medições do processo, ajustando-as a partir dos dados da planta para depois enviá-las para a próxima etapa.

Estimação de Parâmetros:

A estimação de parâmetros é também realizada através de um problema de otimização. Aqui as variáveis de decisão são os parâmetros do modelo e a função objetivo geralmente representa os desvios entre valores medidos e estimados para as variáveis dependentes. A natureza dos modelos rigorosos permite o ajuste de seus parâmetros para compensar perturbações não medidas e mudanças no desempenho do processo provocadas por diversos fatores. O ajuste dos parâmetros do modelo corresponde à correção do mesmo através da ação de retroalimentação do processo (Camolesi et al., 2008).

Tanto a reconciliação de dados como o ajuste de parâmetros consistem em problemas de otimização que podem ser resolvidos separadamente ou de forma simultânea. Embora a solução integrada dos dois problemas seja considerada mais eficiente, há implementações em que a reconciliação de dados é resolvida primeiro utilizando-se modelos mais simples (por exemplo apenas os balanços de massa e energia) e os valores reconciliados das variáveis de processo (vazões, temperaturas) são então utilizados na estimação de parâmetros. Com isto, reduz-se a magnitude e a complexidade dos problemas de otimização a serem resolvidos. Outro recurso frequentemente utilizado para este fim é seleccionar apenas um subconjunto de todos os parâmetros e variáveis possíveis para reconciliação e/ ou estimação em tempo real (Arora e Biegler, 2001).

Modelo de Processo:

O modelo matemático do processo deve representar o sistema em uma ampla faixa de operações e com elevado grau de precisão, de forma que, quando utilizado pelo otimizador, não sejam violadas as restrições do processo e a sua lucratividade potencial seja obtida (Camolesi et al., 2008).

O modelo de processo utilizado na RTO deve representar mudanças nas variáveis independentes do processo, fornecendo assim os pontos de ajuste atualizados que são calculados pelo algoritmo de otimização. O efeito das variáveis independentes

sobre as variáveis dependentes, que são geralmente aquelas que estão nas restrições, deve ter um impacto econômico significativo. Basicamente em todos os casos práticos, o modelo é não-linear e é simulado em estado estacionário.

No trabalho de Mendoza et al. (2013) mostra-se que um modelo implementado em um ambiente orientado a equações é adequado para a otimização de aplicações em tempo real, devido à sua robustez, convergência rápida e capacidade de representar o processo real. A análise do modelo permite uma melhor compreensão do processo e do estabelecimento de limites para processar as especificações e os parâmetros atualizados no ciclo RTO.

Otimização Econômica:

Neste trabalho a atenção será focada no problema de otimização econômica em uma aplicação de RTO, que consiste na determinação do ponto operacional que melhor satisfaça um determinado critério de desempenho de uma planta. Este critério é expresso matematicamente através de uma função objetivo que pode representar, por exemplo, o lucro bruto operacional de uma unidade de processo (valor dos produtos finais menos os custos operacionais e das matérias-primas) o rendimento de um produto, ou mesmo uma combinação de diferentes objetivos. O espaço de busca do ponto ótimo é normalmente limitado por restrições. Essas restrições em geral representam limites de segurança ou capacidade de equipamentos, especificações de qualidade de produtos, restrições ambientais, etc.

A relação entre as variáveis utilizadas para definir o ponto ótimo operacional e as variáveis que expressam as respostas do processo a estímulos externos é dada por um modelo matemático do processo.

A classificação dos problemas de otimização pode ser feita de diversas maneiras, considerando as características das variáveis, das funções objetivo e das restrições impostas ao problema. Biegler e Grossmann (2004) apresentam de forma abrangente as inúmeras alternativas possíveis. Aplicações em tempo real para a indústria do petróleo em geral baseiam-se em variáveis contínuas, e, por conseguinte os problemas típicos decorrentes são de Programação não-linear (NLP). Esta etapa será desenvolvida com mais detalhes na subdivisão 2.4.

Implementação da solução ótima

A implementação na planta do ponto ótimo operacional obtido como solução do problema de otimização não pode, em geral, ser feita de forma instantânea. Se houver diferença significativa entre o estado vigente das variáveis de processo e aquele proposto, a implementação instantânea da nova solução poderia gerar uma severa perturbação sobre o processo. Para evitar que isso ocorra, a implementação do ponto ótimo é geralmente feita através de controladores preditivos multivariáveis, que realizam a implementação de forma suave, distribuindo-a ao longo de certo horizonte de tempo, levando em consideração (através de seu próprio modelo matemático) as restrições vigentes e a eventual ocorrência de perturbações. Na ausência de controladores preditivos, pode-se ainda utilizar algoritmos simples para implementação suave dos valores ótimos como set-points do sistema de controle regulatório (Carvalho, 2007).

O conjunto de set-points encontrados para o processo pelo otimizador é enviado de volta para a planta. Uma vez que a planta atingiu o estado estacionário, um outro ciclo do RTO é realizado, para mantê-la operando da forma mais eficiente possível.

2.3. OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO - OTIMIZAÇÃO ECONÔMICA

A otimização econômica aplicada a um problema RTO consiste na determinação do ponto operacional que melhor satisfaz um determinado critério econômico da planta. Num problema de otimização de processos, normalmente, são consideradas as divisões independentemente, no qual são levados em conta o custo da alimentação, o custo operacional e as receitas de vendas de produtos. Os custos fixos, tais como o custo de capital e os salários, estão excluídos da função objetivo, uma vez que não se pode modificar esses custos por meio da otimização das variáveis operacionais (Carvalho, 2007).

Só que, considerando que o problema de otimização engloba toda a refinaria, uma única unidade otimizada cobre apenas um subconjunto do problema e como tal, não necessariamente fornece uma resposta válida para toda a refinaria. Se as divisões da planta são todas independentes, então é comum resolver o problema de otimização da planta usando uma abordagem distribuída como é mostrado na figura

2.4, em que a solução de toda a planta x^* é simplesmente o conjunto das soluções de todas as divisões (x_1^* , x_2^* , x_3^* , x_4^*).

Figura 2.4 - Otimização modular para divisões independentes da planta.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

No entanto, em uma refinaria, isso seria um caso raro, pois as divisões em uma planta não são independentes, elas interagem umas com as outras através de fluxos entre processos (ver figura 2.5).

Figura 2.5 - Divisões da planta interagem pelas correntes intermediárias entre processos.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

Ainda assim a principal razão para fazer otimizações locais (modelos reduzidos) é que, fazer só um modelo de toda a refinaria é uma tarefa complexa de ser feita e

praticamente intratável devido ao elevado número de variáveis e equações que tem que ser levados em conta, e ao alto consumo de tempo computacional na sua resolução, por essa razão que é importante considerar uma estrutura distribuída na qual, cada divisão busque atingir o ponto operacional que gere o máximo lucro possível da refinaria como um todo.

Como o objetivo de cada divisão é maximizar o seu próprio lucro, então cada divisão deve conhecer os preços dos fluxos intermediários (ver figura 2.6). Uma vez que os preços dos produtos intermediários (que estão em função da qualidade e também de considerações na programação da produção) sejam conhecidos, a otimização individual de cada divisão poderia maximizar o lucro de toda a refinaria (Friedman, 1995).

Figura 2.6 - Divisões da planta necessitam conhecer os preços das correntes intermediárias.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

Os preços de produtos e insumos incorporados à função objetivo de problemas de otimização são parâmetros fundamentais para RTO, pois definem a forma da função e norteiam a solução a ser obtida.

Então, é pertinente definir um preço de transferência que é um valor estabelecido em termos monetários para registrar as transferências de bens e serviços realizadas entre as divisões de uma empresa ou entre empresas de um mesmo grupo (Anthony e Govindarajan, 2002). Este conceito pode ser ampliado para tratar, em termos monetários, as transferências das correntes intermediárias entre as divisões dentro de uma mesma unidade de uma refinaria.

Atkinson e Anthony (2000) diz que as empresas adotam diferentes métodos para determinar o preço de transferência, os mais importantes são:

- Baseado no mercado.
- Baseado em custos.

Os preços baseados no mercado externo são bases mais apropriadas para estimar o valor das mercadorias ou serviços transferidos entre as divisões de uma empresa. O preço de mercado provê uma estimativa independente do produto ou serviço transferido e indica como cada centro de lucro contribui para o total ganho pela empresa na transação. Por exemplo, a divisão de vendas, em vez de transferir a mercadoria internamente, poderia vendê-la externamente. De modo semelhante, a divisão de compras poderia comprar externamente em vez de receber a transferência interna (Atkinson, 2000). Se os preços de mercado não estão disponíveis, os preços de transferências internas podem ser definidos com base nos custos. As abordagens baseadas no custo para transferir bens e serviços são incompatíveis com a ideia de que o mecanismo da transferência de valor forneça apoio ao cálculo da receita da unidade. Jordan, Neves e Rodrigues (2003) afirmam que tendo por base os custos, as formas mais usadas de fixar os preços de transferência interna são: custo real, custo padrão e preço sombra (*shadow price*).

O custo real pressupõe a determinação do preço em função dos custos efetivamente dispendidos para produzir o bem ou o serviço. Porém, podem existir situações em que um preço de transferência interno baseado no custo real não deva ser utilizado, pois existe uma dificuldade ao ratear os custos de vários produtos de uma mesma divisão, isso implica que o preço de transferência baseado em custo real pode levar a decisões prejudiciais para a empresa e à sub-otimização de determinada divisão, já que todas as ineficiências de uma unidade podem ser passadas para outra unidade em forma de preço (Beuren et al., 2008).

Para o custo-padrão, segundo Martins (2003), o objetivo é o de fixar uma base de comparação entre o que ocorreu em termos de custo e o que deveria ter ocorrido. Esta afirmação leva a visualizar o custo-padrão como uma técnica auxiliar da contabilidade de custos e não outro método ou critério de contabilização dos custos e tomada de decisões respeito a um problema de otimização.

Já o preço sombra, conhecido internacionalmente como shadow price, utiliza o problema de otimização para cada divisão, no qual, identifica o valor econômico (preço) de uma unidade de recurso para cada restrição, ou seja, quanto a função objetivo (maximizar lucro) aumentará se for relaxar uma restrição de desigualdade em uma unidade (Beuren et al., 2008). Então pode-se dizer que a decisão feita em base ao preço sombra gere o maior lucro possível para cada divisão, na qual, vai ser relaxada uma restrição de escassez de produto disponível para ser processado e não assim uma restrição de consistência.

Então, resumindo, o principal critério para atribuir um preço a um produto intermediário é a existência de preço de mercado para esse produto, porém, se não houver preço de mercado para o mesmo, ele pode ser estimado com base nos custos do processo a partir da programação matemática (preços sombra). Os preços sombra e preços de mercado são os dois principais recursos para estimar os preços das correntes intermediárias para garantir decisões que gerem o maior lucro para a divisão (Li, 2000).

Considerando que o problema de especificar os preços das correntes intermediárias possa ser resolvido por meio dos métodos explicados anteriormente, ainda resta um outro problema ainda mais importante que é a coordenação que tem que existir entre as divisões da refinaria, para que garantam uma solução que considere toda a refinaria. Já que o ponto operacional de melhor desempenho de uma divisão é determinado independentemente, não corresponde necessariamente ao maior lucro possível que uma refinaria pode gerar considerando todas suas divisões simultaneamente. Para resolver este problema, tem que ser considerados os critérios de técnicas de decomposição para problemas de otimização que garantam que o lucro obtido utilizando uma estrutura distribuída possa atingir um valor muito próximo ao da otimização de todas as unidades consideradas juntas e como consequência do uso das técnicas possa-se precificar adequadamente as correntes intermediárias.

2.4. DECOMPOSIÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

Atualmente, otimizadores on-line têm sido implementados em várias unidades nas refinarias, operando o mais perto possível de suas restrições, para que o processo

seja mais rentável. No entanto, o otimizador implementado em uma única unidade só considera a economia dessa unidade, ao invés de levar em conta a situação de toda a planta. É improvável que a otimização de uma única unidade gere uma solução compatível com os dados de uma otimização de toda a refinaria. Isso significa que a solução da otimização em uma única unidade pode não ser consistente com a estratégia de operação ideal para toda a refinaria (Li, 2000).

Naysmith e Douglas (1995) apresentam duas estruturas para fazer a otimização de uma refinaria: a primeira é a otimização com estrutura centralizada, esta é a forma mais comum de otimização encontrada na literatura, considerando só um modelo para toda a planta. A segunda forma considera uma estrutura distribuída, decompondo o problema de otimização em subproblemas com o objetivo de reduzir a complexidade que apresenta a estrutura centralizada. A figura 2.7 mostra uma comparação de uma otimização centralizada versus uma otimização distribuída. A abordagem distribuída quebra a otimização centralizada em várias otimizações locais, que são coordenados por um modelo coordenador (mestre). O objetivo da abordagem é distribuído porque decompõe a planta de grande escala em subsistemas, reduzindo assim a complexidade do problema de otimização original. A abordagem distribuída também é referida como otimização modular ou hierárquica.

Darby e White (1988) afirmam que uma abordagem de otimização distribuída pode ter as seguintes vantagens:

- As otimizações locais podem ser feitas em paralelo, reduzindo assim o gasto de tempo computacional.
- Poder ser realizada com maior frequência do que a abordagem de otimização centralizada.
- Os otimizadores locais podem modelar os subsistemas de forma mais precisa e completa do que um otimizador centralizado, também podem ter níveis diferentes de otimização.
- O otimizador local permite a incorporação da estimação de parâmetros on-line mais facilmente.
- Podem-se utilizar diferentes softwares de otimização para cada uma das divisões.

- O otimizador local é mais fácil de manter, é menos complexo e mais fácil de entender do que um otimizador com estrutura centralizada.
- Se acontecer algum problema com um otimizador local, este pode ser desligado (off-line) enquanto o resto dos otimizadores continuam trabalhando. O otimizador centralizado tem que ser completamente interrompido para ser reestruturado.

Figura 2.7 - Otimização centralizada vs distribuída.

Fonte: Naysmith e Douglas (1995).

Bailey et al. (1993) encontram duas grandes dificuldades para a otimização distribuída:

- A informação passada entre as restrições dos otimizadores das unidades para evitar conflitos não é tão eficaz como em uma abordagem centralizada.
- É possível encontrar inconsistências dos parâmetros quando só uma parte do processo é considerada.

Zhang e Zhu (2000) apresentam uma metodologia para determinação do ponto ótimo global de uma planta. Inicialmente, os autores mostram que a otimização neste nível é feita a partir de modelos simplificados baseados em modelos de rendimentos, já que a modelagem rigorosa levaria a imensas dificuldades práticas. Esta simplificação leva a resultados limitados, embora tenha a grande vantagem de levar em consideração a utilização integrada das unidades de processo. Por outro lado, as diferentes divisões podem ter seu ponto ótimo local determinado a partir de modelos rigorosos, capazes de determinar o ponto ótimo da divisão com grande precisão. Contudo, o ponto ótimo encontrado pode não corresponder àquele que leva ao máximo desempenho da planta.

Outra dificuldade está no fato de que as divisões em geral possuem como cargas ou produtos correntes intermediárias cujos preços podem ser difíceis de definir (Hui, 2002). Para determinar o ponto ótimo global da planta, os autores propõem uma metodologia que se baseia na decomposição do problema em duas camadas. No início do processo iterativo é realizada a otimização da planta a partir do modelo simplificado, gerando como saídas adicionais os custos marginais das correntes do processo. Estes valores são repassados à segunda camada, composta pelos problemas de otimização baseados em modelos rigorosos.

A otimização de cada unidade é computada e no ponto ótimo operacional de cada uma são determinados novos coeficientes de rendimentos que são repassados à primeira camada. O processo é repetido até que haja convergência dos custos marginais e coeficientes de rendimento. Desta forma, seria obtida uma solução ótima para a planta em perfeita sintonia com o ponto ótimo de cada unidade, explorando ao máximo a sinergia entre as unidades. Como exemplo para teste da metodologia, foi utilizada uma refinaria contendo unidades de craqueamento catalítico fluído, destilação atmosférica e a vácuo, coqueamento retardado, hidrotratamento e blending, entre outras. Os resultados obtidos no exemplo sugerem a possibilidade de ganhos significativos.

Em 2006, Zhang e Zhu propuseram uma evolução desta metodologia, em que o algoritmo de otimização que integra as duas camadas foi modificado, novos critérios de convergência foram propostos e outros aspectos práticos foram considerados, como a existência de possíveis correntes de reciclo (e como tratá-las dentro da

estratégia de decomposição). Novamente utilizou-se uma refinaria de petróleo como exemplo ilustrativo (Carvalho, 2007).

A otimização se preocupa, de forma geral, em aumentar o lucro da unidade produtiva. No entanto, nem sempre a quantificação do lucro é algo palpável, pois uma unidade industrial encontra-se sempre introduzida em um contexto mais amplo, composto por várias unidades industriais e o lucro global nem sempre é representado pelo lucro local. Os objetivos da otimização podem ser variados, de acordo com o que a programação de produção determina. Exemplos de objetivos comuns de otimização de unidades industriais podem ser, além do lucro, o mínimo consumo de energia, a máxima conversão de um produto ou vários, a máxima seletividade, a máxima ou mínima especificação, entre outros (Duraiski, 2009).

As técnicas de decomposição clássicas baseiam-se em algoritmos iterativos para que os problemas de otimização possam ser decompostos e resolvidos separadamente, realizando atualizações do multiplicador de Lagrange para as restrições das correntes intermediárias das divisões, em que para fins econômicos os multiplicadores de Lagrange representariam os preços sombra desses produtos intermediários. Essas técnicas de decomposição vêm sendo estudadas pelo grupo de pesquisa com intuito de ser aplicadas no projeto de desenvolvimento de soluções RTO para a unidade de produção de propeno da refinaria REPLAN da PETROBRAS.

3. TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO NA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

Métodos de decomposição são usados principalmente para resolver problemas de otimização de grande escala que apresentam uma estrutura de subsistemas inter-relacionados. Reduzir a dimensão não é a única motivação, outro aspecto é que sejam tomadas decisões localmente e que os cálculos para resolver estes subsistemas sejam feitos em paralelo com diferentes processadores e/ou softwares.

As técnicas clássicas de decomposição em programação matemática podem ter uma estrutura baseada no preço (*price-directive decomposition*) ou baseada no recurso (*resource-directive decomposition*). Em ambas estruturas, ter conhecimento das condições de otimalidade e de dualidade é fundamental para entender o conceito de decomposição e da resolução iterativa dos problemas (Mahey, 2002).

Assim, a ideia geral das técnicas de decomposição é relaxar as restrições globais (restrições complicadoras), que conectam duas ou mais partes decomponíveis de um problema de otimização, o que pode ser alcançado de diversas formas.

3.1. TÉCNICAS DE RELAXAÇÃO E DECOMPOSIÇÃO

A otimização é "a ciência do melhor" no sentido de que ela ajuda a tomar não apenas uma decisão viável, mas sim a melhor decisão sujeita a certas restrições que descrevem o domínio dentro do qual a mesma tem que ser feita. Modelos de programação matemática fornecem o quadro apropriado para abordar essas decisões de otimização de forma precisa e formal. Portanto, um problema de programação matemática, é representado por uma estrutura de decisão de otimização, apresentada abaixo:

<i>Max</i>	<i>Função Objetivo</i>
<i>sujeito a:</i>	<i>Restrições</i>

Muitos problemas derivados de situações concretas apresentam determinadas estruturas descentralizadas. Portanto, um problema de programação matemática associada ao modelo de otimização descentralizado pode apresentar a seguinte estrutura (Conejo et al. 2006):

$$\begin{array}{ll}
 \text{Max} & \text{Objetivo}_1 + \text{Objetivo}_2 \\
 \text{Sujeito a:} & \text{Restrições}_1 \\
 & \text{Restrições}_2 \\
 & \text{Restrições Comuns}_{1,2}
 \end{array}$$

Neste exemplo o bloco de restrições "restrições 1" está relacionado com o primeiro termo da função objetivo "objetivo 1" e corresponde ao subproblema 1, enquanto que o segundo bloco de restrições "restrições 2" está relacionado com a segunda parte da função objetivo "objetivo 2" e corresponde ao subproblema 2. No entanto, o bloco de restrições comuns afeta os dois subproblemas (são restrições de fronteira) e complica a solução do problema, pois evita que os subproblemas associados com os dois blocos sejam resolvidos separadamente. Por causa das considerações acima, as restrições comuns são denominadas *restrições complicadoras*. Finalmente, nota-se que teria sido possível considerar qualquer número de blocos com diferentes estruturas de fronteira, em vez de apenas dois (Conejo et al. 2006). Já um problema de programação matemática que envolve variáveis inteiras apresenta a seguinte estrutura:

$$\begin{array}{ll}
 \text{Max} & \text{Objetivo}_1 + \text{Objetivo}_2 \\
 \text{Sujeito a:} & \text{Restrições}_1 \text{ \& Restrições Comuns}_{1,2} \text{ (Inteiras)} \\
 & \text{Restrições}_2 \text{ \& Restrições Comuns}_{1,2} \text{ (Inteiras)}
 \end{array}$$

A parte comum de ambos os blocos das restrições estão relacionada com decisões inteiras enquanto as partes não comuns estão relacionadas com as decisões contínuas. Tratar variáveis inteiras é muito mais complicado do que tratar as variáveis contínuas, por isso tais problemas são denominados como problemas com *variáveis complicadoras*. Além disso, nota-se que uma vez que as decisões das variáveis inteiras forem feitas, o subproblema resultante decompõe-se por blocos, o que pode facilitar consideravelmente a sua solução.

O problema estudado neste trabalho apresenta uma topologia descentralizada, que é uma estrutura adequada para algumas estratégias de decomposição. As variáveis consideradas no problema são contínuas e as restrições das operações são não-lineares, portanto devem ser consideradas técnicas adequadas para problemas de decomposição com restrições complicadoras. Os métodos clássicos sugeridos por Conejo et al. (2006) são os de relaxação Lagrangeana e Lagrangeano aumentado,

mas, pelas características do problema estudado, Jose e Ungar (2000) sugerem uma técnica alternativa que é *Pricing Interprocess streams Using Slack Auctions* já que as técnicas clássicas podem apresentar uma série de problemas na sua aplicação. Na próxima seção serão apresentados detalhes das técnicas mencionadas.

3.2. RELAXAÇÃO LAGRANGEANA E DUALIDADE

Para poder entender os métodos de decomposição é importante repassar os conceitos de condições de otimalidade e dualidade, o que é apresentado nas próximas subseções.

3.2.1. Condições de Otimalidade

Conceitos básicos das condições de otimalidade podem ser encontrados em Bazaraa et al. (2006), Winston (1995) e Conejo et al. (2006). De acordo com Pinto e Gut (2005), um problema de otimização pode ser classificado em: problema de otimização sem restrições, problema de otimização com restrições de igualdade, problema de otimização com restrições de desigualdade e por ultimo problema de otimização com restrições de igualdade e desigualdade. A seguir são explicitadas cada uma destas classificações.

a) Problema de otimização sem restrições:

Seja o problema de otimização

$$\begin{array}{ll} \text{Min} & f(\underline{x}) \\ \text{sujeito a:} & \underline{x} \in \mathbb{R}^n \end{array}$$

com $f(\underline{x}) \in C^2$ (Conjunto das funções que podem ser diferenciadas duas vezes).

A condição necessária para um mínimo local é:

Teorema 3.1: se $f(\underline{x})$ possui um extremo em $\underline{x}^*$ (máximo ou mínimo), então este é um ponto estacionário:

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

O que constitui um sistema com n equações e n incógnitas, que pode ser resolvido por qualquer método de resolução de equações algébricas não-lineares.

As condições suficientes para um mínimo local são:

Partindo da expansão da série de Taylor para um ponto extremo $\underline{x}^*$:

$$f(\underline{x}) = f(\underline{x}^* + \nabla \underline{x}) = f(\underline{x}^*) + \nabla^T f(\underline{x}^*) \cdot \nabla \underline{x} + \frac{1}{2} (\nabla^2 f(\underline{x}^*)) \cdot \nabla \underline{x} + \dots$$

onde $\nabla \underline{x}$ é uma perturbação a partir do ponto extremo: $\underline{x} = \underline{x}^* + \nabla \underline{x}$.

Desprezando os termos de ordem superior da série e sabendo que $\nabla f(\underline{x}^*) = \underline{0}$, temos:

$$f(\underline{x}^* + \nabla \underline{x}) - f(\underline{x}^*) = \frac{1}{2} (\nabla^2 f(\underline{x}^*)) \cdot \nabla \underline{x}$$

Então, para que $\underline{x}^*$ seja um mínimo local forte:

$$f(\underline{x}^* + \nabla \underline{x}) - f(\underline{x}^*) > 0, \forall \nabla \underline{x} \rightarrow \nabla^2 f(\underline{x}^*) \cdot \nabla \underline{x} > 0$$

ou seja, a matriz Hessiano $\underline{H}(\underline{x}) \rightarrow \nabla^2 f(\underline{x}^*)$ deve ser positiva definida em $\underline{x} = \underline{x}^*$.

Se $\underline{H}(\underline{x})$ for positiva semidefinida, pode haver múltiplos mínimos, já que $f(\underline{x}^* + \nabla \underline{x}) - f(\underline{x}^*) \geq 0$.

Propriedades:

- $\underline{H}(\underline{x})$ é positiva definida $\leftrightarrow$ autovalores de $\underline{H}$ são positivos.
- $f(\underline{x})$ é estritamente convexa $\leftrightarrow \underline{H}(\underline{x})$ é positiva definida $\forall \underline{x}$.
- Se $f(\underline{x})$ é estritamente convexa e possui um ponto estacionário, então este ponto é um mínimo global.

b) Problema de otimização com restrições de igualdade

Seja o problema de otimização:

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & f(\underline{x}) \\ \text{sujeito a:} \quad & \underline{h}_{m \times 1}(\underline{x}) = \underline{0} \quad \text{com} \quad f(\underline{x}), h(\underline{x}) \in C^2 \\ & \underline{x} \in R^n \end{aligned}$$

Condições necessárias para um mínimo local são:

Teorema 3.2: se $f(\underline{x})$ possui um extremo com restrições em $\underline{x}$, de modo que as equações $h_j(\underline{x}) = 0$, $j = 1, 2, \dots, m$ são válidas, então $\nabla f(\underline{x})$ e $\nabla h_j(\underline{x})$ são linearmente dependentes neste extremo: $\lambda_0 \cdot \nabla f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j \cdot \nabla h_j(\underline{x})$, com pelo menos um λ_j não nulo.

A figura 3.1 apresenta como exemplo uma interpretação geométrica para a dependência linear entre $\nabla f(\underline{x})$ e $\nabla h_j(\underline{x})$ no ponto mínimo $\underline{x}^*$. A linha pontilhada sobre o cone representa a região viável do problema.

Figura 3.1- Interpretação geométrica para a dependência linear dos gradientes.

Fonte: Pinto e Gut (2005).

Considerando sem perda de generalidade que $\lambda_0 = 1$, então $\nabla f(\underline{x}) = - \sum \lambda_j \cdot \nabla h_j(\underline{x})$. Neste caso, $\nabla f(\underline{x})$ e $\nabla h_j(\underline{x})$ são colineares.

As seguintes condições:

$$\begin{aligned}\nabla f(\underline{x}) + \sum \lambda_j \cdot \nabla h_j(\underline{x}) &= 0 \\ h_j(\underline{x}) &= 0\end{aligned}$$

são na verdade as condições estacionárias da função Lagrangeano, L :

$$L(\underline{x}, \underline{\lambda}) = f(\underline{x}) + \sum \lambda_j \cdot h_j(\underline{x})$$

ou seja, estas condições equivalem a:

$$\nabla L(\underline{x}, \underline{\lambda}) = 0 \rightarrow \begin{cases} \frac{\partial L}{\partial \underline{x}} = \nabla f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^m \lambda_j \cdot \nabla h_j(\underline{x}) \\ \frac{\partial L}{\partial \underline{\lambda}} = \underline{h}(\underline{x}) = 0 \end{cases}$$

Esta equação constitui um sistema com $n + m$ equações e $n + m$ incógnitas e sua solução fornece o extremo $\underline{x}^*$ e os respectivos multiplicadores de Lagrange, λ_j .

A condição suficiente para um mínimo local é que, Realizando uma análise semelhante ao caso anterior, temos que a matriz Hessiano do Lagrangeano $H(\underline{x}, \underline{\lambda}) = \nabla^2 L(\underline{x}, \underline{\lambda})$ deve ser positiva definida em $\underline{x} = \underline{x}^*$.

c) Problema de Otimização com Restrições de Desigualdade

Seja o problema de otimização:

$$\begin{aligned} &\text{Min} && f(\underline{x}) \\ &\text{sujeito a:} && \underline{g}_{r \times 1}(\underline{x}) \leq 0 \quad \text{com } f(\underline{x}), g(\underline{x}) \in C^2 \\ &&& \underline{x} \in R^n \end{aligned}$$

Teorema 3.3: Se $f(\underline{x})$ possui um extremo restrito em $\underline{x}$, de modo que $g_j(\underline{x}) \leq 0$ ($j = 1, 2, \dots, r$) então $\exists \mu_j \geq 0$ ($j = 1, 2, \dots, r$) tal que:

$$1) \mu_0 \cdot \nabla f(\underline{x}) + \sum_{j=1}^r \mu_j \cdot \nabla g_j(\underline{x}) = 0 \rightarrow \text{dependência linear dos gradientes}$$

$$2) \mu_j \cdot g_j(\underline{x}) = 0 \rightarrow \text{condição de complementaridade}$$

As restrições de desigualdade podem ser classificadas como:

- Ativas (fortemente) $g_j(\underline{x}^*) = 0 \rightarrow \mu_j \geq 0$
- Ativas (fracamente) $g_j(\underline{x}^*) = 0 \rightarrow \mu_j = 0$
- Inativas $g_j(\underline{x}^*) < 0 \rightarrow \mu_j = 0$

A figura 3.2 mostra um exemplo em que g_1 e g_2 são restrições ativas ($\mu_1, \mu_2 > 0$) e g_3 é uma restrição inativa ($\mu_3 = 0$). Neste caso a dependência linear dos gradientes é expressa como:

$$\mu_0 \cdot \nabla f(\underline{x}) + \mu_1 \cdot \nabla g_1(\underline{x}) + \mu_2 \cdot \nabla g_2(\underline{x}) = 0$$

Nota-se que o gradiente de f aponta na direção de f crescente e que o gradiente de g_j aponta na direção de ampliação da região viável.

Figura 3.2 - Interpretação geométrica para a dependência linear dos gradientes.

Fonte: Pinto e Gut (2005).

Admitindo $\mu_0 = 1$, temos as seguintes condições:

$$\begin{aligned}\nabla f(\underline{x}) + \sum \mu_j \cdot \nabla g_j(\underline{x}) &= 0 \\ \mu_j \cdot g_j(\underline{x}) &= 0\end{aligned}$$

em que $\mu_j \geq 0$ ($j = 1, 2, \dots, r$) são os multiplicadores de Karush Kuhn-Tucker

Nota-se que como $\mu_j = 0$ para as restrições inativas, temos condições semelhantes àsquelas obtidas para o problema de otimização com restrições de igualdade, ou seja, condições estacionárias de Lagrangeano:

$$L(\underline{x}, \underline{\mu}) = f(\underline{x}) + \sum \mu_j \cdot g_j(\underline{x}) \rightarrow \nabla L(\underline{x}, \underline{\mu}) = 0$$

A dificuldade encontra-se na identificação das restrições ativas e inativas.

O significado de multiplicadores de Karush Kuhn-Tucker é o seguinte:

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

Seja uma direção $\underline{p}$, tal que:

$$\begin{aligned}\partial f &= \underline{p}^T \cdot \nabla f(\underline{x}) \text{ é a variação de } f \text{ na direção } \underline{p}. \\ \partial g_j &= \underline{p}^T \cdot \nabla g_j(\underline{x}) \text{ é a variação de } g_j \text{ na direção } \underline{p}.\end{aligned}$$

Multiplicando a equação de condição estacionária acima por $\underline{p}^T$, temos:

$$\underline{p}^T \cdot \nabla f(\underline{x}) + \sum \underline{\mu}_j \cdot \nabla g_j(\underline{x}) = 0 \rightarrow \partial f + \sum \underline{\mu}_j \cdot \partial g_j = 0$$

Assumindo que ∂g_j ($j = 1, 2, \dots, r$, com $j \neq i$), ou seja que a restrição g_i sofre a variação:

$$\partial f + \sum \underline{\mu}_i \cdot \partial g_i = 0 \rightarrow \mu_i = - \left(\frac{\partial f}{\partial g_i} \right)_{\partial g_j=0, j \neq i}$$

Portanto, o multiplicador de Karush Kuhn-Tucker, $\underline{\mu}_i$, representa a sensibilidade da função objetivo frente a uma alteração na restrição $g_i(\underline{x})$, considerando constantes todas as outras restrições.

- Considere uma alteração inviável $\partial g_i > 0$ (aumento de g_i e consequentemente ampliação da região viável). Com $\mu_i > 0$, obtemos $\partial f < 0$, ou seja, o valor da função objetivo é reduzido (favorável à minimização).
- Considere uma alteração viável $\partial g_i < 0$ (redução de g_i). Como $\mu_i > 0$, obtemos $\partial f > 0$ (aumento em f).

d) Otimização com restrições de igualdade e desigualdade

Seja o problema de otimização:

$$\begin{aligned} \text{Min} \quad & f(\underline{x}) \\ \text{sujeito a:} \quad & \underline{h}_{m \times 1}(\underline{x}) = 0 \text{ com } f(\underline{x}), h(\underline{x}), g(\underline{x}) \in \mathbb{C}^2 \\ & \underline{g}_{r \times 1}(\underline{x}) \leq 0 \\ & \underline{x} \in \mathbb{R}^n \end{aligned}$$

A condição necessária para um mínimo local é satisfação das condições de Karush Kuhn-Tucker. Estas condições equivalem à obtenção do ponto estacionário da função Lagrangeano, obtida combinando restrições de igualdade e desigualdade e assumindo $\lambda_0 = \mu_0 = 1$

$$L(\underline{x}, \underline{\lambda}, \underline{\mu}) = f(\underline{x}) + \sum \lambda_j \cdot h_j(\underline{x}) + \sum \underline{\mu}_j \cdot g_j(\underline{x}) \rightarrow \nabla L(\underline{x}, \underline{\lambda}, \underline{\mu}) = 0$$

- Dependência linear dos gradientes

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

λ_j : multiplicadores de Lagrange

μ_j : multiplicadores de Karush Kuhn-Tucker

- Viabilidade das restrições

$$h_j(\underline{x}) = 0 \quad 1 \leq j \leq m$$

$$g_j(\underline{x}) = 0 \quad 1 \leq j \leq r$$

- Condições de Complementaridade

$$\mu_j \cdot g_j(\underline{x}) = 0 \quad 1 \leq j \leq r$$

$$\mu_j \geq 0$$

Condições de Karush Kuhn-Tucker resultam em um sistema não-linear de $n + m + r$ equações e incógnitas. Como solução obtemos um ponto estacionário chamado ponto de Karush Kuhn-Tucker.

A condição suficiente para um mínimo local:

O Hessiano do Lagrangeano $H(\underline{x}, \underline{\lambda}, \underline{\mu}) = \nabla^2 L(\underline{x}, \underline{\lambda}, \underline{\mu})$ deve ser positivo definido em $\underline{x} = \underline{x}^*$.

Se $f(\underline{x})$ é convexa e a região viável F é também convexa então, para um mínimo local $\underline{x}^*$:

$\underline{x}^*$ é também um mínimo global, e, as condições de otimalidade de Karush Kuhn-Tucker são necessárias e suficientes para o mínimo global.

3.2.2. Dualidade

Baseado em Conejo et al. (2006) são apresentados a seguir os conceitos de dualidade, que podem ser divididos em dualidade para programação linear e dualidade para programação não-linear.

a) Dualidade em Programação Linear

Dado o seguinte problema de programação linear em que a variável de decisão é x :

$$\text{Min} \quad z = c^T \cdot x \quad (3.1)$$

Sujeito a:

$$A.x \geq b \quad (3.2)$$

$$x \geq 0$$

tem-se o seguinte problema dual:

$$\text{Max} \quad z = b^T.y \quad (3.3)$$

Sujeito a:

$$A^T.y \leq c \quad (3.4)$$

$$y \geq 0$$

em que $y = (y_1, y_2, \dots, y_m)^T$ são chamadas de variáveis duais.

Podemos identificar o primeiro problema como o problema primal, e o segundo como sua contraparte dual. Nota-se que os mesmos elementos (a matriz A, e os vetores b e c) determinam ambos problemas. No entanto, o problema primal não está no formato padrão, mas este formato nos permite ver mais claramente a simetria entre o problema primal e seu correspondente problema dual como mostra o seguinte teorema:

Teorema 3.4: A dualidade tem uma relação simétrica com o problema primal, se o problema D é o problema dual de P, então P também é o dual de D.

Como se pode observar, cada restrição do problema primal tem variáveis duais associadas com ele, os coeficientes da função objetivo do problema primal são os termos do segundo membro das restrições do problema dual e vice-versa, e a matriz de coeficientes das restrições do problema dual é a transposta da matriz de restrições do problema primal. O problema primal é de minimização, mas seu dual é um problema de maximização.

Para obter um problema dual a partir de um problema primal em sua forma padrão, é usada a definição de dualidade para o seguinte teorema:

Teorema 3.5: O problema primal na forma padrão

$$\text{Min} \quad z = c^T.x \quad (3.5)$$

Sujeito a:

$$A.x = b \quad (3.6)$$

$$x \geq 0$$

tem o seguinte problema dual:

$$\begin{aligned}
 &\text{Max} && z = b^T \cdot y \\
 &\text{sujeito a:} && \\
 &&& A^T \cdot y \leq c \\
 &&& y \geq 0
 \end{aligned}$$

A importância da relação primal-dual é estabelecida nos teoremas que se seguem.

Lema 3.1 (Lema de dualidade fraca). Seja P o problema de programação linear eq.(3.1) - (3.2), e D dual eq.(3.3) - (3.4). Seja x uma solução viável de P e y uma solução viável de D . Portanto

$$b^T \cdot y \leq c^T \cdot x \quad (3.7)$$

Corolário 3.1. Seja $b^T \cdot \bar{y} = c^T \cdot \bar{x}$ para alguns vetores particulares $\bar{x}$ e $\bar{y}$, viável para P e D , respectivamente, então as soluções ótimas dos problemas duais e primais são $\bar{y}$ e $\bar{x}$, respectivamente. Além disso, se $\bar{x}$ é uma solução ótima para o problema primal, então, existe uma solução ótima $\bar{y}$ para o problema dual, e o valor da função objetivo ótima de ambos os problemas coincide com o valor comum $b^T \cdot \bar{y} = c^T \cdot \bar{x}$. Caso contrário, um ou ambos os conjuntos de soluções viáveis estão vazios.

O Corolário 3.1 afirma que ambos problemas, o primal P e o dual D , admitem soluções ótimas simultaneamente.

Em resumo, uma das duas declarações seguintes é afirmativa:

- Ambos os problemas têm solução ótima e seus valores ótimos coincidem.
- Um problema não tem limites para o ótimo e o outro tem uma região viável vazia.

Em geral, as variáveis duais (multiplicadores de Lagrange) estão associados ao preço sombra de uma restrição, já que mostram a alteração do valor ótimo da função objetivo por unidade de mudança no valor do lado direito da restrição, assumindo que todos os outros valores de parâmetros do problema permanecem inalterados. Para muitas aplicações de programação linear os preços sombra são, pelo menos, tão importantes quanto à solução do problema em si; eles indicam se certas mudanças no uso das capacidades produtivas podem afetar o valor da função objetivo. Os preços sombra podem ser obtidos diretamente a partir da solução do problema primal ou determinada pela formulação e resolução do problema dual.

b) Dualidade em programação não-linear

Nesta seção os resultados obtidos para os problemas de programação linear são generalizados para problemas de programação não-linear. Considere o seguinte problema geral primal não-linear:

$$\text{Min}_x \quad z_P = f(x) \quad (3.8)$$

Sujeito a:

$$h(x) = 0 \quad (3.9)$$

$$g(x) \leq 0$$

em que $f: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$, $h: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^l$, $g: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^m$

O problema dual requer a introdução da função dual definida como:

$$\varphi(\lambda, \mu) = \inf_x \{ f(x) + \lambda^T \cdot h(x) + \mu^T \cdot g(x) \} \quad (3.10)$$

em que λ^* , μ^* são os multiplicadores associados com as restrições de igualdade e desigualdade para a solução ótima do problema x^* eq.(3.8) - (3.9).

O problema dual do problema primal eq.(3.8) - (3.9) é então definido como se segue:

$$\text{Max}_{\lambda, \mu} \quad z_D = \varphi(\lambda, \mu) \quad (3.11)$$

Sujeito a:

$$\mu \geq 0 \quad (3.12)$$

Usando a função Lagrangeana

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T \cdot h(x) + \mu^T \cdot g(x) \quad (3.13)$$

pode-se reescrever o problema dual como:

$$\text{Max}_{\lambda, \mu; \mu \geq 0} \quad [\inf_x L(x, \lambda, \mu)] \quad (3.14)$$

Um exemplo da aplicação do uso da função Lagrangeana no problema dual pode ser encontrada em Conejo et al. (2006).

Observação: assumimos que f , h , e g são tais que o ínfimo da função Lagrangeana é sempre alcançado em algum x , de maneira que a operação de "ínfimo" nos problemas eq.(3.10) e (3.14) pode ser substituída pela operação de "mínimo". Então, o problema eq.(3.14) é referido como o problema dual max-min. Nesta situação,

denotamos por $x(\lambda, \mu)$ um ponto em que o mínimo dos Lagrangeanos é atingido (considerado como uma função dos multiplicadores), podemos escrever

$$\varphi(\lambda, \mu) = f(x(\lambda, \mu)) + \lambda^T \cdot h(x(\lambda, \mu)) + \mu^T \cdot g(x(\lambda, \mu))$$

Por outro lado, sobre a hipótese de convexidade de f e g , a função Lagrangeana é convexa em x , e, portanto, no mínimo o seu gradiente deve desaparecer

$$\nabla \varphi(\lambda, \mu) = \nabla f(x(\lambda, \mu)) + \lambda^T \cdot \nabla h(x(\lambda, \mu)) + \mu^T \cdot \nabla g(x(\lambda, \mu)) = 0 \quad (3.15)$$

A última identidade pode ser utilizada para derivar uma expressão para o gradiente da função dual, bem como para seu Hessiano. Mais explicitamente, de acordo com a regra da cadeia

$$\nabla_{\mu} \varphi(\lambda, \mu) = [\nabla f(x(\lambda, \mu)) + \lambda^T \cdot \nabla h(x(\lambda, \mu)) + \mu^T \cdot \nabla g(x(\lambda, \mu))]^T \cdot \nabla_{\mu} x(\lambda, \mu) + g(x(\lambda, \mu)) \quad (3.16)$$

e pela condição eq.(3.15)

$$\mu \varphi(\lambda, \mu) = g(x(\lambda, \mu)) \quad (3.17)$$

É preciso tomar cuidado no uso da expressão eq.(3.17) por causa da descontinuidade de expressão eq.(3.16) em relação a μ . No entanto, isto não é um problema na prática.

Do mesmo modo, obtém-se

$$\lambda \varphi(\lambda, \mu) = h(x(\lambda, \mu)) \quad (3.18)$$

Note-se que a gradiente da função dual é o vetor de desajustes das restrições correspondentes.

Em relação ao Hessiano, note que por condições diferenciáveis eq.(3.17) e (3.18) com respeito à μ e λ , respectivamente, obtemos

$$\nabla_{\mu}^2 \varphi(\lambda, \mu) = \nabla_x g(x(\lambda, \mu)) \nabla_{\mu} x(\lambda, \mu)$$

e

$$\nabla_{\lambda}^2 \varphi(\lambda, \mu) = \nabla_x h(x(\lambda, \mu)) \nabla_{\lambda} x(\lambda, \mu)$$

Para obter uma expressão para $\nabla_{\mu} x(\lambda, \mu)$ e $\nabla_{\lambda} x(\lambda, \mu)$, derivamos a expressão (3.15) em relação à μ e λ , respectivamente. Os resultados são

$$\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu) \nabla_\mu x(\lambda, \mu) + \nabla_x g(x(\lambda, \mu)) = 0$$

e uma equação semelhante trocando λ por μ e h por g , isto é,

$$\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu) \nabla_\lambda x(\lambda, \mu) + \nabla_x h(x(\lambda, \mu)) = 0$$

Substituindo estas equações em (4,69) e (4,70), respectivamente, obtém-se

$$\nabla_\mu^2 \varphi(\lambda, \mu) = - \nabla_x g(x(\lambda, \mu)) [\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu)]^{-1} \nabla_x g(x(\lambda, \mu))$$

e de igual forma para $\nabla_\lambda^2 \varphi(\lambda, \mu)$ tem-se

$$\nabla_\lambda^2 \varphi(\lambda, \mu) = - \nabla_x h(x(\lambda, \mu)) [\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu)]^{-1} \nabla_x h(x(\lambda, \mu))$$

Finalmente, se estamos interessados nas segundas derivadas parciais mistas $\nabla_{\lambda\mu}^2 \varphi(\lambda, \mu)$.

Cálculos semelhantes conduzem a

$$\nabla_{\lambda\mu}^2 \varphi(\lambda, \mu) = - \nabla_x g(x(\lambda, \mu)) [\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu)]^{-1} \nabla_x h(x(\lambda, \mu))$$

e similarmente

$$\nabla_{\lambda\mu}^2 \varphi(\lambda, \mu) = - \nabla_x h(x(\lambda, \mu)) [\nabla_x^2 L(x(\lambda, \mu), \lambda, \mu)]^{-1} \nabla_x g(x(\lambda, \mu))$$

O que mostra que a definição de um problema dual na programação não-linear é equivalente à definição de dualidade apresentada para problemas de programação linear.

Assim, qualquer valor da função objetivo do problema dual é um limite inferior do valor ótimo da função objetivo do problema primal. Isto pode ser utilizado para terminar cálculos em um algoritmo iterativo em que estes valores estão disponíveis, como mostra o teorema de dualidade fraco explicado a seguir.

Teorema 3.6: Dualidade fraca.

Para qualquer solução x viável do problema primal eq.(3.8) - (3.9) e para qualquer solução viável, λ, μ , do problema dual eq.(3.11) - (3.12), vale a seguinte relação:

$$f(x) \geq \varphi(\lambda, \mu) \quad (3.19)$$

Se as regiões viáveis de ambos os problemas, primal e dual, são não vazias, a expressão eq.(3.19) implica que supremo (ϕ) e o ínfimo (f), ambos, sobre suas respectivas restrições, são finitos. Certamente, nem o supremo nem o ínfimo precisam ser atingidos em qualquer ponto viável. Se o resultado gerado da expressão eq.(3.19), tanto o primal quanto o dual são viáveis, então, ambos têm soluções ótimas.

Corolário 3.2 Otimalidade no problema primal e dual.

a) A seguinte relação sempre é mantida:

$$\sup \{ \phi(\lambda, \mu) \mid \mu \geq 0 \} \leq \inf \{ f(x) \mid h(x) = 0, g(x) \leq 0 \} \quad (3.20)$$

b) Se $f(x^*) = \phi(\lambda^*, \mu^*)$ para alguma solução viável x^* do problema primal eq.(3.8)-(3.9) e para algumas soluções viáveis (λ^*, μ^*) do problema dual eq.(3.11)-(3.12), então x^* e (λ^*, μ^*) são as soluções ótimas dos problemas primal e dual, respectivamente. Esta solução define um ponto de sela do Lagrangeano correspondente a um máximo com relação a λ e μ e um mínimo em relação a x .

c) Se $\sup \{ \phi(\lambda, \mu) : \mu \geq 0 \} = +\infty$, então, o problema primal não tem uma solução viável.

d) se $\inf \{ f(x) : h(x) = 0, g(x) \leq 0 \} = -\infty$, então, $\phi(\lambda, \mu) = -\infty$ para todo $\lambda \in \mathbb{R}^l$ e $\mu \geq 0$.

A prova para este corolário pode ser encontrada em Bazaraa et al. (1993).

Se o resultado gerado na eq.(3.19), não é de igualdade, então acontece um gap da dualidade, esse gap é de muito interesse para o estudo das técnicas de decomposição para problemas de otimização.

A diferença:

$$\sup \{ \phi(\lambda, \mu) : \mu \geq 0 \} - \inf \{ f(x) : h(x) = 0, g(x) \leq 0 \}$$

é definida como gap da dualidade dos problemas primal eq.(3.8) - (3.9) e dual eq.(3.11) - (3.12)

Se um vetor multiplicador resolve o problema dual e não gera um gap da dualidade, ou seja, se a relação eq.(3.20) é estritamente satisfeita, então as soluções do Lagrangeano associado a este vetor multiplicador são soluções ótimas do problema

primal. Esse resultado apresenta uma maneira de resolver o problema primal por meio da resolução do problema dual. O resultado principal consiste em obter condições que garantam a inexistência de um gap da dualidade.

Teorema 3.7: Teorema de Dualidade para problemas convexos

Considere um problema de programação matemática convexa como eq.(3.8) - (3.9). Se x^* é a solução do problema primal, então, o vetor associado dos multiplicadores é (λ^*, μ^*) que são solução do problema dual, e $(\mu^*)^T g(x^*) = 0$. Por outro lado, se (λ^*, μ^*) é solução do problema dual, existe uma solução, x^* , do Lagrangeano associada com este vetor de multiplicadores tal que $(\mu^*)^T g(x^*) = 0$, então x^* é uma solução ótima do problema primal.

3.3. DECOMPOSIÇÃO LAGRANGEANA

Como já foram mencionadas anteriormente, as técnicas de decomposição baseiam-se em algoritmos iterativos para que os problemas de otimização possam ser relaxados (considerando conceitos de otimalidade) e resolvidos separadamente, atualizando os multiplicadores de Lagrange (considerando conceitos de dualidade), a partir de um problema mestre.

Para fins econômicos, os multiplicadores de Lagrange representariam os preços sombra dos produtos intermediários e assim, poderia ser otimizada uma divisão de uma refinaria buscando gerar o maior lucro para toda a refinaria.

O problema de otimização deve ter a seguinte estrutura para ser decomposto:

$$\text{Min}_x \quad f(x) \quad (3.21)$$

sujeito a:

$$a(x) = 0 \quad (3.22)$$

$$b(x) \leq 0$$

$$c(x) = 0$$

$$d(x) \leq 0$$

em que $f(x) : R^n \rightarrow R$, $a(x) : R^n \rightarrow R^{na}$, $b(x) : R^n \rightarrow R^{nb}$, $c(x) : R^n \rightarrow R^{nc}$, $d(x) : R^n \rightarrow R^{nd}$, e na , nb , nc e nd são escalares e vamos supor que as restrições complicadoras são $c(x) = 0$ e $d(x) \leq 0$. Se relaxarmos as restrições complicadoras, a resolução do

problema é simplificada drasticamente. A função Lagrangeana do problema de otimização é definida como:

$$L(x, \lambda, \mu) = f(x) + \lambda^T \cdot c(x) + \mu^T \cdot d(x) \quad (3.23)$$

em que λ e μ são os vetores dos multiplicadores de Lagrange e as restrições complicadoras $c(x)$ e $d(x)$ são relaxadas. Sob a hipótese de regularidade e convexidade, a função dual é definida como:

$$\varphi(\lambda, \mu) = \text{Min}_x L(x, \lambda, \mu)$$

sujeito a:

$$a(x) = 0$$

$$b(x) \leq 0$$

A função dual é côncava e em geral não diferenciável. Este é um fato fundamental para ser explorado nos algoritmos de resolução de problemas explicados mais para frente.

O problema dual é definido como:

$$\text{Max}_{\lambda, \mu} \quad \varphi(\lambda, \mu)$$

sujeito a:

$$\mu \geq 0$$

A decomposição por relaxação Lagrangeana é um procedimento atrativo quando a função dual é facilmente avaliada para determinados valores $\bar{\lambda}, \bar{\mu}$ dos vetores dos multiplicadores λ, μ , respectivamente. Em outras palavras, é chamado fácil de resolver se o problema primal é relaxado fornecendo os valores de $\bar{\lambda}$ e $\bar{\mu}$. Então o problema fica da seguinte forma:

$$\text{Min}_x \quad L(x, \bar{\lambda}, \bar{\mu})$$

sujeito a:

$$a(x) = 0$$

$$b(x) \leq 0$$

que pode ser decomposto em subproblemas:

$$\text{Min}_{x_i; i=1, \dots, n} \quad \sum_{i=1}^n L(x_i, \bar{\lambda}, \bar{\mu})$$

sujeito a:

$$a_i(x_i) = 0; \quad i=1, \dots, n$$

$$b_i(x_i) \leq 0; \quad i=1, \dots, n$$

A decomposição facilita a resolução deste problema e normalmente permite que sejam realizadas interpretações físicas e econômicas. O problema é denominado primal decomposto. Então, obtém-se n subproblemas que podem ser resolvidos em paralelo. Sob hipóteses de convexidade, o teorema da dualidade diz que:

$$f(x^*) = \varphi(\lambda^*, \mu^*)$$

em que x^* é a solução da minimização do problema primal e (λ^*, μ^*) é a solução da maximização do problema dual.

Num caso não convexo, dada uma solução viável para o problema primal, x , e uma solução viável para o problema dual, (λ, μ) , a dualidade fraca implica que:

$$f(x^*) \geq \varphi(\lambda^*, \mu^*)$$

No caso convexo, a solução do problema dual fornece a solução do problema primal. No caso não convexo, o valor da função objetivo na solução ótima do problema dual fornece o limite inferior do valor da função objetivo na solução do problema primal. A diferença entre os valores ótimos da função objetivo do problema primal e dual é chamada de gap da dualidade como explicado anteriormente. Um exemplo ilustrativo pode ser encontrado em Conejo et al. (2006).

O algoritmo de resolução de problemas de otimização de processos por decomposição Lagrangeana é apresentado à continuação:

Passo 0: Inicialização

Considerando um problema de minimização, o algoritmo inicia dando um valor para o contador de iterações v :

$$v = 1$$

Também têm que ser fornecidos os valores iniciais dos multiplicadores (λ^0, μ^0) para a primeira iteração como mostrado a seguir:

$$\lambda^{(v)} = \lambda^0 \text{ e } \mu^{(v)} = \mu^0$$

É importante fornecer ε , uma diferença aceitável entre os valores dos multiplicadores de iterações consecutivas para o critério de convergência do algoritmo.

Passo 1: Solução do problema primal relaxado

Resolver os n subproblemas gerados a partir da relaxação das variáveis complicadoras do problema primal, para $i=1, \dots, n$

$$\text{Min}_{x_i} \quad L(x_i^{(v)}, \lambda^{(v)}, \mu^{(v)})$$

sujeito a:

$$a_i(x_i) = 0;$$

$$b_i(x_i) \leq 0;$$

Passo 2: Atualização dos multiplicadores

Para atualizar os multiplicadores podem-se utilizar um dos seguintes procedimentos, que são resolvidos desde um problema mestre, fora dos modelos dos subproblemas e que na verdade, coordena os subproblemas para que se possa atingir o ótimo do problema primal, esses procedimentos, listados a seguir, serão desenvolvidos na próxima subseção:

- a) Método do subgradiente.
- b) Cutting Plane Method.
- c) Bundle Method.
- d) Trust Region Method.

Passo 3: Critério de convergência

O critério de parada do algoritmo tem que satisfazer as seguintes equações:

$$|\lambda^{(v+1)} - \lambda^{(v)}| \leq \varepsilon \quad \text{e} \quad |\mu^{(v+1)} - \mu^{(v)}| \leq \varepsilon$$

em que ε é definido no passo 0. Se essas equações são respeitadas, então o algoritmo tem que parar, a solução ótima foi encontrada e então $x^* = x^{(v)}$. Caso contrário, o algoritmo deve continuar $v \leftarrow v + 1$ e retorna-se para o passo 1. Para ilustrar o algoritmo de solução de problemas por decomposição Lagrangeana, na figura 3.3 é apresentado um fluxograma com os passos do algoritmo explicado anteriormente.

A diferença entre o valor da função objetivo do problema primal (minimização) é o valor da função objetivo do problema dual (maximização) é chamada de gap da dualidade. Uma vez que a solução do problema dual é alcançada, a solução associada ao problema primal poderia não ser viável e, portanto, são necessários procedimentos de viabilidade. O procedimento utilizado para encontrar uma possível

Figura 3.3 - Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de decomposição Lagrangeana.

Fonte: Elaboração própria baseada em Conejo et al. (2006).

solução quase ótima do primal altera ligeiramente os valores obtidos dos multiplicadores num problema mestre para alcançar a viabilidade do problema primal. Procedimentos de subgradientes são geralmente utilizados (Zhuang e Galiana, 1988). Em muitos problemas práticos, o método dos subgradientes é eficaz para alcançar viabilidade em algumas poucas iterações e sem alterar significativamente o valor da função objetivo do problema dual de maximização.

3.3.1. Atualização do Multiplicador de Lagrange

Muitos procedimentos para atualizar o multiplicador são apresentados e comparados na literatura, nesta seção, vão ser apresentados os mais destacados e utilizados.

Daqui para frente, para facilitar a notação, os vetores dos multiplicadores λ e μ são renomeados como $\Theta = (\lambda, \mu)$.

O vetor coluna das restrições complicadoras $c(x^{(v)})$ e $d(x^{(v)})$ na iteração v , constitui um subgradiente da função dual (Bazaraa et al. 1993) como mostra-se a seguir:

$$s^{(v)} = [c(x^{(v)}), d(x^{(v)})]$$

Mais detalhes sobre o método de subgradiente pode ser encontrados em Conejo et al. (2006).

3.3.1.1. Método do Subgradiente

O vetor do multiplicador é atualizado de acordo com:

$$\Theta^{(v+1)} = \Theta^{(v)} + K^{(v)} \frac{s^{(v)}}{\|s^{(v)}\|}$$

em que

$$\lim_{v \rightarrow \infty} K^{(v)} \rightarrow 0$$

e

$$\sum_{v=1}^{\infty} K^{(v)} \rightarrow \infty$$

Uma seleção típica que satisfaz os requisitos anteriores é:

$$K^{(v)} = \frac{1}{a+b.v}$$

em que a e b são escalares. Em outras palavras, K define o passo de atualização dos multiplicadores, seja incrementando ou diminuindo o valor dos multiplicadores de uma seguinte iteração, isso dependendo do sinal do subgradiente (s). Normalmente os valores dos parâmetros a e b são constantes, na literatura podem ser encontrados diferentes critérios para a assinatura destes valores (Polyak, 1987).

O método do subgradiente é simples de implementar e tem um gasto computacional pequeno. No entanto, o progresso deste é lento para chegar ao ótimo, devido à

oscilações nas atualizações. Isto é uma consequência da não-diferenciabilidade da função dual. Além disso, o comportamento oscilatório faz com que seja muito difícil elaborar um apropriado critério de parada do algoritmo. Normalmente o critério de parada também pode ser feito de acordo a um número específico de iterações. Exemplos ilustrativos podem ser encontrados em Conejo et al. (2006) e Guignard (2003).

3.3.1.2. Cutting Plane Method

A atualização do vetor do multiplicador é obtida pela resolução de um problema de programação linear como se mostra a seguir:

$$\begin{aligned} & \text{Max}_{z, \Theta \in C} \quad z \\ & \text{sujeito a:} \\ & \quad z \leq \phi^{(k)} + s^{(k)T} (\Theta - \Theta^{(k)}); \quad k=1, \dots, v, \end{aligned}$$

em que C é um conjunto convexo e compacto. Este é composto pelas faixas de variação dos multiplicadores $C = \{\Theta, \Theta_{\text{dow}} \leq \Theta \leq \Theta^{\text{up}}\}$. Deve ser notado que as restrições do problema linear mostrado acima, representam os semi-espacos no espaço do multiplicados. Valores Θ_{dow} e Θ^{up} são, em geral, fáceis de ser obtidos das propriedades físicas ou econômicas do sistema que é modelado.

O número de restrições do problema de otimização linear para atualizar o multiplicador cresce à medida que se aumenta o número de iterações, isto faz que tenham um elevado custo computacional. O critério de parada deste algoritmo é quando a norma da diferença entre o vetor multiplicador de duas iterações sucessivas é inferior a um limite pré-determinado. Mais detalhes deste método podem ser encontrados em Conejo et al. (2006) e Guignard (2003).

3.3.1.3. Bundle Method

A atualização do vetor do multiplicador é obtida resolvendo o problema de programação dual quadrático relaxado mostrado a seguir:

$$\text{Max}_{z, \Theta \in C} \quad z - \alpha^{(v)} \|\theta - \Theta^{(v)}\|^2$$

sujeito a:

$$z \leq \varphi^{(k)} + s^{(k)T} (\Theta - \Theta^{(k)}) \quad k=1, \dots, v,$$

Em que α é um parâmetro de penalidade, $\|\cdot\|$ é a norma-2 e Θ , "o centro de gravidade", é um vetor do multiplicador centralizado na região viável, de modo que as oscilações sejam evitadas. Deve-se notar que o número de restrições do problema de otimização deste método cresce com o número de iterações.

O centro de gravidade é atualizado em cada iteração da seguinte forma:

$$\text{se} \quad \varphi(\Theta^{(v)}) - \varphi(\Theta^{(v-1)}) \geq m \cdot \delta^{(v-1)}$$

$$\text{então} \quad \Theta^{(v)} = \Theta^{(v)}$$

$$\text{se não} \quad \Theta^{(v)} = \Theta^{(v-1)}$$

em que m é um parâmetro com um valor que está entre 0 e 1, e $\delta^{(v)}$ é o crescimento nominal que representa a diferença entre o valor da função objetivo do problema dual relaxado na iteração (v) e o valor da função objetivo do problema dual nessa mesma iteração. Este valor pode ser calculado da seguinte forma:

$$\delta^{(v)} = z^{(v)} - \alpha^{(v)} \|\Theta^{(v)} - \Theta^{(v)}\|^2 - \varphi(\Theta^{(v)})$$

Se $v = 1$, o valor do centro de gravidade é considerado como o valor inicial do vetor do multiplicador, $\Theta^{(0)}$.

O *Bundle method* é um método plano cortante, em que o procedimento de subida é limitado por uma penalidade na função objetivo. A meta é centralizar o método de plano cortante na região de interesse. No entanto, a fim de centrar o método na região de interesse, é necessário tomar cuidado com a penalidade e outros parâmetros. O critério de parada é quando a diferença entre duas iterações sucessivas do vetor multiplicador se torna inferior a um limite pré-determinado. Critérios de parada mais sofisticados são possíveis (Conejo et al. 2006).

3.3.1.4. Trust Region Method

A atualização do vetor do multiplicador é obtida resolvendo o seguinte problema de programação linear dual relaxada:

$$\begin{aligned} & \text{Max}_{z, \Theta \in C^{(v)}} \quad z \\ & \text{sujeito a:} \\ & \quad z \leq \varphi^{(k)} + s^{(k)T} (\Theta - \Theta^{(k)}); \quad k=1, \dots, n; \quad n \leq \bar{n}, \end{aligned}$$

em que $\bar{n}$ é o máximo número de restrições consideradas quando o problema é resolvido, e $C^{(v)}$ é atualizado dinamicamente, definindo a região viável dos multiplicadores (Redondo e Conejo, 1999). Se o número de iterações for maior que o número máximo especificado de restrições consideradas, as restrições excedentes são eliminadas como é indicado a seguir. Na iteração v a diferença entre todos os hiperplanos avaliados no vetor do multiplicador atual e o valor atual da função objetivo para o vetor do multiplicador atual (residual) é calculado como:

$$\varepsilon_i = \varphi^{(i)} + s^{(i)T} (\Theta^{(v)} - \Theta^{(i)}) - \varphi^{(v)}; \quad \forall i = 1, \dots, n.$$

Assim que n se torna maior que $\bar{n}$, o hiperplano "mais distante" não é considerado, então o numero de hiperplanos fica constante e igual a $\bar{n}$. Deve-se notar que o resíduo ε_i é sempre positivo porque a reconstituição do plano cortante da função dual sobre-estima a função dual atual. Esta técnica que limita o numero de hiperplanos considerados tem se provado computacionalmente eficiente.

O método *trust region* é um método de plano cortante em que o procedimento de subida é dinamicamente limitado por ampliar e diminuir a região de viabilidade sobre uma base de coordenadas. Isto é possível porque a região de viabilidade é simples, são os limites de cada multiplicador. Através deste procedimento de ampliação/diminuição é possível centrar o algoritmo na área de interesse, o que resulta em elevada eficiência. O procedimento de ampliação/redução não depende do problema em questão e envolve heurísticas simples. O critério de parada deste algoritmo é quando a diferença entre o vetor multiplicador de duas iterações sucessivas se torna inferior a um limite pré-especificado. Uma diferença

suficientemente pequena entre um limite superior e um limite inferior do ótimo do problema dual também é um critério de parada apropriado (Conejo et al. 2006).

3.4. LAGRANGEANO AUMENTADO

Lembrando que $c(x)$ é a restrição complicadora de igualdade e $d(x)$ é a restrição complicadora de desigualdade do problema eq.(3.21) - (3.22), a função do Lagrangeano aumentado (LA) deste problema tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} LA_{(x, z, \lambda, \mu, \alpha, \beta)} = & f(x) + \lambda^T c(x) + \frac{1}{2} \alpha \|c(x)\|^2 + \sum_{i=1}^{n_d} [\mu_i (d_i(x) + z_i^2) \\ & + \frac{1}{2} \beta (d_i(x) + z_i^2)^2] \end{aligned} \quad (3.24)$$

Em que os parâmetros de penalidade α e β são escalares grandes o suficiente para garantir a convexidade local (os valores destes parâmetros podem ser encontrados em Conejo et al. 2006) e z_i ($i = 1, \dots, n_d$) são variáveis adicionais para transformar restrições de desigualdade em restrições de igualdade. Deve-se notar que os termos quadráticos permitem que a função do Lagrangeano aumentado tenha boas propriedades de convexidade (Luenberger, 1984). Por conveniência, definimos $v_i = z_i^2$ ($i = 1, \dots, n_d$), portanto a função Lagrangeana aumentada escrita acima é equivalente a

$$\begin{aligned} LA_{(x, z, \lambda, \mu, \alpha, \beta)} = & f(x) + \lambda^T c(x) + \frac{1}{2} \alpha \|c(x)\|^2 + \sum_{i=1}^{n_d} [\mu_i (d_i(x) + v_i) \\ & + \frac{1}{2} \beta (d_i(x) + v_i)^2] \end{aligned} \quad (3.25)$$

O procedimento de decomposição do Lagrangeano aumentado envolve a minimização da eq.(3.25). Note-se que esta minimização em relação a v pode ser realizada analiticamente de forma decomposta, levando a um problema que envolve apenas a minimização em relação a x . A minimização da eq.(3.25) em relação a v_i é

$$\text{Min}_{v_i \geq 0} \quad p_i = \mu_i (d_i(x) + v_i) + \frac{1}{2} \beta (d_i(x) + v_i)^2 \quad (3.26)$$

em que as variáveis v_i devem ser não negativas.

Este problema pode ser facilmente resolvido. A derivada da função objetivo acima em relação a v_i é $\mu_i + \beta (d_i(x) + v_i)$. Se $v_i > 0$, a derivada deve ser igual a zero, o que

implica $v_i = -d_i(x) - \mu_i / \beta$. Se $v_i = 0$, isso significa que $d_i(x)$ é satisfeita como uma igualdade, o que implica que $\mu_i > 0$, e a derivada deve ser não negativa. Portanto,

$$v_i = \text{Max} \{0, -d_i(x) - \mu_i / \beta\}; i = 1, \dots, n_d$$

Em seguida, a função objetivo do problema eq.(3.26) é avaliada da seguinte forma:

$$p_i = \begin{cases} \frac{1}{2\beta} [(\mu_i + \beta d_i(x))^2 - \mu_i^2] & \text{se } v_i = 0 \\ -\frac{1}{2\beta} \mu_i^2 & \text{se } v_i = -d_i(x) - \mu_i/\beta \end{cases}$$

Estes resultados podem ser combinados na fórmula:

$$p_i = \frac{1}{2\beta} [(\text{Max}\{0, \mu_i + \beta d_i(x)\})^2 - \mu_i^2]$$

Finalmente, podemos substituir a expressão de p_i ($i = 1, \dots, n_d$) em (5.50), para obter uma expressão explícita da função do Lagrangeano aumentado,

$$LA_{(x, z, \lambda, \mu, \alpha, \beta)} = f(x) + \lambda^T c(x) + \frac{1}{2} \alpha \|c(x)\|^2 + \frac{1}{2\beta} [(\text{Max}\{0, \mu_i + \beta d_i(x)\})^2 - \mu_i^2]$$

Como alternativa, um tratamento de ponto interior não-linear com restrições de desigualdade pode ser usado (Wu et al., 1994). Essa técnica requer a adição de variáveis de folga para as restrições de desigualdade em eq.(3.24) para convertê-las em restrições de igualdade. Tais variáveis de folga são, então, incorporadas à função objetivo através de termos de barreira logarítmica para garantir a sua positividade.

O algoritmo de decomposição baseado no Lagrangeano aumentado é semelhante ao processo de decomposição por relaxação Lagrangeana indicado na seção anterior. A diferença básica é que os termos quadráticos no Lagrangeano aumentado tornam o problema primal relaxado em não decomponível. Para que este possa ser decomposto, dois procedimentos são utilizados principalmente. O primeiro é linearizar os termos quadráticos da função do Lagrangeano aumentado e fixa os valores (mínimos) das variáveis de uma iteração prévia. O segundo procedimento é fixar diretamente na função do Lagrangeano aumentado os valores (mínimos) das variáveis de uma iteração prévia. Para mais detalhes pode ser consultado o trabalho de Cohen (1980) e exemplos de aplicações podem ser encontrados em Conejo et al. (2006).

O algoritmo para a resolução de problemas de otimização por Lagrangeano aumentado é o seguinte:

Passo 0: Inicialização.

Inicializar com multiplicadores λ e μ , parâmetros de penalidade α e β . Também é importante fornecer ε , que é uma diferença aceitável entre os valores dos multiplicadores de duas iterações consecutivas para o critério de convergência do algoritmo.

Passo 1: Solução do problema primal relaxado.

Resolver os subproblemas gerados a partir do problema primal, para isto deve ser aplicado um procedimento para que o problema primal possa ser decomposto (ver Conejo et al. 2006).

Passo 2: Atualização do multiplicador.

De acordo com Luenberger (1984), Bertsekas (1995) e Bertsekas (1982) uma regra apropriada para atualizar multiplicadores λ (para as restrições de igualdade) é:

$$\lambda^{(v+1)} = \lambda^{(v)} + \alpha.c(x^{(v)})$$

Para os multiplicadores μ (das restrições de desigualdade) que são não negativos, a atualização segue a forma:

$$\mu^{(v+1)} = \text{Max} \{0, \mu_i^{(v)} + \beta.d_i(x^{(v)})\}; \quad i = 1, \dots, n_d$$

Os parâmetros de penalidade α e β também pode ser atualizados com o número de iteração, de modo que a convexidade seja mantida e evitando um mau condicionamento numérico.

Passo 3: Verificação de convergência.

O critério de parada do algoritmo tem que satisfazer as seguintes equações:

$$|\lambda^{(v+1)} - \lambda^{(v)}| \leq \varepsilon \quad \text{e} \quad |\mu^{(v+1)} - \mu^{(v)}| \leq \varepsilon$$

em que ε é definido no passo 0. Se essas equações são satisfeitas, então o algoritmo pode parar e a solução ótima foi encontrada, $x^* = x^{(v)}$.

Caso contrário, o algoritmo deve continuar, $v \leftarrow v + 1$ e retorna-se para o passo 1.

Para ilustrar o algoritmo de solução de problemas por decomposição do Lagrangeano aumentado, na figura 3.4 é apresentado um fluxograma com os passos do algoritmo explicado anteriormente.

Figura 3.4 - Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de Lagrangeano aumentado.

Fonte: Elaboração própria baseada em Conejo et al. (2006).

Exemplos ilustrativos de decomposição de problemas de otimização, tanto para a técnica de relaxação Lagrangeana como para o Lagrangeano aumentado podem ser encontrados em Conejo et al. (2006).

3.5. PRICING INTERPROCESS STREAMS USING SLACK AUCTIONS

Esta é uma técnica alternativa proposta por Jose e Ungar (2000), cujos autores argumentam que a otimização da planta deve ser decomposta em subproblemas com uma complexidade numérica menor, nos quais cada divisão busca maximizar seu lucro. Para que isto aconteça, é necessário conhecer os preços das correntes intermediárias entre as divisões. A melhor forma de busca-los é definindo uma folga entre as correntes do processo das divisões, de forma que essas correntes possam ser precificadas utilizando leilões. Esses leilões terminam quando os preços das correntes estão em equilíbrio, ou seja, quando existe um equilíbrio entre a demanda e a oferta de recursos das divisões, indicando que toda a planta estaria globalmente otimizada.

Este método (leilões de folga) está relacionado as técnicas de decomposição e pode resolver problemas comuns apresentados na prática, em que técnicas clássicas de relaxamento podem apresentar problemas.

A ideia desse método baseia-se no conceito de cadeia de suprimentos que se originou na fabricação e pesquisa operacional como uma forma de gestão dos fluxos de recursos entre empresas (Axelsson e Easton, 1992; Vollmann et al., 1997). Gerenciamento da cadeia de suprimentos em todos os seus detalhes pode envolver: a previsão de demandas das empresas, decisões sobre quais são os produtos a produzir, quando fazê-los, e como enviá-los a seus clientes. A cadeia de suprimentos típica abrange muitas empresas e vários setores. No entanto, uma cadeia de suprimentos também pode ser definida sobre as divisões em uma única fábrica de produtos químicos. Neste caso as denominamos como microcadeias de suprimentos para distingui-las a partir da variedade padrão.

Ao ver uma planta como uma microcadeia de suprimentos, as interações entre as divisões de plantas podem ser consideradas como uma competição pelos recursos limitados. Matematicamente, todos os recursos estão associados com restrições da forma:

$$D_1 + \dots + D_n \leq S, \quad (3.27)$$

em que D_i é a demanda de recursos da divisão i e S é a oferta total dos recursos. Divisões em uma cadeia de suprimentos interagem quando a soma de suas demandas de recursos excede a oferta disponível. Essa interação pode ser gerenciada pela forma com que os recursos são enviados para as divisões, baseada na quantidade de recursos que elas precisam. Preços elevados reduzem a demanda das divisões, enquanto os preços baixos as incentivam a produzir maiores quantidades. Quando a divisão i é abastecida com base na quantidade de recursos que ele usa, o seu objetivo é resolver o seguinte problema de otimização:

$$\text{Max}_{x_i} \quad f_i(x_i) - p \cdot D_i(x_i)$$

sujeito a:

Restrições das Divisões

em que x_i é a variável de decisão, $f_i(x_i)$ é a função objetivo nominal, p é um vetor de preços dos recursos, e $D_i(x_i)$ é a demanda de recursos da divisão i . Devem ser respeitadas as seguintes condições de equilíbrio

$$\sum_{i=1}^n D_i \leq S$$

$$\sum_{j=1}^m p_j \cdot (D_j - S_j) = 0, \quad (3.28)$$

$$p_j \geq 0 \quad j \in \{1, \dots, m\}, \quad (3.29)$$

em que se tem m divisões com m correntes intermediárias.

A fim de aplicar esta abordagem orientada a preço para problemas de otimização em toda a planta, deve-se definir os recursos adequados ao longo dos fluxos entre processos. Embora isto pareça trivial, não é. O principal problema é que os recursos em uma microcadeia de suprimentos são diferentes daquelas em uma cadeia típica. Na situação padrão, cada empresa é livre para comprar a quantidade que desejar, já em uma microcadeia de suprimentos isso é impossível. A divisão da planta não pode dispor dos recursos enviados a ela por meio de correntes intermediárias não tem escolha senão aceitar o recurso, independentemente de quanto é realmente exigido. Fluxos de correntes intermediárias não podem realmente ser vistos como recursos. Matematicamente, o problema é que as restrições das correntes entre processos não são como as restrições de recursos, na verdade são restrições de consistência essencialmente física como:

$$CI_u = CI_d$$

em que CI_u é a corrente intermediária da divisão de upstream e CI_d é a corrente intermediária da divisão de downstream. Ou seja, a restrição impõe que a vazão de saída de uma unidade de upstream deve ser a mesma que a vazão de entrada da unidade de downstream. Isso é irrelevante para efeitos da definição de recursos e também dificulta a precificação dos fluxos entre os processos. A aparente forma de precificação dos fluxos entre processos em que as unidades de downstream têm que pagar pelo recurso enviado desde a unidade de upstream (ver figura 3.5) é intuitiva, mas o raciocínio por trás disso é errado, porque as unidades de downstream não podem dispor da quantidade de recurso do upstream que é enviado para eles. Isso significa que não há nenhuma noção de demanda de recursos a serem utilizados na divisão de downstream. Sem uma noção de demandas dos recursos, não pode haver preços de equilíbrio.

Figura 3.5 - Definição imprópria das correntes intermediárias entre processos.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

As dificuldades em definir preços para fluxos entre processos ocorrem porque os recursos não estão bem definidos nesse caso. Uma maneira de superar isso é remodelar a microcadeia de modo que as restrições dos recursos sejam explícitas.

Considerando a restrição de consistência:

$$CI_u = CI_d$$

Que pode ser reescrita de modo que se tenha a forma de uma restrição de recurso:

$$CI_u - CI_d = 0$$

$$|CI_u - CI_d| \leq 0$$

$$\frac{1}{2}|CI_u - CI_d| + \frac{1}{2}|CI_u - CI_d| \leq 0 \quad (3.30)$$

$D_u \qquad D_d$

O primeiro membro da eq.(3.31) pode ser interpretado como uma demanda agregada por recursos, sendo D_u a demanda da divisão de upstream e D_d a demanda para a divisão de downstream, enquanto o segundo membro pode ser interpretado como uma oferta de recursos. Dado que $|CI_u - CI_d|$ é a quantidade de folga na eq.(3.31), podemos chamar esses novos recursos como recursos de folga. Em geral, eq.(3.31) pode ser escrita como:

$$\frac{1}{2}|CI_u - CI_d| + \frac{1}{2}|CI_u - CI_d| \leq S$$

em que $S > 0$, de modo que S pode ser considerada como uma folga de abastecimento entre as correntes intermediárias. Estes recursos de folga alteram a estrutura da microcadeia de suprimentos de toda a planta. Em vez de considerar uma divisão como vendedora e outra compradora, ambas são compradoras e, quem define a folga entre as correntes intermediárias é, em certo sentido, um administrador da planta (ver Figura 3.6).

Figura 3.6 - Remodelando a microcadeia de suprimentos usando recursos de folga.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

Colocar uma folga entre os recursos intermediários é a forma adequada de ver as correntes da microcadeia de suprimentos, porque capturam a ideia da demanda de recursos, a oferta de recursos e a escassez de recursos. Um recurso se torna escasso, quando a demanda excede a oferta ou seja, existe uma folga entre as

correntes intermediarias (folga de abastecimento) maior à especificada, isto acontece quando as divisões de upstream e downstream tem diferentes valores da corrente intermediaria. A folga de abastecimento é essencialmente a tolerância da planta entre os diferentes valores de CI_u e CI_d . A demanda e a oferta entre duas divisões pode ser controlada fornecendo às divisões (com base na folga especificada entre suas correntes intermediarias) preços adequados, que podem ser encontrados usando leilões de recursos.

O objetivo de qualquer leilão é encontrar os preços dos recursos com respeito a um conjunto de compradores (tais como as divisões em uma planta). Um leiloeiro ajusta os preços dos recursos até que as condições de equilíbrio eq. (3.28) - (3.30) sejam satisfeitas. Quando os recursos são vendidos a preços de equilíbrio, eles são perfeitamente alocados no sentido de que a soma dos objetivos das divisões é maximizada.

Considere a folga da demanda da divisão de upstream

$$D_u = \frac{1}{2}|CI_u - CI_d|$$

e da divisão de downstream

$$D_d = \frac{1}{2}|CI_u - CI_d|$$

Para que a divisão do upstream calcule essa demanda, é preciso saber o valor do CI_d . Portanto, quando um leiloeiro anuncia preços, também deve anunciar algum valor de referência da CI_d para que seja usado pela divisão de upstream. Denotaremos esta referência como CI_d^0 e é chamado de polo de folga da divisão de upstream. Dado um polo de folga e um preço p , o problema de otimização da divisão de upstream para calcular a folga da demanda pode ser expresso da seguinte forma:

$$\text{Max}_{CI_u} \quad f_u(CI_u) - p \cdot \frac{1}{2}|CI_u - CI_d^0|$$

Sujeito a:

Restrições da divisão de Upstream

De maneira similar, para a divisão de downstream o problema de otimização fica:

$$\text{Max}_{CI_d} \quad f_d(CI_d) - p \cdot \frac{1}{2}|CI_d - CI_u^0|$$

Sujeito a:

Restrições da divisão de Downstream

O algoritmo iterativo para resolver a decomposição de problemas de otimização pelo método de leilão da folga é o seguinte:

Passo 0: Inicialização.

Fornecer valores iniciais para o preço (p^0), os valores iniciais das variáveis CI_u^0 , CI_d^0 , a folga entre os recursos (S) e o numero de iteração ($v = 1$)

Passo 1: Resolver os subproblemas:

$$\text{Max}_{CI_u} \quad f_u(CI_u) - p^{(v)} \cdot \frac{1}{2} |CI_u - CI_d^0|$$

Sujeito a:

Restrições da divisão de Upstream

e

$$\text{Max}_{CI_d} \quad f_d(CI_d) - p^{(v)} \cdot \frac{1}{2} |CI_d - CI_u^0|$$

Sujeito a:

Restrições da divisão de Downstream

Obtendo como resultado os valores ótimos CI_u^* e CI_d^*

Passo 2: Critério de Convergência.

Se $|CI_u^* - CI_d^*| \leq S$, então a solução foi encontrada, caso contrário passa-se ao passo 3.

Passo 3: Atualizar os valores de referência.

$$CI_d^0 \leftarrow CI_u^*$$

$$CI_u^0 \leftarrow CI_d^*$$

Ajustar o preço $p^{(v)}$ calculando o excesso da demanda $E^{(v)}$ da seguinte forma:

$$E^{(v)} = CI_d^* - CI_u^*$$

Se o excesso de demanda é negativo, então diminuir o preço $p^{(v)}$, se o excesso de demanda é positivo, incrementar o preço $p^{(v)}$ (Jose e Ungar, 1998) e voltar para o passo 1. Na figura 3.7 mostra-se o fluxograma do algoritmo.

Figura 3.7 - Fluxograma de resolução de problemas de otimização pelo método de Slack Auctions.

Fonte: Elaboração própria com base em a Jose e Ungar (2000).

Exemplos ilustrativos e mais detalhes deste método podem ser encontrados em Jose e Ungar (2000).

4. APRESENTAÇÃO DO PROCESSO ESTUDADO

O processo estudado é a unidade de produção de Propeno da refinaria REPLAN da PETROBRAS S.A. que foi projetada para produzir 53.000 t/ano de propeno de alta pureza com grau polímero (99.5 % molar no mínimo). A unidade é formada por uma seção de carga, uma seção de tratamento cáustico e três diferentes divisões de destilação que são: a Depropanizadora, a De-etanizadora e a Fracionadora de Propeno (Depropenizadora). No processo estudado serão consideradas as divisões de destilação formadas por três colunas para que seja feita a otimização em sequência como mostra a figura 4.1, na qual pode-se observar um diagrama simplificado da unidade de produção de propeno. Por razões de confidencialidade uma escala arbitraria de vazões e preços foi utilizada.

4.1. DESCRIÇÃO DO PROCESSO

A corrente de carga da unidade de produção de propeno é o GLP proveniente da unidade FCC (Fluid Catalytic Cracking), que é bombeada, após tratamento para a primeira divisão de destilação (Depropanizadora).

O GLP da unidade FCC alimenta a Coluna depropanizadora (T-1) contém 10 componentes dos quais os principais são o propano e propeno. A composição detalhada desta corrente de carga está apresentada na tabela 4.1.

Divisão Depropanizadora

A coluna Depropanizadora está equipada com 51 pratos. O produto de fundo da coluna é parcialmente evaporado por meio do vapor aquecido pelo reboiler da depropanizadora (RB1), depois este produto é esfriado no cooler (HX1) e enviado para o splitter do produto de fundo (SP1) em que 70% do produto vai para a Unidade de MTBE e o resto vai para a venda Industrial. A especificação do produto de fundo (C_4^+) é de no máximo 1,0% molar dos componentes leves (etano, propeno e propano). O vapor de topo da T-1 passa pelo condensador total da depropanizadora (HX2).

Figura 4.1 - Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno.

Fonte: Elaboração própria em base a dados do projeto.

O líquido condensado é enviado para o splitter do refluxo, onde a maior parte é bombeada pela B1 (bomba de refluxo da depropanizadora), como refluxo para a coluna T-1 e a parte menor, chamada de produto intermediário C_3 , é bombeada pela B2 (bomba do produto intermediário C_3) para a segunda divisão de destilação (De-etanizadora). A especificação do produto de topo da coluna T-1 é de no máximo 0,1% molar de hidrocarbonetos pesados (C_4^+). Os limites de operação para a vazão de carga para a T-1 são, no máximo de 23804 kg/h e no mínimo de 17312 kg/h.

Tabela 4.1 - Composição da carga (GLP) para a seção da Depropanizadora.

Componente	Fração Molar
Etano	0.0245
Propileno	0.3712
Propano	0.1353
Isobutano	0.1197
1-Buteno	0.0640
1,3-Butadieno	0.0021
Butano	0.0531
Trans-2-Buteno	0.0724
Cis-2-Buteno	0.0483
Isobuteno	0.1026

Fonte: Dados da planta.

Divisão De-etanizadora

O produto intermediário C_3 da coluna Depropanizadora vai para a Coluna De-etanizadora (T-2). A T2 está equipada com 61 pratos. O produto do topo da T-2 é condensado no HX3 (condensador de topo da de-etanizadora). Esse condensado, é enviado para o splitter do refluxo da De-etanizadora (SR2) onde parte deste produto, composto majoritariamente por etano, é enviado para as unidades de FCC da refinaria, para posterior processamento, e o restante é bombeado pela B3 (bomba de refluxo da de-etanizadora), como refluxo para a T-2.

O produto de fundo da coluna é enviado para o splitter do reboiler da T-2 (SB2) onde a parte que vai para o reboiler é evaporada por meio do vapor aquecido do reboiler do De-etanizador (RB2) e depois retorna à coluna. A parte restante do produto de fundo (produto intermediário) é enviada como corrente de alimentação para a Fracionadora de Propeno. A especificação do produto de fundo é de no máximo 120

ppm molar de etano. Os limites de operação para a vazão de carga para a T-2 são, no máximo de 10866 kg/h e no mínimo de 4939 kg/h.

Divisão Fracionadora de Propeno (Depropenizadora)

O produto de fundo da coluna De-etanizadora, contendo C₄ (propano e propeno), é enviado para a fracionadora de propeno (T-3). A T-3 está equipada com 197 pratos.

O calor necessário para separar o propeno do propano é cedido à fracionadora de propeno pelo produto de topo através dos refeedores. Esses refeedores são divididos em duas unidades semelhantes em paralelo. O produto de fundo que contém principalmente o propano é enviado para o splitter do reboiler (SB3), onde parte é enviada para o reboiler (RB3) e o restante é armazenado como produto final para venda no mercado. A especificação do produto de fundo é de no máximo 5% molar de propeno.

O vapor de topo da T-3 é misturado com o vapor do tanque de refluxo TA1 e é conduzido para o Compressor (bomba de calor) de propeno C1. O C1 aumenta a pressão de vapor até 14,8 kgf/cm², condição em que a condensação no reboiler RB3 se torna possível. Após a compressão, no splitter SC1 o vapor é dividido em duas partes, a parte maior vai para o RB3, onde essa corrente condensa-se a 35°C, e depois é enviada para a válvula V5. A outra parte é enviada para o condensador HX4, onde essa corrente é condensada até 35°C e depois é enviada para a válvula V4. A condensação deste vapor mantém a pressão da T-3 sobre controle.

O líquido a partir do RB3 e do HX4 é flasheado nas válvulas V5 e V4 respectivamente, depois estas correntes são misturadas no mixer M2 e enviadas para o tanque de refluxo TA1. O vapor do tanque de refluxo é enviado para a válvula V6 e o líquido é bombeado pela B4 (bomba na saída do tanque TA1) para o splitter de refluxo SR3. Nesse splitter a corrente é dividida em duas partes, a maior parte regressa ao T-3 como refluxo e o resto constitui o produto desejado que neste caso é o propeno com grau polímero.

A especificação do produto de topo é de 99,5% molar em mínimo de propileno. Os limites de operação para a vazão de carga para a T-3 são no máximo de 10062 kg/h e no mínimo de 4574 kg/h.

4.2. MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO ESTUDADO

Para o desenvolvimento de uma ferramenta de otimização em tempo real, é necessário um modelo matemático que seja capaz de representar a operação da unidade estudada. O modelo deve ser flexível para ajustar o comportamento real dentro de uma ampla faixa nas operações de processo (Chachua et al., 2009).

O modelo do processo foi baseado no trabalho publicado por Mendoza et al. (2013) de uma fracionadora de propeno. Este foi implementado em um ambiente orientado a equações, utilizando o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization) de Soares e Secchi (2003).

O EMSO é um software orientado a equações, com as características adequadas para a implementação de um sistema RTO, já que este software tem rotinas para solucionar problemas algébrico-diferenciais, calcula as derivadas por diferenciação automática, faz uma análise automática dos graus de liberdade e contém módulos de otimização e de estimação de parâmetros, entre outras características importantes.

O modelo foi desenvolvido com as seguintes características:

- O modelo termodinâmico utilizado é o de Peng-Robinson (Mendoza et al. 2013), disponível no pacote termodinâmico do EMSO (VRTECH, 2008).
- As correntes de entrada têm uma vazão de 440.16 kmol/h, a uma temperatura de 343.15 K, e uma pressão de 22.264 atm. A corrente tem 10 componentes com a composição mostrada na tabela 4.1 desta seção.
- A primeira coluna (Depropanizadora) tem 51 pratos e a alimentação é feita no prato número 26. A pressão no topo da coluna é de 19.2 atm e pressão de saída do produto intermediário (P3) é de 32.912 atm. A razão de refluxo desta coluna (SR1) obedece à equação ($SRA1 = \text{fluxo 4} / \text{fluxo 3}$) e é de 0.676. O splitter do rebiler (SB1) corresponde à equação ($SB1 = \text{fluxo 7} / \text{fluxo 6}$), especificada com um valor de 0.772. A queda de pressão foi admitida constante em cada prato e o perfil foi linearizado entre a pressão de topo e de fundo, onde a pressão de fundo é de 19.445 atm.
- A segunda coluna (De-etanizadora) é composta por 61 pratos e a corrente de alimentação proveniente da T-1 está no prato número 7. A pressão no prato

número 1 é de 30.5 atm e a pressão no fundo da coluna é de 31 atm. A razão de refluxo desta coluna (SR2) obedece à equação ($SRA2 = \text{fluxo } 13 / \text{fluxo } 12$) é de 0.944. O splitter do reboiler (SB2) corresponde à equação ($SB2 = \text{fluxo } 16 / \text{fluxo } 15$), especificada com um valor de 0.72. A queda de pressão foi admitida constante em cada prato e o perfil foi linearizado entre a pressão de topo e de fundo

- A terceira divisão (Fracionadora de Propeno) tem 197 pratos, esta coluna é de alta pureza, a corrente de alimentação, proveniente da T-2, está no prato número 157. A pressão no topo da coluna é de 9.67 atm. Esta seção possui uma destilação com recompressão de vapor (VRD) para o qual utiliza-se um compressor (bomba de calor). A razão de refluxo desta coluna (SR3) obedece à equação ($SRA3 = \text{fluxo } 26 / \text{fluxo } 24$) e é de 0.07648. O splitter na saída do compressor (SC1) corresponde à equação ($SC1 = \text{fluxo } 22 / \text{fluxo } 20$), especificada com um valor de 0.209. O compressor trabalha com uma pressão de 1550 kPa.
- As válvulas consideradas são de expansão adiabática.
- Trocadores de calor sem perda de carga.

Para a simulação, foram utilizadas 13620 variáveis, 13574 equações, sendo 46 variáveis especificadas. As variáveis especificadas foram estabelecidas de acordo com o sistema de controle adotado na refinaria. Foi utilizado um computador Intel core 2 QUAD CPU Q9550 @ 2.83 GHz x 4.

Já para a otimização desta unidade foram considerados os custos operacionais (dados da planta) entre os quais estão o consumo energético (0.55 \$/KW), o consumo de vapor para os reboilers das colunas T-1 e T-2 (147 \$/Ton), o consumo de água de resfriamento (24.228 \$/Ton) e a corrente de carga da T-1 (1.6 \$/kg). A função objetivo é o lucro operacional bruto (Receita - Custos de Operação - Custo da corrente de Carga), e as restrições de operação da unidade são lineares e não-lineares. Para otimizar se utilizou o solver para otimização não linear IPOPT- Interior point OPTimizer (<https://projects.coin-or.org/Ipopt>), disponível no EMSO.

As variáveis de decisão para a otimização na primeira coluna foram a razão de refluxo (SR1) e a razão do reboiler (SB1), a restrição de pureza do produto de topo é de 0.1% molar no máximo hidrocarbonetos pesados (C_4^+) e da pureza do produto do

fundo é de 1.0% molar no máximo dos componentes leves (etano, propeno e propano). O produto de fundo tem dois destinos finais, 70% vai para a Unidade de MTBE (P1) a um preço de 1.6063 \$/Kg e o restante vai para a venda Industrial (P2) a um preço de 2.424 \$/Kg. Já o produto do topo é enviado como produto intermediário para a T-2.

Na segunda divisão (De-etanizadora), as variáveis de decisão são a razão de refluxo (SR2) e a razão de Reboiler (SB2). O produto de topo (P3) é enviado para a unidade FCC (Fluid Catalytic Cracking) a um preço de mercado de 2.736 \$/Kg. Já o produto de fundo é enviado para a seção onde se encontra a fracionadora de propeno. A restrição de pureza desta corrente é de 120 ppm molar no máximo de etano.

Na T-3 as variáveis de decisão foram a razão de refluxo (SR3) e a razão de caudal que fornece calor para o reboiler na saída do compressor (SC1). Os produtos desta seção são comercializados no mercado, o propeno (P5) a um preço de 6.273 \$/Kg e o propano (P4) a um preço de 1.6063 \$/Kg. As restrições de pureza destes produtos são de 99.5% molar no mínimo de propeno para o P5, e de 5% molar no máximo de propeno na vazão do produto P4.

Na tabela 4.2, os resultados da simulação e a otimização são apresentados, comparando-se as variáveis de decisão, as vazões dos produtos finais e o lucro operacional bruto obtido na unidade de produção de propeno.

Nessa otimização foram consideradas 13640 variáveis, 13634 equações, 6 graus de liberdade e 22 restrições de desigualdade. Pelas características e pelas dificuldades que apresenta o software EMSO referente ao arquivo de dados iniciais (não é automática a atualização desse arquivo) para a otimização, o tempo computacional na resolução do problema de otimização não será considerado neste trabalho.

Nesta tabela pode-se observar que o lucro bruto operacional vai de 68947.75 (\$/h) para 71622.92 (\$/h) o que significa, que considerando uma estrutura centralizada, com a otimização o processo incrementará seu lucro bruto operacional em 3.88%, esse incremento se deve ao cambio de pontos de operação.

Tabela 4.2 - Resultados da simulação e a otimização do processo estudado.

Função Objetivo		Max Lucro = Preço dos Produtos – Custo Vazão de Carga – Custos de Operação	
Coluna	Variáveis	Simulação (Projeto)	Otimização
T-1	Vazão do Produto P1 (Kg/h)	8181.74	8158.40
	Vazão de Produto P2 (Kg/h)	3506.46	3496.46
	Vazão da Corrente 5 (Kg/h)	9919.08	9952.42
	Splitter de Refluxo SR1	0.676000	0.671093
	Splitter de Reboiler SB1	0.772000	0.770792
T-2	Vazão do Produto P3 (Kg/h)	742.850	351.064
	Vazão da Corrente 17 (Kg/h)	9176.22	9601.36
	Splitter de Refluxo SR2	0.949000	0.976064
	Splitter de Reboiler SB2	0.720000	0.707796
T-3	Vazão do Produto P5 (Kg/h)	6542.86	6921.86
	Pureza do Produto P5 (Propeno % molar)	0.999900	0.995001
	Vazão do Produto P4 (Kg/h)	2633.36	2679.5
	Pureza do Produto P4 (Propeno % molar)	0.028100	0.023879
	Splitter de Refluxo SR3	0.076480	0.080226
	Splitter SC1	0.209030	0.213737
Lucro (\$/h)		68947.75	71622.92

Fonte: Dados da planta e resultados obtidos.

Devido aos preços de mercado os produtos P1 e P2 diminuem suas vazões de 8181.74 (kg/h) e 3506.46 (kg/h) para 8158.4 (kg/h) e 3496.46 (kg/h) respectivamente. Como consequência, a corrente intermediária 5 é incrementada de 9919.08 (kg/h) para 9952.42 (kg/h). Já na coluna T-2 o produto P3, também devido ao seu preço de mercado, diminui sua vazão de 742.85 (kg/h) para 351.064 (kg/h). A corrente intermediária 17 incrementa sua vazão de 9176.22 (kg/h) para 9601.36 (kg/h). Na coluna T-3 tanto a vazão do produto P5 (propeno) e P4 (propano) são incrementados. Esse incremento se deve a que o preço de mercado de propeno é favorável (maior), então, na otimização tentara produzir a maior vazão possível de propeno o que significa que a restrição de pureza tem que bater no limite inferior (99.5%) que é como acontece neste processo estudado. Estes valores obtidos serão utilizados para ser comprados com os valores das vazões e o lucro bruto operacional a ser obtidos considerando uma estrutura distribuída.

5. APLICAÇÃO DAS TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO AO PROCESSO ESTUDADO

Nesta seção é apresentada a aplicação das técnicas mais promissoras para resolver o problema de decomposição para a otimização da unidade de produção de propeno descrita na seção anterior. São analisadas as respostas e discutidos os problemas que apresentam essas técnicas.

5.1. TÉCNICAS DE DECOMPOSIÇÃO APLICADAS AO PROCESSO ESTUDADO

O problema pode ser decomposto em subproblemas para cada uma das divisões, sendo S-1 para a divisão da Depropanizador, S-2 para a divisão da De-etanizadora e S-3 para a divisão da fracionadora de propeno. Na figura 5.1 pode-se observar uma estrutura que pode ser decomposta em três subproblemas, no entanto é preciso adicionar e/ou substituir novas variáveis e equações ao modelo descrito na seção 4. Estas variáveis correspondem aos produtos intermediários de cada uma das divisões.

Então o problema de otimização para o processo estudado tem a seguinte estrutura:

$$\text{Maximizar } P_{r1}.P1 + P_{r2}.P2 - P_c.F + P_{r3}.P3 + P_{r4}.P4 + P_{r5}.P5 - \text{Cop}_{s-1} - \text{Cop}_{s-2} - \text{Cop}_{s-3}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-1

Restrições de Operação da Divisão S-2

Restrições de Operação da Divisão S-3

$$5S1 = 5S2$$

$$17S2 = 17S3$$

Onde P_{r1} , P_{r2} , P_{r3} , P_{r4} e P_{r5} são os preços de mercado dos produtos P1, P2, P3, P4 e P5 respectivamente. P_c é o custo da vazão de carga F e Cop_{s-1} , Cop_{s-2} e Cop_{s-3} são os custos operacionais das divisões S-1, S-2 e S-3 respectivamente.

Figura 5.1 - Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno decomposta em três subproblemas.

Fonte: Elaboração própria em base a dados do projeto.

Na aplicação desta técnica foram utilizados os mesmos valores da otimização com estrutura centralizada descrita na seção 4 para: os preços de mercado dos produtos finais, a vazão de carga da T-1, o consumo energético, o consumo de água de resfriamento e o consumo de vapor para os reboilers.

As variáveis 5S1 e 5S2 representam a corrente intermediária entre S-1 e S-2 respectivamente, e 17S2 e 17S3 são as vazões da corrente intermediária entre S-2 e S-3 como mostra a figura 5.1.

Por meio das técnicas de decomposição, o problema primal foi decomposto em três subproblemas correspondentes a cada uma das divisões. Pretende-se atingir o maior lucro possível da unidade de produção de propeno, otimizando separadamente cada uma das divisões.

5.1.1. Decomposição Lagrangeana aplicada ao Processo Estudado

De acordo com esta técnica, identificadas as restrições complicadoras, o problema primal é relaxado, levando as restrições complicadoras para a função objetivo. Como existem duas restrições complicadoras, e por conceitos de dualidade serão adicionados dois multiplicadores de Lagrange, λ_1 para a restrição 5S1 = 5S2 e λ_2 para a restrição 17S2 = 17S3.

A função Lagrangeana fica:

$$L = P_{r1}.P1 + P_{r2}.P2 - P_c.F + P_{r3}.P3 + P_{r4}.P4 + P_{r5}.P5 - Cop_{s-1} - Cop_{s-2} - Cop_{s-3} + \lambda_1.(5S1-5S2) + \lambda_2.(17S2-17S3)$$

Então o problema de otimização relaxado fica:

$$\text{Max } P_{r1}.P1 + P_{r2}.P2 - P_c.F + P_{r3}.P3 + P_{r4}.P4 + P_{r5}.P5 - Cop_{s-1} - Cop_{s-2} - Cop_{s-3} + \lambda_1.(5S1-5S2) + \lambda_2.(17S2-17S3)$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-1

Restrições de Operação da Divisão S-2

Restrições de Operação da Divisão S-3

Assim, seguindo o algoritmo mostrado no capítulo 3 da técnica de decomposição por relaxação Lagrangeana, considerando três subproblemas para cada seção da unidade, têm-se:

Passo 0: Inicialização

$$\begin{aligned} v &= 1 \\ \lambda_1^{(v)} &= \lambda_1^0 = 1.62 \text{ \$/kg} \\ \lambda_2^{(v)} &= \lambda_2^0 = 2.52 \text{ \$/kg} \\ a &= 1 \\ b &= 0.1 \\ \varepsilon &= 0.01 \end{aligned}$$

Os valores de λ_1^0 e λ_2^0 foram designados arbitrariamente com base nos preços de mercado dos co-produtos da seção S-1 e S-2. Para os parâmetros a e b, foram considerados valores sugeridos pela literatura (Conejo et al., 2006). A diferença aceitável entre os multiplicadores de duas iterações consecutivas é de 0.01.

Passo 1: Resolver o problema primal relaxado decomposto em três subproblemas como se mostra a seguir:

Subproblema para a divisão da deporpanizadora (S-1):

$$\begin{aligned} \text{Max} \quad & P_{r1}.P1 + P_{r2}.P2 - P_c.F - \text{Cop}_{s-1} + \lambda_1^{(v)}.5S1^{(v)} \\ \text{sujeito a:} \quad & \text{Restrições de Operação da Divisão S-1} \end{aligned}$$

Subproblema para a divisão da De-etanizadora (S-2):

$$\begin{aligned} \text{Max} \quad & P_{r3}.P3 - \text{Cop}_{s-2} - \lambda_1^{(v)}.5S2^{(v)} + \lambda_2^{(v)}.17S2^{(v)} \\ \text{sujeito a:} \quad & \text{Restrições de Operação da Divisão S-2} \end{aligned}$$

Subproblema para a divisão da fracionadora de propeno (S-3):

$$\begin{aligned} \text{Max} \quad & P_{r4}.P4 + P_{r5}.P5 - \text{Cop}_{s-3} - \lambda_2^{(v)}.17S3^{(v)} \\ \text{sujeito a:} \quad & \text{Restrições de Operação da Divisão S-3} \end{aligned}$$

cujas soluções serão denotadas como: $5S1^{(v)}$, $5S2^{(v)}$, $17S2^{(v)}$, $17S3^{(v)}$.

Passo 2: Atualização do Multiplicador.

Para atualizar o multiplicador, será utilizado o método do sub-gradiente, provavelmente a sugestão mais clássica da literatura.

Fazendo $k^{(v)} = \frac{1}{a+b.v}$ onde k é a constante de relaxação.

Para primeiro multiplicador $\lambda_1^{(v+1)}$

$$\lambda_1^{(v+1)} = \lambda_1^{(v)} + k^{(v)} \frac{s_1^{(v)}}{\|s_1^{(v)}\|}$$

em que

$$S_1^{(v)} = 5S2^{(v)} - 5S1^{(v)}$$

Para segundo multiplicador $\lambda_2^{(v+1)}$

$$\lambda_2^{(v+1)} = \lambda_2^{(v)} + k^{(v)} \frac{s_2^{(v)}}{\|s_2^{(v)}\|}$$

em que

$$S_2^{(v)} = 17S3^{(v)} - 17S2^{(v)}$$

Passo 3: Revisão de Convergência (Critério de parada).

Neste passo, se:

$$|\lambda_1^{(v+1)} - \lambda_1^{(v)}| \leq \varepsilon$$

e

$$|\lambda_2^{(v+1)} - \lambda_2^{(v)}| \leq \varepsilon$$

então as desigualdades estão satisfeitas e pode-se parar o algoritmo já que a solução ótima foi encontrada, neste caso, a solução é: $5S1^* = 5S1^{(v)}$, $5S2^* = 5S2^{(v)}$, $17S2^* = 17S2^{(v)}$, $17S3^* = 17S3^{(v)}$. Caso contrário, voltar ao passo 1.

Para a aplicação desta técnica foram modeladas, simuladas e otimizadas as três divisões de forma separada e com as mesmas características do computador citados na seção 4. A divisão da Depropanizadora para a otimização conta com 2393

variáveis, 2391 equações de igualdade e 8 equações de desigualdade pelo que esta divisão tem 2 graus de liberdade. As duas variáveis de decisão são o splitter do refluxo (SR1) e o splitter do reboiler (SB1).

A divisão da De-etanizadora, para a otimização são utilizadas 2746 variáveis, 2743 equações de igualdade e 10 equações de desigualdade, pelo que esta divisão tem 3 graus de liberdade. As três variáveis de decisão são a corrente de carga da segunda divisão (5S2), o splitter do refluxo (SR2) e o splitter do reboiler (SB2).

A terceira divisão (fracionadora de propeno) para a otimização foram utilizadas 8510 variáveis, 8507 equações de igualdade e 10 equações de desigualdade, pelo que este problema de otimização tem 3 graus de liberdade. As três variáveis de decisão são a corrente de alimentação para a T-3 (17S3), o splitter do refluxo (SR3) o splitter que esta na saída do compressor (SC1).

Os resultados das iterações da decomposição por relaxação Lagrangeana são mostrados na seguinte tabela:

Tabela 5.1 - Respostas da relaxação Lagrangeana.

Iteração #	λ_1	λ_2	5S1 (kg/h)	5S2 (kg/h)	17S2 (kg/h)	17S3 (kg/h)	P5 (kg/h)
1	1.620	2.520	9885.44	10772.40	10061.80	10061.80	7261.30
2	3.256	2.520	9964.36	4939.00	4613.64	10061.80	7261.30
3	1.756	4.020	9885.48	10772.50	10061.80	10061.80	7261.32
4	3.141	4.020	9964.62	10429.28	10061.80	10061.80	7261.32
5	4.427	4.020	9963.90	4939.00	4766.86	10061.80	7261.32
6	3.227	5.220	9964.76	10429.32	10061.80	4573.60	3300.30
7	4.352	4.095	9964.76	4939.02	4767.00	10061.80	7262.76
8	3.293	5.154	9964.54	10429.26	10061.80	4573.60	3299.06
9	4.293	4.154	9964.74	4939.00	4766.98	10061.80	7262.80
10	3.346	5.101	9964.74	10429.26	10061.80	4573.60	3300.44

Fonte: Elaboração própria em base as respostas obtidas.

Nesta técnica, com os valores iniciais de λ_1 e λ_2 , os subproblemas podem ser resolvidos separadamente para determinar os valores das correntes intermediárias 5S1, 5S2, 17S2 e 17S3. Os multiplicadores de Lagrange são ajustados repetidamente até que a restrição de consistência seja satisfeita. Embora esta seja uma técnica amplamente empregada, não pode resolver este problema específico: não há λ_1 e λ_2 capazes de garantir que a restrição complicadora de consistência

seja satisfeita, pelo que tem um comportamento oscilatório (ver Figura 5.2) e não consegue convergir.

Figura 5.2 - Problema de convergência da decomposição Lagrangeana.

Fonte: Elaboração Própria.

Só foram realizadas 10 iterações já que estas são suficientes para mostrar o comportamento oscilatório dos valores dos multiplicadores de Lagrange e das vazões de carga das divisões S1 e S2, este comportamento acontece devido as seguintes causas (Jose e Ungar, 2000):

Causa 1: Divisões indiferentes.

Quando uma ou mais divisões são indiferentes ao valor de um estado de fluxo entre processos, a substituição de Lagrange falhará. Esta falha pode ser explicada utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange. Considere o seguinte problema de otimização

$$\begin{aligned}
 &\text{Max}_{x_1, x_2} && f(x_1, x_2) \\
 &\text{sujeito a:} && \\
 &&& \text{Restrições } x_1 \\
 &&& \text{Restrições } x_2 \\
 &&& g(x_1, x_2) < 0
 \end{aligned}$$

A solução para este problema pode ser encontrada através da representação gráfica da restrição $g(x) = 0$ e os conjuntos de nível de $f(x)$ em um único gráfico. A solução

ocorre onde a função objetivo é tangente à curva da restrição no ponto ótimo, o que significa que neste ponto, os gradientes da função objetivo e da restrição são linearmente dependentes. Uma ilustração desse fato está apresentada na figura 5.3, em que x_1 e x_2 são as variáveis independentes, $f(x)$ é a função objetivo, C_1 , C_2 e C_3 são os valores da função objetivo com $C_1 < C_2 < C_3$ e $g(x)$ é a restrição ativa de desigualdade. Esta condição de dependência linear pode ser definida como:

$$\nabla f(x^*) = \lambda \cdot \nabla g(x^*)$$

em que λ é o multiplicador de Lagrange e x^* é a solução ótima.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

Agora, considerando um problema similar, mas menos complexo que o problema estudado, tem-se:

$$\begin{aligned} &\text{Max}_{x_1, x_2} && f(x_1, x_2) \\ &\text{sujeito a:} && \\ &&& \text{Restrições } x_1 \\ &&& \text{Restrições } x_2 \\ &&& h(x_1, x_2) = 0 \end{aligned}$$

Fazendo um gráfico para a restrição $x_1 - x_2 = 0$ e os conjuntos de nível da função objetivo, como mostra a figura 5.4, pode-se observar que os conjuntos de nível da função objetivo e as restrições nunca são tangentes. A condição $\nabla f = \lambda \cdot \nabla h$ (dependência linear) é verdadeira apenas quando $\nabla f = 0$ e $\lambda = 0$. Esta pode ser a resposta correta para o problema antes que ele seja decomposto, mas depois da

decomposição um multiplicador de Lagrange igual a zero é inútil, pois um multiplicador desse tipo implica que a restrição de consistência pode ser ignorada. Assim, a decomposição por relaxação Lagrangeana não pode ser aplicada neste tipo de problema.

Figura 5.4 - Dependência linear dos gradientes para o problema estudado.

Fonte: Jose e Ungar (2000).

Causa 2: Divisões com objetivos lineares.

Considere o seguinte problema de otimização

$$\begin{array}{ll} \text{Max}_{x_1, x_2} & k_1 \cdot x_1 + k_2 \cdot x_2 \\ \text{Sujeito a:} & \\ & \text{Restrições da divisão 1} \\ & \text{Restrições da divisão 2} \\ & x_1 = x_2 \end{array}$$

em que $k_1, k_2 \geq 0$ e $x_1, x_2 \in \mathbb{R}$. Aplicando a técnica de decomposição por relaxação Lagrangeana obtém-se os seguintes subproblemas

$$\begin{array}{ll} \text{Max}_{x_1} & k_1 \cdot x_1 + \lambda \cdot x_1 \\ \text{Sujeito a:} & \\ & \text{Restrições da divisão 1} \end{array}$$

e

$$\begin{array}{ll} \text{Max}_{x_2} & k_2 \cdot x_2 - \lambda \cdot x_2 \\ \text{Sujeito a:} & \\ & \text{Restrições da divisão 2} \end{array}$$

Se $\lambda > -k_1$, a divisão 1 propõe o seu valor máximo possível de x_1 ; se $\lambda < -k_1$, a divisão 1 propõe o seu mínimo valor possível. Da mesma forma, se $\lambda > k_2$, a divisão 2 propõe o seu valor mínimo possível de x_2 ; se $\lambda < k_2$, a divisão 2 propõe o seu valor máximo possível. Uma vez que, em geral, todas estas possíveis propostas são diferentes, não há um λ capaz de garantir que a restrição $x_1 = x_2$ seja satisfeita. Assim, o problema de decomposição por relaxação Lagrangeana não irá convergir. A resposta obtida do caso estudado é mostrada nas seguintes figuras.

Pode-se observar na figura 5.5 que as vazões, dependendo do valor do multiplicador de Lagrange, são dadas por um limite de capacidade. Para o subproblema da T-1 (5S1) não existe muita variação já que a corrente de entrada é fixada e também por que os limites de pureza de topo e fundo são muito fortes (99.9 % e 1% molar respectivamente).

Figura 5.5 - Vazão corrente intermediária 5S1-5S2.

Fonte: Elaboração própria.

Na figura 5.6 mostra-se que a causa do valor do multiplicador de Lagrange (λ_2) para a corrente intermediária 17S3 é mantida constante no limite máximo de capacidade operacional da coluna T-3 durante as 5 primeiras iterações, isso se deve a que o valor de λ_2 é menor ao preço de mercado do produto P_5 o que significa que essa divisão consegue gerar lucro e por conseguinte processará a máxima vazão possível.

De acordo com o valor do multiplicador e os preços de mercado dos coprodutos, há oscilações entre uma produção máxima ou mínima. Portanto, como a corrente de entrada da T-1, é fixada as vazões de carga das colunas T-2 e T-3 tem que convergir num ponto intermediário e não em um máximo ou mínimo de capacidade, então o problema de decomposição por relaxação Lagrangeana não irá convergir.

Figura 5.6 - Vazão corrente intermediária 17S2-17S3.

Fonte: Elaboração própria.

Devido a não existir convergência dos multiplicadores de Lagrange devido às causas apresentadas, a decomposição pelo método de relaxação Lagrangeana não é recomendada para este tipo de problemas.

Como o método de Lagrangeano aumentado é baseado no método de relaxação Lagrangeana, este também vai apresentar os mesmos problemas pelo que não será realizada a aplicação desta técnica.

5.1.2. Pricing Interprocess Streams Using Slack Auctions Aplicada ao Processo Estudado

De acordo com esta técnica, uma vez identificadas as restrições complicadoras, o problema de otimização global é relaxado, colocando assim as restrições complicadoras multiplicadas pelo preço (p). Como existem duas restrições

complicadoras, serão adicionados dois multiplicadores : p_1 para a restrição $5S1 = 5S2$ e p_2 para a restrição $17S2 = 17S3$.

Então seguindo o algoritmo mostrado na seção 3 da técnica de decomposição por *pricing interprocess streams using slack auctions*, considerando três subproblemas para cada seção da unidade, tem-se:

Passo 0: Inicialização.

Fornecer valores iniciais para

$$v = 1$$

$$p^{(v)}_1 = 1.62 \text{ \$/kg}$$

$$p^{(v)}_2 = 2.52 \text{ \$/kg}$$

$$5S1^0 = 9919 \text{ kg/h}$$

$$5S2^0 = 9919 \text{ kg/h}$$

$$17S2^0 = 9176.22 \text{ kg/h}$$

$$17S3^0 = 9176.22 \text{ kg/h}$$

$$S_1 = 0.01 \text{ kg/h (Folga de recursos Restrição complicadora 1)}$$

$$S_2 = 0.01 \text{ kg/h (Folga de recursos Restrição complicadora 2)}$$

Passo 1: Resolver os subproblemas.

O subproblema para a divisão da depropanizadora (S-1):

$$\text{Max} \quad Pr_1.P1 + Pr_2.P2 - p_1^{(v)}. \frac{1}{2} . |5S1^{(v)} - 5S2^0| - Pr_c.F - Cop_{S-1}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-1

O subproblema para a divisão da De-etanizadora (S-2):

$$\text{Max} \quad Pr_3.P3 - p_1^{(v)}. |5S2^{(v)} - 5S1^0| - p_2^{(v)}. |17S2^{(v)} - 17S3^0| - Cop_{S-2}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-2

O subproblema para a divisão da Fracionadora de Propeno (S-3):

$$\text{Max} \quad Pr_4.P4 + Pr_5.P5 - p_2^{(v)}. |17S3^{(v)} - 17S2^0| - Cop_{S-3}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-3

em que as soluções serão denotadas como: $5S1^{(v)}$, $5S2^{(v)}$, $17S2^{(v)}$, $17S3^{(v)}$.

Passo 2: Critério de Convergência.

Se $|5S1^{(v)} - 5S2^{(v)}| \leq S_1$, e, $|17S2^{(v)}, 17S3^{(v)}| \leq S_2$ então a solução foi encontrada, caso contrário passa-se ao passo 3.

Passo 3: Atualizar os valores de referência.

$$5S1^0 \leftarrow 5S2^{(v)}$$

$$5S2^0 \leftarrow 5S1^{(v)}$$

$$17S2^0 \leftarrow 17S3^{(v)}$$

$$17S3^0 \leftarrow 17S2^{(v)}$$

Para ajustar os preços de $p_1^{(v)}$ e $p_2^{(v)}$ por leilão é utilizado o excesso de demanda $E_1^{(v)}$ e $E_2^{(v)}$:

Se $E_1^{(v)} = 5S2^{(v)} - 5S1^{(v)} < 0$ então $p_1^{(v)}$ tem que baixar seu valor de preço, se $E_1^{(v)} = 5S2^{(v)} - 5S1^{(v)} > 0$ então $p_1^{(v)}$ tem que incrementar seu valor de preço.

Se $E_2^{(v)} = 17S3^{(v)} - 17S2^{(v)} < 0$ então $p_2^{(v)}$ tem que baixar seu valor de preço, se $E_2^{(v)} = 17S3^{(v)} - 17S2^{(v)} > 0$ então $p_2^{(v)}$ tem que incrementar seu valor de preço.

E por ultimo voltar para o passo 1.

Os resultados das iterações desta técnica são mostrados na tabela 5.2. Na otimização com estrutura distribuída utilizando este método de decomposição foram considerados, para a divisão S-1, 2393 variáveis, 2391 equações e 6 restrições de desigualdade, o que significa que essa divisão tem 2 graus de liberdade. Na divisão S-2 foram utilizadas 2746 variáveis, 2743 equações e 10 restrições de desigualdade, dando lugar a 3 graus de liberdade para essa divisão. Já na divisão S-3 foram utilizadas 8510 variáveis, 8507 equações e 10 restrições de desigualdade. Essa divisão tem 3 graus de liberdade.

Na tabela pode-se observar que a um preço (p_1) de 7.02 \$/kg atinge-se a maior vazão do produto intermediário 5S1, já que a restrição de pureza de topo é ativa (0.1% molar dos produtos pesados C_4^+) e a restrição de pureza de fundo é inativa já

que se procura produzir mais C_3 como produto intermediário. Isto acontece porque o peso na função objetivo para reduzir a diferença das vazões das correntes intermediárias entre as duas divisões (S-1 e S-2) é maior do que o preço dos coprodutos P1 e P2. O preço adotado no leilão não tem sentido econômico concreto, já que é muito elevado, sendo inclusive maior do que o preço do produto principal (propeno) na S-3.

Tabela 5.2 - Respostas pricing interprocess streams using slack auctions.

Iteração #	p_1 (\$/kg)	p_2 (\$/kg)	5S1 (kg/h)	5S2 (kg/h)	17S2 (kg/h)	17S3 (kg/h)	P5 (kg/h)
1	1.62	2.52	9880.1	9686.62	9046.68	10061.8	7259.84
2	3.42	4.32	9885.56	10772.92	10061.16	10061.8	7259.84
3	5.22	6.12	9952.32	10773.54	10061.74	10061.8	7259.84
4	7.02	7.92	9962.44	10405.92	9890.08	10061.8	7259.82
5	7.02	9.72	9960.80	10615.50	10061.80	10061.34	7259.52

Fonte: Elaboração própria em base as respostas obtidas.

A seguir mostra-se a formulação do problema de otimização para esta divisão.

$$\text{Max} \quad \text{Pr}_1.P1 + \text{Pr}_2.P2 - p_1^{(v)} \cdot \frac{1}{2} \cdot |5S1^{(v)} - 5S2^0| - \text{Pr}_c.F - \text{Cop}_{S-1}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-1

Em que Pr_1 e Pr_2 são os preços de mercado dos produtos finais da S-1 que são 1.6063 e 2.424 \$/kg respectivamente, Pr_c é o preço da vazão da carga (1.6063 \$/kg) e Cop_{S-1} é o custo operacional desta seção. Como se pode observar, o algoritmo sempre vai tentar zerar a diferença $|5S1^{(v)} - 5S2^0|$ colocando um peso $p_1^{(v)}$, fazendo com que o preço do produto intermediário não tenha um significado econômico válido.

Já na seção S-2 acontece o mesmo problema, já que para os valores apresentados nos preços de leilão, que são superiores ao preço de mercado do propeno, sempre tenta-se produzir a maior vazão possível de etano. Isso faz com que a restrição de topo da T-2 seja ativa (35% molar de propano e propeno), o que significa que existiria demasiado produto principal (propeno) saindo na vazão do etano. O problema de otimização para esta seção é mostrado a seguir:

$$\text{Max} \quad \text{Pr}_3.P3 - p_1^{(v)} \cdot |5S2^{(v)} - 5S1^0| - p_2^{(v)} \cdot |17S2^{(v)} - 17S3^0| - \text{Cop}_{S-2}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-2

Em que Pr_3 é o preço de mercado do produto final da S-2 (etano) que é de 2.736 \$/kg, Cop_{S-2} é o custo operacional desta seção. A situação é análoga à anterior, com as diferenças $|5S2^{(v)} - 5S1^0|$ e $|17S2^{(v)} - 17S3^0|$ no qual o algoritmo sempre tenta zerar essas diferenças.

Na seção S-3, o problema que apresenta é muito parecido à técnica de relaxação Lagrangeana, isto devido a que os produtos finais tem um preço elevado, então sempre vai tentar produzir a maior quantidade possível. A única forma de se ter uma produção com uma quantidade intermediária é elevando o preço do leilão, mas se este preço é maior do que os dos produtos finais então a divisão teria um prejuízo por causa da corrente intermediária. O problema de otimização para esta divisão é mostrado a seguir:

$$\text{Max} \quad Pr_4.P4 + Pr_5.P5 - p_2^{(v)}.|17S3^{(v)} - 17S2^0| - Cop_{S-3}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-3

Em que Pr_4 e Pr_5 são os preços de mercado dos produtos finais da S-3 que são 1.6063; 6.273 \$/kg respectivamente e Cop_{S-3} é o custo operacional desta seção. Desta vez apenas a diferença $|17S3^{(v)} - 17S2^0|$ é que tende a ser zerada através de um peso $p_2^{(v)}$.

Nesta técnica os valores iniciais para o leilões dos preços são incrementados até encontrar convergência entre as correntes intermediárias, ou seja, que a diferença entre estas correntes seja menor a uma folga determinada no inicio do algoritmo. Contudo, considerando que é um processo com uma entrada e duas saídas (produção conjunta), esta técnica tenta maximizar a vazão de saída do produto final de cada seção e não do produto intermediário, perdendo assim a sensibilidade da produção com respeito ao preço. Isto ocorre porque ao colocar um peso (preço de leilão) para a restrição complicadora, tenta-se zerar a diferença entre as correntes intermediárias das duas divisões (ver figura 5.7).

Figura 5.7 - Pricing interprocess streams using slack auctions aplicado ao processo de produção conjunta - função objetivo dos subproblemas.

Fonte: Elaboração própria.

Feita a análise da aplicação deste método pode-se determinar que não é eficaz para o tipo de problema estudado, ou seja, os preços de leilão apresentados não fazem sentido econômico para problemas com produção conjunta, ou seja onde existam coprodutos. Normalmente este método é aplicado a processos que só tenham uma entrada e uma saída, fazendo com que não exista a escolha de vazões de produtos finais entre duas divisões.

5.1.3. Proposta modificação do algoritmo de relaxação Lagrangeana

Depois de fazer uma análise dos problemas que apresentam as técnicas de decomposição estudadas, foi desenvolvida uma proposta de modificação do algoritmo a ser avaliada para resolução de problemas de decomposição na otimização da unidade de produção de propeno (figura 5.8) que é apresentada a continuação:

Figura 5.8 - Fluxograma simplificado da unidade de produção de propeno - algoritmo proposto.

Fonte: Elaboração própria.

Para ilustrar a modificação no algoritmo de resolução de problemas por decomposição Lagrangeana, mostrado na figura 5.9 é apresentado um fluxograma com os passos do algoritmo que serão explicados a continuação:

Passo 0: Inicialização.

Considerando que o problema é de maximização, o algoritmo inicia dando um valor para o contador de iterações v :

$$v = 1$$

Os valores iniciais dos multiplicadores $(\lambda_1^0, \lambda_2^0)$ são fornecidos para a primeira iteração como é mostrado a seguir:

$$\lambda_1^{(v)} = \lambda_1^{(0)}; \lambda_2^{(v)} = \lambda_2^{(0)}$$

onde $\lambda_1^0 = 1.62$ \$/kg e $\lambda_2^0 = 2.52$ \$/kg. Estes valores foram atribuídos arbitrariamente com base nos preços de mercados dos produtos finais em cada divisão.

Além de fornecer valores iniciais para os multiplicadores, é preciso fornecer valores iniciais para os limites de produção disponível, estes valores iniciais são a capacidade máxima de produção de cada divisão.

Figura 5.9 - Fluxograma do algoritmo proposto.

Fonte: Elaboração própria.

Onde:

$LPD_1^{(0)}$ = Capacidade de produção da T-2 = 10772 kg/h.

$LPD_2^{(0)}$ = Capacidade de produção da T-3 = 10061 kg/h.

Esse limite de produção disponível (LPD) é a modificação realizada no algoritmo, com essas restrições já existe um sentido de disponibilidade (escassez) do produto a ser processado.

É importante fornecer ε , uma diferença aceitável entre os valores dos multiplicadores de iterações consecutivas para o critério de convergência do algoritmo. Para este problema, tanto para $|\lambda_1^{(v+1)} - \lambda_1^{(v)}|$ como para $|\lambda_2^{(v+1)} - \lambda_2^{(v)}|$, o valor atribuído para ε é de 0.01.

Passo 1: Solução do problema primal relaxado.

Resolver os 3 subproblemas gerados a partir da relaxação das variáveis complicadoras do problema primal.

Subproblema para a divisão da depropanizadora (S-1):

$$\text{Max} \quad \text{Pr}_1.P1 + \text{Pr}_2.P2 + \lambda_1^{(v)}.5S1^{(v)} - \text{Pr}_c.F - \text{Cop}_{S-1}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-1

Subproblema para a divisão da De-etanizadora (S-2):

$$\text{Max} \quad \text{Pr}_3.P3 + \lambda_2^{(v)}.17S2^{(v)} - \lambda_1^{(v)}.5S2^{(v)} - \text{Cop}_{S-2}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-2

$$5S2 \leq \text{LPD}_1^{(v)}$$

Subproblema para a divisão da fracionadora de propeno (S-3):

$$\text{Max} \quad \text{Pr}_4.P4 + \text{Pr}_5.P5 - \lambda_2^{(v)}.17S3^{(v)} - \text{Cop}_{S-3}$$

sujeito a:

Restrições de Operação da Divisão S-3

$$17S3 \leq \text{LPD}_2^{(v)}$$

cujas soluções serão denotadas como: $5S1^{(v)}$, $5S2^{(v)}$, $17S2^{(v)}$, $17S3^{(v)}$. Também foram adicionadas as restrições de produção disponível para a corrente de carga das divisões S-2 e S-3, isto para garantir que o produto a ser processado esteja disponível.

Passo 2: Atualização do multiplicador

Para atualizar o multiplicador pode-se utilizar um dos seguintes procedimentos: método do subgradiente, cutting plane method, bundle method e thrust region method. A atualização do multiplicador é feita desde um problema mestre, que está fora dos subproblemas e que na verdade, coordena os subproblemas para que possa-se atingir o ótimo do problema primal. O método utilizado neste caso é o de subgradiente, isto por que é um dos métodos mas utilizados na literatura de problemas de decomposição e que apresenta bons resultados. O procedimento clássico do método subgradiente é:

$$\lambda_1^{(v+1)} = \lambda_1^{(v)} + \frac{1}{a + b.v} \cdot \frac{(5S2^{(v)} - 5S1^{(v)})}{|5S2^{(v)} - 5S1^{(v)}|}$$

$$\lambda_2^{(v+1)} = \lambda_2^{(v)} + \frac{1}{a + b.v} \cdot \frac{(17S3^{(v)} - 17S2^{(v)})}{|17S3^{(v)} - 17S2^{(v)}|}$$

onde os valores dos parâmetros a e b são 1 e 0.1 respectivamente. Esses valores foram obtidos da literatura (Conejo et al. 2006).

Também tem que ser atualizado o limite de produção disponível (LPD) da seguinte forma:

$$LPD_1^{(v)} \leftarrow 5S1^{(v)};$$

$$LPD_2^{(v)} \leftarrow 17S2^{(v)};$$

Essa atualização garante que a vazão a ser processada esteja disponível, ou seja que a corrente de carga da T-2 e T-3 não pode ser maior as correntes dos produtos intermediários 5S1 E 17S2 respectivamente.

Passo 3: Critério de convergência

O critério de parada do algoritmo tem que satisfazer as seguintes equações:

$$|\lambda_1^{(v+1)} - \lambda_1^{(v)}| \leq \varepsilon$$

$$|\lambda_2^{(v+1)} - \lambda_2^{(v)}| \leq \varepsilon$$

em que ε é definido no passo 0. Se essas equações de desigualdade são respeitadas, então o algoritmo tem que parar e a solução ótima foi encontrada, então $5S1^* = 5S1^{(v)}$, $5S2^* = 5S2^{(v)}$, $17S2^* = 17S2^{(v)}$, $17S3^* = 17S3^{(v)}$. Caso contrário, o algoritmo deve continuar, com $v \leftarrow v + 1$ e retornar para o passo 1.

Os resultados das iterações da modificação no algoritmo da decomposição por relaxação Lagrangeana são mostrados na tabela a seguir:

Tabela 5.3 - Respostas da proposta de modificação do algoritmo de relaxação Lagrangeana.

Iteração #	λ_1	λ_2	5S1 (kg/h)	5S2 (kg/h)	17S2 (kg/h)	17S3 (kg/h)	P5 (kg/h)
1	1.620	2.520	9885.44	10772.40	10061.80	10061.80	7261.30
2	3.256	2.520	9964.36	4939.00	4613.64	10061.80	7261.30
3	1.756	4.020	9885.48	9964.36	9619.60	4613.64	3329.02
4	3.141	2.635	9964.68	4939.00	4613.64	9619.60	6941.70
5	1.855	3.921	9964.68	9964.68	9609.36	4613.64	3331.38
6	1.855	2.721	9964.68	9964.68	9603.00	9609.36	6942.94
7	1.855	3.846	9964.68	9964.68	9606.24	9603.00	6942.08
8	1.855	2.787	9964.68	9964.68	9606.24	9606.24	6940.20
9	1.855	2.787	9964.68	9964.68	9606.24	9606.24	6940.20

Fonte: Elaboração própria em base às respostas obtidas.

Com a modificação no algoritmo de resolução da relaxação Lagrangeana, fornecendo os valores iniciais para λ_1 , λ_2 , LPD_1 e LPD_2 os subproblemas podem ser resolvidos separadamente determinando assim as vazões das correntes intermediárias 5S1, 5S2, 17S2 e 17S3. Os multiplicadores de Lagrange e os limites de produção disponível são ajustados a cada iteração até que o critério de convergência seja cumprido. Como se pode observar, o critério de convergência é cumprido após 9 iterações, isto significa que a modificação do algoritmo consegue resolver os problemas que apresenta a técnica clássica. como é mostrado na figura 5.10.

As duas causas pelas que a técnica de relaxação Lagrangeana é ineficaz foram superadas ao modificar o algoritmo de resolução. A primeira causa que é a existência de divisões indiferentes, é superada já que ao momento de incrementar uma restrição desigualdade "limite de produção disponível" faz que exista um ponto no qual o gradiente da função objetivo e o gradiente da restrição de desigualdade (limite de produção disponível) sejam linearmente dependentes quando essa restrição é ativa, cumprindo assim as condições de otimalidade mencionadas na seção 3.

Figura 5.10 - Convergência do algoritmo proposto.

Fonte: Elaboração Própria.

Já a segunda causa que é a existência de objetivos lineares, na qual a restrição de capacidade operacional máxima ou mínima de cada subproblema sempre é ativa, foi superada devido a que a restrição de "limite de produção disponível" é atualizado a cada iteração, garantindo que a restrição de capacidade operacional seja variável conforme a disponibilidade de produto a ser processado, assim, a restrição de limite de produto disponível será ativa sempre que os preços de mercado sejam favoráveis, se os preços de mercado são muito baixos para um determinado produto a restrição ativa será a capacidade mínima que pode ser processada em cada divisão, garantindo assim que será maximizada a vazão do produto com maior preço de mercado como é mostrado nas figuras 5.11 e 5.12.

Pode-se observar na figura 5.11 que as vazões da corrente intermediária entre as divisões da coluna T-1 (5S1) e T-2(5S2), dependendo do valor do multiplicador de Lagrange, são dadas por um limite operacional de capacidade ou de disponibilidade de produto. Para o subproblema da T-1 (5S1) não existe muita variação já que a corrente de entrada é fixada e também por que os limites de pureza de topo e fundo são muito fortes (0.999 e 0.001% molar respectivamente). Já a vazão de carga da coluna 2 consegue convergir a partir da iteração numero 5, nesta figura pode se observar que os valores das vazões intermediarias 5S1 e 5S2 (9964.68 kg/h) alcançam um valor similar ao da vazão da corrente intermediaria 5 considerando a otimização com estrutura centralizada (9952.42 kg/h).

Figura 5.11 - Vazão da corrente intermediária 5S1-5S2 utilizando o algoritmo proposto.

Fonte: Elaboração Própria.

Na figura 5.12 mostra-se que a vazão da corrente 17S2 sofreu uma variação no limite máximo da vazão do produto de fundo da T-2, isto a causa que a corrente de entrada da coluna T-2 também sofreu uma variação no limite máximo de carga (5S2) para essa coluna. A vazão de carga da coluna T-3 também atualizo o limite de produto disponível a ser processado, com estas modificações pode se observar que se alcança convergência após 9 iterações.

Figura 5.12 - Vazão da corrente intermediária 17S2-17S3 utilizando o algoritmo proposto.

Fonte: Elaboração Própria.

Devido a que existe convergência dos multiplicadores de Lagrange, com a modificação do algoritmo de resolução pelo método de relaxação Lagrangeana se conseguiu decompor eficazmente o problema estudado. Considerando a otimização uma estrutura centralizada se conseguiu um lucro de 71622.92 \$/h, já considerando uma estrutura distribuída, decompondo o problema em três subproblemas que podem ser resolvidos independentemente, se obteve um lucro de 71754.71 \$/h, o que significa que existe uma diferença de 0.184 % no lucro das duas estruturas de problemas de otimização consideradas no problema (tabela 5.4).

Tabela 5.4 - Respostas dos problemas considerando uma estrutura centralizada e distribuída.

Função Objetivo		Max Lucro = Preço dos Produtos – Custo Vazão de Carga – Custos de Operação		
Coluna	Variáveis	Simulação (Projeto)	Otimização	Algoritmo Proposto
T-1	Vazão do Produto P1 (Kg/h)	8181.74	8158.40	8149.8
	Vazão de Produto P2 (Kg/h)	3506.46	3496.46	3492.6
	Vazão da Corrente 5 (Kg/h)	9919.08	9952.42	9964.72
	Splitter de Refluxo SR1	0.676000	0.671093	0.676971
	Splitter de Reboiler SB1	0.772000	0.770792	0.774288
T-2	Vazão do Produto P3 (Kg/h)	742.85	351.064	358.48
	Vazão da Corrente 17 (Kg/h)	9176.22	9601.36	9606.24
	Splitter de Refluxo SR2	0.949000	0.976064	0.973200
	Splitter de Reboiler SB2	0.720000	0.707796	0.693593
T-3	Vazão do Produto P5 (Kg/h)	6542.86	6921.86	6940.20
	Pureza do Produto P5 (Propeno % molar)	0.999900	0.995000	0.995001
	Vazão do Produto P4 (Kg/h)	2633.36	2679.5	2666.04
	Pureza do Produto P4 (Propeno % molar)	0.028100	0.023879	0.015298
	Splitter de Refluxo SR3	0.076480	0.080226	0.074642
	Splitter SC1	0.209030	0.213737	0.204296
Lucro Operacional Bruto (\$/h)		68947.75	71622.92	71754.71

Fonte: Elaboração própria em base às respostas obtidas.

Essa diferença entre o lucro bruto operacional da estrutura centralizada e distribuída se deve a que o problema estudado é altamente não linear, o que significa que as respostas encontradas são consideradas como ótimos locais, ou seja, pode ter acontecido ao resolver os subproblemas tenha-se encontrado melhores ótimos

locais que na resolução do problema considerando uma estrutura centralizada, como é mostrado na tabela 5.4 na qual pode-se observar que as respostas obtidas a partir de uma estrutura distribuída apresenta um pequeno incremento nas correntes intermediárias e por consequência um incremento nas vazões dos produtos finais e no lucro bruto operacional da unidade. Outras das razões pelas quais pode existir essa pequena diferença é que no cálculo do software, foram consideradas diferentes tolerâncias fazendo que exista uma diferença de decimas como é nosso caso.

Para a otimização utilizando essa proposta de estrutura distribuída foram utilizadas na divisão S-1, 2393 variáveis, 2391 equações e 6 restrições de desigualdade, essa divisão tem 2 graus de liberdade. Na divisão S-2 foram utilizadas 2746 variáveis, 2743 equações e 11 restrições de desigualdade, o que significa que a divisão S-2 tem 3 graus de liberdade. Já na divisão S-3 foram utilizadas 8510 variáveis, 8507 equações e 11 restrições de desigualdade, dando lugar a 3 graus de liberdade.

Pelo explicado anteriormente, pode-se concluir que a modificação no algoritmo de resolução do método de relaxação Lagrangeana é eficaz para resolver o problema de otimização com estrutura distribuída do processo apresentado na seção 4 deste trabalho.

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho descrevemos como a otimização de toda a unidade de produção de propeno da REPLAN - Petrobrás poderia ser decomposta em subproblemas utilizando técnicas de decomposição e como consequência do uso dessas técnicas, os preços das correntes intermediárias podem ser determinados adequadamente, considerando assim uma estrutura distribuída. Para este propósito foram estudadas as principais técnicas de decomposição para problemas de otimização, estas são a *relaxação Lagrangeana* e o *Lagrangeano Aumentado*. Além dessas técnicas clássicas, foi estudada uma outra técnica alternativa que é *Pricing Interprocess Streams Using Slack Auctions*. O principal objetivo destas é decompor o problema original em subproblemas menores coordenados por um problema mestre, atualizando o multiplicador de Lagrange que, nestes casos, é considerado como o preço sombra da corrente intermediária. Estas três técnicas foram fundamentadas teoricamente, fazendo-se uma análise e explicação dos seus algoritmos para aplicação na decomposição de problemas de otimização de divisões posicionadas em série, em que o procedimento iterativo é usado para garantir a convergência para uma solução global.

Essas técnicas foram aplicadas a um problema de otimização de grande porte, que é toda a unidade de produção de propeno da refinaria REPLAN – Petrobrás. Essa unidade é composta por três divisões: Depropanizadora, De-etanizadora e a Fracionadora de Propeno. A estratégia é a redução da complexidade na resolução do problema de otimização com estrutura centralizada para geração dos preços dos produtos intermediários adequados, determinado pelas técnicas de decomposição para a tomada de decisões de produção e também para a obtenção dos set-points.

Com este fim, numa primeira etapa (seção 4 da dissertação) foram consideradas as três divisões num só modelo (baseado no trabalho de Mendoza et al., 2013), para assim poder simular e otimizar a unidade completa, obtendo os set-points requeridos pelo RTO. Os resultados obtidos mostram que a otimização da unidade pode incrementar (comparada com as condições atuais) em 3.88% no lucro da toda a unidade, o que significa 2675.17 \$/h. O principal problema encontrado na modelagem foi a necessidade do EMSO de um arquivo de inicialização viável, o que fez com que a construção do modelo fosse trabalhoso. Em relação à simulação do

processo, o software apresenta as características de um ambiente orientado a equações, como velocidade na convergência, robustez e flexibilidade nas especificações das variáveis do processo.

Numa segunda etapa foram modeladas, simuladas e otimizadas separadamente as três divisões que formam parte da unidade de produção de propeno (seção 5 da dissertação). A construção dos modelos apresentou menor complexidade do que a modelagem da unidade com estrutura centralizada, já que cada uma dessas divisões possui menor número de variáveis e equações, mas os mesmos problemas e características do software mencionados anteriormente se fizeram presentes. Pelas características do EMSO, neste trabalho não será desenvolvida uma análise do gasto computacional na resolução dos problemas de otimização mas, pelo menor número de variáveis e equações, a otimização feita em paralelo das três divisões consideradas separadas, deveria poder ser resolvida num menor tempo computacional.

A aplicação das técnicas de decomposição mencionadas anteriormente ao processo estudado apresentou uma série de problemas (mencionado na seção 5 da dissertação). Nas técnicas da *relaxação Lagrangeana* e *Lagrangeano Aumentado* os problemas encontrados foram os seguintes: existência de divisões indiferentes, ou seja, casos em que não existe dependência linear entre a função objetivo e as restrições complicadoras das divisões estudadas; também encontraram-se problemas com objetivos lineares das divisões, ou seja, a restrição de processamento máximo ou mínimo das divisões S2 e S3 sempre serão ativas fazendo com que não exista convergência do problema mestre com qualquer valor do multiplicador de Lagrange.

A técnica de *Pricing Interprocess Streams Using Slack Auctions* também apresentou problemas. Nessa técnica, é a colocação de um peso na função objetivo tentando minimizar a diferença entre as vazões das restrições complicadoras, mas esta técnica não considera a produção conjunta, já que se não houver um preço de leilão suficientemente alto, sempre tenta-se produzir a maior vazão do coproduto e não da corrente intermediária, fazendo que o preço do leilão não tenha um significado econômico válido para este tipo de processos, isso porque os preços dos produtos intermediários seriam maiores que os preços de mercado dos produtos finais.

Também foi realizado uma *proposta* de mudança no algoritmo de resolução de problemas de otimização por *relaxação Lagrangeana*, demonstrando que essa proposta garante uma solução global para o problema de otimização considerando uma estrutura distribuída, atingindo assim um ótimo geral para todo o processo, mas, como o problema estudado é não linear e foram consideradas tolerâncias diferentes nos cálculos do software, existe uma diferença entre de 0.184% entre a otimização centralizada (ótimo de 71622.92 \$/h) e a otimização distribuída (71754.71 \$/h) da unidade.

Então é importante que a aplicação de técnicas de decomposição para problemas de otimização de unidades em série sejam tomadas em conta para ser acopladas a um sistema de otimização em tempo real, já que assim os novos pontos operacionais encontrados com o RTO sejam sensíveis a mudanças nos preços dos produtos finais e intermediários, garantido assim uma solução global considerando uma estrutura distribuída.

Como sugestões para trabalhos futuros, a proposta sugerida deve ser testada em outras unidades de processo, com produção conjunta de dois ou mais produtos. Outros métodos de atualização dos multiplicadores de devem ser utilizados, para analisar se é possível alcançar a convergência em um menor número de iterações. Já para a otimização do processo, é preciso desenvolver uma plataforma computacional para o EMSO e assim possa ser feita uma análise do gasto computacional requerido na resolução dos problemas de otimização, tanto para a otimização considerando uma estrutura centralizada como para uma estrutura distribuída. Também seria interessante utilizar softwares comerciais diferentes como Aspen e ROMEo para poder implementar as técnicas de decomposição nas unidades que atualmente utilizam estas plataformas computacionais, visando alcançar soluções que abarquem toda a refinaria.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANTHONY, R. N.; GOVINDARAJAN, V. **Sistemas de controle gerencial**, São Paulo, 2002.
- ARORA, N.; BIEGLER, L. T. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 25, n. 11, p. 1585–1599, 2001.
- ATKINSON, A. A.; CHENOY CASTRO, A. O. M. DU. **Contabilidade gerencial**. [S.l.: s.n.], 2000.
- AXELSSON, B.; EASTON, G. **Industrial networks: a new view of reality**, Routledge, New York, 1992.
- BAILEY, J.K.; HYRMAK, A.N.; TREIBER, S.S.; HAWKINS R.B. Nonlinear optimization of a hydrocracker fractionation plant. **Computers & chemical engineering**, v. 17, n. 2, p. 123–138, 1993.
- BAZARAA, M. S.; SHERALI, H. D.; SHETTY, C. M. **Nonlinear programming theory and algorithms**. John Wiley & Sons, New York, 1993.
- BERTSEKAS, D. P. Constrained optimization and Lagrange multiplier methods. **Computer Science and Applied Mathematics, Boston: Academic Press**, v. 1, 1982.
- BERTSEKAS, D. P. **Nonlinear programming**. Athena Scientific, Belmont MA, 1995.
- BEUREN, I.; GRUNOW, M. A.; HEIN, N. Métodos de preço de transferência interna utilizados nas maiores indústrias do Brasil. **Congresso USP**, São Paulo, Brasil, 2008.
- BIEGLER, L. T.; GROSSMANN, I. E. Retrospective on optimization. **Computers & Chemical Engineering**, v. 28, n. 8, p. 1169–1192, 2004.
- CAMOLESI, V. J.; MORO, L. L. F.; ZANIN, A. C. Implantação de um otimizador em tempo real (RTO) no conversor de uma unidade de craqueamento catalítico. **Sba: Controle & Automação Sociedade Brasileira de Automatica**, v. 19, n. 2, p. 128–137, 2008.
- CARVALHO M. **Otimização sequencial por aproximações: Uma aplicação em tempo real para o refino de petróleo**. Tese (Doutorado em coordenação de programas de pós-graduação em engenharia elétrica) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2007.
- CHACHUAT, B.; SRINIVASAN, B.; BONVIN, D. Adaptation strategies for real-time optimization. **Computers & Chemical Engineering**, v. 33, n. 10, p. 1557–1567, 2009.

COHEN, G. Auxiliary problem principle and decomposition of optimization problems. **Journal of optimization Theory and Applications**, v. 32, n. 3, p. 277–305, 1980.

CONEJO, E.; CASTILLO, R.; MINGUEZ R.; GARCIA-BERTRAND, R. **Decomposition Techniques in Mathematical Programming: Engineering and Science Applications**. [S.l.]: Springer, 2006.

DARBY, M. L.; WHITE, D. C. On-line optimization of complex process units. **Chemical Engineering Progress**, v. 84, n. 10, p. 51–59, 1988.

DURAISKI, R. G. **Otimização dinâmica em tempo real utilizando modelos não-lineares simplificados**. Tese de Doutorado - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.

EDGAR, T.F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L.S. **Optimization of chemical processes**, McGraw-Hill, New York, 2001.

FRIEDMAN, Y. Z. What's wrong with unit closed loop optimization? **Hydrocarbon Processing-Section 1**, v. 74, n. 10, p. 107–116, 1995.

GUERRA, O. J.; LE ROUX, G. A. C. Improvements in Petroleum Refinery Planning: 1. Formulation of Process Models. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 50, n. 23, p. 13403–13418, doi:10.1021/ie200303m, 2011.

GUIGNARD, M. Lagrangean relaxation. **Top**, v. 11, n. 2, p. 151–200, 2003.

GUNNERUD, V.; FOSS, B. Oil production optimization—A piecewise linear model, solved with two decomposition strategies. **Computers & Chemical Engineering**, v. 34, n. 11, p. 1803–1812, 2010..

HANMANDLU, M.; PURKAYASTHA, P.; PAL, J. K. On the use of nonlinear programming in real time control in process industries. **Annual Review in Automatic Programming**, v. 13, p. 71–78, 1985.

HARTMANN, J. C. M. Distinguish between scheduling and planning models. **Hydrocarbon processing**, v. 77, n. 7, p. 93–100, 1998.

HUI, C.-W. Determining marginal values of intermediate materials and utilities using a site model. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 2, p. 1023–1029, 2000.

JANG, S.; JOSEPH, B.; MUKAI, H. On-line optimization of constrained multivariable chemical processes. **AIChE journal**, v. 33, n. 1, p. 26–35, 1987.

JIANT T.; CHEN, B.; HE, X.; STUART, P. Application of steady-state detection method based on wavelet transform. **Computers & chemical engineering**, v. 27, n. 4, p. 569–578, 2003.

JORDAN, H.; NEVES, J. C.; RODRIGUES, A. **O controle de gestão: ao serviço da estratégia e dos gestores**. [S.l: s.n.], 2003.

JOSE, R. A.; UNGAR, L. H. Auction-driven coordination for plantwide optimization. **Proc. Foundations of Computer-Aided Process Operation FOCAPO**, 1998.

JOSE, R. A.; UNGAR, L. H. Pricing interprocess streams using slack auctions. **AIChE journal**, v. 46, n. 3, p. 575–587, 2000.

KREIPL, S.; PINEDO, M. Planning and scheduling in supply chains: an overview of issues in practice. **Production and Operations management**, v. 13, n. 1, p. 77–92, 2004.

LATOUR, P. R. ONLINE COMPUTER OPTIMIZATION. 2. BENEFITS AND IMPLEMENTATION. **Hydrocarbon Processing**, v. 58, n. 7, p. 219–223, 1979.

LI, X. **Refinery-wide optimization**. PHD Dissertation. Texas Technical University, 2000.

LUENBERGER, D.G. **Linear and nonlinear programming**. Addison Wesley, Reading, MA, 1984.

MAHEY, P. Decomposition methods for mathematical programming. **Handbook of applied optimization**, p. 337–351, 2002.

MARTINS, E. **Contabilidade de custos**. São Paulo: Atlas, 2003.

MENDOZA, D. F.; PALACIO, L. M.; GRACIANO, J. E. A.; et al. Real-Time Optimization of an Industrial-Scale Vapor Recompression Distillation Process. Model Validation and Analysis. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 16, p. 5735–5746, 2013.

MORO, L. F. L.; ZANIN, A. C.; PINTO, J. M. A planning model for refinery diesel production. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, p. S1039–S1042, 1998.

NAYSMITH, M. R.; DOUGLAS, P. L. Review of real time optimization in the chemical process industries. **Developments in Chemical Engineering and Mineral Processing**, v. 3, n. 2, p. 67–87, 1995.

NEIRO, S. M. S. **Integrated planning of production-distribution in petroleum supply chains**. . [S.l.]: Ph. D. Thesis, University of São Paulo, SP, Brazil, 2004.

PINTO, J. M.; GUT, J. A. W. Otimização de processos químicos. **Apostila do curso PQI5779-Otimização de Processos Químicos I** Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.

POLYAK, B. T. **Introduction to optimization**. Optimization Software, Inc., New York, 1987.

REDONDO, N. J.; CONEJO, A. J. Short-term hydro-thermal coordination by Lagrangian relaxation: solution of the dual problem. **Power Systems, IEEE Transactions on**, v. 14, n. 1, p. 89–95, 1999.

ROMAGNOLI, J.A.; SANCHEZ, M.C. **Data processing and reconciliation for chemical process operations**, first ed. Academic Press Inc., San Diego, USA, 2000.

SEQUEIRA, S. E.; GRAELLS, M.; PUIGJANER, L. Real-time evolution for on-line optimization of continuous processes. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 41, n. 7, p. 1815–1825, 2002.

SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. **Computer Aided Chemical Engineering**, v. 14, p. 947–952, 2003.

SOARES, R. P. **User's and programming manual**; <http://www.enq.ufrgs.br/alsoc/download/emso/docs/Manual.pdf> (accessed Sept 27, 2013).

VOLLMANN, T.; CORDON, C.; RAABE, H. **Supply chain management**. The complete MBA companion, Pitman, London, 1997.

VRTECH. **VRTherm manual do usuário**. www.vrtech.com.br (accessed Sept 27, 2013).

WHITE, D. C. Online optimization: what, where and estimating ROI: Process optimization: Process control and instrumentation. **Hydrocarbon Processing**, v. 76, n. 6, p. 43–51, 1997.

WINSTON, W.L. **Introduction to mathematical programming: Applications and algorithms**, 2nd ed, Duxbury Press, California, 1995.

WU, Y.-C.; DEBS, A. S.; MARSTEN, R. E. A direct nonlinear predictor-corrector primal-dual interior point algorithm for optimal power flows. **Power Systems, IEEE Transactions on**, v. 9, n. 2, p. 876–883, 1994.

ZHANG, J.; ZHU, X. X.; TOWLER, G. P. A simultaneous optimization strategy for overall integration in refinery planning. **Industrial & engineering chemistry research**, v. 40, n. 12, p. 2640–2653, 2001.

ZHANG, N.; ZHU, X. X. A novel modelling and decomposition strategy for overall refinery optimisation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 2, p. 1543–1548, 2000.

ZHANG, N.; ZHU, X. X. Novel modelling and decomposition strategy for total site optimisation. **Computers & chemical engineering**, v. 30, n. 5, p. 765–777, 2006.

ZHANG, Y.; FRASER FORBES, J. Extended design cost: a performance criterion for real-time optimization systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 8, p. 1829–1841, 2000.

ZHUANG, F.; GALIANA, F. D. Towards a more rigorous and practical unit commitment by Lagrangian relaxation. **Power Systems, IEEE Transactions on**, v. 3, n. 2, p. 763–773, 1988.