

## MODELAGEM, SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DE UM REATOR CSTR COM O USO DE ALGORITMO GENÉTICO

<sup>1</sup>Arthur da Silva Vasconcelos de Almeida; <sup>2</sup>Lucas Costa Barreto; <sup>3</sup>Bruno Carlos Vieira dos Santos; <sup>4</sup>Frede Oliveira  
Carvalho

<sup>1</sup>arthur\_silva\_almeida@hotmail.com; <sup>2</sup>lucascosta\_108@hotmail.com 1; <sup>3</sup>brunocarlos343@hotmail.com;  
<sup>4</sup>fredecarvalho@yahoo.com.br

<sup>1,2,3,4</sup>Universidade Federal de Alagoas; Av. Lourival Melo Mota, S/N; 57072-900 ; Maceió; Alagoas; Brasil

**RESUMO:** *No mercado competitivo que temos na atualidade cada vez mais o engenheiro é incentivado a melhorar e otimizar os processos industriais. Buscar otimização por meio da modelagem vem se mostrando bem eficiente e esse trabalho se utilizou da ferramenta do Algoritmo Genético (GA) com implementação em ambiente Matlab® para otimizar a produção de ciclopentanol em um sistema reacional que segue o mecanismo proposto por Van der Vusse utilizando os parâmetros descritos no trabalho de Vojtěšek.*

### 1 INTRODUÇÃO

Um engenheiro no mercado de trabalho atual tem que estar cada vez mais preparado para lidar com um mundo globalizado inclusive a indústria de processos químicos procura cada vez mais que um engenheiro tenha capacidade de liderança, ter capacidade de tomar decisões e principalmente ter a capacidade de resolver problemas. Nesse tipo de indústria principalmente é de grande importância o engenheiro responsável ter controle completo de todo o processo e saber lidar com qualquer mudança.

A muito tempo atrás era muito difícil realizar qualquer mudança mínima no processo, visto que investigar a modificação diretamente torna o procedimento arriscado tanto financeiramente quanto para a segurança do processo, do meio ambiente e para os trabalhadores. Com o avanço da tecnologia passou-se a utilizar a modelagem e a simulação de processos químicos a fim de diminuir o tempo de resposta para experimentos no processo, gerando assim um ganho para a indústria. Com o tempo e a utilização desse novo recurso a indústria passou a ter interesse em operar toda as plantas do processo de forma otimizada com a ajuda do computador.

Na maioria das indústrias químicas é mais conveniente o uso de reatores contínuos, pois estes operam intermitentemente, exceto em casos excepcionais, garantindo uma maior produtividade, sendo assim, para que o processo possa ser otimizado com segurança se faz necessário o estudo das

variáveis envolvidas as quais interferem diretamente na produtividade. Entretanto, o estudo dessas variáveis diretamente na planta se torna inviável devido ao custo, ao risco de falhas e propensão de ocorrência de acidentes. Desta forma o processo pode ser simulado através dos modelos matemáticos fenomenológicos que descrevem o mesmo, se baseando nas equações de balanços de massa e energia.

A otimização é um ramo da matemática que busca a solução de funções características de determinados fenômenos para encontrar os parâmetros que culminam em um valor máximo ou mínimo como resposta da função. Diversas ferramentas computacionais podem ser utilizadas para esse fim, e cada uma delas possui suas particularidades, podendo ser clássicas ou heurísticas. O GA (Algoritmo Genético) é um método heurístico de otimização desenvolvido por John Holland e seus alunos na Universidade de Michigan, nas décadas de 1960 e 1970. Inicialmente, a intenção de Holland não era criar um algoritmo capaz de solucionar problemas específicos, mas sim de implementar a teoria da evolução de Darwin a sistemas computacionais (MITCHELL, 1999). Porém, o GA se mostrou um método de otimização inovador, robusto e capaz de se adaptar em um “ambiente” em constante mudança, utilizando conceitos como o crossover e a recombinação de cromossomos, a mutação e a seleção natural, segundo o qual os mais adaptados sobrevivem (YU, GEN, 2010).

Na implementação do GA em problemas de otimização, valores aleatórios são gerados dentro de um domínio de estudo para representar uma população inicial, a geração parental. Esses valores são representados na forma de cromossomos, através de *bit strings*, e possuem uma certa “qualidade”, chamada *fitness value*, que é um parâmetro do quanto esse valor representa bem a solução ótima do problema. Assim, através do valor desse parâmetro, o algoritmo seleciona randomicamente os indivíduos mais adaptados e realiza permutações entre os cromossomos, de maneira semelhante ao que ocorre no crossover e na recombinação, substitui valores dos strings de 0 para 1 ou vice-versa, como seria nas mutações, através da função objetivo e vai gerando novos valores, que são as gerações descendentes. Ao final, o GA obtém uma geração de descendentes como resultado ótimo do problema em questão.

Os principais problemas em que o GA é utilizado são aqueles em que as funções a ser otimizadas possuem vários pontos de máximo locais, o que dificulta a utilização de métodos tradicionais, como aqueles que se baseiam no uso das derivadas das funções (GOLDBERG, 1989). Isso se dá justamente pelo mecanismo de seleção dos indivíduos mais aptos, utilizado no algoritmo, que permite uma busca pelos melhores candidatos dentro do domínio de estudo e, consequentemente, uma produção de descendentes com uma melhor qualidade após o processo de evolução implementado.

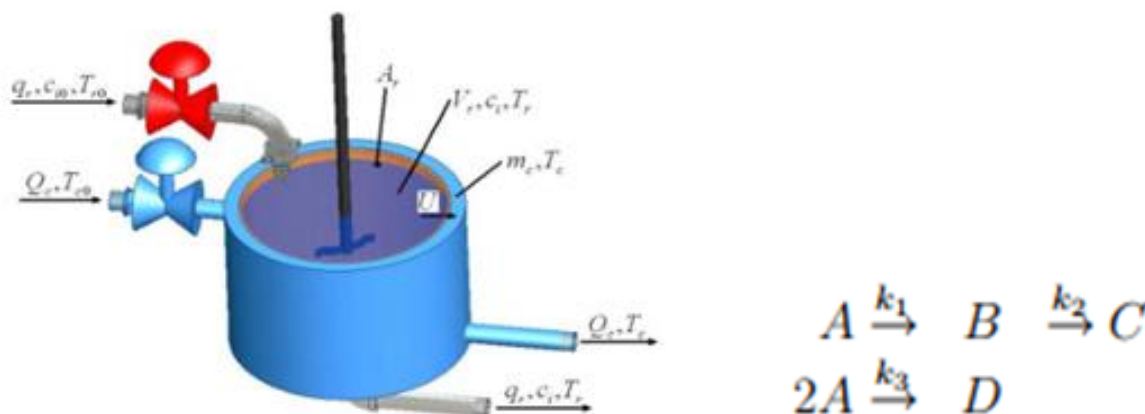
Esse trabalho foi direcionado para otimizar a produção de ciclopentanol (B) em um sistema reacional que segue o mecanismo proposto por Van der Vusse, processando a reação em um reator de mistura perfeita (*Continuous Stirred Tank Reactor* – CSTR), utilizando os parâmetros descritos no trabalho de Vojtěšek. Escolheu-se a utilização do GA com implementação em ambiente Matlab®.

## 2 METODOLOGIA

A princípio, a modelagem e simulação presente neste trabalho contemplou o sistema reacional de Van De Vusse e foram pesquisadas técnicas e as melhores condições operacionais para otimizar a produção máxima do componente B (ciclopentanol) no sistema reacional citado anteriormente com camisa de resfriamento. Para realizar isso utilizou-se o modelos de algoritmos evolucionários de acordo com as especificações do sistema.

A função objetivo implementada para maximizar a produção do composto B, no problema em questão, foi o inverso da concentração do composto B e admitiu-se que o processo acontecia com a utilização de uma mistura perfeita, onde as densidades, capacidades caloríficas e coeficientes de transferência são constantes ao longo de toda a reação. As variáveis e as reações envolvidas no processo estão descritas na figura 1 e estão diretamente envolvidas em todo o estudo do processo.

**Figura 1** - Reator CSTR com camisa de resfriamento e Modelo de reações de Van Der Vusse.



Como exemplo de um processo que segue este mecanismo pode ser lembrada a transformação do ciclopentadieno (A) no produto ciclopentenol (B), e paralelamente temos formação do dicitopentadieno (C) e do ciclopentanediol (D), reação descrita em Klatt e Engell (1998). A corrente de entrada do reator contém apenas o reagente A numa concentração inicial  $C_{A0}$ .

Com essas simplificações foram obtidas as equações do balanço que foram utilizadas para modelar o processo que ocorria no reator representadas a seguir:

$$\frac{dc_A}{dt} = \frac{q_r}{V_r} (c_{A0} - c_A) - k_1 c_A - k_3 c_A^2 \quad \text{EQ1}$$

$$\frac{dc_B}{dt} = \frac{-q_r}{V_r} c_B + k_1 c_A - k_2 c_B \quad \text{EQ2}$$

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{q_r}{V_r} (T_{r0} - T_r) - \frac{h_r}{\rho_r c_{pr}} + \frac{A_r U}{V_r \rho_r c_{pr}} (T_c - T_r) \quad \text{EQ3}$$

$$\frac{dT_c}{dt} = \frac{1}{m_c c_{pr}} (Q_c + A_r U (T_r - T_c)) \quad \text{EQ4}$$

Foi realizada então a simulação desse reator na plataforma MATLAB® e para isso foram utilizadas as condições operacionais e parâmetros descritos em no trabalho de Jiří Vojtěšek (2008). Depois de desenvolvido o modelo que representasse o processo foi simulado um intervalo de condições da operação de vazão de entrada ( $Q_c = \langle -500; 500 \rangle$ ) e do calor cedido ao reator ( $q_r = \langle 0; 0.03 \rangle$ ) a fim de encontrar a condição operacional ótima para a otimização da produção do componente B.

### 3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

#### 3.1 Modelagem e Otimização

A modelagem foi feita a fim de observar o processo até o estado estacionário, onde foi direcionado para resolver o sistema de equações algébricas não lineares que são os balanços de massa e energia do sistema, além disso a análise do estado estacionário e o método iterativo possibilitou encontrar uma condição ótima de operação dentre os intervalos de  $Q_c$  e  $q_r$ . Então, depois de desenvolvido o modelo que representasse o processo, foram simuladas condições de operação no intervalo de  $Q_c = \langle -500; 500 \rangle$  e  $q_r = \langle 0; 0.03 \rangle$  e, com isso, foi analisada a superfície gerada; tornando fácil verificar alguns pontos viáveis de produção máxima de ciclopentanol e também fazer uma análise do comportamento das variáveis do processo (temperatura do reator e da camisa e concentrações de todos os componentes).

##### 3.1.1 Algoritmo Genético

O conjunto de soluções geradas foi avaliado por uma função objetivo, no caso, a produção máxima de B ( $C_b$ ). Na linguagem Matlab o comando *ga* (*genetic algorithm*) apenas minimiza

funções; então para maximizar a produção de B foi aplicado esse comando ao inverso da função objetivo. Sendo assim, o resultado obtido através do método de algoritmo genético foram as saídas de vazão e calor, valores esses que implicam na máxima concentração do componente B.

Foi verificado então através da análise dos resultados que a otimização por meio do algoritmo genético foi satisfatória, visto que ele retornou uma boa resposta ao problema sem um esforço computacional muito grande. Apesar desse método ser muito genérico e poder ser aplicado a várias coisas, restrições foram aplicadas a fim de que evitasse que o algoritmo procurasse soluções fora do domínio do problema, e essas restrições garantiram que o problema tivesse significado físico.

Depois de que foram implementados os operadores de mutação e crossover foram obtidas algumas condições que resultam na produção máxima de B; e um dos conjuntos de parâmetros que satisfazem isso é quando  $qr = 0,001$  e  $Q_c = -0,2315$ . Na tabela 1 encontra-se um comparativo entre os pontos ótimos de comparação obtidos nesse trabalho com outros resultados já obtidos da literatura.

**Tabela 1** - Comparação de pontos ótimos do processo.

Método	$qr(x10^{-3} m^3.min^{-1})$	$Q_c(kJ.min^{-1})$	$C_A(kmol.m^{-3})$	$C_B(kmol.m^{-3})$	$T_r(K)$	$T_c(K)$
Vojtěšek	2.365	-18.56	2.1403	1.0903	387.3	386.06
Vishnoi	--	0	3.000	1.117	Isotérmico	Isotérmico
Magalhães	6	--	3.4	0.95	383	378
Sebastian	31.38	-74.928	1.235	0.9	407.29	402.1
AG (*)	2.4	-0.0133	2.1806	1.0903	390.8821	390.8812
AG (**)	1	-0.2315		1.0752		

**OBS:** (\*) – Newton-Raphson / (\*\*) – Vojtěšek

Fonte: Autor, 2018

No trabalho de Vishnoi foi definido um set point e não foi levado em consideração as variações de temperatura, ou seja, foi considerado um reator isotérmico. Já os trabalhos de Sebastian e de Magalhães levaram em conta a influência da temperatura e também do fluxo, sendo estes desenvolvidos em otimização dinâmica em tempo real (RTO). No método de Newton-Raphson foram resolvidas as EDO's através de Runge Kutta e utilizou-se funções já existentes para resolução de problema de valor inicial e aplicou-se o método de algoritmo genético. Já o método de Vojtěšek utilizou apenas a visualização gráfica para definir o ponto ótimo de produção de ciclopentanol (B), enquanto o algoritmo genético do mesmo método apresentou valores distintos das variáveis principais, calor e vazão volumétrica.

Vale salientar que o processo avaliado neste trabalho possui múltiplos estados estacionários, sendo assim, diversas combinações de  $Q_c$  e  $qr$  podem levar a um máximo na produção de B.

## 4 CONCLUSÕES

Os resultados desse trabalho permitiram obter informações que agregam para o entendimento do processo e como nos outros métodos de análise do problema percebemos que ele possui resultados similares e condizem com a realidade do reator. Entretanto se comparado com o trabalho do Vishnoi esse trabalho representa melhor a realidade visto que utilizando o outro método não considera as variações de temperatura da camisa ao longo do processo. Já nos outros trabalhos a questão da temperatura foi levada em consideração e podemos perceber que todos eles obtiveram saídas parecidas do componente B, até o do próprio Vishnoi, entretanto vale ressaltar que cada método possui sua vazão de entrada e calor, visto que o reator possui diversas maneiras de chegar ao ponto ótimo devido aos múltiplos estados estacionários.

## 5 REFERÊNCIAS

Goldberg, E. D. Genetic algorithms. Pearson Education, 2006 .

Holland, J.H., 1984. Genetic algorithms and adaptation. In: Adaptive Control of Ill-Defined Systems. Springer US, Boston, MA .

Mitchell, M. An introduction to Genetic Algorithms. Massachusetts Institute of Technology, Cambridge, Massachusetts - London, England, 5 th 1999.

VOJTĚŠEK, J. Chemical Reactors: Modern Control Methods, 2007.

Yu, X., Gen, M. Introduction to evolutionary algorithms. British Library Cataloguing in Publication Data, London 2010.