

### JOSE FERNANDO CUADROS BOHORQUEZ

# ESTRATÉGIA ALTERNATIVA DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS DE UMA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO- FCC: IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS GENÉTICOS E METODOLOGIA HÍBRIDA DE OTIMIZAÇÃO

## CAMPINAS

2012

# UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

JOSE FERNANDO CUADROS BOHORQUEZ

# ESTRATÉGIA ALTERNATIVA DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS DE UMA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO- FCC: IMPLEMENTAÇÃO DE ALGORITMOS GENÉTICOS E METODOLOGIA HÍBRIDA DE OTIMIZAÇÃO

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho Co-orientadora: Dra. Delba Nisi Cosme Melo

Tese apresentada à Faculdade de Engenharia Química, da Universidade Estadual de Campinas, para obtenção do Título de Doutor em Engenharía Química.

### CAMPINAS

2012

### FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA

### BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE -UNICAMP

Cuadros Bohórquez, José Fernando C891e Estratégia alternativa de otimização em duas camadas de uma unidade de craqueamento catalítico-FCC: implementação de algoritmos genéticos e metodologia híbrida de otimização / José Fernando Cuadros Bohórquez. --Campinas, SP: [s.n.], 2012. Orientador: Rubens Maciel Filho Coorientador: Delba Nisi Cosme Melo. Tese de Doutorado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 1. Craqueamento catalítico. 2. Dinâmica - Modelos matemáticos. 3. Algoritmos genéticos. 4. Otimização robusta. 5. Controle de processos. I. Maciel Filho, Rubens. II. Cosme Melo, Delba Nisi. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título. Título em Inglês: Two layers approach alternative optimization strategy of a fluid catalytic cracking unit – FCC: genetic algorithms and hybrid optimization strategy implementation Palavras-chave em Inglês: Catalytic cracking, Dynamics - Mathematical models. Genetic Algorithms, Robust optimization, Process control Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos Titulação: Doutor em Engenharia Química Banca examinadora: Denis José Schiozer, Eduardo Coselli Vasco de Toledo, Nadson Murilo Nascimento Lima Data da defesa: 05-11-2012 Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Tese de Doutorado defendida por José Fernando Cuadros Bohórquez e aprovada em 05 de Novembro de 2012 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

au Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Prof. Dr. Denis José Schiozer

Eduardo ofelle Vario de Toledo

Eduardo Coselli Vasco de Toledo

Vera L N Journa . Dra. Vera Lúcia Reis de Gouvêia

Mádzan Murilo N. Lima Dr. Nadson Murilo Nascimento Lima

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química.

Ul

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Orientador

alma and  $())_{0}$ 

Delba Nisi Cosme Melo

Co-orientadora

## DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho a minha mãe, Nelly Amparo Bohórquez, fonte de amor, sabedoria e inspiração em cada um dos desafios que asumo na minha vida. A minhas irmãs Rossana e Tatiana pelo carinho e apoio incondicional, por causa de vocês é que luto cada dia com mais força e optimismo.

#### AGRADECIMENTOS

A Deus, por iluminar meu caminho, por colocar as oportunidades e as pessoas certas no momento oportuno. Devido a ele tem sido possível conhecer pessoas e lugares incríveis, assim como de vivenciar de momentos que sempre levarei no meu coração.

A meus amigos Luisa, Natalia, Oscar, Lucas, Marcele, Anderson e Laura. O Brasil não teria sido o mesmo sem a companhia de vocês. Por cada momento de felicidade e de trsiteza, porque é assim que se deve desfrutar de cada uma das experiências que decidimos assumir nas nossas vidas. Muito obrigado a vocês.

Ao Prof. Dr. Rubens Maciel Filho, meu orientador, porque foi a pessoa que desde o inicio confiou e acredito nas nossas capacidades. O agradeciemento é eterno já que com seu exemplo, aprendi não só a ser um melhor profissional como também uma melhor pessoa.

A Dra. Delba Nissi Cosme, minha co- orientadora, pelo apoio e orientações em cada fase do desenvolvimento deste trabalho, por procurar sempre o caminho certo para atingir com sucesso os objetivos propostos.

Ao CNPq, pelo soporte financeiro.

Enfim, a todos aqueles que contribuíram de alguma forma para que a realização deste trabalho fosse possível.

### RESUMO

Esta pesquisa teve por finalidade o desenvolvimento de uma metodologia de otimização em duas camadas. A otimização preliminar foi baseada na técnica de planejamento de experimentos junto com a metodologia por superfície de resposta com a finalidade de indentificar uma possível região de busca do ponto de operação ótimo, o qual foi obtido através da implementação de métodos híbridos de otimização desenvolvidos mediante associação do modelo determinístico de otimização por programação quadrática sucessiva (SQP) com a técnica dos algoritmos genéticos (GA) no modelo do processo de craqueamento catalítico fluidizado- FCC. Este processo é caracterizado por ser um sistema heterogêneo e não isotérmico, cuja modelagem detalhada engloba as equações de balanço de massa e energia das partículas do catalisador, como também para as fases líquida e gasosa, sendo um dos casos de estudo para a aplicação da metodologia de otimização desenvolvida. Como caso de estudo principal foi considerado o modelo do conversor do processo de FCC desenvolvido por Moro e Odloak (1995).

Mediante a metodologia de otimização do processo baseado no uso do modelo determinístico da planta, foram definidas estratégias e políticas operacionais para a operação da unidade de FCC em estudo. Procurou-se alto nível de desempenho e segurança operacional, através da integração das etapas de operação, otimização e controle no contexto de otimização em tempo real do processo.

As otimizações foram divididas em quatro etapas: 1) Análises preliminares dos fatores e das variáveis de resposta do modelo do conversor foram realizadas usando a técnica de planejamento de experimentos, com o objetivo de compreender a interação entre elas, assim como obter modelos simplificados das variáveis de resposta. A geração dos modelos simplificados é devido à necessidade de ganho no tempo computacional permitindo o conhecimento prévio da região de otimização já que em casos industriais pode não ser possível representar adequadamente o processo por modelos determinísticos; 2) Otimização usando algoritmos genéticos implementados no modelo simplificado da conversão, e no modelo determinístico com e sem restrições; 3) Otimização considerando o método de otimização SQP implementado no modelo simplificado da conversão e no modelo determinístico com restrições; e 4) otimização multi-objetivo do conversor usando

a técnica dos algoritmos genéticos, com o objetivo de maximizar a conversão, assim como a minimização da vazão dos gases de combustão, especificamente o monóxido de carbono (CO). Das otimizações foram obtidos ganhos em torno de 8% na conversão quando comparado com os valores de conversão sem otimização.

Finalmente, foi realizada a integração do modelo do processo, com a otimização e o controle, dando como resultado a otimização em tempo real do conversor de FCC. A variável de otimização foi a conversão e, através da implementação do controle por matriz dinâmica com restrições (QDMC), aplicando a metodologia de controle inferencial. As variáveis escolhidas como variável controlada foi a temperatura de reação e como variável manipulada foi a temperatura da alimentação, com perturbações na vazão de alimentação do ar de regeneração.

Valores de conversão da ordem de 88% foram atingidos para o esquema de otimização em tempo real, o método de otimização por algoritmo genético apresentou um desempenho satisfatório, com tempos e cargas computacionais razoáveis para implementação desta metodologia, em nível industrial.

Palavras-chave: Craqueamento catalítico, modelagem dinâmica, algoritmos genéticos, controle avançado, otimização em duas camadas.

#### ABSTRACT

The purpose of this research was the develop of an optimization methodology. Experimental design technique along with a hybrid optimization methodology obtained by association of sequential quadratic programming (SQP) with genetic algorithms (GA), were implemented in the model of a Fluid Catalytic Cracking process (FCC) developed by Moro and Odloak (1995). This process is described for a heterogeneous, non isothermal system, in which a detailed modeling comprises mass and energy balance equations for catalyst particles, liquid and gaseous phases that makes this process model, a case study for implementing the optimization methodology developed.

The process optimization methodology developed; along with the deterministic model of the plant were applied to define operational strategies and policies for the operation of the FCC unit studied aiming to obtain high performance and operational safety, through the integration of control, operation and optimization stages in the context of real-time optimization (RTO) process.

Optimizations were divided into four stages: 1) Preliminary analysis of factors and response variables of converter modeling were performed using experimental design technique aiming to understand the factors and response variables interaction, as well as to obtain response variables simplified models to be used as objective function in optimization stages, 2) a optimization using genetic algorithms was implemented in the simplified conversion model, in the deterministic modeling and the deterministic model considering factors restrictions, 3) a optimization considering a local search methodology like sequential quadratic programming (SPQ) was implemented in the simplified model of process conversion and also it was consided the deterministic model with restrictions. As initial estimative, the optimum factor values obtained with genetic algorithms were considered as well as two random points in the search space, and 4) a multi objective optimization considering genetic algorithms technique in order to maximize conversion and minimize combustion gases emissions, specifically carbon monoxide was developed. Applying this optimization methodology were obtained increments of around 8% in the feed conversion when compared with conversion values without optimization.

Finally, it was developed the integration of optimization, control and process modeling giving as result the real time optimization (RTO) of FCC converter. The variable maximized by genetic algorithms was the feed conversion and the control technique implemented was based on the matrix named (QDMC) in conjunction with inferential control methodology.

It was considered as controlled variable the reaction temperature adjusting the feed temperature (manipulated variable), for disturbances in the feed flow of the regeneration air. Feed conversion in the order of 88% were achieved for the real time optimization scheme considered, in which, the genetic algorithm showed an excellent performance in reasonable computational times and computational loads for implementation at industrial level.

Keywords: Catalytic Cracking, dynamic modeling, genetic algorithms, advanced control, two layers approach.

# Sumarío

CAPITULO 1- INTRODUÇÃO	1
1.1 Introdução e Justificativa	1
1.2 Objetivos	5
1.2.1 Objetivo geral	5
1.2.2 Objetivos específicos	6
1.3 Organização do trabalho	7
CAPITULO 2- REVISÃO BIBLIOGRAFICA	11
2.1 Processo de Craqueamento Catalitico Fluidizado (FCC)	15
2.2 Modelagem do conversor de FCC	19
2.3 Controle do conversor de FCC	26
CAPITULO 3- SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO	
CATALITICO FLUIDIZADO (FCC)	29
3.1 Simulação da unidade de craqueamento catalítico fluidizado no simulador de	32
processos Aspen HYSYS	52
3.1.1 Caracterização da alimentação do sistema	34
3.1.2 Simulação do conversor de craqueamento catalítico	38
3.1.2.1 Configuração do conversor de craqueamento catalítico	40
3.1.2.2 Calibração do conversor de FCC	45
3.1.2.3 Resultados da simulação do conversor	46
3.1.3 Simulação da unidade de fracionamento	49
3.1.4 Simulação da unidade de recuperação de gases	51
3.1.5 Validação da simulação	54
3.2 Avaliação dos cortes de petróleo obtidos por destilação molecular de um resíduo	60
atmosférico na simulação da unidade de craqueamento catalítico	60
3.2.1 Destilador molecular de filme descendente e obtenção de curvas PEV	<i>(</i> <b>)</b>
estendidas	61
3.2.2 Características dos cortes de destilado obtidos no destilador molecular de filme	63
descendente a ser avaliados na simulação do processo de FCC	
3.2.3 Avaliação dos cortes obtidos da destilação molecular na simulação da unidade	68
	0.1
3.3 Conclusoes	81
CAPITULO 4- ANALISE DO MODELO DE FCC USANDO DI ANELAMENTO DE EXDEDIMENTOS	85
1 1 Implementação do Dianciamento Estorial no Modelo do Conversor do ECC	96
4.1 Implementação do Planejamento Fatorial no Modelo do Conversor de FCC	80
4.2 Conclusões	117
CAPITULO 5 - DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DA	
METODOLOGIA DE OTIMIZACAO DO PROCESSO DE FCC:	
APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS GENETICOS (AG) E PROGRAMAÇÃO	
QUADRATICA SEQUENCIAL (SQP)	119
5.1 Otimização com AG Usando Modelos Simplificados do Processo de FCC	121
5.1.1 Analise do Tamanho da População e das Taxas de Cruzamento na Conversão da	123
5.1.2 Analise da Influencia das Taxas de Mutação Uniforme com Busca em Nichos.	129

5.1.3 Analise da Influencia da Taxa de Mutação de Arraste com Busca em Nichos 5.1.4 Analise da Influencia da Taxa de Mutação de Arraste sem a Utilização de Busca	133
em Nichos	137
5.1.5 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme sem a Utilização de Busca em Nichos	137
5.1.6 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme com Busca em Nichos e Sem o uso da Taxa de Mutação de Arraste	140
5.1.7 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando a Taxa de Mutação de Arraste Sem Uso de Busca em Nichos	142
5.1.8 Analise das Respostas das Variações no Tamanho da População, Taxa de Mutação, Taxa de Cruzamento e Busca em Nichos	144
<ul><li>5.1.9 Analise Estatístico Complementar Usando o Planejamento Plackett &amp; Burman</li><li>5.2 Otimização com AG Usando o Modelo Determinístico do Processo de FCC</li></ul>	148 154
5.2.1 Analise do Tamanho da População e das Taxas de Cruzamento na Conversão do Reator Usando o Modelo Determinístico do Processo	155
5.2.2 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme com Busca em Nichos 5.2.3 Analise da Influencia da Taxa de Mutação de Arraste com Busca em Nichos	158 160
5.2.4 Analise da Taxa de Mutação de Arraste Sem a Utilização da Busca em Nichos.	163
5.2.5 Analise da Influencia da Taxa de Mutação de Uniforme Sem a Utilização de Busca em Nichos	164
5.2.6 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme Com Busca em Nichos e Sem o uso da Taxa de Mutação de Arraste	166
5.2.7 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme Não Utilizando a Taxa de	165
Mutação de Arraste Sem uso de Busca em Nichos	105
5.3 Analise do Algoritmo Genético com Restrições Usando o Modelo Determinístico do Processo	167
5 3 1 Método da Função de Penalidades	169
5.3.2 Resultados das Otimizações Aplicando a Metodologia da Função de Penalidades	171
5.3.2.1 Analise do Tamanho da População e das Taxas de Cruzamento na Conversão	171
5.3.2.2 Analise da Influencia da taxa de Mutação Uniforme e Busca em Nichos na	171 174
5.3.2.3 Analise da influencia da Taxa de Mutação de Arraste com Busca em	176
Nichos	170
5.3.2.4 Analise da Influencia da Taxa de Mutação de Arraste sem Busca em Nichos	178
5.3.2.5 Analise da influencia da Taxa de Mutação de Uniforme sem o Uso da Busca	179
5.5.2.6 Analise da Influencia na Conversao da Taxa de Mutação Uniforme com Busca em Nichos sem o Uso da Taxa de Mutação de Arraste	180
5.3.2.7 Analise da Influencia da Taxa de Mutação Uniforme não Utilizando a Taxa de Mutação de Arraste nem o Operador de Busca em	
Nichos	181

5.4 Otimização da Conversão da Alimentação atraves da Metodologia por	182
Programação Quadrática Sucessiva (SQP)	
5.4.1 Implementação do Método de Programação Quadrática Sequencial (SQP) no	185
Modelo Reduzido da Conversao da Alimentação	
5.4.2 Implementação do Metodo de Programação Quadratica Sequencial (SQP) ao	186
modelo Deterministico do Processo com e sem Restrições	
5.5 Aplicação do Metodo de Algoritmos Geneticos na Otimização Multiobjetivo do Processo de FCC	189
5.5.1 Obtenção dos Modelos Simplificados para a Vazão de Monóxido de Carbono	
na Fase Densa do Primeiro e Segundo Estagio de Regeneração	192
5.5.2 Otimização dos Parâmetros do Algoritmo Genético e dos Pesos da Função de	• • • •
Otimização Multiobjetivo	208
5.6 Conclusões	214
CAPÍTULO 6 – ANALISE DINAMICA EM MALHA ABERTA DO MODELO	010
DE PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALITICO FLUIDIZADO	219
6.1 Efeito do Fluxo de Catalisador Regenerado na Dinâmica do Conversor de FCC	222
6.2 Efeito do Fluxo da Alimentação na Dinâmica do Conversor de FCC	227
6.3 Efeito do Fluxo de Alimentação do Ar na Dinâmica do Conversor de FCC	231
6.4 Efeito da temperatura de Alimentação na Dinâmica do Conversor de FCC	234
6.5 Conclusões	238
CAPÍTULO 7- CONTROLE AVANÇADO E OTIMIZAÇÃO EM TEMPO	
REAL DO CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALITICO	239
FLUIDIZADO	
7.1 Implementação da Estrategia de Controle Avançado QDMC na forma SISO	240
7.2 Integração do Processo em Tempo Real através da Estrategia de Otimização em	253
Duas Camadas	233
7.3 Conclusões	259
CAPÍTULO 8. CONCLUSÕES GERAIS E SUGESÕES DE TRABALHOS	261
FUTUROS	201
8.1 CONCLUSOES GERAIS	261
8.2 SUGESTOES PARA TRABALHOS FUTUROS	262
REFERENCIAS BIBLIOGRAFICAS	265
ANEXO A. TECNICA DE PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS E METODOLOCIA DOD SUDEDEICIE DE DESDOSTA	275
ΑΝΕΥΩ Β. COMDUTA CÃO ΕΝΟΙ ΠΤΙVΑ	282
B 1 AI COPTIMOS CENÉTICOS	205 286
ANEXO C SISTEMAS DE CONTROL E AVANCÃDO	200 201
$C_1$ MATRIZ DINÂMICA DE CONTROLE (DMC)	293
CIT THE TIME DE VERICE DE CONTROLL (DIVIC)	<u>_</u> ,

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Características dos lumps do modelo cinético de craqueamento catalítico3'	7
Tabela 2: Tecnologias para o processamento de petróleos pesados	3
Tabela 3: Condições iniciais da configuração do conversor.     4	5
Tabela 4: Dimensões da seção de conversão4'	7
Tabela 5: Dimensões do regenerador.  4'	7
Tabela 6: Condições da corrente de alimentação.     44	8
Tabela 7: Valores das variáveis com maior influência no rendimento44	8
Tabela 8: Rendimento dos produtos de craqueamento4	8
Tabela 9: Níveis do planejamento fatorial com um 2,5% de variação5:	5
Tabela 10: Planejamento fatorial completo 2 <sup>5</sup> das variáveis com	6
Tabela 11: Resultado com o menor erro absoluto do primeiro planejamento fatorial5'	7
Tabela 12: Resultado com o menor erro absoluto do segundo planejamento fatorial5	7
Tabela 13: Validação da simulação da unidade de FCC.  5000000000000000000000000000000000000	8
Tabela 14: Destilação simulada dos cortes obtidos da destilação molecular	4
Tabela 15: Composição química dos cortes de destilado obtidos através do processo d	e
destilação molecular (Zuniga, 2010)	5
Tabela 16: Caracterização química do resíduo atmosférico JES e dos cortes de destilad	0
obtidos através de destilação molecular (Zuniga, 2010)6	6
Tabela 17: Proporções dos elementos no petróleo.  6	6
Tabela 18: Fração dos produtos nas correntes de saída do processo de FCC para os corte	s
da destilação molecular	8
Tabela 19: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor  69	9
Tabela 20. Propriedades dos produtos para o corte 673,15-831,15 K do destilado	r
molecular	0
Tabela 21: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor  7	1
Tabela 22: Propriedades dos produtos para o corte 673,15-857,15 K do destilado	r
molecular	2
Tabela 23: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor  73	3
Tabela 24: Propriedades dos produtos para o corte 673,15-895,15 K do destilado	r
molecular74	4
Tabela 25: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor  7.	5
Tabela 26: Propriedades dos produtos para o corte 673,15- 932,15 K do destilado	r
molecular70	6
Tabela 27: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor  7'	7
Tabela 28: Propriedades dos produtos para o corte 673,15- 974,15 K do destilado	r
molecular	8
Tabela 29: Rendimentos de destilado e resíduo obtidos no destilador molecular de film	e
descendente (Zuniga, 2009)79	9

Tabela 30: Rendimentos em porcentagem mássica parcial e acumulado dos cortes obtidos
no destilador molecular de filme descendente
Tabela 31: Rendimentos acumulados dos produtos obtidos na unidade de FCC
Tabela 32: Níveis dos fatores no planejamento fatorial 2 <sup>4</sup>
Tabela 33: Planejamento fatorial 2 <sup>4</sup>
Tabela 34: Respostas dos ensaios do primeiro planejamento fatorial 2 <sup>4</sup>
Tabela 35: Efeitos dos fatores para a variável de estudo TRX
Tabela 36: Tabela ANOVA para a variável TRX.  93
Tabela 37: Coeficientes de regressão do modelo estatístico pra a variável de resposta TRX.
Tabela 38: Efeito dos fatores sob a variável de estudo TDG.  98
Tabela 39: Tabela ANOVA para a variável TDG.  100
Tabela 40: Coeficientes de regressão do modelo estatístico pra a variável de resposta TDG.
Tabela 41: Efeito dos fatores sob a variável de estudo TD2
Tabela 42: Tabela ANOVA para a variável TD2
Tabela 43: Planejamento estrela para TD2. 107
Tabela 44: Respostas do planeiamento estrela $2^4$ para a variável TD2
Tabela 45: Efeitos dos fatores para o planeiamento estrela sob a variável TD2
Tabela 46: Tabela ANOVA para TD2 no planejamento estrela
Tabela 47: Efeitos dos fatores sob a variável de estudo SEVERI.
Tabela 48: Coeficientes de regressão do modelo estatístico para a variável de resposta
SEVERI
Tabela 49: Tabela ANOVA para SEVERI no planejamento fatorial.  115
Tabela 50: Níveis dos fatores sobre estudo. 122
Tabela 51: Tamanho total do cromossomo do algoritmo genético.  123
Tabela 52: Influência do tamanho populacional na conversão com uma taxa de
Tabela 53: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de 124
Tabela 54: Influência do tamanho populacional na conversão para uma taxa de
Tabela 55: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de
cruzamento num ponto de 0,5
Tabela 56: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de
cruzamento em um ponto de 0,6
Tabela 57: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de
cruzamento em um ponto de 0,7
Tabela 58: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de
mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de
arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam
entre 0,001 e 0,2
Tabela 59: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de
mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação

de arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 60: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 61: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 62: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste Tabela 63: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste Tabela 64: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam Tabela 65: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam Tabela 66: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 67: Respostas das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 68: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 69: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 70: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos......143 Tabela 71: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de Tabela 72: Respostas das variáveis do modelo reduzido de processo para a combinação. 145 Tabela 73: Respostas das variáveis do modelo reduzido de processo para a combinação. 146 Tabela 74: Níveis do planejamento Plackett & Burman para os parâmetros do algoritmo genético......149 Tabela 75: Matriz de variáveis codificadas do planejamento Plackett & burman e variável Tabela 77: Influência do tamanho populacional no conversor com uma taxa de cruzamento Tabela 78: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de . 155 Tabela 80: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5......157 Tabela 81: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,6......157 Tabela 82: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,7......157 Tabela 83: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme entre 0,001 e 0,2 considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de Tabela 84: Resultado das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 85: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam Tabela 86: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam  Tabela 87: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2. Tabela 88: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0, 001 e 0,2. Tabela 89: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2. Tabela 90: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2. Tabela 91: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam Tabela 92: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam Tabela 93: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.164 Tabela 94: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.164 Tabela 95: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05. Tabela 96: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05. Tabela 97: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e  Tabela 98: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e Tabela 99: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,5......171 Tabela 100: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,6......172 Tabela 101: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,7...... 172 Tabela 102: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um ponto de 0.5. Tabela 103: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um ponto de 0.6. Tabela 104: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um ponto de 0.7. Tabela 105: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.175

Tabela 111: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e

uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2. Tabela 112: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2. Tabela 113: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2 Tabela 114: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2 Tabela 115: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.179 Tabela 116: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.179 Tabela 117: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05. Tabela 118: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05. Tabela 119: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e Tabela 120: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e Tabela 123: Otimização da conversão do processo usando o método de otimização SQP Tabela 124: Otimização da conversão do processo usando o método de otimização SQP 

Tabela 126: Efeitos dos fatores para a vazão de monóxido de carbono do primeiro estágio
de regeneração (CO1)
Tabela 127: Tabela ANOVA para CO <sub>A</sub>
Tabela 128: Coeficientes de regressão para o fluxo de monóxido de carbono no primeiro
estágio de regeneração196
Tabela 129: Efeitos dos fatores para o fluxo de monóxido de carbono
Tabela 130: Planejamento estrela para o fluxo de monóxido de carbono do segundo estágio
de regeneração
Tabela 131: Efeito dos fatores para o fluxo de monóxido de carbono no segundo estágio de
regeneração
Tabela 132: Tabela ANOVA do modelo quadrático para CO <sub>B</sub>
Tabela 133: Coeficientes de regressão do modelo quadrático de CO <sub>B</sub>
Tabela 134: Fluxo do monóxido de carbono nos dois estágios de regeneração para o modelo
reduzido e para o modelo determinístico
Tabela 135: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de
Tabela 136: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de
cruzamento em um ponto de 0,5209
Tabela 137: Avaliação dos pesos da função de otimização multiobjetivo, considerando um
tamanho da população de 60 e uma taxa de cruzamento de 0,6210
Tabela 138: Avaliação dos pesos da função de otimização multiobjetivo, considerando um
tamanho da população de 60 e uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5210
Tabela 139: Avaliação da taxa de cruzamento uniforme no problema de otimização
multiobjetivo
Tabela 140: Variações na taxa de mutação de arraste para uma taxa de cruzamento
uniforme de 0,6

# LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Organização geral do trabalho de tese.	9
Figura 2: Esquema geral do upgrading do petróleo.	13
Figura 3. Esquema geral do refino de petróleo (GRAY, 1994)	14
Figura 4: Ilustração simplificada do processo de craqueamento (Erthal, 2003)	15
Figura 5: Ilustração de uma planta de craqueamento catalítico (Abadie, 2002)	16
Figura 6: Esquema simplificado de conversor de FCC. Modoficado de Patan & Ko	orbicz
(2007)	17
Figura 7: Diagrama esquemático do conversor tipo side by side, Han e Chung (2001).	19
Figura 8: Perfil de temperatura da fracionadora principal	50
Figura 9: Seção de Fracionamento.	51
Figura 10: Sistema de Absorção/Retificação	53
Figura 11. Coluna Debutanisadora	54
Figura 12: Diagrama de fluxo da simulação da unidade de craqueamento cata	alítico
fluidizado	59
Figura 13: Configuração interna do destilador molecular de filme descendente,	62
Figura 14: Gráfico de pareto para a variável de resposta TRX	92
Figura 15: Valores observados versus valores preditos para TRX	95
Figura 16: Superfície de resposta para TRX.	96
Figura 17: Superfície de resposta para TRX	97
Figura 18: Gráfico de pareto para a variável de resposta TDG	99
Figura 19: Valores observados versus valores preditos para TDG	102
Figura 20: Valores observados versus valores preditos para TDG	103
Figura 21: Gráfico de pareto para a variável de resposta TD2	105
Figura 22: Gráfico de pareto para a variável de resposta SEVERI	112
Figura 23: Valores observados versus valores preditos para SEVERI	114
Figura 24: Superfície de resposta para SEVERI.	116
Figura 25: Metodologia de otimização do processo de FCC	121
Figura 26: Análise da taxa de cruzamento uniforme e do tamanho da população,	125
Figura 27: Análise da taxa de cruzamento em um ponto e do tamanho da população	128
Figura 28: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão para diferentes valo	res de
tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento uniforme (TCU)	131
Figura 29: Variação da conversão com a taxa de mutação uniforme para diferentes v	alores
de tamanho da população e de taxa de cruzamento em um ponto (TSP)	132
Figura 30: Influência da taxa de mutação de arraste na conversão para diferentes valo	res de
Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento uniforme (TCU)	136
Figura 31: Influência da taxa de mutação de arraste na conversão para diferentes valo	res de
Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento em um ponto (TCP)	136

Figura 32: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão para diferentes valores de
Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento em um ponto (TCP) e uniforme
(TCU)
Figura 33: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão, sem o uso da taxa de
mutação de arraste para diferentes valores de tamanho de população e taxa de cruzamento
em um ponto e uniforme
Figura 34: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão, sem o uso da taxa de
mutação de arraste nem da busca em nichos
Figura 35: Perfil da variação na conversão com o número de gerações nos dois melhores de
conjuntos de parâmetros no algoritmo genético
Figura 36: Gráfico de Pareto para a variável de resposta Conversão
Figura 37: Superfície de resposta para a conversão
Figura 38: Variação da conversão com uso da taxa de mutação de arraste
Figura 39: Esquem da otimização do processo de FCC usando a função de penalidades. 170
Figura 40: Gráfico de pareto para a variável de resposta $CO_{A}$
Figura 41: Valores observados <i>versus</i> valores preditos para o fluxo de monóxido de
carbono do primeiro estágio de regeneração
Figura 42: Superfície de resposta para a variável CO1
Figura 43: Gráfico de pareto para o fluxo de monóxido de carbono do segundo estágio de
regeneração
Figura 44: Valores observados <i>versus</i> valores preditos para o fluxo de monóxido de
carbono do segundo estágio de regeneração
Figura 45: Superfície de resposta para a variável $CO_B$
Figura 46: Efeito das Variações no Cruzamento Uniforme e do Tamanho da população na
Conversão do Processo
Figura 47: Efeito da taxa de mutação uniforme na conversão para fixando o cruzamento
uniforme e em um ponto
Figura 48: Análise do estado estacionário inicial para a temperatura de reação
Figura 49: Análise do estado estacionário para a temperatura da fase diluída geral
Figura 50: Análise do estado estacionário da temperatura da fase densa do primeiro estágio
de regeneração 221
Figura 51: Análise do estado estacionário da fase densa do segundo estágio de regeneração
221
Figura 52: Análise do estado estacioário da fase diluida do segundo estágio de regeneração.
222.
Figura 53: Temperatura de saída do <i>riser</i> para diferentes perturbações do fluxo de
catalisador regeneredo
Figura 54: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de catalisador regenerado
Figura 55: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de
catalisador regeneredo

Figura 56: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes
perturbações de catalisador regenerado
Figura 57: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações de catalisador regenerado
Figura 58: Conversão para diferentes perturbações do fluxo
Figura 59: Temperatura de saída do riser para diferentes perturbações do fluxo de
alimentação
Figura 60: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação
Figura 61: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de
alimentação
Figura 62: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação
Figura 63: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação
Figura 64: Conversão para diferentes perturbações do fluxo
Figura 65: Temperatura de saída do riser para diferentes perturbações do fluxo de
alimentação de ar
Figura 66: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação de ar
Figura 67: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de
alimentação de ar
Figura 68: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação de ar
Figura 69: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações do fluxo de alimentação de ar
Figura 70: Conversão para diferentes perturbações do fluxo
Figura 71: Temperatura de saída do riser para diferentes perturbações da temperatura de
alimentação235
Figura 72: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações da temperatura de alimentação235
Figura 73: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações da temperatura de
alimentação236
Figura 74: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes
perturbações da temperatura de alimentação236
Figura 75: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes
perturbações da temperatura de alimentação237
Figura 76: Conversão para diferentes perturbações da temperatura de alimentação237
Figura 77: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX), após uma

Figura 78: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar do Figura 79: Comportamento da variável manipulada (Vazão de alimentação-RTF), após uma Figura 80: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da Figura 81: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada......244 Figura 82: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP) Figura 83: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma Figura 84: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a vazão de alimentação como variável manipulada......247 Figura 85: Comportamento da variável manipulada (Vazão de alimentação-RTF) após uma Figura 86: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da Figura 87: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada. ..... 249 Figura 88: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP), Figura 89: Resposta da variavel controlada para variações no fator de supressão do Figura 90: Resposta da variavel manipuldada para variações no fator de supressão do Figura 91: Resposta da variável controlada para variações na constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) fixando o valor do fator de supressão de movimento  $\alpha$ =5......252 Figura 92: Resposta da variável manipulada para variações na constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) fixando o valor do fator de supressão de movimento  $\alpha$ =5......252 Figura 94: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da Figura 95: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada. ..... 257 Figura 96: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP), 

## LISTA DE SIMBOLOS

 $A_{ra}$ Área transversal do reator  $(m^2)$  $C_{rc2}$ Coque no catalisador da segunda fase de regeneração (% massico)  $C_{sc}$ Coque no catalisador gasto (% massico)  $C_{rc1}$ Coque sobre o catalisador do primeiro estágio de regeneração (% massico) Concentração de CO na fase diluída do primeiro estágio de regeneração (% molar)  $CO_{d1}$ Velocidade de queima de coque no primeiro estágio de regeneração (kgmomin<sup>-1</sup>)  $C_{arb1}$  $D_{\rm ff}$ Densidade da massa de alimentação (t m<sup>-3</sup>)  $F_{at1}$ Relação mássica entre oxigênio consumido e coque queimado no primeiro estágio  $F_{gm1}$ Vazão de gases efluentes da fase densa do primeiro estágio (kgmol min<sup>-1</sup>)  $F_{12}$ Fração do fluxo de ar do primeiro para o segundo estágio de regeneração  $F_{a1}$ Gases de combustão do primeiro estágio de regeneração (kg min<sup>-1</sup>)  $F_{\sigma}$ Vazão de gases totais produzidas no regenerador (kg min<sup>-1</sup>)  $F_{a0}$ Vazão de gases do regenerador em direção a camará de combustão de CO (kg/min)  $H_{ra}$ Inventário de catalisador no reator e no riser (t) Calor de vaporização do gasóleo de alimentação (kcal kg<sup>-1</sup>)  $\Delta H_{fv}$ Calor de combustão do coque do primeiro estágio de regeneração (kcal kgmol<sup>-1</sup>)  $\Delta H_{c1}$  $\Delta H_{cr}$ Calor da reação de craqueamento (kcal kg<sup>-1</sup>)  $H_{rg1}$ Inventário de catalisador no primeiro estágio de regeneração (t)  $h_{sv}$ Altura do *stand pipe* (m) Altura do leito fluidizado do reator (m)  $h_{ra}$ Altura do leito fluidizado no primeiro estágio de regeneração (m)  $h_1$  $h_{w}$ Altura da separação entre o primeiro e segundo estágio de regeneração (m)  $K_{w}$ Constante de fluxo (t min<sup>-1</sup> m<sup>-0,5</sup>) M<sub>rg</sub> Peso molecular médio dos gases efluentes no regenerador Concentração de oxigênio nos gases do regenerador (% molar)  $O_{fg1}$ Concentração de oxigênio nos gases efluentes da fase diluída do primeiro estágio  $O_{d1}$ (% molar)  $P_{ra}$ Pressão do reator (kgf cm<sup>-2</sup>)  $P_{rg}$ Pressão do regenerador (kgf cm<sup>-2</sup>)  $\Delta P_{LCV}$ Diferencial de pressão na válvula de controle de nível do reator (kgf/cm<sup>-2</sup>) R Constante dos gases ideais Vazão de catalisador para o *riser* (t min<sup>-1</sup>)  $R_{rc}$ Velocidade da reação de craqueamento (t min<sup>-1</sup>)  $R_{oc}$  $R_{tf}$ Vazão de alimentação para o *riser*  $(m^3 d^{-1})$ 

- $R_{cf}$  Velocidade de formação de coque (ton min<sup>-1</sup>)
- $R_{sc}$  Vazão de catalisador gasto (t min<sup>-1</sup>)
- $R_{rc1}$  Vazão de catalisador do primeiro para o segundo estágio de regeneração (tmin<sup>-1</sup>)
- $R_{cb1}$  Velocidade do coque queimado no primeiro estágio de regeneração (%massa min<sup>-1</sup>)
- $R_{ma1}$  Vazão de ar para o primeiro estágio de regeneração (kgmol min<sup>-1</sup>)
- $R_{CO1}$  Velocidade de combustão de CO na fase diluída do regenerador (kgmol min<sup>-1</sup>)
- $R_{a1}$  Vazão de ar para o primeiro estágio de regeneração (t h<sup>-1</sup>)
- $S_c$  Calor especifico do catalisador
- $S_a$  Calor especifico do ar e dos gases efluentes (kcal kg<sup>-1</sup> °C<sup>-1</sup>)
- $T_{rg2}$  Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração (°C)
- $T_{fp}$  Temperatura da alimentação na entrada do *riser* (°C)
- $T_{ra}$  Temperatura do leito do reator (°C)
- $T_{rg1}$  Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração (°C)
- $T_a$  Temperatura do ar (°C)
- $T_{d1}$  Temperatura da fase diluída do primeiro estágio de regeneração (°C)
- $T_{rg}$  Temperatura media dos gases efluentes do regenerador (°C)
- $V_1$  Volume da fase densa do primeiro estágio de regeneração (m<sup>-3</sup>)
- $V_{d1}$  Volume da fase diluída do primeiro estágio de regeneração (m<sup>3</sup>)
- $V_{rg}$  Volume livre total do regenerador (m<sup>3</sup>)

## **CAPITULO 1 – INTRODUÇÃO**

#### 1.1 Introdução e Justificativa

O craqueamento catalítico fluidizado (FCC) consiste nas reações de quebra de moléculas de cadeias carbônicas de compostos pesados tais como, gasóleos e resíduos do processo de refino do petróleo. A presença de um catalisador particulado e a alta temperatura promove a quebra das cadeias, produzindo hidrocarbonetos mais leves, com maior valor comercial.

A modelagem do FCC pode assumir vários níveis de complexidade. Quanto maior a complexidade, menor o número de considerações sobre as equações governantes e, em geral, uma representação mais fiel do fenômeno físico. Em contrapartida, o tempo computacional será bem maior para a determinação das variáveis do problema. Para o caso em que a modelagem serve de ferramenta para o acompanhamento e ajuste do processo, a capacidade de processamento das plataformas computacionais pode surgir como fator limitante. Muitos trabalhos como os de Ali e Rohani (1997), Han e Chung (2001a), Han e Chung (2001b), Martignoni (2000), Erthal (2003), Erthal et al. (2003b), Penteado (2003), Penteado et al. (2003b), Maciel et al. (1996), Malay et al. (1999), Santos (2000) têm sido desenvolvidos na tentativa de se obter um modelo que alie fidelidade ao fenômeno físico com rapidez computacional. O modelo determinístico desenvolvido por Moro e Odloak (1995) foi usado neste trabalho, o qual está baseado nas equações de conservação de massa e energia representando assim o comportamento dinâmico do processo. A modelagem será empregada para definição de estratégia e política operacionais na otimização e controle do processo que tem como objetivo geral operar a planta FCC com alto nível de desempenho e segurança operacional.

Como a operação da planta deve ser feita de forma a atender requisitos de segurança e alto desempenho, além de outros possíveis objetivos, os controladores devem ser corretamente sintonizados. Se alto desempenho operacional é desejado, é necessário operar a planta de forma otimizada. Tal operação, de fato requer a integração entre as etapas de controle, operação e otimização, sendo necessário ter-se uma representação confiável do processo. Com relação à elaboração de modelos, tem-se que, muitas vezes, ao se tentar modelos advindos de leis físico-químicas, estes se tornam de natureza muito complexa, quando os fenômenos envolvidos no processo são complexos. As dificuldades surgem não só na complexidade matemática dos modelos e consequente resolução, como também na reprodução dos fenômenos.

Com o objetivo de reduzir os custos, atender às restrições ambientais e especificações de qualidade do produto final, tem-se buscado alternativas de otimização do processo. Na literatura há relatos de trabalhos que tratam da estrutura de integração e otimização em tempo real, como por exemplo, os trabalhos de Tvrzská de Gouvêa & Odloak (1998), Lestage *et al.* (2002) e Zanin *et al.* (2002).

Embora pesquisas venham sendo desenvolvidas no tocante à otimização em tempo real de equipamentos, publicações concernentes a aplicações de otimização de uma ou de várias unidades em tempo real são relativamente escassas, quando comparadas com outras, como controle e otimização, fora do contexto de integração em tempo real. Isso porque o problema resultante é de dimensão elevada e, assim, de um lado a dificuldade dos problemas de otimização e controle é acentuada e, de outro, os métodos numéricos existentes podem tornar-se impraticáveis devido ao elevado tempo computacional requerido. Assim, destacam-se a implementação e avaliação do desempenho de algoritmos de otimização, como sendo robustos e que sejam relativamente fáceis de implementar em sistemas industriais.

A elaboração de um problema de otimização sempre recairá em dois níveis: um problema de minimização, ou um problema de maximização, baseado sempre numa função objetivo, cuja resposta será um menor valor para o problema de minimização e um maior valor para o problema de maximização. Os métodos clássicos de otimização e mais utilizados são os do tipo gradientes que levam em consideração a derivada analítica de uma determinada função e são chamados de métodos determinísticos de otimização, porque se baseiam em modelos de processos determinísticos, os quais partindo de uma estimativa inicial da sua resposta prevê todos os seus passos e, o método convergirá para um ponto ótimizado. Estes métodos são considerados como sendo métodos de busca local. Em

oposição a esses métodos, estão os métodos estocásticos, aleatórios ou também chamados de métodos heurísticos, onde o caráter aleatório de vários processos é simulado. Nestes métodos, várias escolhas são feitas com base em números aleatórios, sorteados no momento da execução do código. Assim, o método aleatório não executará a mesma seqüência de operações em duas execuções sucessivas, levando a uma resposta final diferente. Ao contrário dos métodos determinísticos, os heurísticos são considerados métodos de busca global.

Neste sentido, nem todo tipo de problema de otimização pode ser resolvido por um método do tipo gradiente, que normalmente mostra-se como a melhor alternativa para ser usada, mas o seu uso torna-se inviabilizado sempre que:

- Houver descontinuidades na função objetivo f (x), ou houver mais de um mínimo;
- Não se puder escrever uma função objetivo f(x) diferenciável;
- Se o cálculo das derivadas for inviável.

Assim, deve-se partir para métodos alternativos, sendo os métodos heurísticos os mais usados. Esses métodos diferem das técnicas convencionais de busca (as quais se limitam a obter uma única solução para o problema de otimização) pelo fato de operar com uma população de soluções individuais, cada qual determinada em termos de critérios relevantes de otimização. A utilização de operadores genéticos como mutação não permite que o programa se prenda a um mínimo local, uma vez que outras regiões potenciais do espaço de busca são exploradas através da alocação dos indivíduos das populações às diferentes regiões.

Em alguns casos, devido à complexidade e natureza descontínua da função objetivo, os métodos convencionais tornam-se dispendiosos por requererem um número muito grande de pontos para aumentar a chance de atingir um ótimo global (Matous *et al.*, 2000). Assim, os programas evolucionários são reconhecidamente mais robustos para os diversos problemas de otimização encontrados em engenharia.

É importante acrescentar ainda, que os modelos desenvolvidos para a otimização em tempo real são, usualmente, baseados na informação de modelos de primeiros princípios *"first principles"* que incluem basicamente, no caso da unidade do processo de craqueamento, as equações das taxas cinéticas de reação e as equações dos balanços de massa e de energia do processo. Esses modelos são desenvolvidos para descrever de forma mais realista o comportamento do processo. Suposições e aproximações são feitas para simplificar o sistema com o objetivo de reduzir o esforço computacional para a solução numérica do modelo, ou também por conta de alguns efeitos serem considerados insignificantes.

No entanto, há casos em que essas suposições não são razoáveis e o modelo predito é incapaz de representa adequadamente o comportamento do processo. Essa discrepância causada entre o modelo gerado (mal condicionado) e a planta real pode gerar para o sistema de otimização *on-line* um alto custo de implementação e baixo desempenho na otimização, podendo reduzir um dos objetivos a ser alcançado na otimização: a maximização do lucro na unidade, por exemplo. Assim, a otimização baseada em modelos que utilizam a informação de primeiros princípios é limitada pela inabilidade de compensar distúrbios entre a planta real e os modelos mal condicionados, levando o otimizador a convergir para um ponto que não é o ótimo verdadeiro, já que o modelo é incapaz de descrever exatamente o comportamento do processo.

Levando-se isto em consideração, muitas pesquisas têm sido feitas no sentido de melhorar a eficiência das rotinas existentes de otimização ou o desenvolvimento de outras rotinas, no sentido de diminuir cada vez mais a distância que há entre os processos modelados e o que existe de fato na planta real.

Finalmente, está clara a necessidade de utilizar algoritmos de otimização sem restrições que não usem explicitamente as derivadas do modelo a otimizar e sim de algoritmos de pesquisa direta "*direct-search*", ou algoritmos baseados na teoria evolucionista, por exemplo, os algoritmos genéticos (AGs), acreditando-se no sucesso da sua implementação, apesar de serem mais lentos para alcançar a sua convergência. No entanto, a probabilidade de sucesso na busca das condições ótimas operacionais é maior. O desafio é, portanto, além de manter a robustez, desenvolver algoritmos que sejam rápidos o suficiente para implementação com integração de processos em tempo real.

4

#### **1.2 OJETIVOS**

#### 1.2.1 Objetivo geral

Teve-se como objetivo geral aplicar a técnica de otimização heurística para o caso do reator de uma unidade de FCC. Esperou-se com isso desenvolver e executar a integração de processos em tempo real, seguindo uma abordagem de otimização em duas camadas em tempo real para a unidade FCC. Esta abordagem apresenta grande potencial de estratégias em processos químicos e é usada na atualização do modelo e sub-sistemas de otimização que se baseiam na otimização em tempo real-RTO (Zhang & Forbes, 2000; Melo *et al.*2005).

O desafio esteve diante do comportamento dinâmico de unidades da craqueamento catalítico FCC que incorpora uma modelagem dinâmica heterogênea e não isotérmica, com a aplicação da técnica de otimização heurística, a fim de otimizar o sistema para que possa ser controlado em diferentes situações operacionais. Isso acontece, em virtude do processo considerado ser altamente não linear e apresentar alta complexidade de comportamento, que caso seja tratado por métodos de otimização baseados em métodos determinísticos, ou seja, através de equações de balanços de massa e de energia, são difíceis de serem implementados.

De fato, os modelos dessas unidades são constituídos de um sistema de equações diferenciais ordinárias e equações diferenciais algébricas de alta dimensionalidade, os quais são difíceis de serem adequadamente resolvidos por métodos de otimização do tipo Programação Quadrática Sucessiva (SQP). Nesse contexto, métodos de pesquisa direta *"direct-search"*, ou métodos baseados em modelos empíricos têm ganhado força nos últimos anos, pois esses métodos não requerem o modelo do processo para que seja implementada a otimização (Xiong e Jutan, 2003). Métodos heurísticos de otimização como o AG de busca multidirecional, são recomendados.

Levando esses pontos em consideração, associado com as dificuldades encontradas na implementação do método SQP, por exemplo em outro sistema de estudo (Melo *et al.*, 2005), a proposta do desenvolvimento e implementação de métodos de otimização baseados em algoritmos genéticos se torna uma alternativa interessante de ser investigada e, ter seu desempenho avaliado no contexto de otimização em tempo real. Ressalta-se que as implementações encontradas na literatura são para os casos de estudos simples (problemas de baixa dimensionalidade e normalmente sem a interação das equações de balanços de massa e energia) e são aplicados para a otimização "*off-line*".

1.2.2 Objetivos específicos

Os objetivos específicos são os seguintes:

(1) Analisar o comportamento dinâmico do processo de craqueamento catalítico, através dos modelos matemáticos já existentes e simuladores de processos com o auxílio do planejamento fatorial completo de dois níveis.

(2) Desenvolver e implementar a metodologia de algoritmos genéticos para a otimização em tempo real no contexto da integração de processos em tempo real.

(3) Desenvolver procedimentos híbridos de otimização, fazendo-se uso da metodologia de otimização SQP junto com os algoritmos genéticos, ou seja, aliando métodos de busca local com os métodos heurísticos. Esta etapa será realizada utilizando-se primeiramente, o método de otimização AG e gerando um conjunto de soluções candidatas à solução ótima. Então, um método de busca local (por exemplo, SQP) seria usado novamente para transformar este conjunto de soluções em um conjunto de mínimos locais. Desta forma, métodos híbridos de otimização, acoplando-se algoritmos determinísticos e heurísticos podem ser gerados e ter o seu desempenho avaliado.

(4) Implementar a metodologia de controle avançado tal como o controlador baseado em modelo preditivo (MPC), com a finalidade de executar os resultados dos cálculos no estágio de otimizacao. Este tipo de controladores são geralmente introduzidos na estrutura em duas camadas para assegurar a solução que pode ser implementada na planta (Marlin & Hrymak, 1996; Morari & Lee, 1999; Rao & Rawlings, 2000).

(5) Desenvolver e implementar a otimização em duas camadas-integração em tempo real. Nesta metodologia, o problema de otimização é resolvido antes do problema de
controle. Trata-se de uma estratégia de controle hierárquico, cuja camada de otimização calcula os *setpoints* para ser usado no controle avançado.

#### 1.3 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

A tese está dividida em sete capítulos:

Os Capítulos 1 e 2 apresentam a introdução e a justificativa da presente proposta de tese de doutorado, asssim como uma breve revisão bibliográfica dos principais conceitos usados no seu desenvolvimento.

No Capítulo 3 faz-se uma análise prévia do processo de Craqueamento Catalítico Fluidizado fazendo uso do simulador de processos Aspen HYSYS. A finalidade dessa análise foi indentificar as principais características do processo, as variáveis com maior influência na conversão da alimentação e os efeitos de interação entre as mesmas, devido a o craqueamento catalítico ser considerado um processo altamente não linear com forte interação entre as variáveis, o que pode afetar os rendimentos dos produtos.

No Capítulo 4 planejamentos de experimentos são aplicados no modelo do processo do conversor desta vez desenvolvido na linguagem de programação FORTRAN, com a finalidade de obter modelos simplificados para serem usados no estágio de otmização. Tambem foi confirmada a relevância de algumas variáveis do processo que, com ajuda dos resultados obtidos no Capítulo 3, definiram as variáveis controladas e manipuladas no estágio de controle e otimização em tempo real.

No Capítulo 5 otimizações mono-objetivo do processo usando a metodologia dos algoritmos genéticos (AGs) e programação quadrática sucessiva (SQP) foram realizadas usando os modelos simplificados obtidos no Capítulo 4. Igualmente, foram realizadas otimizações usando o modelo determinístico do processo, com e sem restrições, visando maximizar a conversão do processo. A abordagem de otimização multiobjetivo também foi avaliada através da técnica dos algoritmos genéticos com a finalidade de maximizar a conversão, minimizando a emissão de gases de combustão, mais especificamente monóxido de carbono (CO), nas fases densas do primeiro e segundo estágios de regeneração.

No Capítulo 6 foi realizada a análise dinâmica em malha aberta das variáveis de estado, frente a perturbações das variáveis independentes, com a finalidade de indentificar o melhor conjunto das variáveis manipuladas e controladas a serem usadas no estágio de controle e otimização em tempo real.

O Capítulo 7 está dividido em duas partes: na primeira, apresenta-se a implementação da técnica de controle por matriz dinâmica quadrática (QDMC) integrada ao modelo de processo do conversor de craqueamento catalítico fluidizado, tendo como base os cálculos realizados nas análises dinâmicas apresentadas no Capitulo 6, assim como a análise das variáveis apresentadas nos Capitulos 3 e 4. Na segunda parte apresenta-se a otimização em tempo real do processo através da metodologia de otimização em duas camadas, a camada superior, composta pelas otimizações usando a técnica dos algoritmos genéticos com restrições, baseada nas análises dos parâmetros do otimizador apresentadas no Capítulo 5 e a camada inferior, composta pelo controlador QDMC que emprega os valores ótimos das variáveis de estado calculadas pela camada de otimização como *setpoints*.

Por fim, são apresentadas as conclusões, e as sugestões para trabalhos futuros.

Um esquema geral da organização do trabalho é apresentado na Figura 1.



Figura 1: Organização geral do trabalho de tese.

# **CAPITULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA**

O petróleo é um líquido viscoso, escuro, tóxico, irritante e inflamável. Encontra-se em depósitos a diferentes profundidades no interior da terra e é constituído por uma mistura de hidrocarbonetos junto com pequenas quantidades de outros elementos tais como: enxofre, oxigênio, nitrogênio, níquel, vanádio, arsênico e cromo. De acordo com a mistura predominante de hidrocarbonetos, o petróleo se classifica em base parafínica, naftênica e aromática. Os hidrocarbonetos do tipo parafínico contêm moléculas de carbono que formam cadeias retas, as quais podem conter ou não ramificações. Esse tipo de moléculas tem pouca afinidade química. Os hidrocarbonetos naftênicos ou ciclo-parafínicos formam uma molécula circular, na qual todos os enlaces de carbono estão saturados com hidrogênio. Finalmente, encontram-se os hidrocarbonetos aromáticos contendo na estrutura anéis benzênicos. Esses hidrocarbonetos podem conter ramificações com hidrocarbonetos parafínicos ou uniões de dois ou mais anéis benzênicos que podem conter radicais.

Com o objetivo de se obter a maior quantidade com produtos de maior qualidade e valor comercial, o petróleo deve ser processado e transformado de maneira conveniente através de várias unidades de processo o que é denominado esquema de refino.

Os esquemas de refino podem ser classificados em quatro grandes grupos (Abadie, 2002):

- Processos de separação;
- Processos de conversão;
- Processos de tratamento;
- Processos auxiliares.

Os processos de separação são de natureza física e têm por objetivo desdobrar o petróleo em suas frações básicas ou processar uma fração previamente produzida, no sentido de retirar dela um grupo específico de compostos. Os processos de conversão são sempre de natureza química e visam transformar uma fração em outras ou alterar profundamente a constituição molecular de uma dada fração, de forma a melhorar sua

qualidade. Isto pode ser conseguido através de reações de quebra, reagrupamento ou reestruturação molecular. Os processos de tratamento têm por finalidade principal eliminar as impurezas que, estando presente nas frações, possam comprometer suas qualidades finais, garantindo assim estabilidade química ao produto acabado. Dentre as impurezas, os compostos de enxofre e nitrogênio, por exemplo, conferem as propriedades indesejáveis, tais como: corrosividade, acidez, odor desagradável, formação de compostos poluentes, alteração de cor, etc. Finalmente, encontramos os processos auxiliares que se destinam a fornecer insumos à operação dos processos anteriormente citados ou tratar rejeitos desses mesmos processos.

Os processos de conversão na indústria do petróleo, são geralmente usados para:

1. Melhorar cargas de baixo valor comercial tais como petróleos pesados em produtos como nafta e gás liquefeito de petróleo (GLP). A nafta é usada, principalmente, como suplemento na produção da gasolina, enquanto o GLP é usado como combustível ou como carga de processos petroquímicos;

2. Melhorar as características dos combustíveis. Por exemplo: uma fração de nafta de baixa octanagem é reformada em um produto de alta octanagem;

3. Reduzir impurezas prejudiciais nas frações de petróleo e resíduos, controlando assim a poluição e evitando o envenenamento dos catalisadores usados no processo. Por exemplo: o hidrotratamento da nafta de carga aos reformadores catalíticos é essencial devido às impurezas de enxofre e nitrogênio que podem envenenar o catalisador.

Os processos de conversão podem ser: térmicos quando somente calor é usado para levar a quebra das moléculas; ou catalíticos, quando o catalisador diminui a energia de ativação das mesmas. O catalisador também tem a função de direcionar a reação através do produto ou produtos desejados.

Segundo El-Hariry (1989), os processos de conversão do petróleo podem ser divididos em: processos de adição de hidrogênio e processos de rejeição de carbono. Adicionalmente, esses processos podem ser divididos em: catalíticos e não- catalíticos, segundo a presença ou não de catalisador. Na Figura 2 é apresentado um esquema geral dos processos de conversão de gasóleos e de petróleos pesados.



Figura 2: Esquema geral do upgrading do petróleo.

Dentre os processos de rejeição de carbono encontramos o craqueamento catalítico fluidizado. A Figura 3 mostra como o craqueamento está inserido no processo de refino de petróleo.



Figura 3. Esquema geral do refino de petróleo (GRAY, 1994).

#### 2.1 PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALITICO FLUIDIZADO

O craqueamento catalítico, ilustrado na Figura 4, consiste nas reações de quebra de moléculas de cadeias carbônicas de compostos pesados tais como, gasóleos e resíduos do processo de refino do petróleo. A presença de um catalisador particulado e a alta temperatura promove a quebra das cadeias, produzindo hidrocarbonetos mais leves, com maior valor comercial.



Figura 4: Ilustração simplificada do processo de craqueamento (Erthal, 2003).

O processo de craqueamento catalítico ocorre em equipamentos chamados de conversores. A corrente de alimentação é introduzida no conversor de FCC (*riser*), onde ocorre a reação de craqueamento catalítico. Os produtos formados contendo as frações mais leves de hidrocarbonetos são levados para a etapa de recuperação, constituídas por colunas de destilação ou "fracionadoras". Parte dos produtos desses equipamentos é conduzido a uma seção de recuperação de gases, onde são separados em três frações distintas: gás combustível (moléculas contendo 1 a 2 átomos de carbono, C1 e C2), gás liquefeito (C3 e C4) e nafta de craqueamento (C5 a C12). Em seguida, passam para uma estação de tratamento químico, onde são reduzidos os teores de enxofre. O restante dos produtos extraídos da fracionadora é composto de Gasóleo Leve de Reciclo (LCO) ou Diesel de Craqueamento, Óleo Clarificado (OC) retirados da base do equipamento e coque. O catalisador desativado é enviado para o regenerador que, depois de regenerado, é enviado continuamente ao *riser* para catalisar novamente a reação. O esquema geral da unidade de craqueamento catalítico fluidizado é apresentado na Figura 5.



Figura 5: Ilustração de uma planta de craqueamento catalítico (Abadie, 2002).

O conversor de FCC (*Fluid Catalytic Cracking*) é composto basicamente de um tubo vertical (*riser*), um vaso separador/*stripper* e um regenerador, cuja distribuição é apresentada na Figura 6. O processo de craqueamento catalítico propriamente dito ocorre no *riser*. Por isso, Maya *et al.* (1998) em seus estudos deixaram evidente que o regenerador e o *riser* eram os equipamentos de maior importância para a fidelidade dos modelos, devido à complexidade das reações químicas. Entretanto, a planta só se tornaria representativa de um sistema real se o reator (conjunto vaso separador/*stripper*) fosse incluído nos modelos. A carga, em torno de 250°C, é colocada em contato com o catalisador particulado a alta temperatura (700°C). Os catalisadores são constituídos basicamente por um componente ativo (zeólita), por uma matriz e por ingredientes funcionais. A matriz pode ser inerte (caolim), ativa (alumina) ou sintética (sílica). O catalisador é admitido numa posição logo acima da entrada da carga, com uma vazão regulada por uma válvula situada na entrada do equipamento (TCV – *Temperature Control Valve*).



Figura 6: Esquema simplificado de conversor de FCC. Modoficado de Patan & Korbicz (2007).

Ao entrar em contato com o catalisador, a carga recebe energia suficiente para se aquecer, vaporizar e alimentar as reações endotérmicas de craqueamento. Devido à alta temperatura e às propriedades catalíticas do meio, as moléculas da carga são quebradas, resultando em compostos mais leves e coque. O coque, um resíduo do craqueamento, consiste primordialmente de cadeias carbônicas não-craqueadas, metais pesados, hidrogênio e compostos aromáticos com características próximas à do grafite e é o responsável pela desativação do catalisador. Ele pode ser formado tanto no processo de craqueamento (coque catalítico) como no transporte da carga (coque residual de carbono). O catalisador é arrastado pela carga vaporizada em consequência da variação da massa específica da fase gasosa. Sua aceleração é tal que o tempo de residência (tempo de permanência do catalisador no *riser*) é da ordem de 1 a 4s. Este tempo constitui-se num fator determinante para a obtenção de uma composição de produtos adequada. Caso as reações não sejam interrompidas, os produtos na saída do *riser* serão apenas carbono, metano e hidrogênio, indesejáveis para comercialização.

Após passar pelo *riser*, a mistura gás-catalisador, (em torno de 530°C) segue para o vaso separador, onde os produtos são retirados pela parte superior através de ciclones. Os ciclones são dispositivos montados no interior do vaso separador, que utilizam a força centrífuga e da gravidade para separar o catalisador dos gases (mais leves). O catalisador, que tem sua trajetória retilínea convertida num movimento de rotação, quando em contato com a superfície interna do ciclone e na presença da gravidade, tem sua velocidade diminuída, provocando sua queda no leito do vaso separador. Em seguida, o catalisador dirige-se por gravidade ao *stripper*, onde sofre um processo de agitação por mudança de direção do escoamento, combinado com a sua lavagem por injeção de vapor d'água. Isto provoca a remoção da maior parte dos hidrocarbonetos remanescentes no corpo do catalisador, arrastados pela corrente ascendente de vapor d'água. Embora as reações de craqueamento ocorram no *riser*, por uma razão histórica se denomina "reator" o conjunto destes dois equipamentos: vaso separador e *stripper*.

Em seguida, e já fora do *stripper*, as partículas de catalisador passam por uma linha de conexão e uma válvula de controle de nível de catalisador no vaso separador, denominada LCV (*Level Control Valve*). A vazão que controla o nível do catalisador é dependente da abertura e do diferencial de pressão agindo na válvula.

O catalisador gasto (impregnado de coque) chega então ao regenerador onde o coque é queimado na presença de ar. O coque possui poder calorífico suficiente para elevar a temperatura do catalisador. Os gases de combustão são separados do catalisador em ciclones posicionados no topo do regenerador e enviados a uma caldeira de recuperação através de uma válvula de gás.

Na caldeira, os gases recebem uma quantidade extra de ar e, por meio de um conjunto auxiliar de maçaricos, o CO é convertido quase que totalmente em  $CO_2$ . Parte da energia produzida na queima é aproveitada na produção de vapor d'água, utilizado no acionamento de sopradores e compressores de gás e o restante é empregado em outras unidades da refinaria. O catalisador com baixo teor de coque e, portanto, com sua atividade recuperada, é devolvido ao *riser* por uma linha de transporte chamada *stand-pipe* passando através de uma válvula de controle de temperatura, TCV. Sua vazão controla a temperatura do catalisador no topo do *riser* e é função da abertura e do diferencial de pressão entre o

regenerador e o *riser*. Chegando ao *riser*, o catalisador finalmente é misturado novamente à carga de alimentação, completando assim o ciclo.

#### **2.2 MODELAGEM DO CONVERSOR DE FCC**

Segundo Han e Chung (2001), as unidades de FCC podem ser agrupadas em dois tipos: *side by side* e *stacked* de acordo com a configuração do reator e do regenerador. A Figura 7 apresenta um reator de FCC tipo *side by side* que compreende um reator e um regenerador conectado através de duas linhas de transporte de catalisador. Esse tipo de conversor representa à grande maioria dos conversores modernos de FCC que estão sendo operados no mundo.



Figura 7: Diagrama esquemático do conversor tipo side by side, Han e Chung (2001).

Nos conversores tipo *stacked* o reator está localizado acima do regenerador para endireitar as linhas de transporte de catalisador. A maioria dos fenômenos físico-químicos

que tem lugar em ambas as configurações de reatores são similares. O conversor apresentado na Figura 5 é um exemplo de conversor tipo *stacked*.

A modelagem de processos atua de alguma forma a representar o comportamento do sistema real que se está querendo representar. O uso do modelo pode assumir várias formas dependendo do que se presume saber e, o que está querendo ser determinado. Em controle de processos e otimização em tempo real (RTO) o problema fundamental é considerar um modelo dinâmico do processo junto com as entradas e saídas a fim de criar uma entrada para o qual o sistema responda de forma prescrita, o anterior dá como resultado um problema de controle regulatório (Hangos e Cameron, 2001). Neste trabalho, um modelo de conversor/ regenerdor do tipo *stacked Orthoflow F* apresentado em Moro e Odloak (1995) é usado seguindo as diretrizes do modelo de Gould *et al.*(1967) que está baseado no conceito do triplo balanço, isto é:

- O balanço de energia entre o calor gerado nas reações de combustão no regenerador e o calor requerido pelas reações de craqueamento no *riser*;
- O balanço de massa entre o coque gerado nas reações de craqueamento e o coque queimado no regenerador;
- O fluxo de catalisador entre o *riser* e o regenerador tem que ser ajustado, de forma apropriada para manter um perfil de pressões adequado.

O modelo tem como objetivo, basicamente, a determinação das seguintes variáveis:

- Conteúdo de coque no catalisador gasto e regenerado das primeira e segunda fases de regeneração;
- Temperatura de saída do riser;
- Temperatura da fase densa do primeiro e segundo estágios de regeneração;
- Inventário de catalisador no reator;
- Temperatura da fase diluída do regenerador;
- Conteúdo de oxigênio nos gases de combustão do regenerador;

• A pressão sob o regenerador e o reator.

As principais equações do modelo para o *riser*, reator e regenerador são apresentadas a seguir:

#### Equações para o riser:

- Balanço de carbono no riser.

$$H_{ra} \frac{dC_{cat}}{dt} = -R_{rc}C_{cat} + 100R_{cf}$$
Eq.1

Sendo:

C<sub>cat</sub>: Coque gerado nas reações de craqueamento;

R<sub>cf</sub>: velocidade de formação de coque.

- Balanço de Energia no *riser*: A dinâmica das reações de craqueamneto no *riser* é desprezível quando comparada com as constantes de tempo dominantes do sistema.

$$S_{c}R_{rc}[T_{rg2} - T_{rx}] + S_{f}D_{tf}R_{tf}[T_{fp} - T_{rx}] - \Delta H_{fv}D_{tf}R_{tf} - 1440\Delta H_{cr}R_{oc} = 0$$
 Eq.2

T<sub>rx</sub>: Temperatura de reação

#### Equações para o reator:

- Balanço de carbono no reator:

$$H_{ra} \frac{dCsc}{dt} = R_{rc} \left[ C_{rc2} - C_{sc} \right] + 100R_{cf}$$
 Eq. 3

C<sub>sc</sub>: teor de carbono mássico no catalisador gasto que sai do reator;

C<sub>rc2</sub>: Teor de carbono mássico no catalisador regenerado.

- Balanço de energia no reator:

$$Hra\frac{dT_{ra}}{dt} = R_{rc}T_{rx} - R_{sc}T_{ra}$$
 Eq. 4

T<sub>ra</sub>: Temperatura do catalisador no vaso separador.

- Diferença de pressões no reator:

$$\frac{dHra}{dt} = R_{rc} - R_{sc}$$
 Eq.5

H<sub>ra</sub>: inventário de catalisador no reator;

R<sub>rc</sub>: fluxo de catalisador regenerado;

R<sub>sc</sub>: fluxo de catalisador gasto.

A diferença de pressões na válvula de nível do reator esta representada pela seguinte equação.

$$\Delta P_{LCV} = P_{ra} + \gamma h_{ra} + \gamma h_{sp} - P_{rg}$$
 Eq.6

Onde  $h_{ra}$  no reator é dado por:

$$h_{ra} = \frac{H_{ra}}{\gamma A_{ra}}$$
 Eq. 7

A dinâmica da válvula de catalisador gasto esta dada por:

$$\tau LCV \quad dA_{LCV} / dt = CLCV - A_{LCV}$$
 Eq. 8

CLCV: saída do controlador de nível do vaso separador

### Equações para o regenerador:

- Balanço de catalisador na fase densa do primeiro estágio de regeneração:

$$\frac{dH_{rg1}}{dt} = R_{sc} - K_w [h_1 - h_w]^{0.5}$$
 Eq. 9  
Sendo:

H<sub>rg1</sub>: inventário de catalisador no primeiro estágio de regeneração.

- Balanço de carbono na primeira etapa de regeneração:

$$\frac{dCrc1}{dt} = \left[\frac{R_{sc}C_{sc} - R_{rc1}C_{rc1}}{H_{rg1}}\right] - R_{cb1}$$
Eq. 10

Sendo:

C<sub>rc1</sub>: Concentração de carbono no catalisador do primeiro estágio de regeneração.

- Balanço de oxigênio na fase densa do primeiro estágio de regeneração:

$$\frac{V_1\rho_1}{100}\frac{dO_{fg1}}{dt} = 0,21R_{ma1} - \frac{F_{gm1}O_{fg1}}{100} - \frac{10}{12}R_{cb1}H_{rg1}F_{at1}$$
 Eq. 11

Sendo:

 $O_{fg1}$ : % molar de  $O_2$  nos gases de combustão na saída da fase densa.

- Balanço de oxigênio na fase diluída do primeiro estágio de regeneração:

$$\frac{V_{d1}\rho_{d1}}{100}\frac{d[O_{d1}]}{dt} = F_{g1}\frac{\{O_{fg1} - [O_{d1}]\}}{100} - 30R_{c01}V_{d1}$$
 Eq. 12

Sendo:

Od1: % molar de oxigênio na fase diluída

- Balanço de energia no leito do primeiro estágio do regenerador:

É assumido que esse tipo de leito pode ser representado por um reator de mistura perfeita com temperaturas e concentrações homogêneas. Assumimos ainda que, os calores específicos são constantes na faixa de temperatura normal e que uma determinada fração do ar injetado no primeiro estágio é arrastada para o segundo, sofrendo um aquecimento até a temperatura do leito, mas não participando da reação de queima de coque.

$$H_{rg_1}S_c \frac{dT_{rg_1}}{dt} = S_c R_{sc}T_{ra} - S_c R_{rc1}T_{rg_1} + S_a \frac{R_{a1}}{60} (T_a - F_{12}T_{rg_1}) - 0,001F_{g_1}S_a T_{rg_1}$$

$$-0,012\Delta H_{c1}C_{arb_1}$$
Eq. 13

Sendo:

Trg1: Temperatura do leito denso do primeiro estágio de regeneração

- Balanço de energia na fase diluída:

$$V_{d1}\rho_{d1}S_a \frac{dT_{d1}}{dt} = F_{g1}S_a \left(T_{rg1} - T_{d1}\right) + 4,058 \times 10^6 R_{CO1}V_{d1}$$
Eq. 14

Sendo:

T<sub>d1</sub>: Temperatura da fase diluída do primeiro estágio de regeneração

$$R_{CO1} = 1,5 \exp\left(-\frac{15000}{(T_{d1} + 273)}\right) [O_{d1}]^{0.5} [CO_{d1}] P_{rg}^{1.5}$$
 Eq. 15

Sendo:

R<sub>CO1</sub>: velocidade de reação de monóxido de carbono para dióxido de carbono.

- Cálculo da pressão no regenerador:

$$\frac{V_{rg}M_{rg}}{R(T_{rg}+273)}\frac{dP_{rg}}{dt} = F_g - F_{g0}$$
 Eq. 16

Sendo:

P<sub>rg</sub>: Pressão no regenerador.

A dinâmica da válvula dos gases de combustão esta dada por:

$$\tau PDCV \quad dA_{PDCV} / dt = CPDCV - A_{PDCV}$$
 Eq. 17

CPDCV: saída do controlador de nível do vaso separador

Assim como foi feito para manipular a vazão de gases de combustão enviados para a caldeira  $F_0$ , a vazão de gases do fracionador para o compressor é manipulado através da dinâmica da válvula do compressor.

No modelo estão presentes três controladores tipo PI, com o objetivo de manter um perfil de pressão adequado, também conhecida como circulação. As variáveis manipuladas pelos controladores são: válvula de controle de nível (LCV), que controla o nível de catalisador no reator (H<sub>RA</sub>), a abertura da válvula de controle que manipula o fluxo de vapor à turbina do compressor de gás (PDCV) que controla a pressão de sucção do compressor de gás (PCIRC). Uma abertura de válvula completa significa que o compressor de gás tem atingido sua máxima capacidade e como consequência, a severidade das reações de craqueamento ou o fluxo de alimentação tem que ser diminuído. Finalmente, encontramos a válvula de gases de combustão (PDV) que controla a diferença de pressões entre reator e o regenerador (DPR).

- Ação de controle do Inventario de Catalisador (H<sub>RA</sub>)

$$LCV = KLCV * e(t) + \frac{KLCV}{TAULCV} \int_{0}^{t} e(\tau)d\tau$$
 Eq. 18

LCV: Apertura da válvula de catalisador gasto.

KLCV: Ganho da ação proporcianal.

TAULCV: Tempo integral.

- Ação de controle da diferença de pressão no reator/regenerador.

$$PDCV = KPDCV * e(t) + \frac{KPDCV}{TAUPDCV} \int_{0}^{t} e(\tau)d\tau$$
 Eq. 19

PDCV: Apertura da válvula dos gases de combustão.

KPDCV: Ganho da ação proporcional.

TAUPDCV: Tempo integral.

-Ação de controle para ajustar a pressão no reator.

$$PCV = KPCV * e(t) + \frac{KPCV}{TAUPCV} \int_{0}^{t} e(\tau)d\tau$$
 Eq. 20

PCV: Apertura da válvula do compressor.

KPCV: Ganho da ação proporcional.

TAUPCV: Tempo integral

#### 2.3 CONTROLE DO CONVERSOR DE FCC

O principal inconveniente na modelagem do conversor do processo de craqueamento catalítico fluidizado está relacionado ao grande número de variáveis, forte interação e às não-linearidades, o que dificulta o projeto e, por sua vez, a caracterização e descrição dinâmica do processo. O projeto do sistema de controle necessita tanto de informações relativas ao estado estacionário como sobre a dinâmica do sistema. Quanto mais sofisticado o sistema de controle, menor a tolerância aos erros do modelo.

Um modelo completo e perfeito não é apenas tecnicamente impossível, mas também não totalmente necessário, o suficiente é um modelo razoavelmente bom que descreva os efeitos das variáveis mais importantes e a dinâmica dominante (Abadie, 1997). De acordo com o descrito anteriormente, o controle do processo está ligado à adequada descrição dos fenômenos e da interação entre as variáveis do processo, sendo de grande importância a capacidade de determinação e descrição do ponto de operação estacionário e as restrições do mesmo. Os benefícios operacionais da aplicação de uma adequada estratégia de controle são: o ajuste de *set-point* para um ponto de operação mais adequado, operação mais próxima das restrições limitantes e, finalmente, respostas mais rápidas e menores afastamentos do *set-point* como resposta as perturbações.

As variáveis na modelagem do conversor de FCC, que são consideradas no controle, podem classificadas em três grupos: 1) variáveis de estado que são aquelas que ficam definidas a partir da solução das equações do modelo. Dentro desse grupo encontramos os níveis de catalisador do regenerador e do reator, as temperaturas na fase densa no regenerador e no reator, a temperatura da fase diluída do regenerador, teor de carbono no catalisador gasto e regenerado, teor de oxigênio no gás de combustão do regenerador e conversão do gasóleo; 2) As variáveis manipuláveis que podem ser usadas para controlar algumas variáveis de estado. Dentro desse grupo encontramos: vazão de circulação de catalisador gasto e regenerado, vazão de ar de combustão, temperatura e vazão de carga; 3) As perturbações dentre as quais encontramos a qualidade da carga que afeta a conversão e o coque formado, a temperatura do ar assim como a qualidade do catalisador através dos parâmetros da cinética de reação.

Quando a variável controlada se desvia do *set-point* devido às perturbações, sistemas de controle do tipo regulatório são acionados com a finalidade de compensar estas perturbações. Existem outros casos onde a perturbação é o *set-point*, o qual muda como função do tempo e, portanto a variável controlada deve seguir o *set-point*. Os sistemas de controle que estão desenhados com este propósito são nomeados de controle servo (Corripio, 1998). No conversor de FCC existem quatro tipos de controle regulatório primário na seção de reação-regeneração. Inicialmente encontramos os controladores de fluxo que são implementados para ajustar os fluxos de alimentação, de reciclo, o fluxo de ar

e os fluxos de vapor de dispersão e o vapor para o *stripper*. Em seguida, encontramos o controlador de temperatura do reator que regula o fluxo de catalisador regenerado sujeito à restrição de pressão diferencial mínimo da válvula de catalisador regenerado; deve ser possível selecionar a variável de processo do controlador de temperatura, esta seleção deve ser feita entre a temperatura dos gases na entrada de um dos ciclones, temperatura média dos gases entre os ciclones e a temperatura de saída dos gases para a fracionadora.

A temperatura do regenerador não é controlada automaticamente, esta depende do seu modo de operação em combustão parcial ou total. A pressão do reator não é diretamente controlada, esta variável é ajustada através de um controlador de pressão no compressor de gases no topo da coluna fracionadora. Em alguns casos, a pressão do regenerador é controlada diretamente regulando o fluxo dos gases de combustão. Finalmente, encontramos o controlador de nível de catalisador na retificadora que regula o fluxo de catalisador gasto em direção ao regenerador sujeito à restrição de diferencial de pressão mínimo na válvula de catalisador gasto.

Para maximizar os lucros de uma unidade, esta deve ser operada simultaneamente seguindo quantas restrições seja possível. Exemplos dessas restrições são os limites do soprador de ar, do compressor de gases e as temperaturas do reator e do regenerador e assim por diante. O controle regulatório convencional trabalha num laço de controle de cada vez e não diz nada sobre as outras malhas de controle. Para superar esses inconvenientes, sistemas de controle avançado são instalados nas refinarias como a finalidade de proporcionar um controle mais preciso das variáveis operacionais, seguindo múltiplas restrições, para obter incrementos nos rendimentos e na severidade do craqueamento. Maiores detalhes sobre os sistemas de controle avançado podem ser encontrados no Anexo C.

# CAPITULO 3-SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALITICO FLUIDIZADO (FCC)

Neste capitulo é apresentada a modelagem no estado estacionário da unidade de craqueamento catalítico no simulador de processos Aspen HYSYS, que inclui o conversor, a fracionadora principal, duas absorvedoras, a desetanizadora e a debutanizadora. Esta parte do trabalho está inserida dentro do objetivo específico relacionado com a análise de sensibilidade das variáveis do processo de FCC. Como caso especifico de estudo foram considerados os dados de cinco cortes de petróleo obtidos do processamento de um resíduo atmosférico brasileiro nomeado ARJES na unidade de destilação molecular de filme descendente; os quais foram considerados na carga do conversor de FCC. A simulação está dividida em três partes: na primeira parte foi simulado um caso base a partir de dados industriais, considerando a caracterização da alimentação do sistema, configuração, calibração e simulação do conversor, assim como a simulação da unidade de recuperação de produtos e a validação da simulação. Na segunda parte, as caracterizações dos destilados obtidos do resíduo de petróleo ARJES processado no destilador molecular foram avaliadas na simulação do processo. Nesse mesmo tópico, os cálculos dos rendimentos globais e as comparações das características físico-químicas dos cortes com os resultados das simulações são descritos. Finalmente, no terceiro tópico, são apresentadas as conclusões e recomendações.

A densidade °API (*American Petroleum Institute*) é um parâmetro de classificação através da qual o petróleo ou produtos de petróleo são considerados como extra-leves (40<°API<45), leve (35<°API<40), médio (25<°API<35), pesado (20<°API<25), ultrapesado (15<°API<20) ou asfáltico (°API<15) (Tovar, 2012). Para o estudo de caso, foram alimentadas as caracterizações dos destilados obtidos do processo de destilação molecular do resíduo atmosféricos no conversor da unidade de craqueamento catalítico. Os destilados considerados possuem densidades entre 15-17 °API, que segundo a classificação anterior, os produtos podem ser considerados como ulta-pesados, motivo pelo qual a abordagem da simulação do conversor baseou-se nas características de conversores tipo RFCC (craqueamento catalítico de resíduos). As modificações do modelo convencional de craqueamento catalítico para o processamento de alimentações ultra- pesadas estão focadas no *stripper* e no regenerador do conversor devido às grandes quantidades de coque, impurezas e contaminantes que se depositam sob o catalisador, dando origem, assim, ao processo conhecido como RFCC (*Residue Fluid Catalytic Cracikg*) que é uma extensão do processo convencional de FCC para processar cargas pesadas e resíduos de petróleo. Depois da separação dos produtos voláteis no *stripper*, o catalisador desativado é transferido do reator para o regenerador. Os produtos de reação no *riser* passam junto com os produtos voláteis do *stripper* para a torre fracionadora.

A regeneração do catalisador compreende a queima do coque depositado sob as partículas de catalisador usando ar ou uma mistura de ar com vapor. O coque é produzido a partir de impurezas, contaminantes (metais e asfaltenos), resíduos de carbono coradson (CCR) ou resíduo de carbono Ramsbottom. Diferentes modificações do processo FCC/RFCC têm sido usadas comercialmente, com o objetivo de incrementar a flexibilidade das alimentações. De acordo com o mencionado, as modificações do processo convencional de craqueamento estão focadas no *stripper* e separador de produtos do catalisador, minimizando assim as reações secundárias que produzem altos rendimentos de gases de combustão, com baixos rendimentos dos produtos líquidos. Altas temperaturas no regenerador são atingidas através de duas etapas de regeneração devido às altas taxas de produção de coque.

Gray (1994) descreve os aspectos que devem ser considerados quando resíduos do processamento do petróleo são introduzidos na operação das unidades de FCC:

1. Incremento no conteúdo de CCR: Os resíduos podem ter uma tendência significativa em direção ao coqueamento através do resíduo carbônico *coradson*. Quando a alimentação é pulverizada sob o catalisador na base do *riser*, alguns componentes do resíduo permanecem como líquido conduzindo as reações de coqueamento;

2.Presença de metais: O conteúdo de vanádio e níquel na alimentação será depositado sob o catalisador, os quais promovem reações de desidrogenação, incrementando a produção de coque e gases. O níquel, geralmente é mais reativo que o vanádio. Os altos níveis de

acúmulo desses metais podem também bloquear o acesso aos poros no catalisador. Esse bloqueio reduz a área superficial do catalisador, e sua atividade;

3.Incremento no conteúdo de enxofre: Uma fração típica de resíduo tem mais enxofre que o gasóleo; desse enxofre uma porção será capturado no coque, e liberado como  $SO_2$  no regenerador. O restante deixará o reator como  $H_2S$  e enxofre nos destilados;

4.Incremento no conteúdo de nitrogênio: As bases nitrogenadas tendem a envenenar os sítios ácidos do catalisador, o que reduz sua atividade. Esses compostos nitrogenados são subsequentemente removidos no regenerador, com contínuos incrementos nas emissões de compostos  $NO_x$ .

O efeito global de adicionar resíduo numa unidade de FCC, seja misturando com gasóleos ou alimentando como é obtido nas unidades de destilação, é a redução do desempenho relativo à alimentação do gasóleo. O resíduo aumenta o coqueamento do catalisador e provoca envenenamento por compostos de nitrogênio, depositando metais que reduzem a seletividade para os produtos desejados, assim a adição incremental de resíduos, reduz a produção da unidade.

O foco deste estudo é a avaliação de cortes obtidos da destilação molecular de filme descendente, nomeados de gasóleos ultra-pesados, a partir do processamento de resíduos atmosféricos brasileiros, no processo de craqueamento catalítico (FCC). O objetivo principal é a determinação dos ganhos nos rendimentos em cortes como gasolina e gás liquefeito de petróleo, quando os gasóleos obtidos via destilação molecular, são alimentados na unidade de FCC. Para que este estudo fosse realizado, inicialmente foi feita a simulação da unidade de craqueamento catalítico no simulador de processos Aspen HYSYS, baseado em uma unidade de processo da Petrobras. A simulação do conversor e da unidade de recuperação de gases foi validada com ajuda do "software Statistica 7.0".

Dados de cinco cortes obtidos do processamento de um petróleo brasileiro, nomeado ARJES na unidade destilação molecular de filme descendente, foram alimentados no conversor de FCC. Os rendimentos globais, isto é, considerando o processo de destilação molecular, a unidade de destilação atmosférica e os rendimentos obtidos no craqueamento catalítico, foram determinados para cada um dos cortes avaliados. Então, análises detalhadas dos produtos de craqueamento obtidos como resultado das simulações no Aspen HYSYS foram comparadas, com análises físico-químicas dos cortes alimentados. Os dados do resíduo de petróleo ARJES bem como as caracterizações físico-químicas dos produtos obtidos da destilação molecular foram obtidos de Zuniga (2009).

# 3.1 SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDIZADO NO SIMULADOR DE PROCESSOS ASPEN HYSYS

Inicialmente, a alimentação é processada na seção de conversão, cujo intervalo de tempo está entre 1 a 4 segundos, com todas as reações desejadas ocorrendo em uma tubulação de grande diâmetro denominada *riser*. Após a separação dos produtos de craqueamento, que acontece em um vaso de separação ou reator, os gases são transferidos à unidade de recuperação de gases, em um intervalo de temperaturas que varia entre 490 e 550°C, conforme o tipo de carga.

A finalidade da seção de recuperação de gases é, através de operações de compressão, absorção, retificação e destilação em várias etapas, processar as correntes de gases e de nafta instabilizada, e delas separar três frações distintas: o gás combustível (C1 e C2), o gás liquefeito (C3 e C4) e a nafta de craqueamento (C5 a C12) (Abadie ,1997).

Para efeito de comparação, inicialmente, a simulação da unidade de craqueamento catalítico é construída com dados da literatura e, os resultados são comparados com os dados obtidos em Pedrosa (1994), para depois, fazer a avaliação dos cortes obtidos por destilação molecular de filme descendente.

Segundo Garcia (2006), para obter o modelo em estado estacionário, as seguintes etapas devem ser seguidas:

- Definição das bases da simulação;
- Caracterização da alimentação do sistema;
- Definição das operações unitárias envolvidas no processo;
- Especificação dos graus de liberdade do sistema;

- Validação do modelo estático;

- Avaliação do estudo de caso.

Em se tratando de hidrocarbonetos apolares, o modelo termodinâmico pode ser representado por equações de estado. Na simulação do conversor de FCC foi usado o modelo de Peng Robinson, para fazer a caracterização da alimentação do conversor, que para o caso de estudo é composta por cinco cortes obtidos da destilação molecular de filme descendente de um resíduo atmosférico (Zuñiga, 2009).

As misturas de hidrocarbonetos com composições conhecidas, misturas definidas, podem ser caracterizadas a partir de componentes puros, ponto normal de ebulição, densidade, peso molecular e propriedades críticas mediante o uso das regras de mistura. Quando se trabalha com misturas não definidas, com composições que não são bem conhecidas (volume, peso e frações molares de todos os componentes presentes), tais como as frações de petróleo, métodos específicos de caracterização são necessários. As informações usuais disponíveis para estas misturas são propriedades físicas (densidade, peso molecular, viscosidade e índice de refração) e propriedades de volatilidade dadas pela American Society for Testing and Materials (ASTM) e curvas de ponto de ebulição verdadeiro (PEV). Neste trabalho, avaliação das curvas PEV estendidas na unidade de craquemento catalítico fluidizado foi feita através do simulador Aspen HYSYS *Refining Catcracker* junto com o *oil manager do Oil characterization environment* do Aspen HYSYS.

O *Oil Caracterization Environment*, no Oil Manager do Aspen Hysys *Refining Catcracker* é uma ferramenta na qual as características de um fluido de petróleo podem ser representadas mediante o uso de pseudocomponentes. As propriedades físicas, críticas, termodinâmicas e de transporte são determinadas para cada um deles, usando correlações e dados de ensaios de laboratório pré-estabelecidos.

## 3.1.1 CARACTERIZAÇÃO DA ALIMENTAÇÃO DO SISTEMA

Para iniciar a caracterização do óleo no *Oil Caracterization Environment*, o pacote termodinâmico usado foi Peng-Robinson. Este se ajustou muito bem para o caso de misturas de hidrocarbonetos. A caracterização dos componentes leves dos petróleos utilizados para a introdução das PEV estendidas dos cortes obtidos por destilação molecular foi feita através dos dados obtidos no simulador de processos de refino e petroquímica PETROX 2,70, da Petrobras. O simulador Petrox possui uma base de dados com ensaios completos para todos os tipos de "crus" brasileiros, além de ter uma metodologia própria para a estimação das propriedades físicas, assim como métodos de conversão próprios da Petrobras, como o craqueamento catalítico e o coqueamento retardado.

Os compoentes leves identificados através do simulador PETROX foram: água, nitrogênio, metano, etano, propano, i-butano, n-butano, i-pentano, n-pentano, n-hexano, n-nonano e dióxido de carbono.

Existem dois caminhos para caracterizar a alimentação que ajustará a cinética dos 21 *lumps* asociados com a alimentação no Aspen Plus *CatCracker: fingerprint* e propriedades de inspeção *standard* (Aspen HYSYS *Refining CatCracker*, 2008).

Nas análises tipo *Fingerprint*, inclui-se análise detalhada de alimentação mediante *gas chromatografhy-mass spectrometry* (GC/MS), *carbon nuclear magnetic resonance* (C NMR) e *high performance liquid chromatography* (HPLC). As análises de destilação podem ser incluidas já que a ideia desse tipo de caracterização é fornecer informação detalhada. Nas análises de inspeção de propriedades tipo *standard* o tipo de análise são as destilações ASTM D 2887, D1160, D86, gravidade, viscosidade, conteúdo de enxofre e índice de refração.

Já que as análises detalhadas levadas em consideração com os tipos de dados *fingerprint* não são ensaios de rotina, o sistema ajusta os dados base tipo *figerprint* para caracterizar a alimentação que está ingressando por meio de propriedades de inspeção e, assim, gerar a composição dos 21 *lumps*.

As propriedades requeridas para a caracterização da alimentação na unidade de FCC, com as quais se ajustam as propriedades mais detalhadas ou *fingerprint* são: densidade °API, curvas de destilação (ASTM D2887, D 1160, D86), índice de refração, viscosidade, conteúdo de enxofre, nitrogênio básico, resíduo carbônico *Conradson* ou *Rambsbottom* e metais (Cu, Fe, Na, Ni, V).

As destilações são usadas para distribuir as massas nas análises mais detalhadas tipo *fingerprint* e para estimar as massas em cada um dos *lump* dos produtos. A gravidade, enxofre, viscosidade e índice de refração são usados para determinar a aromaticidade da alimentação. O carbono *Conradson* é usado como uma parte do cálculo de coque no *riser*, reator e regenerador; o nitrogênio e os metais são usados para calcular as atividades dos catalisadores. Para o caso das curvas de destilação que serão usadas no simulador, tem que ser encontrada uma referência ou *figerprint*, a qual junto com as propriedades de inspeção e as provas de destilação estabelecerão as propriedades adequadas para o estudo de caso.

A qualidade da carga também é determinada pelos vários tipos e quantidades de hidrocarbonetos que a constitui, bem como pelas impurezas presentes na mesma. A composição da carga, por sua vez, é influenciada diretamente pelas características do petróleo original e do processo de refinação que a gerou. Essa carga está composta de hidrocarbonetos parafínicos, olefínicos, naftênicos e aromáticos nas suas diversas formas e arranjos, além de outros compostos, de caráter orgânico ou não, que são classificados como impurezas (Abadie, 1997).

As taxas relativas para as quatro classes de hidrocarbonetos encontrados nas frações de petróleo são as seguintes, em ordem decrescente de velocidade reacional:

- 1. Olefinas;
- 2. Naftênicos e isoparafinas;
- 3. Parafinas;
- 4. Aromáticos.

Também podem ser encontradas impurezas e contaminantes tais como: asfaltenos, resinas, metais pesados, metais alcalinos, alcalinos terrosos, nitrogênio, enxofre e cloretos.

35

Asfaltenos e resinas são substâncias coloidais, dispersas no petróleo ou em suas frações pesadas, insolúveis em hidrocarbonetos leves, constituída de complexas cadeias de elevado peso molecular. Esses compostos são encontrados, normalmente, em gasóleos muito pesados, resíduos atmosféricos e de vácuo e em óleos desasfaltados, sendo esses tipos de compostos poderosos precursores de coque.

No simulador existe um conjunto de bases de cálculo nas bases de dados da alimentação para FCC. Quando temos uma alimentação como: gasóleo de vácuo, gasóleo de vácuo hidrotratado, resíduo ou outro tipo de alimentação no modelo é preciso selecionar a base de cálculo apropriada para cada alimentação. Se estiver presente o caso que existem várias alimentações é preciso procurar a base de cálculo apropriada para cada alimentação converte o cada alimentação "*fingerprint*", com isto o sistema de caracterização converte cada uma das alimentações para os grupos que compõem a cinética de 21 *lumps* e, logo estes são misturados. As reações são baseadas em uma cinética de primeira ordem, que ocorrem na fase vapor.

No Aspen, os reagentes e os produtos são divididos em agregados de material ou *lumps* classificados de acordo com a espécie química e a faixa de pontos de ebulição. As estruturas moleculares estão baseadas nas prováveis rotas de reação e nos mecanismos que existem na química do craqueamento catalítico fluidizado. Na Tabela 1, estão resumidos os *lumps* que o modelo de FCC usa, os quais estão divididos em três categorias: parafínicos, naftênicos e aromáticos (este grupo está dividido em carbono substituinte e em cadeias de carbonos aromáticos), e assim cada um desses tipos está dividido em quatro faixas de pontos de ebulição.

N°	Lump	Faixa de PNE	Descrição
1	С		C lump- produz gases leves
2	G	<430°F	Lump equivalente à gasolina C5
3	Pl	430-650°F	Parafinas leves
4	Nl		Naftenos leves
5	Ar11		Aromáticos de 1 anel- leves
6	Ar2l		Aromáticos de 2 anéis- leves
7	Asl		Aromáticos leves anéis de carbonos
			substituintes
8	Ph	650-950°F	Parafinas pesadas
9	Nh		Naftenos pesados
10	Ar1h		Aromáticos de 1 anel- Pesados
11	Ar2h		Aromáticos de 2 anéis -Pesados
12	Ar3h		Aromáticos de 3 anéis- Pesados
13	Ash		Carbonos substituintes de anéis
			aromático-Pesados
14	Rp	>950°F	Parafinas em resíduos
15	Rn		Naftenos em resíduos
16	Ra1		Aromáticos de 1 anel em resíduos
17	Ra2		Aromáticos de 2 anéis em resíduos
18	Ra3		Aromáticos de 3 anéis em resíduos
19	Ras		Carbonos substituintes em anéis
			aromáticos- resíduos
20	Kcoke	N/A	Coque cinético
21	Mcoke		Coque metálico

Tabela 1: Características dos *lumps* do modelo cinético de craqueamento catalítico.

A simulação da unidade de craquemento catalítico fluidizado no simulador Aspen HYSYS *Refining Catcraker* foi dividida nas seguintes etapas:

(1) Simulação do Conversor: levando em consideração o desenho escolhido na configuração, diferentes tipos de dados têm que ser inseridos para a adequada operação do conversor, tais como: tipo de alimentação, tipo de catalisador, bem como dados de operação do *riser*, reator e regenerador.

Diferentes estudos de caso foram extraídos da literatura e testados (Fernandez, 2006; Moro, 1995; Pedrosa, 1994), visando identificar as condições operacionais para atingir elevados rendimentos de nafta e GLP, junto com baixos rendimentos de coque.

(2) Simulação da Unidade de Recuperação de Gases: uma vez atingidas às condições operacionais para a adequada operação do conversor, a seção de recuperação de produtos é inserida no processo de acordo com dados publicados em Cuadros (2009) e Pedrosa (1994). A unidade de recuperação é composta por: uma fracionadora, duas absorvedoras, uma debutanisadora e uma desetanisadora. Devido à alta complexidade do processo e, à entre as variáveis, a metodologia do planejamento fatorial foi aplicada na unidade como um todo, visando à identificação das principais variáveis e à convergência da unidade, de acordo com as condições reais de operação da planta.

No tópico seguinte, cada uma das etapas para a construção da simulação da unidade de craqueamento catalítico é apresentada, começando com a simulação do conversor e, depois com a unidade recuperação de gases.

#### 3.1.2 SIMULAÇÃO DO CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

As etapas no desenvolvimento do modelo do conversor de FCC para a avaliação das frações pesadas de petróleo no Aspen HYSYS, segundo LLanes (2009) são as seguintes:

 A primeira etapa é configurar a seção do reator-regenerador, de acordo com as características dos conversores de RFCC. Depois de realizada a configuração, um catalisador da base de dados dos catalisadores do Aspen é selecionado, a base de dados cobre um grande número de catalisadores comerciais, com informações das características básicas do catalisador, bem como informações do rendimento;

- As cinéticas de reação são automaticamente calibradas ao desempenho da operação atual. Essa etapa requer, como mínimo, um conjunto completo de dados de operação com qualidade suficiente, como os determinados pelos balanços de materiais. Esses dados são introduzidos em uma utilidade de calibração, que ajusta automaticamente o modelo;
- 3. Uma vez que a calibração tenha sido feita, a seção de reação pode agora predizer o efluente do reator, usando a lista de componentes selecionados pelo usuário. As correntes efluentes totais contêm informações dos rendimentos dos produtos, composição de leves e distribuição de propriedades de refinaria tais como enxofre, RON e aromáticos;
- 4. A seção de fracionamento e planta de gases pode opcionalmente usar um fracionador principal e seção de separação de gases simplificada, ou um fracionamento rigoroso, etapa por etapa, para todas as colunas de destilação e modelos detalhados de trocadores de calor;
- Caracterização das correntes de alimentação que, para o caso em estudo, vão ser as curvas PEV estendidas dos cortes de destilado obtidas pela destilação molecular do resíduo atmosférico ARJES;
- 6. Avaliação das curvas PEV estendidas dos petróleos pesados no simulador;
- 7. Diferentes planilhas automatizam a entrada e reporte de dados para, assim, ter um resumo conveniente do desempenho da unidade.

#### 3.1.2.1 CONFIGURAÇÃO DO CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Segundo Han In-Su (2001), as unidades de FCC podem ser agrupadas em dois tipos: *side by side e stacked*, de acordo com a configuração do reator e do regenerador, onde a maioria dos fenômenos físico-químicos que têm lugar em ambas as configurações de reatores são similares. A configuração do conversor para o processamento dos cortes obtidos, através da destilação molecular de filme descendente dos resíduos atmosféricos do petróleo ARJES, no simulador de processos Aspen HYSYS foi feita de acordo com:

1. As configurações existentes para o processamento de frações pesadas e resíduos de petróleo;

2. As configurações existentes para o conversor de FCC no simulador Aspen HYSYS.

Inicialmente, as características dos conversores para o processamento de frações pesadas e resíduos de petróleo são descritas, e servem como base para a seleção da melhor configuração da base de dados do simulador. Em geral, os conversores do simulador apresentam como característica uma configuração do tipo *side by side*, como apresentado na Figura 6.

Segundo Le Page (1992), a principal dificuldade encontrada no processamento de alimentações pesadas é devido à presença de moléculas, tais como: óleos, resinas e asfaltenos, principais constituintes dos resíduos de petróleo. Tanto para hidro tratamento quanto para craqueamento catalítico, as dificuldades encontradas no processamento desse tipo de alimentações se apresentam devido a vários aspectos: inibição direta dos sítios ativos no catalisador pela absorção direta das moléculas pesadas, deposição progressiva de coque sob o catalisador, limitações difusionais relacionadas à dimensão relativa dos tamanhos dessas moléculas e o tamanho dos poros do catalisador e, também, devido à deposição de metais sob o catalisador destruindo progressivamente sua atividade. De acordo com estas considerações, uma prévia separação das moléculas pesadas dos petróleos a serem refinados ou convertidos é o meio para evitar tais dificuldades.

Existem dois tipos de processamentos de separação das moléculas pesadas:

- Processos físicos de extração como a desasfaltação, que consiste na precipitação de resinas e compostos asfaltênicos através de solventes apropriados;
- Processos de craqueamento químico-térmico como o coqueamento que é desenhado para eliminar resinas e asfaltenos através da formação de uma fase sólida denominada coque.

No craqueamento catalítico fluidizado, os mecanismos de formação de coque fazem parte do segundo tipo de processamento de petróleos pesados. O coque produzido no conversor pode ser oriundo de quatro diferentes mecanismos de formação (Abadie, 1997).

- Coque catalítico: gerado pela adsorção de íons carbonium aromáticos polinucleares nos centros ácidos do catalisador, este tipo de coque provém das reações de condensação;
- Coque do resíduo carbônico: sua geração deve-se à presença de compostos pesados. Entre eles, encontramos o resíduo de carbono presente na carga, devido à composição química da alimentação que, ao perder os elementos voláteis por força do súbito e forte aquecimento, transforma-se em coque unicamente, devido à ação térmica;
- Coque contaminante: formado devido à ação catalítica de metais depositados na superfície do catalisador, agindo como fortes catalisadores de condensação e desidrogenação;
- Coque catalisador/Óleo: é formado pelos hidrocarbonetos retidos entre os poros e as partículas de catalisador, os quais são queimados no regenerador como se fosse coque. Cabe destacar que este não é um tipo verdadeiro de coque.

Diferentemente da desasfaltação que isolam moléculas pesadas, resinas e asfaltenos sem modificar a estrutura química, o craqueamento está baseado na modificação da estrutura das moléculas como resultado de uma série de reações sucessivas, como as reações de desalquilação, desidrogenação e condensação. Esses processos podem ser agrupados em duas categorias: a primeira delas, são os tratamentos baseados, unicamente, no calor. Os processos mais conhecidos são: o coqueamento retardado, coqueamento fluido, *flexi-coking* e *flexicoking* com gasificação dual. Outros processos são: eureka, ACTIV, KK, KKI e *dinacracking* os quais têm sido objeto de testes de demonstração e sua industrialização é limitada; a segunda categoria é composta pelos processos catalíticos como, por exemplo, o *resid cat cracking*. O campo de aplicação desse processo é relativamente limitado, já que só podem processar alimentações com conteúdo de carbon *coradson* menor que 10%, em peso.

Na Tabela 2, são apresentadas as três principais categorias para o processamento de petróleos pesados tanto para o caso térmico, como para o caso catalítico.

Na simulação do conversor para o processamento dos cortes obtidos por destilação molecular de um resíduo atmosférico, a configuração adotada de acordo com os conversores da terceira categoria denominada *resid cat cracking* apresentadas na Tabela 2 é o conversor tipo *Reduced Crude Oil Conversion process* (RCC) da UOP Company, pois esta configuração se ajusta às características dos conversores do Aspen HYSYS, caracterizado por uma configuração *side by side*, com duas etapas de regeneração. No Aspen HYSYS *Cat Craker* do Aspen HYSYS, diferentes arranjos do conversor *side by side* podem ser selecionadas: um ou duas etapas de regeneração e um ou dois pontos de injeção da alimentação podem ser escolhidos (Aspen HYSYS *Operations Guide*, 2008).

O processo de conversão de óleos "crus" reduzidos (RCC) da *UOP process división Inc* publicado por Myers *et al.* (1992) na US Patent 4341624, trata da produção de gasolina de alta octanagem e outros produtos de peso molecular mais baixos, a partir de óleos carbono metálicos, tais como os "crus" reduzidos ou similares. As alimentações carbono metálicas estão compostas de óleos, que vaporizam acima de, aproximadamente, 343°C. Esses óleos contêm, preferencialmente pelo menos 70% v/v de material 343°C+ e, pelo menos 10% v/v de material, que vaporizam acima dos 551°C. O óleo ou sua fração 343°C+ está caracterizado pelo seu conteúdo de metais pesados.
Processo e nome comercial	Licenciador	
Coqueamento retardado	FW;UOP;Kellog; CONOCO; Koa	
	Oil; SINOPEC	
ACTIV(tratamento de coqueamento de asfaltos a	Nippon Mining Co Ltd; Kureha-	
vácuo)	Chiyoda	
EUREKA	Kureha-Chiyoda	
CHERRY P (processo abrangente de reformado de	Osaka Gas Co Ltd	
fraçoes pessadas de petróleo)		
Fluid coking	Exxon R&E Co	
Fllexi coking	Exxon R&E Co	
LR coking (Lurgi-Ruhrgas coking)	Lurgi	
ART process (asphalt residual treating)	MIW Kellog Co	
KK process (coke fluidized bed cracking)	MITI (Japão)	
KKI process	Kobe Steel- Koa Oil- Idemitsu	
	Kosan	
HOT (Heavy oil treating process)	Nippon Mining Co	
ACC(Allosite catalytic cracking process)	Kurushima Engineering	
Dynacracking process	Hydrocarbon Research Inc.	
<b>RCC</b> (reduced crude oil conversion process)	UOP process Division Inc.	
HOC (Heavy oil cracking process)	MIW Kellog & Phillips Pet, Co	
S & W FCC process	Stone & Webster	
<b>R-2R</b> (1 riser 2 regenerators)	Total France & IFP	

Tabela 2: Tecnologias para o processamento de petróleos pesados.

A configuração, em termos gerais do conversor de óleos carbono metálicos é composta, principalmente, de um *riser*, pelo qual é alimentado pelo fundo o óleo e o catalisador regenerado. Seguindo na configuração do conversor, é encontrado o combustor ou regenerador, que recebe o catalisador despojado da câmara de separação. No combustor é feita a queima do coque, que se deposita sob o catalisador no processo de reação. Cabe destacar que a regeneração do catalisador pode ser levada em consideração em uma ou duas etapas de regeneração.

Embora o uso de duas etapas de regeneração seja contemplado neste projeto, pois é a preferência no processo de regeneração, nessa patente, a segunda etapa de regeneração é operada, principalmente como uma câmara de separação. Porém, a segunda etapa de regeneração pode ser usada para remover depósitos adicionais de coque ao redor do 1% ou menos.

Para o estudo de caso, foram escolhidos dois estágios de regeneração nos quais o catalisador entra num leito superior do primeiro estágio de regeneração, removendo parcialmente o conteúdo de coque e, logo, conduzindo para o segundo estágio de regeneração a onde entra em contato com ar de combustão fresco. O catalisador regenerado é transferido para o *riser* entrando em contato com a alimentação fresca na base do *riser* sendo conduzidos (catalisador gasto e produtos de craqueamento) para o reator depois de acontecidas as reações de craqueamento.

No reator, o catalisador gasto é separado dos gases de craqueamento através de ciclones. Os gases de craqueamento são enviados à fracionadora principal e o catalisador gasto é enviado a uma zona de recuperação, e assim os hidrocarbonetos remanescentes são retirados do catalisador através de vapor de água. Finalmente, o catalisador gasto é enviado ao regenerador e o ciclo se repete novamente.

No Aspen HYSYS há a possibilidade de dimensionar o *riser*, *stripper*, bem como os dois estágios de regeneração no FCC *configuration wizard*, os dados de partida da simulação foram obtidos no estudo de Fernandes (2006), junto com as diretrizes da *U.S patent* n. 4.341.624 publicada por Myers (1982). Esses dados foram modificados através

das simulações para conseguir a configuração que atingisse as condições mais realistas do conversor de FCC. Na Tabela 3 são apresentadas as dimensões das iniciais do conversor.

Tabela 3: Condições iniciais da configuração do conversor.					
Seção do conversor	Comprimento(m)	Diâmetro (m)			
Riser	32,11	1,6			
Stripper	8,0	3,6			
Disengager	8,5	5,1			
<b>Regenerador 1</b>	13,7	6,4			
<b>Regenerador 2</b>	11,8	5,9			
Lift	20,64	0,8			
Stand pipe de catalisador gasto	8,5	0,8			
Stand pipe de catalisador regenerado	7,5	0,8			

# 3.1.2.2 CALIBRAÇÃO DO CONVERSOR DE FCC

A etapa de calibração é feita tanto para a alimentação quanto para os produtos. No caso da alimentação, os dados da planta são usados para ajustar os parâmetros das correlações de propriedades, os quais são ajustados ao modelo cinético de 21 *lumps*. Para os produtos, cada propriedade tem uma curva de referência fixa que está representada pela propriedade no eixo das ordenadas *versus* o ponto normal de ebulição do componente hipotético no eixo das abscissas. Essas curvas são ajustadas às propriedades dos produtos medidas para conformar as curvas de propriedade base, que são usadas para calcular as propriedades dos cortes. Finalmente, as propriedades calculadas dos cortes são usadas para calibrar as correlações de propriedades no modelo de FCC. A calibração do conversor permite salvar os fatores de calibração para serem usados na simulação.

A calibração do conversor no HYSYS *Refining CatCracker* está dividida nas seguintes etapas:

a) Inicialmente, deve-se gerar um caso novo;

- b) No Simulation Basis manager se inserem os componentes leves e o pacote termodinâmico que, para o caso em estudo é Peng-Robinson, esses dados são extraídos de Pedrosa (1994);
- c) Insere-se e, e configura-se uma nova unidade de craqueamento catalítico fluidizado. Na primeira página do FCC *configuration wizard* escolhe-se um *riser* e dois estágios de regeneração; os dados geométricos foram extraídos de Fernandes (2006) e Myers *et al.* (1982), nesse ultimo foi assumido que não existem perdas de calor com o ambiente;
- d) No conjunto de fatores de calibração foram importados os fatores de uma unidade da UOP (*Universal Oil Products*) que se encontra nos arquivos do Aspen HYSYS e que se ajusta às características do conversor escolhido como estudo de caso.

Outra opção é gerar um novo conjunto de fatores de calibração, a partir da calibração do modelo de FCC. Para este caso, os dados de projeto são os mesmos da configuração inicial da unidade. Já no caso dos dados da alimentação dos catalisadores, os dados de operação e os dados dos produtos podem ser obtidos a partir de dados industriais. Uma vez que, os parâmetros das correlações do modelo cinético estejam definidos, dá-se início à simulação da unidade de craqueamento catalítico, constituída pelo conversor, junto com a unidade de recuperação de gases. Os dados para validar a simulação foram extraídos de Pedrosa (1994), que serviu de base para a avaliação dos cortes obtidos via destilação molecular.

#### 3.1.2.3 RESULTADOS DA SIMULAÇÃO DO CONVERSOR

Uma vez atingida a convergência do conversor, de acordo com os dados publicados na literatura, foram feitas variações aleatórias das variáveis de entrada que apresentaram uma maior sensibilidade com respeito ao rendimento dos produtos de craqueamento. As variáveis identificadas são: temperatura do segundo estágio de regeneração (TR2), temperatura de alimentação (Talim), fluxo de ar para o primeiro e segundo estágios de regeneração (RA1 e RA2) e temperatura de reação (TRX). Tambem foram feitas variações do tipo de catalisador, já que o Aspen HYSYS V 7,0 possui um conjunto de 61

catalisadores na sua base de dados para serem testados na simulação com a finalidade de ajustar os dados da simulação aos dados reais de operação da planta.

As dimensões da configuração final do conversor após alguns ajustes são apresentadas nas Tabelas 4 e 5:

abela 4: Dimensões da	i seção c	le conversă
	Riser	Reator
Comprimento (m)	36,58	0,3048
Diâmetro (m)	1,01	4,37

Tabela 4: Dimensões da seção de conversão.

Tabela 5	5: Dimer	nsões do	regenerador.
I ubbiu c			regenerador

	Regen	erador
	Estágio I	Estágio II
Altura do leito denso (m)	9,5	9,5
Diâmetro do leito denso (m)	8	7,5
Diâmetro da fase diluída (m)	8	7,5
Diâmetro da interface (m)	8	7,5
Altura de entrada dos ciclones (m)	15,24	15,24
Diâmetro de entrada do ciclion (m)	2,28	2,28
Diâmetro de saída do ciclon (m)	1,21	1,21

A corrente de alimentação é composta por um gasóleo com densidade °API de 21,32 em uma faixa de temperatura de destilação de 302-611 °C. As condições da corrente de alimentação do conversor são apresentadas na Tabela 6.

Fluxo de alimentação (m <sup>3</sup> /h)	333,3
Temperatura (°C)	105,6
Pressão (kPa)	240

Tabela 6: Condições da corrente de alimentação.

Os valores das variáveis que têm maior efeito sobre o conversor, os rendimentos dos produtos, bem como as características do catalisador que apresentou o melhor desempenho são apresentados na Tabela 7.

Tabela 7: Valores das variáveis com maior influência no rendimento dos produtos do processo.

Fluxo de ar para o primeiro estágio de regeneração (RA1)	10000 STD_m <sup>3</sup> /h
Fluxo de ar no segundo estágio de regeneração (RA2)	1000 STD_m <sup>3</sup> /h
Temperatura segunda etapa de regeneração (TR2)	645 °C
Temperatura de alimentação (Talim)	100 °C
Temperatura de reação (TRX)	536 °C

As anteriores variáveis foram identificadas de acordo com sua sensibilidade nos produtos de craqueamento. Os rendimentos dos produtos na saída do conversor, de acordo com os valores das variáveis apresentadas na Tabela 7, são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8: Rendimento dos produtos de craqueamento.

Produtos de Craqueamento	Rendimento % (p/p)
Nafta	44,14
Óleo leve de reciclo	10,25
Óleo clarificado	11,26
Coque	19,97

As características do catalisador com melhores rendimentos dos produtos de craqueamento é denominado Nova D50G no Aspen HYSYS que é composto principalmente por alumina, seguido de zeólita e, em menor proporção, encontram-se as terras raras.

## 3.1.3 SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE FRACIONAMENTO

Inicialmente, encontramos a fracionadora principal que tem com objetivo retirar dos produtos de craqueamento provenientes do reator e do conversor os componentes mais pesados, tais como óleo decantado e óleo leve de reciclo.

Para retirar os componentes mais pesados, os gases provenientes do conversor em uma faixa de temperatura entre 500-550°C entram em uma zona de *flash* que recebe uma grande quantidade de refluxo interno a uma temperatura entre 180-200°C. Cabe ressaltar a importância do controle da temperatura de fundo da fracionadora, devido à elevada aromaticidade do resíduo de craqueamento, valores superiores podem causar um intenso coqueamento nessa região. Outro produto lateral é o diesel de craqueamento ou óleo leve de reciclo.

Pelo topo da torre, saem as frações mais leves e rentáveis produzidas na unidade de FCC: nafta, GLP e gás combustível. A temperatura de saída desses gases é controlada, visando acertar o ponto final de ebulição por meio de uma corrente resfriada que serve como refluxo de topo.

A seguir são apresentadas as condições de operação da fracionadora principal:

- Temperatura no topo: 98,07°C
- Temperatura no fundo: 360°C
- Pressão no topo: 1kgf/cm<sup>2</sup>
- Pressão no fundo: 1,5 kgf/cm<sup>2</sup>
- Número de estágios da coluna: 22
- Número de estágios da retificadora lateral: 2

Na coluna, especificou-se uma eficiência de 0,6 para os seis primeiros pratos e uma eficiência de 1 para os pratos restantes. Os pratos estão numerados de cima para baixo, em ordem crescente. Na Figura 8 é apresentado um perfil de temperatura da fracionadora principal, no qual é observado um aumento da temperatura na medida em que se aumenta o número de prato.



Figura 8: Perfil de temperatura da fracionadora principal.

Na Figura 9 pode-se observar um esquema da fracionadora principal, a qual possui uma retificadora lateral, três *pump around* ou bombas de sucção e um vaso de topo.



Figura 9: Seção de Fracionamento.

## 3.1.4 SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE RECUPERAÇÃO DE GASES

A unidade de recuperação de gases tem como objetivo promover as condições para que haja uma eficiente separação entre a nafta de craqueamento, o GLP e o gás combustível com a maior recuperação possível de GLP. Essa unidade pode ser dividida em três sistemas distintos, porém, interligados: o primeiro é o sistema de compressão de gases, seguido do sistema de absorção/retificação e, finalmente, do sistema de fracionamento.

O sistema de compressão de gases, utiliza o gás proveniente do vaso de topo da fracionadora e, através de dois estágios de compressão, eleva a pressão do gás de 0,8 kg/cm<sup>2</sup>.g para aproximadamente 17 kg/cm<sup>2</sup>.g. Usualmente, são usados compressores centrífugos onde a razão de compressão para cada estágio é de aproximandamente quatro.

O sistema de absorção/retificação compõe uma absorvedora primária, absorvedora secundária e uma coluna desetanisadora. As absorvedoras têm como objetivo recuperar as frações mais pesadas que o C2 provenientes do vaso de alta pressão.

A seguir, são apresentadas as condições de operação das colunas de absorção:

## Absorvedora Primária:

- Número de estágios: 10.
- Pressão de operação: 14 a 20 kgf/cm<sup>2</sup>.

Absorvedora Secundária:

- Número de estágios: 9.
- Pressão de operação: 14 a 20 kgf/cm<sup>2</sup>.

Na coluna desetanisadora, devido ao moderado aquecimento, a nafta libera os gases (C1-C2) que saem pelo topo e se juntam à descarga do compressor. No fundo, é obtida uma corrente rica em propano, propeno, butanos e butenos, que é separada da nafta na unidade debutanisadora. As condições de operação da coluna desetanisadora foram:

Coluna desetanisadora:

- Número de estágios: 9.
- Pressão de operação: 14 a 20 kgf/cm<sup>2</sup>.

Na Figura 10, encontramos o sistema de absorção e retificação composto pelas duas absorvedoras e pela coluna desetanisadora:



Figura 10: Sistema de Absorção/Retificação.

Por fim, encontramos o sistema de fracionamento que é composto pela coluna debutanisadora e tem como função promover a máxima separação entre a nafta e o gás liquefeito. A nafta, produto de fundo da torre desetanisadora, é pré-aquecida com a corrente de nafta estabilizada que saí pelo fundo da torre debutanisadora. Pelo topo desta unidade, saem vapores de GLP que após o esfriamento, são liquefeitos e coletados em um tambor de acúmulo.

As condições de operação da coluna debutanisadora foram as seguintes:

- Número de estágios: 20.
- Pressão de operação: 8 a 12 kgf/cm<sup>2</sup>.
- Temperatura do fundo da coluna: 187°C.

Na Figura 11 é apresentado um esquema da coluna debutanisadora:



Figura 11: Coluna Debutanisadora

## 3.1.5 VALIDAÇÃO DA SIMULAÇÃO

Para realizar a validação do modelo e, devido à forte interação entre as variáveis e as não linearidades do modelo de craqueamento catalitico, planejamentos fatoriais, tomando como ponto central as variáveis apresentadas na Tabela 7 foram realizados, objetivando encontrar o conjunto de variáveis de entrada que produzam o conjunto de variáveis de saída, com a menor variação ao respeito dos dados da indústria.

Para desenvolver está tarefa fosse realizada foi elaborado um planejamento fatorial completo 2<sup>5</sup>, com um total de 32 experimentos, tomando como referência os dados dos produtos de craqueamento (gases condensáveis, gás liquefeito de petróleo, gasolina, óleo leve de reciclo e óleo clarificado) para fazer a validação dos resultados, de acordo com o estudo de Pedrosa (1994).

Inicialmente, foram feitas variações em torno do ponto central de 10%, 5%, 4%. Porém para a maioria dos ensaios do planejamento, a unidade de conversão não convergiu. Com uma variação em torno de 2,5% a maioria dos ensaios do planejamento convergiu. Nas Tabelas 9 e 10 são apresentados o ponto central e o planejamento de experimentos com uma variação de 2,5% em torno do ponto central, respectivamente.

Fataras	Ponto	Nív	veis
Fatores	Central	-1	+1
RA1	10000	9750	10250
(STD_m <sup>3</sup> /h)			
RA2	1000	975	1025
(STD_m <sup>3</sup> /h)			
<b>TR2</b> (°C)	645	629	661
T alim (°C)	100	97	103
TRX (°C)	536	522	549

Tabela 9: Níveis do planejamento fatorial com um 2,5% de variação do ponto central.

Ensaio	RA1	RA2	TR2	T alim	TRX
1	9750	975	629	97	522
2	10250	975	629	97	522
3	9750	1025	629	97	522
4	10250	1025	629	97	522
5	9750	975	661	97	522
6	10250	975	661	97	522
7	9750	1025	661	97	522
8	10250	1025	661	97	522
9	9750	975	629	103	522
10	10250	975	629	103	522
11	9750	1025	629	103	522
12	10250	1025	629	103	522
13	9750	975	661	103	522
14	10250	975	661	103	522
15	9750	1025	661	103	522
16	10250	1025	661	103	522
17	9750	975	629	97	549
18	10250	975	629	97	549
19	9750	1025	629	97	549
20	10250	1025	629	97	549
21	9750	975	661	97	549
22	10250	975	661	97	549
23	9750	1025	661	97	549
24	10250	1025	661	97	549
25	9750	975	629	103	549
26	10250	975	629	103	549
27	9750	1025	629	103	549
28	10250	1025	629	103	549
29	9750	975	661	103	549
30	10250	975	661	103	549
31	9750	1025	661	103	549
32	10250	1025	661	103	549

Tabela 10: Planejamento fatorial completo 2<sup>5</sup> das variáveis com Maior influência na unidade de FCC.

Da Tabela 10, vale destacar que, o ensaio que apresentou um menor erro absoluto das variáveis de saída da simulação do conversor de FCC foi o ensaio 10, esses valores são apresentados na Tabela 11:

Fatores				]	Erro Abso	oluto nas l	Resposta	s	
RA1	RA2	TR2	TAlim	TRX	GC	GLP	GLN	LCO	OCL
10250	975	629	103	522	-0,86%	18,19%	14,49%	6,70%	5,52%

Tabela 11: Resultado com o menor erro absoluto do primeiro planejamento fatorial.

Um segundo planejamento fatorial completo foi realizado, desta vez, tomando como ponto central os valores dos fatores apresentados na Tabela 11, na tentativa de reduzir a variação das correntes de gás liquefeito de petróleo e gasolina com respeito dos valores da indústria, ressaltando que, as correntes de nafta e GLP são as correntes com maior importância na unidade.

A combinação dos fatores junto com o erro absoluto, quando comparado com os valores publicados na literatura, são mostrados na Tabela 12.

Tabela 12: Resultado com o menor erro absoluto do segundo planejamento fatorial.

Fatores				]	Erro Abs	oluto nas	Resposta	as	
RA1	RA2	TR2	TAlim	TRX	GC	GLP	GLN	LCO	OCL
10506	999	644	105	535	-7,59%	15,92%	13,60%	8,08%	10,20%

A partir dos valores dos fatores da Tabela 12, ajustes finais foram feitos em algumas das variáveis para diminuir ainda mais o erro absoluto das correntes de interesse. Assim pode-se chegar aos valores apresentados na Tabela 13, os quais correspondem aos valores finais com os quais foi validada a simulação da unidade de FCC.

Variáveis	de Entrada		Variáveis de Saída			
Fator	Valor calculado (ton/dia)	Produtos	Valor medido (ton/dia)	Valor calculado (ton/dia)	Desvio absoluto (%)	
RA1	10506,2	GC	360	370,37	-2,88	
RA2	999,37	GLP	1167	1031,70	11,59	
TR2	644,7	GLN	3534	3084,33	12,72	
Talim	105,6	LCO	667	613,13	8,07	
TRX	535	OCL	1107	993,45	10,25	

Tabela 13: Validação da simulação da unidade de FCC.

Na Figura 12 é apresentado um esquema geral da simulação da unidade de craqueamento catalítico fluidizado.



Figura 12: Diagrama de fluxo da simulação da unidade de craqueamento catalítico fluidizado.

# 3.2 AVALIAÇÃO DOS CORTES DE PETRÓLEO OBTIDOS POR DESTILAÇÃO MOLECULAR DE UM RESIDUO ATMOSFÉRICO NA SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Diferentes estudos têm sido realizados por pesquisadores dos Laboratórios de Desenvolvimento de Processos de Separação (LDPS) e de Otimização, Projeto e Controle Avançado (LOPCA) da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP) no intuito de desenvolver de metodologias para fracionar resíduos pesados e ultra-pesados de petróleo. As pesquisas se iniciaram com (Batistella, 1996), com a modelagem e simulação de destiladores moleculares de filme descendente e centrífugo, processos usados de forma alternativa no estágio de purificação na indústria de química fina, já que a destilação convencional, em muitos casos, não podia ser utilizada devido à instabilidade térmica dos produtos envolvidos.

Em Batistella (1999), foram verificadas as características das técnicas de destilação molecular de filme descendente e centrífuga na obtenção de produtos de alto valor agregado instáveis termicamente. Nesse trabalho, foi realizado o desenvolvimento da modelagem e simulação de destiladores operando em cascata e em refluxo, o desenvolvimento de uma metodologia para *scale-up* bem como a montagem experimental para separação de carotenos do óleo de palma e purificação de álcoois de lanolina comercial através do uso de destiladores comerciais foram levados em consideração. Uma das suas principais conclusões foi da aplicação dessa técnica para análise de componentes pesados, já que esse processo apresenta tempos de operação extremamente curtos e condições de temperatura brandas, ideal para o processamento de óleos pesados evitando, assim, o craqueamento térmico, com a consequente decomposição do petróleo.

Os trabalhos aplicando a técnica da destilação molecular em resíduos de vácuo de petróleos pesados continuaram com Santos (2005). Nesse estudo, desenvolveu-se um método novo e apropriado para estender a curva PEV para ser usada na caracterização dos resíduos de petróleos pesados, usando a técnica de destilação molecular de filme descendente. Outros trabalhos focados na caracterização de resíduos de petróleo, usando a mesma técnica, foram realizados por Winter (2007), Ballesteros (2009) e Rocha (2009).

Além desses estudos, encontramos o trabalho de Zuñiga (2009) cujo objetivo principal foi a realização da simulação do processo de destilação molecular de frações pesadas de petróleo em um destilador molecular de filme descendente. Para atingir esse objetivo, ensaios experimentais para o fracionamento de amostras de petróleos pesados, por meio da destilação molecular com o destilador de filme descendente de dois resíduos 400°C+, obtidos da destilação atmosférica de dois petróleos brasileiros diferentes, foram realizados para estender a curva PEV dos petróleos analisados até aproximadamente 700°C.

O objetivo deste capítulo é a avaliação das caracterizações das curvas de destilação dos cortes obtidos via destilação molecular de filme descendente do resíduo atmosférico 400 °C+ do petróleo ARJES, dados estes publicados em Zuniga (2009), bem como da obtenção do rendimento dos cortes obtidos da destilação do resíduo com respeito, à alimentação da unidade de destilação atmosférica.

## 3.2.1 DESTILADOR MOLECULAR DE FILME DESCENDENTE E OBTENÇÃO DE CURVAS PEV ESTENDIDAS

A destilação molecular é uma forma particular de evaporação, em que a taxa é governada somente pela taxa de moléculas que escapam da superfície do líquido sem retorno das moléculas evaporadas para a fase líquida (não há equilíbrio líquido-vapor), a temperatura e a taxa de evaporação são determinadas pela quantidade de calor fornecido ao líquido pela superfície aquecida do evaporador e não são influênciadas pela condição do vapor. A distância entre o evaporador e o condensador corresponde ao percurso livre-meio das moléculas evaporantes, onde o fluxo do líquido destilado é extremamente comportado, sem convecção, devido à ebulição não existir e, sem difusão devido às altas viscosidades e pesos moleculares (Batistella, 1996).

O destilador molecular de filme descendente usado para obter os cortes de destilado a serem avaliados na simulação da unidade de FCC é um caso particular do destilador molecular, onde o líquido a ser destilado é aquecido por meio de um sistema térmico ou elétrico até a temperatura de alimentação, degaseificado no degaseificador, e alimentado na parte superior do evaporador. O líquido escoa por meio da força da gravidade uniformemente na parede externa do evaporador na forma de um fino filme descendente que é parcialmente vaporizado, e o vapor gerado é condensado pelo condensador. Na parte inferior do equipamento, através de chicanas, o resíduo e o condensado escoam para recipientes distintos de resíduo e de destilado.

A Figura 13 ilustra a configuração interna do destilador molecular de filme descendente, onde a alimentação é feita no topo do destilador, o filme descendente na carcaça externa ou evaporador e as saídas de resíduo e destilado no fundo da unidade.



Figura 13: Configuração interna do destilador molecular de filme descendente, Fonte: Catálogo UIC GmbH, 2011.

Uma curva PEV de uma fração de petróleo, de composição desconhecida constitui a representação gráfica da temperatura de vaporização de certa quantidade de líquido evaporado *versus* a porcentagem em volume (tomando como base 100 unidades de

volume). Na curva, a temperatura de ebulição do componente mais leve da mistura é chamada de Ponto Inicial de Ebulição (PIE) e a temperatura de ebulição do componente mais pesado da mistura é chamado de Ponto Final de Ebulição (PFE) (Zuniga, 2009). A curva PEV estendida compreende a integração dos dados de temperatura do destilador molecular ajustados à temperatura atmosférica equivalente através da correlação ASTM 1160 *versus* porcentagem de destilado junto com os dados da curva PEV convencional obtida com os métodos padronizados ASTM D 2892 e ASTM D 5263.

Os dados de Santos (2005) mostram que, através do uso da metodologia da curva PEV estendida, há um ganho em porcentagem de destilado entre 30-45% para resíduos atmosféricos 420°C+, e entre 8-20% para os resíduos de vácuo 540/565°C+. Isto indica que, através do processo de destilação molecular, é possível ter um melhor aproveitamento do petróleo cru, além de reduzir a quantidade de resíduos.

# 3.2.2 CARACTERÍSTICAS DOS CORTES DE DESTILADO OBTIDOS NO DESTILADOR MOLECULAR DE FILME DESCENDENTE A SER AVALIADOS NA SIMULAÇÃO DO PROCESSO DE FCC

De acordo com Zuniga (2009), o resíduo de petróleo usado para obter os cortes de destilado através do destilador molecular é constituído por um resíduo atmosférico 400°C+ da destilação ASTM 2892 produzido como resultado do fracionamento do petróleo com nome fantasia ARJES com 16,90 °API e 0,950 de densidade 20/4°C.

Para fracionar o resíduo atmosférico foi usado um destilador molecular de filme descendente KDL 5- Mini Pilot PLant/UIC. O processo de destilação é realizado em estado estável sendo o resíduo atmosférico continuamente alimentado, e duas correntes de produtos são geradas: cortes de destilado e resíduo da destilação molecular como apresentado na Figura 15. O destilado é separado do resíduo atmosférico em quatro etapas: a primeira, é o transporte dos compostos evaporados da mistura líquida para o filme superficial, seguido da destilação da mistura do filme superficial, transporte das moléculas evaporadas através do espaço entre o evaporador e o condensador e, finalmente, a condensação das moléculas evaporadas.

A caracterização dos cortes obtidos da destilação molecular do resíduo de petróleo ARJES foi realizada através do método de destilação simulada HT-750 apresentada a seguir na Tabela 14, tendo como base os dados publicados por Zuniga (2010).

% Peso de	400 559 °C	400 <b>5</b> 94°C	400 ( <b>22</b> °C	400 <i>(5</i> 0°C	400 <b>7</b> 01°C
Destilado	400-558 C	400-584 C	400-022 C	400-039 C	400-701 C
IBP	372,6	375,2	374,7	375,6	376,9
5	393,5	395,6	398,4	400,3	402,6
10	402,9	405,5	409,3	411,9	414,9
15	410,0	413,2	417,8	421,1	424,8
20	416,3	420,0	425,2	429,0	433,7
25	421,9	426,2	432,1	436,7	442,5
30	427,1	431,9	438,6	444,7	452,1
35	432,0	437,5	445,7	453,3	462,7
40	437,0	443,4	453,3	462,8	473,7
45	441,7	449,2	461,4	472,5	485,0
50	446,8	455,7	469,9	482,5	496,4
55	452,2	462,7	478,5	492,5	507,6
60	457,8	469,8	487,3	502,4	519,3
65	463,9	477,0	496,1	512,5	531,4
70	470,2	484,4	504,6	522,9	544,4
75	476,7	492,0	513,6	533,6	558,1
80	483,8	499,7	522,7	545,1	571,9
85	491,7	507,8	532,5	557,2	586,2
90	500,7	517,4	543,7	569,9	601,5
95	514,0	530,5	558,7	585,6	620,5
100	564,5	566,1	593,9	619,8	692,5

Tabela 14: Destilação simulada dos cortes obtidos da destilação molecular.

Análise de densidade, viscosidade e caracterização química através de análise SARA para identificação em fração mássica dos compostos saturados, aromáticos, resinas e asfaltenos; análise de espectroscopia de ressonância magnética nuclear (RMN), para identificação da proporção de carbonos aromáticos e carbonos alifáticos e análise de composição química foram realizados nesse mesmo estudo na alimentação do destilador molecular, bem como nos cortes de destilado obtidos. A Tabela 15 apresenta uma lista com as faixas de pontos de ebulição, as densidades °API e a composição química dos elementos dos cortes de destilado obtidos em cada temperatura da destilação molecular.

Resíduo Atmosférico	TDM (K)	T (K)	С	Н	Ν	S	H/C	°API
ARJES	483,15	673,15- 831,15	0,877	0,127	<0,003	0,005	1,77	17,2
	503,15	673,15- 857,15	0,870	0,128	<0,003	0,005	1,78	16,3
	553,15	673,15- 895,15	0,870	0,127	<0,003	0,005	1,80	16,0
	563,15	673,15- 932,15	0,869	0,120	<0,003	0,006	1,81	15,7
	598,15	673,15- 974,15	0,881	0,127	<0,003	0,006	1,84	15,3

Tabela 15: Composição química dos cortes de destilado obtidos através do processo de destilação molecular (Zuniga, 2010).

A composição de compostos saturados, aromáticos, resinas e asfaltenos está caracterizada na Tabela 16. A maior concentração de alfaltenos no resíduo atmosférico é observada quando comparada com a concentração de asfaltenos nos cortes, via destilação molecular; também se pode observar um aumento da concentração de compostos saturados e aromáticos nos cortes destilados com a diminuição da temperatura do destilador molecular.

Análise SARA					C NN	ИR
Amostra	Saturados	Aromáticos	Resinas	Asfaltenos	Carbono Aromático	Carbono Alifático
		Alimentação	o ao Destil	ador Molecu	lar	
ARJES	0,17	0,41	0,29	0,13	0,23	0,77
	Сог	rtes de destila	do do resío	luo Atmosfé	rico JES	
673,15-	0.47	0.44	0.09	0.01	0.21	0 79
831,15	0,47	0,11	0,11 0,09	0,01	·,	
673,15-	0.46	0.44	0.09	0.01	0.21	0 79
857,15	0,10	0,11	0,07	0,01	0,21	0,19
673,15-	0.41	0.44	0.14	0.01	0.21	0.79
895,15	0,11	0,11	0,11	0,01	0,21	0,19
673,15-	0.40	0.44	0.15	0.01	0.22	0.78
932,15	.,		0,10	0,01		0,70
673,15-	0.36	0.43	0.19	0.02	0.22	0.78
974,15	-,00	-,	-,->	-,	~,==	-,, 0

Tabela 16: Caracterização química do resíduo atmosférico JES e dos cortes de destilado obtidos através de destilação molecular (Zuniga, 2010).

Segundo Speight (1999), as proporções dos elementos no petróleo variam dentro de limites muito estreitos, os quais são apresentados na Tabela 17.

Tabela 17: Proporções dos elementos no petróleo.

Elemento	Limite
Carbono	83,0-87,0%
Hidrogênio	10,0-14,0%
Oxigênio	0,05-1,5%
Enxofre	0,05-6,0%
Metais (Ni e V)	< 1000 ppm

Compostos de enxofre estão dentro dos mais importantes constituintes do petróleo. Em termos gerais, altas densidades do petróleo caracterizam baixas densidades °API, com altos conteúdos de enxofre. O enxofre total no petróleo pode variar de 0,04% p/p para um petróleo leve até 5% p/p para um petróleo pesado. A concentração do enxofre nas diferentes frações do petróleo se incrementa com o aumento no ponto de ebulição. O sulfeto de hidrogênio é o constituinte mais comum de muitos petróleos e alguns petróleos com mais de 1% p/p de enxofre estão acompanhados de gás com consideráveis quantidades de sulfeto de hidrogênio.

O conteúdo de nitrogênio no petróleo é geralmente baixo, encontrando-se na faixa entre 0.1-0.9%. Em geral, quanto mais asfáltico for o petróleo maior será o conteúdo de nitrogênio, analogamente quanto maior for o resíduo carbônico, maior será o conteúdo de nitrogênio.

A proporção de parafinas nos cortes de petróleo varia com o tipo de petróleo, mas dentro do mesmo petróleo, a proporção de parafinas usualmente diminui com o incremento no peso molecular. Da mesma forma, um incremento na proporção de hidrocarbonetos aromáticos é evidente com o incremento no peso molecular e nos asfaltenos e nas resinas.

Nas Tabelas 15 e 16 destaque é para o caráter aromático dos cortes com o incremento na temperatura do destilador molecular junto com baixos valores de densidades °API, o que indica uma alta tendência na formação de coque. Mesmo assim, os hidrocarbonetos saturados encontram-se em menor proporção para cortes com maior temperatura do destilador molecular, o que indica um aumento no peso molecular da fração.

Os dados apresentados nas tabelas anteriores são usados como referência para a análise das características dos produtos obtidos no processo de craqueamento catalítico, em relação à alimentação vinda dos cortes de destilado do destilador molecular, e às características de projeto e operação da unidade de craqueamento. Os rendimentos do processo para cada um dos produtos de craquemento em relação à alimentação da unidade de destilação atmosférica são determinados.

67

## 3.2.3 AVALIAÇÃO DOS CORTES OBTIDOS DA DESTILAÇÃO MOLECULAR NA SIMULAÇÃO DA UNIDADE DE FCC

Na avaliação dos cortes obtidos da destilação molecular na simulação da unidade de FCC são feitas, inicialmente, as comparações dos produtos da unidade de craquemento: GC, GLP, GLN, LCO, OC para os produtos dos cortes da destilação molecular e de um gasóleo convencional da indústria dados apresentados em Pedrosa (1994), os resultados são apresentados na Tabela 18. Igualmente são apresentadas as frações de cada um dos produtos em relação ao fluxo total de saída para cada uma das correntes.

Tabela 18: Fração dos produtos nas correntes de saída do processo de FCC para os cortesda destilação molecular.

Produto	Gasóleo Convencional (Pedrosa, 1994)	Corte 673,15- 831,15 K	Corte 673,15- 857,15 K	Corte 673,15- 895,15 K	Corte 673,15- 932,15 K	Corte 673,15- 974,15 K
°API	21,32	17,2	16,3	16,0	15,7	15,3
	Fraçã	ão dos produ	tos nas corre	entes de saída	l	
GC	0,061	0,064	0,057	0,067	0,065	0,067
GLP	0, 69	0, 162	0, 156	0, 156	0, 156	0, 174
GLN	0, 506	0, 480	0, 496	0, 496	0, 503	0, 482
LCO	0, 101	0, 118	0, 115	0, 102	0, 104	0,119
OC	0, 163	0, 177	0, 176	0, 179	0, 171	0, 158
Fluxo Total	6092,98	6422,55	6272,96	6271,1	6191,97	6324,57

Em relação ao gasóleo convencional e tomando como referência as correntes de GLP e GLN, que são as correntes com maior interesse econômico, os cortes mais pesados representados pelas densidades 15,7 ° API e 15,3 °API possuem a maior proporção desses produtos, quando comparados com os outros cortes avaliados, em geral, devido às altas relações H/C.

A seguir será feita uma análise mais detalhada dos produtos, para cada um dos cortes avaliados, levando em consideração as frações obtidas na anterior tabela junto com as análises apresentadas no item 3. 2.2 e as análises de saída para cada uma das correntes no Aspen HYSYS.

• Resultados do corte 673,15-831,15 K

Conforme pode-se observar na Tabela 19, os altos valores obtidos de nafta, seguidos de altos valores nas correntes de LCO e coque, são característicos de alimentações compostas de saturados, com um alto caráter parafínico. O nitrogênio e o enxofre da alimentação estão distribuídos majoritariamente nos cortes mais pesados, como podem ser vistos na Tabela 20. Os valores elevados de coque são produtos das grandes quantidades de aromáticos, resinas e asfaltenos. A nafta apresenta o maior valor de fluxo mássico, porém, apresenta valores elevados de aromáticos.

Drodutos	Fluxo Mássico	Rendimento (%
rioutios	(ton/d)	<b>p/p</b> )
H2S	19,3	0,25
Gás Combustível	211,0	2,77
Propano	101,9	1,33
Propeno	254,3	3,34
n-Butano	94,7	1,24
i-Butano	193,3	2,53
Butenos	331,5	4,35
Nafta C5- 430 °F	3295,7	43,29
LCO 430-650°F	1072,9	14,09
650 °F+	935,5	12,28
coque	1102,1	14,47
Rendimento	73,	61%

Tabela 19: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor

para o corte 673,15-831,15 K.

6	a
υ	/

Propriedades	CE 265 °E	265 420 °E	120 <i>(5</i> 0°F	(50 °F)
dos produtos	C3-205 F	205-430 F	430-030 F	050 °F+
°API	64,1	41,3	30,8	4,2
Gravidade	0.72	0.81	0.8	1.04
específica	0,72	0,01	0,8	1,04
Enxofre (%)	0,08	0,07	0,5	0,8
RON	90,2	89,6	-	-
MON	83,4	80,9	-	-
( <b>R+M</b> )/2	86,8	85,2	-	-
Parafinas	55 7	22.5	27.4	10.4
(%)	55,7	55,5	27,4	17,4
Olefinas (%)	35,5	1,6	0	0
Naftênos (%)	7,4	3,7	27,7	22,3
Aromáticos (%)	1,4	61,1	44,7	58,2
Could Point (°C)	-	-	2,5	-
Carbono	0,01	0,02	0,1	0,38
Nitrogênio Básico	4,48	12,6	126,9	193,9

Tabela 20. Propriedades dos produtos para o corte 673,15-831,15 K do destilador molecular.

• Resultados do corte 673,15-857,15 K

Duadutas	Fluxo Mássico	Rendimento (%		
Produtos	(ton/d)	<b>p/p</b> )		
H2S	20,22	0,26		
Gás Combustível	208,9	2,72		
Propano	100,8	1,31		
Propeno	254,3	3,32		
n-Butano	95,3	1,24		
i-Butano	193,5	2,52		
Butenos	332,7	4,34		
Nafta C5- 430 °F	3346,5	43,69		
LCO 430-650°F	1013,9	13,23		
650 °F+	908,6	11,86		
Coque	1183,7	15,45		
Rendimento	74,89%			

Tabela 21: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor

para o corte	673,15-857,15 K.

Propriedades	C5-265 °F	265- 430 °F	/30_650°F	650
dos produtos	C3-205 F	205- 450 T	430-030 F	° <b>F</b> +
°API	63,89	41,05	30,20	3,47
Gravidade específica	0,72	0,82	0,87	1,04
Enxofre (%)	0,08	0,08	0,54	0,92
RON	90,20	89,82	-	
MON	83,54	81,10	-	
(R+M)/2	86,87	85,46	-	
Parafinas (%)	57,03	32,14	26,33	18,64
Olefinas (%)	34,50	1,34	0	0
Naftênos (%)	7,06	3,97	26,70	21,62
Aromáticos (%)	1,4	62,53	46,96	59,72
Could Point (°C)	-	-	1,68	-
Carbono	0,01	0,02	0,11	0,39
Nitrogênio Básico	4,76	13,51	145,41	216,13

Tabela 22: Propriedades dos produtos para o corte 673,15-857,15 K do destilador molecular.

Nas Tabelas 21 e 22, podem ser vistos como os resultados obtidos da avaliação do segundo corte do processo de destilação molecular apresentam valores de rendimento maiores, quando comparado com os resultados do corte 673,15-831,15 K. Isto se deve principalmente, à produção de maiores valores de coque, já que o corte 673,15-857,15 K

apresenta valores maiores de densidade. Os valores de nafta também são maiores como resultado das elevadas relações de H/C. Os aromáticos da alimentação estão presentes ,principalmente, nas naftas. O enxofre e o nitrogênio se encontram ,majoritariamente, nas correntes de LCO e fundos.

#### • Resultados 673,15-895,15 K

Duodutos	Fluxo Mássico	Rendimento (%	
Produtos	(ton/d)	<b>p/p</b> )	
H2S	20,83	0,27	
Gás Combustível	201,64	2,62	
Propano	96,86	1,26	
Propeno	247,43	3,22	
n-Butano	93,50	1,21	
i-Butano	188,64	2,45	
Butenos	325,13	4,23	
Nafta C5- 430 °F	3310,73	43,13	
LCO 430-650°F	955,59	12,45	
650 °F+	916,72	11,94	
coque	1317,47	17,16	
Rendimento	75,60%		

Tabela 23: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor para o corte 673,15- 895,15 K.

Os valores de nafta, para os produtos do terceiro corte avaliado, são menores quando comparados com os casos anteriores, devido aos baixos valores de saturados e os elevados valores de resinas, aromáticos e asfaltenos que aumentam a produção de coque e diminuem a reatividade do catalisador. A tendência é aumentar a produção de coque, na medida em que se aumenta a temperatura dos cortes do destilador molecular, como podem ser vistos na Tabela 23, já que existe um maior acúmulo de precursores desse composto, com o aumento na temperatura.

Propriedades	C5-265 °F	265- 430 °F	430-650°F	650 °F+	
dos produtos					
°API	63,86	41,01	30,18	3,41	
Gravidade	0,72	0,82	0,87	1,04	
específica				,	
Enxofre (%)	0,08	0,08	0,57	0,981	
RON	90,10	89,87	-	-	
MON	83,64	81,18	-	-	
(R+M)/2	86,87	85,52	-	-	
Parafinas	58.65	32.36	26.45	18.86	
(%)	50,05	52,50	20,15	10,00	
Olefinas (%)	33,39	1,07	0	0	
Naftênos (%)	6,79	4,01	26,89	21,71	
Aromáticos	1.16	62,54	46,65	59.41	
(%)	, -	- ,-	- ,	,	
Could Point	_	_	1.65	_	
(°C)			1,00		
Carbono	0,01	0,02	0,12	0,39	
Nitrogênio	5,38	15,28	172,59	239,63	
Básico	,	, 	,	, 	

Tabela 24: Propriedades dos produtos para o corte 673,15-895,15 K do destilador molecular.

### • Corte 673,15- 932,15 K

Tabela 25: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor

Duodutos	Fluxo Mássico	Rendimento	
Produtos	(ton/d)	(% p/p)	
H2S	21,25	0,27	
Gás Combustível	197,25	2,56	
Propano	94,36	1,22	
Propeno	242,87	3,15	
n-Butano	92,18	1,19	
i-Butano	185,33	2,40	
Butenos	319,92	4,16	
Nafta C5- 430 °F	3281,26	42,66	
LCO 430-650°F	914,92	11,89	
650 °F+	924,60	12,02	
Coque	1416,23	18,41	
Rendimento	76,07%		

para o corte 673,15-932,15 K.

Para o caso do corte 673,15- 932,15 K, pode-se observar como os valores de nafta e GLP diminuem devido à perda de reatividade do catalisador. Neste caso, isso ocorre não só devido à ação do coque, mas também devido ao aumento de metais como nitrogênio e enxofre, que contribuem com o envenenamento do catalisador, aumentando a produção de compostos contaminantes como H<sub>2</sub>S e NOx no regenerador. Os resultados dessas análises podem ser vistos nas Tabelas 25 e 26. Os maiores rendimentos são devido aos elevados valores de coque, que é um dos produtos de craqueamento.

Propriedades	<i>C5 365</i> °F	265 120 °E	<i>130 65</i> 0°F	650 °E 1	
dos produtos	C3-205 F	205-450 F	430-030 F	050 <sup>-</sup> F+	
°API	63,85	40,99	30,20	3,41	
Gravidade específica	0,72	0,82	0,87	1,04	
Enxofre (%)	0,08	0,08	0,59	1,02	
RON	90,02	89,89	-	-	
MON	83,72	81,23	-	-	
(R+M)/2	86,87	85,56	-	-	
Parafinas (%)	59,84	32,61	26,61	19,07	
Olefinas (%)	32,58	0,87	0	0	
Naftênos (%)	6,60	4,04	27,10	21,83	
Aromáticos (%)	0,97	62,46	46,27	59,08	
Could Point (°C)	-	-	1,68	-	
Carbono	0,01	0,02	0,12	0,40	
Nitrogênio Básico	5,99	16,98	198,69	261,8	

Tabela 26: Propriedades dos produtos para o corte 673,15- 932,15 K do destilador molecular.

#### • Corte 673,15- 974,15 K

Os produtos do corte com o maior valor de temperatura de destilação molecular confirmam a tendência dos produtos de craqueamento: há diminuição na produção de cortes intermediários, como gasolina e GLP, bem como o aumento dos cortes pesados, como óleo leve de reciclo (LCO) e de óleo clarificado (OC). Os valores de gases de combustão e de nafta apresentam os valores mais baixos para todos os casos estudados e o rendimento é o mais alto dos cinco casos testados, como conseqüência dos altos valores de coque.

Dradutas	Fluxo Mássico	Rendimento (%	
Froutios	(ton/d)	<b>p/p</b> )	
H2S	21,97	0,28	
Gás Combustível	191,21	2,47	
Propano	90,92	1,17	
Propeno	235,14	3,04	
n-Butano	89,49	1,16	
i-Butano	179,54	2,32	
Butenos	310,23	4,02	
Nafta C5- 430 °F	3196,35	41,45	
LCO 430-650°F	892,70	11,57	
650 °F+	964,19	12,50	
Coque	1539,38	19,96	
Rendimento	75,91%		

Tabela 27: Fluxos e rendimentos dos produtos do conversor

para o corte 6/3,1	5-9	9/4,1	5.	Κ.
--------------------	-----	-------	----	----

Propriedades	C5-265 °F	265- 430 °F	430-650°F	650 °F+	
dos produtos					
°API	63,93	41,11	30,48	3,68	
Gravidade	0.72	0.81	0.87	1 04	
específica	0,72	0,01	0,07	1,01	
Enxofre (%)	0,09	0,09	0,63	1,08	
RON	89,96	89,85	-	-	
MON	83,74	81,19	-	-	
(R+M)/2	86,85	85,52	-	-	
Parafinas	60.17	33 33	27.15	19 53	
(%)	00,17	55,55	27,13	17,55	
Olefinas (%)	32,40	0,83	0	0	
Naftênos (%)	6,58	3,97	27,69	22,21	
Aromáticos	0.83	61.84	45 14	58 25	
(%)	0,00	01,01	10,11	50,25	
<b>Could Point</b>	-	_	2.01	_	
(°C)			2,01		
Carbono	0,01	0,02	0,12	0,39	
Nitrogênio	6.91	19.45	228.1	281.3	
Básico	0,71	19,10	220,1	201,0	

Tabela 28: Propriedades dos produtos para o corte 673,15- 974,15 K do destilador molecular.

Para determinar o rendimento acumulado dos cortes obtidos por destilação molecular do resíduo atmosférico do petróleo ARJES, no que diz respeito aos rendimentos gerais do petróleo inicialmente, é considerado o último rendimento do petróleo definido na curva PEV até a temperatura de 400°C. No caso do petróleo em estudo, esse valor corresponde a 29,30 % em massa acumulada. Em seguida, são adicionados os valores de rendimento, em massa parcial para cada um dos cortes, os quais são calculados a partir dos rendimentos de destilado no destilador molecular.
Os valores de rendimento para cada uma das temperaturas de operação do destilador molecular são apresentados na Tabela 29.

Temperatura do destilador molecular (°C)	Temperatura atmosférica equivalente (°C) ASTM 1160	% Rendimento do destilado	% Resíduo
210	576,28	32,70	67,30
230	602,32	38,10	61,90
260	640,38	46,14	53,86
290	677,30	52,47	47,53
325	719,00	58,89	41,11

Tabela 29: Rendimentos de destilado e resíduo obtidos no destilador molecular de filme descendente (Zuniga, 2009).

Na anterior tabela, as temperaturas do destilador molecular são determinadas a uma pressão de vácuo de 0,1 Pa e as temperaturas atmosféricas equivalentes são as temperaturas do destilador molecular corrigidas à pressão atmosférica através da norma ASTM 1160.

Para calcular o rendimento em massa parcial, toma-se como referência o rendimento que ainda falta por recuperar do petróleo, já que para o caso do petróleo de estudo, esse rendimento é de 70,70%, que é o máximo rendimento que se poderia recuperar na destilação molecular do resíduo atmosférico do petróleo ARJES. A Equação 21 é usada para determinar os rendimentos parciais do destilador molecular:

% Rendimento  $Parcial = \frac{\% Massa recuperadana DM * Maximo Rendimento Esperado}{100}$  Eq. 21

O máximo rendimento esperado é 70,70% e a massa recuperada são os rendimentos de destilado para as diferentes temperaturas do destilador molecular apresentados na Tabela 29. Para obter os rendimentos, em porcentagem de massa acumulada, até a temperatura atmosférica equivalente do destilador molecular são adicionados: o rendimento parcial da unidade de destilação atmosférica e, o rendimento, em massa parcial do destilador molecular. Estes valores constam na Tabela 30.

TAE (°C)	<b>Rendimento parcial</b>	Rendimento acumulado
ASTM 1160	(%)	(%)
576,28	23,12	52,42
602,32	26,94	56,24
640,38	32,62	61,92
677,30	40,16	69,42
719.00	41.64	70.94

Tabela 30: Rendimentos em porcentagem mássica parcial e acumulado dos cortes obtidos no destilador molecular de filme descendente.

Os rendimentos acumulados apresentados na Tabela 30 equivalem à porcentagem da alimentação que já foi resgatada na unidade de destilação atmosférica, junto com a porcentagem que já foi resgatada na destilação molecular. Para determinar o rendimento acumulado dos produtos obtidos na unidade de craqueamento, o cálculo análogo deve ser realizado para os rendimentos obtidos de cada um dos cortes da destilação molecular. Para realizar esse cálculo, os máximos rendimentos que se podem recuperar, em cada corte, devem ser determinados fazendo uso da Equação 21, determinando os rendimentos parciais e acumulados de cada corte.

Na Tabela 31 são apresentados os resultados da avaliação de cada um dos cortes na unidade de craqueamento catalítico.

Cortes da DM	Máximo rendimento a recuperar	Rendimento, em massa parcial (%)	Rendimento, em massa acumulado (%)
673,15-831,15 K	47,58	35,02	87,44
673,15-857,15 K	43,76	32,77	89,01
673,15-895,15 K	38,08	28,78	90,7
673,15-932,15 K	30,58	23,26	92,68
673,15-974,15 K	29,06	22,05	92,99

Tabela 31: Rendimentos acumulados dos produtos obtidos na unidade de FCC.

O máximo rendimento a recuperar determina-se subtraindo a porcentagem de rendimento acumulado, para cada um dos cortes até o destilador molecular, da alimentação na unidade de destilação atmosférica representada por 100%; os rendimentos parciais são determinados, como foi feito no caso do destilador molecular, e o rendimento em massa acumulado é determinado para cada corte na unidade de FCC, adicionando o rendimento parcial para cada corte com o rendimento acumulado no destilador molecular.

## **3.3 CONCLUSÕES**

O simulador de processos Aspen HYSYS é a ferramenta adequada para a simulação da unidade de craqueamento catalítico e para a avaliação dos cortes obtidos da destilação molecular do resíduo atmosférico do petróleo ARJES.

Na simulação do conversor para o processamento dos cortes obtidos por destilação molecular de um resíduo atmosférico, a configuração adotada de acordo com os conversores da categoria denominada *resid cat cracking*, apresentadas na Tabela 2, é o conversor tipo Reduced Crude Oil Conversion process (RCC) da UOP Company. Esta configuração se ajusta às características dos conversores do Aspen HYSYS caracterizado por uma configuração *side by side*, com duas etapas de regeneração. No Aspen HYSYS *Cat Craker* do Aspen HYSYS, diferentes arranjos do conversor *side by side* podem ser selecionadas: uma ou duas etapas de regeneração, com um ou dois pontos de injeção da alimentação podem ser escolhidos.

A configuração adotada tipo *side by side* da categoria *resid cat cracking* é composta por dois estágios de regeneração para resolver o sobreaquecimento da fase diluída devido à combustão de CO, sendo composto por um *riser* com uma câmara de separação superior denominada reator. As características escolhidas estão de acordo com a literatura consultada para o processamento de resíduos de petróleo e são características que podem ser ajustadas no simulador de processos (Gray, 1994; Myers, 1982).

As variáveis com maior influência na operação do conversor são: fluxo de ar para o regenerador, temperatura do segundo estágio de regeneração, temperatura de alimentação e temperatura de reação. As variáveis anteriores são de grande importância para o ajuste dos rendimentos dos produtos de craqueamento.

Os rendimentos dos produtos no conversor estiveram caracterizados por altas porcentagens de coque devido principalmente às características da alimentação composta por resíduos de petróleo com baixos valores de densidade °API, altos conteúdos de aromáticos, asfaltenos e resinas.

A validação da simulação foi feita com dados dos fluxos das correntes de saída, porém, esses poderiam ter sido mais precisos, se tivessem sido avaliados com dados da pressão e temperatura, os quais não se encontravam disponíveis para a unidade de FCC da refinaria considerada no caso em estudo.

Foi usado o planejamento de experimentos completo para realizar a validação das simulações devido à alta interação entre as variáveis e às não-linearidades do modelo de processo. A ferramenta foi muito útil na procura da combinação das variáveis de entrada do processo de craqueamento catalítico, cujos resultados se aproximassem mais aos dados reais da planta.

O desvio absoluto para as cinco variáveis de saída do processo simulado GC, GLP, GLN, OCL e OC, em relação aos valores reais da planta foi, calculado para a simulação de referência, dados apresentados na Tabela 13. O maior desvio absoluto foi a da corrente de gasolina com 12,7 %. Cabe destacar que, as particularidades do processo de craqueamento catalítico e a precisão do erro empregado justificam as variações com respeito aos dados reais da planta.

As tolerâncias usadas para a convergência da simulação estão na ordem de 1\*10-3 e o método numérico é o *default* do Hysys que é o HYSIM *Inside-Out* o que leva a obter desvios absolutos dos fluxos dos cortes do resíduo de petróleo ARJES, em relação com o fluxo total do gasóleo convencional, na ordem de 3% considerado um erro aceitável, dados apresentados na Tabela 18. O erro pode ser causado por um grande número de fatores, entre os quais, encontramos: o tipo de processo em estudo, que é de complexidade elevada, cuja modelagem está composta por um grande número de equações não-lineares, com uma forte interação entre as variáveis. A grande quantidade de unidades presentes na simulação em conjunto produz um erro acumulado maior que pode ser identificado nas correntes de saída do processo.

Na Tabela 31, pode-se observar como com o processo de craqueamento catalítico aplicado a gasóleos pesados obtidos da destilação molecular, se promove um maior aproveitamento do resíduo, além dos ganhos no rendimento já obtidos com a destilação molecular. Para o caso do petróleo em estudo, um aproveitamento de até 35%, em massa para o resíduo de petróleo ARJES foi observado.

Uma vez identificada a estrutura geral da unidade de FCC, bem como as variáveis de processo, que têm maior influência na conversão da alimentação, usando como caso de estudo o craqueamento de destilados obtidos do processo de destilação molecular, o estudo será focado no conversor da unidade. Para essa finalidade o modelo de conversor desenvolvido por Moro *et al.* (1995) apresentado na seção 2,2 e desenvolvido na linguagem de programação *FORmula TRANslation System* (FORTRAN) será aplicado no desenvolvimento da otimização em tempo real, usando a técnica dos algoritmos genéticos como metodologia de otimização.

A sensibilidade das variáveis de estado frente a variações nos limites operacionas das variáveis independentes do modelo do conversor foi determinada, mostrando que a temperatura de reação e a conversão do processo são variáveis de grande importância no processo de craqueamento de gasóleos. A partir de deste estudo foram obtidos modelos simplificados da temperatura de reação, assim como da conversão, os quais são representativos da dinâmica do modelo determinístico do processo. Estes modelos e as correspondentes superfícies de resposta foram de grande ajuda nos estudos posteriores de

otimização e controle da operação do conversor e estão de acordo com o primeiro objetivo específico almejado para o desenvolvimento desta tese de doutorado.

## CAPITULO 4. ANÁLISE DO MODELO DE FCC USANDO PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS

Neste capítulo o planejamento fatorial de experimentos e a análise por superfície de resposta foram implementados no modelo do conversor de FCC, como base para uma primeira otimização, através de simulações com todas as possíveis combinações das variáveis. O objetivo desta análise é determinar quais variáveis operacionais do processo poderiam ser usadas como variáveis manipuladas e quais os pontos do reator são mais sensíveis, objetivando a otimização e o posterior controle do processo, como também a escolha das variáveis e parâmetros sensíveis, determinantes e pertinentes ao processo de produção dos hidrocarbonetos leves.

Para estudar o efeito de qualquer fator sobre uma dada resposta, precisa-se fazê-lo variar de nível e observar o resultado que essa variação produz sobre a resposta. Para isso, precisa-se ter o fator em, pelo menos, dois níveis diferentes; o planejamento mais simples de todos é aquele em que todos os fatores são estudados em apenas dois níveis (Barros Neto, 2001).

Para k fatores, isto é, k variáveis controladas pelo experimentador, um planejamento completo de dois níveis exige a realização de  $2x2x,,x2=2^{k}$  ensaios diferentes, sendo, por isso, chamado de planejamento fatorial  $2^{k}$ . Maiores detalhes sobre a técnica de planejamento fatorial assim como da metodologia por superfície de resposta podem ser encontrados no anexo A. O *software* usado para realizar esse tipo de análise foi o STATISTICA (versão 7,0).

No planejamento de experimentos, inicialmente, deve-se identificar os fatores ou variáveis independentes (variáveis de entrada) e as respostas de interesse (variáveis de saída). Essas respostas são as variáveis que o experimentador tem condições de controlar. No modelo do conversor de FCC apresentado por Moro *et al.* (1995), as variáveis de entrada são:

- Vazão de carga para o riser (RTF);

- Temperatura da carga na entrada do riser (TFP);

- Vazões de ar para o primeiro e segundo estágios de regeneração (RAI1 e RAI2);

- Circulação de catalisador regenerado para o riser (CTCV).

A vazão total de ar está composta pela soma das vazões de alimentação para o primeiro e segundo estágios de regeneração, esta vazão é denominada RAI. As variáveis de saída ou controladas são:

- Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração (TRG1);

- Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração (TRG2);

- Conversão (SEVERI);

- Temperatura de reação (TRX);

- Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2);

- Temperatura da fase diluída geral (TDG).

## 4.1. IMPLEMENTAÇÃO DO PLANEJAMENTO FATORIAL NO MODELO DO CONVERSOR DE FCC

Na implementação do planejamento fatorial no modelo do conversor de FCC, foram estudadas as quatro variáveis de entrada (RTF, CTCV, RAI e TFP) identificadas no modelo do processo de craqueamento catalítico fluidizado. As respostas avaliadas para cada simulação do modelo foram as seis variáveis de saída ou controladas identificadas anteriormente. Simulações equivalentes a um planejamento fatorial completo 2<sup>4</sup> foram realizadas, com o objetivo de identificar das respostas do processo: TRG1, TRG2, SEVERI, TRX, TD2, TDG. Quais são as variáveis de saída mais sensíveis às variações nas variáveis de entrada, que serão estudadas com mais detalhes através da metodologia por superfície de resposta. Os níveis dos fatores apresentados na Tabela 32, são os sugeridos no trabalho de Moro (1992).

Nível/Variável	RAI (kNm <sup>3</sup> /hr)	CTCV	$\mathbf{RTF}\ (\mathbf{m}^{3}/\mathbf{d})$	TFP (°C)
Superior	231	0,92	10100	245
Inferior	201	0,42	7900	215

Tabela 32: Níveis dos fatores no planejamento fatorial  $2^4$ .

Para as combinações dos fatores do planejamento fatorial 2<sup>4</sup> são gerados 16 ensaios os quais são apresentados na Tabela 33.

Uma análise prévia do modelo do conversor foi realizada com a finalidade de observar o comportamento dinâmico das variáveis de resposta, usando as condições iniciais propostas na modelagem do conversor, através da qual foi conferido como o modelo atinge a estabilidade das variáveis de saída com o decorrer do tempo. O tempo total de corrida foi de 1800s, sendo necessário um tempo aproximado de 500s para que todas as respostas atingissem o estado estacionário.

O comportamento de algumas variáveis, como: vazão de catalisador regenerado, vazão de alimentação e temperatura da alimentação foi observado, sendo essas variáveis de grande importância na operação do conversor. Para uma redução na vazão de catalisador regenerado e no fluxo da alimentação, a temperatura das reações de conversão é diminuída e, por conseguinte, a severidade das reações.

Ao diminuir a vazão de catalisador regenerado e aumentar as vazões de ar para regeneração, aumenta-se a quantidade do mesmo na primeira e segunda etapa de regeneração, aumentando as temperaturas dos mesmos nas fases densas e diluídas. Os valores do inventário de catalisador no reator, do diferencial de pressão entre o reator/ regenerador e a pressão de sucção no compressor são ajustadas pelos três controladores PI presentes no modelo do conversor de craqueamento catalítico.

Ensoio	Planejamento fatorial: 2 <sup>4</sup>				
	RAI	CTCV	RTF	TFP	
1	201	0,42	7900	215	
2	231	0,42	7900	215	
3	201	0,92	7900	215	
4	231	0,92	7900	215	
5	201	0,42	10100	215	
6	231	0,42	10100	215	
7	201	0,92	10100	215	
8	231	0,92	10100	215	
9	201	0,42	7900	245	
10	231	0,42	7900	245	
11	201	0,92	7900	245	
12	231	0,92	7900	245	
13	201	0,42	10100	245	
14	231	0,42	10100	245	
15	201	0,92	10100	245	
16	231	0,92	10100	245	

Tabela 33: Planejamento fatorial 2<sup>4</sup>.

Na Tabela 34 são apresentados os resultados para os 16 ensaios apresentados na tabela anterior.

Analise	TRG1	TRG2	SEVERI	TRX	HRA	DPR	PCIRC	TD2	TDG
1	677,0	684,2	60,3	483,4	90	0,65	1	726,8	1153,3
2	676,7	677,7	59,8	481,3	90	0,66	1	686,8	1153,3
3	679,4	707,8	85,7	572,3	90	0,65	1	703,4	691,1
4	716,7	743,9	88,3	596,2	90	0,65	1	1018,6	802,7
5	642,3	667,9	50,5	463,5	90	0,68	1	715,3	696,3
6	656,2	669,4	51,7	466,4	90	0,69	1	701,1	761,9
7	628,0	656,7	72,9	517,5	90	0,65	0,9	648,6	633,2
8	664,6	695,3	77,3	539,5	90	0,65	1	693,9	681,7
9	693,1	696,9	64,3	498,3	90	0,65	1	746,6	1209,8
10	687,9	686,3	62,2	491,5	90	0,65	1	693,3	1223,2
11	694,3	722,6	87,5	588,4	90	0,65	1	723,0	711,4
12	731,5	756,9	89,7	611,7	90	0,65	1	1194,4	838,6
13	655,9	670,1	48,8	462,8	90	0,65	1	709,2	1029,7
14	664,4	670,6	50,8	467,5	90	0,67	1	687,2	1100,6
15	644,0	672,6	76,4	534,5	90	0,65	1	664,6	649,7
16	679,5	710,1	80,1	555,6	90	0,65	1	713,4	702,3

Tabela 34: Respostas dos ensaios do primeiro planejamento fatorial  $2^4$ .

De acordo com os resultados apresentados, os valores das temperaturas do regenerador se encontram na faixa de 660-730°C. Devido às limitações do material, valores superiores podem ocasionar danos mecânicos na unidade.

A temperatura do *riser* se encontra na faixa de 500-550°C, valores superiores podem produzir altas conversões, com alta produção de gás combustível e GLP, para o caso da conversão, este valor deve ser o maior valor possível atingido, dentro da faixa

apropriada de operação para as restantes variáveis. Os valores das temperaturas das fases diluída do regenerador e da temperatura de reação no *riser* apresentaram valores fora da faixa de operação adequada, e valores baixos de conversão para alguns dos ensaios.

De acordo com as respostas apresentadas na Tabela 34 e, devido algumas das variáveis apresentarem uma maior sensibilidade frente às variações nos fatores. As superfícies de resposta e os modelos estatísticos simplificados serão adquiridos para as variáveis de resposta TD2, TDG, TRX e SEVERI. Na Tabela 35, são apresentados os resultados dos efeitos junto com as interações de terceira ordem dos fatores para a variável temperatura de reação (TRX) considerando que os fatores em negrito são os estatisticamente significativos.

Para estabelecer quais são os fatores e as combinações que são estatisticamente significativas, toma-se como referência o valor do teste "p", que mede o erro experimental para um nível de confiança de 95%.

Na Figura 14, é apresentado o gráfico de pareto para a variável de resposta TRX, este serve como meio de comparação dos efeitos dos fatores para uma determinada variável de resposta, as variáveis que têm um maior efeito na temperatura de reação são CTCV e RTF. De acordo com a Tabela 35, quando a abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV) varia do nível de -1 a +1, a temperatura de reação aumenta em 87,6%. Já no caso da vazão de alimentação (RTF), quando esta variável passa do nível -1 a +1 a temperatura da reação diminui 39,4%.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Media*	520,6	0,42	1225,059	0,000520
	(1) <b>RAI*</b>	11,1	0,85	13,088	0,048546
	(2) CTCV*	87,6	0,85	103,088	0,006175
	(3) <b>RTF</b> *	-39,5	0,85	-46,441	0,013706
	(4) TFP*	11,3	0,85	13,265	0,047903
	1 by 2*	11,4	0,85	13,471	0,047173
	1 by 3	1,5	0,85	1,824	0,319331
TRX	1 by 4	-0,5	0,85	-0,647	0,634386
	2 by 3*	-15,9	0,85	-18,706	0,034001
	2 by 4	4,9	0,85	5,765	0,109346
	3 by 4	-2,9	0,85	-3,412	0,181512
	1*2*3	-2,6	0,85	-3,029	0,202977
	1*2*4	0,175	0,85	0,206	0,870737
	1*3*4	0,77	0,85	0,912	0,529362
	2*3*4	3,27	0,85	3,853	0,161663
	2*3*4	3,27	0,85	3,853	0,161663

Tabela 35: Efeitos dos fatores para a variável de estudo TRX.

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%.

a Valor do coeficiente de regressão para o erro.

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.



Estimativa Estandarizada dos Efeitos (Valor Absoluto)

Figura 14: Gráfico de pareto para a variável de resposta TRX

Objetivando-se ter um melhor conhecimento das interações entre os fatores com a temperatura de reação (TRX), modelos simplificados foram gerados. Para isso, inicialmente, foi determinado o grau de ajuste a um modelo linear através da tabela ANOVA dados apresetados na Tabela 36.

Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdade	MQ
Regressão	39697,33	14	2835,52
Resíduos	2,89	1	2,89
Falta de ajuste	-	-	-
Erro puro	2,89	1	2,89
Total	39700, 22	15	
% De Variaçã	ăo explicada		0,99
% Máximo de va	riação explicada		0,99
	Α	NOVA	TABELADO
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	Ç	981,15	245,27

Tabela 36: Tabela ANOVA para a variável TRX.

De acordo com os resultados apresentados na Tabela 36, a interação entre os fatores e a variável de resposta TRX se ajustam a um modelo linear devido à média quadrática  $MQ_R/MQ_r$  calculada pela tabela ANOVA ser maior que a média quadrática tabelada, estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p para o nível de confiança desejado.

Na Tabela 37, são apresentados os coeficientes de regressão do modelo linear para a variável TRX, considerando um nível de confiança de 95%.

Fator	Coeficiente de regressão	Erro	t(1)	Р
Media*	520,650	0,425	1225,059	0,001
(1) <b>RAI</b> *	5,563	0,425	13,088	0,049
(2) CTCV*	43,813	0,425	103,088	0,006
(3) <b>RTF</b> *	-19,738	0,425	-46,441	0,014
(4) TFP*	5,638	0,425	13,265	0,048
1 by 2*	5,725	0,425	13,471	0,047
1 by 3	0,775	0,425	1,824	0,319
1 by 4	-0,275	0,425	-0,647	0,634
2 by 3*	-7,950	0,425	-18,706	0,034
2 by 4	2,450	0,425	5,765	0,109
3 by 4	-1,450	0,425	-3,412	0,182
1*2*3	-1,288	0,425	-3,029	0,203
1*2*4	0,087	0,425	0,206	0,871
1*3*4	0,387	0,425	0,912	0,529
2*3*4	1,637	0,425	3,853	0,162

Tabela 37: Coeficientes de regressão do modelo estatístico pra a variável de resposta TRX.

Considerando os resultados obtidos nas Tabelas 36 e 37, apresenta-se a Equação 22. Esta pode ser usada na estimativa da temperatura de reação (TRX) a partir dos valores codificados dos fatores. O coeficiente de regressão da equação é R  $^2$ =0,99.

$$TRX = 520,65 + 5,5625 * RAI + 43,8125 * CTCV - 19,7375 * RTF + 5,6375 * TFP + 5,7250 * RAI * CTCV - 7,95 * CTCV * RTF$$
Eq. 22

A boa capacidade de predição da Equação 22 é representada na Figura 15, cujos valores preditos no eixo das ordenadas conferem com os valores observados estimados através do modelo determinístico, no eixo das abscissas.



Figura 15: Valores observados versus valores preditos para TRX.

Considerando que o objetivo geral do planejamento de experimento para o caso da variável em estudo é estabelecer as relações entre os diferentes fatores com TRX, conhecendo-se que as variáveis com um maior efeito sob a variável analisada são CTCV, RTF e TFP, segundo o diagrama de pareto apresentado na Figura 14; a superfície de resposta é apresentada na Figura 16, que mostra graficamente o efeito da interação dos dois fatores com maior efeito sobre a temperatura de reação.

Segundo a superfície de resposta para TRX valores baixos dessa variável são atingidos a partir de baixos valores de CTCV e altos valores de RTF.



Figura 16: Superfície de resposta para TRX.

Devido à vazão de carga a ser processada, ser sempre um objeto de acerto, em comum acordo entre a programação de produção e a gerência responsável pela unidade. Este é um fator que, de forma geral é determinado e que a operação não tem ingerência direta (Abadie, 1997). Diante disso, a vazão da carga (RTF) vai ser substituída pela seguinte variável de entrada significativa no diagrama de pareto apresentada na Figura 14, que é a temperatura da vazão de alimentação (TFP). Na Figura 17 é apresentada a superfície de resposta que relaciona TRX com CTCV e TFP.



Figura 17: Superfície de resposta para TRX.

De acordo com a Figura 17, valores baixos de TRX são atingidos ao diminuir a abertura de catalisador regenerado e a temperatura da alimentação.

Os resultados para a variável temperatura da fase diluída geral (TDG) que é a segunda variável de resposta que apresentou uma maior sensibilidade frente às variações nos fatores. Na Tabela 38, são apresentados os efeitos dos fatores e suas interações de terceira ordem. Os fatores em negrito são aqueles estatisticamente significativos.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Média*	877,425	0,2	4387,125	0,000145
	(1)RAI*	61,250	0,4	153,125	0,004157
	(2) CTCV*	-327,200	0,4	-818,000	0,000778
	(3) RTF*	-190,975	0,4	-477,438	0,001333
	(4) TFP*	111,475	0,4	278,688	0,002284
	1 by 2*	23,750	0,4	59,375	0,010721
	1 by 3	-1,825	0,4	-4,563	0,137361
TDG	1 by 4	4,775	0,4	11,938	0,053205
	2 by 3*	96,775	0,4	241,938	0,002631
	2 by 4*	-88,125	0,4	-220,313	0,002890
	3 by 4*	65,800	0,4	164,500	0,003870
	1*2*3*	-32,625	0,4	-81,563	0,007805
	1*2*4*	0,125	0,4	0,313	0,807178
	1*3*4*	-2,450	0,4	-6,125	0,103029
	2*3*4*	-70,600	0,4	-176,500	0,003607

Tabela 38: Efeito dos fatores sob a variável de estudo TDG.

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%.

a Valor do coeficiente de regressão para o erro.

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

Na Figura 18, apresenta-se o diagrama de pareto para a fase diluída geral (TDG). O efeito dos fatores, em ordem decrescente, sob a variável TDG é: CTCV, RTF, TFP e RAI, respectivamente, quando CTCV passa do nível -1 para o nível +1 diminui a resposta em -

327,2 %, seguido de RTF que diminui em -190,9%, TFP aumenta TDG em 111,5% e, finalmente, RAI aumenta TDG em 61,2%.



Figura 18: Gráfico de pareto para a variável de resposta TDG.

Como foi feito para TRX, o modelo simplificado vai ser determinado para TDG, com o objetivo de facilitar a análise dos fatores dessa variável. A Tabela 39 apresenta os dados da Tabela ANOVA.

Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdade	MQ
Regressão	751262, 19	14	53661, 58
Resíduos	0,64	1	0, 64
Falta de ajuste	-	-	-
Erro puro	0,64	1	0,640
Total	751262, 83	15	
% De Vari	ação explicável		1,0
% Máximo de	variação explicável		1,0
	ANOVA	A	TABELADO
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	83846,2	3	245,27

Tabela 39: Tabela ANOVA para a variável TDG.

Segundo os resultados apresentados na Tabela 39, a interação entre os fatores e a variável de resposta TDG se ajusta a um modelo linear, pois a média quadrática  $MQ_R/MQ_r$  calculada, por meio da tabela ANOVA, é maior que a média quadrática tabelada, estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p, no nível de confiança desejado.

Na Tabela 40, observam-se os coeficientes do modelo linear para a variável TDG, com um nível de confiança de 95%.

Fator	Coeficiente de regressão	Erro	t(1)	р
Média*	877,425	0,200	4387,125	0,000
(1) <b>RAI</b> *	30,625	0,200	153,125	0,004
(2) CTCV*	-163,600	0,200	-818,000	0,001
(3) <b>RTF</b> *	-95,488	0,200	-477,438	0,001
(4) <b>TFP*</b>	55,738	0,200	278,688	0,002
1 by 2*	11,875	0,200	59,375	0,011
1 by 3	-0,913	0,200	-4,563	0,137
1 by 4	2,387	0,200	11,938	0,053
2 by 3*	48,388	0,200	241,938	0,003
2 by 4*	-44,063	0,200	-220,313	0,003
3 by 4*	32,900	0,200	164,500	0,004
1*2*3*	-16,313	0,200	-81,563	0,008
1*2*4*	0,063	0,200	0,313	0,807
1*3*4*	-1,225	0,200	-6,125	0,103
2*3*4*	-35,300	0,200	-176,500	0,004

Tabela 40: Coeficientes de regressão do modelo estatístico pra a variável de resposta TDG.

A Equação 23 pode ser usada na estimativa da temperatura da fase diluída geral, a partir dos valores codificados dos fatores. O coeficiente de regressão da equação é R $^2$ =0,99.

$$TDG = 877, 425 + 30, 625 * RAI - 163, 6 * CTCV - 95, 487 * RTF + 55, 738 * TFP + 11, 875 * RAI * CTCV$$

$$+48, 387 * CTCV * RTF - 44, 062 * CTCV * TFP + 32, 9 * RTF * TFP - 16, 312 * RAI * CTCV * RTF$$

$$-35, 3 * CTCV * RTF * TFP$$

$$Eq. 23$$

A capacidade de predição da Equação 23 é apresentada na Figura 19, onde os valores preditos no eixo das ordenadas conferem com os valores observados estimados através do modelo determinístico no eixo das abscissas.



Figura 19: Valores observados versus valores preditos para TDG.

Assim como, foi feito no caso da temperatura de reação TRX e, com o objetivo de estabelecer a relação entre os diferentes fatores com TDG, conhecendo-se que as variáveis com um maior efeito sobre essa variável são CTCV e TFP, segundo o diagrama de pareto na Figura 18, vai se ilustrar a superfície de resposta apresentada na Figura 20.



Figura 20: Valores observados versus valores preditos para TDG.

De acordo com a superfície de resposta para TDG apresentada na Figura 20, para baixos valores de CTCV são obtidos altos valores de TDG. Já baixos valores de TFP produzem baixos valores de TDG.

A próxima variável a ser estudada é a temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2). A metodologia usada é a mesma aplicada na análise das variáveis TRX e TDG. Inicialmente, apresenta-se a tabela com os efeitos, bem como o diagrama de pareto para identificar a tendência que essa variável segue, de acordo com os fatores analisados. Na Tabela 41, são apresentados os efeitos dos fatores para o planejamento fatorial  $2^4$ .

Variavél	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Média*	751,64	9,89	76,02	0,01
	(1)RAI*	93,90	19,78	4,75	0,13
	(2) CTCV*	86,70	19,78	4,38	0,14
	(3) RTF*	-119,95	19,78	-6,07	0,10
	(4) TFP*	29,65	19,78	1,50	0,37
	1 by 2*	126,28	19,78	6,39	0,10
	1 by 3	-79,43	19,78	-4,02	0,16
TD2	1 by 4	17,33	19,78	0,88	0,54
	2 by 3*	-109,78	19,78	-5,55	0,11
	2 by 4*	28,08	19,78	1,42	0,39
	3 by 4*	-25,78	19,78	-1,30	0,42
	1*2*3*	-93,70	19,78	-4,74	0,13
	1*2*4*	22,60	19,78	1,14	0,46
	1*3*4*	-18,40	19,78	-0,93	0,52
	2*3*4*	-14,20	19,78	-0,72	0,60

Tabela 41: Efeito dos fatores sob a variável de estudo TD2.

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%.

a Valor do coeficiente de regressão para o erro.

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

Na tabela anterior pode ser observado que para um nível de confiança 95%, nenhum dos fatores é estatisticamente significativo para a variável de estudo TD2. Na Figura 21, observa-se que, além de todos os fatores não ser significativos para o nível de confiança estabelecido, o efeito deles sob a variável de resposta TD2 é muito baixo quando comparado com os resultados obtidos nas Figuras 14 e 18 para as variáveis TRX e TDG, respectivamente.



Estimativa Estandarizada dos Efeitos (Valor Absoluto)

Figura 21: Gráfico de pareto para a variável de resposta TD2.

Na Tabela 42, apresenta-se a análise de variância (ANOVA) do planejamento fatorial completo para TD2 com o objetivo de compreender melhor as interações entre os fatores e se sua relação com TD2 se ajusta a um modelo linear.

Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdade	MQ
Regressão	309955,37	14	22139,67
Resíduos	1564,20	1	1564,20
Falta de ajuste	-	-	-
Erro puro	1564,20	1	1564,20
Total	311519,57	15	
% De Variaç	ão explicada	(	),99
% Máximo de variação explicada		(	),99
	ANO	VA	TABELADO
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	14,	15	245,27

Tabela 42: Tabela ANOVA para a variável TD2.

Nesta tabela pode-se observar que, o valor do fator calculado é menor que o valor do fator tabelado, o que leva a concluir que o modelo não se ajusta a um modelo linear. Em seguida será testado um modelo quadrático obtido por meio de um planejamento estrela  $2^4$ .

Na Tabela 43 é apresentado o planejamento estrela da variável TD2, onde os limites dos fatores são apresentados na Tabela 32. Já na Tabela 44 são apresentadas as respostas da avaliação do planejamento no simulador do conversor.

Ensaio		Planejamen	to estrela: 2 <sup>4</sup>	
-	RAI	CTCV	RTF <sup>*</sup>	TFP
1	201	0,42	7900	215
2	201	0,42	7900	245
3	201	0,42	10100	215
4	201	0,42	10100	245
5	201	0,92	7900	215
6	201	0,92	7900	245
7	201	0,92	10100	215
8	201	0,92	10100	245
9	231	0,42	7900	215
10	231	0,42	7900	245
11	231	0,42	10100	215
12	231	0,42	10100	245
13	231	0,92	7900	215
14	231	0,92	7900	245
15	231	0,92	10100	215
16	231	0,92	10100	245
17	186	0,67	9000	230
18	246	0,67	9000	230
19	216	0,17	9000	230
20	216	1,17	9000	230
21	216	0,67	6800	230
22	216	0,67	11200	230
23	216	0,67	9000	200
24	216	0,67	9000	260
25	216	0,67	9000	230
26	216	0,67	9000	230

Tabela 43: Planejamento estrela para TD2.

Análise	TRG1	TRG2	SEVERI	TRX	HRA	DPR	PCIRC	TD2	TDG
1	659,3	672,6	53,5	467,6	90	0,651	1	715,1	1050,7
2	693,1	696,9	64,3	498,3	90	0,65	1	746,6	1209,8
3	642,3	667,9	50,5	463,5	90	0,68	1	715,3	696,3
4	655,9	670,1	48,8	462,8	90	0,65	1	709,2	1029,7
5	679,4	707,8	85,7	572,3	90	0,65	1	703,4	691,1
6	694,3	722,6	87,5	588,4	90	0,65	1	723,0	711,4
7	628	656,7	72,9	517,6	90	0,65	0,9	649,0	633,2
8	644,2	672,8	76,4	534,7	90	0,65	1	664,7	649,7
9	676,7	677,7	59,8	481,3	90	0,65	1	686,8	1188,4
10	687,9	686,3	62,2	491,5	90	0,65	1	693,3	1223,2
11	656,2	669,4	51,7	466,4	90	0,69	1	701,1	761,9
12	664,4	670,6	50,8	467,5	90	0,67	1	687,1	1100,7
13	716,7	743,9	88,4	596,2	90	0,65	1	1018,6	802,7
14	731,5	756,9	89,7	611,7	90	0,65	1	1194,4	838,6
15	664,6	695,3	77,3	539,5	90	0,65	1	693,9	681,7
16	679,5	710,1	80	555,6	90	0,65	1	713,4	702,3
17	654,1	685,3	73,5	523,9	90	0,65	1	681,1	671,4
18	712,6	729,6	77,4	544,9	90	0,65	1	1185,5	980,3
19	626,6	629,3	33,8	421,4	106,8	0,92	1	627,9	660,3
20	675	703,9	83,8	566,3	90	0,65	1	699,1	684,7
21	736,9	750,7	87,8	591,8	90	0,65	1	1208,2	1019
22	645,1	677,7	62,4	496,5	90	0,65	1	682,5	673,7
23	669,8	700,6	73	522,2	90	0,65	1	761,9	734,5
24	703,9	732,1	79,3	555,9	90	0,65	1	1116,0	816,1
25	686,9	716,5	76,4	539	90	0,65	1	987,6	791,6
26	686,9	716,5	76,4	539	90	0,65	1	987,6	791,6

Tabela 44: Respostas do planejamento estrela 2<sup>4</sup> para a variável TD2.

Na Tabela 45 são apresentados os efeitos dos fatores para o planejamento estrela 2<sup>4</sup> para a variável TD2. Nessa tabela pode-se observar que o fator que exerce maior influência é o efeito quadrático da abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV). Quando esse fator passa do nível -1 para o nível +1, a temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração diminui em 100,9%. A vazão de alimentação é a segunda variável com maior efeito em TD2, quando esse fator passa do nível -1 para o nível +1, TD2 diminui em 83,3%.

Propriedade	Fator	Efeito	Erro	t	Р
	Média	987,600	97,396	10,140	1E-6
	(1)RAI (L)	73,796	28,116	2,625	0,024
	RAI (Q)	-33,466	32,969	-1,015	0,332
	(2) CTCV (L)	35,346	28,116	1,257	0,235
	CTCV (Q)	-100,916	32,969	-3,061	0,011
	(3) RTF (L)	-83,287	28,116	-2,962	0,013
TD2	RTF (Q)	-30,453	32,969	-0,924	0,375
	(4) TFP (L)	39,863	28,116	1,418	0,184
	TFP (Q)	-32,053	32,969	-0,972	0,352
	1L by 2L	62,381	34,435	1,812	0,097
	1L by 3L	-40,481	34,435	-1,176	0,265
	1L by 4L	7,944	34,435	0,231	0,822
	2L by 3L	-55,581	34,435	-1,614	0,135
	2L by 4L	13,294	34,435	0,386	0,707
	3L by 4L	-13,644	34,435	-0,396	0,700

Tabela 45: Efeitos dos fatores para o planejamento estrela sob a variável TD2.

Para estabelecer se, de fato, a relação entre os fatores e TD2 se ajusta a um modelo quadrático apresenta-se, na Tabela 46, a análise de variância ANOVA. Nessa análise, semelhante ao procedimento para o caso linear, a falta de ajuste pode estar relacionada à alta não linearidade dos fatores com a temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2).

Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdade	MQ	
Regressão	695756,7	14	49696,9	
Resíduos	208693,2	11	18972,1	
Falta de ajuste	-	-	-	
Erro puro	208693,2	11	18972,1	
Total	904449,9	25		
% De Variaç	ão explicada	0,	,77	
% Máximo de va	riação explicada	0,	.77	
	ANG	DVA	TABELADO	
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	2,	62	2,74	

Tabela 46: Tabela ANOVA para TD2 no planejamento estrela.

Finalmente, será analisada a conversão volumétrica do processo (SEVERI). Esta variável é definida como o porcentual do volume da carga que transformada em produtos mais leves que ela, esta variável é representada na Equação 24.

Conversão (SEVERI) = 
$$\frac{\text{Carga Fresca} - (\text{LCO} + \text{OCL})}{\text{Carga Fresca}} * 100(\% \text{ vol.})$$
Eq. 24

onde LCO representa o óleo leve de reciclo e OCL representa o óleo clarificado.

Na Tabela 47 os efeitos dos fatores para a variável SEVERI são apresentados, levando em conta até as interações de terceira ordem. Os fatores em negrito são aqueles estatisticamente significativos.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Média*	69,163	0,175	395,214	0,002
	(1)RAI*	1,700	0,350	4,857	0,129
	(2) CTCV*	26,175	0,350	74,786	0,009
	(3) <b>RTF</b> *	-11,175	0,350	-31,929	0,020
	(4) TFP*	1,625	0,350	4,643	0,135
	1 by 2*	1,500	0,350	4,286	0,146
	1 by 3	1,100	0,350	3,143	0,196
SEVERI	1 by 4	-0,250	0,350	-0,714	0,605
	2 by 3*	0,075	0,350	0,214	0,866
	2 by 4*	0,725	0,350	2,071	0,286
	3 by 4*	-0,725	0,350	-2,071	0,286
	1*2*3*	-0,300	0,350	-0,857	0,549
	1*2*4*	0,000	0,350	0,000	1,000
	1*3*4*	0,300	0,350	0,857	0,549
	2*3*4*	1,475	0,350	4,214	0,148

Tabela 47: Efeitos dos fatores sob a variável de estudo SEVERI.

Significância estatística para um nível de confiança de 95%.

a Valor do coeficiente de regressão para o erro.

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

O diagrama de pareto para a variável de resposta SEVERI é ilustrado na Figura 22. De acordo com essa figura, o efeito dos fatores em ordem decrescente sob a variável SEVERI é: CTCV, RTF. Quando CTCV passa do nível -1 para o nível +1, a resposta aumenta em 74,78 %, seguido de RTF que a diminui em -31,93%.



Figura 22: Gráfico de pareto para a variável de resposta SEVERI.

Na Tabela 48 são apresentados os coeficientes para o ajuste ao modelo linear da variável SEVERI, considerando um nível de confiança de 95%.

Fator	Coeficiente de regressão	Erro	t(1)	р
Média*	69,163	0,175	395,214	0,002
(1) <b>RAI</b> *	0,850	0,175	4,857	0,129
(2) CTCV*	13,088	0,175	74,786	0,009
(3) <b>RTF</b> *	-5,588	0,175	-31,929	0,020
(4) TFP*	0,812	0,175	4,643	0,135
1 by 2*	0,750	0,175	4,286	0,146
1 by 3	0,550	0,175	3,143	0,196
1 by 4	-0,125	0,175	-0,714	0,605
2 by 3*	0,037	0,175	0,214	0,866
2 by 4*	0,363	0,175	2,071	0,286
3 by 4*	-0,362	0,175	-2,071	0,286
1*2*3*	-0,150	0,175	-0,857	0,549
1*2*4*	0,000	0,175	0,000	1,000
1*3*4*	0,150	0,175	0,857	0,549
2*3*4*	0,738	0,175	4,214	0,148

Tabela 48: Coeficientes de regressão do modelo estatístico para a variável de resposta SEVERI.

A Equação 25 pode ser usada na estimativa da conversão, a partir dos valores codificados dos fatores estatisticamente significativos para um nível de confiança de 95%. O coeficiente de regressão da correlação é  $R^2$ =0,99.

*SEVERI* = 69,163+13,088\**CTCV* - 5,588\**RTF* 

Eq. 25

A capacidade de predição da Equação 25 é apresentada na Figura 23, onde os valores preditos no eixo das ordenadas conferem com os valores observados estimados através do modelo determinístico, no eixo das abscissas.



Figura 23: Valores observados versus valores preditos para SEVERI.

Os resultados da análise ANOVA são apresentados na Tabela 49, revelando a interação entre os fatores e a variável de reposta SEVERI, que se ajusta a um modelo linear devido à média quadrática  $MQ_R/MQ_r$  calculada ser maior que a média quadrática tabelada estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p, no nível de confiança desejado.
Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdade	MQ
Regressão	3289,9	14	234,9
Resíduos	0,49	1	0,49
Falta de ajuste	-	-	-
Erro puro	0,49	1	0,49
Total	3290,39	15	
% De Variação explicada		0,9	)
% Máximo de variação explicada		0,99	9
	AN	OVA	FABELADO
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	479,38		4,6

Tabela 49: Tabela ANOVA para SEVERI no planejamento fatorial.

Como o objetivo de estabelecer a relação entre os diferentes fatores com SEVERI, conhecendo-se que as variáveis com efeito significativo são CTCV e RTF, de acordo com o diagrama de pareto apresentado na Figura 22, a superfície de resposta é apresentada na Figura 24.



Figura 24: Superfície de resposta para SEVERI.

Na Figura 24 vale destacar que valores elevados de conversão são atingidos para altos valores da abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV), isto é, fluxos elevados de catalisador regenerado, bem como baixos valores do fluxo de alimentação.

Considerando as superfícies de resposta obtidas para cada uma das variáveis de estado e, considerando que o processo de craqueamento catalítico é caracterizado por um grande número de variáveis com uma forte interação, caracterizado por não- linearidades foi possível obter modelos simplificados para as variáveis SEVERI, TRX e TDG com alto grau de ajuste, já para a variável TD2 o planejamento de experimento não ajusto os fatores significativos a um modelo linear, nem a um modelo quadrático. As variáveis de estado TRG1 e TRG2 não apresentaram variações significativas para as variações dos fatores motivo pelo qual não foi realizada a analise estatística sobre essas variaveis.

#### 4.2. CONCLUSÕES

Com relação as variáveis de resposta estudadas, a temperatura de reação (TRX), a temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2), a temperatura da fase diluída geral (TDG), e a conversão (SEVERI) foram as variáveis que apresentaram maior sensibilidade frente à variações nos níveis dos fatores. Foi sobre estas variáveis que se realizou a análise estatística e a obtenção dos modelos simplificados.

Dada à importância da conversão da alimentação no processo de craqueamento catalítico, o modelo simplificado representado pela Equação 25 será usado no estudo de otimização usando a técnica dos algoritmos genéticos (AG), bem como do método de otimização por programação sequencial (SQP), visando maximizar essa variável, em tempos e cargas computacionais baixas.

A temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2), apresenta um comportamento altamente não linear, como ficou demostrado nos testes apresentados nas Tabelas 42 e 46, razão pela qual não foi possível obter um modelo simplificado que represente o comportamento dessa variável. Esse comportamento é característico da grande maioria das variáveis do modelo de processo de FCC caracterizado por uma alta interação entre as variáveis e não linearidades.

A técnica de planejamento de experimento se mostrou como uma metodologia adequada à análise das interações entre as variáveis e à obtenção de modelos simplificados para serem usados em estudos posteriores de otimização do processo.

A combinação dos fatores para assegurar uma adequada operação no reator e no regenerador de acordo com as análises feitas no STATISTICA é a seguinte: valores baixos da temperatura da alimentação podem ser combinados com altos valores da vazão de catalisador regenerado; além disso, para altos valores da vazão de alimentação, os valores de fluxo de ar devem ser baixos. Para o caso de baixos valores da vazão de alimentação, os valores de fluxo de ar podem variar entre o limite superior e inferior, sem ocasinar alterações prejudiciais na operação do conversor.

No próximo Capítulo, os modelos simplificados obtidos através dos planejamentos estatísticos são usados na maximização da conversão do processo, fazendo-se uso de

métodos estocásticos de otimização como, os algoritmos genéticos. As otimizações usando o modelo simplificado serão comparadas com as otimizações usando o modelo determinístico do processo com e, sem restrições. Além disso, serão feitas comparações com métodos determinístico de otimização como *Sequential Quadratic Programming* (SPQ), com a finalidade encontrar a melhor metodologia de otimização e a combinação de parâmetros do otimizador que maximizem a conversão do processo, dentro dos limites operacionais estabelecidos.

## CAPÍTULO 5 - DESENVOLVIMENTO E IMPLEMENTAÇÃO DA METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE FCC: APLICAÇÃO DOS ALGORITMOS GENÉTICOS (AG) E PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL (SQP)

O objetivo principal deste capítulo é a implementação dos algoritmos genéticos como metodologia de otimização acoplada ao modelo simplificado da conversão apresentado no capítulo anterior e ao modelo determinístico do processo de FCC. As etapas para execução do algoritmo genético são apresentadas em Costa *et al.* (2005) e são descritas a seguir:

- Preparação do modelo;
- Desenvolvimento e implementação da otimização;
- Escolha das funções objetivo e otimização dos parâmetros do algoritmo genético.

A ferramenta usada para realizar as otimizações foi o algoritmo desenvolvido por David L, Carrol versão 1,7, escrito na linguagem de programação Fortran, em codificação binária. Este algoritmo inicializa a amostragem aleatória de indivíduos com diferentes parâmetros para serem otimizados usando a abordagem de algoritmos genéticos, isto é, evolução através da sobrevivência do mais apto, sendo esta uma técnica de pesquisa/otimização baseada na seleção natural.

Gerações sucessivas evoluem os indivíduos baseado na sobrevivência "Darwiniana" do mais apto; o algoritmo genético é uma simulação computacional da evolução na qual o usuário proporciona ao ambiente (funções), nas quais a população deve sobreviver. Dentre os parâmetros que devem ser levados em consideração durante as otimizações estão as mutações (pmutate), o cruzamento (pcross), o elitismo (ielite), *niching* ou busca em nichos (iniche), o tamanho da população (npopsiz) e o número de gerações (maxgen), entre outros. O esquema de seleção usado é por torneio para assim escolher os pares para o cruzamento. Maiores detalhes sobre as técnicas de computação evolutiva e sobre os algoritmos genéticos podem ser encontrados no anexo B.

Uma vez determinados os parâmetros do algoritmo genético, usando o modelo simplificado da conversão assim como o modelo determinístico do processo, com a finalidade de realizar um comparativo do desempenho das duas metodologias na maximização da conversão; o estudo continuou com a inclusão das restrições nas variáveis de processo aplicando a metodologia da função de penalidades. Variações nos parâmetros do algoritmo genético foram realizadas com a finalidade de estabelecer a combinação final dos parâmetros que maximizam a conversão.

Realizadas as otimizações com a metodologia dos algoritmos genéticos, caracterizado por ser uma técnica de busca global, foi feita a implementação de uma técnica de otimização determinística, com busca local, como aprogramação quadrática sequencial (SQP), com a finalidade de refinar a busca do ótimo globa encontrado com os algortimos geneticos.

Três abordagens foram analisadas: a otimização usando o modelo simplificado da conversão obtido através da metodologia de planejamento de experimentos, o modelo determinístico do processo e, finalmente, o modelo determinístico com restrições. Como estimativas inicias foram considerados os melhores valores das variáveis através da técnica dos algoritmos genéticos (metodologia híbrida de otimização), assim como o estabelecimento do chute inicial obtido através do planejamento de experimentos, considerado simplesmente a técnica por programação quadrática sequencial. Por fim, foi considerada a otimização multi-objetivo do conversor de FCC, com o objetivo de maximizar a conversão da alimentação, bem como minimizar a emissão de gases de combustão, mais especificamente a vazão de monóxido de carbono (CO) através da metodologia dos algoritmos genéticos com restrições. Um esquema geral da metodologia de otimização desenvolvida é apresentada na Figura 25.



#### <u>Esquema Geral das Otimizações</u>

Figura 25: Metodologia de otimização do processo de FCC.

# 5.1 OTIMIZAÇÃO COM AG USANDO MODELOS SIMPLIFICADOS DO PROCESSO DE FCC

Para levar em consideração as simulações usando os modelos simplificados obtidos no Capítulo 4, inicialmente, deve ser determinado o número máximo de cromossomos (*bits* binários) por indivíduo, isto é feito através da Equação 26. Para isso, estabelece-se os limites máximos e mínimos de cada sub série, binária e a precisão delas.

$$l_i = \log_2\left(\frac{x_i^{máx} - x_i^{\min}}{\varepsilon_i}\right)$$
 Eq. 26

onde  $\varepsilon_i$  é a precisão requerida para a variável em estudo; e  $x_i^{máx}$  e  $x_i^{min}$  são os limites superior e inferior da variável. O tamanho total da série é definido pelo somatório de cada  $l_i$  como apresentado na Equação 27.

$$l_{total} = \sum_{i=1}^{N} l_i$$
 Eq. 27

A partir do planejamento de experimentos, foi obtida a Equação 25 para o cálculo da conversão da alimentação.

$$SEVERI = 69,163+13,088 * CTCV - 5,588 * RTF$$

Sendo:

SEVERI: conversão volumétrica (%);

CTCV: abertura da válvula de catalisador regenerado (%);

RTF: vazão da carga  $(m^3/d)$ .

O nível superior e inferior dos fatores é apresentado na Tabela 50.

Tabela 50: Níveis dos fatores sobre estudo.

Parâmetro	Límite inferior da variável	Límite superior da variável
CTCV	42	92
RTF	7900	10100

O tamanho da sub-série e o total de cromossomos é calculado aplicando as Equações 26 e 27, referentes a cada fator da Equação 27, para o cálculo do tamanho total do cromossomo dados apresentados na Tabela 51.

Fator	CTCV	RTF
<b>Limite máximo</b> $x_i^{max}$	92	10100
<b>Limite mínimo</b> $x_i^{\min}$	42	7900
<b>Precisão</b> $\mathcal{E}_i$	0,1	0,1
Tamanho da sub-série $l_i$	8,96	14,42
Tamanho total $l_{Total}$	2	23,39

Tabela 51: Tamanho total do cromossomo do algoritmo genético.

Como estimativas inicias, na otimização dos parâmetros do algoritmo genético foram consideradas as recomendações feitas em Carroll (2010). Consideraram-se os seguintes parâmetros: tamanho de população, busca em nichos, cruzamento uniforme e de um ponto com suas taxas vaiando entre 0,5 e 0,7 ; mutação uniforme e de arraste com valores de 0,01 e 0,02, respectivamente, e um número de gerações igual a 26.

Inicialmente, foi avaliada a influência do tamanho da população e as taxas de cruzamento na conversão, fixando os demais parâmetros. A conversão sem a otimização dos parâmetros do algoritmo genético foi 79, 1821%.

## 5.1.1 ANÁLISE DO TAMANHO DA POPULAÇÃO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA CONVERSÃO DA ALIMENTAÇÃO

A primeira análise consistiu na variação do tamanho da população entre 20 e 100 com os operadores de cruzamento uniforme e em um ponto variando entre 0,5 e 0,7. Os valores da taxa de mutação de arraste e da taxa de mutação uniforme foram fixados em 0,02 e 0,01 considerando também a busca em nichos. O tamanho da população, bem como os operadores de cruzamento foram modificados, com a finalidade de estudar a maximização da conversão da alimentação.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Elitismo Cruzamento Uniforme		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão		
20	0,5	87,430		
40	0,5	87,578		
60	0,5	87,835		
80	0,5	87,827		
100	0,5	87,716		
Conversão sem Otimização	79,182%			

Tabela 52: Influência do tamanho populacional na conversão com uma taxa decruzamento uniforme de 0,5.

Tabela 53: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100			
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme	
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26	
Tamanho da população	Taxa de cruzamentoConversão		
20	0,6	87,773	
40	0,6	87,707	
60	0,6	87,486	
80	0,6	87,784	
100	0,6	87,637	
Conversão sem Otimização	79,1821%		

Tabela 54: Influência do tamanho populacional na conversão para uma taxa de cruzamento uniforme de 0,7.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme		
Taxa de mutação	Taxa de mutação de	Número de gerações=26		
Uniforme=0,01	arraste=0,02			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento Conversão (SEVER			
20	0,7	86,707		
40	0,7	87,679		
60	0,7	87,736		
80	0,7	87,537		
100	0,7	87,660		
Conversão sem Otimização	79,1821%			

Nas Tabelas 52 a 54 são apresentados os resultados das variações do tamanho na população com taxa de cruzamento uniforme. O melhor valor obtido de conversão foi de 87,835 para um tamanho da população de 60 e uma taxa de cruzamento de 0,5. Cabe destacar que, os valores obtidos são próximos nos diferentes ensaios realizados.

Os valores de conversão, fazendo as variações nos parâmetros do algoritmo genético apresenta variações consideraveis, quando comparados com os valores de conversão sem o uso do algoritmo de otimização, com uma diferença aproximada de 8,65 %, evidenciando assim a utilidade do estudo de sensibilidade paramétrica do algoritmo de otimização. Na Figura 26 é apresentado um gráfico comparativo das variações no tamanho da população com taxa de cruzamento uniforme. Observa-se que, os melhores valores de conversão são obtidos para taxas de cruzamento uniforme baixas e tamanhos de população entre 60 e 80. Valores baixos de conversão resultam da combinação de valores baixos do tamanho da população e valores altos de taxa de cruzamento.



Figura 26: Análise da taxa de cruzamento uniforme e do tamanho da população, na conversão.

A seguir, nas Tabelas 55 a 57 são apresentados os resultados da conversão considerando as variações na taxa de cruzamento num ponto. Conclui-se que os valores de conversão são próximos para os diferentes ensaios realizados.

O maior valor da conversão, usando a taxa de cruzamento em um ponto, é de 87,837% para um tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento de 0,6. Esse valor é similar ao máximo valor de conversão usando a taxa de cruzamento uniforme, porém, os valores do tamanho de população e da taxa de cruzamento são maiores. Assim como, no caso das conversões obtidas variando a taxa de cruzamento uniforme, os valores de conversão aumentaram em 8,654%, quando o processo foi otimizado usando os algoritmos genéticos, desta vez, usando a taxa de cruzamento em um ponto.

Tabela 55: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Elitismo Cruzamento em um ponto		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população	Taxa de cruzamento Conversão (SEVE			
20	0,5	86,789		
40	0,5	87,330		
60	0,5	87,233		
80	0,5	87,733		
100	0,5	87,779		
Conversão sem Otimização	79,1821 %			

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo Cruzamento em um ponto			
Taxa de mutação	Taxa de mutação de	Número de gerações=26		
Uniforme=0,01	arraste=0,02			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)		
20	0,6	87,374		
40	0,6	87,641		
60	0,6	87,154		
80	0,6	87,661		
100	0,6	87,837		
Conversão sem Otimização	79,1821%			

Tabela 56: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,6.

Tabela 57: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,7.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100			
Busca com nichos	Elitismo Cruzamento em um ponto		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02Número de gerações		
Tamanho da população	Taxa de cruzamento Conversão (SEVER		
20	0,7	86,814	
40	0,7	87,743	
60	0,7	87,658	
80	0,7	87,319	
100	0,7	87,776	
Conversão sem Otimização	79,1821%		

A Figura 27 apresenta um gráfico comparativo das variações no tamanho da população com taxa de cruzamento em um ponto. Os melhores valores de conversão são o resultado de tamanhos de população de 100, para todas as taxas de cruzamento em um ponto, e as conversões mais baixas são o resultado de tamanhos de população baixos para todas as taxas de cruzamento,

Comparando as taxas de cruzamento uniforme e, em um ponto, em geral, o cruzamento em um ponto apresenta resultados maiores de conversão, quando comparado com a taxa de cruzamento uniforme. A faixa de tamanhos de população que apresentou melhores resultados se encontra entre 60 e 100, com taxas de cruzamento de 0,5 e 0,6.



Figura 27: Análise da taxa de cruzamento em um ponto e do tamanho da população na conversão.

A seguir, são analisadas as variações nas taxas de mutação uniforme e de arraste com o uso ou não da busca em nichos. As variações nas taxas de mutação serão feitas entre 0,001 e 0,2; os valores do tamanho de população inicial considerados são 80 e 100, com taxas de cruzamento de 0,5 e 0,6 para ambas as formas de cruzamento.

#### 5.1.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DAS TAXAS DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS

As avaliações foram feitas variando a taxa de mutação uniforme e fixando-se a taxa de mutação de arraste em 0,02; fazendo uso da operação de busca em nichos. Nas Tabelas 58 a 61 são apresentados os resultados das conversões para diferentes valores de taxa de mutação uniforme, para os dois casos de cruzamento uniforme e, em um ponto com taxas de cruzamento de 0,5 e 0,6.

Dos resultados apresentados, o maior valor de conversão, variando a taxa de cruzamento uniforme é 87, 833% para um tamanho de população de 80 e uma taxa de cruzamento de 0,6. Já para o caso da taxa de cruzamento em um ponto, o maior valor de conversão foi de 87,837% para um tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento de 0,6.

Tabela 58: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cru	zamento = 0,5	
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	87,626	0,001	87,407
0,01	87,827	0,01	87,733
0,1	87,626	0,1	87,658
0,2	87,483	0,2	87,493

Tabela 59: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cru	zamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	87,744	0,001	87, 496
0,01	87,716	0,01	87, 779
0,1	87,296	0,1	87,722
0,2	87,582	0,2	87,762

Tabela 60: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cruzamento=0,6				
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto					
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão		
Uniforme		Uniforme			
0,001	87,833	0,001	87,833		
0,01	87,784	0,01	87,661		
0,1	87,293	0,1	87,747		
0,2	87,566	0,2	87,519		

Tabela 61: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e, uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cru	zamento=0,6	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	87,780	0,001	87,835
0,01	87,637	0,01	87,837
0,1	87,667	0,1	87,814
0,2	87,533	0,2	87,776

Nas Figuras 28 e 29 são apresentados os perfis de conversão para os dois casos de tamanho de população e taxa de conversão analisados. A tendência para os dois casos de cruzamento é apresentar conversões altas para baixos valores de taxa de mutação uniforme e, diminuir, na medida em que, os valores de taxa de mutação aumentam. Para as combinações de popz=80 com taxa de cruzamento de uniforme de 0,5 e popz=100 e taxa de cruzamento de 0,6, os valores de conversão oscilam até se estabilizar em um valor de 87,4714.



Figura 28: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão para diferentes valores de tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento uniforme (TCU).



Figura 29: Variação da conversão com a taxa de mutação uniforme para diferentes valores de tamanho da população e de taxa de cruzamento em um ponto (TSP).

Dos resultados apresentados, vale observar que é de grande importância a escolha adequada da combinação dos parâmetros do algoritmo genético, já que eles podem afetar os valores de conversão do processo, como é evidenciado nas Figuras 28 e 29. Como também, no caso das análises para o tamanho de população, os valores de conversão são maiores para cruzamento em um ponto, esses resultados apresentaram uma única tendência, como mostrado na Figura 28, para os diferentes valores de taxa de mutação, que é de diminuir a conversão, na medida em que, a taxa de mutação uniforme aumenta. Menores valores de conversão é o resultado de maiores valores de taxa de mutação para todos os valores de tamanho de população e taxa de cruzamento.

#### 5.1.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS

A seguir serão analisadas as variações na taxa de mutação de arraste entre 0,001 e 0,1, fixando o valor de taxa de mutação uniforme em 0,01 com busca em nichos. Os valores de tamanho de população são de 80 e 100 com taxas de cruzamento uniforme e em um ponto de 0,5 e 0,6.

Nas Tabelas 62 a 65 são apresentados os resultados das variações na taxa de mutação de arraste para os dois casos de estudo de cruzamento uniforme e em um ponto. O maior valor atingido de conversão para o caso da taxa de cruzamento uniforme foi de 87, 836%, para um tamanho de população de 80, taxa de cruzamento de 0,5 e taxa de mutação de arraste de 0,005. Para o caso de cruzamento em um ponto, o maior valor atingido de conversão foi de 87, 832% para um tamanho de população de 100, taxa de cruzamento 0,5 e taxa de mutação de arraste de 0, 001. Valores maiores de taxa de mutação de arraste foram avaliados, porém, os valores de conversão apresentaram um caráter aleatório, os quais se estabilizam em valores menores de conversão. Fica evidente a importância das análises das variações do operador genético taxa de mutação de arraste, já que os valores de conversão apresentaram maiores valores, quando comparados com as variações nas taxas de mutação uniformes apresentadas no item 5.1.2.

Tabela 62: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de
mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação
uniforme de 0,01 e, uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste
variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80				
	Taxa de cruzamento = 0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação	Convorsão	Taxa de Mutação	Convorção	
Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao	
0,001	87,744	0,001	87,509	
0,005	87,836	0,010	87,725	
0,010	87,827	0,100	87,817	
0,050	87,774	0,200	87,713	
0,100	87,571	0,300	87,795	

Tabela 63: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0, 001 e 0,2.

	Tamanho da	População= 100		
	Taxa de cru	uzamento=0,5		
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação de	Convoncão	Taxa de Mutação	Convorção	
Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao	
0,001	87, 319	0,001	87, 832	
0,005	87,646	0,010	87,602	
0,010	87,637	0,100	87, 814	
0,050	87, 782	0,200	87, 826	
0,100	87, 633	0,300	87, 725	

Tabela 64: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cru	uzamento=0,6	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	87, 741	0,001	87, 776
0,005	87, 835	0,010	87, 784
0,010	87, 734	0,100	87, 729
0,050	87, 789	0,200	87, 759
0,100	87, 780	0,300	87, 750

Tabela 65: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6, As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100			
Taxa de cruzamento=0,6			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	87, 781	0,001	87,762
0,005	87, 711	0,010	87, 665
0,010	87, 714	0,100	87, 835
0,050	87, 746	0,200	87, 737
0,100	87, 573	0,300	87,826

Nas Figuras 30 e 31 são apresentados os perfil de variação da conversão com a taxa de mutação de arraste. Na Figura 30, para o caso da taxa de cruzamento uniforme observa-se que as maiores conversões resulta de baixas taxas de mutação de arraste e tamanhos de população de 80. A partir de taxas de mutação de 0,005, os valores de conversão começam a decrescer rapidamente, exceto para o tamanho de população de 80 e taxa de cruzamento de 0,6, atingindo um valore estável, aproximadamente, em 87,80%.

No caso da Figura 31, para o caso da taxa de cruzamento em um ponto, os valores da taxa de mutação de arraste foram estendidos até valores aproximados de 0,3 para, assim, entender melhor a tendência dos perfis. Os maiores valores de conversão foram atingidos para baixas taxas de mutação de arraste, apresentando-se o caráter aleatório dos perfis, a partir de uma taxa de mutação de arraste de 0,1.

Em termos gerais, o maior valor de conversão, fazendo as variações da taxa de mutação de arraste, se apresentou para o caso da taxa de cruzamento uniforme, conforme apresentado na Figura 31, com um valor de 87, 836%. Igualmente, nas análises, observouse a influência dos parâmetros do algoritmo genético na conversão, já que pequenas variações nas taxas de mutação e de cruzamento geravam fortes oscilações na conversão.



Figura 30: Influência da taxa de mutação de arraste na conversão para diferentes valores de Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento uniforme (TCU).



Figura 31: Influência da taxa de mutação de arraste na conversão para diferentes valores de Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento em um ponto (TCP).

#### 5.1.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE SEM A UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

Variações foram realizadas na taxa de mutação de arraste, fixando-se o valor de mutação uniforme sem o uso do operador de busca em nichos. Os valores da taxa de mutação de arraste variaram na faixa entre 0,001 e 0, com valores de cruzamento uniforme e de um ponto fixado em 0,5 e tamanhos populacionais de 80 e 100.

Os valores de conversão se mantiveram constantes para os diferentes valores de taxa de mutação de arraste, atingindo um valor de 87, 839%, que é alto quando comparada com as análises realizadas nos itens anteriores, indicando que o não uso do parâmetro de busca em nichos conduz a valores mais altos de conversão.

#### 5.1.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME SEM A UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

Neste ítem foram consideradasas variações na taxa de mutação uniforme mantendo constante a taxa de mutação de arraste, com um valor de 0,02, variando os valores da taxa de mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, e com valores de cruzamento uniforme e de um ponto de 0,5, bem como tamanhos populacionais de 80 e 100, sem incluir a busca em nichos. O maior valor de conversão atingido foi de 87, 839%, o que indica que o não uso do parâmetro de busca em nichos leva a um a um bom desempenho da otimização.

A seguir, nas Tabelas 66 e 67 são apresentados os resultados das variações na taxa de mutação uniforme sem o uso da busca em nichos.

Tabela 66: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cru	izamento=0,5	
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento	em um Ponto
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Uniforme		Uniforme	
0,001	87,839	0,001	87,839
0,005	87,839	0,005	87,839
0,010	87,839	0,010	87,837
0,050	87,838	0,050	87,830
0,100	87,757	0,100	87,822
0,200	87,634	0,200	87,732
0,300	87,616	0,300	87,400

Tabela 67: Respostas das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cr	uzamento=0,5	
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
Uniforme		Uniforme	
0,001	87,839	0,001	87,838
0,005	87,839	0,005	87,839
0,010	87,839	0,010	87,839
0,050	87,836	0,050	87,776
0,100	87,764	0,100	87,818
0,200	87,619	0,200	87,709
0,300	87,705	0,300	87,766

Na Figura 32 é apresentado o perfil de conversão para diferentes valores da taxa de mutação uniforme. De acordo com essa figura, os melhores valores de conversão são obtidos na faixa entre 0,001 e 0,05, exceto para o caso do tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5, que apresentou valores menores quando comparados aos obtidos nas outras análises. Após o valor de taxa de mutação de 0,05, a tendência da conversão é diminuir. Esta situação é observada para todos os tipos de cruzamento, exceto para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5 e tamanho de população de 100, que começou a diminuir a partir de uma taxa de mutação uniforme de 0,1.



Figura 32: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão para diferentes valores de Tamanho de população (Popz) e Taxa de cruzamento em um ponto (TCP) e uniforme (TCU).

### 5.1.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA NA CONVERSÃO DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS E SEM O USO DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE

Nesta análise é estudada a sensibilidade na conversão para variações na taxa de mutação uniforme entre 0,001 e 0,3, sem levar em conta a taxa de mutação de arraste, usando o operador de busca em nichos. Os valores da taxa de cruzamento uniforme e em um ponto foram fixados em 0,5 e os tamanhos de população avaliados são 80 e 100. Nas Tabelas 68 e 69 são apresentados os resultados das simulações.

Para o caso analisado, usando a forma de cruzamento uniforme, o melhor resultado foi de 87,826% para um tamanho de população de 100, uma taxa de cruzamento de 0,5 e uma taxa de mutação uniforme de 0,1; conversão considerada baixa quando comparado com os resultados obtidos nas análises anteriores.

Tabela 68: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cr	uzamento=0,5	
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento en	n um Ponto
Taxa de Mutação de Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	87,811	0,001	87,073
0,005	87,740	0,005	86,888
0,010	87,495	0,010	87,726
0,050	87,766	0,050	87,827
0,100	87,708	0,100	87,801
0,200	87,740	0,200	87,672
0,300	87,463	0,300	87,084

No caso do cruzamento em um ponto, o melhor resultado de conversão tem um valor de 87, 827% para um tamanho de população de 80, uma taxa de cruzamento de 0,5 e uma taxa de mutação uniforme de 0,05.

Tabela 69: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzamente	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto	
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	87,729	0,001	87,062	
0,005	87,784	0,005	87,741	
0,010	87,754	0,010	87,777	
0,050	87,719	0,050	87,771	
0,100	87,826	0,100	87,640	
0,200	87,672	0,200	87,714	
0,300	87,346	0,300	87,617	

Na Figura 33 é apresentado o perfil de conversão sem considerar a taxa de mutação de arraste, os melhores valores se encontram na faixa entre 0,001 e 0,1, ampliando a faixa dos valores de taxa de mutação, quando comparado com as análises realizadas nos item anteriores. A partir de valores de taxa de mutação de 0,1, os valores de conversão começam a diminuir ou se estabilizam em valores inferiores ao ótimo atingido.

Dos resultados obtidos, pode-se concluír que, ao excluir-se a taxa de mutação de arraste das análises, valores menores de conversão são obtidos para as variações na taxa de mutação uniforme, indicando que a taxa de mutação de arraste é um parâmetro que afeta significativamente a otimização da conversão.



Figura 33: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão, sem o uso da taxa de mutação de arraste para diferentes valores de tamanho de população e taxa de cruzamento em um ponto e uniforme.

### 5.1.7 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO A TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE SEM O USO DE BUSCA EM NICHOS

Nesta análise foram feitas variações na taxa de mutação uniforme entre 0,001 e 0,1, desprezando a taxa de mutação de arraste e a busca em nichos. Os valores do tamanho de população analisados foram 80 e 100 e taxas de cruzamento uniforme e num ponto de 0,5.

Nas Tabelas 70 e 71 são apresentadas as respostas das análises onde o maior valor de conversão atingido é de 87, 839%, para as duas taxas de cruzamento, como também, para os dois tamanhos de população.

Tabela 70: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 80			
Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Uniforme	Conversao	Uniforme	Conversao
0,001	87,838	0,001	87,838
0,005	87,839	0,005	87,833
0,010	87,839	0,010	87,839
0,050	87,829	0,050	87,838
0,100	87,786	0,100	87,837
0,200	87,740	0,200	87,770

Tabela 71: Respostas das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 100			
Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação de Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	87,839	0,001	87,837
0,005	87,839	0,005	87,837
0,010	87,839	0,010	87,838
0,050	87,837	0,050	87,839
0,100	87,831	0,100	87,774
0,200	87,629	0,200	87,660

Na Figura 34 é apresentado o perfil de conversão *versus* a taxa de mutação uniforme, onde se pode observar que, as conversões são elevadas em torno de 87,83%, até um valor de taxa de mutação de 0,05, a partir do qual as conversões começam a decrescer para todos os casos analisados de tamanho de população e de taxa de cruzamento.



Figura 34: Influência da taxa de mutação uniforme na conversão, sem o uso da taxa de mutação de arraste nem da busca em nichos.

### 5.1.8 ANALISE DAS RESPOSTAS ÀS VARIAÇÕES NO TAMANHO DA POPULAÇÃO, TAXA DE MUTAÇÃO, TAXA DE CRUZAMENTO E BUSCA EM NICHOS

Das análises realizadas, o melhor valor de conversão encontrado foi de 87, 839%, valor obtido para os casos nos quais a busca em nichos e a taxa de mutação de arraste foram desprezados, para um valor de taxa de cruzamento uniforme e em um ponto de 0,5; valores de tamanho de população de 80 e 100 e para uma faixa de taxas de mutação uniforme entre 0, 001 e 0, 050.

A seguir, nas Tabelas 72 e 73, são apresentados os valores das variáveis independentes abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV) e vazão de carga para o riser (RTF), em termos de variáveis reais para os valores dos parâmetros do algoritmo genético que levaram ao máximo de conversão.

Na Tabela 72, a combinação dos parâmetros do algoritmo genético, taxa de mutação uniforme 0,01 com cruzamento uniforme, os quais foram obtidos para uma conversão de 87, 839%, com uma vazão de alimentação de 7930, 69 m<sup>3</sup>/d, a maior atingida com uma abertura da válvula de catalisador regenerado de 91,52%, que se tornou baixa quando comparada com os valores de abertura de válvula de catalisador regenerado apresentados nesta tabela. Os valores anteriores mostram como se podem atingir altas conversões, com altas vazões de alimentação para valores de fluxo de catalisador regenerado baixos, ajudando assim, a atingir a altas temperaturas na segunda etapa de regeneração, com baixas temperaturas no *riser*.

Tamanho da População= 80								
Taxa de	Cruzar	nento Unifo	orme	Cruzame	Cruzamento em um ponto			
<b>Mutação</b>	Conversão	CTCV		Conversão	CTCV	RTF		
Uniforme	(%)		$(\mathbf{m}^{2}/\mathbf{d})$	(%)		$(\mathbf{m}^{2}/\mathbf{d})$		
0,001	87,838	92,00	7900,11	87,838	92,00	7902,20		
0,005	87,839	92,00	7919,69	87,833	91,99	7906,16		
0,010	87,839	91,52	7930,69	87,839	91,36	7916,50		
0,050	87,829	87,97	8075,67	87,838	88,82	8127,26		

Tabela 72: Respostas das variáveis do modelo reduzido de processo para a combinação dos parâmetros do AG otimizadas.

Na Tabela 73, observa-se que com a combinação de parâmetros taxa de mutação uniforme 0,01, com cruzamento em um ponto, que levaram a uma conversão de 87, 838%, com uma vazão de alimentação de 7942,90 m<sup>3</sup>/d que foi a maior atingida para o tamanho de população de 100, com uma abertura da válvula de 91,43%, considerada baixa, quando comparada com os resultados apresentados nesta tabela.

Tamanho da População= 100								
Taxa de	Cruzan	nento Unif	orme	Cruzamento em um ponto				
Mutação Uniformo	Conversão	CTCV	RTF	Conversão	CTCV	RTF		
Uniforme	(%)		(m /u)	(70)		(m /u)		
0,001	87,839	92,00	7902,75	87,837	91,75	7900,33		
0,005	87,839	91,74	7907,04	87,837	91,99	7928,71		
0,010	87,839	91,06	7924,64	87,838	91,43	7942,90		
0,050	87,837	88,28	8067,42	87,839	89,90	8087,00		

Tabela 73: Respostas das variáveis do modelo reduzido de processo para a combinaçãodos parâmetros do AG que atingem máxima conversão.

A seguir, na Figura 35, são apresentados os perfis de conversão *versus* o número de gerações para as duas combinações de parâmetros do algoritmo genético que obtiveram os maiores valores de conversão. Os dois casos analisados são:

- Tamanho de população (Popz) 80, taxa de cruzamento uniforme (TCU) 0,5; taxa de mutação uniforme (TMU) 0,01, desprezando a taxa de mutação de arraste e a busca em nichos;
- Tamanho de população (Popz) 100, taxa de cruzamento em um ponto (TCP), taxa de mutação uniforme (TMU) 0,01, desprezando a taxa de mutação de arraste e a busca em nichos.



Figura 35: Perfil da variação na conversão com o número de gerações nos dois melhores de conjuntos de parâmetros no algoritmo genético

O destaque acontece para o caso do tamanho de população de 80 com taxa de cruzamento uniforme, que se atingem valores de conversão superiores, quando comparado com o caso de tamanho de população 100, com taxa de cruzamento em um ponto, até o valor de 20 gerações, estabilizando-se depois em um valor de conversão de 87,839%, o que indica que o valor sugerido pelo autor do algoritmo genético de 26 gerações, com o qual foram analisados todos os casos é adequado.

#### 5.1.9 ANÁLISE ESTATÍSTICA COMPLEMENTAR USANDO PLACKETT & BURMAN

Um estudo complementar foi realizado, dessa vez, usando um planejamento Plackett & Burman, visando identificar do conjunto total de parâmetros do algoritimo genético, aqueles que têm maior influência na otimização do processo de craqueamento catalítico, considerando os modelos simplificados como função objetivo.

Os parâmetros considerados para esse estudo, além dos já estudados, são:

- Idum, que é um parâmetro que determina a população inicial de indivíduos trata-se de um número ramdômico inicial, que deve ser inteiro negativo, por exemplo: idum=-1000, valor recomendado por Carroll (2010);
- Nchild, considera o número de crianças por par de cromosomos pais, podendo asumir valores de 1 ou 2;
- Ielite, que é uma adição aos vários métodos de seleção, que força os AG's a reter um certo número de melhores indivíduos em cada geração. Caso seja estabelecido um valor zero para desativar esta opção, os melhores indivíduos não serão replicados de uma geração para a seguinte, se ajusta 1 para que os melhores indivíduos sejam replicados na seguinte geração.

Os valores dos demais parâmetros são ajustados segundo os resultados obtidos nos items anteriores, os quais serão identificados como os pontos centrais do planejamento fatorial fracionário, com variação de 20% para calcular o nível inferior: -1 e superior: +1. Os pontos centrais das variáveis *maxgen, idum e pcross* são, respectivamente: 26, 1000 e 0,5. Na Tabela 74 são apresentados os limites do planejamento.

	Nív	Níveis					
Parâmetros	-1	+1					
Npopsiz	80	100					
Pmutate	0,001	0,05					
Maxgen	21	31					
Idum	-800	-1200					
Pcross	0,4	0,6					
Ielite	0	1					
Icreep	0	1					
Pcreep	0,001	0,1					
Iuniform	0	1					
Iniche	0	1					
Nchild	1	2					

Tabela 74: Níveis do planejamento Plackett & Burman para os parâmetros do algoritmo genético.

No *software* Statistica versão 7,0, são considerados 15 fatores, e um total de 16 ensaios, ficando três variáveis para o cálculo do erro e uma variável para a média, já que o número de parâmetros analisados é 11. Na Tabela 75 é apresentada a matriz de planejamento, junto com os valores da variável de resposta.

	npopsize	pmutate	maxgen	Idum	pcross	ielite	icreep	pcreep	iuniform	Iniche	nchild	Conversão
1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	-1	87,660
2	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	86,426
3	-1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	1	87,786
4	1	1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	86,645
5	-1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	87,839
6	1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	-1	-1	87,839
7	-1	1	1	-1	-1	-1	1	1	-1	-1	-1	87,722
8	1	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	-1	1	87,837
9	-1	-1	-1	1	1	1	-1	1	-1	-1	-1	87,723
10	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1	87,798
11	-1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1	87,818
12	1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	-1	-1	87,833
13	-1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	84,152
14	1	-1	1	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	87,815
15	-1	1	1	1	-1	-1	-1	1	1	1	-1	85,274
16	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	87,731

Tabela 75: Matriz de variáveis codificadas do planejamento Plackett & burman e variável resposta do FCC.
Na Tabela 76 são apresentados os efeitos dos fatores do planejamento Plackett & Burman. Os fatores, em negrito, são aqueles estatisticamente significativos para um nível de confiança de 95%. Três fatores se mostraram estatisticamente significativos são eles: iniche, icreep e ielite.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Media*	87,244	0,132	658,932	0,000
	npopsize*	0,494	0,265	1,865	0,136
	pmutate*	0,174	0,265	0,658	0,546
	maxgen*	-0,435	0,265	-1,643	0,176
	idum*	-0,451	0,265	-1,704	0,164
Conversão	pcross*	-0,132	0,265	-0,499	0,644
	ielite*	1,065	0,265	4,022	0,016
	icreep*	1,059	0,265	3,998	0,016
	pcreep*	0,056	0,265	0,210	0,844
	iuniform*	0,118	0,265	0,445	0,680
	iniche*	-1,115	0,265	-4,211	0,014
	nchild*	-0,141	0,265	-0,531	0,624

Tabela 76: Efeitos dos fatores para a variável de estudo conversão.

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%.

a Valor do coeficiente de regressão para o erro.

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

Na Figura 36 é apresentado o gráfico de Pareto para a conversão. Os fatores que têm um maior efeito são: iniche, ielite e icreep. De acordo com a Tabela 44, quando varia o nível de -1 para +1 para iniche, o valor de conversão diminui em 1,115 %. No caso de ielite, o valor da conversão aumenta em 1,065% e, para icreep o valor da conversão aumenta em 1,059%.



Estimativa Estandarizada dos Efeitos (Valor Absoluto)

Figura 36: Gráfico de Pareto para a variável de resposta Conversão.

A seguir são apresentadas as superfícies de resposta para as variáveis estatisticamente significativas. Onde pode ser observado o efeito em conjunto que elas têm sob a conversão.

A Figura 37 apresenta o efeito que tem a busca em nichos e o elitismo sob a conversão, no qual valores altos de conversão são atingidos quando a busca em nichos é desconsiderada e o elitismo está incluído. Nas análises realizadas, por tentativa e erro, este desempenho foi identificado nos items 5.1.4; 5.1.5; 5.1.7. Onde conversões ao redor de 87,839 são atingidas, sem o uso da busca em nichos, já o uso do elitismo é considerado em todas as análises.



Figura 37: Superfície de resposta para a conversão.

A Figura 38 apresenta a superfície de resposta para a interação do uso da taxa de mutação de arraste e a busca em nichos. Para o uso da busca em nichos e sem o uso da taxa de mutação de arraste, valores baixos de conversão são atingidos, comportamento que é evidenciado no item 5. 1. 6 cujos valores baixos de conversão são atingidos, quando comparados com as outras análises para os diferentes valores da taxa de mutação uniforme.

No caso do item 5. 1. 7, altos valores de conversão foram atingidos, destacando-se que o efeito combinado do tamanho da população, do elitismo, assim como o não uso da busca em nichos, afetou a taxa de mutação de arraste. Onde foi observado o efeito contrário ao esperado, segundo o gráfico de Pareto para a taxa de mutação de arraste.



Figura 38: Variação da conversão com uso da taxa de mutação de arraste.

De acordo com os resultados apresentados pode-se concluir que, o *Statistica* é uma ferramenta de grande importância para a identificação dos parâmetros com uma maior influência na otimização através de algoritmos genéticos. Porém, estimativas iniciais dos parâmetros devem ser feitas para estabelecer os limites nos quais os parâmetros do algoritmo apresentam melhores resultados, já que cada processo de acordo com sua modelagem, pode apresentar faixas de operação diferentes, o que afeta a escolha dos parâmetros da otimização.

# 5.2 OTIMIZAÇÃO COM AG USANDO O MODELO DETERMINÍSTICO DO PROCESSO DE FCC

A seguir são apresentadas as análises das variações nos parâmetros do algoritmo genético, usando o modelo determinístico do processo de FCC. Estas variações seguiram a mesma ordem, como no caso das avaliações usando o modelo simplificado, com o objetivo de estabelecer um comparativo entre as duas metodologias.

### 5.2.1 ANÁLISE DO TAMANHO DA POPULAÇÃO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA CONVERSÃO DA ALIMENTAÇÃO USANDO O MODELO DETERMINISTICO DO PROCESSO

As considerações iniciais dos parâmetros do algoritmo genético serão as mesmas das otimizações usando modelos simplificados, isto é, variações do tamanho de população entre 20 e 100 indivíduos, variações das taxas de cruzamento uniforme e em um ponto entre 0,5 e 0,7; mutação uniforme e de arraste variando entre 0,02 e 0,01, considerando 26 gerações, a cada iteração. Nas Tabelas 77 a 79 são apresentadas as análises das variações no tamanho da população e da taxa de cruzamento.

de 0,5.				
Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população Taxa de cruzamento		Conversão (SEVERI)		
20	0,5	85,280		
40	0,5	85,220		
60	0,5	85,172		
80	0,5	85,250		
100	0,5	85,243		
Conversão sem Otimização 79,182%				

Tabela 77: Influência do tamanho populacional no conversor com uma taxa de cruzamento

Tabela 78: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100					
Busca com nichos	Busca com nichos Elitismo Cruzamento Unif				
Taxa de mutação	Taxa de mutação de	Número de gerações=26			
Uniforme=0,01	arraste=0,02				
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,6	85,211			
40	0,6	85,172			
60	0,6	85,283			
80	0,6	85,298			
100	0,6	85,225			
Conversão sem Otimização	onversão sem Otimização 79,182%				

cruzamento uniforme de 0,7.				
Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme		
Taxa de mutação	Taxa de mutação de	Número de gerações=26		
Uniforme=0,01	arraste=0,02			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)		
20	0,7	84,598		
40	0,7	85,327		
60	0,7	85,220		
80	0,7	85,168		
100	0,7	85,108		
Conversão sem Otimização	79, 1	821%		

Tabela 79: Influência do tamanho populacional na conversão com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,7.

O melhor valor obtido de conversão foi de 85,327 para um tamanho de população de 40 e uma taxa de cruzamento de 0,7. Uma redução de 2,5 na conversão, quando comparado com o melhor valor obtido usando o modelo reduzido para o mesmo tipo de análise.

A seguir são apresentados os resultados usando a taxa de cruzamento em um ponto nas Tabelas 80 a 82. O maior valor da conversão é de 85,320 para um tamanho de população de 80 e uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,7, com uma redução de 2,5 na conversão, quando comparada com o melhor valor obtido na avaliação da mesma taxa de cruzamento e usando o modelo reduzido do processo. Vale destacar que os parâmetros do algoritmo genético, para os dois casos de cruzamento são diferentes, tanto para as otimizações usando o modelo reduzido, quanto para as otimizações usando o modelo determinístico.

cruzamento en un ponto de 0,5.					
Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100					
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento em um ponto			
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,5	84,920			
40	0,5	85,294			
60	0,5	85,173			
80	0,5	85,283			
100	0,5	85,104			
Conversão sem Otimização	79,	182%			

Tabela 80: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5.

Tabela 81: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,6.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento em um ponto		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população	Tamanho da populaçãoTaxa de cruzamento			
20	0,6	84,875		
40	0,6	85,315		
60	0,6	85,071		
80	0,6	85,283		
100	0,6	85,318		
Conversão sem Otimização 79, 182%				

Tabela 82: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa decruzamento em um ponto de 0,7.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento em um ponto		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)		
20	0,7	84,703		
40	0,7	85,238		
60	0,7	85,138		
80	0,7	85,320		
100	0,7	85,246		
Conversão sem Otimização	79, 182%			

Os valores de taxa de cruzamento em um ponto e uniforme, bem como do tamanho da população para os melhores resultados obtidos da conversão são próximos, quando comparados com as avaliações usando o modelo simplificado e o modelo determinístico. A seguir, para efeitos de comparação, serão feitas as avaliações da taxa de mutação e busca em nichos, com o modelo determinístico do processo, considerando os mesmos valores dos parâmetros utilizados para o caso do modelo simplificado.

#### 5.2.2 ANÁLISE DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS

Das variações na taxa de mutação uniforme, o melhor valor de conversão para o caso de cruzamento uniforme é de 85,322%, para a combinação de fatores taxa de mutação uniforme 0,1, tamanho de população 80 e taxa de cruzamento uniforme 0,6. Comparando estes resultados com as análises realizadas usando o modelo simplificado, a diferença é de 2,5%, a menos. Já para o caso das análises considerando a taxa de cruzamento em um ponto, o melhor valor de conversão é de 85,34% para um tamanho de população de 80 e uma taxa de cruzamento de 0,5, apresentando a mesma diferença para a conversão, quando comparada com a análise da taxa de cruzamento uniforme do modelo simplificado. Os resultados são apresentados nas Tabelas 83 a 86.

Tamanho da População= 80				
	Taxa de cru	12amento = 0,5	<b>D</b> (	
Cruzamento	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto	
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	85,191	0,001	85,237	
0,01	85,250	0,01	85,283	
0,1	85,275	0,1	85,340	
0,2	85,247	0,2	85,161	

Tabela 83: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme entre 0,001 e 0,2 considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5.

Tabela 84: Resultado das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cru	izamento=0,5		
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto	
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	85,210	0,001	85,221	
0,01	85,243	0,01	85,104	
0,1	85,262	0,1	85,228	
0,2	85,109	0,2	85,065	

Tabela 85: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cruzamento=0,6				
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto		
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão		
0,001	85,281	0,001	85,295		
0,01	85,298	0,01	85,283		
0,1	85,321	0,1	85,307		
0,2	85,191	0,2	85,214		

Tabela 86: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cru	izamento=0,6		
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	85,219	0,001	85,330	
0,01	85,225	0,01	85,318	
0,1	85,290	0,1	85,269	
0,2	85,052	0,2	85,239	

### 5.2.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS

O melhor valor da conversão para as variações na taxa de mutação de arraste, considerando o cruzamento uniforme é de 85,345% para um tamanho de população de 80 e uma taxa de cruzamento de 0,5, com uma diferença de 2,5, a menos, quando comparado com o melhor caso, usando o modelo simplificado. Os valores considerados de tamanho de população e taxa de cruzamento são os mesmos usados no modelo simplificado.

Para o caso da taxa de cruzamento em um ponto, o maior valor de conversão foi de 85,344% para um tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento de 0,6, com uma diferença de 2,48%, a menos, quando comparado com as avaliações feitas usando o modelo simplificado. Os resultados dessas análises são apresentados nas Tabelas 87 a 90.

Tabela 87: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cru	zamento = 0,5			
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação	Convorsão	Taxa de Mutação	Convorção		
Arraste	Conversao	de Arraste	Conversão		
0,001	85,241	0,001	85,240		
0,005	85,316	0,010	85,286		
0,010	85,344	0,100	85,333		
0,050	85,282	0,200	85,341		
0,100	85,262	0,300	85,239		

Tabela 88: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0, 001 e 0,2.

Tamanho da População= 100			
Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			em um Ponto
Taxa de Mutação	Convorção	Taxa de Mutação	Convorção
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	85,278	0,001	85,138
0,005	85,215	0,010	85,294
0,010	85,216	0,100	85,273
0,050	85,233	0,200	85,208
0,100	85,297	0,300	85,238

Tabela 89: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cr	uzamento=0,6	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			n um Ponto
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	85,230	0,001	85,311
0,005	85,296	0,010	85,309
0,010	85,343	0,100	85,327
0,050	85,182	0,200	85,230
0,100	85,093	0,300	85,331

Tabela 90: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100			
Taxa de cruzamento=0,6			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação	Convorsão	Taxa de Mutação	Convorção
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	85,278	0,001	85,137
0,005	85,228	0,010	85,258
0,010	85,241	0,100	85,328
0,050	85,167	0,200	85,318
0,100	85,209	0,300	85,344

# 5.2.4 ANÁLISE DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE SEM A UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

O melhor valor de conversão atingido, sem o uso da busca em nichos e variando a taxa de mutação de arraste, usando o modelo determinístico do processo foi de 85,345%. A diferença das mesmas análises usando o modelo simplificado do processo foi de 2,49%. Como também no caso do modelo simplificado, os valores de conversão se mantiveram constantes para todas as variações na taxa de mutação arraste. Os resultados são apresentados nas Tabelas 91 e 92.

Tabela 91: Resultados das simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2, sem o uso de busca em nichos.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cru	izamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			em um Ponto
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversão
0,001	85,344	0,001	85,343
0,005	85,344	0,010	85,344
0,010	85,344	0,100	85,344
0,050	85,344	0,200	85,334
0,100	85,344	0,300	85,343

Tabela 92: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2 sem o uso de busca em nichos,

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cr	uzamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			n um Ponto
Taxa de Mutação	Conversão	Taxa de Mutação	Conversão
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao
0,001	85,344	0,001	85,344
0,005	85,344	0,010	85,343
0,010	85,344	0,100	85,343
0,050	85,344	0,200	85,344
0,100	85,344	0,300	85,344

# 5.2.5 ANÁLISE DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME SEM A UTILIZAÇÃO DE BUSCA EM NICHOS

O maior valor da conversão para as variações na taxa de mutação uniforme, mantendo constante a taxa de mutação de arraste, sem a busca em nichos foi o mesmo do item anterior, para os dois casos analisados de tamanho de população estudados. Os resultados das variações na taxa de mutação uniforme são apresentados nas Tabelas 93 e 94.

Tabela 93: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cr	uzamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			m um Ponto
Taxa de Mutação de Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	85,344	0,001	85,332
0,005	85,344	0,005	85,343
0,010	85,344	0,010	85,344
0,050	85,344	0,050	85,340
0,100	85,339	0,100	85,328
0,200	85,306	0,200	85,269
0,300	85,189	0,300	85,276

Tabela 94: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cru	uzamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			em um Ponto
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	85,344	0,001	85,341
0,005	85,344	0,005	85,339
0,010	85,344	0,010	85,341
0,050	85,343	0,050	85,343
0,100	85,332	0,100	85,291
0,200	85,265	0,200	85,309
0,300	85,277	0,300	85,117

### 5.2.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS E SEM O USO DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE

O maior valor de conversão atingido foi de 85,34% para um tamanho de população de 80, considerando uma taxa de cruzamento uniforme de 0,001, sem apresentar uma diferença significativa das variações feitas nas análises anteriores. A diferença com respeito às análises do modelo simplificado foi de 2,49%. Os resultados são apresentados nas Tabelas 95 e 96.

Tabela 95: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cr	uzamento=0,5	
Cruzamente	o Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	85,342	0,001	85,304
0,005	85,223	0,005	85,039
0,010	85,253	0,010	84,902
0,050	85,321	0,050	85,305
0,100	85,281	0,100	85,257
0,200	85,243	0,200	85,006
0,300	85,092	0,300	85,204

Tabela 96: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tamanho da População= 100			
	Taxa de cru	uzamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			em um Ponto
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão
0,001	85,308	0,001	84,932
0,005	85,199	0,005	85,207
0,010	85,338	0,010	85,289
0,050	85,215	0,050	85,276
0,100	85,255	0,100	85,316
0,200	85,314	0,200	85,246
0,300	85,090	0,300	85,074

### 5.2.7 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO A TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE SEM O USO DE BUSCA EM NICHOS

O valor de conversão atingido para esta análise foi de 85,344%, para todas as análises realizadas. Assim como, nos ensaios anteriores, a diferença é de 2,5%, quando comparado com as mesmas análises realizadas com o modelo simplificado, as Tabelas 97 e 98 apresentan os resultados para as variações na taxa de mutação uniforme.

Tabela 97: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 80			
	Taxa de cr	ruzamento=0,5	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			m um Ponto
Taxa de Mutação	Convorção	Taxa de Mutação	Convorção
de Uniforme	Conversao	Uniforme	Conversao
0,001	85,344	0,001	85,338
0,005	85,344	0,005	85,344
0,010	85,344	0,010	85,343
0,050	85,343	0,050	85,344
0,100	85,318	0,100	85,335
0,200	85,324	0,200	85,283

Tabela 98: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 100			
Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			em um Ponto
Taxa de Mutação	Convorção	Taxa de Mutação	Convorsão
de Uniforme	Conversao	Uniforme	Conversao
0,001	85,344	0,001	85,344
0,005	85,344	0,005	85,344
0,010	85,344	0,010	85,343
0,050	85,340	0,050	85,342
0,100	85,336	0,100	85,309
0,200	85,282	0,200	85,285

Das simulações realizadas, usando o modelo determinístico do processo, uma diminuição em 2,5 no valor de conversão obtida usando o modelo simplificado foi observada para todos os casos. A combinação final dos parâmetros do algoritmo genético tanto para os valores ótimos de conversão, quanto para o modelo simplificado e para o modelo determinístico são similares, considerando um tamanho de população de 80, taxa de cruzamento uniforme de 0,5 e uma taxa de mutação uniforme de 0,01.

A seguir serão apresentadas as análises do modelo determinístico sujeitas às restrições nas variáveis de decisão do processo.

# 5.3 ANÁLISE DO ALGORITMO GENÉTICO COM RESTRIÇÕES USANDO O MODELO DETERMINÍSTICO DO PROCESSO

Nesta seção, o problema de otimização composto pela função objetivo que pode ser um modelo simplificado ou o modelo determinístico do processo, as restrições de desigualdade, restrições de igualdade e os limites operacionais das variáveis é formulado e resolvido, usando a metodologia dos algorítmos genéticos. Segundo Sadeghbeigi (2000), o objetivo da proposta de otmização do processo de FCC é maximizar a velocidade de alimentação e/ou a conversão com o equipamento existente atingindo quantas restrições for possível como resposta a mudanças na qualidade da alimentação, condições no meio ambiente, ou demandas do mercado. A filosofia de operação da unidade e seus limites de operação aparentes servem para o estabelecimento das restrições da unidade.

Para maximizar os benefícios da unidade de conversão, esta deve ser operada contra ou no limite de todas suas restrições mecânicas e operacionais. Em outras palavras, ganhos incrementais para um acréscimo na alimentação pode estar representados em aumentos na conversão da alimentação, que no processo de estudo é denominada SEVERI e, mais especificamente, na maximização da gasolina e do GLP. A filosofia de operação da unidade e seus limites de operação aparentes, muitas vezes, ditam as restrições, os ganhos na operação de FCC são maximizados, quando a unidade é operada simultaneamente de acordo com diferentes restrições, as quais para o caso de estudo do conversor da unidade de FCC são estabelecidas nas seguintes variáveis de processo:

- Seção de pré-aquecimento da alimentação: temperatura da carga na entrada do riser (TFP);
- Reator- regenerador: vazão de carga de alimentação (RTF), abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV).

Uma vez definidas as variáveis que representam as restrições do processo, e a função objetivo, o problema de otimização é estabelecido. Para o caso da maximização da conversão usando o modelo determinístico do processo, o problema de otimização é apresentado na Equação 28.

Maximize SEVERISujeito às Equações do Modelo Determis.e às Restrições OperacionaisSEVERI  $\leq 90$ TFP  $\geq 219$ 7900  $\leq RTF \leq 10100$ 

Segundo Deb (2000), os métodos para o tratamento de restrições usados nos algoritimos clássicos de otimização podem ser classificados em dois grupos: (a) métodos genéricos,: não exploram a estrutura matemática das restrições, isto é, tratam restrições lineares, bem como restrições não-lineares; e b) métodos específicos: são aplicáveis apenas para um tipo específico de restrições.

Dentre os métodos genéricos mais populares, encontramos o método da função de penalidades, método dos multiplicadores de Lagrange, como também os métodos de busca complexa. Sua popularidade deve-se principalmente, por serem facilmente aplicados em qualquer problema, sem realizar muitas mudanças no algoritmo de otimização. Como os algortimos genéticos são métodos de busca genérica, muitas aplicações dos algoritmos genéticos têm feito uso do método da função de penalidades para abordar o problema de otimização com restrições.

Segundo Michalewicz e Schoenauer (1996), dentre as diferentes abordagens do método da função de penalidades, o método da função estática de penalidades é a aproximação mais robusta para ser aplicada no caso em estudo. Esses métodos sofisticados podem funcionar bem para alguns problemas. Porém, podem não funcionar para outras abordagens.

#### 5.3.1 MÉTODO DA FUNÇÃO DE PENALIDADES

De acordo com Deb (2010), no método da função de penalidades estática representado na Equação 29, o tratamento das restrições de desigualdade em problemas de minimização, a função de ajuste  $\vec{F(x)}$  é definida como a soma da função objetivo  $\vec{f(x)}$  e um termo de penalidade, que depende da violação da restrição  $(g_j(\vec{x}))^n$ :

$$F\left(\vec{x}\right) = f\left(\vec{x}\right) + \sum_{j=1}^{J} R_j \left(g_i\left(\vec{x}\right)\right)^n$$
 Eq. 29

O valor obsoluto do operando  $g_j(\vec{x})$  tem que de ser considerado quando o exponente n é a unidade, para o caso do operando negativo e zero quando não é negativo na minimização da função  $f(\vec{x})$ . O parâmetro  $R_j$  é o parâmetro de penalidade da j-ésima restrição de desigualdade. O propósito do parâmetro de penalidade  $R_j$  é fazer a violação da restrição  $g_j(\vec{x})$ , da mesma ordem de magnitude do valor da função objetivo  $f(\vec{x})$ . As restrições de igualdade são usualmente convertidas em restrições de desigualdade através da Equação 30, onde  $\delta$ é um valor positivo pequeno.

$$g_{k+j}\left(\vec{x}\right) \equiv \delta - \left|h_k\left(\vec{x}\right)\right| \ge 0$$
 Eq.30

Na aplicação do método da função de penalidades para o problema de otimização com restrições do modelo do conversor de FCC, foram estabelecidas quatro restrições: duas para o fluxo da alimentação, uma para a temperatura da alimentação e, uma para a conversão. Para reduzir o número de parâmetros de penalidades, as restrições foram normalizadas, dando como resultado um único parâmetro de penalidade R com um valor de 0,1. Para todas as avaliações realizadas nos parâmetros do algortimo genético, os valores de conversão nunca infringiram a restrição estabelecida. Já os valores da temperarura da alimentação e do fluxo de alimentação infringiam, para uma grande quantidade de indivíduos da população, em cada uma das gerações, às restrições estabelecidas. Na Figura 39 é apresentado um esquema da otimização com restrições, implementando a função de penalidades.



Figura 39: Esquem da otimização do processo de FCC usando a função de penalidades.

A seguir são apresentados os resultados das otimizações variando os parâmetros do algoritmo genético e seguindo a mesma metodologia dos items 5. 1 e 5.2.

# 5.3.2 RESULTADO DAS OTIMIZAÇÕES APLICANDO A METODOLOGIA DA FUNÇÃO DE PENALIDADES

As comparações nos resultados das conversões, no caso das otimizações com restrições foram feitas, em conjunto com os resultados das otimizações fazendo uso do modelo simplificado, resultados apresentados o item 5. 1 já que, para esses dois casos, foram obtidos os maiores valores de conversão.

# 5.3.2.1 ANÁLISE DO TAMANHO DA POPULAÇÃO E DAS TAXAS DE CRUZAMENTO NA CONVERSÃO DA ALIMENTAÇÃO

Os resultados para as variações nos parâmetros do algoritmo genético, considerando o modelo restrito são apresentados nas Tabelas 99 a 104.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100			
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme	
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26	
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)	
20	0,5	86,74	
40	0,5	87,20	
60	0,5	87,03	
80	0,5	87,25	
100	0,5	86,96	
Conversão sem Otimização	79, 1	82%	

Tabela 99: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,5.

P	3 3				
Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100					
Busca com nichos	Busca com nichos Elitismo Cruzamento Unifor				
Taxa de mutação Uniforme=0,01	a de mutação Taxa de mutação de iforme=0,01 arraste=0,02				
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,6	86,86			
40	0,6	87,14			
60	0,6	87,01			
80	0,6	86,68			
100	0,6	86,86			
Conversão sem Otimização	79, 182%				

Tabela 100: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

Tabela 101: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento uniforme de 0,7.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100				
Busca com nichos	Elitismo	Cruzamento Uniforme		
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26		
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)		
20	0,7	86,47		
40	0,7	86,03		
60	0,7	87,06		
80	0,7	87,17		
100	0,7	87,28		
Conversão sem Otimização	79, 182%			

O melhor valor de conversão na avalição do tamanho de população e taxa de cruzamento uniforme foi de 87,28%, para um tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento de 0,7, com uma diferença de 0,55%, a menos, quando comparado com o melhor valor obtido usando o modelo simplificado do processo. As tabelas 102, 103 e 104 apresentam os resultados usando a taxa de cruzamento em um ponto.

deterministico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um ponto de 0,5.					
Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100					
Busca com nichos	Elitismo Cruzamento em um pont				
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,5	85,56			
40	0,5	86,78			
60	0,5	87,01			
80	0,5	87,04			
100	0,5	87,04			
Conversão sem Otimização	79, 182%				

Tabela 102: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelodeterminístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um pontode 0,5.

Tabela 103: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelodeterminístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um pontode 0,6.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100					
Busca com nichos	Busca com nichos Elitismo Cruzamento em um po				
Taxa de mutação	Taxa de mutação de	Número de gerações=26			
Uniforme=0,01	arraste=0,02				
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,6	85,23			
40	0,6	86,75			
60	0,6	86,69			
80	0,6	87,17			
100	0,6	87,14			
Conversão sem Otimização	79, 182%				

<b>Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100</b>					
Busca com nichos	Cruzamento em um ponto				
Taxa de mutação Uniforme=0,01	Taxa de mutação de arraste=0,02	Número de gerações=26			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento	Conversão (SEVERI)			
20	0,7	86,26			
40	0,7	86,37			
60	0,7	87,03			
80	0,7	87,12			
100	0,7	87,18			
Conversão sem Otimização	79, 182%				

Tabela 104: Influência do tamanho populacional na conversão usando o modelo determinístico do processo com restrições e taxa de cruzamento em um ponto de 0,7.

O melhor valor de conversão na avaliação do tamanho da população e da taxa de cruzamento em um ponto foi de 87,18% para um tamanho de população de 100 e uma taxa de cruzamento de 0,7, com uma diferença de 0,657, a menos, quando comparada com o melhor valor obtido usando o modelo simplificado do processo. Dos resultados anteriores pode-se concluir que, os melhores valores de conversão são para tamanhos de população de 80 e 100, com taxas de cruzamento em um ponto entre 0,6 e 0,7.

# 5.3.2.2 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME E BUSCA EM NICHOS NA CONVERSÃO DA ALIMENTAÇÃO

Dos resultados apresentados nas Tabelas 105 a 108, o melhor valor de conversão na avaliação da taxa de mutação uniforme e busca em nichos foi de 87,22%, para um tamanho de população de 100, uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,6 e uma taxa de mutação uniforme de 0,001. Com uma diferença de 0,617, a menos, quando comparada com o melhor valor obtido com o modelo simplificado do processo.

Tabela 105: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80				
	Taxa de cruzamento $= 0,5$			
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	86,89	0,001	87,07	
0,01	87,25	0,01	87,04	
0,1	86,98	0,1	87,12	
0,2	86,78	0,2	86,92	

Tabela 106: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	87,19	0,001	87,16	
0,01	86,96	0,01	87,04	
0,1	87,00	0,1	87,08	
0,2	87,15	0,2	87,05	

Tabela 107: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80				
	Taxa de cru	izamento=0,6		
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	86,98	0,001	87,16	
0,01	86,68	0,01	87,17	
0,1	86,88	0,1	86,86	
0,2	86,27	0,2	87,04	

Tabela 108: Resultados das Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cruzamento=0,6			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	
0,001	86,97	0,001	87,22	
0,01	86,86	0,01	87,14	
0,1	86,81	0,1	87,21	
0,2	86,51	0,2	86,92	

# 5.3.2.3 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE COM BUSCA EM NICHOS

Nos resultados apresentados, o maior valor de conversão foi de 87,32%, para um tamanho de população de 80, uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5 e uma taxa de mutação de arraste de 0,3, apresentando uma dimunuição de 0,516, quando comparado com o resultado obtido usando o modelo simplificado do processo. Nas Tabelas 109 a 112 são apresentados os resultados das variações na taxa de mutação de arraste.

Tabela 109: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 80				
	Taxa de cruzamento = 0,5			
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação Arraste	Conversão	Taxa de Mutação de Arraste	Conversão	
0,001	86,86	0,001	87,22	
0,005	86,91	0,010	87,10	
0,010	87,03	0,100	87,07	
0,050	86,95	0,200	86,92	
0,100	87,18	0,300	87,32	

Tabela 110: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0, 001 e 0,2.

Tamanho da População= 100				
	Taxa de cruzamento=0,5			
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação	Convorção	Taxa de Mutação	Convorsão	
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversão	
0,001	87,26	0,001	86,79	
0,005	86,93	0,010	86,61	
0,010	86,95	0,100	86,92	
0,050	87,04	0,200	87,12	
0,100	86,92	0,300	87,19	

Tabela 111: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

	Tamanho da	a População= 80	
	Taxa de cr	ruzamento=0,6	
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto			
Taxa de Mutação do Arresto Conversão		ăo Taxa de Mutação	Conversão
0.001	86.88	0.001	86.69
0,005	87,06	0,010	87,28
0,010	87,14	0,100	87,09
0,050	87,04	0,200	87,21
0,100	87,09	0,300	87,08

Tabela 112: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,6. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2.

Tamanho da População= 100						
	Taxa de cru	izamento=0,6				
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto					
Taxa de Mutação Conversão		Taxa de Mutação	Conversão			
de Arraste		de Arraste				
0,001	87,05	0,001	87,23			
0,005	87,01	0,010	87,09			
0,010	86,99	0,100	87,20			
0,050	87,02	0,200	86,83			
0,100	87,16	0,300	87,19			

### 5.3.2.4 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE SEM BUSCA EM NICHOS

O melhor valor de conversão se manteve constante, para a maioria dos casos analisados, com um valor de 87,32%, com uma diminuição em 0,519, quando comparado com o mehor valor obtido usando modelos simplificados. Os resultados são apresentados nas Tabelas 113 e 114.

Tabela 113: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2 sem o uso de busca em nichos.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto				
Taxa de Mutação de Arraste	Conversão	Taxa de Mutação de Arraste	Conversão		
0,001	87,32	0,001	87,32		
0,005	87,32	0,010	87,32		
0,010	87,32	0,100	87,30		
0,050	87,32	0,200	87,30		
0,100	87,32	0,300	87,31		

Tabela 114: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação de arraste, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação de arraste variam entre 0,001 e 0,2 sem o uso de busca em nichos.

Tamanho da População= 100						
	Taxa de cr	uzamento=0,5				
Cruzament	Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto					
Taxa de Mutação Conversão		Taxa de Mutação	Convorção			
de Arraste	Conversao	de Arraste	Conversao			
0,001	87,32	0,001	87,32			
0,005	87,32	0,010	87,30			
0,010	87,32	0,100	87,32			
0,050	87,32	0,200	87,30			
0,100	87,32	0,300	87,32			

# 5.3.2.5 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME SEM O USO DA BUSCA EM NICHOS.

Para o caso em estudo, o melhor valor obtido da conversão foi de 87,32, com uma diminuição em 0,519, quando comparado com o mesmo caso usando o modelo simplificado do processo. Os valores das taxas de mutação uniforme, bem como aconteceu no caso do uso do modelo simplificado, foram baixos para os dois casos de tamanho da população analisados. Os resultados são apresentados nas Tabelas 115 e 116.

Tabela 115: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzamento	Uniforme	Cruzamento e	m um Ponto		
Taxa de Mutação de UniformeConversão		Taxa de Mutação Uniforme	Conversão		
0,001	87,32	0,001	87,10		
0,005	87,32	0,005	87,27		
0,010	87,32	0,010	87,29		
0,050	87,27	0,050	87,28		
0,100	87,20	0,100	87,08		
0,200	87,07	0,200	87,25		
0,300	86,96	0,300	87,01		

Tabela 116: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, uma taxa de mutação de arraste de 0,02 e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,1.

Tamanho da População= 100					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	em um Ponto		
Taxa de Mutação Uniforme Conversão		Taxa de Mutação Uniforme	Conversão		
0,001	87,32	0,001	87,30		
0,005	87,32	0,005	87,25		
0,010	87,32	0,010	87,31		
0,050	87,31	0,050	87,30		
0,100	87,23	0,100	87,30		
0,200	86,91	0,200	86,91		
0,300	87,17	0,300	87,14		

### 5.3.2.6 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA NA CONVERSÃO DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME COM BUSCA EM NICHOS SEM O USO DA TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE

O maior valor de conversão obtido foi de 87,26, para um tamanho de população de 100 uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5 e uma taxa de mutação uniforme de 0,05. Quando comparado com os resultados obtidos usando o modelo simplificado do processo, o maior valor de conversão se manteve constante para os mesmos ensaios de taxa de mutação uniforme. Os resultados são apresentados nas Tabelas 117 e 118.

Tamanha da Danulação- 80							
	Taxa de cruzamento=0,5						
Cruzamento Uniforme Cruzamento em um Ponto							
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão				
0,001	87,03	0,001	86,88				
0,005	86,84	0,005	87,17				
0,010	87,21	0,010	86,90				
0,050	87,16	0,050	87,16				
0,100	87,01	0,100	86,85				
0,200	86,84	0,200	86,84				
0,300	86,58	0,300	87,07				

Tabela 117: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tabela 118: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e uma taxa de cruzamento de 0,5. As taxas de mutação uniforme variam entre 0,001 e 0,05.

Tamanho da População= 100					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	em um Ponto		
Taxa de Mutação Uniforme	Conversão	Taxa de Mutação Uniforme	Conversão		
0,001	87,15	0,001	87,22		
0,005	86,90	0,005	87,14		
0,010	87,10	0,010	87,26		
0,050	86,83	0,050	87,26		
0,100	86,95	0,100	87,13		
0,200	87,13	0,200	86,83		
0,300	86,70	0,300	86,90		

# 5.3.2.7 ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA TAXA DE MUTAÇÃO UNIFORME NÃO UTILIZANDO A TAXA DE MUTAÇÃO DE ARRASTE NEM O OPERADOR DE BUSCA EM NICHOS.

Desconsiderando a mutação de arraste e a busca em nichos, o melhor valor de conversão foi de 87,32, com uma diferença a menos de 0, 519, quando comparado com os resultados obtidos com o modelo simplificado. Os resultados são apresentados nas Tabelas 119 e 120.

Tabela 119: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme, considerando um tamanho de população de 80, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 80					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzament	o Uniforme	Cruzamento e	em um Ponto		
Taxa de Mutação Conversão		Taxa de Mutação	Convoncão		
de Uniforme	Conversão	Uniforme	CUIVEISAU		
0,001	87,32	0,001	87,21		
0,005	87,32	0,005	87,31		
0,010	87,32	0,010	87,32		
0,050	87,30	0,050	87,26		
0,100	87,18	0,100	87,28		
0,200	87,02	0,200	87,11		

Tabela 120: Simulações para o cálculo da conversão variando a taxa de mutação uniforme considerando um tamanho de população de 100, sem o uso da taxa de mutação de arraste e busca em nichos.

Tamanho da População= 100					
	Taxa de cr	uzamento=0,5			
Cruzamento	Uniforme	Cruzamento en	m um Ponto		
Taxa de Mutação	Conversão	Conversão			
de Uniforme		Uniforme			
0,001	87,32	0,001	87,29		
0,005	87,32	0,005	87,31		
0,010	87,32	0,010	87,32		
0,050	87,27	0,050	87,24		
0,100	87,16	0,100	87,12		
0,200	87,15	0,200	87,20		

Considerando todas as análises realizadas com o modelo determinístico com restrições, o melhor resultado obtido através das simulações foi para um tamanho de população de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,3; uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5, para os quais se obtiveram valores de conversão de 87,32%.

O mesmo valor de conversão foi obtido para o caso onde era desconsiderada a busca em nichos e a taxa de mutação de arraste. Porém, para efeitos da pressão seletiva na evolução dos indivíduos através das gerações, será considerado o caso no qual se incluem estes parâmetros.

No próximo tópico, a técnica de otimização por programação quadrática sucessiva (SQP) será aplicada no modelo do processo de FCC. As avaliações serão feitas, considerando como função objetivo o modelo reduzido obtido através dos planejamentos de experimentos, o modelo determinístico, bem como o modelo determinístico com restrições. As comparações serão feitas com as análises realizadas com o algoritmo genético, tomando como ponto de partida o melhor valor obtido em cada análise. Da mesma forma, serão consideradas como estimativas iniciais os valores inicias do modelo do conversor, bem como o valor do ponto central do planejamento estrela apresentado na Tabela 43, no Capítulo 4, com a finalidade de ter pontos de comparação que não estejam sujeitos aos valores ótimos obtidos com o AG.

# 5.4 OTIMIZAÇÃO DA CONVERSÃO DO PROCESSO ATRAVÉS DA METODOLOGIA POR PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SUCESSSIVA (SQP)

As técnicas de otimização determinísticas são métodos de busca local que tratam o problema de otimização através de gradientes e outras operações matriciais que dependem do ponto de partida adotado. A programação matemática, que é um desses métodos de otimização, lida com os problemas de otimização, em conjunto com a identificação de um algorítmo que seja mais adequado para resolução do problema abordado. As características da função objetivo e das restrições influenciam as diferentes subdivisões desse método.

Dentro da programação matemática, encontramos a programação não-linear, cuja função objetivo ou algumas das restrições são consideradas como funções não-lineares das variáveis de projeto. Há uma divisão em problemas com ou sem retrições, e uni ou multidimensionais, onde a solução pode ser feita por uma grande variedade de métodos.

Podem-se considerar três categorias de métodos na programação não-linear:

1. Método de penalização e barreira;

- 2. Programação quadrática sequencial;
- 3. Gradiente reduzido generalizado.

A programação quadrática sequencial (SQP) é uma técnica que pode apresentar algumas dificuldades numéricas relacionadas à falta de continuidade das funções que são otimizadas ou de suas restrições, funções não-convexas, multimodalidade, necessidade de se trabalhar com valores discretos para as variáveis, existência de mínimos locais, entre outros. As limitações podem ocorrer devido ao aumento do número das variáveis de projeto envolvidas no problema, observando-se maior dificuldade na resolução e montagem do problema a ser solucionado. Podendo surgir funções descontínuas que apresentam convergência lenta, funções que apresentam muitos mínimos locais, onde os valores globais são dificilmente obtidos (Victorino de Souza, 2005).

A representação do problema de otimização é muito similar à representação para o algoritmo genético (Equação 28), com a diferença que é incluído o ponto viável ou possível  $x \in \theta$ . A representação do problema de otimização para o caso do método de SQP é apresentado na Equação 31.

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & f(x) \\ & hi(x) \ge 0 \\ \text{Sujeito} & a & hj(x) = 0 \\ & x_i^L \le x \le x_i^U \\ & x \in \theta \end{array}$$
 Eq. 31

Segundo Friedlander (1994), na programação , trata-se de minimizar uma função quadrática sujeita a restrições lineares de igualdade e/ou desigualdade, que consistem em resolver uma sequência de problemas de programação quadrática. Dada  $x^k$ , uma aproximação da solução da Equação 32 é associado ao seguinte problema de programação quadrática:

Minimizar 
$$q(d) \equiv \nabla^t f(x^k) d + \frac{1}{2} d^t Q^k d$$
  
Sujeita  $a h(x^k) + J_h^t(x^k) d = 0$   
Eq. 32

Pelas condições de otimalidade de segunda ordem, o ideal seria que  $Q^k$  fosse uma aproximação de  $\nabla_x^2 L(x^k, \lambda^k)$ , sendo  $\lambda^k$  uma estimativa dos multiplicadores de Lagrange associados a  $x^*$ .

Os métodos de programação quadrática sequencial têm a seguinte estrutura geral:

1. Dados  $x^k e \lambda^k$ , estimadores de  $x^* e \lambda^*$ , resolver a Eq. 31 determinando  $d_k e \lambda^{k+1}$ , onde  $\lambda^{k+1}$  é o vetor de multiplicadores de Lagrange associado à solução da Eq. 31;

2. Definir  $x^{k+1} = x^k + \alpha_k d_k$ , onde  $\alpha_k$  é escolhido de maneira a fazer decrescer uma "função de mérito" adequada;

3. Calcular  $Q^{k+1}$ , em geral, dependendo dos multiplicadores de Lagrage do sub-problema quadrático resolvido no passo 1.

A seguir, são apresentados os três casos onde o algoritmo de programação quadrática sequencial foi aplicado. O primeiro deles foi o uso do modelo simplificado da conversão (Equação 25) como função objetivo, depois foi usado o modelo determinístico do processo e, finalmente, foi usado como função objetivo o modelo determinístico do processo com restrições.

### 5.4.1 IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DE PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL (SQP) NO MODELO REDUZIDO DA CONVERSÃO DA ALIMENTAÇÃO

Neste tópico, o modelo simplificado obtido para a conversão do processo equação 25, obtido a partir dos valores codificados dos fatores estatisticamente significativos, desenvolvidos pela metodologia por superfície de resposta é usado como função objetivo. Devido ao fato da subroutina de otimização NCONF do FORTRAN, que representa o SQP, ser uma subroutina de minimização, a função que representa a severidade é modificada para assim transformá-la em uma função de maximização definida como CONVSQP.

$$CONVSQP = 1 / SEVERI$$

Como estimativa inicial da subroutina de otimização, serão considerados três pontos: a condição inicial de partida das variáveis: abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV) e a vazão de alimentação (RTF), consideradas no modelo de FCC e apresentadas em Moro (1992); o ponto central do planejamento estrela apresentado na Tabela 43, bem como o ponto ótimo obtido das otimizações com o algoritmo genético através do modelo simplificado. Esses valores são apresentados na Tabela 121.

Eq. 33

Estimativas Iniciais Valores Reais				Es Va	timativas Iniciai lores Codificado	s s
Variáveis	Ponto Inicial do Modelo de FCC	Ponto Central Planejamento Estrela	Ótimo obtido com AG	Ponto Inicial do Modelo de FCC	Ponto Central Planejamento Estrela	Ótimo obtido com AG
CTCV	0,82	0,67	0,91	0,6	0	0,96
RTF (m <sup>3</sup> /d)	8730	9000	7930,69	-0,25	0	-0,97

Tabela 121: Pontos de partida iniciais em valores reais e codificados.

,

Os resultados obtidos das simulações são apresentados na Tabela 122.

Otimização com o Ponto Inicial do Modelo de FCC			Otimização com o Ponto Central do Planejamento Estrela			Otimização com os valores obtidos do AG		valores G
CTCV	RTF	SEVERI	CTCV	RTF	SEVERI	CTCV	RTF	SEVERI
0,6	-0,25	78,41	0	0	69,16	0,96	-0,97	87,15
0,6	-0,25	78,41	3,45E-4	0	69,16	0,960	-0,97	87,15
0,6	-0,25	78,41	0	3,45E-4	69,16	0,96	-0,97	87,14
1	-1	87,84	1	-1	87,83	1	-1	87,84
1	-1	87,84	1	-1	87,84	1	-1	87,84
1	-1	87,84	1	-1	87,84	1	-1	87,84

Tabela 122: Valores ótimos dos três casos estudados.

Os valores das estimativas iniciais, para os três casos estudados, convergem nos mesmos valores de conversão, isto é, 87,84%. O melhor valor obtido usando algorítmo genético com o modelo simplificado foi de 87,84%, indicando que, fazendo uso exlusivamente do método estocástico, é suficiente para atingir o ótimo global no espaço de busca analisado. Também, vale destacar que, o tempo computacional para os dois casos estudados foi da ordem de segundos.

# 5.4.2 IMPLEMENTAÇÃO DO MÉTODO DE PROGRAMAÇÃO QUADRÁTICA SEQUENCIAL (SQP) AO MODELO DETERMINÍSTICO DO PROCESSO COM E SEM RESTRIÇÕES

Neste item, a conversão da alimentação foi maximizada. No entanto, para isso usou-se o modelo determinístico do craqueamento catalítico sem restrições, usando como estimativas iniciais os valores ótimos atingidos com o modelo determinístico com AG resultados apresentados no item 5. 2; bem como, o ponto inicial do modelo de processo e o ponto central do planejamento estrela apresentado na Tabela 43. Os resultados são apresentados na Tabela 123.
Otimização com o Ponto Inicial do Modelo de FCC			Otimização com o Ponto Central do Planejamento Estrela			Otimização com os valores obtidos do AG		
CTCV	RTF	SEVERI	CTCV	RTF	SEVERI	CTCV	RTF	SEVERI
0,82	8730	79,13	0,67	9000	72,79	0,9	7900	85,09
0,82	8730	79,14	0,67	9000	72,81	0,9	7900	85,10
0,82	8733	79,11	0,67	9003	72,77	0,9	7900	85,08
0,92	8729	80,75	0,92	8999	79,14	0,92	7900	85,34
0,92	8729	80,75	0,92	8999	79,14	0,92	7900	85,35
0,92	8733	80,73	0,92	9003	79,12	0,92	7900	85,33

Tabela 123: Otimização da conversão do processo usando o método de otimização SQP com o modelo determinístico do processo.

Nos três casos analisados, a conversão do processo diminuiu utilizando o método SQP com o modelo determinístico do processo, quando comparada com as análises usando o modelo simplificado. O melhor valor obtido usando o método SQP foi usando como estimativa inicial o valor ótimo com o algorítmo genético.

Os resultados da Tabela 123 indicam que, o uso da metodologia de otimização SPQ não melhorou o ponto ótimo obtido com o algoritmo genético. Isto porque o melhor valor obtido de conversão, usando o modelo determinístico com AG, assim como com SQP, foi de 85,34%.

O problema de otimização usando a metodologia de SQP com restrições usando o modelo determinístico é apresentado na Equação 34. Os resultados das otimizações são apresentados na Tabela 124.

Minimize CONVSQP Sujeito às Equações do Modelo Determis. e às Restrições Operacionais TFP ≥ 219

Eq. 34

A diferença do problema de otimização apresentado na Equação 28 para o caso do algoritmo genético com restrições está no fato de que o fluxo de alimentação (RTF) tem sido desconsiderado, já que a estimativa inicial do SQP para esta variável cai dentro das restrições consideradas para o AG, que caso consideradas para o SQP, eliminaria os melhores valores de conversão. Observando que os limites operacionais das variáveis foram mantidos constantes.

Tabela 124: Otimização da conversão do processo usando o método de otimização SQP com o modelo determinístico do processo com restrições.

Valores Ótimos das Variáveis de Resposta									
Otimizaçã do N	Otimização com o Ponto Inicial do Modelo de FCC Otimização com o Ponto Central do Planejamento Estrela			Ponto mento	Otimiza ob	ção com os v otidos do AG	alores		
CTCV	TFP	SEVERI	CTCV	TFP	SEVERI	CTCV	TFP	SEVERI	
0,82	215,0	79,4	0,67 230 74,8 0,9					87,3	

Com relação aos resultados obtidos, conclui-se que os valores ótimos obtidos com o método de SQP são bem próximos dos pontos ótimos obtidos com o AG, nas três estimativas iniciais consideradas. O problema de otimização com restrições depende das restrições impostas, e da estimativa inicial considerada. Valores inicias, dentro das restrições ativas no caso do SQP, são desconsiderados, conduzindo a valores baixos, quando comparados com os ótimos do AG. Igualmente, o esforço e o tempo computacional para os dois casos de estudo foram baixos, indicando que a metodologia com AG é suficiente para realizar as otimizações.

Os valores considerados como ótimos, no estágio de controle e otimização em tempo real, são os valores obtidos com o modelo determinístico junto com a metodologia de algoritmos genéticos com restrições, com os quais chegou-se a conversões na ordem de 87,32%. Os valores obtidos com o modelo reduzido, muito embora, tenham sido maiores, estão sujeitios a um grau de ajuste do modelo simplificado, bem como a um grau de confiança, como apresentado para os modelos obtidos no Capitulo 4.

No seguinte item, uma quinta abordagen foi estudada focada no impacto ambiental dos gases de combustão no regenerador, através da minimização das emissões de monóxido de carbono (CO), na fase densa do primeiro e segundo estágio de regeneração, ao mesmo tempo que se maximiza a conversão da alimentação.

## 5.5 APLICAÇÃO DO MÉTODO DE ALGORITMOS GENETICOS NA OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVO DO PROCESSO DE FCC

De acordo a Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (EPA), uma grande parte das refinarias no mundo tem cometido sérias violações contra a legislação ambiental, devido aos grandes volumes de emissões de gases no ar, assim como, provocando grandes deperdícios de sólidos e líquidos (Cheng *et al*, 1998). Essas regulamentações ambientais estão afetando o projeto e as operações do processo das novas unidades de FCC, além de ser a força motriz para reduzir a emissão de poluentes nos produtos da unidade craqueamento catalítico.

As considerações ambientais do processo de FCC estão relacionadas, principalmente, com as emissões no regenerador. O controle dessas emissões está direcionado aos poluentes regulamentados e compostos tóxicos no ar. Esses poluentes incluem: monóxido de carbono (CO), ozônio, óxidos de nitrogênio (NO, N<sub>2</sub>O), óxidos de enxofre (SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>) e particulados. As autoridades ambientais estabelecem um limite máximo para as emissões de CO na atmosfera de 500 ppm para as novas unidades de FCC, bem como para as unidades existentes (EPA, 2008).

O monóxido de carbono (CO) é o principal produto da combustão incompleta das reações de queima de coque na fase densa do regenerador. Este último é um leito fluidizado quente que tem como função queimar o coque depositado sob o catalisador durante as reações de craqueamento, as temperaturas típicas do regenerador variam entre 675-760°C. Os produtos de combustão e o catalisador são levados à parte superior do regenerador, denominada fase diluída, onde os ciclones separam o catalisador, que retorna ao leito denso. O catalisador quente, livre de coque, é enviado ao *riser*, que entra em contato com a alimentação, completando assim o ciclo.

A fração CO2/CO está relacionada às formas de regeneração, existindo atualmente duas linhas principais: a combustão parcial, onde parte do carbono é convertido em CO e a outra em CO2; e a combustão total, onde todo o carbono é convertido em CO2. Altas relações de CO2/CO caraterizam a combustão total e, baixas relações, caraterizam a combustão parcial.

Na combustão parcial, as temperaturas da fase densa variam entre 670 e 720°C, enquanto na combustão total as temperaturas podem atingir até 760°C. Isso faz com que o teor de carbono no catalisador regenerado seja mais baixo. No modelo de Moro (1992), as reações de combustão que estão presentes nos balanços de energia na fase densa do primeiro e segundo estágios de regeneração são:

1. Combustão do carbono:

A qual é a reação por excelência da combustão do coque. Ocorre na fase densa do regenerador, sendo bastante exotérmica e de média velocidade. Devido ao carbono ser o principal constituinte do coque, esta é a reação que mais contribui para a geração de calor.

2. Combustão do monóxido de carbono

$$CO+1/2 O2 \rightarrow CO2 -67,636 \text{ Kcal/mol}$$
 Eq. 36

Reação mais lenta, porém, altamente exotérmica. Depende muito do excesso de ar (oxigênio) injetado no regenerador, ocorrendo normalmente na fase diluída ou no interior dos ciclones. Apenas em casos excepcionais, quando se usa aditivos promotores de combustão, esta reação se passa na fase densa.

A combustão do monóxido de carbono é a principal responsável pelas excessivas elevações de temperatura ocorridas nas regiões superiores do regenerador.

Com a finalidade de se obter modelos simplificados para serem usados no problema de otimização multiobjetivo, planejamento de experimentos foram aplicados no modelo determinístico do FCC para, assim, obter as funções objetivo do fluxo de monóxido de carbono na fase densa do primeiro (CO<sub>A</sub>) e segundo (CO<sub>B</sub>) estágios de regeneração, em função das variáveis de entrada do modelo determinístico. A formulação do problema de

otimização multiobjetivo é apresentado na Equação 37, definido para maximizar a conversão da alimentação e minimizar o fluxo de monóxido de carbono na fase densa do primeiro e segundo estágio de regeneração, com os valores das variáveis independentes sujeitias a várias restrições.

MaximizeSEVERIMinimize
$$CO_A$$
Minimize $CO_B$ s.t. $0.42 \le CTCV \le 0.92$  $488.15 \le TFP \le 518.15$  $0.091 \le RTF \le 0.116$ 

Segundo Konoak *et al.* (2006), o método clássico para resolver problemas de otimização multiobjetivo se baseia na atribuição de um peso  $w_i$ , a cada função objetivo normalizada  $Z_i$ , transformando o problema de otimização multiobjetivo em um problema com uma única função escalar a otimizar apresentada na Equação 38.

$$Min \quad z = w_1 z_1(x) + w_2 z_2(x) + \dots + w_k z_k(x)$$
Eq. 38

onde  $z_i$  é a função objetivo normalizada  $z_i(x)$  e  $\sum w_i = 1$ . Esta é nomeada de aproximação *apriori* devido ao fato do usuário dar um valor aos pesos das funções.

Resolvendo o problema de otimização com a Equação 38, para um conjunto dado de pesos  $w = \{w_1, w_2 \dots w_k\}$  produz-se uma única solução. Se são necessárias múltiplas soluções, o problema de otimização deve ser resolvido várias vezes, com diferentes combinações dos pesos. A seguir, são apresentados os planejamentos fatoriais visando a obtenção das funções objetivo relacionadas à emissão de monóxido de carbono.

### 5.5.1 OBTENÇÃO DOS MODELOS SIMPLIFICADOS PARA A VAZÃO DE MONÓXIDO DE CARBONO NA FASE DENSA DO PRIMEIRO E SEGUNDO ESTAGIO DE REGENERAÇÃO

Para gerar as funções objetivo que relacionam as variáveis a serem maximizadas ou minimizadas (maximização da severidade e minimização das vazões de monóxido de carbono), junto com as variáveis de decisão, inicialmente, foi considerada a equação 25 como função objetivo da variável severidade. Para o caso das variáveis  $CO_A \ e \ CO_B \ e$  considerado um planejamento fatorial completo 2<sup>4</sup>, com o objetivo de identificar, quais das variáveis de entrada tem uma maior influência nas vazões de monixido de carbono. O planejamento fatorial é realizado devido a que não existiam modelos explícitos no modelo inical considerado que relacionassem as variáveis do problema de otimização.

As variáveis independentes consideradas no planejamento fatorial são: vazão de ar de regeneração (RAI), abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV), fluxo de alimentação (RTF) e temperatura de alimentação (TFP). Segundo o modelo de Moro *et al.* (1995), a vazão do ar para o segundo estágio de regeneração é mantida constante, logo, a variável manipulada é o fluxo de ar para o primeiro estágio denominado: RA1.

Os níveis dos fatores e os ensaios considerados são os mesmos apresentados nas Tabelas 32 e 33 do Capítulo 4. Os resultados do planejamento para as variáveis, fluxo de monóxido de carbono da fase densa do primeiro estágio de regeneração ( $CO_A$ ) e fluxo de monóxido de carbono da fase densa do segundo estágio de regeneração ( $CO_B$ ) são apresentdos na Tabela 125, as vazões são dadas em kmol/min.

Na Tabela 126, são apresentados os efeitos dos fatores da variável CO<sub>A</sub> junto com as interações entre os fatores. Os valores em negrito são os fatores estatisticamente significativos.

Rodadas	COA	COB
1	11,2	0,7
2	12,0	0,4
3	11,9	3
4	16,0	3,3
5	9,4	1,5
6	11,46	0,95
7	9,15	2,40
8	12,85	3,06
9	12,19	0,57
10	12,54	0,30
11	12,66	3,18
12	16,97	3,29
13	10,05	091
14	11,63	0,60
15	9,99	2,59
16	13.77	3.24

Tabela 125: Resultados do planejamento de experimentos

para o fluxo de monóxido de carbono no regenerador.

Tabela 126: Efeitos dos fatores para a vazão de monóxido de carbono do primeiro estágio de regeneração (CO1).

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	Pb
	Mean/Interc,	12,11000	0,103712	116,7653	0,000000
	(1) <b>RAI</b>	2,58500	0,207425	12,4624	0,000059
	(2)CTVC	1,60250	0,207425	7,7257	0,000580
	( <b>3</b> ) <b>RTF</b>	-2,14500	0,207425	-10,3411	0,000146
	(4) <b>TFP</b>	0,73000	0,207425	3,5193	0,016931
COA	1 by 2	1,38750	0,207425	6,6892	0,001129
	1 by 3	0,19500	0,207425	0,9401	0,390328
	1 by 4	-0,08000	0,207425	-0,3857	0,715596
	2 by 3	-0,79750	0,207425	-3,8448	0,012065
	2 by 4	0,14250	0,207425	0,6870	0,522644
	3 by 4	-0,08500	0,207425	-0,4098	0,698928

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%,

a Valor do coeficiente de regressão para o erro,

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

Na Figura 40, é apresentado o gráfico de Pareto para a variável de resposta  $CO_A$ . Segundo esse gráfico, as variáveis que têm maior efeito sobre a variável estudada são: o fluxo de ar (RAI), o fluxo de alimentação (RTF), abertura da válvula que controla o fluxo de catalisador regenerado (CTCV), como também o efeito de interação do conjunto de RAI com CTCV e de CTCV com RTF. A variável que apresenta menor efeito sobre  $CO_A$  é a temperatura de alimentação (TPF).

O efeito da variável RAI, quando passa do nível -1 para o nivel +1 é aumentar o fluxo do monóxido de carbono em 2,58%. O efeito de RTF é inverso sobre  $CO_A$ , quando esta variável passa do nível -1 a +1, dimimui o fluxo do  $CO_A$  em 2,14%. Já a variável CTCV tem um efeito direto no  $CO_A$ , quando se tem uma variação deste fator do nível -1 para o nível +1, o fluxo de  $CO_A$  aumenta em 1,6%. Esse mesmo efeito também pode ser observado para a interação entre as variáveis RAI junto com CTCV e TFP, que aumentam o fluxo de  $CO_A$  em 1,38% e 0,73%, respectivamente. Finalmente, encontramos o efeito inverso de CTCV junto com RTF, que diminui o fluxo de  $CO_A$  em 0,79%.



Estimativa Estandarizada dos Efeitos (Valor Absoluto)

Figura 40: Gráfico de pareto para a variável de resposta CO<sub>A</sub>.

A análise de variância ANOVA apresentada na Tabela 127 é avaliada com a finalidade de determinar o grau de ajuste dos dados ao modelo linear. Para isto, a média quadrática calculada pela tabela ANOVA, definida como  $MQ_R$ / MQr, tem que ser maior que a média quadrática tabelada, estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p, para o nível de confiança desejado.

O modelo para o caso do fluxo de monóxido de carbono da fase densa do primeiro estágio de regeneração se ajusta a um modelo linear, devido ao fato da média quadrática  $MQ_R/MQr$  calculada pela tabela ANOVA ser maior que, a média quadrática tabelada, estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p, para o nível de confiança desejado.

Fonte de variação	SQ	N° Graus de Liberdad	e MQ
Regressão	68,069100	10	6,8069
Resíduos	0,860500	5	0,1721
Falta de ajuste	-	-	-
Erro puro	0,860500	5	0,172
Total	68,929600	15	
% De Variação e	xplicada	0,9875	
% Máximo de variaç	ão explicada	0,9875	
	A	ANOVA TABE	LADO
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	39,	55206275 4,7	74

Tabela 127: Tabela ANOVA para CO<sub>A</sub>.

Na Tabela 128, são apresentados os coeficientes de regressão do modelo linear com um nível de confiança de 95%.

Fator	Coeficiente de regressão	Erro	t(1)	Р
Mean/Interc	12,8100	29,79795	0,42990	0,685168
(1) <b>RAI</b>	-0,0501	0,12178	-0,41119	0,697961
(2)CTVC	-28,0750	9,37241	-2,99549	0,030256
( <b>3</b> ) <b>RTF</b>	-0,0007	0,00200	-0,34346	0,745224
(4)TFP	0,0732	0,11621	0,62978	0,556494
1 by 2	0,1850	0,02766	6,68917	0,001129
1 by 3	0,0000	0,00001	0,94010	0,390328
1 by 4	-0,0002	0,00046	-0,38568	0,715596
2 by 3	-0,0015	0,00038	-3,84477	0,012065
2 by 4	0,0190	0,02766	0,68700	0,522644
3 by 4	-0,0000	0,00001	-0,40979	0,698928

Tabela 128: Coeficientes de regressão para o fluxo de monóxido de carbono no primeiro estágio de regeneração.

A equação 39 é usada na estimativa do fluxo do monóxido de carbono a partir dos valores reais dos fatores, o coeficiente de regressão da equação é  $R^2=0$ , 987. Cabe destacar que, para o caso da codificação real, todos os fatores devem ser incluídos no modelo simplificado para obter um valor preciso da variável CO<sub>A</sub>.

$$CO_{A} = 12,81 - 0,0501*RAI - 28,075*CTCV - 0,0007*RTF + 0,0732*TFP + 0,1850*(RAI*CTCV) +5,91E-6*(RAI*RTF) - 0,0002*(RAI*TFP) - 0,0015*(CTCV*RTF) Eq. 39 +0,0190*(CTCV*TFP) - 2,576E-6*(RTF*TFP)$$

A capacidade de predição da equação 39 é representada na Figura 41, cujos valores preditos pelo modelo reduzido para o cálculo de CO<sub>A</sub>, apresentados nesta figura, conferem com os valores determinados através do modelo determinístico.



Figura 41: Valores observados *versus* valores preditos para o fluxo de monóxido de carbono do primeiro estágio de regeneração.

Com o objetivo de conhecer como as variáveis com maior efeito e suas interações afetam a variável de resposta, é apresentada, na Figura 42, a superfície de resposta, que mostra o efeito em conjunto dos fatores RAI e RTF sobre  $CO_A$ .



Figura 42: Superfície de resposta para a variável CO1.

De acordo com a Figura 42, valores altos do fluxo de alimentação junto com valores baixos do fluxo de ar, diminuem a produção de monóxido de carbono na fase densa do primeiro estágio de regeneração.

Para o caso do fluxo de monóxido de carbono, na fase densa do segundo estágio de regeneração ( $CO_B$ ), nenhum dos fatores mostrou-se significativos. Quando o modelo linear é analisado para um nível de confiança de 95%. Esses resultados podem ser observados na Tabela 129, apresentada a seguir, que mostra que todos os valores do p-value dos fatores e das interações de segunda ordem são maiores do que 0,005.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	P <sup>b</sup>
	Mean/Interc,	7,5050	5,62318	1,33465	0,239537
	(1)RAI	-11,2250	11,24635	-0,99810	0,364052
	(2)CTVC	-8,9950	11,24635	-0,79981	0,460112
	(3)RTF	11,3250	11,24635	1,00699	0,360156
	(4)TFP	11,1825	11,24635	0,99432	0,365719
COB	1 by 2	11,6550	11,24635	1,03634	0,347542
	1 by 3	-11,1850	11,24635	-0,99454	0,365621
	1 by 4	-11,2525	11,24635	-1,00055	0,362977
	2 by 3	-11,6950	11,24635	-1,03989	0,346038
	2 by 4	-11,0475	11,24635	-0,98232	0,371055
	3 by 4	11,1975	11,24635	0,99566	0,365130

Tabela 129: Efeitos dos fatores para o fluxo de monóxido de carbono

do segundo estágio de regeneração.

Em busca da função objetivo, já que os dados não se ajustaram a um modelo linear, um planejamento estrela  $2^4$  foi testado para, assim, avaliar se os fatores se ajustam a um modelo quadrático. O planejamento é apresentado na Tabela 130.

Ensaio		Planej	amento Estrel	a 2**4		Fluxo de
	RAI	RA1	CTCV	$\mathbf{RTF}^{*}$	TFP	COB
1	201	180,5	0,42	7900	215	0,7
2	201	180,5	0,42	7900	245	0,6
3	201	180,5	0,42	10100	215	1,5
4	201	180,5	0,42	10100	245	0,9
5	201	180,5	0,92	7900	215	3,01
6	201	180,5	0,92	7900	245	3,18
7	201	180,5	0,92	10100	215	2,40
8	201	180,5	0,92	10100	245	2,59
9	231	210,5	0,42	7900	215	0,4
10	231	210,5	0,42	7900	245	0,30
11	231	210,5	0,42	10100	215	0,95
12	231	210,5	0,42	10100	245	0,60
13	231	210,5	0,92	7900	215	3,35
14	231	210,5	0,92	7900	245	3,29
15	231	210,5	0,92	10100	215	3,06
16	231	210,5	0,92	10100	245	3,24
17	186	165,5	0,67	9000	230	2,39
18	246	225,5	0,67	9000	230	1,79
19	216	195,5	0,17	9000	230	0,32
20	216	195,5	1,17	9000	230	3,16
21	216	195,5	0,67	6800	230	1,67
22	216	195,5	0,67	11200	230	2,40
23	216	195,5	0,67	9000	200	2,53
24	216	195,5	0,67	9000	260	2,68
25 (C)	216	195,5	0,67	9000	230	2,62
26 (C)	216	195,5	0,67	9000	230	2,62
27 (C)	216	195,5	0,67	9000	230	2,62

Tabela 130: Planejamento estrela para o fluxo de monóxido de carbono do segundo estágio de regeneração.

Na Figura 43, é apresentado o gráfico de Pareto para a variável de resposta  $CO_B$ . Nesse gráfico, as variáveis significativas são: o efeito linear da abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV), quando passa do nível -1 para o nível +1 o fluxo do  $CO_B$  aumenta em 1,98%; o efeito quadrático de CTCV, quando passa do nível -1 para o nível +1, o fluxo de CO<sub>B</sub> diminui em 0,52%, bem como o efeito quadrático do fluxo de alimentação, quando esta variável passa do nível -1 para o nível +1 o fluxo de CO<sub>B</sub> diminui em 0,37%; e finalmente, a interação dos efeitos lineares de CTCV(L) e RTF (L), quando a interação destas variáveis passa do nível -1 para o nível +1, o fluxo de CO<sub>B</sub> diminui em 0,44%.



Estimativa Estandarizada dos Efeitos (Valor Absoluto)

Figura 43: Gráfico de pareto para o fluxo de monóxido de carbono do segundo estágio de regeneração.

A Tabela 131 apresenta os efeitos dos fatores sobre  $CO_B$ . Cabe destacar que o fator que apresenta um maior efeito é a interação linear da variável RAI, seguido do efeito quadrático da variável CTCV e, do efeito da interação linear entre CTCV e RTF. Finalmente, encontra-se o efeito quadrático do fator RTF.

Variável	Fator	Efeito	Erro	t <sup>a</sup>	Pb
	Mean/Interc,	2,620000	0,220862	11,86263	0,000000
	(1)RAI (L)	-0,074167	0,156173	-0,47490	0,643384
	RAI (Q)	-0,344375	0,165646	-2,07898	0,059731
	(2)CTCV (L)	1,987500	0,156173	12,72629	0,000000
	CTCV (Q)	-0,519375	0,165646	-3,13545	0,008604
	(3)RTF (L)	0,155833	0,156173	0,99783	0,338060
	RTF (Q)	-0,371875	0,165646	-2,24500	0,044396
COB	(4)TFP (L)	-0,030833	0,156173	-0,19743	0,846795
	TFP (Q)	-0,086875	0,165646	-0,52446	0,609510
	1L by 2L	0,401250	0,191272	2,09780	0,057770
	1L by 3L	0,076250	0,191272	0,39865	0,697155
	1L by 4L	0,001250	0,191272	0,00654	0,994893
	2L by 3L	-0,436250	0,191272	-2,28079	0,041619
	2L by 4L	0,203750	0,191272	1,06524	0,307733
	3L by 4L	-0,061250	0,191272	-0,32022	0,754305

Tabela 131: Efeito dos fatores para o fluxo de monóxido de carbono no segundo estágio de regeneração.

\*Significância estatística para um nível de confiança de 95%,

a Valor do coeficiente de regressão para o erro,

b Probabilidade da significância, Se o nível de confiança é do 95 % o p- valor é 0,05.

A tabela ANOVA apresentada na Tabela 132 é usada para determinar o grau de ajuste do modelo quadrático que correlaciona os fatores estatisticamente significativos com a variável de resposta  $CO_B$ , para um nível de confiança de 95%. Nesta tabela, pode ser identificada a relação  $MQ_R/MQr$ , a qual é comparada com a média quadrática tabelada estimada a partir dos graus de liberdade p-1 e n-p, para assim determinar se o modelo é estatisticamente significativo.

Fonte de variação SQ		N° Graus de Liberdade	MQ	
Regressão	27,436392	14	1,9597	
Resíduos	1,756075	12	0,1463	
Falta de ajuste	-	-	-	
Erro puro	1,756075	12	0,146	
Total	29,192467	26		
% De Variaç	ão explicada	0,92	398	
% Máximo de va	riação explicada	0,93	398	
	AN	OVA	TABELADO	
MQ <sub>R</sub> /MQ <sub>r</sub>	13,39	174417	2,64	

Tabela 132: Tabela ANOVA do modelo quadrático para CO<sub>B</sub>.

De acordo com a tabela ANOVA apresentada, a interação entre os fatores e a variável de resposta se ajustam a um modelo quadrático, já que a média quadrática MQ<sub>R</sub>/MQ<sub>r</sub> calculada pela tabela ANOVA é maior que a média quadrática tabelada.

Na Tabela 133 são apresentados os coeficientes de regressão do modelo quadrático para um nível de confiança de 95%.

Fator	Coeficiente de regressão	Erro	t(12)	Р
Mean/Interc,	-52,2062	42,67606	-1,22331	0,244690
(1) RAI (L)	0,2708	0,19464	1,39153	0,189322
RAI (Q)	-0,0008	0,00037	-2,07898	0,059731
(2) CTCV (L)	-1,1230	8,82032	-0,12732	0,900796
CTCV (Q)	-4,1550	1,32517	-3,13545	0,008604
(3) RTF (L)	0,0033	0,00222	1,48570	0,163151
RTF (Q)	-0,0000	0,00000	-2,24500	0,044396
(4) TFP (L)	0,0857	0,20035	0,42765	0,676480
TFP (Q)	-0,0002	0,00037	-0,52446	0,609510
1L by 2L	0,0535	0,02550	2,09780	0,057770
1L by 3L	0,0000	0,00001	0,39865	0,697155
1L by 4L	0,0000	0,00043	0,00654	0,994893
2L by 3L	-0,0008	0,00035	-2,28079	0,041619
2L by 4L	0,0272	0,02550	1,06524	0,307733
3L by 4L	-0,0000	0,00001	-0,32022	0,754305

Tabela 133: Coeficientes de regressão do modelo quadrático de CO<sub>B</sub>

A Equação 40 pode ser usada na estimativa do fluxo de monóxido de carbono da fase densa do segundo estágio de regeneração ( $CO_B$ ), a partir dos valores reais dos fatores. O coeficiente de regressão da equação é  $R^2$ : 0,9398.

Devido aos fatores encontrarem-se em codificação real, todos eles devem ser incluídos no modelo para o cálculo do fluxo de monóxido de carbono.

 $CO_{B} = -52,2062 + 0,2708 * RAI - 0,0008 * RAI^{2} - 1,1230 * CTCV - 4,1550 * CTCV^{2} + 0,0033 * RTF - 1.537E - 07 * RTF^{2} + 0,0857 * TFP - 0,0002 * TFP^{2} - 1,53 * 10^{-7} * RTF^{2} + 0,0857 * TFP - 0,0002 * TFP^{2} + 0,0535 * RAI * CTCV + 2.310E - 06 * RAI * RTF + 2.777E - 06 * RAI * TFP - 0,0008 * CTCV * RTF + 0,0272 * CTCV * TFP - 1,856E - 6 * RTF * TFP E Eq. 40$ 

A capacidade de predição desta correlação é conferida através da Figura 44, que apresenta os valores preditos através do modelo reduzido *versus* os valores estimados com o modelo determinístico.



Figura 44: Valores observados *versus* valores preditos para o fluxo de monóxido de carbono do segundo estágio de regeneração.

Na Figura 45 é apresentada a superfície de resposta da interação das duas variáveis, com maior efeito sobre a variável de resposta CO<sub>B</sub>. Para obter valores baixos de fluxo do monóxido de carbono na fase densa do segundo estágio, baixos valores do fluxo de alimentação devem ser combinados com baixos valores de abertura da válvula de catalisador regenerado, minizando, assim, a contribuição dos gases efluentes por parte do segundo estágio de regeneração.



Figura 45: Superfície de resposta para a variável CO<sub>B</sub>.

As Equações 39 e 40 para o cálculo do fluxo de  $CO_A$  e  $CO_B$  obtidas através do *software* Statistica, serão usadas como função objetivo no problema de otimização multi-objetivo, que envolve a minimização do monóxido de carbono nos gases efluentes, e a simulatanea maximização da conversão da alimentação.

Na Tabela 134 são feitas as comparações dos valores do fluxo de monóxido de carbono, calculados a partir do modelo reduzido e, a partir do modelo determinístico para CO<sub>A</sub> e CO<sub>B</sub>, para cada um dos ensaios do planejamento fatorial.

	Planejamento fatorial: 2 <sup>4</sup>					COA	COB	CO <sub>A</sub> Red	CO <sub>B</sub> Red
Ensaio	RAI	RA1	CTCV	RTF	TFP			Kcu	Ncu
1	201	180,5	0,42	7900	215	11,2	0,7	11,0	1,0
2	231	210,5	0,42	7900	215	12,0	0,4	12,09	0,48
3	201	180,5	0,92	7900	215	11,9	3	11,88	2,85
4	231	210,5	0,92	7900	215	16,0	3,3	15,74	3,10
5	201	180,5	0,42	10100	215	9,4	1,5	9,52	1,61
6	231	210,5	0,42	10100	215	11,46	0,95	10,99	1,21
7	201	180,5	0,92	10100	215	9,15	2,40	8,80	2,56
8	231	210,5	0,92	10100	215	12,85	3,06	13,05	2,96
9	201	180,5	0,42	7900	245	12,19	0,57	11,76	0,86
10	231	210,5	0,42	7900	245	12,54	0,30	12,68	0,31
11	201	180,5	0,92	7900	245	12,66	3,18	12,92	3,08
12	231	210,5	0,92	7900	245	16,97	3,29	16,61	3,64
13	201	180,5	0,42	10100	245	10,05	091	10,10	1,31
14	231	210,5	0,42	10100	245	11,63	0,60	11,42	0,91
15	201	180,5	0,92	10100	245	9,99	2,59	9,67	2,67
16	231	210,5	0,92	10100	245	13,77	3,24	13,75	3,07

Tabela 134: Fluxo do monóxido de carbono nos dois estágios de regeneração para o modelo reduzido e para o modelo determinístico.

Na Tabela 134, destacam-se as variações que podem se apresentar nos cálculos dos fluxos de monóxido de carbono para o modelo simplificado, as quais têm como origem o ajuste das correlações apresentadas nas Equações 35 e 36. Porém, para o caso em estudo, essas variações são muito pequenas para serem consideradas nas otimizações.

## 5.5.2 OTMIMIZAÇÃO DOS PARÂMETROS DO ALGORITMO GENÉTICO E DOS PESOS DA FUNÇÃO DE OTIMIZAÇÃO MULTI-OBJETIVO

A seguir sera apresentada a otimização dos parâmetros do algorítmo genético para o problema de otimização multi-objetivo, tendo como finalidade a maximização da conversão e a minimização do fluxo de monóxido de carbono da fase densa do regenerador. A metodologia para a determinação da melhor combinação dos parâmetros do algoritmo genético é similar à apresentada nas análises anteriores.

Vale lembrar que, a conversão sem a otimização dos parâmetros do algoritmo genético é de 79,134%. Os melhores valores da análise do tamanho da população são apresentados nas Tabelas 135 e 136, com variações entre 20 e 100 do tamanho da população, considerando o cruzamento uniforme e os demais valores dos parâmetros do algorítmo genético fixados como valores sugeridos em Carrol (2010). Igualmente, as análises apresentam o conjunto de parâmetros, que junto ao tamanho de população, produzem valores altos de conversão e baixos do fluxo de CO.

O maior valor de conversão obtido foi de 78,3%, para um tamanho de população de 60, uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6, onde os valores dos fluxos de  $CO_A$  e  $CO_B$  são 10,4 e 2,8 kmol/min, respectivamente, com valores das constantes da função de otimização fixados 0,33.

Já as conversões considerando a taxa de cruzamento em um ponto foram menores, porém, também se aprasentou uma diminuição nos fluxos de monóxido de carbono, quando comparado com os dados não otmizados. Os resultados destas otimizações não são apresentados.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100								
Busca com nichos E			Elitismo	Cruzamento Uniforme				
Taxa de mutaça Uniforme=0,0	ão 1	Taxa de mutação de arraste=0,02		Número de gerações=26				
Tamanho da população	Taxa de cruzamento		Conversão (SEVERI)	FluxoCO <sub>A</sub>	Fluxo CO <sub>B</sub>			
20		0,6	76,1	9,5	2,6			
40		0,6	76,4	9,6	2,7			
60	0,6		78,3	10	2,8			
80	0,6		76,1	9,5	2,6			
100		0,6	76,1	9,5	2,6			
Conversão sem								
otimização dos			79, 1821%	)				
parâmetros (p/p %)								
Fluxo CO <sub>A</sub> sem								
otimização	10,37							
(kmol/min)								
Fluxo CO <sub>B</sub> sem								
otimização	2,70							
(kmol/min)								

Tabela 135: Influência do tamanho populacional no conversor de FCC com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

Tabela 136: Influência do tamanho populacional na conversão de FCC para uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,5.

Tamanho populacional 20, 40, 60, 80 e 100							
Busca com nichos E			Elitismo	Cruzamento Uniforme			
Taxa de mutaça Uniforme=0,0	ăo 1	Taxa de mutação de arraste=0,02		Número de gerações=26			
Tamanho da população	Taxa de cruzamento		Conversão (SEVERI)	FluxoCOA	Fluxo CO <sub>B</sub>		
20		0,5	76,6	9,7	2,7		
40		0,5	76,2	9,5	2,6		
60		0,5	75,2	9,3	2,6		
80	0,5		76,5	9,6	2,7		
100	0,5		76,1	9,5	2,6		
Conversão sem otimização dos parâmetros (p/p %)			79, 1821%	)			
Fluxo CO <sub>A</sub> sem otimização (kmol/min)	10,37						
Fluxo CO <sub>B</sub> sem otimização (kmol/min)			2,70				

A seguir são feitas variações nos pesos de cada umas das funções do problema de otimização multiobjetivo, com a finalidade de obter valores maiores de conversão, e consequente menores valores dos fluxos de CO, uma vez estimados estes pesos, o restante dos parâmetros do algorítmo genético são avaliados.

Nas Tabelas 137 e 138 são avaliados os pesos da função de otimização multiobjetivo para os melhores valores obtidos, considerando o tamanho da população e a taxa de cruzamento apresentados nas anteriores analises.

Tabela 137: Avaliação dos pesos da função de otimização multiobjetivo, considerando um tamanho da população de 60 e uma taxa de cruzamento de 0,6.

fSEVCONT	fCO <sub>A</sub>	fCO <sub>B</sub>	Conversão (SEVERI)	Fluxo CO <sub>A</sub>	Fluxo CO <sub>B</sub>
0,33	0,33	0,33	78,3	10	2,8
0,1	0,1	0,8	54,4	11,0	1,1
0,1	0,8	0,1	73,0	8,7	2,5
0,8	0,1	0,1	81,2	10,9	3,0

Tabela 138: Avaliação dos pesos da função de otimização multiobjetivo, considerando um tamanho da população de 60 e uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5.

fSEVCONT	fCO <sub>A</sub>	fCO <sub>B</sub>	Conversão (SEVERI)	Fluxo CO <sub>A</sub>	Fluxo CO <sub>B</sub>
0,33	0,33	0,33	75,2	9,3	2,6
0,1	0,1	0,8	54,1	11,0	1,1
0,1	0,8	0,1	72,7	8,7	2,5
0,8	0,1	0,1	81,7	11,0	3,0

De acordo com as tabelas apresentadas, para reduzir o fluxo de monóxido de carbono, mantendo valores altos de conversão, a combinação dos fatores da função de otimização multi-objetivo é 0,1 para a conversão (SEVCONT); 0,8 para o fluxo do monóxido de carbono da fase densa do primeiro estágio de regeneracao ( $fCO_A$ ); e 0,1 para o fluxo de monóxido de carbono da fase densa do segundo estágio de regeneracao ( $fCO_B$ ), para um tamanho de população de 60 e uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

Assim como foi apresentado nos items anteriores, a análise da influência da taxa de mutação e da busca em nichos foram levadas em consideração, inicialmente, para variações

nas taxas de mutação uniforme e de arraste com o uso ou não da busca em nichos. As variações na taxa de mutação serão entre 0,001 e 0,2, o tamanho da população será fixado em 60, com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6 e uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5.

Dentre as variações na taxa de mutação uniforme, os melhores valores de conversão e fluxo de monóxido de carbono são apresentados na Tabela 139. As avaliações foram feitas fixando a taxa de mutação de arraste em 0,02, fazendo uso do operador de busca em nichos, para cruzamento uniforme de 0,6 e cruzamento num ponto de 0,5.

Busca com nichos		Elitismo		Cruzamento Uniforme		
Taxa de cruzamento Uniforme=0,6		Taxa de mutação de arraste=0,02		Número de gerações=26		
Tamanho da população	Taxa mutação uniforme		Conversão (SEVERI)	FluxoCO <sub>A</sub>	Fluxo CO <sub>B</sub>	
60	0,001		72,5	8,6	2,5	
	0,01		73,0	8,7	2,5	
	0,1		73,1	8,8	2,5	
		0,2	73,3	8,8	2,6	
Conversão sem			70 18210			
Otimização (p/p %)	79, 1821%					
Fluxo CO <sub>A</sub> sem						
otimização	10,37					
(kmol/min)						
Fluxo CO <sub>B</sub> sem						
otimização	2,70					
(kmol/min)						

Tabela 139: Avaliação da taxa de cruzamento uniforme no problema de otimização multiobjetivo.

Dos resultados anteriores, concluiu-se que, os valores de conversão aumentam com o aumento na taxa de mutação uniforme, os valores de  $CO_B$  se mantiveram praticamente constantes para os dois casos de taxa de mutação e de cruzamento, o mesmo comportamento foi observado para o fluxo de  $CO_A$ . O maior valor de conversão para o caso de cruzamento uniforme foi de 73,3%, com um fluxo de 8,8 kmol/min para  $CO_A$  e de 2,6 kmol/min para  $CO_B$ . No caso de cruzamento em um ponto, a maior conversão foi de 72,9%, para um fluxo de  $CO_A$  de 8,7 kmol/min e 2,5 kmol/min para  $CO_B$  resultados não apresentados.

Na Tabela 140 são apresentados os resultados da taxa de mutação de arraste com variações entre 0,001 e 0,1, fixando a taxa de mutação uniforme em 0,2, que foi o valor para o qual se obtiveram os maiores valores da conversão e menores valores de monóxido de carbono com busca em nichos. Como no caso anterior, as avaliações foram feitas para um tamanho de população de 60, com uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6. Outras análises foram feitas, desconsiderando os operadores de busca em nichos, taxa de mutação uniforme e de arraste, sem apresentar bons resultados.

Busca com nichos		Elitismo		Cruzamento Uniforme			
Taxa de cruzamento Uniforme=0,6		Taxa de mutação uniforme=0,2		Número de gerações=26			
Tamanho da	Taxa mutação de		Conversão	Eluxo CO.	Eluxo CO-		
população	aı	raste	(SEVERI)	TIUXO COA	FIUXO COB		
	0	),001	72,8	8,7	2,5		
	0,005		73,0	8,8	2,5		
60	0,010		73,0	8,8	2,5		
	0,050		72,9	8,7	2,5		
	0,100		72,9	8,7	2,5		
Conversão sem	70, 182						
Otimização (p/p %)	79, 1621%						
Fluxo CO <sub>A</sub> sem							
otimização	10,37						
(kmol/min)							
Fluxo CO <sub>B</sub> sem							
otimização	2,70						
(kmol/min)							

Tabela 140: Variações na taxa de mutação de arraste para uma taxa de cruzamentouniforme de 0,6

Nas Figuras 46 e 47 é apresentado um resumo com os principais resultados obtidos para as variações nas taxas de cruzamento e mutação uniforme. Uma redução de 12,8% no fluxo de monóxido de carbono representado por  $CO_A$  e  $CO_B$ , com uma conversão de 73% foi atingida. Nas unidades de craqueamento catalítico, as conversões podem variar entre 70% e 85% (Abadie, 1997), mostrando que os resultados obtidos são compatíveis com os dados industriais. Uma combinação dos parâmetros do algoritmo genético de 60 no

tamanho da população, cruzamento uniforme de 0,6; mutação de arraste de 0,1; mutação uniforme de 0,2; 26 gerações com busca em nichos e elitismo produzem os fluxos mais baixos de CO com altas conversões, como pode ser observado a seguir na Figura 46.

Um tempo computacional de 10s, em um processador Intel Core2Quad 2,66 GHz, mostrou que os algoritmos genéticos, junto com o planejamento fatorial, são ferramentas muito úteis, em aplicações de otimização multi-objetivo baseados na metodologia da função de penalidades, com baixos tempos e cargas computacionais.



Figura 46: Efeito das Variações no Cruzamento Uniforme e do Tamanho da população na Conversão do Processo.

Na Figura 47, pode-se observar como altas conversões são atingidas para altos valores de taxa de mutação uniforme, considerando o operador de cruzamento uniforme. Esse operador se mostra mais efetivo, quando comparado com o operador de cruzamento em um ponto.



Figura 47: Efeito da taxa de mutação uniforme na conversão para fixando o cruzamento uniforme e em um ponto.

#### **5.6 CONCLUSÕES**

As otimizações prévias usando o algorítmo genético conjuntamente com o modelo simplificado da conversão da alimentação, fazendo variações no tamanho de população, bem como nas taxas de cruzamento uniforme e cruzamento em um ponto apresentaram valores em torno de 87,835%. Esse foi o valor máximo de conversão que se obteve, representando um aumento de 8,65%, com respeito à conversão do processo sem otimização. As duas combinações de parâmetros, para os quais se obteve valores altos na conversão, são: taxa de cruzamento uniforme de 0,5, e um tamanho de população de 60, bem como uma taxa de cruzamento em um ponto de 0,6 e um tamanho de população de 100, respectivamente.

A partir das análises prévias do tamanho de população e dos operadores de cruzamento, foram avaliadas as taxas de mutação uniforme e de arraste, e a busca em

nichos. Duas combinações de parâmetros foram essenciais para se obter os maiores valores de conversão: 1) tamanho de população de 80, taxa de cruzamento uniforme com um valor de 0,5; taxa de mutação uniforme 0,01, sem levar em consideração a taxa de mutação de arraste e a busca em nichos; e 2) tamanho de população 100, taxa de cruzamento em um ponto 0,5, taxa de mutação uniforme 0,01, sem levar em conideração a taxa de mutação de arraste e a busca em nichos. O número de gerações igual a 26, sugerido por Carrol (2010), foi apropriado para obter valores elevados de conversão, com os quais se obteve uma conversão de 87,839%.

Por meio do planejamento Plakett & Burman, conseguiu-se conferir a importância do parâmetro de busca em nichos, conforme observado no diagrama de Pareto apresentado na Figura 36. Esse parâmetro afeta inversamente a conversão. Igualmente, outros parâmetros mostraram ter importância significativa na busca de valores altos de conversão. Esses parâmetros são: elitismo e taxa de mutação de arraste, que afetam diretamente a conversão.

Conseguiu-se verificar a importância do estudo prévio dos parâmetros do algorítmo genético para o caso da otimização do modelo de conversor de craqueamento catalitico, já que pequenas variações podem afetar a obtenção do valor ótimo de conversão. O estudo dos parâmetros é realizado prévio às otimizações, para assim dar inicio às otimizações dos fatores do modelo do processo.

Através das simulações usando o modelo determinístico do processo, uma diminuição em 2,5 no valor de conversão obtido usando o modelo simplificado foi observada para todos os casos. A combinação final dos parâmetros do algorítmo genético para os valores ótimos de conversão, tanto para o modelo simplificado como para o modelo determinístico, são similares, considerando um tamanho de população de 80, taxa de cruzamento uniforme de 0,5 e uma taxa de mutação uniforme de 0,01. Os parâmetros de busca em nichos e taxa de mutação de arraste apresentam a mesma tendência como no caso do modelo simplificado confirmando os resultados obtidos no item 5. 1. 9.

A implementação do algoritmo genético para o caso do modelo determinístico com restrições, mostrou que o melhor resultado na conversão foi para um tamanho de população

de 80, uma taxa de mutação de arraste de 0,3; uma taxa de mutação uniforme de 0,01 e uma taxa de cruzamento num ponto de 0,5, para os quais se obtiveram valores de conversão de 87,32%, muito próximos dos valores obtidos considerando o modelo simplificado.

Do acoplamento da metodologia de otimização por programação quadrática sequencial com o modelo simplificado do processo, considerando as três estimativas iniciais diferentes, o valor de conversão atingido foi o mesmo com um valor de 87,84% indicando que o uso exclusivo do método estocástico é suficiente para atingir o ótimo global no espaço de busca analisado. Já a implementação da mesma metodologia de otimização ao modelo determinístico do processo sem restrições, mostrou que o melhor valor de conversão é obtido considerando como estimativa inicial o ótimo obtido com o algoritmo genético, junto com o modelo determinístico sem restrições, para o qual se obteve um valor de conversão de 85,33%.

Para o caso da avaliação do método de SQP com restrições, o melhor valor de conversão foi obtido, considerando como estimativa inicial o melhor valor obtido com o algoritmo genético com restrições, com o qual se obteve conversões na ordem de 87,3%, sem apresentar uma variação significativa, mostrando que o algoritmo genético com restrições é a melhor alternativa para otimizar a conversão do processo.

A avaliação da quinta abordagem, que considera a otimização multi-objetivo do processo dos tipos de modelos simplificados, foram obtidos para a determinação da vazão de monóxido de carbono da fase densa de regeneração, um modelo linear que representa a vazão de monóxido de carbono da fase densa do primeiro estágio de regeneração e um modelo quadrático que representa a vazão de monóxido de carbono da fase densa do segundo estágio de regeneração.

Os valores dos parâmetros da função de otimização multi-objetivo, os quais foram fixados na avaliação dos parâmetros do AG, são: 0,1 para a conversão; 0,8 para o fluxo do monóxido de carbono da fase densa do primeiro estágio de regeneração e 0,1 para o fluxo de monóxido de carbono da fase densa do segundo estágio de regeneração, para um tamanho de população de 60 e uma taxa de cruzamento uniforme de 0,6.

216

Uma combinação dos parâmetros do algoritmo genético de 60, no tamanho da população, cruzamento uniforme de 0,6; mutação de arraste de 0,1; mutação uniforme de 0,2; 26 gerações com busca em nichos e elitismo produzem os fluxos mais baixos de CO, com altas conversões.

Um tempo computacional de 10s em um processador Intel Core2Quad 2,66 GHz, mostrou que os algoritmos genéticos, junto com o planejamento fatorial, são ferramentais muito úteis em aplicações de otimização multiobjetivo baseados na metodologia da função de penalidades com baixos tempos e cargas computacionais.

No próximo capítulo, a análise dinâmica das variáveis de estado em malha aberta: conversão (SEVERI), temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (TD2), temperatura da fase diluída geral (TDG), temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração (TRG1), temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração (TRG2), temperatura de reação (TRX) frente a diferentes porcentagens de perturbação das variáveis manipuladas: abertura da válvula de catalisador regenerado (CTCV), fluxo de alimentação (RTF), temperatura da alimentação (TFP) e fluxo de alimentação do ar (RAI) no primeiro e segundo estágios de regeneração, é apresentada.

O objetivo foi estudar a sensibilidade do modelo do processo de craqueamento catalítico frente a perturbações degrau, a partir de um estado de equilíbrio, ou seja, sem ação dos controladores (malha aberta). Esse estudo faz parte de uma análise prévia para o controle e otimização em tempo real do processo, visando identificar as variáveis controladas, manipuladas, como também as possíveis perturbações, às quais o modelo do processo está submetido.

217

# CAPÍTULO 6 – ANÁLISE DINÂMICA EM MALHA ABERTA DO MODELO DE PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDIZADO

Para realizar a análise dinâmica em malha aberta das variáveis de estado, a partir da perturbação degrau das variáveis de entrada, garantindo que essas perturbações fossem feitas a partir do estacionário, inicialmente, é apresentada a análise dinâmica de cada uma das variáveis de estado representada pela variação com o tempo de primeira ordem da variável em estudo até atingir o estado estacionário. Após são estudadas as variações com o tempo frente a diferentes perturbações degrau das variáveis independentes do processo.

Esse tipo de análise é fundamental para definir as estruturas de controle e adotar o procedimento operacional que garanta um adequado funcionamento do conversor, determinando, quais variáveis devem ser escolhidas para serem controladas e/ou manipuladas, com a finalidade de manter ou alterar um determinado ponto de operação do reator. Da mesma forma, este tipo de análise permitiu identificar determinados tipos de comportamento das variáveis de estado, como a presença da resposta inversa, como também o aparecimento de uma relação não-linear entre as variáveis devido, principalmente, à complexidade das reações químicas envolvidas.

Antes de chegar à configuração do controle final, muitas questões devem ser respondidas baseadas no estudo da dinâmica do processo em malha aberta. Por exemplo, não é evidente se a temperatura do reator deve ser controlada pela vazão de catalisador regenerado ou pela vazão da carga, como pela temperatura da carga. Situação semelhante analogamente, para o controle da temperatura do regenerador.

O fenômeno da resposta inversa é o que causa maiores problemas para a implementação de uma malha de controle. A dinâmica do conversor de FCC é fortemente dependente da carga de catalisador e, consequentemente, da carga de coque. Essas variáveis têm uma forte influência no balanço de energia do regenerador, o que determina a carga energética de toda a unidade, pois a condição do *riser* a ser estabelecida, principalmente, depende da condição do regenerador.

219

As análises do estado estacionário inicial, representado pela variação das variáveis de estado com o tempo assim como as derivada de primeira ordem, para cada intervalo de tempo, até as variáveis não apresentarem mais variações são apresentadas nas Figuras 48 a 52. Igualmente pode se observar como todas as variáveis atingem o estado estacionário para um tempo de iteração de 2000 s.



Figura 48: Análise do estado estacionário inicial para a temperatura de reação.



Figura 49: Análise do estado estacionário para a temperatura da fase diluída geral.



Figura 50: Análise do estado estacionário da temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração.



Figura 51: Análise do estado estacionário da fase densa do segundo estágio de regeneração.



Figura 52: Análise do estado estacioário da fase diluida do segundo estágio de regeneração.

A seguir é apresentada a análise da dinâmica em malha aberta das variáveis de estado, para diferentes perturbações degrau das variáveis de entrada do modelo realizadas no tempo de 2000s. Isto é, a partir de um estado estacionário.

## 6.1 EFEITO DO FLUXO DE CATALISADOR REGENERADO NA DINÂMICA DO CONVERSOR DE FCC

Nas Figuras 53 a 58 são apresentadas as respostas das perturbações degrau em +/-5% e +/-20% da variável abertura da válvula do fluxo de catalisador regenerado (CTCV), que controla o mesmo fluxo. Na Figura 53 é apresentada a análise da temperatura de reação (TRX).


Figura 53: Temperatura de saída do *riser* para diferentes perturbações do fluxo de catalisador regeneredo.

Quando a unidade de FCC é perturbada fazendo mudanças na velocidade de circulação de catalisador, o efeito global é de alterar os balanços de energia em ambos os reatores, *riser* e regenerador. Essa situação se apresenta porque o catalisador sólido é um veículo para a transferência de energia entre os dois reatores. Sendo assim, uma redução na circulação de catalisador incrementa a carga energética no regenerador, resultando em uma maior quantidade de energia fornecida pela queima do coque na superfície do catalisador disponível para aumentar as reações de craqueamento. Dessa maneira, se a produção de coque é o suficientemente grande, o regenerador depois da perturbação é aquecido. Simultaneamente, para o *riser*, uma redução na circulação de catalisador se manifesta como uma menor quantidade de energia fornecida, porém, essa situação muda quando o catalisador começa a aquecer, devido às mudanças de temperatura no regenerador, compensando o primeiro efeito. Assim, alguns minutos depois que a perturbação foi aplicada, se apresenta uma mudança global no desempenho do regenerador, situação que pode dar como resultado, a resposta inversa como é apresentado na Figura 49. Igualmente,

é observado um comportamento altamente não-linear, com uma alta sensibilidade da temperatura de reação frente à perturbações da vazão de catalisador regenerado.

No caso do incremento na vazão de circulação de catalisador, este produz um incremento na quantidade de energia fluindo entre o reator e o regenerador, porém a carga energética no regenerador é proporcionalmente diminuída com o tempo de residência do catalisador. Como resultado, existe uma pequena quantidade de energia específica disponível para promover as reações no regenerador, ao mesmo tempo em que no *riser* se tem um fluxo maior de energia que é uma situação que melhora a vaporização do gasóleo, e as condições de reação, esfriando o catalisador.

Nas Figuras 54 a 57 são apresentadas as análises das temperaturas do regenerador tanto nas fases diluídas como nas fases densas. As respostas são não-lineares frente à perturbaçoes na vazão de catalisador regenerado apresentando-se um aumento para variações negativas, devido ao incremento na carga energética do regenerador. Essas temperaturas são influênciadas por três principais fatores: quantidade de coque gerado, vazão de ar de combustão injetado e circulação de catalisador. Também pode ser verificado nas Figuras 56 e 57 que, o conversor trabalha no modo de conversão parcial, já que as temperaturas se encontram na faixa entre os 670-720°C (Abadie, 1997).

Na Figura 58 é apresentado o comportamento da conversão do processo que se vê favorecida para perturbações positivas no fluxo do catalisador regenerado e diminuída para perturbações degrau negativas.



Figura 54: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de catalisador regenerado.



Figura 55: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de catalisador regeneredo.



Figura 56: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes perturbações de catalisador regenerado.



Figura 57: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações de catalisador regenerado.



Figura 58: Conversão para diferentes perturbações do fluxo de catalisador regenerado.

## 6.2 EFEITO DO FLUXO DA ALIMENTAÇÃO NA DINÂMICA DO CONVERSOR DE FCC

A vazão de carga fresca é uma variável independente, que influência bastante uma outra variável dependente: o tempo de contato, que, por sua vez, é definido como o tempo efetivo em que ocorre o contato entre a carga de hidrocarbonetos injetados na base do *riser* e o catalisador que vem do regenerador. O tempo de contato depende basicamente da vazão volumétrica da carga e de outros fluidos injetados no *riser*.

Nas Figuras 59 a 64 pode-se observar o comportamento não-linear das variáveis de saída frente a perturbações degrau na vazão de alimentação. Uma variação negativa no fluxo de alimentação causará maior severidade operacional e, por conseguinte, maior conversão, maior produção de gás combustível, maior produção de gás liquefeito, maior produção de nafta, maior produção de coque, maior necessidade de ar para combustão, menor produção de óleos leve e decantado, assim como maiores temperaturas nas fase

densa do regenerador. Alguns destes comportamentos podem ser observados nas figuras apresentadas a seguir:



Figura 59: Temperatura de saída do *riser* para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.



Figura 60: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.



Figura 61: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.



Figura 62: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.



Figura 63: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.



Figura 64: Conversão para diferentes perturbações do fluxo de alimentação.

# 6.3 EFEITO DO FLUXO DE ALIMENTAÇÃO DO AR NA DINÂMICA DO CONVERSOR DE FCC

A vazão de ar para combustão depende somente da quantidade de coque gerado no *riser*, modificações na vazão de ar afetam o balanço de energia da unidade, já que o ar se encontra a uma temperatura mais baixa, quando comparada com a temperatura no regenerador. Além do que, a capacidade calorífica dos gases serem mais baixa que a dos sólidos. As respostas a perturbações degrau na vazão de ar são apresentadas nas Figuras 65 a 70.

A resposta do sistema a um incremento no fornecimento de ar é um incremento nas temperaturas do regenerador, devido ao excesso de oxigênio nas reações de combustão. Igualmente, as temperaturas no *riser* serão afetadas seguindo a tendência das temperaturas do regenerador. Já uma diminuição na vazão de ar produz um acúmulo de coque no catalisador, resfriando este último com a subsequente diminuição das temperaturas no *riser* e na conversão da alimentação. A tendência das respostas é não-linear, com fortes variações para altas perturbações, como pode ser observado na Figura 65, no caso da temperatura de saída do *riser*.



Figura 65: Temperatura de saída do *riser* para diferentes perturbações do fluxo de alimentação de ar.



Figura 66: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação de ar.



Figura 67: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações do fluxo de alimentação de ar.



Figura 68: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação de ar.



Figura 69: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações do fluxo de alimentação de ar.



Figura 70: Conversão para diferentes perturbações do fluxo

de alimentação de ar.

# 6.4 EFEITO DA TEMPERATURA DE ALIMENTAÇÃO NA DINÂMICA DO CONVERSOR DO FCC

A temperatura da carga é uma das mais importantes variáveis operacionais do conversor. Ela é utilizada normalmente para acertar o balanço térmico e, em especial, a temperatura do regenerador. Para atingir uma determinada temperatura do *riser*, uma certa quantidade de energia tem que ser fornecida. Essa demanda de calor é fornecida, exclusivamente, por duas correntes energéticas: circulação de catalisador e temperatura da carga (admitindo constante sua vazão).

Portanto, em malha aberta, uma redução na temperatura da carga causa: diminuição na severidade das reações, e na produção de coque, como redução na temperatura da fase densa do regenerador. O efeito contrário pode ser observado, com o aumento da temperatura da carga, como pode ser observado através das Figuras 71 a 76. Assim como ocorreu nos casos anteriores, as respostas apresentam um comportamento não-lineal frente a perturbações degrau da vazão da alimentação.



Figura 71: Temperatura de saída do *riser* para diferentes perturbações da temperatura de alimentação.



Figura 72: Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações da temperatura de alimentação.



Figura 73: Temperatura da fase diluída geral para diferentes perturbações da temperatura de alimentação.



Figura 74: Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração para diferentes perturbações da temperatura de alimentação.



Figura 75: Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração para diferentes perturbações da temperatura de alimentação.



Figura 76: Conversão para diferentes perturbações da temperatura de alimentação

#### 6.5 CONCLUSÕES

Com relação aos resultados relacionados ao comportamento dinâmico da unidade de FCC, conclui-se que o modelo do conversor de craqueamento catalítico fluidizado conseguiu reproduzir as principais características dinâmicas do conversor de FCC, sendo de grande utilidade em estudos de controle e otimização em tempo real do processo. Igualmente, diferentes análises foram realizadas frente a perturbações degrau nas variáveis de entrada.

A temperatura de reação, que é a variável de maior importância no craqueamento catalítico, é a variável usada para o controle da conversão. A temperatura de reação ideal é aquela na qual se obtém a maior conversão possível. Essa temperatura pode ser alterada de duas maneiras distintas: através da vazão de catalisador regenerado (CTCV), ou através da temperatura da carga que chega a base do *riser*. A análise que apresentou um comportamento diferente do esperado foi a resposta dessa temperatura frente a perturbações degrau do fluxo de catalisador regenerado, efeito causado pela alteração dos balanços de energia, em ambos os reatores, *riser* e regenerador que é a causa da resposta inversa apresentada na Figura 53.

Devido à relação entre temperatura de reação (TRX) junto com vazão de catalisador regenerado apresentar resposta inversa, comportamento não desejado, para fins do controle do processo as variáveis escolhidas para continuar o estudo de controle e otimização em tempo real, junto com os dados dos valores otimizados da temperatura de reação obtidos no capitilo cinco, serão: a temperatura da alimentação (TFP) e a vazão de alimentação (RTF) cujas análises dinâmicas, em malha aberta foram apresentadas nas Figuras 59 e 71.

# CAPÍTULO 7. CONTROLE AVANÇADO E OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL DO CONVERSOR DE CRAQUEAMENTO CATALITICO FLUIDIZADO

Neste capítulo, são apresentados o controle e a integração em tempo real do conversor de FCC. Considerando que, o *setpoint*, que para o caso em estudo é a temperatura de saída do *riser* (TRX), é determinado através da maximização da conversão (SEVERI), usando a técnica dos algoritmos genéticos, resultados apresentados no Capítulo 5. Para o controle do conversor é empregado um controle preditivo baseado em modelo (*Model Predictive Control-MPC*). Denominado matriz dinâmica quadrática de controle (*Quadratic Dynamic Matrix Control-* QDMC) para sistemas mono-variaveis (SISO). A integração de processos em tempo real será feita através da estratégia de otimização em duas camadas, sendo apresentadas as funções objetivo do otimizador e do controlador, bem como a metodologia para resolver o problema de otimização, sendo implementados no modelo determinístico do conversor de FCC desenvolvido na liguagem de programação FORTRAN.

A unidade de FCC é um exemplo típico de um processo multivariável com restrições, onde vários controladores preditivos têm sido comercialmente aplicados apresentando excelentes resultados. Na maioria dos casos práticos, a operação viável do processo se encontra na interseção de várias restrições do processo, igualmente os controladores preditivos tem a capacidade de incluir restrições na formulação da lei de controle. Na abordagem da matriz dinâmica de controle (DMC), as restrições podem ser incluídas nas equações da predição do erro, onde o controlador calcula as variáveis manipuladas, que minimizam o erro através da técnica dos mínimos quadrados. Vale destacar que, somente restrições de igualdade podem ser incluídas nessa estratégia. O controlador identifica interativamente as restrições ativas, incluindo as respectivas equações na formulação do problema.

Na abordagem QDMC, denominada como a segunda geração do algorítmo de controle DMC, por pesquisadores da Shell (Garcia e Morshedi, 1986), o problema de controle é formulado como um problema de programação quadrática.

A função de custo é o quadrado da distância da trajetória predita à trajetória de refêrencia. Nesta abordagem, as retrições podem ser incluidas tanto nas variáveis manipuladas, como nas controladas (Moro *et al.* 1995).

### 7.1 IMPLEMENTAÇÃO DA ESTRATÉGIA DE CONTROLE AVANÇADO QDMC NA FORMA SISO

A modelagem do conversor de FCC é caracterizada por um grande número de variáveis com forte interação e não-linearidades. Apenas um número limitado de variáveis como temperatura, pressão e vazão podem ser facilmente medidas continuamente. As perturbações mais comuns no conversor estão relacionadas com a composição da carga, impurezas e qualidade do catalisador, as quais só podem ser determinadas em laboratório, dificultando a análise dinâmica e o controle do processo. Do mesmo modo o projeto e, por conseguinte, a configuração do conversor podem alterar significativamente a dinâmica do processo.

As informações relativas à dinâmica do processo foram apresentadas no Capítulo 6, destacando-se o comportamento da temperatura de saída do *riser* (TRX) frente a variações nas diferentes variáveis de entrada. A temperatura de reação é a variável de maior importância no craquemento catalítico e a mais usada para o controle da conversão. Essa variável pode ser alterada de três maneiras distintas: através da vazão de catalisador regenerado (CTCV), através da temperatura da carga que chega à base do *riser* (TFP), ou da vazão da carga (RTF). No estudo do controle da unidade de FCC apresentado neste capítulo, são analisadas variações da temperatura de reação frente a perturbações no fluxo de ar de regeneração.

As variáveis manipuladas consideradas são a temperatura da carga e a vazão de alimentação. Embora a vazão de alimentação nunca seja usada para controlar uma variável de estado e, sim, seja usada para controlar uma variável econômica, de forma ilustrativa, esta variável será considerada no estudo do controle do processo. Então, para a vazão de ar do regenerador perturbações em torno de 5% são levadas em consideração; já o *set-point* estará fixando em uma faixa de temperaturas de reação entre 550-570 °C, o valor desta variável no estado estacionário foi de 541,3 °C, resultados apresentados no Capítulo 6.

240

A partir do comportamento dinâmico do conversor, foi realizada a identificação dos parâmetros do modelo interno, junto com extensivas simulações, mantendo como objetivo localizar o melhor conjunto de parâmetros do controlador. A melhor combinação dos parâmetros, considerando a vazão de alimentação como variável manipulada foi: horizonte de convolução (NHCONV)=350, horizonte de controle (NHC)=1, horizonte mínimo de predição (NHPMIN)=1, horizonte máximo de predição (NHPMAX)=10 os valores do fator de supressão de movimento ( $\lambda$ ) e constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) foram 1 . Os parâmetros do modelo interno do controlador foram: A(1)=1, A(2)= -0,57, B(1)=0,2, para um tempo de amostragem de 2s. O comportamento da variável controlada e manipulada frente a perturbações na vazão de ar é apresentado nas Figuras 77 e 78.



Figura 77: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX), após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador.



Figura 78: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar do regenerador.



Figura 79: Comportamento da variável manipulada (Vazão de alimentação-RTF), após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado.

Na Figura 77, pode se observar o *overshoot* que apresenta a variável controlada, atingindo o *set-point* em um valor de temperatura de 561°C, em torno dos 2360s. Também pode-se observar que, a variável controlada atinge o *set-point*, 200 segundos após a variável manipulada atingir um novo estado estacionário. A Figura 79 mostra como a variável manipulada sai do estado estacionário em um valor de 8030 m<sup>3</sup>/s e, após uma mudança brusca, atinge um novo estado estacionário num valor de 8230 m<sup>3</sup>/s. Os resultados mostraram um bom desempenho do controlador QDMC para a estrutura de controle considerada.

Analogamente ao que foi feito para a vazão de alimentação, a identificação dos parâmetros do modelo interno foi realizada, desta vez, considerando a temperatura de alimentação (TFP) como variável manipulada. A melhor combinação dos parâmetros do controlador QDMC foi determinada através de extensivas simulações. A melhor combinação dos parâmetros foi: horizonte de convolução (NHCONV) = 350, horizonte de controle (NHC)=1, horizonte mínimo de predição(NHPMIN)=1, horizonte máximo de predição (NHPMAX)=10. Os parâmetros do modelo interno do controlador são: A(1)=1, A(2)= -0,2132, B(1)=0,407, para um tempo de amostragem de 2s. O comportamento da variável controlada frente a perturbações na vazão de ar é apresentado na Figura 80. Do mesmo modo, como foi feito no caso da vazão de alimentação, os limites máximo e mínimo da variável controlada e da manipulada são de grande importância no controlador QDMC, para o ajuste da variável controlada ao *set-point*.



Figura 80: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da alimentação com variável manipulada.



Figura 81: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada.



Figura 82: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP) após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado.

Na Figura 80, pode-se observar o *overshoot* que apresenta a variável controlada, atingindo o *set-point* em um valor de temperatura de 561°C, em torno dos 2764s, também observou-se como a variável manipulada apresenta uma forte variação para ajustar a variável controlada no *set-point* devido à baixa influência que tem sobre a temperatura de reação, quando comparada com a influência da vazão de alimentação. Esse comportamento pode ser observado no diagrama de pareto para TRX, apresentado na Figura 14.

A Figura 82 mostra que a variável manipulada sai do estado estacionário em um valor de 211,5°C e, após uma mudança brusca, atinge um novo estado estacionário em valor de 236,8°C. Os resultados mostraram um bom desempenho do controlador QDMC para a estrutura de controle considerada.

Com a finalidade de estudar melhor o comportamento do controlador, o valor do *set-point* foi mudado de 561°C para 551°C. Os resultados com a vazão de alimentação como variável manipulada são apresentados nas Figuras 83 a 85.



Figura 83: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador.



Figura 84: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a vazão de alimentação como variável manipulada.



Figura 85: Comportamento da variável manipulada (Vazão de alimentação-RTF) após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado.

Os parâmetros do controlador são os mesmos considerados nas Figuras 77 e 79, variando os limites superior e inferior do controlador, tanto para a variável manipulada como para a controlada, os quais se mostraram como parâmetros de grande importância na sintonização do controlador QDMC. Na Figura 83, pode-se observar como a temperatura de reação atinge o valor do *set-point* aos 2568 s para um valor de temperatura de 551,22 °C, apresentando uma diferença de 496s, após a variável manipulada atingir o estado estacionário, dos 8600 m<sup>3</sup>/d aos 2072s.

Nas Figuras 86 a 88, é apresentado o comportamento da temperatura de reação frente a variações da temperatura de alimentação, considerando o novo valor do *set-point*. Os parâmetros do controlador são os mesmos das Figuras 80 a 82, variando assim como no caso anterior, os limites da variável manipulada e controlada do controlador. Novamente, observa-se o overshoot na variável controlada, atingindo valores de 565,75 °C, aos 2138s para depois se estabilisar no valor do *set-point*. As respostas da variável controlada, manipulando a temperatura de alimentação são mais rápidas, quando comparada com a vazão de alimentação.



Figura 86: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da alimentação com variável manipulada.



Figura 87: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada.



Figura 88: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP), após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado.

As respostas da temperatura de alimentação apresentadas na Figura 88, mostram que, após uma forte variação, a temperatura se estabiliza em um valor de 217,93 °C. Percebe-se que, para valores menores no *set-point* da temperatura de reação, o controlador realiza variações menos fortes da variável manipulada, quando comparado com os resultados apresentados na Figura 80, por este motivo variações mais moderadas na temperatura de reação devem ser consideradas, quando a variável em estudo é a temperatura de alimentação. O controlador QDMC se mostrou eficiente frente a variações no *set-point* conseguindo conduzir rapidamente a variável controlada no seu novo estado estacionário.

Nas Figuras 89 a 92 é apresentada a análise dos parâmetros de controle: fator de supressão de movimento ( $\lambda$ ) e constante da trajetória de referência ( $\alpha$ ) para a malha de controle, temperatura de saída do riser (TRX) sendo esta a variavel controlada e a temperatura da alimentação (TFP) a variável manipulada. O valor do *set-point* foi estabelecido em 551°C. Pode-se observar nessas figuras como altos valores das constantes produzem menos oscilações na variável controlada e na variável manipulada, apresentando-se uma resposta mais suave quando comparada com os casos analisados anteriormente.

O fator de supressão de movimento é uma restrição sobre a ação de controle, quanto maior seu valor, menos enérgica será a ação de controle, dando estabilidade e diminuindo as oscilações da malha fechada. A constante da trajetória de referencia está relacionada com o comportamento imposto pela trajetória de referência. Para pequenos valores de  $\alpha$ , tem-se uma trajetória de referência menos suave, o que pode levar à sobre-elevações e ações de controle mais enérgica. Um aumento de  $\alpha$ , conduz a uma trajetória suave, permitindo menores oscilações na variável controlada, (Toledo, 1999).



Figura 89: Resposta da variavel controlada para variações no fator de supressão do movimento  $(\lambda)$ .



Figura 90: Resposta da variavel manipuldada para variações no fator de supressão do movimento ( $\lambda$ ).



Figura 91: Resposta da variável controlada para variações na constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) fixando o valor do fator de supressão de movimento  $\alpha$ =5.



Figura 92: Resposta da variável manipulada para variações na constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) fixando o valor do fator de supressão de movimento  $\alpha$ =5.

### 7.2 INTEGRAÇÃO DO PROCESSO EM TEMPO REAL ATRAVÉS DA ESTRATÉGIA DE OTIMIZAÇÃO EM DUAS CAMADAS

O controle operacional do conversor da unidade de craqueamento catalítico fluidizado é composto por dois níveis: o nível de otimização que é realizado "*off-line*", e cuja função é especificar a região de operação desejada limitada por um conjunto de restrições, estes resultados foram apresentados no Capítulo 5 e o nível de controle, ou regulação que mantém a operação próxima do estado estacionário desejado, com os resultados sendo apresentados na Seção 7,1.

Em Otimização em Tempo Real (*Real Time Optimization-RTO*), medidas do processo são usadas para atualizar os parâmetros do modelo do processo, em tempo real. O modelo utilizado é então usado na formulação de um problema de otimização dinâmico, que é resolvido sequencialmente. O sistema de controle resultante pode ser usado para atualizar trajetórias do sistema, em intervalos que permita a solução do problema de otimização dinâmico.

Em uma das várias aplicações, a estrutura de otimização em camadas hierárquicas, consiste de uma camada superior de otimização em tempo real e de uma camada inferior de controle usada para resolver a regulação da trajetória (Rezende, 2007).

Na estratégia de otimização em tempo real em duas camadas, a camada inferior é responsável pelo controle dinâmico, a camada superior determina os *set-points* ótimos das variáveis para o estado estacionário, e os envia para a camada inferior. Na estratégia de otimização em uma camada, o problema de controle é resolvido, simultaneamente, junto com o problema de otimização econômica.

Diferentes trabalhos tem sido publicados na literatura relacionados com a otimização em tempo real do processo de craqueamento catalítico fluidizado dentre os quais destaca-se o trabalho de Moro e Odloak (1995). Estes autores implementaram um algorítmo de controle em uma camada composto pela função de controle regulatório, junto com a função de otimização. A função de controle é baseada em uma estrutura de controle avançado DMC, que tem como objetivo levar as variáveis controladas para os *set-points* calculados, em cada tempo de amostragem, pela função de otimização. Uma otimização

econômica é levada em consideração através da resolução de um problema de programação linear, usando o algoritmo *simplex* como metodologia de otimização.

Restrições são impostas nos *set-points* e sobre os valores estimados das variáveis manipuladas. A estrutura de controle proposta é simulada para um conjunto particular de variáveis controladas e manipuladas do conversor de FCC, sendo que, os resultados indicam um bom potencial para sua aplicação em sistemas reais.

Outro trabalho de grande importância relacionado à otimização em tempo real do conversor de FCC foi o desenvolvido por Zanin *et al.* (2002), que comparou três metodologias de integração controle preditivo-otimização, bem como o modelamento dessas estratégias com a finalidade de evitar problemas de *offset*. As estratégias de otimização em duas camadas, otimização em uma camada com correção da variável manipulada e otimização em uma camada com correção na função econômica foram avaliadas. Devido ao fato da unidade industrial de FCC em estudo, ser altamente perturbada, a estratégia de otimização em uma camada, com correção nas variáveis manipuladas foi implementada. Os resultados da implementação dessta estrutura de otimização indicam que, o controlador otimizado, se encontra na capacidade de melhorar os benefícios econômicos, quando comparado com as práticas de operação convencionais. As simulações com a implementação da estratégia de otimização em uma camada apresentou respostas dinâmicas, rápidas e suaves.

No presente trabalho, o problema de controle é resolvido através do controlador preditivo baseado em modelo QDMC denvolvido por Toledo (1999), que foi modificado e adaptado na unidade de FCC, já o problema de otimização com restrições foi resolvido através dos algoritmos genéticos. Na estratégia de otimização em duas camadas, o ponto de operação ótimo é calculado pela camada de otimização e o resultado traduzido como *set-point* das variáveis controladas. Um esquema da estratégia de otimização proposta é apresentada na Figura 93.



Figura 93: Esquema de otimização em duas camadas modificado de Melo (2005).

A camada de otimização consistiu na maximização da conversão sujeito às restrições operacionais, usando a metodologia da função de penalidades resultados apresentados no Capítulo 5. A camada de otimização calcula os *set-points* da camada de controle, representados pelos valores ótimos das temperaturas de reação, como consequência da maximização da conversão (abordagem feedback). O problema de otimização foi resolvido, usando a metodologia de otimização global baseado na técnica dos algorítmos genéticos, os quais se mostraram eficientes na busca dos valores ótimos da temperatura de reação e dos valores ótimos das variáveis manipuladas, fluxo de catalisador regenerado (CTCV), vazão de alimentação (RTF) e temperatura de alimentação (TFP). O estado estacionário otimizado foi determinado a partir de perturbações na temperatura do ar de regeneração. A formulação do problema de otimização da camada superior é apresentado na Equação 41.

Maximize ConversãoSujeita a:Eq. do mod elo Rigoroso (Eq 1.1-1.15)e as restrições operacionaisEq. 41Conversão  $\leq 90$ TFP  $\geq 219$ 7900  $\leq RTF \leq 10100$ 

Segundo Sharma & Singh (2010), o algoritmo DMC pode ser formulado para manipular explicitamente as restrições através da programanção quadrática. A metodologia é conhecida como matriz dinâmica quadrática de controle (QDMC) como é apresentada na Equação 42.

$$\begin{split} & \underset{\Delta u_0, \Delta u_1, \Delta u_2, \dots}{\text{Min}} \Phi = \left(E - A\Delta u\right)^T \Gamma \left(E - A\Delta u\right) + \left(\Delta u\right)^T F^2 \Delta u \\ & Sujeita \quad a: \\ & u_{\min} \leq u_i \leq u_{\max}, i = 0, 1, \dots, N_c - 1 \quad \text{Restri}_{\tilde{c}\tilde{c}\tilde{e}\tilde{s}} \text{ sobre a var. manipulada} \\ & \Delta u_{\min} \leq \Delta u_i \leq \Delta u_{\max}, i = 0, 1, \dots, N_c - 1 \quad \text{Restri}_{\tilde{c}\tilde{c}\tilde{e}\tilde{s}} \text{ sobre os mov. de controle} \\ & y_{\min} \leq y_i \leq y_{\max}, i = 1, \dots, N_p \quad \text{Restri}_{\tilde{c}\tilde{c}\tilde{e}\tilde{s}} \text{ sobre as var. de processo} \end{split}$$

onde N<sub>P</sub>, N<sub>c</sub>,  $\Gamma$  e F são parâmetros de ajuste do controlador QDMC;  $\Gamma$  e F são a matriz de pesos e a matriz de supressão de movimentos, respectivamente;  $\Gamma$  penaliza o erro entre o *set-point* e a variável controlada e F, penaliza os movimentos de controle; N<sub>p</sub> e N<sub>c</sub> representam o horizonte de predição e de controle, respectivamente. Maiores detalhes no Anexo C.

Nas Figuras 94 e 96 são apresentados os resultados da otimização em tempo real em duas camadas da temperatura de reação do conversor de FCC. A variável manipulada escolhida é a temperatura da alimentação, já que, além da vazão de alimentação ser uma variável econômica ajustada previamente, a temperatura da alimentação é uma variável que pode ser ajustada facilmente pelo sistema de pré-aquecimento.



Figura 94: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador, considerando a temperatura da alimentação com variável manipulada.



Figura 95: Comportamento da conversão após uma perturbação de 5% na vazão de Ar de regeneração considerando a temperatura da alimentação como variável manipulada.



Figura 96: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP), após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado.

Dos resultados apresentados, pode-se observar que o *set-point* calculado pela camada de otimização foi de 595, 64 °C. Após um *overshoot* acentuado, que atingiu uma temperatura de 663,14 °C, o controlador conseguiu estabilizar a temperatura de reação, aos 3208 s. A variável manipulada atingiu um valor de 246,65°C, aos 3236 s. O tempo cumputacional gasto para realizar a otimização em tempo real foi de 3,46 min, em um processador Intel Core2Quad, 2,66 GHz.

Nas Figuras 97 e 98 os resultados das variáveis manipulada e controlada são apresentados considerando os melhores valores da constante da trajetória de referencia ( $\alpha$ ) e do fator de supressão de movimento ( $\lambda$ ). Pode-se observar que a resposta da temperatura de reação apresenta menos oscilações atingindo o valor do *set-point* em um menor tempo.


Figura 97: Comportamento da variável controlada (Temperatura de reação-TRX) após uma perturbação de 5% na vazão de ar do regenerador considerando a temperatura da alimentação com variavel manipulada fixando  $\lambda$ =5 e  $\alpha$ =0,7.



Figura 98: Comportamento da variável manipulada (Temperatura da alimentação-TFP) após uma perturbação de 5% na vazão de ar regenerado fixando  $\lambda$ =5 e  $\alpha$ =0,7.

### 7.3 CONCLUSÕES

A integração em tempo real se mostrou altamente dependente das características do modelo do processo, do método numérico na resolução do conjunto de equações diferenciais, e da técnica de otimização aplicada. Devido ao fato da técnica dos algoritmos genéticos estimar aleatoriamente o valor das variáveis de entrada do processo através das gerações, estas estimativas podem afetar a solução do sistema de equações diferenciais, conduzindo a regiões no espaço de busca que o método numérico não consegue convergir.

O contrador QDMC é fortemente dependende dos limites operacionais máximo e mínimo das variáveis manipulada e controlada no ajuste do processo ao *set-point* estabelecido pela camada de otimização, já que diversos ajustes tiveram que ser feitos nesses parâmetros, para as duas variáveis manipuladas consideradas, com o objetivo de atingir o valor esperado da variável controlada.

A escolha dos parâmetros do algorítmo genético com restrições apresentada no Capítulo 5 e aplicada na otimização em tempo real, é de grande importância no desempenho do otimizador em tempo real, já que pode conduzir a tempos e esforçõs computacionais que inviabilizam sua aplicação a nível industrial. Parâmetros como, o número de gerações, taxas de mutação uniforme e de arraste, bem como as taxas de cruzamento mostraram ter uma forte influência no desempenho do controle ótimo.

A escolha da temperatura da alimetação como variável manipulada mostrou um excelente desempenho no controle da temperatura de reação, já que conseguiu levar o processo para o novo estado estacionário, imposto pela camada de otimização em um tempo de 3208s.

260

# 8. CONCLUSÕES GERAIS E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

### **8.1 CONCLUSÕES GERAIS**

O modelo determinístico do conversor de craqueamento catalítico fluidizado apresentou características não-lineares com uma forte interação entre as variáveis. Este fato pode ser observado durante as simulações apresentadas no Capítulo 3, devido à grande dificuldade na convergência do modelo, frente a pequenas variações nas variáveis de entrada. Este fato também foi observado no Capítulo 7, na atualização dos parâmetros do modelo, uma vez realizadas a perturbação na vazão de ar no cálculo do ótimo através das gerações.

A metodologia de planejamento de experimento foi de grande utilidade na obtenção de modelos simplificados usados na otimização preliminar da conversão. Igualmente, foi de grande utilidade na análise de interação entre as variáveis, fornecendo grande ajuda no controle e otimização em tempo real do processo.

A técnica dos algorítmos genéticos se mostrou mais eficiente no cálculo do ótimo global quando comparada com a técnica de programação quadrática sequencial. O híbrido entre essas duas metodologias, não mostrou ganhos nos valores de conversão, o que leva à conclusão de que, o algoritmo genético por si só, leva ao ótimo global no espaço de busca.

Um estudo completo deve ser levado em consideração na escolha dos parâmetros do algorítmo genético, já que estes afetam significativamente o desempenho do otimizador em tempo real. Como foi visto, o número de gerações se mostrou como sendo um parâmetro com forte influência no tempo computacional, levando aproximadamente 3,46 min no cálculo do valor ótimo da conversão e, por conseguinte, da temperatura de reação.

A análise dinâmica das variáveis de saída do processo frente a perturbações degrau nas variáveis de entrada é de grande importância, uma vez que serve na escolha das variáveis manipuladas e controladas e, por conseguinte, na identificação dos parâmetros do modelo interno do controlador. Para os dois conjuntos de variáveis manipuladas e controladas, isto é, temperatura de reação (TRX)-vazão de alimentação (RTF), temperatura de reação (TRX)-temperatura de alimentação (TFP), foi possível identificar o conjunto de parâmetros do modelo interno, os quais influênciam fortemente os cálculos do controlador QDMC.

O controlador QDMC se mostrou eficiente no ajuste da temperatura de reação frente a perturbações na vazão de ar de regeneração com baixos tempos computacionais. Os limites nas restrições das variáveis manipuladas e controladas mostraram uma forte influência no ajuste das variáveis.

A técnica dos algoritmos genéticos, acoplada ao controlador QDMC, usados no controle em tempo real do conversor de craqueamento catalítico fluidizado, teve um desempenho satisfatório, com tempos e esforços computacionais razoáveis para implementação em nível industrial.

### 8.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Ao longo deste trabalho verificaram-se algumas oportunidades para aprimoramento da simulação desenvolvida, das otimizações e do controle e otimização em tempo real; algumas destas sugestões de trabalhos futuros são listadas a seguir.

Considerando-se a simulação da unidade de FCC, uma representação mais realista da cinética de craquemento pode ser feita, considerando dados indústriais para realizar a calibração da unidade de conversão, tomando como base dados da alimentação e dos produtos de craquamento. Nas simulações desenvolvidas, as calibrações foram feitas considerando parâmetros da base de dados do simulador Aspen HYSYS para um modelo de conversor do tipo *side by side* da UOP.

Igualmente, uma representação mais completa dos cortes de destilado do processo de destilação molecular de filme descendente no simulador de processos pode ser feita, através da inclusão do modelo do destilador molecular no simulador de processos, usando ferramentas como o *Custom Modeler* dos Aspen HYSYS ou interfase CAPE-OPEN.

Diversos modelos podem ser considerados como funções objetivo nas otimizações, usando a técnica dos algoritmos genéticos. Dentre esses modelos podem ser considerados funções econômicas com o objetivo de maximizar o lucro ou minimizar os custos, também podem ser consideradas diversas funções na tentativa de minimizar a emissão de gases de combustão como, por exemplo, a minimização da emissão de gases como SO<sub>2</sub>, SO<sub>3</sub>, NO, NO<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>O do regenerador ou a minimização do conteúdo de enxofre na gasolina de FCC. Para esses casos, as cinéticas de reção devem ser consideradas na modelagem do conversor.

Igualmente é de grande importância a geração de modelos simplificados quadráticos para serem avaliados junto com as técnicas de otimização quadrática e evolutiva com a finalidade de comparar os resultados obtidos com os modelos desenvolvidos no presente trabalho.

Outros tipo de algoritmos de otimização evolutiva podem ser avaliados na otmização do modelo de craqueamento catalítico com a finalidade de diminuir o tempo e a esforço computacional como, por exemplo, a programação evolutiva que usa a mutação como único operador diminuindo assim, as avaliações da função objetivo. Outra metodologia que pode ser avaliada são as estratégias evolutivas, nas quais o tamanho da população de progenitores e descendentes podem ser diferentes diminuindo assim, o número de indivíduos a serem avaliados na função objetivo.

Outras técnicas de otimização que também podem ser avaliadas são aquelas inpiradas na inteligência coletiva como a otimização por colonia de formigas (ACO) ou a otimização por enxame de partículas (PSO), que, usando uma menor quantidade de parâmetros quando comparadas com as técnicas evolutivas proporcionam soluções ótimas com baixos esforços e cargas computacionais.

Relacionado à otimização em tempo real do processo de craqueamento catalítico, a estratégia de otimização em uma camada poderia ser avaliada, essa estratégia apresenta a vantagem de assimilar rápidas mudanças nos objetivos econômicos, porém a sintonia *feed back* não é uma tarefa fácil por conta das oscilações provocadas pelas perturbações do processo. O desempenho da estratégia de otimização em uma camada poderia ser comparado com o desempenho em duas camadas desenvolvido neste trabalho, já que a

estratégia em duas camadas apresenta melhores resultados na ausência de perturbações e quando os objetivos econômicos não tem muita variação.

## **REFERÊNCIAS BIBLIOGRAFICAS**

ABADIE, E. Catalytic cracking. Petrobras, 1997.

ABADIE, E. **Curso de formação de operadores de refineria**. Curitiba: Centro Universitario Positivo, 2002.76p.

AGUILAR, R. A.; ANCHEYTA, J.; TREJO, F. Simulation and planning of a petroleum refinery based on carbon rejection process. **Fuel**, DOI:10,1016/j,fuel,2012,01,056, 2012.

ALI H. e ROHANI S. Dynamic Modeling and Simulation of a Riser-Type Fluid Catalytic Cracking Unit. **Chemical Engineering & Technology**, v.20, p.118-130, 1997.

Aspen Tech. Aspen HYSYS Refining CatCracker Operations guide, Burlington (MA), Version Number: 7,0, 2008.

BALLESTEROS HERNANDEZ, J. Estudo e caracterização de frações pesadas de petroleo obtidas de destilação molecular e definição das propriedades fisico-quimicas para a modelagem deste processo. 2009. 154 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

BARROS NETO, Benicio de; SCARMINIO, Ieda Spacino; BRUNS, Roy Edward. **Como fazer experimentos: pesquisa e desenvolvimento na ciencia e na industria**. Campinas, SP: UNICAMP, 2001. 401p.

BATISTELLA, Cesar Benedito. **Modelagem e simulação de destiladores moleculares de filme descendente e centrifugo**. 1996. 162p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

BATISTELLA, Cesar Benedito. Tecnologia da destilação molecular: da modelagem matematica a obtenção de dados experimentais aplicada a produtos de quimica fina.
1999. 201p. Tese (Doutorado em Engenharia Quimica) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP.

Carroll, D. L. **Carroll's FORTRAN Genetic Algorithm Driver**. Disponível em: <.http://cuaerospace.com/Carroll/ga.html>. Acesso em: Junho de 2010.

CASTRO, L. N. Fundamentals of natural computing: basic concepts algorithms and applications. Boca Raton, Fla,: Chapman and Hall/CRC, 2006. 662 p.

Short path distillation. In: Catálogo UIC GmbH. Disponível em:<HTTP: // WWW.uicgmbh.de/en/basics/short-path-distillation>. Acesso em: 23 de setembro de 2011.

CHENG, W.; KIM, G.; PETERS, A.; ZHAO, X.; RAJAGOPALAN, K.; ZIEBARTH, M.; PEREIRA, C. Environmental Fluid Catalytic Cracking Technology. **Catalysis Reviews**, v. 40, p. 39-79, 1998.

CORRIPIO, A. B. **Design and application of process control systems**. Research Triangle Park: ISA, 1998, 319p.

COSTA, C. B.; RIVERA, E. A.; REZENDE, M. C. A. F.; MACIEL, M. R. W. e FILHO, R. M. Prior detection of genetic algorithm significant parameters: Coupling factorial design technique to genetic algorithm. **Chemical Engneering Science**., v. 62, p. 4780 – 4801, 2007.

COSTA, C. B. B.; WOLF, M. R. e MACIEL, R. Factorial design technique applied to genetic algorithm parameters in a batch cooling crystallization optimization. **Computers and Chemical Engineering.**, v. 29, p. 2229-2241, 2005.

CUADROS, J. F.; FILHO, R. M.; MACIEL, M. R.; BATISTELLA, C. B. e MEDINA, L. C. Evaluation and application of the extended TBP curves in processing and refining of heavy oil fractions. Computer Aided Chemical Engineering, v.26, p.195 – 200, 2009.

DEB, K. An efficient constraint handling method for genetic algorithms. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. v. 186, p. 311-338, 2000.

EL-HARIRY, A. Residue Upgrading Schemes- A Comparative Analysis. Studies in surface science and catalyst. v.53, p. 129-163, 1989.

ERTHAL, R. H.; NEGRÃO, C. O. R.; ROSSI, L. F. **Modeling the Riser of a Fluid Catalytic Cracking Unit**. The 17<sup>th</sup> International Congress of Mechanical Engineering. COBEM 2003, São Paulo, 2003.

ERTHAL, R. H. Modelagem e Simulação Dinâmica de um Conversor de Craqueamento Catalítico. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica e de Materiais), CEFET, Curitiba, 2003.

FERNANDES, J. L.; VERSTRAETE, J. J.; PINHEIRO, C. I.; OLIVEIRA, N. M. e RIBEIRO, F. R. Dynamic modelling of an industrial R2R FCC unit. **Chemical Engineering Science**. v.62, p. 1184 – 1198, 2007.

FRIEDLANDER, A. Elementos de programação não-linear. Campinas, SP: Editora da UNICAMP, 1994. 123p.

GARCIA VASCONCELOS, Claudia Jovita. **Desenvolvimento de estratégias de integração de processos em tempo real aplicadas à produção de GLP**. 2006, 202p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.

GARCIA, C. E. e MORSHEDI A. M. Quadratic programming Solution of Dynamic Matrix Control (QDMC). Chemical Engineering Communications. v. 46, p.73-87, 1986.

267

GOULD, L. A.; EVANS, L. B. e KURIHARA, H. Optimal control of fluid catalytic cracking process. **Automatica**, v. 6, p. 695-703, 1970.

GOLDBERG, D. E. Genetic algorithms in search optimization and machine learning. Reading, Mass,: Addison-Wesley, 1989. 412 p.

GRAY, M. R. Upgrading petroleum residues and heavy oils. New York, N,Y: M, Dekker, 1994. 348p.

HAJABDOLLAHI, F.; RAFSANJANI, H. H.; HAJABDOLLAHI, Z. e HAMIDI, Y. Multiobjective optimization of pin fin to determine the optimal fin geometry using genetic algorithm. **Applied Mathematical Modlling**. v. 36. P. 244 – 254, 2012.

HAN I, S.; CHUNG, C. B. Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process, Part I: Process modeling. **Chemical Engineering Science**, v.56, p. 1951-1971, 2001a.

HAN, I, S.; CHUNG, C. B. Dynamic Modeling and Simulation of a Fluidized Catalytic Cracking Process, Part II: Property estimation and simulation. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 1973-1990, 2001.

HAN I.; RIGGS J. B. and CHUNG C. Modeling and optimization of a fluidized catalytic cracking process under full and partial combustion modes. **Chemical Engineering and Processing**. v. 43, p. 1063-1084, 2004.

HAN, I. and CHUNG, C. Dynamic modeling and simulation of a fluidized catalytic cracking process, Part I: Process modeling. **Chemical Engineering Science**. v. 56, p. 1951 – 1971, 2001.

HANGOS, K.; CAMERON, I. T. Process modelling and model analysis. San Diego: Academic Press. 2001. 543p.

HASAN, S. D.; MELO, D. N. e FILHO R. M. Simulation and response surface analysis for the optimization of a three-phase catalytic slurry reactor. **Chemical Engineering Process**, v. 44, p. 335 – 343, 2005.

KASAT, R. B. and GUPTA, S. K. Multi-objective optimization of an industrial fluidizedbed catalytic cracking unit (FCCU) using genetic algorithm (GA) with the jumping genes operator. **Computers and Chemical Engineering**. V. 27, p.1785 – 1800, 2003.

KONOAK, A.; COIT, D. W. and SMITH, A. E. Multi-objective optimization using genetic algorithms: A tutorial, Reliability Engineering and System Safety. v. 91, p. 992-1007, 2006.

LESTAGE, R.; POMERLEAU, A. and HODOUIN, D. Constrained Real-Time Optimization of a Grinding Circuit using Steady-State Linear Programming Supervisory Control. **Powder Technology**. v. 124, p.254-263, 2002.

LE PAGE, J.; CHATILA, S. G. e DAVIDSON, M. **Resid and heavy oil processing**. Paris: Technip, 1992. 179p.

LLANES, J. and MIRANDA, M. Use modeling to fine-tune cracking operations. **Hydrocarbon Processing**, v. 87, p. 123 – 132, 2009.

MACIEL, R. F.; BATISTA, L. M. F. and FUSCO M. A fast Fluidized Bed Reactor Industrial FCC Regenerator. **Chemical Engineering Science**. V.51, n. 10, p. 1807-1816, 1996.

MALAY, P,; MILNE, B. J. and ROHANI, S. The Modified Dynamic of a Riser Type Fluid Catalytic Unit. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**. V.77, p. 169-179, 1999.

MORO, L. F. L. and ODLOAK, D. Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters. Journal of Process Control. v. 5, p. 29 – 39,1995.

MARLIN, T. E. and HRYMAK, A. N. Real-time operations optimization of continuous processes. In: Chemical Process Control - V Conference, 1996.

MARTIGNONI, W. P. Desenvolvimento de Modelagem e Simulação de risers de FCC Modelo 1-D. Relatório PETROBRAS, 2000.

MATOUS, K.; LEPS, M.; ZEMAN, J. and SEJNOHA, M. Applying genetic algorithms to selected topics commonly encountered in engineering practice. Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering. v.190, p.1629-1650, 2000.

MAYA, R.; BOGLE, D. and LÓPEZ, F. Approach to the analysis of the dynamics of industrial FCC units. Journal of Process Control, v. 8, p. 89-100, 1998.

MELO, D. N. C. Estratégia de Otimização em Duas Camadas: Aplicação para Processos de Hidrogenação em Reatores Catalíticos Trifásicos. 2005. 174p. Tese (Doutorado em Engenharia Química)- Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2005.

MELO D. N.; COSTA C. B.; TOLEDO E. C.; MARIANO A. P.; WOLF M. R. and FILHO R. M. Optimization of a Three-Phase Catalytic Slurry Reactor Using Reduced Statistical Models. International Journal of Chemical Reactor Engineering.v.8, A62, 2010.

MICHALEWICZ, Z. and SCHOENAUER, M. Evolutionary algorithms for constrained parameter optimization problems. Evolutionary Computation. v. 4, p.1-32, 1996.

MORARI, M. and LEE, J. H. Model predictive control: Past, Present and Future. **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, p. 667-682, 1999.

270

MORO, L. F. L. **Desenvolvimento de um controlador preditivo multivariável para um conversor industrial de craqueamento catalítico**. 1992. 77 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Quimica) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 1992.

NASCIMENTO LIMA, Nadson Murilo. **Modelagem e controle hibrido preditivo por logica fuzzy de processos de polimerização**. 2006. 236p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.

PATAN, K. and KORBICZ, J. Fault detection in catalytic cracking converter by means of probability density approximation. **Engineering Applications of Artificial Intelligence**. v. 20, p. 912 – 923, 2007.

PENTEADO, J. C. Modelagem Dinâmica do Regenerador de uma Unidade de Craqueamento Catalítico. 2003. 133p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica e de Materiais), CEFET-PR, Curitiba, 2003.

PENTEADO, J.C.; NEGRÃO, C. O. R.; ROSSI, L. F. S. Modelagem de Regeneradores em Leito Fluidizado de Unidades FCC. In: 2º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo & Gás, Rio de Janeiro, 2003.

PEDROSA NETO, Pedro. Simulação e otimização da seção de fracionamento e recuperação de produtos da unidade de craqueamento catalitico fluido. 1994. 101p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 1994.

PLAZAS TOVAR, L. Modelagem e simulação doprocesso de destilação molecular centrifuga reativa: desenvolvimento, avaliação e aplicação para o "upgrading" de frações pesadas de petróleo. 2012. 442p. Tese (Doutorado em Engenharia Quimica) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2012.

RAGAIAH G. P. Stochastic global optimization: Tecniques and applications in chemical engineering. Singapore: World scientific publishing company, 2010. 705p.
RAO, C. V. and Rawlings, J. B. Linear programming and model predictive control. Journal of Process Control.v.10, p. 283-289, 2000.

REZENDE, Mylene Cristina Alves Ferreira. **Modelagem e otimização de processos para implmentação em tempo real**. 2007. 175 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2007.

ROCHA, E. Utilização de prototipo nacional de destilador molecular para caracterização de frações pesadas de petróleo. 2009. 101 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2009.

SANTOS, P. Extensão da curva de ponto de ebulição verdadeiro para petroleos pesados nacionais a través do processo de destilação molecular. 2005. 187p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 2005.

SADEGHBEIGI, R. Fluid catalytic cracking handbook: design, operation and troubleshooting of FCC facilities. 2nd ed. Houston, Texas: Gulf, 2000. 369p.

SEBORG, D, E.; EDGAR, T, F.; MELLICHAMP, D, A. **Process dynamics and control.** 2nd ed. Hoboken, N,J,: J, Wiley, 2004. 713p.

SHARMA N. and SINGH K. Quadratic Dynamic Matrix Controlo of Isopropyl Acetate Reactive Distillation Column. Proceedings of the World Congress on Engineering and Computer Science. v.2, San Francisco, USA, 2010.

SOUZA, J. A.; VARGAS, J.V.C.; ORDONEZ, J.C.; MARTIGNONI, W.P. and VON MEIEN, O. F. Thermodynamic optimization of fluidized catalytic cracking (FCC) units. **International Journal of Heat and Mass Transfer**. v. 54, p. 1187-1197, 2011.

TOLEDO, Eduardo Coselli Vasco de. **Modelagem, simulação e controle de reatores cataliticos de leito fixo**. 1999. 337p. Tese (doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química, Campinas, SP, 1999.

TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. T. and ODLOAK, D. R. One-Layer Real Time Optimization of LPG Production in the FCC Unit: Procedure, Advantages and Disadvantages. **Computers and Chemical Engineering**, v.22, p. 198, 1998.

ASHLAND OIL. Myers, G. D. Carbo- Metallic oil conversion. UNITED STATES PATENT 5442503. 13 Maio de 1982. Disponível em: <http://www.osti.gov/energycitations/product.biblio.jsp?osti\_id=5442503>. Acesso em: Fevereiro de 2099.

ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Regulatory Impact Analysis for the Petroleum Refineries. UNITED STATES PATENT EPA-452/R-08-002. Disponível em: < <a href="http://www.epa.gov/ttn/ecas/regdata/RIAs/finalpetroleumrefineriesnspsria43008.pdf">www.epa.gov/ttn/ecas/regdata/RIAs/finalpetroleumrefineriesnspsria43008.pdf</a>>. Acesso em : março de 2012.

VICTORINO DE SOUZA, Igor. Otimização de um reator industrial de produção de alcool ciclico utilizando algoritmos genéticos. 2005. 507p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2005.

VON ZUBEN, Fernando. Notas de aula da disciplina computação evolutiva. Programa de Pós-graduação no departamerto de engenharia da computação e automação industrial. Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2002.

WANG, Z.; YANG, B.; CHEN, C.; YUAN, J. and WANG, L. Modeling and optimization for the secondary reaction of FCC gasoline based on the fuzzy neural network and genetic algorithm. **Chemical Engineering Process**. v. 46, p. 175 – 180, 2007.

WANG, R.; LI, C.; HE, X. and CHEN, B. A Novel Close-loop Strategy for Integrating Process Operations of Fluidized Catalytic Cracking Unit with Production Planning Optimization. **Chinese Journal of Chemical Engineering**. v. 16, p. 909 – 915, 2008.

WINTER, A. Caracterização de frações ultra pesadas de petroleo nacional por meio do processo de destilação molecular. 2007. 116p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2007.

XIONG Q. and JUTAN A. Continuous optimization using a dynamic simplex method. **Chemical Engineering Science**. v.58, n.16, p 3817-3828, 2003.

ZANIN, A. C.; TVRZSKÁ DE GOUVÊA, M. and ODLOAK, D. Integrating real-time optimization into the model predictive controller of the FCC system. **Control Engineering Practice**. v.10, p. 819-831,2002.

ZHANG, Y. and FORBES, J. F. Extended design cost: A performance criterion for realtime optimization systems. **Computers and Chemical Engineering**. v.24, p.1829-1841, 2000.

ZUÑIGA LIÑAN, Lamia. **Modelagem e simulação do processo de destilação molecular e determinação experimental aplicado a residuos pesados de petróleos**. 2009, 325p, Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, 2009.

## ANEXO A

## <u>TÉCNICA DE PLANEJAMENTO DE EXPERIMENTOS E</u> <u>METODOLOGIA POR SUPERFICIE DE RESPOSTA</u>

Como um dos objetivos da pesquisa foi a aplicação da técnica de otimização heurística para mapear a possível região ótima de operação aplicada ao caso do conversor de uma unidade de FCC, é importante identificar uma metodologia apropriada para a adequada implementação desta técnica de otimização. Em Melo *et al.*(2010) a otimização em tempo real de um reator catalítico trifásico foi desenvolvida fazendo uso da abordagem de duas camadas, onde os passos básicos são descritos para integrar modelos reduzidos para a conversão do processo obtidos através da técnica de análise estatístico junto com a técnica de otimização por programação Quadrativa Sucessiva (SQP). Os passos básicos são descritos a seguir:

- Especificar todas as variáveis ou fatores que podem influenciar a resposta de interesse;
- Estabelecer o planejamento estatístico e executar as corridas computacionais correspondentes;
- 3. Calcular os efeitos dos fatores;
- Identificar os fatores significativos. Aqueles que serão as variáveis utilizadas no procedimento de otimização;
- 5. Gerar modelos simplificados;
- 6. Identificar regiões de operação viáveis.

Na Figura A.1 é apresentada uma descrição completa do procedimento de otimização fazendo uso da técnica de análise estatística adaptada de Melo *et al.* (2010), onde é possível identificar três níveis de rastreio diferentes de maneira a identificar o ponto de operação ótimo.

No primeiro nível, os fatores significativos são selecionados através da técnica de analise estatística; a seguir no seguinte nível, os fatores significativos são correlacionados e a região ótima de operação é identificada por meio das superfícies de resposta e, finalmente, a região ótima é explorada para identificar o ponto de operação ótimo usando algoritmos de otimização.



Figura A.1:Níveis de rastreio na pesquisa do ponto de operação ótimo fazendo uso do desenho fatorial, modificado de Melo *et al.* (2010).

Com relação ao primeiro e segundo níveis de rastreio na identificação do ponto de operação ótimo é importante destacar a metodologia implementada para identificar e correlacionar os fatores significativos nomeada de desenho fatorial que é um tipo de planejamento experimental. O planejamento experimental é um tipo de análise estatística do processo com a finalidade de organizar adequadamente um experimento para assegurar o tipo e a quantidade certa de dados para responder clara e eficientemente a uma dada pergunta de interesse baseado em técnicas estatísticas. O primeiro passo nesse tipo de análise estatística é identificar quais variáveis (fatores) e respostas que são de interesse. O segundo passo é definir o objetivo dos experimentos para assim escolher o planejamento de experimentos mais apropriado (Barros *et al.*, 2001).

Entre as diferentes metodologias de planejamento experimentais mais conhecidas encontramos o *simplex*, planejamento ou desenho fatorial e análise de superfície de resposta. O método *simplex* e suas derivações são mais convenientes para ensaios rápidos, como análise química, já que as condições experimentais nas quais deve ser realizado o

ensaio seguinte dependem da resposta do ensaio anterior. A análise de superfície de resposta tem como base o método de planejamento fatorial.

O planejamento fatorial é uma das técnicas de desenho de experimentos baseada em considerações estatísticas que traz as informações mais significativas acerca da influência dos fatores num problema específico, incluindo os efeitos de interação entra as variáveis. Essa técnica avalia, ao mesmo tempo, todas as variáveis do processo para identificar quais realmente influenciam a resposta final (Costa *et al.*, 2007). Os valores escolhidos para estudar os fatores são chamados de níveis, neste trabalho um desenho fatorial de dois níveis (nível -1 e nível +1) é usado para conhecer se certos fatores têm ou não influência na resposta escolhida. Na interpretação dos resultados gerados por um desenho fatorial completo é necessário decidir quais dos efeitos calculados são diferentes de zero. A prática usual é usar o conceito de significância estatística. Com os resultados obtidos do planejamento é possível calcular os efeitos principais e de interação das variáveis sobre as respostas, determinar quais são os efeitos mais significativos e ajustar empiricamente os dados a um modelo linear, correlacionando as variáveis e as respostas.

Dentre os diferentes tipos de planejamento experimental podemos ainda encontrar o Plackett-Burman (PB). Esta análise é útil para escolher os fatores mais importantes de uma lista de candidatos. Esse tipo de desenho requer poucas rodadas e é muito usado quando o pesquisador depara-se com um grande número de fatores e não tem certeza de quais configurações são suscetíveis de produzir ótimas respostas (Hasan *et al*.2004 ). Uma vez identificados os fatores significativos assim como a região de operação viável do modelo de FCC, uma metodologia apropriada de otimização pode ser aplicada com a finalidade de identificar os pontos de operação que maximizam/minimizam determinada função econômica, ambiental ou de processo.

Uma vez aplicada a metodologia de superfície de resposta para o mapeamento da região ótima de operação, assim como da identificação das variáveis com maior influência no processo de craqueamento catalítico fluidizado, foi abordado o problema de otimização operacional como apresentado na Figura A.1. Métodos estocásticos de otimização assim como métodos determinísticos foram aplicados em modelos reduzidos, obtidos no

278

planejamento fatorial e no modelo determinístico do conversor de FCC em busca do ótimo operacional do processo.

Diversos trabalhos tem sido publicados na literatura acerca da otimização do processo de FCC. Em Souza *et al.* (2011), a otimização termodinâmica do *riser* foi desenvolvida através da minimização da geração de entropia, isto é, a minimização da energia destruída no sistema. Esse estudo permitiu a determinação das condições operacionais ótimas para a máxima produção dos produtos, considerando o consumo de energia e as perdas térmicas no sistema. A maximização da rentabilidade de diferentes esquemas de refino é apresentada em Aguiar *et al.* (2012) através da otimização das variáveis operacionais de diferentes unidades de processo consideradas e do resíduo de vácuo enviado a cada uma dessas unidades. Os esquemas de refino considerados neste estudo foram: reformado catalítico, hidrotratamento, craqueamento catalítico, coqueamento retardado, viscorredução e gasificação. Em Han *et al.* (2004), a maximização do lucro do processo operado nos modos de combustão parcial e total foi levado em consideração através de algoritmos de programação quadrática sucessiva sujeito a um grande número de restrições operacionais. O sistema de otimização é composto por um modelo em estado estacionário do processo, um estimador de parâmetros e um otimizador do processo.

O problema de otimização do conversor de craqueamento catalítico fluidizado pode ser de maximização ou minimização de uma determinada função objetivo com respeito às variáveis de decisão. Por exemplo, a maximização da conversão da alimentação ou minimização da emissão de gases de combustão, os quais estão sujeitos às restrições do processo, limites operacionais das variáveis e o próprio modelo do processo. Igualmente, o problema de otimização pode ter um único ou múltiplos ótimos, um dos quais é o ótimo global e os outros são os ótimos locais.

O ótimo global para o caso de minimização é o menor valor da função objetivo no espaço de busca. Por outro lado, o mínimo local é o menor valor da função objetivo quando comparado com os pontos na vizinhança. Porém, este valor é menor quando comparado com o mínimo global. Além da necessidade de encontrar o ótimo global, o problema de otimização pode envolver dois ou mais objetivos conflitantes, o que transforma a busca em um problema de otimização multi-objetivo. Segundo Rangaiah (2010), os métodos de

otimização global podem ser divididos em dois grupos: determinísticos e estocásticos (ou probabilísticos). Os métodos determinísticos usam propriedades analíticas do problema de otimização, por exemplo, convexidade para gerar uma sequência determinística de pontos no espaço de busca que convergem em um ótimo que não necessariamente é o ótimo global. Esses métodos requerem algumas suposições para serem resolvidos: que a função objetivo seja contínua e diferenciável no espaço de busca e podem ser classificados em dois grupos, conforme as características da função objetivo e das restrições:

- Programação linear: quando a função objetivo e as restrições são funções lineares das variáveis de decisão. O método simplex é o método mais tradicional para solucionar este tipo de problema de otimização;
- Programação não-linear: quando a função objetivo, ou pelo menos uma das restrições, é uma função não-linear das variáveis de decisão. Nesta classe, os métodos que mais se destacam são: método de programação linear sequencial, método de programação quadrática sequencial, método das direções viáveis e método do gradiente reduzido, entre outros.

As técnicas de otimização estocástica envolvem elementos probabilísticos e, consequentemente, usam números aleatórios na busca do ótimo global. Assim, a sequência de pontos depende da semente utilizada para a geração de números aleatórios. Na prática, estes tipos de técnicas convergem rapidamente numa solução ótima global. As técnicas de otimização estocástica podem ser divididas em quatro grupos: (1) técnicas de busca aleatória, (2) métodos evolutivos, (3) inteligência de enxame, e (4) outros métodos.

As técnicas de otimização estocástica são simples de compreender e programar, não requerem suposições para definir o problema de otimização, são robustas para problemas altamente não-lineares, mesmo com um grande número de variáveis e, podem ser adaptadas a um grande número de problemas não convencionais.

Entre as técnicas de otimização estocástica, encontramos algumas que extraem ideias da natureza para realizar os cálculos baseadas em formas, comportamentos e padrões similares aos naturais, usados na resolução de problemas complexos. Esse campo de pesquisa é denominado de computação natural e está dividido em três grandes ramos: computação inspirada na natureza, simulação da natureza e computação com matérias naturais (de castro, 2006). A computação inspirada na natureza tem como objetivo fornecer técnicas alternativas de solução de problemas complexos que não podem ser resolvidos pelas técnicas convencionais tomando como fonte de inspiração a natureza, este ramo está dividido em quatro sub-áreas: redes neurais artificiais, computação evolutiva, inteligência coletiva e sistemas imunológicos artificiais.

As redes neurais artificiais são definidas como sistemas de processamento de informação com inspiração tomada do sistema nervoso, em muitos casos o cérebro humano, com uma ênfase particular na resolução de problemas.

A computação evolutiva se baseia nas ideias da biologia evolucionária para, assim, desenvolver algoritmos evolutivos de otimização e busca, os quais estão baseados na teoria evolutiva Darwiniana que propõe que uma população de indivíduos com a capacidade de reprodução e sujeitos à variação genética, junto com seleção natural, resulta em novas populações de indivíduos mais adaptados a seu entorno. Os principais tipos de algoritmos evolutiva, programação genética e sistemas classificadores. Apesar de existirem algumas diferenças entre os principais algoritmos evolutivos, todos eles apresentam as características básicas de um processo evolutivo, como proposto pela teoria da evolução de *Darwing*.

A inteligência de enxame é um termo usado para descrever algoritmos ou dispositivos de solução de problemas inspirados no comportamento coletivo de organismos sociais, por exemplo, colônias de insetos. A inteligência de enxame está dividida em duas linhas de estudo: algoritmos baseados no comportamento coletivo de insetos sociais e algoritmos baseados na sócio- cognição. Os sistemas imunológicos artificiais tomam ideias do sistema imune e seus correspondentes modelos com o objetivo de descrever sistemas computacionais para a solução de problemas complexos.

# <u>ANEXO B</u> <u>COMPUTAÇÃO EVOLUTIVA</u>

A computação evolutiva representa uma estratégia de busca paralelo-sequencial baseada na teoria da evolução de Darwing para desenvolver técnicas de otimização e busca na resolução de problemas complexos (de Castro, 2006). Algumas ideias da computação evolutiva são extraídas da biologia evolutiva, que trata entre outras coisas, do estudo da diversidade, as diferenças e similitudes entre organismos e suas características adaptativas e não-adaptativas. Além disso, a computação evolutiva é considerada como um método de busca fraco, concebido para resolver problemas genéricos em mundos genéricos, onde opera a não-linearidade e o dinamismo. Embora não garantam eficiência total na obtenção da solução, geralmente, garantem a obtenção de uma boa aproximação para a solução (Von Zuben, 2002). A vantagem mais significativa da computação evolutiva está na possibilidade de se resolver problemas pela simples descrição matemática, do que se quer ver presente na solução, não havendo necessidade de se indicar explicitamente os passos até o resultado, que certamente seriam específicos para cada caso.

Darwing propôs que uma população de indivíduos com a capacidade de reproduzirse e sujeitos a variações genéticas, seguidas por algum tipo de seleção, resultavam em novas populações de indivíduos mais adaptados a seu entorno. Esta proposta foi muito radical na época, pois sugeria que um simples algoritmo de processos de reprodução, mais variação e seleção natural, eram suficientes para produzir formas de vida complexa. Esses algoritmos iterativos de busca, mais otimização desenvolvidos com inspiração de processos biológicos de evolução são denominados de algoritmos evolutivos. A área de pesquisa que envolve todos os algoritmos evolutivos é denominada de computação evolutiva.

O algoritmo evolutivo padrão é um algoritmo genérico, iterativo e probabilístico que mantém uma população de indivíduos a cada iteração. Cada indivíduo corresponde a uma solução potencial de um problema que tem de ser resolvido que é avaliado numa função objetivo para assim dar seu grau de adaptabilidade (*fitness*) ao ambiente. Assim, a cada iteração uma nova população é gerada e são selecionados os indivíduos mais adaptados da população atual e, reproduzindo eles, sexual ou asexulamente. Se empregada a reprodução sexual ao operador de recombinação genética ou *crossover* pode ser usado. Variações genéticas através de mutações podem também afetar os indivíduos da população, assim como o processo de iteração. As etapas anteriormente nomeadas: reprodução, variação

genética e seleção constituem o que é chamado de geração. Muitos algoritmos evolutivos são implementados usando as etapas anteriormente nomeadas com algumas diferenças na representação, seleção e reprodução, bem como na ordem em que eles são aplicados. O critério de parada desse tipo de algoritmos é, usualmente, o número de gerações ou a obtenção de algum objetivo pré-especificado. A seguir é apresentada uma descrição geral dos principais algoritmos evolutivos (Von Zuben, 2002):

- Algoritmos Genéticos (AG): O operador de busca principal é a recombinação com a aplicação da mutação em baixas probabilidades. A codificação para este tipo de algoritmos é binária com seleção probabilística proporcional ao *fitness*.
- Estratégias Evolutivas (EE): enfatizam a mutação e recombinação como operadores essenciais ao processo de busca. A codificação para este tipo de algoritmos é real com seleção determinística, onde o tamanho de população de pais e filhos pode ser distinto.
- Programação Evolutiva (PE): Enfatiza a mutação e não incorpora a recombinação. O operador de seleção é probabilístico e a maioria das aplicações emprega vetores reais como codificação.
- Programação Genética (PG): As estruturas de dados são representadas utilizando árvores através de seleção probabilística proporcional ao *fitness* fazendo uso de operadores de *crossover* e mutação.

Existem algumas características dos algoritmos genéticos que fazem dessa técnica de computação evolutiva a mais usada, porém não é a metodologia mais adequada para todos os casos. Primeiro, os algoritmos genéticos manipulam um conjunto de soluções simultaneamente, assim, a probabilidade de ficar preso em ótimos locais é reduzida quando comparada com métodos ponto a ponto no espaço de busca. Essa característica faz dos AGs apropriados para paralelização. Segundo, os AGs usam operadores que podem atuar numa codificação dos parâmetros ao invés dos mesmos parâmetros, característica que simplifica sua implementação. Terceiro, podem trabalhar com qualquer tipo de função objetivo, pois não requerem continuidade ou diferenciabilidade das funções a serem otimizadas, o que faz

deles apropriados para resolver problemas com funções objetivo complexas. Porém, os AGs possuem algumas limitações, eles podem convergir prematuramente e são menos efetivos para um ajuste fino.

A seguir é feita uma descrição mais detalhada dos algoritmos genéticos, os quais são usados na otimização do conversor do processo de craqueamento catalítico fluidizado.

### **B.1. ALGORITMOS GENÉTICOS**

Publicações recentes envolvem diferentes tipos de otimização na área de engenharia, desde estimação de parâmetros a projetos de plantas, de otimização mono a multi- objetivo, de otimização sujeita a condições bem definidas até otimizações com incertezas. Alguns trabalhos relacionados com a otimização de processos usando a técnica dos algoritmos genéticos são descritos a seguir.

De acordo com Hajabdollahi *et al.*, (2012), o estudo da transferência de calor numa dimensão foi modelado e otimizado através das curvas de Bezier para ,assim, determinar a melhor geometria. A velocidade de transferência de calor e o fator de eficiência foram considerados como duas funções objetivo e uma otimização multi- objetivo foi levada em consideração, usando o algortimo NSGA-II para encontrar um conjunto de soluções ótimas chamadas de Pareto. A conservação de energia e a análise térmica foram realizados para verificar o método de solução. Os resultados apresentaram boa precisão.

Wang *et al.* (2007) trabalou com a reação secundária da gasolina craqueada cataliticamente por meio de experimentos em diferentes condições operacionais, usando redes neurais fuzzy (FNN) junto com algoritmos genéticos (GA), com o objetivo de maximizar os rendimentos da gasolina reformada e restringir a fracão de olefinas. A reação secundária da gasolina de FCC faz referência às reações químicas envolvendo compostos olefínicos. Resultados experimentais concordam com os preditos, produzindo rendimentos de gasolina na ordem de 80% e atingindo o padrão de gasolina com conteúdo da fração olefínica restrito a não mais do que 18%. Kasat e Gupta (2003), propuseram uma adaptação inspirada na genética natural de um código de algoritmo genéico binário elitista não- dominado (NSGA-II) com o conceito de gen tipo *jump* (JG) para produzir um novo código nomeado NSGA-II-JG para ,assim, obter soluções da otimização multiobjetivo de

um modelo de FCC, que apresenta alta carga computacional. Três estudos de caso foram analisados, nos quais o código NSGA-II-JG obteve soluções para a otimização multiobjetivo com redução do tempo computacional em 1/5, quando comparado com o código NSGA-II. Wang *et al.* (2008) estudou uma nova estratégia integrada em laço fechado para determinar um plano ótimo viável através de GIOPIMS (Graphic I/O Petrochemical Industry Modeling System), assim como as correspondentes condições operacionais da unidade de FCC. Um algoritmo genético generalizado acoplado com o simulador foi aplicado na determinação das condições operacionais implementando o plano quase ótimo do FCC gerado com GIOPIMS.

Os algoritmos genéticos são aqueles que estão baseados na mecânica de seleção natural e da genética natural, combinando a sobrevivência entre cadeias de estruturas com intercâmbio de informação entre elas. Em cada geração um novo conjunto de estruturas é gerado usando *bits* e partes das estruturas antigas gerando assim novos pontos no espaço de busca com um desempenho melhorado (Goldberg, 1989).

As estruturas de dados que representam os indivíduos da população são nomeadas cromossomos (espaço genotípico) representados por cadeias de dígitos binários {0, 1}, onde cada unidade do cromossomo é um gene localizado em certa parte do cromossomo denominado *lócus*. As diferentes formas que um gene pode assumir são chamadas de alelos. O significado de um cromossomo quando avaliado numa função objetivo é denominado fenótipo. A cada cromossomo é designada uma probabilidade de reprodução que vai ser aplicada dependendo do seu *fitness* relativo aos outros cromossomos na população. Também pode ser aplicado o operador de mutação para introduzir variação genética entre os indivíduos.

O *fitness* de cada cromossomo é um número estritamente positivo a ser maximizado, onde o processo de seleção levado em consideração é um algoritmo denominado *Roulette Wheel.* A probabilidade de selecionar um cromossomo da população é diretamente proporcional a seu valor de *fitness* que irá fazer parte da próxima população de indivíduos. Cabe destacar que, este método de seleção permite que um cromossomo seja escolhido mais de uma vez, assim como a rejeição e desaparição de alguns indivíduos da população. A reprodução nos algoritmos genéticos é dividida em três etapas:

- Processo de seleção, que não introduz novos indivíduos na população temporária apenas os progenitores;
- Aplicação dos operadores de recombinação ou cruzamento;
- Aplicação dos operadores de mutação.

Esses operadores são aplicados a cada conjunto de novos indivíduos, até que um determinado critério de parada ou qualidade das soluções seja atingido. A seguir são descritos com maiores detalhes os operadores de recombinação e mutação.

Operador de cruzamento: o processo de cruzamento ou *crossover* é um operador primário que permite a recombinação genotípica de alelos entre pares de cromossomos pais, permitindo que a próxima geração herde suas características. A ideia é que os novos indivíduos herdem as melhores características dos pais. Esta operação é levada a cabo em três estágios: 1) dois cromossomos são selecionados dentre os indivíduos da população atual; 2) aleatoriamente é selecionado o ponto onde vai ser levado em consideração o cruzamento para os dois cromossomos; 3) dois novos cromossomos são formados a partir do intercâmbio de atributos entre os cromossomos pais.

Existem diferentes tipos de operadores de cruzamento (Victorino, 2005): cruzamento num ponto, onde é escolhida uma posição de corte aleatoriamente, de modo que, os segmentos de corte, a partir deste ponto, sejam trocados; cruzamento em dois ou múltiplos pontos, é análogo ao operador anterior, sendo que ao invés de haver um ponto de corte, existem dois ou mais pontos escolhidos aleatoriamente; cruzamento segmentado, neste operador não existem pontos de corte, cada gene é testado segundo uma probabilidade e, caso seja selecionado, é trocado pelo respectivo gene do outro pai; cruzamento uniforme, onde cada gene do descendente é criado copiando o gene correspondente de um dos pais escolhido de acordo com uma máscara de cruzamento, se houver 1 o gene é copiado do primeiro pai e se houver 0 o gene é copiado do segundo pai.

Operador de mutação: é um operador secundário nos algoritmos genéticos devido à sua baixa probabilidade de ocorrência, onde um gene do cromossomo é substituído

aleatoriamente por outro para produzir um novo cromossomo. A mutação é o operador responsável pela introdução e manutenção da diversidade na população e tem a função de realizar modificações nas soluções para evitar a estagnação numa única região do espaço de busca (ótimos locais). A mutação é realizada em dois estágios: seleção das posições dentro do cromossomo que irão sofrer mutação e, para o caso de cadeias binárias, substituição do alelo 1 para 0 e do alelo 0 para 1. Esse operador é aplicado aos indivíduos de acordo com uma probabilidade dada pela taxa de mutação.

Na codificação binária, o operador de mutação empregado é a mutação pontual, ou seja cada posição da cadeia possui uma probabilidade *pm* de sofrer mutação. Na codificação real os operadores de mutação empregados são a mutação uniforme, que substitui o valor de um gene escolhido com um valor aleatório uniforme selecionado dentro de um intervalo de valores pré-selecionados e a Gaussiana, que adiciona um valor aleatório a um determinado gene de acordo com uma distribuição gaussina. A mutação nãouniforme, usada em problemas de otimização e codificação em ponto flutuante, realiza uma mutação, segundo uma probabilidade dinâmica, isto é, uma probabilidade que diminui de acordo com o número de gerações. Também podemos encontrar o operador de mutação por vizinhança, usado nas codificações inteira ou em ponto flutuante que substitui o valor de um dado gene por valores escolhidos aleatoriamente, da vizinhança, ou acima do valor atual.

## ANEXO C

# SISTEMAS DE CONTROLE AVANÇÃDO

Atualmente, os processos industriais são predominantemente contínuos, caracterizados por altos rendimentos, altamente integrados com respeito aos fluxos de matéria e enegia e sujeitos a estreitas especificações de processo e regulamentações ambientais e de segurança. Todos esses fatores combinados dificultam o controle do processo, e o os requerimentos para um melhor desempenho do controlador, incentivando investimentos econômicos para sistemas de controle viáveis nas plantas industriais modernas.

Em contraste à teoria de controle clássica essencialmente limitada a sistemas *single-input single-output* (SISO) descrita por sistemas de equações diferenciais lineares com coeficientes constantes, a teoria de controle moderna é também desenvolvida para sistemas multi-variáveis isto é *multiple-input multiple-output* (MIMO), com a interação entre as variáveis do processo. Esses sistemas são descritos por sistemas de equações diferenciais lineares, sistemas de equações diferenciais ordinárias não- lineares e parciais. Esses controladores estão na capacidade de acompanhar restrições ativas, as quais variam dependendo das características da carga e dos preços, assim como de mudar de restrição para manter o ponto ótimo de operação que pode ser identificado através do uso de técnicas de otimização.

Dentre as estruturas que têm sido desenvolvidas para melhorar o desempenho do sistema de controle, encontramos a técnica de controle preditivo que usa o modelo do processo, no domínio do tempo, como parte do controlador para predizer as saídas futuras sob um período de tempo. Diferentemente, das técnicas tradicionais de controle que usam os modelos de funções de transferência, o modelo de controle preditivo está baseado em um tipo particular de modelo, nomeado de modelo de convolução, que faz parte da técnica de controle preditivo chamada matriz dinâmica de controle (DMC). Esta técnica pode ser aplicada em sistemas SISO e MIMO além incluir restrições de desigualdade nas variáveis manipuladas e controladas. Uma descrição mais detalhada desta técnica de controle é descrita ne seguinte seção.

292

#### C.1. Matriz Dinâmica de Controle (DMC)

A ideia básica do controle por matriz dinâmica (DMC) é utilizar um modelo de resposta ao degrau no domínio do tempo (modelo de convolução) para predizer o comportamento de um determinado processo sob um horizonte de predição. As mudanças futuras na variável manipulada são calculadas com a finalidade de atingir determinadas características da variável de resposta, que minimizarão algum índice de desempenho (Lima, 2006).

Ao contrarío dos controladores clássicos que atuam no processo após este ser desviado de seu ponto de operação desejado *set-point* e de apresentar um desempenho insatisfatório, quando aplicados a sistemas nao-lineares e/ou multi-variáveis, a técnica de controle preditivo baseado em modelo, prediz o comportameto futuro do sistema, utilizando um modelo dinâmico do processo internamente na sua estrutura (modelo discreto de convolução). Uma trajetória de entradas futuras é então calculada, mas somente a primeira ação de controle é implementada entre uma amostragem e outra.

### Modelo de Convolução

Com o objetivo de descrever o comportamento de processos que exibem uma dinâmica que não se ajusta a uma função de transferência de primeira ou segunda ordem, como no caso das técnicas de controle convencional, a técnica DMC emprega o modelo de resposta ao degrau ou impulso no domínio do tempo (modelo de convolução). A vantagem desse modelo é que seus coeficientes podem ser obtidos diretamente a partir de dados experimentais sem precisar assumir uma estrutura do modelo, obtidos diretamente do comportamento dinâmico do processo frente a perturbações em variáveis de entrada, sendo útil para processos que apresentam um comportamento do processo incomum.

### Modelo de Resposta ao Degrau e ao Impulso.

Segundo Seborg (2004), o modelo de resposta pode ser obtido a partir do comportamento em malha aberta do processo em estudo. Os valores das respostas ao degrau unitário  $\Delta$ m1 estão representados pelos valores de a<sub>0</sub>, a<sub>1</sub>, a<sub>2</sub>, a<sub>3</sub>, a<sub>4</sub>, nos períodos de amostragem  $\Delta$ t, como apresentado na Figura C.1. O número de tempos de amostragem no qual a resposta do processo em malha aberta atinge entre 90 e 95% do estado estacionário é denominado de horizonte de convolução, representado por NS na Figura 8. Considerando a resposta ao degrau para uma mudança  $\Delta$ m na variável manipulada e determinando as respostas para um instante de amostragem NS, as respostas estão representadas por:

$$C_0 = 0 \quad t = 0$$

$$C_1 = C_0 + a_1 \Delta m_0 \quad t_1 = \Delta t$$

$$C_2 = C_0 + a_2 \Delta m_0 \quad t_2 = 2\Delta t$$

$$C_3 = C_0 + a_3 \Delta m_0 \quad t_3 = 3\Delta t$$

$$C_4 = C_0 + a_4 \Delta m_0 \quad t_4 = 4\Delta t$$



Figura C1: Identificação dos coeficientes do modelo de resposta ao degrau. a) Degrau unitário, b) Coeficientes a<sub>i</sub> do modelo de resposta ao degrau.
Para T mudanças na variável manipulada e aplicando o princípio da superposição, as variações nas respostas estão representadas através do modelo de convolução apresentado na Equação 2 para *n* instantes de amostragem.

$$C_{n+1} = C_0 + \sum_{i=1}^{T} a_i \Delta m_{n+1-i}$$
 Eq. 2

Aplicando a primeira diferença inversa das constantes do modelo de resposta ao degrau unitário são obtidas as constantes do modelo de resposta ao impulso, h<sub>1</sub>, h<sub>2</sub>,..., h<sub>T</sub>. A representação da obtenção destes valores é apresentada a seguir:

$$h_i = a_i - a_{i-1}$$
  
 $h_0 = 0$   $i = 1, 2, ..., T$  Eq. 3

O modelo de convolução representado através dos coeficientes de resposta ao impulso é representado através da Equação 4.

$$C_{n+1} = C_0 + \sum_{i=1}^{T} h_i m_{n+1-i}$$
 Eq.4

Uma generalização do modelo de convolução na determinação de um número arbitrário de predições pode ser feita através da definição do horizonte de controle U e do horizonte de predição V. O horizonte de controle é definido como o número de ações de controle que são calculadas para afetar as saídas preditas sob um horizonte de predição a partir de um determinado passo de tempo n.

Considerando o caso geral de uma sequência arbitrária de mudanças na variável manipulada  $\Delta m_0$ ,  $\Delta m_1$ ,...,  $\Delta m_{u-1}$ , assim como um estado estacionário inicial C<sub>0</sub>=0, as respostas preditas podem ser calculadas usando a seguinte matriz, baseada no modelo de convolução sob um horizonte de predição V. Os parâmetros U e V são parâmetros de projeto do controlador.

O modelo de convolução, usando os coeficientes de resposta ao impulso numa forma recursiva expressado em função das trocas incrementais de  $\Delta m$  é representado através da seguinte expressão:

$$\hat{c}_{n+1} = \hat{c}_n + \sum_{i=1}^T h_i \Delta m_{n+1-i}$$
 Eq. 6

A equação anterior descreve como  $\Delta m$  afeta a saída  $C_{n+1}$  usando os coeficientes de resposta ao impulso  $h_i$ . A somatória dos índices em  $\Delta m$  e b resulta em todos os T termos, usando o princípo da superposição.

As predições são feitas em laço aberto, já que não proporcionam nenhuma correção, consequência de erros na modelagem ou nas mudanças na carga para um determinado passo de tempo.

Para superar esse inconveniente, o modelo de DMC utiliza a predição corrigida de  $\hat{c}_{n+1}$  denominada  $c_{n+1}^*$ . O valor corrigido pode ser obtido comparando o valor atual  $c_n$  com  $\hat{c}_n$  e, em seguida deslocando a correção para frente obtendo assim:

$$c_{n+1}^* - \hat{c}_{n+1} = c_n - \hat{c}_n$$
 Eq. 7

Esta correção compensa erros no modelo, assim como mudanças na carga em estágios anteriores, atuando como um controle *feedback*. Em forma recursiva, a partir da expressão anterior, junto com a resposta ao impulso obtemos:

$$c_{n+1}^* = \hat{c}_{n+1} + (c_n - \hat{c}_n) = c_n + \sum_{i=1}^T h_i \Delta m_{n+1-i}$$
 Eq. 8

O controle preditivo possui como principal característica a predição do comportamento do processo no futuro sob um horizonte de predição V, este último é um parâmetro de projeto que influência o desempenho do controlador. O modelo convolução pode ser representado na sua forma recursiva, em termos de mudanças incrementais da variável manipulada através da seguinte expressão:

$$C_{n+j}^* = C_{n+j-1}^* + \sum_{i=1}^T h_i \Delta m_{n+j-i}$$
 Eq. 9

Onde  $j=1,2,...,V \in C_{n}^{*}=C_{n}$ .

A equação Eq.(9) pode ser representada na forma matricial para um horizonte de predição V e um horizonte de controle U, com U $\leq$  V.

$$\begin{pmatrix} c_{n+1}^{*} \\ c_{n+2}^{*} \\ c_{n+3}^{*} \\ \vdots \\ \vdots \\ c_{n+N}^{*} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{1} & 0 & 0 & \vdots & \vdots & 0 \\ a_{2} & a_{1} & 0 & 0 \\ a_{3} & a_{2} & a_{1} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ a_{v} & a_{v-1} & a_{v-2} & \vdots & \vdots & a_{v-U+1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Delta m_{n} \\ \Delta m_{n+1} \\ \Delta m_{n+2} \\ \vdots \\ \Delta m_{n+2} \\ \vdots \\ \Delta m_{n+U-1} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_{n} + P_{1} \\ c_{n} + P_{2} \\ c_{n} + P_{3} \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ C_{n} + P_{N} \end{pmatrix}$$
Eq. 10

Onde:

$$P_{i} = \sum_{j=1}^{t} S_{j} \qquad i = 1, 2, ..., V$$
  
Eq. 11  
$$S_{j} = \sum_{i=j+1}^{T} h_{i} \Delta m_{n+j-i} \qquad j = 1, 2, ..., V$$

Os valores de P<sub>i</sub> são elementos do vetor de projeção, o qual inclui predições futuras dos valores de c baseados em variações nas variáveis de entrada, previamente implementadas. O objetivo do controle preditivo é minimizar a diferença entre as predições

corrigidas  $c_{n+j}^*$  e uma trajetória de referência  $r_{n+j}$  que está representada pelos valores do *set*point V passos de tempo no futuro. A partir das definições anteriores podem ser definidos os seguintes vetores:

$$\widehat{E} = \begin{pmatrix} r_{n+1} - c_{n+1}^{*} \\ r_{n+2} - c_{n+2}^{*} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ r_{n+V} - c_{n+V}^{*} \end{pmatrix} \qquad \widehat{E}^{'} = \begin{pmatrix} E_{n} - P_{1} \\ E_{n} - P_{2} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ E_{n} - P_{2} \end{pmatrix} \qquad \text{Eq. 12}$$

Onde  $\hat{E}'$  é o valor predito do erro do processo para V instantes no futuro baseado nas mudanças da variável manipulada e no sinal atual do erro. Os valores de P<sub>i</sub> é um elemento do vetor de saída futuro projetado. Os valores de  $\hat{E}'$  é a predição do erro em laço aberto, já que está baseado nas ações passadas de controle, sem incluir as ações de controle, atuais e futuras. O  $\hat{E}$  representa a predição do erro em laço fechado, pois é baseada nas ações de controle atuais e futuras.

A partir das definições apresentadas e considerando a trajetória do *set- point*  $r_{n+j}$ , a cada lado da Equação 10 se obtém a seguinte expressão:

$$\hat{E} = -A\Delta m + \hat{E}'$$
 Eq. 13

Onde A é uma matriz triangular VxU que representa as constantes do modelo de convolução e  $\Delta m$  é um vetor Ux1 que representa os movimentos futuros de controle. Se existe uma correspondência perfeita entre a trajetória de saída predita do sistema em laço fechado, a trajetória desejada  $\hat{E} = 0$  e o número de movimentos de controle é igual ao número de saídas preditas (U=V) a Equação 13 pode ser representada da forma:

Estabelecendo que U=V, usualmente conduz a um controle insatisfatório, quando comparado com o caso que U<V. O sistema de equações da matriz dinâmica de controle (DMC) para o caso onde U<V resulta em um sistema de equações sobredeterminado, sem uma solução exata. Porém, é possível obter a melhor solução através da minimização de um índice de desempenho J definido como:

A cada instante de amostragem U, ações futuras de controle são calculadas, porém só a primeira ação de controle  $\Delta m_n$  é implementada. Uma dificuldade que se apresenta na

lei de controle anterior são as excessivas mudanças na variável manipulada, o que pode ser resolvido, penalizando os movimentos da variável manipulada no cálculo do índice de desempenho através da seguinte expressão:

$$J\left[\Delta m\right] = \hat{E}^{T} W_{1} \hat{E} + \Delta m^{T} W_{2} \Delta m \qquad \text{Eq. 16}$$

Onde  $W_1$  e  $W_2$  são matrizes definidas permitindo ao usuário especificar diferentes penalizações sobre o erro predito.