

OTIMIZAÇÃO DE UM REATOR DE SÍNTESE DE AMÔNIA UTILIZANDO O BAT ALGORITHM

Taline Góes^{1*}, Walber Lima², Rogério Pagano²

1 – Universidade Federal de Sergipe – UFS, São Cristóvão-SE, talinevgoes@hotmail.com

2 – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química – UFS, São Cristóvão-SE

Abstract – Heuristic optimization techniques have become well-known due to the high number of algorithms developed in recent years, as well as to the several applications in different types of engineering problems, especially in the field of optimization of industrial chemical processes. An industrial process that requires special attention is the ammonia synthesis process, which needs to be constantly improved once ammonia is an important industrial chemical feedstock. This project evaluates the use of the heuristic method Bat Algorithm (BA) to ammonia synthesis reactor design problem. As a result, the BA reached maximum values for the economic return objective function equals to $5,029 \cdot 10^6$ \$/year considering the reactor's length equals to 7,48 m ($T_0 = 694$ K), $5,032 \cdot 10^6$ \$/year for a length of 7,57 m ($T_0 = 700$ K) and $5,006 \cdot 10^6$ \$/year for a 10 m reactor ($T_0 = 800$ K). The values of economic return reached in this project were better than several studies that can be found in the literature.

Keywords: Optimization, Heuristic Algorithm, Bat Algorithm, Ammonia Synthesis Reactors

Introdução

As abordagens heurísticas em problemas de otimização estão se tornando cada vez mais populares em aplicações de engenharia, pois elas dependem de conceitos simples e são de fácil implementação; não requerem informações de derivadas; são capazes de desconsiderar ótimos locais; e podem ser aplicadas para a solução de problemas diversificados, abrangendo inúmeras áreas [1].

Uma das vertentes que tem se destacado no que se refere ao crescente uso de algoritmos heurísticos é a otimização de processos e reatores químicos. Um problema, desta área, que requer uma atenção especial, é o processo de síntese de amônia. Uma vez que a amônia é considerada um importante insumo químico industrial, que é utilizado na fabricação dos mais variados produtos que vão desde fertilizantes até plásticos e fibras [2].

A reação de síntese de amônia (Eq. 1) é reversível e altamente exotérmica e, por isso, é comumente processada nas indústrias em reatores autotérmicos. Este tipo de reator utiliza o calor liberado na própria reação para aquecer o gás de alimentação e manter a temperatura apropriada dentro do reator. Como a produção de amônia depende de fatores como temperatura do gás de alimentação (T_f), temperatura da mistura reacional (T_g) e fluxo mássico de nitrogênio (N_{N_2}), e todos estes fatores estão intrinsicamente relacionados com o comprimento do reator (x). Desta forma, o problema de otimização destes reatores autotérmicos de síntese de amônia consiste na obtenção do comprimento ótimo que retorne a valores de T_f , T_g , e N_{N_2} capazes de gerar altos rendimentos econômicos para o processo [3,4].



Na literatura, existem diversos trabalhos que discutem a modelagem, simulação e otimização de reatores autotérmicos, como em Babu e Angira [5], Upreti e Deb [6], Yusup *et al.* [7], Borges *et al.* [3], Carvalho *et al.* [8] e em Nguyen *et al.* [4]. Nestes trabalhos, os autores aplicaram diferentes abordagens heurísticas para otimizar a função-objetivo retorno econômico do processo através da obtenção do comprimento ótimo do reator de síntese.

Dentre os diversos algoritmos heurísticos que podem ser aplicados no problema de otimização do reator autotérmico de síntese de amônia pode-se citar o *Bat Algorithm*. Este algoritmo é baseado na habilidade de ecolocalização de morcegos [9]. O fenômeno da ecolocalização se baseia na emissão de ondas ultrassônicas e correspondente a

medição do tempo gasto para estas ondas voltarem ao ponto de origem após serem refletidas pelo alvo ou obstáculo [10].

De forma semelhante a outras técnicas baseadas em inteligência de enxames, o algoritmo inspirado em morcegos começa com um conjunto de soluções provisórias, onde cada morcego tem a sua taxa de emissão (r_i) e volume de pulso (A_i). Estes morcegos voam aleatoriamente guiados pelo sistema de ecolocalização e a cada iteração os morcegos memorizam sua localização atual, em seguida sua velocidade e frequência são ajustadas para a obtenção de novas posições, conforme Eq. 2-4. A localização ajustada de cada morcego é analisada para extrair um conjunto de melhores locais (funções-objetivos) de morcegos selecionados [11,12].

$$f_i = f_{min} + (f_{max} - f_{min})\beta \quad (2)$$

$$v_i^t = v_i^{t-1} + (x_* - x_i^{t-1})f_i \quad (3)$$

$$x_i^t = x_i^{t-1} + v_i^t \quad (4)$$

sendo t e $t-1$ duas iterações sucessivas do algoritmo, f_i a frequência do morcego- i , v_i^t a velocidade do morcego- i na iteração t , x_i^t a posição do morcego- i na iteração t , f_{min} e f_{max} os valores que delimitam o intervalo de frequência, $\beta \in [0,1]$, x_* a melhor posição/solução possível na iteração.

Após a atualização da frequência, velocidade e posição, os parâmetros de taxas de emissão de pulso emitidas por cada morcego devem ser verificados. Essa checagem é realizada por meio da comparação da taxa de emissão (r_i) com um ruído aleatório. Caso o ruído aleatório, gerado por uma função randômica, seja maior do que a taxa de emissão, significa que provavelmente o morcego- i está distante da melhor solução. E com isso, sorteia-se uma solução entre as melhores e através de um pequeno deslocamento gera-se uma nova solução para o morcego- i , conforme Eq. 5 [12].

$$x_{novo} = x_{velho} + \epsilon A^t \quad (5)$$

tal que, $\epsilon \in [-1,1]$ e é um escalar aleatório e A^t a média da intensidade de pulso de todos os morcegos na iteração t .

A intensidade dos pulsos (A_i) e a taxa de emissão dos pulsos (r_i) são atualizadas a medida que as iterações prosseguem. A intensidade diminui e a taxa de pulso aumenta conforme o morcego vai se aproximando de sua presa. As atualizações da intensidade de pulsos e da taxa de emissão de pulsos são descritas, respectivamente, pelas Eq. 6 e 7 [13].

$$A_i^{t+1} = \alpha A_i^t \quad (6)$$

$$r_i^{t+1} = r_i^0 [1 - e^{-\gamma t}] \quad (7)$$

sendo, α e γ constantes positivas com valores $\in [0,1]$.

Diante do quadro descrito anteriormente, o presente artigo propõe a aplicação da subrotina DASSL para resolver numericamente o sistema de equações diferenciais que governam o processo de síntese de amônia em reatores autotérmicos e a aplicação do método heurístico *Bat Algorithm* para otimizar o projeto do equipamento simulado, de modo a maximizar o retorno econômico do processo.

Metodologia

Implementação do *Bat Algorithm*

O algoritmo de otimização *Bat Algorithm* foi implementado em linguagem de programação FORTRAN 90. O código utilizado foi baseado nos trabalhos de Jaddu *et al.* [14] e Yang [9] e desenvolvido no Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos (LAMSIM) da Universidade Federal de Sergipe.

Os valores dos parâmetros do algoritmo adotados no estudo são mostrados na Tabela 1. O algoritmo fora testado 20 vezes para a função-objetivo analisada e foi

estabelecido como critério de convergência o número máximo de iterações igual a 3000, utilizando assim um número máximo de 3.000.000 soluções candidatas. Para fins de avaliação dos resultados, foi calculada a média das funções-objetivo obtidas pelo algoritmo de otimização em cada uma das execuções.

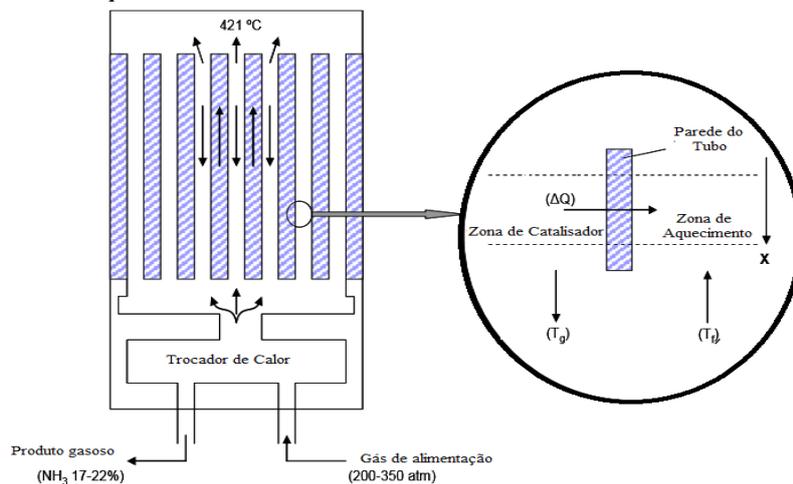
Tabela 1 – Valores dos parâmetros dos algoritmos testados.

Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor	Parâmetro	Valor
Nº de indivíduos	100,00	A _{max}	1,00	γ	0,90
f_{max}	1,00	A _{min}	0	Γ_{max}	1,00
f_{min}	0	α	0,90	Γ_{min}	2,00

Modelagem matemática e simulação do reator de síntese de amônia

A modelagem matemática do reator utilizado neste trabalho foi baseada no modelo proposto por Carvalho *et al.* [8]. O gás de alimentação contém uma composição molar de 21,75 % de N₂, 65,25 % de H₂, 5% de NH₃, 4% de CH₄ e 4% de Ar, sendo os dois últimos gases inertes. A reação ocorre na temperatura de 500°C em uma pressão de 200 atm. O esquema do reator simulado é mostrado na Fig 1.

Figura 1 – Esquema do reator de síntese de amônia simulado neste trabalho [7].



As simplificações adotadas neste trabalho são: transferência difusiva de calor e massa negligenciadas; temperatura do gás na zona do catalisador igual a temperatura da partícula de catalisador; capacidades térmicas dos gases constantes; atividade catalítica uniforme ao longo do reator e igual a 1; e queda de pressão no reator negligenciável, se comparada a pressão total do sistema.

Para o modelo do reator, são considerados os balanços de energia para o gás de alimentação (T_f) e para o gás de reação (T_g) e o balanço de massa para o nitrogênio (N_{N_2}), conforme Eq. 8-10, respectivamente.

$$\frac{dT_f}{dx} = -\frac{US_1}{WC_{pf}}(T_g - T_f) \quad (8)$$

$$\frac{dT_g}{dx} = -\frac{US_1}{WC_{pg}}(T_g - T_f) + \frac{(-\Delta H)S_2}{WC_{pg}}\left(-\frac{dN_{N_2}}{dx}\right) \quad (9)$$

$$\frac{dN_{N_2}}{dx} = -F \left[K_1 \frac{p_{N_2} p_{H_2}^{1,5}}{p_{NH_3}} - K_2 \frac{p_{NH_3}}{p_{H_2}^{1,5}} \right] \quad (10)$$

sendo, $K_1 = 1,78954 \cdot 10^4 e^{\left(\frac{-20800}{RT_g}\right)}$ e $K_2 = 2,5714 \cdot 10^{16} e^{\left(\frac{-47400}{RT_g}\right)}$

As pressões parciais dos componentes da reação de síntese de amônia, que aparecem nos balanços de energia para o gás de reação e de massa para o nitrogênio, são mostradas nas Eq. 11-13, respectivamente para nitrogênio, hidrogênio e amônia.

$$p_{N_2} = \frac{286N_{N_2}}{2,598N_{N_2}^0 + 2N_{N_2}} \quad (11)$$

$$p_{H_2} = 3p_{N_2} \quad (12)$$

$$p_{NH_3} = \frac{286(2,23N_{N_2}^0 - 2N_{N_2})}{2,598N_{N_2}^0 + 2N_{N_2}} \quad (13)$$

As condições iniciais para o problema descrito pelas Eq. 8-10 são $T_f^0=694, 706$ e 800 K, $T_g^0=694, 706$ e 800 K e $N_{N_2}^0=701,20 \frac{\text{kmol}}{\text{h}\cdot\text{m}^2}$ para T_f , T_g e N_{N_2} , respectivamente. T_f^0 , T_g^0 e $N_{N_2}^0$ denota os valores iniciais em $x = 0$ (topo do reator).

Os parâmetros das Eq. 8-13 com seus valores numéricos são: C_{pf} – Capacidade Calorífica do gás de alimentação ($0,707 \text{ kcal}/(\text{kg}\cdot\text{K})$); C_{pg} – Capacidade Calorífica do gás de reação ($0,709 \text{ kcal}/(\text{kg}\cdot\text{K})$); F – Atividade catalítica ($1,0$); ΔH – Calor de reação ($-26.000 \text{ kcal}/(\text{kmol}\cdot\text{N}_2)$); R – Constante de gás ideal ($1,987 \text{ kcal}/(\text{kmol}\cdot\text{K})$); S_1 – Área superficial dos tubos catalíticos por unidade de comprimento do reator (10 m); S_2 – Área da seção transversal da zona de catalisador ($0,78 \text{ m}^2$); U – Coeficiente de transferência de calor na parede ($500 \text{ kcal}/(\text{h}\cdot\text{m}^2\cdot\text{K})$); W – Taxa total de transferência de massa ($26.400 \text{ kg}/\text{h}$); T^0 – Temperatura de Topo do reator (694 K , 706 K e 800 K).

Para simular o reator apresentado foi desenvolvido um código do modelo em linguagem de programação FORTRAN 90. Para resolver numericamente o sistema de equações diferenciais propostos para o reator, foi utilizada a subrotina DASSL, desenvolvida por Petzold [15].

Otimização do reator simulado

O problema adotado consiste na otimização de reatores autotérmicos de síntese amônia a partir do processo de Haber-Bosch. Tal problema requer a maximização de uma função-objetivo sujeita a uma série de restrições de desigualdade e de igualdade envolvendo a solução de equações diferenciais acopladas (vide Eq. 8-10). As restrições de desigualdades adotadas são: $0 \leq N_{N_2} \leq 3220 \text{ (kmol}/\text{m}^2\text{h)}$, $400 \leq T_f \leq 800 \text{ (K)}$, $400 \leq T_g \leq 800 \text{ (K)}$ e $0 \leq x \leq 10 \text{ (m)}$.

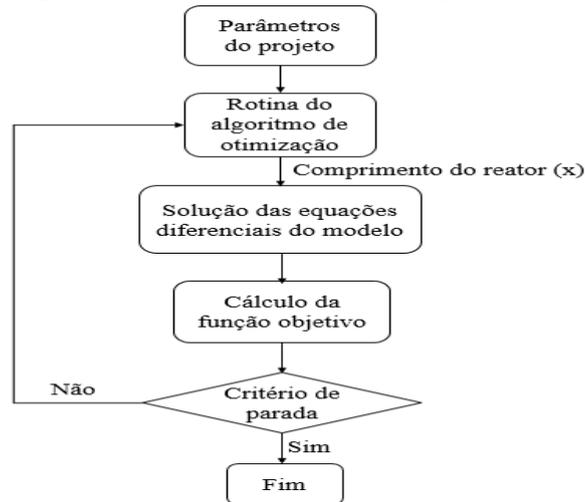
A otimização realizada neste trabalho teve como função-objetivo o retorno econômico do processo, baseado na diferença entre o valor do produto gasoso e o valor do gás de alimentação menos a amortização dos custos de capital do reator. Os outros custos operacionais foram negligenciados. Tal função-objetivo, apresentada na Eq. 14, é a mesma utilizada nos trabalhos de Babu e Angira [5], Upreti e Deb [6], Yusup *et al.* [7], Borges *et al.* [3], Carvalho *et al.* [8] e em Nguyen *et al.* [4]:

$$f(x, N_{N_2}, T_f, T_g) = 1,33563 \cdot 10^7 - 1,70843 \cdot 10^4 N_{N_2} + 704,09(T_g - T_0) - 699,27(T_f - T_0) - (3,45663 \cdot 10^7 + 1,98365 \cdot 10^9 \cdot x)^{0,5} \quad (14)$$

A expressão de f depende das variáveis x , N_{N_2} , T_g e T_f , para um dado valor de T_0 . É válido salientar que T_g , T_f e N_{N_2} são funções de x , conforme descrito nas Eq. 8-10. Portanto, o problema de otimização desses reatores consiste na obtenção do comprimento que forneça valores de T_f , T_g e N_{N_2} que possam otimizar a função-objetivo proposta, conforme procedimento representado na Fig 2.

O procedimento sintetizado na Fig 2 consiste, primeiramente, na proposição de um determinado valor de comprimento para o reator de síntese de amônia pelo algoritmo de otimização empregado. De posse do valor de x fornecido pelo algoritmo, são buscados na solução do modelo os valores das variáveis dependentes correspondentes à variável axial encontrada. Estes valores são fornecidos ao algoritmo de otimização para que a função-objetivo seja calculada. Estes passos são repetidos, seguindo-se às características intrínsecas do método de busca, até que o critério de parada seja satisfeito.

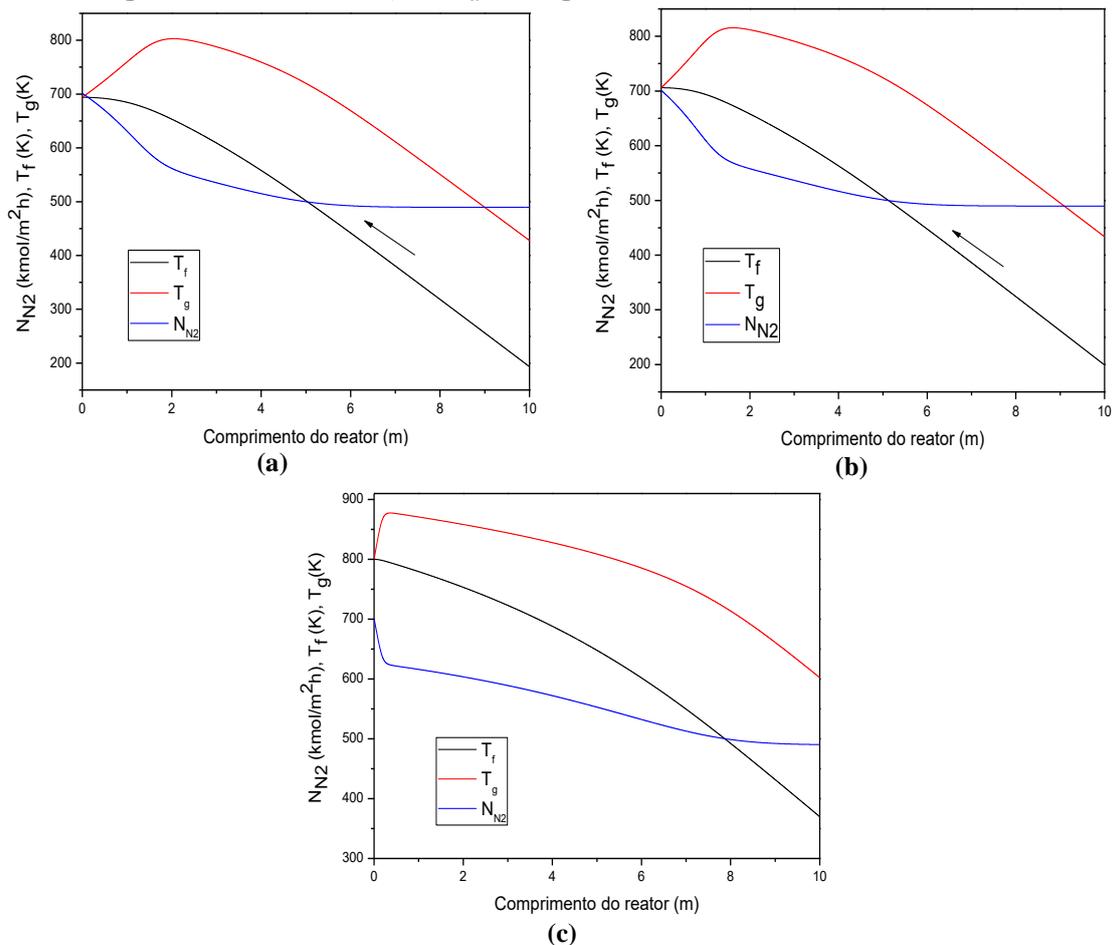
Figura 2 – Procedimento de otimização adotado.



Resultados e Discussões

Os resultados da simulação do reator de amônia implementado neste trabalho, para as temperaturas de topo iguais a 694 K, 706 K e 800 K estão ilustrados nas Fig 3(a), 3(b) e 3(c), respectivamente. Nesta Figura, são mostrados os perfis das variáveis N_{N_2} , T_f e T_g ao longo do comprimento do reator autotérmico de síntese de amônia.

Figura 3 – Perfis de N_{N_2} , T_f e T_g ao longo do reator. $T_0=694$ K(a), 706 K(b) e 800 K(c).



A partir dos resultados mostrados na Fig 3, é possível observar que os perfis obtidos apresentaram um comportamento suave, indicando boa convergência do método numérico aplicado e estabilidade no modelo para as diferentes temperaturas de topo

analisadas. Os perfis obtidos neste trabalho também corroboram os perfis numéricos apresentados nos trabalhos de Carvalho *et al.* [8] e Borges *et al.* [3]. Dessa forma, o método numérico adotado foi capaz de obter resultados satisfatórios para o modelo.

Otimização do reator autotérmico de síntese de amônia

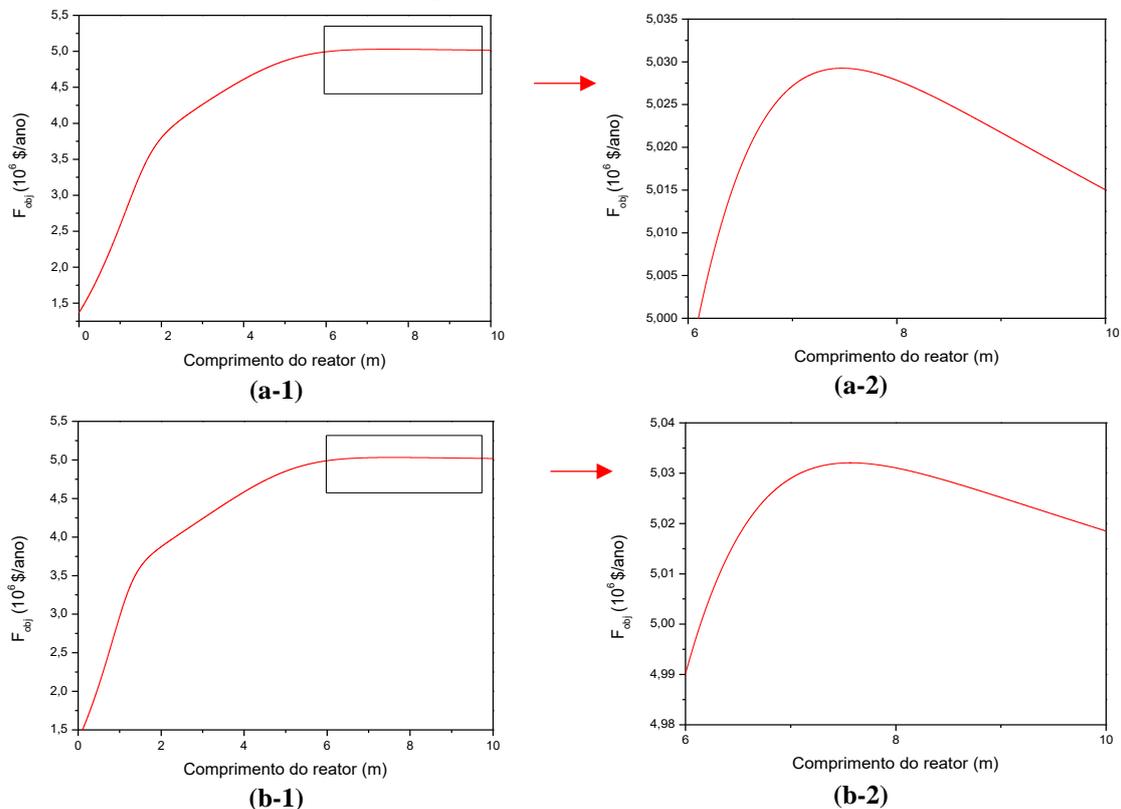
O objetivo da otimização do reator simulado neste trabalho é a obtenção do comprimento ótimo que retorne o maior valor da função-objetivo (Eq. 14). Para a obtenção dos valores ótimos, o algoritmo foi executado 20 vezes e a partir dos valores obtidos em cada execução, a média aritmética foi calculada. A otimização foi realizada em diferentes temperaturas de topo e os valores encontrados são mostrados na Tabela 2.

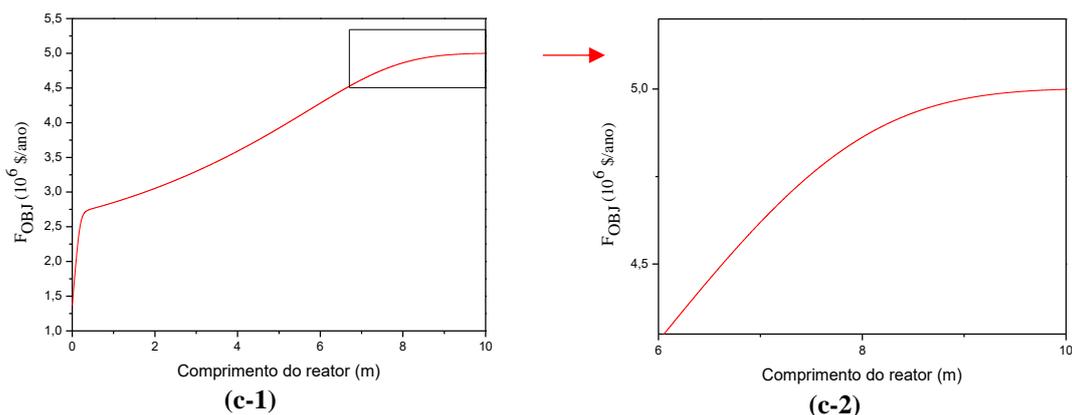
Tabela 2 – Resultados da otimização do reator simulado com $T_0=694$ K, 706 K e 800 K.

Temperatura de Topo (T_0)	694 K	706 K	800 K
Ótimo da função (\$/ano)	5.029.257,76	5.032.061,44	5.005.759,19
Comprimento ótimo (m)	7,480	7,571	10,000
T_f ótimo (K)	350,663	350,072	369,944
T_g ótimo (K)	582,337	582,164	602,292
N_{N_2} ótimo (kmol/m ² h)	489,722	489,528	490,388

Como o objetivo principal deste estudo é verificar se o algoritmo de otimização alcançou ou se aproximou dos retornos econômicos máximos do processo, foram plotados os gráficos das funções-objetivo a partir dos resultados do sistema proposto, Eq. 8-10, calculados em cada valor de x . Os gráficos das funções-objetivo para $T_0 = 694$, 706 e 800 K são mostrados, respectivamente, nas Fig 4(a), 4(b) e 4(c).

Figura 4 – Gráfico da função-objetivo em $T_0 = 694$ K (a), 706 K(b) e 800 K(c) em função do comprimento do reator. Para todo o comprimento do reator (1). Para valores de comprimento próximos ao ótimo (2).





A partir da Fig 4, foi observado que os pontos ótimos da função-objetivo para $T_0 = 694, 706$ e 800 K são, respectivamente, iguais a 7,48, 7,57 e 10 m. Dessa maneira, o algoritmo avaliado alcançou o objetivo de otimização do problema proposto para as 3 condições, ou seja, o *Bat Algorithm* foi capaz de maximizar a função-objetivo. Inclusive, os valores das funções obtidos neste trabalho ultrapassaram os encontrados em diferentes trabalhos na literatura, conforme mostrado na Tabela 3.

Tabela 1 – Valores das funções-objetivo obtidos na otimização de reatores autotérmicos de síntese de amônia em diferentes trabalhos da literatura.

Autores	T_0 (K)	F_{obj} (\$/ano)	$X_{ótimo}$ (m)	Método de otimização
Upreti e Deb (1997)	694	$4,230 \cdot 10^6$	5,330	Algoritmo Genético
Babu e Angira (2005)	694	$4,480 \cdot 10^6$	6,790	Evolução Diferencial
Carvalho <i>et al.</i> (2014)	694	$5,016 \cdot 10^6$	6,694	Método de busca direta
Yusup <i>et al.</i> (2006)	694	$5,014 \cdot 10^6$	6,695	Método do Tiro Múltiplo
Borges <i>et al.</i> (2012)	694	$5,015 \cdot 10^6$	6,695	Algoritmo de Pesquisa Gravitacional
	706	$5,018 \cdot 10^6$	6,776	
	800	$4,991 \cdot 10^6$	9,515	
Este trabalho	694	$5,029 \cdot 10^6$	7,480	<i>Bat Algorithm</i>
	800	$5,032 \cdot 10^6$	10,000	

A Tabela 3 apresenta os resultados obtidos pelo *Bat Algorithm* e por outras estratégias de otimização para fins de comparação. A partir desta tabela, é possível observar que os algoritmos utilizados em outros estudos conseguiram se aproximar do valor ótimo da função-objetivo retorno econômico, adicionalmente, os resultados alcançados neste artigo mostraram-se melhores do que os reportados na literatura, indicando que o BA se mostrou mais eficaz do que os outros métodos de otimização para este problema.

Conclusão

Neste trabalho, a subrotina DASSL e o algoritmo de otimização *Bat Algorithm* foram avaliados na resolução do sistema de equações diferenciais provenientes do balanço de massa e energia e do problema de otimização do projeto de um reator autotérmico de síntese de amônia, respectivamente. Foram estudados três casos de teste, considerando três temperaturas de topo diferentes. Através dos resultados obtidos na etapa de simulação foi possível concluir que a metodologia numérica de resolução foi satisfatória, pois os perfis obtidos corroboraram perfis obtidos em outros estudos da literatura. Já com relação à otimização, foi observado que o *Bat Algorithm* conduziu a

excelentes resultados, pois conseguiu encontrar o ponto ótimo de comprimento do reator nas três condições operacionais testadas.

Agradecimentos

Agradeço LAMSIM-UFS pelo apoio no desenvolvimento deste trabalho.

Referências

1. S. Miijalili; A. Lewis. The Whale Optimization Algorithm. *Advances in Engineering Software*, 2016, 95, 51-67.
2. D. J. Bray; S. M. King; J. Jonsson. A new industry benchmark for ammonia production. *International Nitrogen Syngas Conference & Exhibition*, 2014.
3. R. A. Borges; F. S. Lobato; V. Steffern. Modeling and Optimization of an Auto-thermal Ammonia Synthesis Reactor using the Gravitational Search Algorithm. *3rd International Conference on Engineering Optimization*, 2012.
4. T. A-N, Nguyen; T-A, Nguyen; T-D. Vu; K-T, Nguyen; T. K-T Dao; K. P-H, Huynh. Optimization of an auto-thermal ammonia synthesis reactor using eyelid coordinate method.
5. B. V. Babu; R. Angira. Optimal Design of an Auto-thermal Synthesis Reactor. *Computers and Chemical Engineering*. 2005, 29, 1041-1045.
6. R. S. Upreti; K. Deb. Optimal design an ammonia synthesis reactor using genetic algorithms. *Computers and Chemical Engineering*. 1997, 21(1), 87-92.
7. S. Yusup; H. Zabiri; N. Yusoff; Y. C. Yew. Modeling and Optimization of Ammonia Reactor using Shooting Methods. *Proceeding of the 5th WSEAS Int. Conf. on Data Networks, Communications & Computers*. 2006.
8. E. P. Carvalho; C. Borges; D. Andrade; J. Y. Yuan. M. A. S. S. Ravagnani. Modeling and Optimization of an ammonia reactor using a penalty-like method. *Applied Mathematics and Computation*, 2014, 237, 330-339.
9. X-S, Yang. A new metaheuristic Bat-inspired Algorithm. *Nature inspired Cooperative Strategies for Optimization. Studies in Computational Intelligence*, 2010, 284, 65-74.
10. I. André; R. S. Parpinelli. Tutorial sobre o uso de técnicas para controle online de parâmetros em algoritmos de inteligência de Enxame e Computação Evolutiva. *Revistas de Informática Teórica e Aplicada*, 2014, 21(2), 90-135.
11. M. A. Al-Betar; M. A. Awadallah; H. Farris, X-S, Yang; A. T. Khader; O. A. Al-Omari. Bat-inspired Algorithms with Natural Selection mechanisms for Global Optimization. *Neurocomputing*. 2017.
12. F. C. R. Coelho; I. C. Silva Júnior; B. H. Dias; A. L. Marcato. Metaheurística inspirada na ecolocalização de morcegos: aperfeiçoamento e estudo de casos. *Congresso Latino-Iberoamericano de Investigación Operativa/ Simpósio Brasileiro de Pesquisa Operacional*. 2012, 2588-2599.
13. A. Chakri; R. Khelif; M. Benouaret, M.; X-S, Yang. New directional bat Algorithm for continuous Optimization problems. *Expert System with Applications*, 2017, 69, 159-175.
14. N. S. Jaddu; S. Abdullah; A. R. Hamdan. Optimization of neural network model using modified bat-inspired Algorithm. *Applied Soft Computing*. 2015, 27, 71-86.
15. L. R. Petzold. DASSL Code (Differential Algebraic System Solver). *Computing and Mathematics Research Division*. 1989.