

AVALIAÇÃO DE TÉCNICAS META-HEURÍSTICAS PARA SOLUÇÃO DE PROBLEMAS DE SÍNTESE DE REDES DE REATORES QUÍMICOS

Bruno Eduardo Boraczynski Vantini Mazzin (PIBIC/CNPq/FA/Uem), Esdras Penêdo de Carvalho (Orientador), e-mail: brunoeduh09@gmail.com.

Universidade Estadual de Maringá / Centro de Ciências Exatas/Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Matemática, Matemática aplicada.

Palavras-chave: reatores químicos, meta-heurísticas, otimização.

Resumo:

Reatores químicos são equipamentos essenciais em indústrias químicas, visto que a excelência do produto obtido por eles e seu tipo e configuração determinam os demais estágios do processo industrial, como etapas de alteração de pressão, de separação e de aquecimento ou resfriamento de correntes. Para analisar a síntese de redes de reatores químicos, foram estudados artigos científicos acerca do tema, prática da linguagem C de programação e softwares, estudo de solução de equações diferenciais e métodos meta-heurísticos. Com isso, foi possível por meio de implementações computacionais no software Matlab, analisar a síntese ótima de redes de reatores químicos com problemas encontrados na literatura.

Introdução

Os processos químicos industriais são naturalmente dependentes dos produtos gerados nos reatores químicos, recipientes capazes de conter as reações químicas de interesse. Contudo, dificilmente as reações são únicas e simples, como a reação de isomerização de um determinado composto. Em geral há reações múltiplas, o que requer uma análise detalhada para obtenção de um produto específico.

Um determinado sistema reacional pode ser otimizado com a utilização de técnicas matemáticas de otimização. Para tanto, o sistema precisa ser modelado matematicamente e um problema de otimização, objetivando se alcançar o máximo ou o mínimo de uma determinada métrica de processo, precisa ser formulado.

Quando se tem em mente diversas possibilidades estruturais de processo, como por exemplo, a possibilidade de se utilizar diferentes tipos de reatores arranjados em diferentes configurações em série e/ou paralelo, ou ainda a possibilidade de alimentação de um ou mais reagentes em diferentes pontos do arranjo de reatores, uma metodologia adequada de abordagem é a construção de uma superestrutura, que abranja em si todas as possibilidades desejáveis. Assim, a derivação de um modelo de otimização a partir dessa superestrutura e a utilização de uma rotina de otimização para encontrar a topologia ótima de processo, bem como os valores ótimos das variáveis de processo.

Materiais e métodos

Foram realizados estudos em artigos científicos, ACHENIE; BIEGLER (1986) e LAKSHMANAN; BIEGLER (1996) que abordam a síntese de redes de reatores químicos por diferentes métodos e análises. Foram realizados seminários para a apresentação e discussão desses artigos, onde houve o acompanhamento e ampliação do conhecimento sobre a área. Além disso, foram estudadas técnicas para solução de equações diferenciais e métodos meta-heurísticos, tais como *Particle Swarm Optimization*, *Genetic Algorithm* e *Simulated Annealing*, sendo esses compreendidos por meio de estudos da literatura e resolução de exercícios.

Para implementação computacional, aprendeu-se a dominar a linguagem C e o software Matlab via videoaulas e realização de exercícios, podendo-se assim, abordar o estudo da síntese ótima de reatores químicos no mesmo. Para consolidação, foi abordado um caso encontrado em diversos casos na literatura.

Resultados e Discussão

A familiarização da linguagem C foi realizada através de implementação de algoritmos para alguns exemplos, como algoritmos para o movimento de um cavalo em um jogo de xadrez, ordenação de números, média de 1000 números, conversor de base, contagem de votos, entre outros.

Com o domínio da linguagem C e o estudo dos métodos de solução de equações diferenciais, foram implementados algoritmos no software Matlab para resolver equações diferenciais pelos métodos de Euler, Euler modificado, Range-Kutta de diferentes ordens, entre outros.

Com o estudo da literatura sobre os métodos meta-heurísticos, foram desenvolvidos exercícios relacionados as técnicas de *Particle Swarm Optimization*, *Genetic Algorithm* e *Simulated Annealing*.

Um caso abordado para analisar a síntese ótima de redes de reatores químicos foi a reação de Trambouze e Piret (1959), exemplo que envolve quatro espécies (A, B, C e D) e em que ocorrem três reações paralelamente (A formando B, C e D).

Dados:

$F_0 = 100 \text{ L.min}^{-1}$ (Taxa de alimentação);

$CA_0 = 1,0 \text{ mol.L}^{-1}$ (Concentração inicial de A);

$k_1 = 0,025 \text{ mol.(L.min.)}^{-1}$ (formação de B);

$k_2 = 0,2 \text{ min}^{-1}$ (formação de C);

$k_3 = 0,41 \text{ L (mol.min.)}^{-1}$ (formação de D);

Para resolução do problema, foi utilizada a superestrutura proposta por SILVA; RAVAGNANI; MENOCI; SAMED (2008), que consiste nas possibilidades para solução ótima: um reator CSTR; um reator PFR; um reator CSTR em série com um reator PFR; um reator PFR em série com um reator CSTR. A superestrutura encontra-se na figura a seguir.

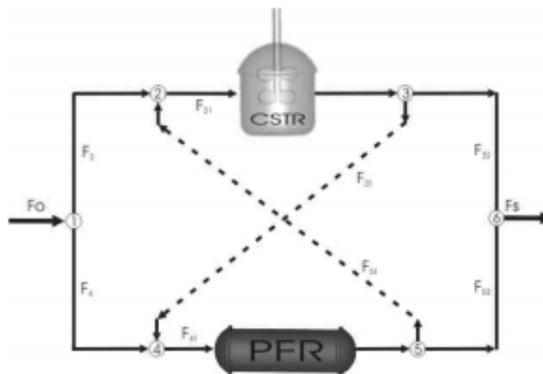


Figura 1: Superestrutura para a síntese de redes de reatores químicos.

Partindo-se dos seis nós da figura 1 (pontos 1 ao 6), desenvolve-se as equações para a superestrutura (figura 2) e as equações para cada tipo de reator, podendo-se assim sintetizar a rede de reatores químicos para o problema.

CSTR	PFR
$\frac{V}{F} = \frac{x}{(-r)}$	$F \frac{dx}{dV} = (-r)$
<p>Onde:</p> <p>V: Volume do reator;</p> <p>F: Vazão molar;</p> <p>x: conversão;</p> <p>(-r): taxa de reação.</p>	

Figura 2: Equações para os dois tipos de reatores envolvidos e o significado das variáveis.

Utilizando como solução ótima um reator CSTR seguido de um reator PFR e aplicando as ferramentas mostradas anteriormente para os métodos de soluções de equações diferenciais e os métodos meta-heurísticos (nesse caso *Genetic Algorithm*), foi possível, com auxílio do Matlab, encontrar uma solução para o problema, que era de maximizar a seletividade para a espécie C.

A resposta final para Seletividade de C foi de aproximadamente 0,4558. Em relação ao valor de 0,499 obtido por ACHENIE; BIEGLER (1986), o erro percentual foi de 8,84%, o que não demonstra ser a utilização do método meta-heurístico *Genetic Algorithm* como um método apropriado para a síntese de redes de reatores químicos. Entretanto, SILVA; RAVAGNANI; MENOCCI; SAMEDI (2008) resolveu o mesmo exemplo utilizando um método com *Genetic Algorithm*, obtendo respostas semelhantes às obtidas em vários artigos na literatura sobre esse caso, o que comprova a viabilidade do uso de meta-heurísticas para a otimização da síntese de redes de reatores químicos. Nessa resolução, pode ter ocorrido uma consideração de forma equivocada ou a aplicação do algoritmo não foi tão eficiente quanto deveria para atingir a seletividade de C esperada.

Os resultados para os métodos de solução de equações diferenciais e os métodos meta-heurísticos foram satisfatórios, visto que foi possível aprender vários métodos para ambos e desenvolver algoritmos para a resolução de exemplos, além de dominar a linguagem C.

Conclusões

Os objetivos do projeto foram alcançados, visto que foi possível compreender a importância da síntese ótima de reatores químicos, o que pode trazer economia em termos financeiros ao processo, como no gasto da compra dos reatores ou na diminuição de gasto de reagente para a obtenção da mesma quantidade do produto, além de obter a maior quantidade possível do produto desejado. Aprendeu-se a dominar a linguagem C, métodos de solução de equações diferenciais, métodos meta-heurísticos, além de obter a capacidade de criar algoritmos para os métodos. Foi possível entender para que serve uma superestrutura em uma síntese de redes de reatores químicos e a utilização dos métodos meta-heurísticos que mesmo havendo poucos trabalhos na literatura com essa temática devido os métodos serem relativamente recentes, tende a ser muito utilizado no futuro, visto os resultados positivos na síntese de processos, como na síntese de redes de trocadores de calor. O resultado não foi próximo ao encontrado na literatura, devido possíveis considerações equivocadas e a aplicação do algoritmo não foi tão eficiente quanto deveria para atingir a seletividade de C esperada.

Agradecimentos

Agradecimento a Esdras Penêdo de Carvalho, pela confiança em designar esse projeto a mim e ter me orientado na realização e no aprendizado sobre os métodos meta-heurísticos e síntese de redes de reatores químicos.

Agradecimento a Caliane Bastos Borba Costa, pelos ensinamentos e orientações para realização desse projeto.

Agradecimento a Fundação Araucária por ter me concedido a bolsa e ter fornecido a oportunidade de poder realizar esse projeto e me auxiliar na carreira acadêmica.

Referências

LAKSHMANAN, A.; BIEGLER, L.T. **Synthesis of optimal chemical reactor systems**. Ind. Eng. Chem. Res., Washington, D.C., v. 35, n. 35, p. 1344-1353, 1996;

ACHENIE, L.K.E.; BIEGLER, L.T. **Algorithm synthesis of chemical reactor networks using mathematical programming**. Ind. Eng. Chem. Res., Washington, D.C., v. 25, n. 1, p. 621-627, 1986.

SILVA, L. K. et al; **Reactor network synthesis for isothermal conditions**. Acta Sci. Technology, v. 30, n. 2, p. 199-207, 2008.