



OPERAÇÃO ÓTIMA DE UMA PLANTA DE TRATAMENTO DE EFLUENTES - BENCHMARK SIMULATION MODEL (BSM)

Arthur César Alves¹, Antônio Carlos Brandão de Araújo²

RESUMO

Os avanços na modelagem computacional de processos químicos permitiram a engenharia a obtenção de resultados cada vez mais confiáveis, todavia, tais modelos requerem geralmente um maior esforço computacional, devido à sua complexidade. Com isso, existe a necessidade da geração de modelos reduzidos, baseados em aproximações e simplificações do modelo rigoroso, de modo que estes possuam resultados tão confiáveis quanto o modelo rigoroso original. A vantagem da construção de metamodelos está exatamente no ganho de tempo na obtenção de resultados e na redução do esforço computacional, aspectos importantes na modelagem de processos químicos. O presente trabalho tem como objetivo modelar, simular, validar e otimizar um metamodelo de um processo químico altamente não-linear: O setor reacional de uma unidade de tratamento de efluentes. O metamodelo foi gerado através da técnica da kriging, e para garantir alta confiabilidade é necessária a geração de variáveis aleatórias não-enviesadas, sendo utilizada a técnica do hipercubo latino para tal fim. Os resultados obtidos foram comparados com o modelo rigoroso, utilizando o método de validação cruzada e foram analisados por índices estatísticos. A validação constatou que o ajuste para uma reta se deu melhor: função polinomial de grau dois, como termo de regressão, e, para o termo de correlação, a função gaussiana. A otimização utilizando o metamodelo atendeu às restrições exigidas, concluindo que o metamodelo o pela técnica proposta neste trabalho tem a capacidade de prever com precisão as variáveis de decisão do processo, podendo substituir o modelo rigoroso, gerando uma convergência mais rápida da simulação do processo.

Palavras-chave: Metamodelo; Kriging; Otimização.

¹Aluno do curso de Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: arthur.alves@eq.ufcg.edu.br

²Doutor, Professor adjunto, Departamento de Engenharia Química, UFCG, Campina Grande, PB, e-mail: brandao@eq.ufcg.edu.br



GREAT OPERATION OF AN EFFLUENT TREATMENT PLANT - BENCHMARK SIMULATION MODEL (BSM)

ABSTRACT

Advances in the computational modeling of chemical processes allowed the engineering to obtain increasingly reliable results, however, such models generally require a greater computational effort, due to its complexity. Thus, there is a need for the generation of small models, based on approximations and simplifications of the rigorous model, so that they have results as reliable as the original rigorous model. The advantage of the construction of metamodels is precisely in the gain of time in obtaining results and in the reduction of computational effort, important aspects in the modeling of chemical processes. The present work aims to model, simulate, validate and optimize a meta-model of a highly nonlinear chemical process: The reactive sector of an effluent treatment unit. The metamodel was generated through the kriging technique, and to ensure high reliability it is necessary to generate non-skewed random variables, using the Latin hypercube technique for this purpose. The results were compared with the rigorous model using the cross validation method and were analyzed by statistical indices. The validation found that the fit for a straight line was better: grade two polynomial function, as regression term, and for the correlation term, the Gaussian function. The optimization using the metamodel met the constraints required, concluding that the metamodel o by the technique proposed in this work has the ability to accurately predict the process decision variables, being able to replace the rigorous model, generating a faster convergence of the process simulation.

Keywords: Metamodel; Kriging; Optimization.