

# ALGORITMOS DE OTIMIZAÇÃO DO SOFTWARE MATLAB APLICADOS À ENGENHARIA QUÍMICA

Letícia Cavalini Dias<sup>1</sup>, Gustavo Vieira Olivieri<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Engenharia Química, Centro Universitário FEI  
[leticia-cavallini@hotmail.com](mailto:leticia-cavallini@hotmail.com), [gustavo.vo@fei.edu.br](mailto:gustavo.vo@fei.edu.br)

**Resumo:** Foram estudados cenários comuns nas áreas de projetos e processos na área da Engenharia Química, incluindo a resolução de sistemas não-lineares e a minimização de custos, que exigem auxílio computacional. O software Matlab se destaca pela robustez e variedade de comandos para resolver problemas matemáticos e otimização. Foi aplicado nos cinco cenários abordados, utilizando algoritmos específicos e gerando dados para a apostila didática em desenvolvimento.

## 1. Introdução

A Engenharia Química, especialmente nas áreas técnicas de projetos e processos, utiliza modelos matemáticos para descrever fenômenos e equipamentos. Esses modelos incluem equações algébricas, diferenciais ordinárias, diferenciais parciais e inequações para representar operações unitárias ou processos químicos. A otimização busca a melhor solução com base em métricas como maximização de lucro ou minimização de custo [1,2]. Além do aspecto econômico, a otimização é usada em problemas físicos e matemáticos na Engenharia Química, como ajuste de modelos cinéticos e solução de balanços materiais não-lineares.

O conceito de otimização é amplo e útil, frequentemente complementado por recursos computacionais para problemas complexos ou repetitivos. Um problema de otimização tem uma função objetivo, variáveis de decisão e restrições [3]. A função objetivo é o alvo a ser maximizado ou minimizado, enquanto as variáveis de decisão são ajustáveis para otimizar essa função. As restrições são limites associados às variáveis.

Na Engenharia Química, a otimização é aplicada em modelos cinéticos, termodinâmicos, equações de transferência de calor e análise de custos. O software Matlab é uma ferramenta valiosa para resolver esses problemas, oferecendo recursos para customização de códigos. Este projeto visa explorar o Matlab para cenários típicos da Engenharia Química, incluindo a escrita de códigos e a criação de uma apostila didática com cenários, códigos e resultados.

## 2. Metodologia

Foram explorados cinco cenários típicos da Engenharia Química, abordando diversos tópicos e oferecendo múltiplas abordagens de resolução. Cada cenário está sendo detalhado didaticamente e registrado digitalmente em uma apostila. Códigos customizados estão sendo desenvolvidos no software Matlab, utilizando comandos como `fsolve`, `lsqnonlin`, `fminsearch`, `fmincon` e `surrogateopt`, para explorar e comparar recursos. Tutoriais para esses comandos estão

disponíveis no website da MathWorks [4]. Os cenários propostos são:

1. Balanço material em processo químico com reciclo e purga;
2. Estudo de um reator químico com efeitos térmicos;
3. Minimização de custos na construção de uma coluna de destilação;
4. Estimativa de parâmetros cinéticos de uma reação química a partir de dados de um reator batelada;
5. Escolha de processos para maximizar o lucro.

## 3. Resultados

Neste trecho, os resultados de um dos cinco casos propostos são apresentados, usando Matlab para a formulação adequada ao problema. Um exemplo abordado é a minimização de custos para a construção de uma coluna de destilação. A destilação é representada por uma coluna de pratos, onde cada prato é um estágio de equilíbrio líquido-vapor, com um condensador no topo e uma corrente de produto no fundo.

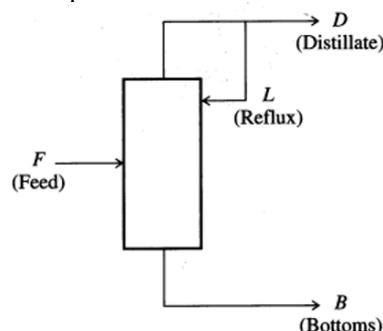


Figura 1 – Esquema simplificado de uma coluna de destilação (Caso 3) [1].

O código Matlab para calcular o número ótimo de pratos e o custo mínimo de construção é o seguinte:

```
%% Parâmetros
Cp = 30; % $/ft2
Cs = 10; % $/ft3
Cf = 4000; % $
Cd = 3000; % $
Cb = 2000; % $
Cx = 8000; % $
L_D_min = 1;
K = 0.01; % h·ft2/lb
F = 1500; % lb/h
D = 1000; % lb/h
N_min = 5;
H = 2; % ft

% Função Objetivo
```

```
L_D = @(N)(1/(1-N_min/N))*L_D_min;
L = @(N)(L_D(N)*D);
A = @(N)(K*(L(N)+D));
CL = @(N)(5000+0.7*L(N));
C = @(N) Cp*A(N)*N + Cs*H*A(N)*N + Cf + Cd +
Cb + CL(N) + Cx;
```

```
%% Restrições
inf = N_min; % Limite inferior para N (número
de pratos)
sup = 100; % Limite superior para N

n0 = 100; % Chute inicial para N
[x, fval] = fmincon(C, n0, [], [], [], [],
inf, sup, []);
```

```
%% Resultados
N_opt = x;
C_min = fval;

fprintf('Número ótimo de pratos: %.2f\n',
N_opt);
fprintf('Custo mínimo de construção:
%.2f\n', C_min);
```

O código resultou em um número ótimo de 9 pratos, com um custo mínimo de construção de \$38.200.

Já um outro exemplo descreve a decomposição do hidroperóxido de 2-isopropilnaftaleno em fase líquida, com catalisadores homogêneos. Nele são fornecidos parâmetros cinéticos, entalpia da reação, calor específico e condições operacionais do reator adiabático, com o objetivo de determinar a conversão alcançada.

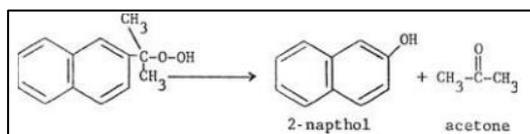


Figura 3 – Reação de decomposição do 2-isopropilnaftaleno hidroperóxido (Caso 2).

Logo, o *script* *MatLab* é dado por:

```
function f = funcoes_caso2(x)
% Variáveis de entrada
V_dot = 100; % [L/min]
Ta = 298.15; % [K]
cA = 0.5; % [mol/L]
kref = 0.543; % [min^(-1)]
Tref = 60+273.15; % [K]
Ea = 25e3*4.184; % [J/mol]
deltaHr = -60.5e3*4.184; % [J/mol]
R = 8.314; % [J/mol.K]
cp_m = 406*4.184; % [J/mol.K]
VR = 100; % [L]
U = 280; % [W/m^2.K]
D = (2*VR/1000/pi)^(1/3);
A = 2*pi*D^2;
FA0 = cA*V_dot;
```

```
% Balanço de energia
f(1) = -V_dot*cp_m*(x(1)-Ta)-
deltaHr*FA0*x(2);
```

```
% Equação de projeto
```

```
f(2) = VR*kref*exp(Ea/R*(1/Tref-1/x(1)))*(1-
x(2))-V_dot*x(2);
```

```
x0 = [400;0.9];
x = fsolve(@funcoes_caso2,x0)
```

O estudo identificou três estados estacionários distintos no reator, atingidos a partir de diferentes condições iniciais. Os estados estacionários resultantes, em termos de temperatura e conversão, são: [298.6631;0.0069], [341.8337;0.5863], [369.4432;0.9569].

#### 4. Conclusões

A pesquisa abordou cinco casos distintos, nos quais foram realizados significativos avanços. No Caso 1, foi explorada a produção de metanol a partir de dióxido de carbono e hidrogênio, com foco na determinação das vazões molares para atender às especificações de produção. A função *lsqnonlin* foi empregada para resolver as equações não lineares envolvidas. O Caso 2 investigou a decomposição do hidroperóxido de 2-isopropilnaftaleno em fase líquida, utilizando catalisadores homogêneos. O objetivo foi determinar a conversão atingida no reator, com a função *fsolve* resolvendo o problema.

No Caso 3, a otimização dos custos de construção de uma coluna de destilação foi realizada utilizando o método *fmincon*, considerando correlações entre variáveis e restrições associadas aos componentes da coluna. No Caso 4, a função *lsqnonlin* foi aplicada para estimar parâmetros cinéticos em um reator batelada, validando a cinética proposta com os dados experimentais. Finalmente, no Caso 5, a função *fmincon* foi utilizada para maximizar o lucro de um processo químico, integrando a escolha entre diferentes processos produtivos e a consideração de variáveis binárias e contínuas.

#### 5. Referências

- [1] T. F. Edgar, D. M. Himmelblau, *Optimization of Chemical Processes*, McGraw-Hill, 2001.
- [2] J. A. W. Gut, *Programação Matemática para Otimização de Processos*, Editora da Universidade de São Paulo, 2021.
- [3] A. R. Secchi, E. C. Bisciaia Jr., *Métodos Numéricos para Engenheiros Químicos: Algoritmos e Aplicações*, Ed. do Autor, 2020.
- [4] Mathworks®. MATLAB, [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com), Acesso em: 02 ago. 2023.

#### Agradecimentos

Ao Centro Universitário FEI, pela concessão da bolsa PIBID, e pela infraestrutura para desenvolvimento do trabalho computacional.

<sup>1</sup> Aluno de ID do Centro Universitário FEI. Projeto com vigência de 10/2023 a 09/2024.