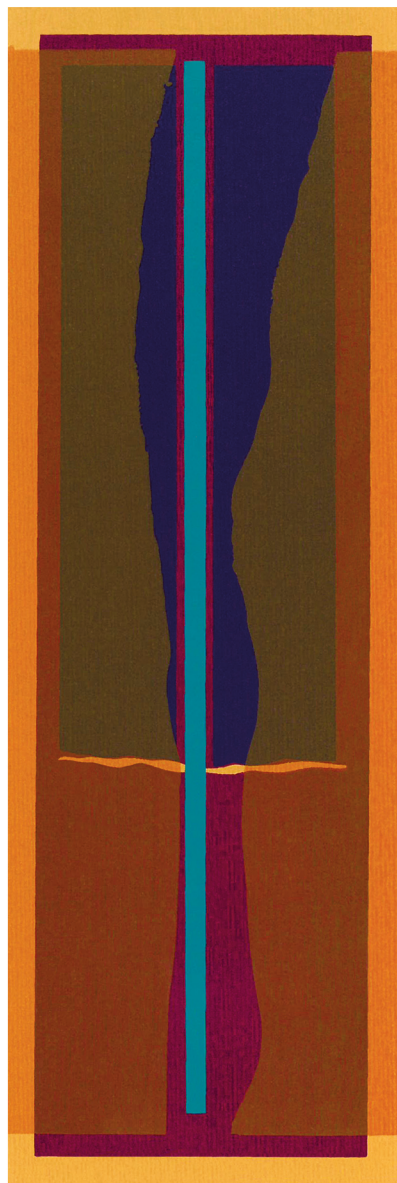


PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA PARA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

Jorge A. W. Gut



PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA PARA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS



UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Reitor Vahan Agopyan

Vice-reitor Antonio Carlos Hernandes

PRÓ-REITORIA DE GRADUAÇÃO

Pró-reitor Edmund Chada Baracat



EDITORA DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

Diretor-presidente Carlos Roberto Ferreira Brandão

COMISSÃO EDITORIAL

Presidente Rubens Ricupero

Vice-presidente Valeria De Marco

Carlos Alberto Ferreira Martins

Clodoaldo Grotta Ragazzo

Maria Angela Faggin Pereira Leite

Ricardo Pinto da Rocha

Tânia Tomé Martins de Castro

Suplentes Marta Maria Geraldês Teixeira

Primavera Borelli Garcia

Sandra Reimão

Editora-assistente Carla Fernanda Fontana

Chefe Div. Editorial Cristiane Silvestrin

PROGRAMAÇÃO MATEMÁTICA PARA OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

Jorge A. W. Gut

Copyright © 2021 by Jorge A. W. Gut

Apoio da Pró-reitoria de Graduação da Universidade de São Paulo
Programa de Incentivo à Produção de Livros Didáticos para o Ensino de Graduação

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
(Câmara Brasileira do Livro, SP, Brasil)

Gut, Jorge A. W.

Programação Matemática para Otimização de Processos
/ Jorge A. W. Gut. – 1. ed. – São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2021. – (Acadêmica; 110).

Bibliografia.

ISBN 978-65-5785-033-6

1. Engenharia química. 2. Otimização matemática. 3. Pesquisa operacional. 4. Programação (matemática). 5. Programação linear. I. Título. II. Série.

21-66468

CDD-515

Índices para catálogo sistemático:

1. Otimização contínua: Matemática aplicada 515

Maria Alice Ferreira – Bibliotecária – CRB-8/7964

Direitos reservados à

Edusp – Editora da Universidade de São Paulo
Rua da Praça do Relógio, 109-A, Cidade Universitária
05508-050 – São Paulo – SP – Brasil
Divisão Comercial: tel. (11) 3091-4008 / 3091-4150
www.edusp.com.br – e-mail: edusp@usp.br

Printed in Brazil 2021

Foi feito o depósito legal

*Esta obra é dedicada ao professor doutor José Maurício Pinto,
responsável pelo meu ingresso na entusiasmante vida acadêmica
e no mundo da otimização de processos.
Eternamente grato por sua orientação e inspiração.*

SUMÁRIO

Apresentação.....	15
1. Introdução	17
1.1 Otimização de Processos	17
1.2 Plano do Livro	20
2. Preliminares.....	21
2.1 Escalares, Vetores e Matrizes	21
2.2 Operações Vetoriais e Matriciais.....	23
2.3 Características de Vetores	25
2.4 Determinante e Autovalores de Matrizes Quadradas.....	27
2.5 Funções Matemáticas	33
2.6 Concavidade de uma Função	39
2.7 Convexidade de um Espaço.....	45
2.8 Série de Taylor.....	48
2.9 Método de Newton.....	51
2.10 Aproximações Numéricas de Derivadas	55
2.11 Resolvendo Sistemas de Equações Lineares	57
2.12 Exercícios	59

3.	Introdução à Programação Matemática.....	63
3.1	Começando com um Problema Simples	63
3.2	Padronização do Modelo Matemático	68
3.3	Graus de Liberdade	70
3.4	Restrições Ativas e Inativas	73
3.5	Múltiplos Objetivos	75
3.6	Análise de Sensibilidade	77
3.7	Classes de Problemas de Programação Matemática	79
3.8	Exercícios	79
4.	Condições de Otimalidade	83
4.1	Avançando para um Problema Não Linear.....	83
4.2	O Ponto Ótimo em Problemas Irrestritos	87
4.3	Introduzindo Restrições de Igualdade	87
4.4	Ponto Ótimo em Problemas com Restrições de Igualdade	90
4.5	Introduzindo Restrições de Desigualdade	92
4.6	O Ponto Ótimo em Problemas com Restrições de Desigualdade	94
4.7	Condições de Karush-Kuhn-Tucker (KKT)	101
4.8	Obtenção de um Ponto KKT	105
4.9	Convexidade de Problemas de Otimização.....	108
4.10	Exercícios	113
5.	Programação Linear	117
5.1	Introdução	117
5.2	O Formato padrão do Método Simplex	119
5.3	Procurando Vértices	121
5.4	Variáveis Básicas e Não Básicas.....	125
5.5	Procurando o Vértice Ótimo	128
5.6	O Método Simplex	133
5.7	Usando Variáveis Artificiais.....	141
5.8	Casos Particulares do Método Simplex	146
5.9	Caso LP: Problema de Transporte	148
5.10	Caso LP: Problema de Mistura	151
5.11	Exercícios	157
6.	Programação Não Linear	165
6.1	Introdução	165

6.2	Começando com um Caso Não Convexo	166
6.3	Lidando com Problemas Não Convexos	169
6.4	Recomendações para Modelagem e Resolução de NLPs	172
6.5	Método dos Multiplicadores de Lagrange	179
6.6	Método de Programação Linear Sucessiva (SLP)	180
6.7	Método de Programação Quadrática Sucessiva (SQP) ...	184
6.8	Método de Gradiente Reduzido Generalizado (GRG) ...	186
6.9	Avaliação de Algoritmos de Otimização	189
6.10	Caso NLP: Ajuste de Modelo	191
6.11	Caso NLP: Otimização de Processo de Alquilação	193
6.12	Exercícios	198
7.	Fundamentos de Otimização Discreta	205
7.1	Introdução	205
7.2	Variáveis Discretas	206
7.3	Variáveis Binárias	207
7.4	Representação de Problemas Discretos	210
7.5	Modelando Restrições Lógicas	213
7.6	Convertendo Proposições Lógicas em Expressões Algébricas	219
7.7	Restrições Lógicas Envolvendo Variáveis Contínuas	220
7.8	Exercícios	223
8.	Programação Linear Inteira Mista	227
8.1	Introdução	227
8.2	Método de Busca Exaustiva	228
8.3	Relaxando o Problema	229
8.4	Método <i>Branch and Bound</i>	232
8.5	Problemas Clássicos MILP e IP	237
8.6	Identificação de Combinações Quase Ótimas	245
8.7	Linearização por Partes de Funções Não Lineares	248
8.8	Caso MILP: Problema de Alocação de Combustíveis	253
8.9	Caso MILP: Síntese de uma Sequência de Destilação	256
8.10	Caso MILP: Programação de Produção	262
8.11	Exercícios	272
9.	Programação Não Linear Inteira Mista	279
9.1	Introdução	279

9.2	Método de Busca Exaustiva	280
9.3	Método <i>Branch and Bound</i>	281
9.4	Métodos de Decomposição	281
9.5	Convexificação de Posinômios	287
9.6	Caso MINLP: Seleção Ótima de Processos	289
9.7	Caso MINLP: Projeto Ótimo de uma Planta Multiproduto	295
9.8	Exercícios	306
Apêndice A. Otimização Usando o Programa Gams		311
A.1	Introdução	311
A.2	Caso LP: Problema de Transporte	313
A.3	Caso NLP: Ajuste de Modelo	321
A.4	Caso NLP: Otimização de Processo de Alquilação	323
A.5	Caso MILP: Problema de Alocação de Combustíveis	326
A.6	Caso MILP: Programação de Produção	330
A.7	Caso MINLP: Seleção Ótima de Processos	336
A.8	Caso MINLP: Projeto Ótimo de uma Planta Multiproduto	338
Apêndice B. Otimização Usando o Programa Lingo		343
B.1	Introdução	343
B.2	Caso LP: Problema de Transporte	344
B.3	Caso NLP: Ajuste de Modelo	349
B.4	Caso NLP: Otimização de Processo de Alquilação	351
B.5	Caso MILP: Problema de Alocação de Combustíveis	354
B.6	Caso MILP: Programação de Produção	358
B.7	Caso MINLP: Seleção Ótima de Processos	364
B.8	Caso MINLP: Projeto Ótimo de uma Planta Multiproduto	366
Apêndice C. Otimização Usando o Programa Excel Solver		371
C.1	Introdução	371
C.2	Caso LP: Problema de Transporte	372
C.3	Caso NLP: Ajuste de Modelo	376
C.4	Caso NLP: Otimização de Processo de Alquilação	379
C.5	Caso MILP: Problema de Alocação de Combustíveis	383
C.6	Caso MINLP: Seleção Ótima de Processos	386

C.7 Caso MINLP: Projeto Ótimo de uma Planta	
Multiproduto	389
Bibliografia	393
Sobre o Autor	397

APRESENTAÇÃO

O propósito deste livro é introduzir alunos de cursos de graduação e pós-graduação em engenharia aos conceitos e técnicas de otimização de processos por programação matemática. Além da formulação de modelos de otimização, são explorados métodos de resolução manuais e também por implementação em programas de otimização, assim como a interpretação dos resultados obtidos. Espera-se estimular o interesse dos alunos pela otimização de processos por meio de casos práticos e problemas resolvidos passo a passo.

Embora alguma experiência e familiaridade em cálculo e álgebra linear seja esperada para acompanhar este livro, o capítulo 2 faz uma revisão de conceitos para proporcionar um nivelamento básico e uniformizar a nomenclatura adotada. Os capítulos 3 e 4 lidam com os fundamentos da otimização por programação matemática, conceituando as condições que definem a otimalidade. Nos capítulos 5 e 6, métodos de otimização para problemas lineares (método Simplex) e não lineares (métodos SLP, SQP e GRG) são explorados, juntamente com exemplos práticos. O uso de variáveis binárias 0/1 na modelagem de processos é discutido no capítulo 7 para a introdução de decisões e escolhas discretas nos problemas. Na sequência, os capítulos

8 e 9 exploram os métodos de otimização que lidam com esse tipo de problema, com equações lineares (método *Branch and Bound*) e não lineares (métodos de decomposição). O livro aborda também estratégias de modelagem que facilitam a convergência de algoritmos para a solução ótima de um problema.

Os apêndices trazem tutoriais práticos para uso dos programas de otimização Gams, Lingo e Excel Solver, de forma que o leitor possa escolher qual ou quais irá usar para resolver os problemas propostos ao final de cada capítulo.

Em resumo, esta obra objetiva capacitar os alunos a:

- a) Compreender e interpretar os conceitos matemáticos que definem a teoria de otimização por programação matemática.
- b) Formular adequadamente problemas de otimização fazendo uso de equações algébricas e variáveis contínuas e discretas.
- c) Compreender e saber empregar as principais técnicas e algoritmos de solução aplicados às diferentes classes de modelos de programação matemática.
- d) Utilizar adequadamente programas de otimização e de interpretar e avaliar os resultados obtidos.
- e) Conhecer importantes aplicações da programação matemática inteira mista na otimização de processos.

Bom estudo!

INTRODUÇÃO

Este capítulo introdutório, além de apresentar o plano do livro, pretende motivar o profissional ligado à engenharia de processos a se envolver com os fundamentos e as ferramentas de otimização.

1.1 OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

Na indústria de processamento químico, a pressão para melhorar a qualidade de produtos, reduzir custos de produção, diminuir riscos e minimizar o impacto ambiental tem motivado o desenvolvimento de ferramentas de modelagem e otimização para resolver rapidamente problemas complexos. Do ponto de vista prático, pode-se definir o termo otimização como: encontrar a melhor solução para um sistema ou processo, respeitando restrições estabelecidas. Para quantificar o termo “melhor”, faz-se necessária uma função “objetivo” que sirva como indicador da qualidade de uma solução particular. Objetivos típicos para processos industriais incluem minimizar custos operacionais e fixos, maximizar rendimentos ou parâmetros de qualidade, minimizar o impacto ambiental etc.

As variáveis do problema são definidas de modo a influenciar a função objetivo (e também as restrições). Podem representar fisicamente o tamanho e a capacidade de equipamentos, bem como as condições de operação – pressão, temperatura e vazão. Por fim, não só os limites da operação do processo, da qualidade dos produtos e da validade dos modelos usados, mas também as relações de dependência entre as variáveis do problema devem ser entendidos como restrições no processo. Normalmente, as variáveis podem ser classificadas como: (1) variáveis de decisão, que representam os graus de liberdade na otimização, e (2) variáveis dependentes, que podem ser calculadas a partir de equações.

A simulação ou a avaliação de um processo químico envolve a resolução de um modelo matemático com zero graus de liberdade, ou seja, sua solução, caso exista, é única. Em um problema de otimização, algumas variáveis ficam livres, dentro de certos limites, em vez de serem especificadas como na simulação – por exemplo, a temperatura de um reator químico, o número de pratos em uma coluna de destilação, o comprimento dos tubos de um trocador de calor.

Em muitos casos, a tarefa de encontrar uma melhor solução pela manipulação das variáveis de decisão é executada por tentativa e erro, por meio de estudos de casos. No entanto, métodos de otimização utilizam abordagens sistemáticas para encontrar a melhor solução da forma mais eficiente.

Áreas correlatas que descrevem a teoria e os conceitos de otimização são a programação matemática e a pesquisa operacional, e ambas apresentam uma extensa literatura associada. A programação matemática lida principalmente com a caracterização de propriedades teóricas de problemas e algoritmos de otimização com restrições, incluindo a existência de soluções, a convergência para as soluções etc. A pesquisa operacional, por sua vez, foca na aplicação e na implementação de métodos de otimização para uso prático e eficiente.

A aplicação de métodos de otimização a problemas reais, fazendo uso da modelagem matemática e de ferramentas computacionais, é muito útil à área da engenharia de processos. Nesse caso, é importante sentir-se confortável quanto ao funcionamento dos algoritmos de otimização, incluindo as limitações dos métodos. Ao formular pro-

blemas que capturem a essência do processo real, deve-se ter em mente que eles sejam tratáveis e solúveis pelos métodos disponíveis.

Seguem cinco importantes aplicações de otimização em engenharia de processos.

- a) Projeto de processos: determinar variáveis operacionais e dimensionar equipamentos por meio da modelagem de um processo ou de uma operação unitária.
- b) Síntese de processos: seleção da configuração ótima de um processo adicionando ou retirando unidades e conexões em um fluxograma produtivo.
- c) Planejamento e programação de processos: determinação do planejamento ótimo de produção, distribuição, inventário etc. Otimizar a programação de produção em unidades batelada multi-produto.
- d) Controle e operação de processos: otimização *on-line* do modelo do processo para minimizar desvios do *set-point* (RTO – *real time optimization*). Planejamento e programação *on-line*.
- e) Ajuste de modelos: minimizar os desvios entre dados experimentais e valores preditos por um modelo matemático através do ajuste de parâmetros.

A otimização de processos envolve diferentes profissionais. Os matemáticos desenvolvem teorias e métodos de otimização, os analistas numéricos desenvolvem a implementação computacional dos métodos de maneira eficiente e prática, e os engenheiros de processo modelam problemas reais e fazem uso de ferramentas para otimizar e, então, interpretar e implementar resultados na prática.

O passo inicial é a definição do problema a ser otimizado, seu escopo, as variáveis de decisão, os objetivos e as limitações do sistema. O segundo passo é a tradução do problema para equações, inequações e variáveis de forma a elaborar um modelo confiável e coerente. Em seguida, tem-se a resolução do problema de otimização usando algoritmos apropriados. Uma vez obtida a solução ótima é necessário avaliar se ela faz sentido e é aceitável. Caso contrário, a etapa de modelagem deve ser revista. Por fim, tem-se a implementação da solução obtida.

A figura 1.1 sumariza as principais ações do engenheiro de processos, sendo o modelo o ponto central. Dada a interdisciplinaridade

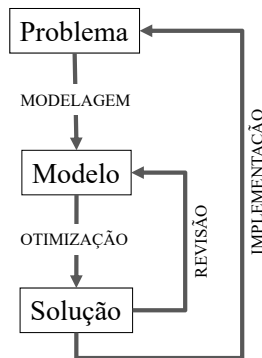


Figura 1.1 Formulação e resolução de modelos de otimização.

na otimização de processos, o modelo segue um formato padronizado, que será apresentado no próximo capítulo. Esse formato é importante para facilitar a interação e a comunicação a quem desenvolve e usa algoritmos de otimização.

1.2 PLANO DO LIVRO

Nesta obra, serão desenvolvidos aspectos de modelagem de problemas de otimização; estudaremos também a teoria de otimização por programação matemática e os métodos de otimização. Problemas diversos serão resolvidos passo a passo ou por meio de programas de otimização. Nos apêndices A, B e C há instruções para uso dos programas Gams, Lingo e Excel Solver. O leitor poderá escolher qual ou quais desses deseja aprender a usar e resolver os exercícios propostos. Ao longo do livro, há uma evolução na complexidade dos problemas de otimização, começando com casos lineares e terminado com casos não lineares que envolvem decisões discretas do tipo sim/não por meio de variáveis binárias 0/1.

LANÇAMENTO 2019

JÁ DISPONÍVEL

LIVRARIA VIRTUAL

www.edusp.com.br/loja

LIVRARIAS

www.edusp.com.br/livrarias

INFORMAÇÕES

Divulgação Edusp

divulga@usp.br

