



PROGRAMA DE DISCIPLINA

DISCIPLINA:		GDPEQ0121 OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS - 60h			
PRÉ-REQUISITO:		Estequiometria Industrial. Cálculo Numérico.			
CARGA HORÁRIA: 60 horas				CRÉDITOS	ANO
TEÓRICA: 50 %	PRÁTICA: 50 %	ESTÁGIO: 0%	TOTAL: 100%	04	2018

EMENTA

Introdução, conceitos e definições de problemas de Otimização. Análise econômica de processos químicos. Conceitos matemáticos fundamentais. Formulação de um problema de Otimização. Problemas de Otimização Unidimensional Sem Restrições. Problemas de Otimização Multidimensional Sem Restrições. Ajuste de Modelos Matemáticos. Programação Linear (PL).

OBJETIVOS

Apresentar os conceitos básicos e procedimentos de otimização. Habilitar o aluno para: efetuar a síntese de processos através da escolha de rotas químicas e sequências ótimas de operações unitárias; formular e solucionar problemas de otimização no projeto de equipamentos e processos das indústrias químicas e petroquímicas; e utilizar recursos de *software* em busca da otimização uni/multidimensional de processos químicos.

METODOLOGIA

Aula expositiva;
Quadro e recursos multimídia;
Software de programação, modelagem e simulação de processos;
Resolução de exercícios;
Visita técnica industrial.

AVALIAÇÃO

02 provas (60 pontos). 02 listas de exercícios (10 pontos). 02 trabalhos computacionais (15 pontos).



CONTEÚDO PROGRAMÁTICO

- 1. Introdução, conceitos e definições sobre otimização.** O que é otimização; Por que otimizar?; Escopo e Hierarquia de Otimização; Exemplos de Aplicações de Otimização; As características essenciais da otimização; Procedimento Geral para Resolução de Problemas de Otimização; Obstáculos à Otimização;
- 2. Análise econômica de processos químicos.** O papel da análise econômica para o processo; Custo de Capital para Novo Design e para o Retrofit; Custo Anualizado de Capital; Custo de Operação; Critérios Econômicos Simples; Fluxo de Caixa e Avaliação Econômica do projeto; Critérios de investimento; Economia do Processo;
- 3. Conceitos matemáticos fundamentais:** Operações com Matrizes e Vetores; Independência Linear, Matriz Singular e Posto de uma Matriz; Soluções de sistemas; Graus de Liberdade; autovalores e autovetores. Continuidade de Funções; Funções unimodais e multimodais, côncavas e Convexas; Condições necessárias e Condições Suficientes para um Extremo de uma Função Irrestrita; Interpretação da Função Objetivo em Termos de uma Aproximação Quadrática;
- 4. Formulação de um Problema de Otimização:** A Função Objetivo (FO); Tolerância ou Critério de Parada; Objetivos Econômicos e Operacionais; Combinação de Objetivos Operacionais com Objetivos Econômicos; Funções de Restrição (FR) Otimização On-Line.
- 5. Problemas de Otimização Unidimensional Sem Restrições:** Métodos Indiretos (MI) para OUSR; Método de Newton; Método de Quasi-Newton; Método da Secante; Métodos Diretos (MD) para OUSR; Avaliação dos Métodos Unidimensionais de Otimização;
- 6. Problemas de Otimização Multidimensional Sem Restrições:** Métodos Indiretos (MI) para OMSR; Método do Gradiente ou Método do Gradiente Descendente; Método do Gradiente Conjugado; Método de Newton; Método de Levenberg-Marquardt; Método da Secante ou Quasi-Newton; Métodos Diretos (MD) para OMSR; Busca Randômica; Grade de Busca; Busca Unidimensional; Método Simplex ou do Poliedro Flexível; Avaliação dos MD's e MI's para Problemas de OMSR;
- 7. Ajuste de Modelos Matemáticos.** Ajuste de Modelos Lineares nos Parâmetros Com uma Variável independente; Escolha da Forma do Modelo Linear; Ajuste do Modelo Linear Univariável; Ajuste de Modelos Lineares de Várias Variáveis; Ajuste de Modelos Matemáticos Não-Lineares; Ajuste de Modelos por Métodos Diretos - Método do Poliedro Flexível; Ajuste de Modelos por Métodos Indiretos; Procedimento Geral para Ajuste de Modelos
- 8. Programação Linear (PL):** Convertendo Problemas para a Forma Padrão da PL; A Dualidade em Programação Linear; Análise de Sensibilidade em PL; Programação Linear Sucessiva (PLS);
- 9. Programação não-linear com restrições:** Substituição direta; Condições necessárias de Primeira Ordem para um Extremo Local: Problemas que contenham apenas restrições de igualdade/ Problemas que contenham apenas restrições de desigualdade/Problemas que contêm Restrições de Igualdade e Desigualdade;
- 10. Programação Quadrática:** Métodos de Penalidade (função penalidade), Barreira e Lagrangeiro Aumentado; Programação Linear Sucessiva; Penalidade Programação Linear Sucessiva; Programação Quadrática Sucessiva; O Método do Gradiente Reduzido Generalizado; Vantagens e Desvantagens Relativas dos Métodos de PNL; *Software* de PNL disponível; Otimizadores para Operação Independente e aplicações; Otimizadores de planilhas; Sistemas de Modelagem; Usando o software NLP
- 11. Multiplicadores de Lagrange:** Análise de Sensibilidade por Multiplicadores de Lagrange; Condições de Kuhn-Tucker – CKT; Vantagens e Desvantagens dos



Multiplicadores de Lagrange;

12. **Programação Quadrática – PQ e Programação Inteira e Mista – PIM:** *Branch and Bound Techniques*.

13. **Intensificação de Processo (PI);**

14. **Problemas aplicados à engenharia química:** processos de troca de calor; sistemas de fluxos de fluidos; processos de separação; operação de reatores em condições ótimas; otimização em projeto e operações de grandes plantas; integração energética; microprocessamentos; Otimização em tempo real;

BIBLIOGRAFIA

HIMMELBLAU, D. M. AND EDGAR, T. F.; *Optimization of Chemical Process*. Second Edition, McGraw-Hill, 2001.

FLOUDAS, C. A.; AND PARDALOS, P. M. (Eds.). *Encyclopedia of Optimization*. Second Edition, Springer Science BusinessMedia, 2009.

SMITH, R. (ROBIN). *Chemical process design and integration*. John Wiley & Sons, 2005.

HIMMELBLAU, D. M.; *Process Analysis by Statistical Methods*. John Wiley & Sons, 1970.

BEVERIDGE, G. S. AND SCHEHTER, R. S.; *Optimization Theory and Practice*. McGraw-Hill, 1970.

KALID, RICARDO DE A., *Otimização de Processos Químicos*. Departamento de Engenharia de Química, Universidade Federal da Bahia, material não publicado;

REKLAITIS, G. V.; RAVINDRAN, A.; RAGSDELL, K. M.; *Engineering Optimization: Methods and Applications*. John Wiley & Sons, 1983.

SEIDER JD AND WARREN D. *Product & process design principles: synthesis, analysis and evaluation*. 2nd edn. Wiley, 2003.

PILLO, G., ROMA, M., “*Large Scale Nonlinear Optimization*”, Springer, 2006

BARTHOLOMEW-BIGGS, M., “*Nonlinear Optimization with Engineering Applications*”, Springer, 2008

BANGERT, P. “*Optimization for Industrial Problems*”, Springer, 2012