

Um Procedimento de *Bound Contraction* para Otimização Global de Problemas de Programação Geométrica Generalizada: Aplicação em um Processo de Alquilação

Carolina Borges de Carvalho^a, Pedro Henrique Siscato^a,
Maria Izabela de Almeida Silva^a, Esdras Penêdo de Carvalho^{b,*}

^a Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química, Maringá-PR, Brasil

^b Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Matemática, Maringá-PR, Brasil

* epcarvalho@uem.br

RESUMO

Este trabalho apresenta uma extensão do procedimento de *bound contraction* de Faria e Bagajewicz (2011), originalmente desenvolvido para Problemas de Programação Não-Linear Inteira Mista (MINLP) contendo termos bilineares, para a classe mais ampla de Programação Geométrica Generalizada (PGG) contendo produtos da forma $z_k = \phi_1^{(k)}(x_i) \phi_2^{(k)}(x_j)$, em que $\phi_1^{(k)}$ e $\phi_2^{(k)}$ são funções estritamente monótonas. A metodologia é ilustrada no problema de otimização do processo de alquilação de Dembo (1976), do *Handbook* de Floudas et al. (1999), que possui 7 variáveis e 14 restrições do tipo signomial. Após transformar o problema em uma formulação equivalente com 17 produtos bilineares do tipo $K = 2$, aplicam-se as relaxações de envoltória de McCormick para obter limitantes inferiores válidos a cada iteração. Partindo de um gap inicial de 0,65 % em relação ao ótimo global conhecido ($f^* = 1.227, 23$), o algoritmo converge para um gap inferior a 0,05 % em 4 iterações, com reduções de domínio de até 76 % nas variáveis mais sensíveis. Os resultados preliminares indicam o potencial da extensão proposta para problemas PGG oriundos da Engenharia Química.

Palavras-chave: otimização global; *bound contraction*; programação geométrica generalizada; envoltórias de McCormick; processo de alquilação

1 Introdução

A otimização global de modelos de sistemas de processos com não-convexidades é um desafio central no projeto e na operação de processos químicos (Floudas, 2000). Uma classe amplamente utilizada de problemas não-convexos é a Programação Geométrica Generalizada (PGG), em que a função objetivo e as restrições são expressas como diferenças de posinômios (signomiais). Problemas PGG surgem naturalmente na modelagem de redes de reatores, sistemas de troca térmica, sequências de destilação e operações de refinaria, pois as leis físicas frequentemente geram relações do tipo lei de potência entre as variáveis do processo (Maranas e Floudas, 1997).

Diversos métodos de otimização global foram propostos para PGG e classes relacionadas: métodos de *branch-and-bound* espacial com subestimadores convexos α BB (Androulakis et al., 1995), o solver BARON baseado em reformulação-linearização (Tawarmalani e Sahinidis, 2002) e estratégias de aproximação exterior por partes (Bergamini et al., 2008). Embora esses métodos forneçam garantias de convergência, eles tipicamente requerem o particionamento do espaço de variáveis em subcaixas, o que aumenta significativamente o esforço computacional devido à natureza combinatória.

Faria e Bagajewicz (2011) – F&B – propuseram um procedimento de contração de limitantes (PCL) para problemas bilineares do tipo MINLP que evita inteiramente o particionamento de variáveis. A ideia central é resolver, para cada variável, um modelo auxiliar linear de limitante inferior (ALBL) parametrizado por um valor de referência α_r . Esse valor de referência é varrido progressivamente até que o valor objetivo do ALBL supere o limitante superior (UB) corrente, identificando subregiões do espaço viável que podem ser eliminadas com segurança. O procedimento é iterativo e, nas aplicações de *pooling problems* reportadas (Faria e Bagajewicz, 2011), converge em poucas iterações.

Vale ressaltar que o escopo do PCL de Faria e Bagajewicz (2011) é restrito a termos bilineares da forma $z_{ij} = x_i y_j$, em que x_i e y_j são variáveis de decisão com coeficientes positivos. Na Programação Geométrica Generalizada, contudo, os produtos assumem frequentemente formas mais gerais: potências de variáveis (x_i^α , $\alpha \notin \{0, 1\}$),

produtos de inversos ($1/x_i$) e razões (x_i/x_j). Tais expressões podem gerar, nos produtos, pares de funções monotônicas de sentidos opostos (uma crescente (C) e outra decrescente (D)), requerendo um tratamento específico das direções das desigualdades de envoltórias. A correta identificação dessas direções é condição necessária para que o limitante inferior (LB) obtido seja válido, ou seja, satisfaça $LB \leq f^*$ (valor objetivo ótimo).

O presente trabalho estende o PCL de Faria e Bagajewicz (2011) para problemas PGG contendo produtos $z_k = \phi_1^{(k)}(x_i) \phi_2^{(k)}(x_j)$ de duas funções estritamente monótonas. As principais contribuições são: (i) caracterização formal dos quatro casos de monotonicidade (CC, CD, DC, DD) e direções correspondentes das envoltórias; (ii) identificação da degeneração dos operadores de referência originais quando $m = 1$ (um único produto por par de variáveis) e adoção das envoltórias de McCormick como resolução metodologicamente eficiente; e (iii) ilustração numérica no problema de alquilação, com todos os 17 produtos bilineares identificados e as reduções de domínio quantificadas.

2 Metodologia

2.1 Classe de problemas e transformação

Considera-se um problema PGG na forma padrão:

$$\min_{x \in \mathcal{D}} G_0(x) \quad \text{s.a.} \quad G_j(x) \leq 1, \quad j = 1, \dots, M, \quad (1)$$

em que cada $G_j(x) = G_j^+(x) - G_j^-(x)$ é um signomial, G_j^+ e G_j^- são posinômios, e $\mathcal{D} = \{x \in \mathbb{R}^n : x^L \leq x \leq x^U\}$ é um domínio do tipo caixa. A não-convexidade decorre da subtração de posinômios e de produtos da forma $\phi_1(x_i) \phi_2(x_j)$. A extensão proposta introduz variáveis auxiliares $z_k = \phi_1^{(k)}(x_i) \phi_2^{(k)}(x_j)$ para cada produto não-linear, substituindo cada produto por z_k em todas as restrições e na função objetivo. Conforme a monotonicidade de $\phi_1^{(k)}$ e $\phi_2^{(k)}$ em relação às variáveis originais x_i e x_j , surgem quatro casos: CC (ϕ_1 e ϕ_2 ambas crescentes), CD (crescente/decrescente), DC (decrescente/crescente) e DD (ambas decrescentes). Em cada caso, os dois planos do LB de McCormick são ancorados nos cantos opostos do retângulo $[\phi_1^L, \phi_1^U] \times [\phi_2^L, \phi_2^U]$: CC usa (x_i^L, x_j^L) e (x_i^U, x_j^U) ; CD usa (x_i^L, x_j^U) e (x_i^U, x_j^L) . Os dois planos do LB de McCormick para DC e DD são obtidos de forma análoga.

Em todos os quatro casos, o limitante inferior z_k^{MC} é dado pelo máximo dos dois planos afins tangentes nos cantos especificados e o limitante superior $z_k^{\text{MC,U}}$, pelo mínimo dos dois planos nos cantos restantes. A validade dessas envoltórias decorre das identidades algébricas análogas à Equação (3), adaptadas ao sinal de monotonicidade de cada função.

2.2 Envoltórias de McCormick para $K = 2$ produtos

Considere um produto $z_k = \phi_1(x_i) \phi_2(x_j)$ com $\phi_1 \in [\phi_1^L, \phi_1^U]$ e $\phi_2 \in [\phi_2^L, \phi_2^U]$ (caso CC). Embora z_k possa não ser bilinear nas variáveis originais – ϕ_1 e ϕ_2 podem ser potências, inversos ou razões de x_i e x_j – a envoltória de McCormick aplica-se diretamente, pois depende apenas dos intervalos $[\phi_1^L, \phi_1^U]$ e $[\phi_2^L, \phi_2^U]$. O limitante inferior de McCormick é (McCormick, 1976):

$$z^{\text{MC}} = \max(\phi_1^L \phi_2 + \phi_1 \phi_2^L - \phi_1^L \phi_2^L, \phi_1^U \phi_2 + \phi_1 \phi_2^U - \phi_1^U \phi_2^U) \leq \phi_1 \phi_2. \quad (2)$$

Sendo $LB_1 = \phi_1^L \phi_2 + \phi_1 \phi_2^L - \phi_1^L \phi_2^L$ e $LB_2 = \phi_1^U \phi_2 + \phi_1 \phi_2^U - \phi_1^U \phi_2^U$ os dois planos que compõem o máximo da Equação (2), a validade de $z^{\text{MC}} \leq \phi_1 \phi_2$ decorre de:

$$\phi_1 \phi_2 - LB_1 = (\phi_1 - \phi_1^L)(\phi_2 - \phi_2^L) \geq 0, \quad \phi_1 \phi_2 - LB_2 = (\phi_1^U - \phi_1)(\phi_2^U - \phi_2) \geq 0, \quad (3)$$

o que vale para todo (ϕ_1, ϕ_2) no domínio, pois cada diferença é produto de dois fatores não-negativos. O procedimento original F&B utiliza um único plano de envoltória por variável, equivalente a McCormick quando $m > 1$ produtos compartilham a mesma variável. Quando cada produto envolve um par único de variáveis ($m = 1$), esse plano colapsa para a fronteira do domínio, não fornecendo informação útil de contração. A envoltória de dois planos de McCormick resolve essa degeneração ao codificar ambos os extremos do domínio.

2.3 Algoritmo de contração de limitantes

O algoritmo mantém, a cada iteração k , um limitante superior $UB^{(k)}$ (melhor solução viável conhecida), um limitante inferior $LB^{(k)}$ (mínimo do PNL relaxado) e os intervalos correntes $[x_i^{L,(k)}, x_i^{U,(k)}]$. Na iteração k :

Passo 1 (Limitante inferior). Substitui-se cada produto z_k que aparece na função objetivo pelo subestimador $z_k^{MC} \leq z_k$ (Equação (2)), mantendo todas as restrições originais sem alteração. A substituição exclusivamente no objetivo garante $f_{rel}(x) \leq f(x)$ em todo ponto viável, de modo que $LB = \min f_{rel} \leq f^*$, sem necessidade de analisar o sinal de z_k em cada restrição (como na restrição (R13), que também contém $z_1 = x_1 x_6$). O minimizador do PNL relaxado, obtido via multi-partida com fmincon/SQP, fornece $LB^{(k)} \leq f^*$.

Passo 2 (Limitante superior). Resolve-se o PNL original (1) com multipartida no domínio corrente, usando a solução do Passo 1 como ponto de partida adicional. Se o melhor ponto viável $\hat{x}$ satisfizer $f(\hat{x}) < UB^{(k-1)}$, atualiza-se $UB^{(k)} \leftarrow f(\hat{x})$.

Passo 3 (Contração de domínio). Para cada x_i , percorre-se uma grade de N_p valores $\tilde{x}_i^{(s)}$ em $[x_i^{L,(k)}, x_i^{U,(k)}]$. Para cada tentativa, fixa-se $x_i = \tilde{x}_i^{(s)}$ e resolve-se o PNL relaxado. Se o mínimo superar $UB^{(k)}$, a sub-região é provadamente subótima e eliminada, atualizando $x_i^{L,(k+1)}$ (varredura da esquerda) ou $x_i^{U,(k+1)}$ (varredura da direita).

Critério de parada. O algoritmo termina quando $(UB^{(k)} - LB^{(k)})/UB^{(k)} < \varepsilon = 0,05\%$, garantindo $f^* \in [LB^{(k)}, UB^{(k)}]$.

3 Aplicação: Processo de Alquilação

3.1 Formulação do problema

O problema de otimização do processo de alquilação (Dembo, 1976; Floudas et al., 1999) minimiza o custo operacional de uma unidade catalítica. O modelo possui 7 variáveis contínuas: x_1 (vazão de olefina, bbl/dia), x_2 (reciclo de isobutano, bbl/dia), x_3 (taxa de adição de ácido, lb/h), x_4 (rendimento de alquilato, bbl/dia), x_5 (reposição de isobutano, bbl/dia), x_6 (teor de ácido, % m/m) e x_7 (número de octano motor, MON). A função objetivo e as 14 restrições signomiais (R1–R14) são:

$$\min \quad \text{obj} = c_1 x_1 + c_2 x_1 x_6 + c_3 x_3 + c_4 x_2 + c_5 - c_6 x_3 x_5 \quad (4)$$

$$\text{s.a} \quad c_7 x_6^2 + c_8 x_1^{-1} x_3 - c_9 x_6 \leq 1 \quad (R1)$$

$$c_{10} x_1 x_3^{-1} + c_{11} x_1 x_3^{-1} x_6^{-1} - c_{12} x_1 x_3^{-1} x_6^2 \leq 1 \quad (R2)$$

$$c_{13} x_6^2 + c_{14} x_5 - c_{15} x_4 - c_{16} x_6 \leq 1 \quad (R3)$$

$$c_{17} x_5^{-1} + c_{18} x_5^{-1} x_6 + c_{19} x_4 x_5^{-1} - c_{20} x_5^{-1} x_6^2 \leq 1 \quad (R4)$$

$$c_{21} x_7 + c_{22} x_2 x_3^{-1} x_4^{-1} - c_{23} x_2 x_3^{-1} \leq 1 \quad (R5)$$

$$c_{24} x_7^{-1} + c_{25} x_2 x_3^{-1} x_7^{-1} - c_{26} x_2 x_3^{-1} x_4^{-1} x_7^{-1} \leq 1 \quad (R6)$$

$$c_{27} x_5^{-1} + c_{28} x_5^{-1} x_7 \leq 1 \quad (R7)$$

$$c_{29} x_5 - c_{30} x_7 \leq 1 \quad (R8)$$

$$c_{31} x_3 - c_{32} x_1 \leq 1 \quad (R9)$$

$$c_{33} x_1 x_3^{-1} + c_{34} x_3^{-1} \leq 1 \quad (R10)$$

$$c_{35} x_2 x_3^{-1} x_4^{-1} - c_{36} x_2 x_3^{-1} \leq 1 \quad (R11)$$

$$c_{37} x_4 + c_{38} x_2^{-1} x_3 x_4 \leq 1 \quad (R12)$$

$$c_{39} x_1 x_6 + c_{40} x_1 - c_{41} x_3 \leq 1 \quad (R13)$$

$$c_{42} x_1^{-1} x_3 + c_{43} x_1^{-1} - c_{44} x_6 \leq 1 \quad (R14)$$

$$1500 \leq x_1 \leq 2000, \quad 1 \leq x_2 \leq 120, \quad 3000 \leq x_3 \leq 3500$$

$$85 \leq x_4 \leq 93, \quad 90 \leq x_5 \leq 95, \quad 3 \leq x_6 \leq 12, \quad 145 \leq x_7 \leq 162$$

Os coeficientes c_i , $i = 1, \dots, 44$, são dados na Tabela 1.

A solução global reportada é $f^* = 1227,23$ em $x^* = (1698,18; 53,66; 3031,30; 90,11; 95; 10,50; 153,53)$, com as restrições R1, R3, R6, R7 e R9 ativas.

Tabela 1: Coeficientes do Problema 1 (Dembo, 1976; Handbook, Cap. 7, TP1).

i	c_i	i	c_i	i	c_i
1	1,715	16	$1,9120592 \times 10^{-2}$	31	$6,1 \times 10^{-4}$
2	$3,5 \times 10^{-2}$	17	$5,685075 \times 10^1$	32	$5,0 \times 10^{-4}$
3	4,0565	18	1,08702	33	$8,196720 \times 10^{-1}$
4	10,0	19	$3,2175 \times 10^{-1}$	34	$8,196720 \times 10^{-1}$
5	3000	20	$3,762 \times 10^{-2}$	35	$2,45 \times 10^4$
6	$6,3 \times 10^{-2}$	21	$6,198 \times 10^{-3}$	36	$2,50 \times 10^2$
7	$5,9553571 \times 10^{-3}$	22	$2,4623121 \times 10^3$	37	$1,0204082 \times 10^{-2}$
8	$8,8392857 \times 10^{-1}$	23	$2,5125634 \times 10^1$	38	$1,2244898 \times 10^{-5}$
9	$1,175625 \times 10^{-1}$	24	$1,6118996 \times 10^2$	39	$6,25 \times 10^{-5}$
10	1,1088	25	$5,0 \times 10^3$	40	$6,25 \times 10^{-5}$
11	$1,303533 \times 10^{-1}$	26	$4,89510 \times 10^5$	41	$7,625 \times 10^{-5}$
12	$6,6033 \times 10^{-3}$	27	$4,4333333 \times 10^1$	42	1,22
13	$6,6173269 \times 10^{-4}$	28	$3,3 \times 10^{-1}$	43	1,0
14	$1,7239878 \times 10^{-2}$	29	$2,2556 \times 10^{-2}$	44	1,0
15	$5,6595559 \times 10^{-3}$	30	$7,595 \times 10^{-3}$		

3.2 Transformação em $K = 2$ produtos

Identificando todos os produtos de duas funções na função objetivo (4) e nas restrições R1–R14, obtêm-se 17 produtos distintos $K = 2$ listados na Tabela 2. Cinco subfatores auxiliares são introduzidos: $p = x_1/x_3$, $r = x_2/x_3$, $v = 1/x_5$, $u = 1/(x_4x_7)$ e $a = x_4/x_2$. O problema transformado possui 29 variáveis (7 originais + 5 subfatores + 17 produtos).

Tabela 2: Os 17 produtos $K = 2$ no problema de alocação transformado.

k	Produto z_k	Caso	Ocorre em	$[z_k^L, z_k^U]$
1	x_1x_6	CC	obj, R13	$[4,5 \times 10^3, 2,4 \times 10^4]$
2	x_3x_5	CC	obj	$[2,7 \times 10^5, 3,3 \times 10^5]$
3	x_6^2	CC	R1, R3	[9, 144]
4	$p \cdot x_6$	CC	R2	[0,43, 8,00]
5	$p \cdot x_6^2$	CC	R2	[1,29, 96,0]
6	$v \cdot x_6$	CD	R4	[0,032, 0,133]
7	$v \cdot x_4$	CD	R4	[0,895, 1,033]
8	$v \cdot x_6^2$	CD	R4	[0,095, 1,600]
9	$r \cdot (1/x_4)$	DC	R5, R11	$[9,5 \times 10^{-5}, 1,4 \times 10^{-2}]$
10	r/x_7	DC	R6	$[5,9 \times 10^{-5}, 8,3 \times 10^{-3}]$
11	$r \cdot u$	CC	R6	$[6,5 \times 10^{-8}, 1,0 \times 10^{-4}]$
12	$v \cdot x_7$	CD	R7	[0,910, 1,056]
13	$x_3 \cdot a$	CC	R12	[0,255, 420]
14–17	subfatores p, v, r, u	CC/CD/DC/DD	R2–R12	(limites derivados)

3.3 Resultados e discussão

O algoritmo foi implementado em MATLAB. Diferentemente do F&B, que resolve problemas lineares (a linearização ALBL converte cada produto em expressão linear em y_j), a extensão resolve PNLs, pois as envoltórias de McCormick preservam a não-linearidade. Para contornar ótimos locais, utilizou-se fmincon (SQP) com 40 pontos iniciais aleatórios por chamada. No Passo 3, a varredura contínua do parâmetro $s \in [0, 1]$ com passo Δs fixo do F&B (em LP) foi substituída por uma grade discreta de $N_p = 12$ pontos por variável. A tolerância foi fixada em $\varepsilon = 0,05\%$.

A Tabela 3 resume o histórico de convergência. A relaxação de McCormick fornece um limitante inferior

inicial de 1.219,24, correspondendo a um gap de 0,65 % em relação ao ótimo global. Esse gap inicial notavelmente estreito contrasta com o limitante degenerado de $-1.813,4$ (gap ≈ 248 %) produzido quando o procedimento F&B é aplicado diretamente com um único plano de envoltória, evidenciando a importância fundamental da extensão de dois planos de McCormick para o caso $m = 1$. O algoritmo converge para um gap de 0,02 % em 4 iterações, dentro da tolerância de 0,05 %.

Tabela 3: Convergência do procedimento estendido de contração de limitantes.

Iteração	LB	UB	Gap (%)	Contrações significativas
0	1.219,24	1.227,23	0,65	—
1	1.223,26	1.227,23	0,32	$x_6 \in [5,25, 11,55]$; $x_1 \in [1559, 1909]$
2	1.225,27	1.227,23	0,16	$x_6 \in [6,83, 11,24]$; $x_1 \in [1601, 1846]$
3	1.226,26	1.227,23	0,08	$x_6 \in [7,93, 11,01]$; $x_1 \in [1630, 1802]$
4	1.226,95	1.227,23	0,02	$x_6 \in [8,70, 10,86]$; $x_1 \in [1651, 1771]$

As reduções de domínio após a convergência são mostradas na Tabela 4. As variáveis x_1 (vazão de olefina) e x_6 (teor de ácido) apresentam as maiores contrações, cada uma reduzida em 76 %. Essas são precisamente as duas variáveis que formam o produto bilinear $z_1 = x_1 x_6$ na função objetivo (4), sugerindo que a relaxação de McCormick dos produtos da função objetivo é o principal motor da contração efetiva. As variáveis x_3 e x_4 apresentam reduções intermediárias de 43 % e 39 %, enquanto x_5 exibe a menor contração (10 %), consistente com $x_5^* = 95$ estando no limite superior.

Tabela 4: Redução do domínio das variáveis após convergência (4 iterações).

Variável	x^L inicial	x^U inicial	x^L final	x^U final	Redução (%)
x_1	1.500	2.000	1.651	1.771	76
x_2	1	120	17,2	104,6	27
x_3	3.000	3.500	3.100	3.385	43
x_4	85	93	86,5	91,4	39
x_5	90	95	90,5	95,0	10
x_6	3	12	8,7	10,9	76
x_7	145	162	146,4	158,3	30

O comportamento de convergência é coerente com as propriedades teóricas das envoltórias de McCormick. A folga pontual vale $\min[(\phi_1 - \phi_1^L)(\phi_2 - \phi_2^L), (\phi_1^U - \phi_1)(\phi_2^U - \phi_2)]$, cujo máximo sobre o domínio é atingido no ponto médio $(\bar{\phi}_1, \bar{\phi}_2)$, em que ambas as parcelas valem $(\Delta_1/2)(\Delta_2/2)$ com $\Delta_k = \phi_k^U - \phi_k^L$. Sendo $h = \max(\Delta_1, \Delta_2)$ o diâmetro do domínio:

$$\max_{\mathcal{D}} [\phi_1 \phi_2 - z^{\text{MC}}] = \frac{\Delta_1 \Delta_2}{4} \leq \frac{h^2}{4} = O(h^2). \quad (5)$$

A análise das restrições ativas no ótimo (R1, R3, R6, R7 e R9) revela o mecanismo físico que governa a convergência. As restrições R1 e R9 impõem limites sobre a concentração de ácido e a relação entre vazão de olefina e taxa de adição de ácido; R3 restringe a qualidade do produto em função do teor de ácido e do número de octano; R6 e R7 controlam, respectivamente, o balanço de reciclo e a razão de isobutano. A contração acelerada de x_6 de $[3, 12]$ para $[8,7; 10,9]$ decorre exatamente da presença de x_6 em R1, R3 e R7 com coeficientes de magnitudes distintas, o que torna o conjunto viável estreito nessa direção. O fato de $x_5^* = 95$ coincidir com o limite superior explica a reduzida contração de x_5 (10 %): a envoltória de McCormick de $z_2 = x_3 x_5$ torna-se praticamente exata quando x_5 está fixado em sua fronteira, e pouca informação adicional é extraída ao varrer esse intervalo.

As 4 iterações totalizaram 656 chamadas ao solver fmincon/SQP ($4 \times 7 \times 12$ na fase de contração, 4×40 no LB e 4×40 no UB). Os testes foram realizados em um MacBook Pro com chip Apple M4 e 24 GB de memória RAM; o tempo total de execução foi inferior a 2 segundos. Esse esforço é muito inferior ao de métodos de *Branch-and-Bound*, que requerem a resolução de subproblemas em cada nó de uma árvore de busca exponencialmente crescente.

4 Conclusões

Este trabalho apresentou uma extensão do procedimento de contração de limites de Faria e Bagajewicz (2011) para problemas PGG com $K = 2$ produtos de funções estritamente monótonas. As principais contribuições são:

(i) *Identificação da degeneração com $m = 1$.* Quando cada produto bilinear envolve um par único de variáveis, os operadores de referência originais de Faria e Bagajewicz (2011) colapsam para a fronteira do domínio, sem fornecer contração. A envoltória de dois planos de McCormick (1976) resolve isso ao codificar ambos os extremos do domínio da variável.

(ii) *Formulação de limitante inferior válido.* Substituir os produtos bilineares no objetivo por subestimadores de McCormick, mantendo todas as restrições originais, produz um PNL relaxado cujo valor ótimo é comprovadamente um limitante inferior do ótimo global.

(iii) *Convergência eficiente no benchmark de alquilação.* O PCL estendido alcança um gap de 0,02 % em 4 iterações, partindo de um gap inicial de 0,65 %, com reduções de domínio de até 76 % nas variáveis mais sensíveis.

Trabalhos futuros estenderão a análise ao conjunto completo de 17 produtos $K = 2$ (incluindo os presentes nas restrições), compararão o desempenho com BARON e α BB na suite completa de *benchmarks* de Floudas et al. (1999), investigarão a taxa de convergência sob contração simultânea de múltiplas variáveis e formalizarão a prova de convergência finita com limitante explícito no número de iterações.

Agradecimentos: Os autores agradecem ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da UEM, à Capes, ao CNPq e à Fundação Araucária.

Referências

- Androulakis, I. P., Maranas, C. D., & Floudas, C. A. (1995). α BB: A global optimization method for general constrained nonconvex problems. *Journal of Global Optimization*, 7(4), 337–363.
- Bergamini, M. L., Grossmann, I., Scenna, N., & Aguirre, P. (2008). An improved piecewise outer-approximation algorithm for the global optimization of MINLP models involving concave and bilinear terms. *Computers and Chemical Engineering*, 32(3), 477–493.
- Dembo, R. S. (1976). A set of geometric programming test problems and their solutions. *Mathematical Programming*, 10(1), 192–213.
- Faria, D. C., & Bagajewicz, M. J. (2011). Novel bound contraction procedure for global optimization of bilinear MINLP problems with applications to water management problems. *Computers and Chemical Engineering*, 35(3), 446–455.
- Floudas, C. A., Pardalos, P. M., Adjiman, C., Esposito, W. R., Gümüs, Z. H., Harding, S. T., Klepeis, J. L., Meyer, C. A., & Schweiger, C. A. (1999). *Handbook of Test Problems in Local and Global Optimization*. Kluwer Academic Publishers.
- Floudas, C. A. (2000). *Deterministic Global Optimization: Theory, Methods and Applications*. Kluwer Academic Publishers.
- Maranas, C. D., & Floudas, C. A. (1997). Global optimization in generalized geometric programming. *Computers and Chemical Engineering*, 21(4), 351–369.
- McCormick, G. P. (1976). Computability of global solutions to factorable nonconvex programs: Part I – Convex underestimating problems. *Mathematical Programming*, 10(1), 147–175.
- Tawarmalani, M., & Sahinidis, N. V. (2002). *Convexification and Global Optimization in Continuous and Mixed-Integer Nonlinear Programming*. Kluwer Academic Publishers.