



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA



Código Disciplina/Nome: EQE 002- Otimização em Engenharia Química
Tipo: Disciplina Complementar de Escolha Condicionada
Carga Horária Teórica : 45 h Prática: 0 h
Cursos : Disciplina de Escolha Condicionada para os cursos de Engenharia Química, Engenharia de Alimentos e Engenharia de Bioprocessos.
Pré-requisito:
Créditos: 03
Objetivo: Habilitar o aluno a formular e resolver problemas de otimização no projeto de equipamentos e de processos da indústria química.
Ementa: Conceitos básicos e formulação de problemas de otimização. Otimização unidimensional sem restrições : resolução formal e métodos numéricos, caracterização de extremos. Otimização multidimensional sem restrições : resolução formal, caracterização de extremos, métodos numéricos. Aplicações no projeto de equipamentos e otimização de processos. Regressão linear múltipla : ajuste de parâmetros a partir de dados experimentais. Regressão não-linear múltipla. Programação linear : método Simplex. Otimização não linear com restrições de igualdade e desigualdade : multiplicadores de Lagrange e introdução à programação quadrática sucessiva.
Conteúdo Programático: 1.Introdução. A Natureza e a Organização dos Problemas de Otimização. Formulação de Funções Objetivo : Medidas de Custo e Lucratividade de Processos Químicos. (3horas) 2.Conceitos Básicos. Funções Contínuas, Funções Unimodais e Multimodais, Funções Côncavas e Convexas. Domínios Convexos. Caracterização de Extremos em Uma ou Várias Dimensões a partir do Comportamento Quadrático da Função Objetivo. Matriz Hessiana. Ponto Estacionário de Funções. (4 horas) 3.Otimização Unidimensional sem Restrições. Métodos Diretos por Eliminação de Região : Busca Binária e o Método da Seção Áurea. Métodos Indiretos : Newton, Quase-Newton e Secante. Métodos de Aproximação Polinomial. Aplicações na Otimização de Processos Químicos com uma Variável de Projeto: Pressão em Evaporadores de Dois Efeitos, Razão de Refluxo de Colunas de Destilação. (5 horas) 4.Otimização Multidimensional sem Restrições. Métodos Diretos : Busca Aleatória, Busca Unidimensional, Método Simplex, Direções Conjugadas e o Método de Powell. Métodos Indiretos de Ordem 1 : Método do Gradiente e Método do Gradiente Conjugado. Métodos Indiretos de Ordem 2 : Método de Newton, Método de

Marquardt. Métodos Secante e Aproximações para Matriz Hessiana e sua Inversa. Aplicações na Otimização de Processos Químicos com 2 ou mais Variáveis de Projeto : Sistemas de Reatores Químicos em Série, Otimização de Redes de Troca Térmica, Otimização de Estruturas de Reação-Separação-Reciclo. (7 horas)

5. Regressão Múltipla Linear e Não Linear : Estimção de Parâmetros com o Método dos Mínimos Quadrados em Modelos Lineares e Não Lineares. Método Gauss-Newton. Ajuste de Parâmetros de Modelos a partir de Dados Experimentais. (5 horas)

6. Programação Linear. Conceitos Básicos. Método Simplex. Análise de Sensibilidade. Dualidade em Programação Linear. Algoritmo Karmarkar. Aplicações em Problemas de Otimização da Manufatura e Distribuição de Produtos Químicos. (6 horas)

7. Otimização Não Linear com Restrições : Multiplicadores de Lagrange. Condições de Otimalidade. Método do Gradiente Reduzido. Introdução à Programação Quadrática Sucessiva. Aplicações na de Projetos de Processos Químicos com Restrições de Especificações de Produtos : Otimização de Sistemas de Evaporadores com Múltiplos Efeitos, Otimização de Sequências de Colunas de Destilação. (6 horas)

Bibliografia Recomendada (no mínimo 3)

1. BEVERIDGE, G. and SCHECHTER, R. "Optimization: Theory and Practice" McGraw-Hill, New York, 1970.
2. WILDE, D. and BEIGHTLER, C. "Foundations of Optimization". Prentice Hall, Englewood-Cliffs, 1967.
3. EDGAR, T.F. and HIMMELBLAU, D.M. "Optimization of Chemical Processes", McGraw-Hill, New York, 1989

Bibliografia Complementar (no mínimo 5)

1. FLOUDAS, C.A., "Nonlinear and Mixed-Integer Optimization", Oxford University Press, Oxford, 1995
2. Pillo, G., Roma, M., "Large Scale Nonlinear Optimization", Springer, 2006
3. Bartholomew-Biggs, M., "Nonlinear Optimization with Engineering Applications", Springer, 2008
4. Bangert, P., "Optimization for Industrial Problems", Springer, 2012
5. Snyman, J., "Practical Mathematical Optimization", Springer, 2005