



XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

OTIMIZAÇÃO DE PROBLEMAS DE ENGENHARIA QUÍMICA UTILIZANDO O SOFTWARE EMSO

J. P. HENRIQUE¹, A. R. SECCHI², M. A. S. S. RAVAGNANI³, C. B. B. COSTA³

¹ Universidade Federal de São Carlos, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

² Universidade Federal do Rio de Janeiro, Instituto Alberto Luiz de Coimbra de Pós-Graduação e Pesquisa de Engenharia (COPPE)

³ Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: cbbcosta@uem.br

RESUMO – *O EMSO, software livre para fins de ensino e pesquisa acadêmica, apresenta um ambiente favorável à simulação e otimização de problemas de engenharia química, por permitir a visualização e edição de modelos utilizando linguagem própria. Ademais, o software permite que novos códigos (solvers) criados pelo usuário sejam inseridos, o que se estende a códigos de algoritmos de otimização. Considerando esta ampla versatilidade e abrangência de aplicação, o objetivo deste trabalho foi modelar no EMSO problemas de otimização não linear (NLP), linear inteira-mista (MILP) e não linear inteira-mista (MINLP), tanto mono quanto multiobjetivos. Algoritmos determinísticos e um não determinístico, inserido no EMSO como solver, foram utilizados na solução dos problemas. Os resultados demonstram a eficácia do EMSO para a solução de problemas de otimização em engenharia química, uma vez que todos os problemas foram resolvidos, obtendo, inclusive, resultados melhores do que os publicados na literatura.*

1. INTRODUÇÃO

Atualmente estão disponíveis comercialmente diversos simuladores de sistemas e processos químicos que podem ser basicamente divididos em dois grupos: simulador modular sequencial, como o Aspen Plus[®] e HYSYS Process[®] e os simuladores baseados em equações como o gPROMS[®], Aspen Dynamics[®] e o EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) (Soares e Secchi, 2003). A interface gráfica do EMSO combina o desenvolvimento de modelos, construção de fluxogramas, simulação e otimização de processos químicos (Rodrigues *et al.*, 2010). Com uma biblioteca dinâmica com diversos algoritmos de solução de equações algébricas e diferenciais, este software permite a adição de novos *plugins* (cálculo de propriedades termodinâmicas, interface com outros softwares, etc.) e adição de *solvers* para solução de problemas de otimização ou interpolação de dados (Furlan *et al.*, 2016).

Diante da grande possibilidade de aplicações por meio desse software, este trabalho teve como objetivo a sua utilização na otimização de problemas clássicos de engenharia química e a comparação de resultados com aqueles publicados na literatura.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

2. MODELOS DE OTIMIZAÇÃO

2.1. Programação mono-objetivo não linear (NLP)

Para essa otimização mono-objetivo foi desenvolvido um modelo com três reatores perfeitamente agitados (*CSTR - Continuous Stirred-tank Reactor*) em série, com o propósito de encontrar os volumes dos reatores 1, 2 e 3 de forma que minimize a concentração do reagente A na saída do terceiro reator (C_{A3}). O modelo foi implementado de acordo com a equação de consumo desse reagente (Equação 1), além dos parâmetros e variáveis descritas abaixo.

$$r_{Ai} = k C_{Ai}^{1,5}, \quad i = \{1, 2, 3\} \quad (1)$$

$$F_0(C_{Ai-1} - C_{Ai}) = r_{Ai} V_i, \quad i = \{1, 2, 3\} \quad (2)$$

em que: F_0 : vazão volumétrica constante [m^3/h];

C_{A0} é a concentração do reagente A na alimentação (entrada do reator);

C_{Ai} a concentração do reagente na saída do reator i , $i = \{1, 2, 3\}$ [kmol/m^3];

V_i : volume do reator i , $i = \{1, 2, 3\}$ [m^3];

k : constante de reação do componente A [$\text{m}^{1,5}/(\text{h kmol}^{0,5})$];

r_{Ai} : velocidade de reação [$\text{kmol}/(\text{h m}^3)$];

O modelo de otimização (Equação 3) tem como objetivo minimizar C_{A3} , de forma que a soma dos volumes dos três reatores seja menor ou igual a $7,0 \text{ m}^3$. O algoritmo utilizado foi o IPOPT (*Interior Point OPTimizer*) disponibilizado por Wächter e Biegler (2006) já implementado na biblioteca original do software. O valor do parâmetro k é $1,0 \text{ m}^{1,5}/(\text{h.kmol}^{0,5})$ e as variáveis F_0 e C_{A0} recebem valores de $2,0 \text{ m}^3/\text{h}$ e $1 \text{ kmol}/\text{m}^3$, respectivamente.

$$\begin{aligned} \min \quad & C_{A3} \\ \text{s.a.} \quad & \sum_{i=1}^3 V_i - 7 \leq 0; \text{ Eq. (1); Eq. (2); } \quad V_i \in \mathfrak{R}_+^* \end{aligned} \quad (3)$$

2.2. Programação multiobjetivo não linear por enxame de partículas

Baseado em um modelo *flash* com uma fonte de calor $Q_{\text{entrada_flash}}$ e uma fonte mássica com vazão constante $F_0 = 496,3 \text{ kmol}/\text{h}$ a 340 K de uma mistura ternária equimolar (pentano, hexano, benzeno), foi implementado um modelo de otimização multiobjetivo, de forma a maximizar a fração do componente pentano na fase vapor ($z_{1_saida_vapor}$) e minimizar o fluxo de calor no equipamento ($Q_{\text{entrada_flash}}$), operando a uma pressão constante de 1 atm (igual à entrada).

Por se tratar de uma otimização multiobjetivo, a Equação 4 apresenta as duas funções objetivo, além do intervalo para a temperatura no *flash* definido com base nos pontos de ebulição ($309,15$ e $353,15 \text{ K}$) do pentano (mais volátil) e do benzeno (menos volátil), respectivamente.

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO





XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



ENBEQ
2016
XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

$$\min [-z_{i_saida_vapor}, Q_{_entrada_flash}]$$

$$s.a. 300,15 \leq T_{flash} \leq 363,15; \quad (4)$$

Modelo do *Flash*;

$$T_{flash}, Q_{_entrada_flash}, z_{i_saida_vapor} \in \mathfrak{R}_+^*, i = \{1, 2, 3\}$$

O modelo foi implementado usando um algoritmo multiobjetivo por enxame de partículas (*MO-PSO - Multiobjective Particle Swarm Optimization*) disponibilizado por Gonçalves *et al.* (2012) e implementado na biblioteca do software pelo usuário. Para essa otimização utilizaram-se 20 partículas com um máximo de 30 iterações.

2.3. Programação linear inteira-mista (MILP)

Como descrito por Biegler *et al.* (1999), o problema proposto é maximizar o lucro de uma empresa fornecedora de um produto químico C que pode ser fabricado pelo Processo II ou III, os quais utilizam como matéria prima o produto químico B. Esse produto B pode ser adquirido a partir de outra empresa, ou então ser fabricado pelo Processo I que utiliza A como matéria-prima, que tem suprimento máximo de 16 ton/h. O preço de compra dos produtos químicos A e B são 500 e 950 \$/ton, respectivamente.

A demanda máxima de C é de 15 ton/h e o preço de venda para as primeiras 10 ton/h é de 1800 \$/ton e 1500 \$/ton para o excesso. Na Tabela 1, são apresentados alguns dados referentes à conversão e custos operacionais e de investimento.

Tabela 1 – Dados de custo e conversão nos processos da empresa (Biegler *et al.*, 1999)

Processo	Conversão	Investimento e custo operacional	
		Fixo (\$/ton)	Variável (\$/ton matéria-prima)
I	90% de A para B	1.000	250
II	82% de B para C	1.500	400
III	95% de B para C	2.000	550

Diante dos dados apresentados, podem-se verificar, no esquema por superestrutura, as alternativas de produção do produto químico C (Figura 1). As variáveis binárias y são variáveis de decisão entre um processo ou outro e as variáveis x representam os fluxos mássicos de produção em ton/h.

Depois de produzido C, seja pelo Processo II (x_{C2}) ou III (x_{C3}), consideram-se dois casos possíveis: ou a soma ($x_{C2} + x_{C3}$) é menor ou igual a 10 ton/h ou está entre 10 e 15 ton/h. Considerando esse condicional, deve-se acrescentar as variáveis inteiras de decisão (y_{D1} e y_{D2}) e as variáveis reais (x_{CD1} e x_{CD2}) que representam o valor da soma ($x_{C2} + x_{C3}$) entre 0 e 10 ton/h e de 10 a 15 ton/h, respectivamente. O modelo de otimização pode ser verificado na Equação 5.

Utilizou-se o código determinístico BONMIN (*Basic Open-source Nonlinear Mixed Integer programming*) com o *solver* disponibilizado na biblioteca do software e implementado com base no método disponibilizado por Bonami *et al.* (2008).

PROMOÇÃO



REALIZAÇÃO



ORGANIZAÇÃO



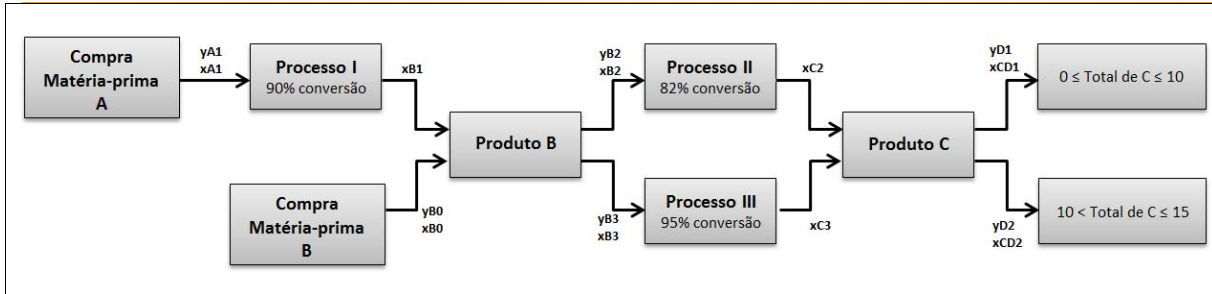


Figura 1 – Superestrutura do processo de produção de C.

$$\max L = 100[18x_{CD1} + 180y_{D2} + 15(x_{CD2} - 10y_{D2}) - 10y_{A1} - 7,5x_{A1} - 9,5x_{B0} - 15y_{B2} - 4x_{B2} - 20y_{B3} - 5,5x_{B3}]$$

$$\begin{aligned} \text{s.a. } & x_{A1} - 16y_{A1} \leq 0 & x_{B1} - 0,9x_{A1} &= 0 \\ & x_{B0} - 50y_{B0} \leq 0 & y_{B2} + y_{B3} - 1 &= 0 \\ & y_{A1} + y_{B0} - 2 \leq 0 & x_{B2} + x_{B3} - x_{B1} - x_{B0} &= 0 \\ & x_{B2} - 30y_{B2} \leq 0 & x_{C2} - 0,82x_{B2} &= 0 \\ & x_{B3} - 30y_{B3} \leq 0 & x_{C3} - 0,95x_{B3} &= 0 \\ & x_{C2} + x_{C3} - 15 \leq 0 & x_{CD1} + x_{CD2} - x_{C2} - x_{C3} &= 0 \\ & x_{CD1} - 10y_{D1} \leq 0 & y_{D1} + y_{D2} - 1 &= 0 \\ & x_{CD2} - 15y_{D2} \leq 0 \\ & y_{B0} + y_{A1} - 1 \geq 0 \\ & x_{CD2} - 10y_{D2} \geq 0 \end{aligned} \tag{5}$$

$$y_{A1}, y_{B0}, y_{B2}, y_{B3}, y_{D1}, y_{D2} \in \{0, 1\}$$

$$x_{A1}, x_{B0}, x_{B1}, x_{B2}, x_{B3}, x_{C2}, x_{C3}, x_{CD1}, x_{CD2} \in \mathfrak{R}_+$$

2.4. Programação não linear inteira-mista (MINLP)

Foi utilizado um modelo não linear misto com inteiros de três trocadores de calor, operando em contracorrente e conectados de acordo com a Figura 2. Nessa rede de trocadores o objetivo é operá-los com o menor custo anual possível, considerando o custo das utilidades nos trocadores 2 e 3 e o custo de instalação de cada trocador, que é função de suas respectivas áreas. Os dados referentes às temperaturas, custos e vazões estão apresentados na Tabela 2 (Turkay e Grossmann, 1996).

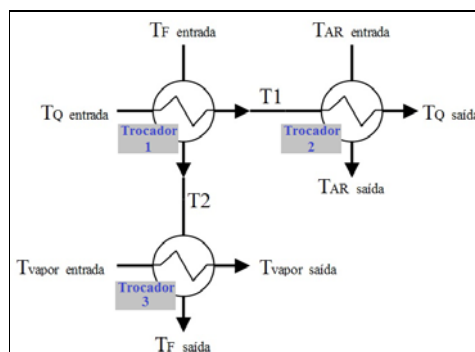


Figura 2 – Esquema de instalação da rede de trocadores.



XXI Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro



XVI Encontro Brasileiro sobre o
Ensino de Engenharia Química
Fortaleza/CE
25 a 29 de setembro

Considerou-se que $(T_{Q_entrada} - T_2)$ e $(T_1 - T_{F_entrada})$ sejam maiores ou iguais a 10 K, para que nas saídas das correntes fria e quente do trocador 1 exista ainda um gradiente de temperatura considerável.

Nesse contexto, os parâmetros e variáveis do problema são os seguintes, considerando a DTML (Diferença de Temperatura Média Logarítmica) aproximada pelo método de Paterson (1984) para evitar problemas de indeterminação logarítmica durante a otimização (Equação 6).

Parâmetros:

- $T_{Q_entrada}$: Temperatura de entrada do fluido quente no trocador 1 [K];
- $T_{F_entrada}$: Temperatura de entrada do fluido frio no trocador 1 [K];
- T_{Q_saida} : Temperatura de saída do fluido quente no trocador 2 [K];
- $T_{AR_entrada}$: Temperatura de entrada da água de resfriamento no trocador 2 [K];
- T_{AR_saida} : Temperatura de saída da água de resfriamento no trocador 2 [K];
- $T_{vapor_entrada}$: Temperatura de entrada do vapor no trocador 3 [K];
- T_{vapor_saida} : Temperatura de saída do vapor no trocador 3 [K];
- T_{F_saida} : Temperatura de saída do fluido frio no trocador 3 [K];
- U_i : Coeficiente global de troca térmica no trocador i , $i = \{1,2,3\}$ [kW/m²·K];
- FCp_Q : Produto da vazão mássica pelo calor específico do fluido quente [kW/K];
- FCp_F : Produto da vazão mássica pelo calor específico do fluido frio [kW/K];

Variáveis binárias:

- y_{ij} : Escolha (1) ou não (0) da faixa de área i , para o trocador j , com $i = \{1,2,3\}$ e $j = \{1,2,3\}$;

Variáveis Reais:

- T_1 : Temperatura de saída do fluido quente no trocador 1 [K];
- T_2 : Temperatura de saída do fluido frio no trocador 1 [K];
- A_i : Área de troca térmica do trocador i , $i = \{1,2,3\}$ [m²];
- $e_{troc\ i}$: Constante para cálculo do DTML no trocador i , com $i = 1,2,3$ [-];
- $tetaMA_{troc\ i}$: Média aritmética para cálculo do DTML no trocador i , com $i = 1,2,3$ [-];
- $tetaMG_{troc\ i}$: Média geométrica para cálculo do DTML no trocador i , com $i = 1,2,3$ [-];
- $\delta_{ln\ i}$: DTML para o trocador i , com $i = 1,2,3$ [-];
- $qQ_{ln\ i}$: Taxa de calor trocado pelo fluido quente no trocador i , com $i = 1,2,3$ [kW];
- $qQ_{cp\ i}$: Taxa de calor trocado pelo fluido quente no trocador i , com $i = 1,2,3$ [kW];

Tabela 2 – Dados da rede de trocadores de calor (Turkay e Grossmann, 1996)

Corrente	FCp (kW/K)	$T_{entrada}$ (K)	T_{saida} (K)	Custo (\$/kW·ano)
Quente	10,0	500	340	
Fria	7,5	350	560	
Água de resfriamento		300	320	20
Vapor		600	600	80

Trocador de calor	Coeficiente global de troca térmica [kW/(m ² K)]	Trocador de calor	Possível área (m ²)	Custo de investimento (\$/ano)
1	1,5	1, 2 e 3	$0 < A \leq 10$	$2750 A^{0,6} + 3000$
2	0,5		$10 < A \leq 25$	$1500 A^{0,6} + 15000$
3	1,0		$25 < A \leq 50$	$600 A^{0,6} + 46500$

Para resolver esse problema, utilizou-se o código determinístico BONMIN com as variações (*Branch-and-Bound – BB*) e (*Outer-Approximation – OA*).

PROMOÇÃO

REALIZAÇÃO

ORGANIZAÇÃO



Esse mesmo problema foi resolvido com o uso do MINLP-PSO (método não determinístico), baseado no método por enxame de partículas de Kennedy e Eberthart (1997) e Laskari *et al.* (2002), desenvolvido em linguagem C++ e adicionado à biblioteca do software. Para a otimização foram utilizadas 400 partículas e um máximo de 70 iterações.

$$\begin{aligned}
 \min z = & y11(2750 A1^{0.6}+3000) + y21(1500 A1^{0.6}+15000) + y31(600 A1^{0.6}+46500) + \\
 & y12(2750 A2^{0.6}+3000) + y22(1500 A2^{0.6}+15000) + y32(600 A2^{0.6}+46500) + \\
 & y13(2750 A3^{0.6}+3000) + y23(1500 A3^{0.6}+15000) + y33(600 A3^{0.6}+46500) + \\
 & 20qQ_LN_2 + 80qF_LN_3 \\
 \text{s.a. } e_troc1 = & 1 - (TQ_entrada - T2)/(T1 - TF_entrada) & qQ_LN_1 - U1 A1 \delta T_ln_1 = 0 \\
 e_troc2 = & 1 - (TQ_saida - TAR_entrada)/(T1 - TAR_saida) & qQ_CP_1 - Fcp_H (TQ_entrada - T1) = 0 \\
 e_troc3 = & 1 - (Tvapor_entrada - TF_saida)/(Tvapor_saida - T2) & qQ_LN_1 - qQ_CP_1 = 0 \\
 \text{tetaAM_troci} = & (T1 - TF_entrada)(1 - e_troci/2) & qQ_LN_2 - U2 A2 \delta T_ln_2 = 0 \\
 \text{tetaGM_troci} = & (T1 - TF_entrada)(1 - e_troci/2 - e_troci^2/8 - e_troci^3/16) & qH_CP_2 - Fcp_H (T1 - TQ_saida) = 0 \\
 \text{tetaAM_troci} = & (T1 - TAR_saida)(1 - e_troci/2) & qQ_LN_2 - qQ_CP_2 = 0 \\
 \text{tetaGM_troci} = & (T1 - TAR_saida)(1 - e_troci/2 - e_troci^2/8 - e_troci^3/16) & qF_LN_3 - U3 A3 \delta T_ln_3 = 0 \\
 \text{tetaAM_troci} = & (Tvapor_saida - T2)(1 - e_troci/2) & qF_CP_3 - Fcp_C (TF_saida - T2) = 0 \\
 \text{tetaGM_troci} = & (Tvapor_saida - T2)(1 - e_troci/2 - e_troci^2/8 - e_troci^3/16) & qF_LN_3 - qF_CP_3 = 0 \\
 \delta T_ln_1 = & (1/3)\text{tetaAM_troci} + (2/3)\text{tetaGM_troci} & qQ_LN_1 - Fcp_C (T2 - TF_entrada) = 0 \\
 \delta T_ln_2 = & (1/3)\text{tetaAM_troci} + (2/3)\text{tetaGM_troci} \\
 \delta T_ln_3 = & (1/3)\text{tetaAM_troci} + (2/3)\text{tetaGM_troci}
 \end{aligned} \tag{6}$$

$$\begin{aligned}
 y11 + y21 + y31 - 1 &= 0 & A1 - 10y11 - 25y21 - 50y31 &\leq 0 \\
 y12 + y22 + y32 - 1 &= 0 & A1 - 0y11 - 10y21 - 25y31 &> 0 \\
 y13 + y23 + y33 - 1 &= 0 & A2 - 10y12 - 25y22 - 50y32 &\leq 0 \\
 TQ_entrada - T2 &\geq 10 & A2 - 0y12 - 10y22 - 25y32 &> 0 \\
 T1 - TF_entrada &\geq 10 & A3 - 10y13 - 25y23 - 50y33 &\leq 0 \\
 & & A3 - 0y13 - 10y23 - 25y33 &> 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 e_troci, \text{tetaAM_troci}, \text{tetaGM_troci}, \delta T_ln_i, qQ_LN_i, qQ_CP_i, z \in \mathfrak{R}, \quad i = 1, 2, 3; \\
 y_{ij} \in \{0, 1\}, \quad i = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, 3; \\
 A_i \in \mathfrak{R}_+, \quad 0 \leq A_i \leq 50, \quad i = 1, 2, 3; \\
 T1 \in \mathfrak{R}, \quad 351 \leq T1 \leq 500; \\
 T2 \in \mathfrak{R}, \quad 350 \leq T2 \leq 499;
 \end{aligned}$$

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1. Programação mono-objetivo não linear (NLP) – Reatores CSTR

Inicialmente pode-se verificar o comportamento do modelo pela definição das variáveis V_1 , V_2 e V_3 com os valores de 1, 2 e 4 m^3 , obtendo no final da simulação os valores de 0,704, 0,426 e 0,217 $kmol/m^3$ para C_{A1} , C_{A2} e C_{A3} , respectivamente. Para o estudo de otimização (Equação 3), essas variáveis (V_i) são liberadas para busca, deixando o modelo com 3 graus de liberdade, encontrando os valores de 2,077, 2,332 e 2,590 m^3 para V_1 , V_2 e V_3 e a função objetivo ($\min C_{A3}$) apresenta valor de 0,210 $kmol/m^3$.

3.2. Programação multiobjetivo não linear por enxame de partículas – Modelo *flash*

A Figura 3 apresenta as partículas não dominadas da primeira e última iteração podendo-se observar (Figura 3a) que para os menores consumos de energia (da ordem de 3800 kW) não há

separação dos componentes ($z_1 = 0,33$) no *flash*, pois as proporções de entrada são mantidas na fase líquida formada na saída do *flash* e neste caso não há formação da fase vapor. A maior separação do componente pentano ocorre com um consumo da ordem de 50.600 kW a 279,15 K (Figura 3a). A Figura 3b apresenta a frente não dominada da última iteração e como as partículas estão distribuídas, podendo-se observar que ocorre uma tendência de conflito entre as duas funções otimizadas, pois para um aumento da fração de ($z_{1_saída_vapor}$) há também um aumento no consumo de energia ($Q_{entrada}$).

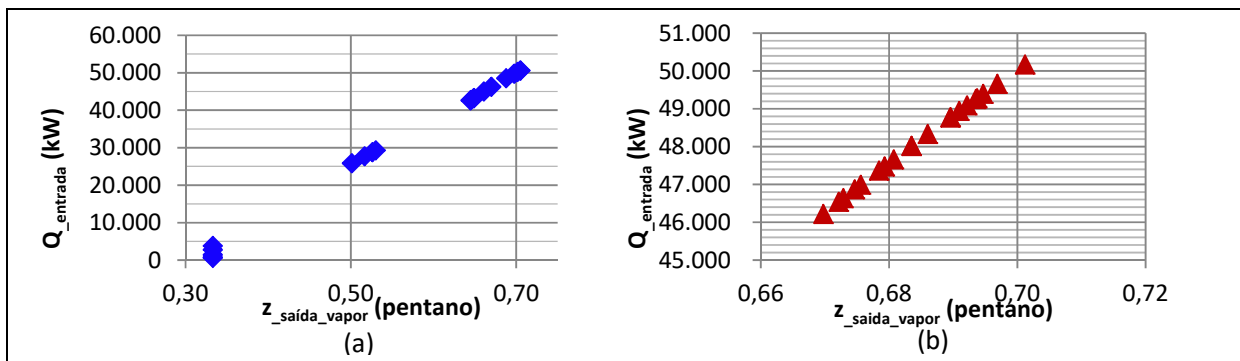


Figura 3 – Distribuição das partículas não dominadas. (a) primeira iteração; (b) última iteração.

3.3. Programação linear inteira-mista (MILP) – Otimização de processo

Após executar a otimização MILP com as restrições e condições apresentadas conclui-se que para produzir C e obter um lucro máximo deve-se utilizar o Processo I e o Processo III com um valor inicial de 16,00 tonA/h. Verifica-se também que a variável y_{D2} recebeu o valor 1, ou seja, $y_{DI} = 0$ e o total de C é 13,68 ton/h, obtendo um lucro de 600,00 \$/h.

3.4. Programação não linear inteira-mista (MINLP) – Rede de trocadores

Após executar a otimização no software baseado no modelo de otimização (Equação 6), e considerando o cálculo do DTML pela aproximação de Paterson (1984), pode-se verificar que o menor custo anual é obtido pelo método determinístico quando as áreas dos trocadores 1, 2 e 3 são 25, 20,18 e 7,68 m^2 , respectivamente. Nesta condição operacional a T1 é 397,31 K e T2 é 486,92 K, gerando um custo de 117.105,00 \$/ano. Esse resultado corresponde a um custo anual 0,590% menor do que aquele apresentado por Turkey e Grossmann (1996) (custo anual de 117.800 \$/ano).

A solução pelo método não determinístico apresentou um custo anual de 117.109 \$/ano, resultando em uma economia anual de 0,586% quando comparado à publicação acima citada e os valores finais das variáveis são praticamente os mesmos encontrados pelo método determinístico.

4. CONCLUSÕES

A aplicação de diversas metodologias de otimização para problemas de engenharia química mostrou resultados satisfatórios e, em um caso de estudo, melhores do que o apresentado

pela literatura. O estudo aqui apresentado demonstra a grande versatilidade do software EMSO para solução de problemas de otimização.

5. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a CAPES, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior, e ao CNPq, Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BIEGLER, L.T.; GROSSMANN, I.E.; WESTERBERG, A.W. *Systematic methods of chemical process design*, New Jersey: Editora Prentice Hall, 1999.
- BONAMI, P.; BIEGLER, L.T.; CONN, A.R.; CORNUÉJOLS, G.; GROSSMANN, I.E.; LAIRD, C.D.; LEE, J.; LODI, A.; MARGOT, F.; SAWAYA, N.; WÄTCHER, A. An algorithmic framework for convex mixed integer nonlinear programs. *Discrete Optim.* v. 5, n. 2, p. 186-204, 2008.
- FURLAN, F.F.; LINO, A.; MATUGI, K.; CRUZ, A.J.G.; SECCHI, A.R.; GIORDANO, R.C. A simple approach to improve the robustness of equation-oriented simulators: Multilinear look-up table interpolators. *Comp. Chem. Eng.* v. 86, p. 1-4, 2016.
- GONÇALES, L.C.G.; FURLAN, F.F.; SOARES, R.P.; SECCHI, A.R.; GIORDANO, R.C., COSTA, C.B.B. Implementation of Pareto Multi-objective Particle Swarm Optimization Algorithm in EMSO. *Eng Opt 2012.* v. 73, p. 1-7, 2012.
- KENNEDY, J.; EBERHART R.C. A discrete binary version of the particle swarm algorithm. *IEEE Int. Conf. Syst. Man. Cybern.* v. 05, p. 4105-4108, 1997.
- LASKARI, E.C.; PARSOPOULOS, K.E., VRAHATIS, M.N. Particle swarm optimization for integer programming. *IEEE C. Evol. Computat.* v. 02, p. 1582-1587, 2002.
- PATERSON, W.R. A replacement for the logarithmic mean. *Chem. Eng. Sci.*, v. 39, n. 11, p. 1635-1636, 1984.
- RODRIGUES, R.; SOARES, R.P.; SECCHI, A.R. Teaching chemical reaction engineering using EMSO simulator. *Comput. Appl. Eng. Educ.* v. 18, n. 4, p. 607-618, 2010.
- SOARES, R. P.; SECCHI, A.R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimisation. *Comp. Aid. Che. Engng.* p. 947-952, 2003.
- TURKAY, M.; GROSSMANN, I.E. Disjunctive programming techniques for the optimization of process systems with discontinuous investment costs – multiple size regions. *J. Ind. Eng. Chem.* v. 35, p. 2611-2623, 1996.
- WÄCHTER, A.; BIEGLER, L.T. On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming, *Math. Program.* v. 106, n. 1, p. 25-57, 2006.