UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

COPPE

PROGRAMA DE ENGENHARIA QUÍMICA

— Otimização de Processos —

Prof. Argimiro R. Secchi

Lista de Exercícios

1) A engenheira Diana Prince, responsável por um determinado processo químico, notou, ainda na fase de projeto da planta, a ocorrência da reação de hidrogenação do eteno:

$$\underbrace{C_2H_4}_{n_2} + \underbrace{H_2}_{n_3} \leftrightarrow \underbrace{C_2H_6}_{n_1}$$

que para fins do processo em questão é indesejada. Querendo saber a quantidade de eteno que seria perdida no processo, Diana decidiu calcular o número de mols n_1, n_2 e n_3 das espécies em equilíbrio, lembrando que, no equilíbrio, a energia de Gibbs total do sistema, $G_t(n_1, n_2, n_3)$ é mínima. Sabendo que as espécies atômicas se conservam, qual foi o problema de otimização formulado pela Eng. Diana?

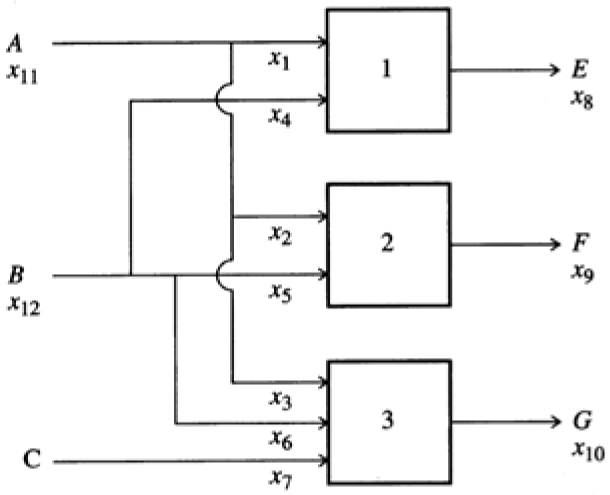
2) Dada a função objetivo $S(x_1, x_2) = 7{,}5\, x_1^2 + 12\, x_2^2 - 3\, x_1^2\, x_2^2 + 18\, x_1 + 11$, determine a localização e a natureza (mínimo, máximo ou sela) dos seus pontos estacionários. Esboce o gráfico da superfície da função objetivo em função de x_1 e x_2 e outro gráfico com 50 curvas de níveis, ambos contendo todos os pontos estacionários encontrados. Indique no segundo gráfico a localização dos pontos estacionários.

3) Resolver 10 problemas de otimização multivariável sem restrições, obtidos do site https://en.wikipedia.org/wiki/Test_functions_for_optimization ou de outras fontes (dadas as referências), usando 5 métodos de otimização e compará-los usando as 4 métricas de desempenho.

4) A engenheira Fiona, responsável pela operação da Unidade de Extração por Solvente (UES) de uma indústria química, recebeu a incumbência de encontrar condições operacionais que fossem lucrativas para a UES para evitar o seu desligamento. A avaliação econômica realizada pela Eng. Fiona resultou na seguinte função lucro: $L(\boldsymbol{x}) = a - \frac{b}{x_1} - c\,x_2 - d\,\frac{x_1}{x_2}$, em que x_1 e x_2 são as razões mássicas do produto que deixam cada estágio de extração na corrente rafinada, com $x_1 \leq 0{,}02$ e $x_2 \leq x_1$, e a = 129,93, b = 0,5, c = 4000, d = 25 são constantes. A condição de operação atual é dada por: $x_1 = 0{,}015$ e $x_2 = 0{,}001$. **(a)** Qual é o valor da função lucro na condição atual? **(b)** Qual a condição de máximo lucro encontrada pela Eng. Fiona e o valor da função lucro nessa nova condição, sabendo que a solução foi **irrestrita**? **(c)** Mostre que a nova condição é realmente um ponto de máximo; **(d)** Após operar vários meses nessa nova condição, a falta de solvente no mercado aumentou em quatro vezes o seu preço, modificando as constantes da função lucro para a = 279,72, b = 2,0, c = 4000, d = 100. Se a planta continuasse a operar nas mesmas condições encontradas em (b), qual seria o valor da função lucro? Qual foi a decisão tomada pela Eng. Fiona nessa nova condição do mercado? Por quê?

5) Determine as dimensões do paralelepípedo, cuja diagonal tem um comprimento *d*, que apresenta o maior volume possível.

6) Considerando uma planta projetada para a produção de uma variedade de produtos, conforme ilustrado na figura abaixo:



Processo 1: $A + B \rightarrow E$

Processo 2: $A + B \rightarrow F$

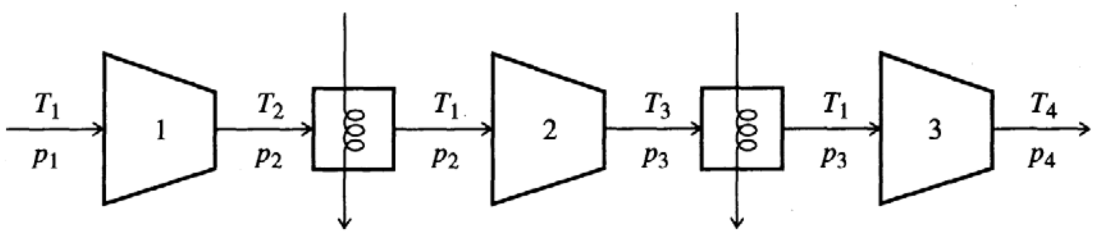
Processo 3: $3A + 2B + C \rightarrow G$

A engenheira Leia ficou encarregada de maximizar o lucro da unidade, limitado à capacidade operacional e sem deixar de atender à demanda do mercado. Os dados de processo econômicos por ela obtidos estão dispostos na tabela a seguir:

Matéria Prima	Oferta (kg/dia)	Custo (R$/kg)	Processo	Produto	Demanda (kg/dia)	Relação Estequiométrica (kg/kg)	Custo de Processa-mento (R$/kg)	Preço de Venda (R$/kg)
A	40.000	1,50	1	E	20.000	2/3A, 1/3B	1,50	4,00
B	30.000	2,00	2	F	15.000	2/3A, 1/3B	0,50	3,30
C	25.000	2,50	3	G	25.000	1/2A, 1/6B, 1/3C	1,00	3,80

(a) Qual foi a formulação do problema de otimização elaborado pela Eng. Leia? **(b)** Qual foi a solução obtida? **(c)** Qual seria a solução se não houvesse demanda mínima?

7) Determine o trabalho mínimo do sistema de compressão abaixo, considerando compressão adiabática de gás ideal: $W = \dfrac{k\,R\,T_1}{k-1}\left[\left(\dfrac{p_2}{p_1}\right)^{\frac{(k-1)}{k}} + \left(\dfrac{p_3}{p_2}\right)^{\frac{(k-1)}{k}} + \left(\dfrac{p_4}{p_3}\right)^{\frac{(k-1)}{k}} - 3\right]$



Dados k = 1,4, p_1 = 100 kPa, p_4 = 1000 kPa e T_1 = 300 K. **(a)** Esboce a função objetivo e suas curvas de níveis em função de p_2 e p_3. **(b)** Utilize os métodos de Rosembrock, Powell, *steepest descent*, gradiente conjugado, BFGS e DFP para obter a solução ótima e compare os resultados obtidos.

8) Resolva novamente os exercícios (4b) e (4d) utilizando o método SQP e levando-se em conta as restrições do problema e $L(x) \geq 0$.