

OTIMIZAÇÃO DE REDES DE REATORES QUÍMICOS UTILIZANDO TÉCNICAS DETERMINÍSTICAS

Pedro Henrique Siscato (PIBIC/CNPq/UEM), Esdras Penêdo de Carvalho (Orientador). E-mail: epcarvalho@uem.br

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

Matemática, Matemática aplicada.

Palavras-chave: *Bound contraction*; otimizador global; reatores químicos.

RESUMO

Neste trabalho, aplicou-se uma generalização do método *Bound Contraction (BC)* num problema de otimização de engenharia química, não convexo com termos bilineares e funções monótonas. Obteve-se o ótimo global em 2,1 segundos de CPU.

INTRODUÇÃO

No contexto industrial, são necessários projetos equipamentos de forma que minimizem o custo de projeto e operação ou maximizem a produção de determinado produto. Contudo, os modelos são muitas vezes não-lineares e podem introduzir não convexidades no problema, o que dificulta a otimização, pois podem resultar em múltiplos minimizadores locais. Neste sentido, são necessários modelos avançados de busca para superar as dificuldades da natureza não convexa dos modelos.

No presente trabalho aplicamos uma generalização do método *BC* desenvolvido por Faria e Bagajewicz (2010) para termos bilineares. O método em questão refere-se a mecanismos que ajustam os limites inferior e superior das variáveis selecionadas previamente, até que uma determinada tolerância seja atingida. Esta generalização requer monotonicidade, o que não é um obstáculo porque podem ser realizadas reformulações de funções não monótonas.

MATERIAIS E MÉTODOS

Generalização do método Bound Contraction

Considere um modelo de otimização que contém termos que são produtos de duas variáveis contínuas x_i e y_j e que podem ser substituídas por uma variável contínua z_{ij} , definida como:

$$z_{ij} = x_i y_j \quad \forall i = 1, \dots, n; \forall j = 1, \dots, m \quad (1)$$

em que x_i e y_j , estão sujeitos a determinados limites:

$$x_i^L \leq x_i \leq x_i^U \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (2)$$

$$y_j^L \leq y_j \leq y_j^U \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (3)$$

Considere modelos de otimização que contenham não-linearidades racionais e/ou não racionais:

$$z_{ij} = g(x_i, y_j) \quad \forall i = 1, \dots, n; \forall j = 1, \dots, m \quad (4)$$

em que $g(x_i, y_j)$ é uma função monótona crescente ou decrescente em uma variável e crescente ou decrescente em outra ou crescente/decrescente em ambas.

Considerando $g(x_i, y_j)$ monótona crescente em ambas as variáveis, nosso relaxamento é o seguinte:

$$z_{ij} \leq g(\bar{x}_i^U, \bar{y}_j^U) \quad \forall i = 1, \dots, n; \forall j = 1, \dots, m \quad (5)$$

$$z_{ij} \geq g(\bar{x}_i^L, \bar{y}_j^L) \quad \forall i = 1, \dots, n; \forall j = 1, \dots, m \quad (6)$$

em que $\bar{x}_i^L$ e $\bar{x}_i^U$, $\bar{y}_j^L$ e $\bar{y}_j^U$ são os limites inferior e superior atualizados para x_i e y_j , respectivamente. Desta forma, o problema relaxado proposto se torna linear, chamado de *Lower Bound - LB*. Em contrapartida, o problema original é chamado de *Upper Bound - UB*. Sejam $\hat{z}_{ij}$, $\hat{x}_i$ e $\hat{y}_j$ as soluções do *LB*, são introduzidos valores de referência (x_i^{ref}) para cada variável:

$$x_i^{ref} = f_x^{(3)}(\hat{z}_{i1}, \hat{z}_{i2}, \dots, \hat{z}_{im}; \hat{y}_1, \hat{y}_2, \dots, \hat{y}_m) = \min_{j=1, \dots, m} \left\{ \frac{\hat{z}_{ij}}{\hat{y}_j} \right\} \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (7)$$

Após, são introduzidas distâncias de x_i^{ref} aos limites inferior e superior de x_i :

$$d_i^L = x_i^{ref} - \bar{x}_i^L \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (8)$$

$$d_i^U = \bar{x}_i^U - x_i^{ref} \quad \forall i = 1, \dots, n \quad (9)$$

Sem perda de generalidade, assumiu-se que d_i^L é a menor distância, isto é, x_i^{ref} está mais próximo de $\bar{x}_i^L$ do que de $\bar{x}_i^U$ e definimos o modelo *Linear Auxiliar Inferior ALB_i^L*, modificando (5):

$$z_{ij} \leq g(\bar{x}_i^U, y_j^U) \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (10)$$

$$z_{ij} \geq g(x_i^{ref} + s d_i^U, y_j^L) \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (11)$$

Analogamente, o modelo *Linear Auxiliar Superior ALB_i^U* é definido para a variável x_i , modificando (6):

$$z_{ij} \leq g(x_i^{ref} - sd_i^L, y_j^U) \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (12)$$

$$z_{ij} \geq g(\bar{x}_i^L, y_j^L) \quad \forall j = 1, \dots, m \quad (13)$$

em que s pode variar de zero a um em ambos os modelos. Assim, pode-se executar o problema ALB_i^L para diferentes valores de s até chegar a um ponto $s = s^*$ em que o problema é infactível para um valor acima de s^* , ou sua solução é maior que a solução UB corrente. Então o limite superior da variável x_i é atualizado considerando s^* . Similarmente ALB_i^U é executado para diferentes valores de s até encontrar o ponto $s = s^*$, em que o problema é infactível ou sua solução é maior que a solução UB corrente. Quando isso acontece, o limite inferior da variável x_i é atualizado para ser o novo ponto baseado em s^* .

Problema de design de reatores químicos

O problema foi proposto por Manousiouthakis e Sourlas (1992) e envolve dois reatores de tanque agitado (CSTR) de mistura perfeita, onde ocorrem as reações $A \xrightarrow{k_0} B \xrightarrow{k_1} C$ e $A \xrightarrow{k_2} B \xrightarrow{k_3} C$ para o primeiro e segundo reator, respectivamente. A , B e C são componentes do sistema. Em ambas as reações são assumidas cinéticas de primeira ordem. As variáveis x_0 e x_1 são concentrações de A na saída do primeiro e segundo reator, respectivamente e x_3 e x_4 são concentrações de B na saída do primeiro e segundo reator. O objetivo é projetar um *design* de modo que a concentração de B na corrente de saída do segundo reator x_3 seja maximizada e não exceda um determinado limite superior no custo de investimento. A concentração de entrada de A no primeiro reator é 1 mol/L e as constantes cinéticas são: $k_0 = 0.09755988 \text{ s}^{-1}$, $k_1 = 0.99k_0$, $k_2 = 0.0391908 \text{ s}^{-1}$, e $k_3 = 0.9k_2$.

$$\text{Min } F^{UB} = -x_3 \quad (24)$$

$$\text{s. a: } x_0 + k_0 x_0 x_4 = 1 \quad (15)$$

$$x_1 - x_0 + k_1 x_1 x_5 = 0 \quad (16)$$

$$x_2 + x_0 + k_2 x_2 x_4 = 1 \quad (17)$$

$$x_3 - x_2 + x_1 - x_0 + k_3 x_3 x_5 = 0 \quad (18)$$

$$x_4^{0.5} + x_5^{0.5} \leq 4 \quad (19)$$

$$0 \leq x_0, x_1, x_2, x_3 \leq 1 \quad (20)$$

$$0 \leq x_4, x_5 \leq 16 \quad (21)$$

Este problema, contém minimizadores locais muito próximos ao ótimo global: Os ótimos locais são: $x = (0,390; 0,390; 0,375; 0,375; 16; 0)^T$, com $F^{UB} = -0.375$, e em $x = (1; 0,393; 0; 0,388; 0; 16)^T$ com $F^{UB} = -0.3881$. A solução ótima global é $x = (0,771462; 0,516997; 0,204234; 0,388812; 3,036504; 5,096052)^T$ com $F^{UB} =$

-0.38881143. Para aplicar o método *BC* no problema, definimos as variáveis: $z_0 = x_0x_4$, $z_1 = x_1x_5$, $z_2 = x_2x_4$, $z_3 = x_3x_5$, e $w_0 = x_4^{0.5}$, $w_1 = x_5^{0.5}$. O procedimento de contração é realizado escolhendo $x_i \in \{x_4, x_5\}$ a serem contraídas. Após a substituição de variáveis, temos o a formulação do problema *LB* relaxado e o método é aplicado conforme a metodologia já discutida.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O procedimento encontra a solução na primeira iteração, que contrai significativamente a concentração de *B* na corrente de saída do segundo reator (x_3) e traz a função objetivo do *Lower Bound* de -0,48115036 para -0,388837496 que tem uma lacuna de 0,0075%. A solução global ($F^{UB} = -0,38881143$) é encontrada em 2,1 segundos de CPU.

CONCLUSÕES

O problema de design de reatores químicos demonstrou que o método *BC* para otimização de modelos com convexidades, é eficaz para encontrar a solução ótima global de maneira rápida e precisa, mesmo neste caso com múltiplos ótimos locais próximos ao ótimo global. Assim, destaca-se o potencial do método *BC* como uma ferramenta robusta para resolver problemas complexos de otimização na engenharia.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao CNPq pela bolsa do PIBIC para a produção científica em questão.

REFERÊNCIAS

FARIA, D. C.; BAGAJEWICZ, M. J. Novel bound contraction procedure for global optimization of bilinear MINLP problems with applications to water management problems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 35, n. 3, p. 455-446, 8 abr. 2010. DOI <https://doi.org/10.1016/j.compchemeng.2010.04.010>.

MANOUSIOUTHAKIS, V.; SOURLAS, D. A Global optimization approach to rationally constrained rational programming. **Chemical Engineering Communications**, v. 115, n. 1, p. 127-147, 02 jan. 1991. DOI <https://doi.org/10.1080/00986449208936033>.