

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

INFERÊNCIA NA OTIMIZAÇÃO E CONTROLE DE COLUNAS

DE DESTILAÇÃO VIA FUNÇÕES RACIONAIS

Autor: Afrânio Pessoa Cavalcante Jr.

Orientador: Mário de Jesus Mendes

Campinas
Estado de São Paulo
Dezembro/1995

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO:

SISTEMAS DE PROCESSOS QUÍMICOS E INFORMÁTICA

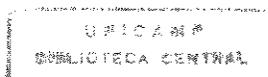
**INFERÊNCIA NA OTIMIZAÇÃO E CONTROLE DE COLUNAS
DE DESTILAÇÃO VIA FUNÇÕES RACIONAIS**

Autor: Afrânio Pessoa Cavalcante Jr.

Orientador: Mário de Jesus Mendes

Dissertação submetida à comissão de Pós-Graduação
da Faculdade de Engenharia Química - UNICAMP
como parte dos requisitos necessários para obtenção
do grau de MESTRE EM ENGENHARIA QUÍMICA.

Campinas
Estado de São Paulo
Dezembro/1996



UNIDADE	BC
N.º DE FOLHAS	
TITULO	T/UNICAMP
CODIGO	C314i
V.º	
N.º DE REGISTRO	27603
PREÇO	667/96
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	03/05/96
N.º CPD	

CM-00087725-3

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

C314i

Cavalcante Jr., Afrânio Pessoa

Inferência na otimização e controle de colunas de destilação via funções racionais / Afrânio Pessoa
Cavalcante Jr.-- Campinas, SP: [s.n.], 1996.

Orientador: Mário de Jesus Mendes.

Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Destilação. 2. * Variáveis - Inferência. I. Mendes, Mário de Jesus. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Esta versão corresponde à redação final da Dissertação de Mestrado defendida por Afrânio Pessoa Cavalcante Júnior e aprovada pela banca examinadora em 19 de janeiro de 1996.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Mário de Jesus Mendes', is written above a horizontal line.

Mário de Jesus Mendes

Dissertação defendida e aprovada em 19 de janeiro de 1996 pela banca examinadora constituída pelos professores:



Prof. Dr. Mário de Jesus Mendes



Prof.(a) Dr.(a) Maria Teresa Moreira Rodrigues



Prof. Dr. Roger Josef Zemp

Aos meus pais Afrânio e Irene.

Às manas Tânia, Telma e Márcia.

Aos sobrinhos Anderson, Vanessa, Danielle,

Filipe e Fábio.

AGRADECIMENTOS

Ao professor Mário de Jesus Mendes pela paciente orientação e pelo constante apoio oferecido.

À professora Maria Teresa Moreira Rodrigues pelas sugestões apresentadas para a realização deste trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico pelo financiamento do projeto.

Ao amigo Renato Spandri pelo encorajamento para assumir esta empreitada e pelo incentivo oferecido no decorrer dela.

À todos os colegas da Faculdade de Engenharia Química da UNICAMP.

SUMÁRIO

LISTA DE TABELAS	I
LISTA DE FIGURAS	II
RESUMO	III
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	3
3. A INFERÊNCIA NO CONTROLE E OTIMIZAÇÃO DE COLUNAS DEBUTANIZADORAS	8
4. INFERÊNCIA DO INTEMPERISMO VIA FUNÇÕES RACIONAIS	17
4.1 Simulação da Coluna em Regime Estacionário	17
4.2 Seleção das Variáveis Inferenciais	21
4.3 Seleção e Ajuste do Modelo	28

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	
5.1 Obtenção dos Valores do Intemperismo para Diferentes Condições Operacionais da Coluna	31
5.2 Seleção das Temperaturas do Conjunto de Variáveis Inferenciais do Processo	37
5.3 Calibração do Modelo	42
5.4 Análise da Capacidade de Predição do Modelo	52
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES	61
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	63
ANEXOS	66
ABSTRACT	74

I

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1- Especificações do Gás Liquefeito de Petróleo para o Mercado Nacional	14
Tabela 3.2- Especificações da Gasolina para o Mercado Nacional	15
Tabela 3.3- Especificações para a Coluna Debutanizadora	16
Tabela 5.1- Especificações Utilizadas na Simulação da Coluna em Regime Estacionário	33
Tabela 5.2- Caracterização da Carga de Alimentação	34
Tabela 5.3- Resultados obtidos pelo Método de Naphtali-Sandholm e Simulador Hysim para a composição molar dos produtos	36
Tabela 5.4- Resultados obtidos pelo método de Naphtali-Sandholm e Simulador Hysim para o calor e temperatura na Debutanizadora	37
Tabela 5.5- Dados das Simulações utilizadas na construção da Matriz dos Ganhos de Temperatura na Coluna Debutanizadora	38
Tabela 5.6- Valores Singulares Obtidos pela Decomposição em Valores Singulares da Matriz dos Ganhos de Temperatura	42
Tabela 5.7- Soma do quadrado dos erros produzidos na estimativa do intemperismo (conjunto de calibração)	49

Tabela 5.8- Erro Quadrático Médio das Predições (Funções Racionais)	59
Tabela 5.9- Erro Quadrático Médio das Predições (Funções Lineares)	60

II

LISTA DE FIGURAS

Figura 3.1- Unidade de Craqueamento Catalítico (Diagrama de Blocos)	9
Figura 3.2- Seção de Fracionamento/Recuperação de Gases de uma Unidade de Craqueamento Catalítico (Fluxograma)	12
Figura 3.3- Equipamento para a Determinação Experimental do Intemperismo	14
Figura 4.1- Procedimento de Cálculo do Método de Naphtali-Sandholm	20
Figura 4.2- Exemplo de Aplicação da PCA em um conjunto hipotético de dados	24
Figura 5.1- Representação Esquemática da Coluna Debutanizadora	32
Figura 5.2- Análise de componentes principais - gráfico $u_1\sigma_1$ x estágio	39
Figura 5.3- Análise de componentes principais - gráfico $u_2\sigma_2$ x estágio	39
Figura 5.4 - Análise de componentes principais - gráfico $u_3\sigma_3$ x estágio	40
Figura 5.5- Análise de componentes principais - gráfico $u_4\sigma_4$ x estágio	40
Figura 5.6- Análise de componentes principais - gráfico $u_5\sigma_5$ x estágio	41
Figura 5.7- Análise de componentes principais - gráfico $u_6\sigma_6$ x estágio	41

Figura 5.8- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ , R e P - Conjunto de Calibração	44
Figura 5.9- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ , R e P - Conjunto de Calibração	44
Figura 5.10- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ , R e P - Conjunto de Calibração	45
Figura 5.11- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ , R e P - Conjunto de Calibração	45
Figura 5.12- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Calibração	47
Figura 5.13- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Calibração	47
Figura 5.14- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Calibração	48
Figura 5.15- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Calibração	48
Figura 5.16- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Calibração	50
Figura 5.17- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Calibração	50
Figura 5.18- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Calibração	51
Figura 5.19- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Calibração	51

Figura 5.20- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ , R e P - Conjunto de Predição	53
Figura 5.21- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ , R e P - Conjunto de Predição	53
Figura 5.22- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ , R e P - Conjunto de Predição	54
Figura 5.23- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ , R e P - Conjunto de Predição	54
Figura 5.24- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Predição	55
Figura 5.25- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Predição	55
Figura 5.26- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Predição	56
Figura 5.27- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ ,T ₃₁ , R e P - Conjunto de Predição	56
Figura 5.28- Intemperismo do GLP via função racional de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Predição	57
Figura 5.29- Intemperismo do GLP via função linear de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Predição	57
Figura 5.30- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Predição	58
Figura 5.31- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T ₈ ,T ₃₁ ,Q,R e P - Conjunto de Predição	58

III

RESUMO

A inferência de variáveis é frequentemente utilizada na indústria química em substituição à medida direta, on-line, de variáveis controladas. Esta substituição dá-se principalmente em processos nos quais a obtenção direta destas grandezas apresenta alto custo, baixa confiabilidade, e atrasos significativos no tempo de resposta. Modelos fundamentais simplificados nem sempre encontram-se disponíveis para o controle inferencial destes processos. Nestes casos, modelos empíricos devem ser utilizados. Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um modelo inferencial empírico, baseado na utilização de Funções Racionais Multivariáveis, para estimar a qualidade dos produtos em uma coluna de destilação. A metodologia desenvolvida inclui a utilização da técnica da Decomposição em Valores Singulares (SVD) para a seleção das variáveis do processo com o melhor poder preditivo. Os resultados obtidos mostraram que os modelos baseados em funções racionais possuem grande poder de predição e apresentam significativas vantagens em relação aos modelos obtidos via regressão linear múltipla na inferência da qualidade dos produtos em colunas de destilação.

1. INTRODUÇÃO

A obtenção de medidas confiáveis da composição dos produtos em uma coluna de destilação constitui-se na principal dificuldade para o controle e otimização deste tipo de equipamento. Muitos analisadores de produto, como os cromatógrafos gasosos, apresentam atrasos no tempo de resposta além do alto custo de manutenção e dos grandes investimentos necessários para a sua instalação. O atraso global do tempo de resposta de uma medida situa-se tipicamente entre 10 e 20 minutos ⁽¹⁾. Este fato impõe severas limitações ao desempenho do sistema de controle e otimização associado ao equipamento. Entretanto, a confiabilidade das análises é talvez o seu ponto mais crítico. Para se obter resultados confiáveis nas análises de composição feitas neste tipo de equipamento faz-se necessário um grande dispêndio de recursos, em termos de força de trabalho, na obtenção e manutenção de uma base de dados conveniente para o sistema. A utilização de um modelo inferencial do processo apresenta-se como uma ferramenta importante para a solução deste tipo de problema.

Um modelo inferencial utiliza variáveis facilmente mensuráveis do sistema para estimar a variável desejada. Para uma coluna de destilação, um modelo inferencial para a composição do destilado pode ser representado pela seguinte forma geral:

$$X_D = f(T_1, T_2, \dots, F, \dots) \quad (1.1)$$

onde X_D representa o valor da variável estimada e T_1 , T_2 e F representam variáveis facilmente mensuráveis do processo como, por exemplo, a temperatura dos pratos da coluna e a vazão de alimentação. Geralmente, o modelo é específico para o processo e deve ser desenvolvido ou ajustado para cada aplicação. Modelos fundamentais ou modelos "short cut" do processo são frequentemente utilizados como modelos inferenciais quando os mesmos apresentam-se disponíveis e fornecem precisão suficiente para as medidas com um razoável tempo de computação. Porém, frequentemente, modelos fundamentais apropriados para o uso em tempo real não se encontram disponíveis. Nestes casos, a estrutura e os parâmetros do modelo devem ser determinados através de uma análise dos dados do processo. Este tipo de modelo é conhecido como modelo inferencial empírico do processo.

Um modelo inferencial empírico tem como principal objetivo fornecer estimativas do valor da variável controlada. A precisão das estimativas deve ser insensível às mudanças esperadas em torno do ponto nominal de operação.

Nos últimos anos, o desenvolvimento de modelos com estas características tem sido objeto de estudo de diversos trabalhos apresentados na literatura. A grande parte deles, no entanto, baseia-se na representação linear das relações entre as variáveis mensuradas e a variável a ser inferida. Uma vez que muitos processos químicos apresentam relações altamente não-lineares entre as suas variáveis, modelos baseados neste tipo de representação nem sempre produzem resultados precisos. Nestes casos, modelos baseados na representação não-linear das relações entre as variáveis do processo fazem-se necessários. Porém, a determinação dos parâmetros do modelo neste tipo de representação nem sempre é muito simples.

O presente trabalho apresenta uma metodologia para o desenvolvimento de um modelo empírico para inferir a qualidade do produto em uma coluna de destilação utilizando funções racionais multivariáveis.

A metodologia em questão visa desenvolver modelos capazes de atender às necessidades associadas ao controle e otimização de colunas de destilação, sem os inconvenientes apresentados pelos modelos inferenciais empíricos baseados em funções polinomiais multivariáveis e em redes neurais, no que diz respeito à determinação dos parâmetros do modelo.

A análise e discussão desta metodologia é feita a partir do desenvolvimento de um modelo inferencial empírico para a determinação da especificação do produto de topo em uma coluna debutanizadora, o intemperismo do GLP, um típico processo químico em que a caracterização da composição do produto via modelo inferencial empírico se faz necessária para o controle e otimização on-line do processo.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Nos últimos anos, a literatura tem registrado a presença de muitos modelos para a inferência de variáveis importantes do processo a partir de variáveis facilmente mensuráveis.

Em destilação, o perfil de composição desejado geralmente corresponde a um perfil de temperatura definido. Assim, os primeiros modelos inferenciais desenvolvidos para estimar a qualidade do produto em colunas de destilação basearam-se na utilização da temperatura de um prato, previamente selecionado, como variável de predição.

A utilização deste tipo de modelo tornou-se uma prática tradicional na determinação da qualidade do produto com propósitos de controle.

Os modelos que utilizam a temperatura de um prato como variável de predição geralmente apresentam a seguinte forma:

$$\ln X_D = a_0 + a_1 \cdot T \quad (2.1)$$

O coeficiente angular a_1 é determinado na fase de desenvolvimento do modelo, permanecendo constante após esta etapa. O valor correto da composição X_D é produzido em tempo real ajustando o set point da temperatura através de um controle tipo cascata. Outra alternativa é o ajuste manual periódico baseado em dados de laboratório. Este procedimento é equivalente ao ajuste do coeficiente linear a_0 . O prato selecionado deve minimizar o erro na estimativa da composição do produto. Em sistemas binários, a temperatura no topo da coluna, para uma dada pressão, é considerada uma variável de predição eficiente. Entretanto, o controle baseado em estimadores com uma única temperatura nem sempre produz resultados precisos. Este fato torna-se ainda mais evidente para sistemas multicomponentes, onde os graus de liberdade adicionais do sistema dificultam a estimativa da composição com precisão.

Com o propósito de melhorar o desempenho dos modelos baseados em uma única temperatura, Tolliver & McCune ⁽²⁾ propuseram um método baseado na sensibilidade da temperatura dos pratos frente às variações na composição da alimentação, no calor do refeedor e no refluxo. Neste método a seleção do prato com a temperatura mais apropriada para o modelo é feita através da análise gráfica dos resultados obtidos via simulação em estado estacionário. O critério utilizado para a escolha tem como princípio a seleção do prato no qual a temperatura apresenta a mais forte correlação com a composição do produto para as diversas perturbações na coluna.

Moore et al ⁽³⁾ apresentaram um método baseado na aplicação da análise de componente principais (PCA). Este método seleciona a temperatura do prato com maior variância para um conjunto particular de dados. Perturbações no calor do refeedor e no refluxo foram utilizadas para o levantamento do conjunto apropriado de dados. A escolha da temperatura do prato com maior variância produziu bons resultados nas estimativas da composição do produto. Esta heurística, escolha da temperatura no prato com maior variância, pode resultar em modelos adequados em alguns casos. Porém, a PCA não seleciona diretamente a variável inferencial com o melhor poder preditivo. A variável que apresenta a maior variação em um conjunto de dados não é necessariamente a que melhor se correlaciona com a variável a ser inferida. Além disto, os métodos propostos por Tolliver & McCune e Moore et al têm a significativa desvantagem de estarem limitados ao modelo inferencial com uma única temperatura de prato.

Brosilow e colaboradores (Weber & Brosilow ⁽⁴⁾ ; Joseph & Brosilow ^(5,6)) foram os primeiros pesquisadores a sugerir o uso de modelos inferenciais empíricos com múltiplas variáveis para inferir a composição dos produtos em colunas de destilação. O modelo proposto baseia-se na combinação linear de diferentes variáveis inferenciais do processo e inclui uma técnica para a seleção das temperaturas dos pratos com melhor poder preditivo. Esta técnica baseia-se na análise do número de condição da matriz reduzida do modelo. O ajuste dos parâmetros do modelo é feito por regressão linear. O modelo obtido teve como variáveis inferenciais escolhidas a razão de refluxo, o calor do refeedor e a temperatura de alguns pratos. A utilização deste modelo na simulação do controle de uma coluna de destilação multicomponente mostrou que o controle produzido com um modelo inferencial deste tipo é comparável ao produzido com a medida direta da composição. Além disto, o controle produzido com os valores inferidos pelo modelo mostrou-se muito superior ao produzido mantendo-se constante a temperatura em um único prato.

Seguindo este raciocínio, diversos trabalhos sugerindo o desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos utilizando múltiplas variáveis foram publicados.

Choo & Saxena ⁽⁷⁾ desenvolveram um modelo inferencial empírico para estimar a composição de topo em uma coluna de destilação extrativa. O modelo desenvolvido baseou-se na regressão linear dos dados históricos do processo. As variáveis inferenciais utilizadas no modelo foram pressão e temperaturas em quatro diferentes pratos. As temperaturas de pratos mais conveniente para o modelo foram obtidas através da análise de sensibilidade para variações no perfil de composição. Os resultados mostraram que as estimativas obtidas pelo modelo eram pobres quando a composição da alimentação encontrava-se 1% ou mais fora do intervalo utilizado para o ajuste.

Mejdell & Skogestad ⁽¹⁾ foram os pioneiros na utilização dos métodos da Regressão do Componente Principal (PCR) e da Projeção de Estruturas Latentes (PLS) no desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos para coluna de destilação. Eles propuseram o uso de transformações logarítmicas nas composições e temperaturas para representar a não-linearidade do processo. Os estimadores obtidos via PLS mostraram-se eficazes para uma larga extensão de aplicações.

Kresta & McGregor ⁽⁸⁾ aprofundaram os estudos feitos por Mejdell & Skogestad na aplicação do método PLS no desenvolvimento de modelos inferenciais para colunas de destilação. Neste trabalho eles enfatizam as habilidades do método em lidar com problemas típicos do desenvolvimento de modelos inferenciais como, por exemplo, o sobre-ajuste causado pela utilização de variáveis fortemente correlacionadas. Outra importante questão levantada pelos autores é a da necessidade de se obter um conjunto de dados do processo compatível ao uso a que o modelo se destina.

Uma importante questão a ser observada em relação modelos multivariáveis anteriormente relatados é que todos eles são modelos lineares. Uma vez que o processo de destilação apresenta relação não-linear entre as suas variáveis, fazem-se necessárias transformações convenientes nas variáveis com o intuito de melhorar o desempenho destes modelos. Deste modo, o sucesso na aplicação de um modelo deste tipo está intimamente relacionado à experiência adquirida com o conhecimento específico do processo estudado, não podendo, portanto, ser facilmente aplicada por um profissional menos experimentado.

King & Queen ⁽⁹⁾ desenvolveram um estudo comparativo entre funções racionais e funções polinomiais na representação de dados com relação funcional desconhecida. Os resultados mostraram que, em muitas situações, as funções racionais fornecem estimativas melhores para um mesmo número de parâmetros ajustáveis, além de apresentarem grande estabilidade na extrapolação para pontos fora do intervalo ajustado.

Resultado similar foi obtido por Heiser & Parrish ⁽¹⁰⁾ em um estudo em que compararam o desempenho de modelos baseados em funções racionais com o de modelos baseados em funções polinomiais na representação de dados de entalpia de excesso. Eles concluíram que, em situações em que modelos polinomiais necessitam mais de quatro parâmetros, modelos baseados em funções racionais apresentam melhores resultados com um menor número de parâmetros. As funções racionais também mostraram-se mais confiáveis na extrapolação do ajuste.

Ponton ⁽¹¹⁾ estudou o uso de funções racionais multivariáveis na predição de propriedades físicas (método da contribuição de grupo para estimativa do ponto de ebulição). Seu estudo mostrou que funções relativamente simples e bem definidas podem ser utilizadas na representação de dados altamente não-lineares e até mesmo descontínuos.

Ponton & Klemes ⁽¹²⁾ compararam o desempenho das funções racionais multivariáveis com o das redes neurais na modelagem de fenômenos não-lineares. Três casos foram especialmente estudados: inferência da composição dos produtos na separação de uma mistura de pentano e hexano em uma coluna de alta pureza; a estimativa da composição do líquido na separação flash de uma mistura de etano e pentano; a estimativa da composição do líquido na separação flash de uma mistura multicomponente (etano, propano, isobutano e penteno). Eles concluíram que modelos inferenciais empíricos baseados em funções racionais multivariáveis apresentam resultados equivalentes aos obtidos por modelos baseados em redes neurais. No entanto, modelos baseados em funções racionais têm como vantagem a disponibilidade de métodos simples e rápidos para o ajuste dos parâmetros.

Através da análise da literatura é possível observar portanto que muitos esforços têm sido feitos na tentativa de se desenvolver modelos inferenciais empíricos adequados para estimar a qualidade do produto em colunas de destilação. Estes esforços são reflexo da importância técnico-econômica assunto e do seu interesse no meio acadêmico.

A maior parte dos modelos propostos baseia-se na representação linear das relações entre as diversas variáveis do processo. Estes modelos podem produzir resultados imprecisos, em alguns casos, principalmente pelo fato da relação entre as variáveis nestes processos ser altamente não-linear.

Grande parte dos modelos baseados na representação não-linear das relações entre as diferentes variáveis do processo apresentam um sério inconveniente: a dificuldade associada à determinação dos parâmetros do modelo. Como exemplo pode-se citar os modelos baseados em funções polinomiais multivariáveis e redes neurais. No entanto, a literatura tem apontado para os promissores resultados obtidos com a utilização de funções racionais multivariáveis na modelagem de processos não-lineares.

Assim sendo, no presente trabalho decidiu-se investigar o potencial das funções racionais multivariáveis no desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos. Seu objetivo é o desenvolvimento de uma metodologia para a obtenção de modelos empíricos, baseados em funções racionais multivariáveis, capazes de atender às necessidades associadas à otimização e controle de colunas de destilação.

3. A INFERÊNCIA NO CONTROLE E OTIMIZAÇÃO DE COLUNAS DEBUTANIZADORAS

A indústria do refino do petróleo passa por um processo de grandes transformações com o objetivo de atender às prioridades ditadas pelo mercado no que diz respeito à qualidade e preço dos produtos. Assim, o controle e a otimização das diversas operações envolvidas no processo de refino do petróleo têm recebido especial incentivo visando promover uma maior eficiência e competitividade das empresas do setor.

A implantação de técnicas de otimização na operação de colunas debutanizadoras tem despertado um particular interesse na indústria do refino do petróleo. Este interesse é baseado no fato deste equipamento separar as correntes de maior valor comercial no processo de craqueamento catalítico do petróleo. Portanto, ganhos significativos são obtidos com a operação otimizada deste tipo de coluna.

O processo de craqueamento catalítico consiste na quebra (cracking) de moléculas pesadas, presentes no gasóleo, por ação de um catalisador à base de sílica-alumina. A ruptura das ligações possibilita o aparecimento de moléculas leves, principalmente compostos de 3 a 12 átomos de carbono. As reações também provocam, em menor escala, a formação de gases leves (1 a 2 átomos de carbono), gasóleo leve, gasóleo pesado e coque; este último deposita-se na superfície do catalisador.

A deposição do coque provoca a desativação do catalisador devido à considerável redução da área disponível aos reagentes. Com o objetivo de restaurar a sua atividade, o catalisador inativado pelo coque é continuamente retirado do vaso de reação e enviado a um vaso de regeneração onde, por intermédio de uma injeção de ar e por ação da alta temperatura, o coque é queimado, restabelecendo a sua atividade catalítica. Ao conjunto reator-regenerador dá-se o nome de conversor. A figura 3.1 apresenta um diagrama de blocos simplificado de uma unidade de craqueamento catalítico.

Os gases de craqueamento efluentes do reator são enviados à seção de fracionamento onde realiza-se uma separação primária dos produtos. O equipamento utilizado para este fim é uma coluna de destilação conhecida como fracionadora principal.

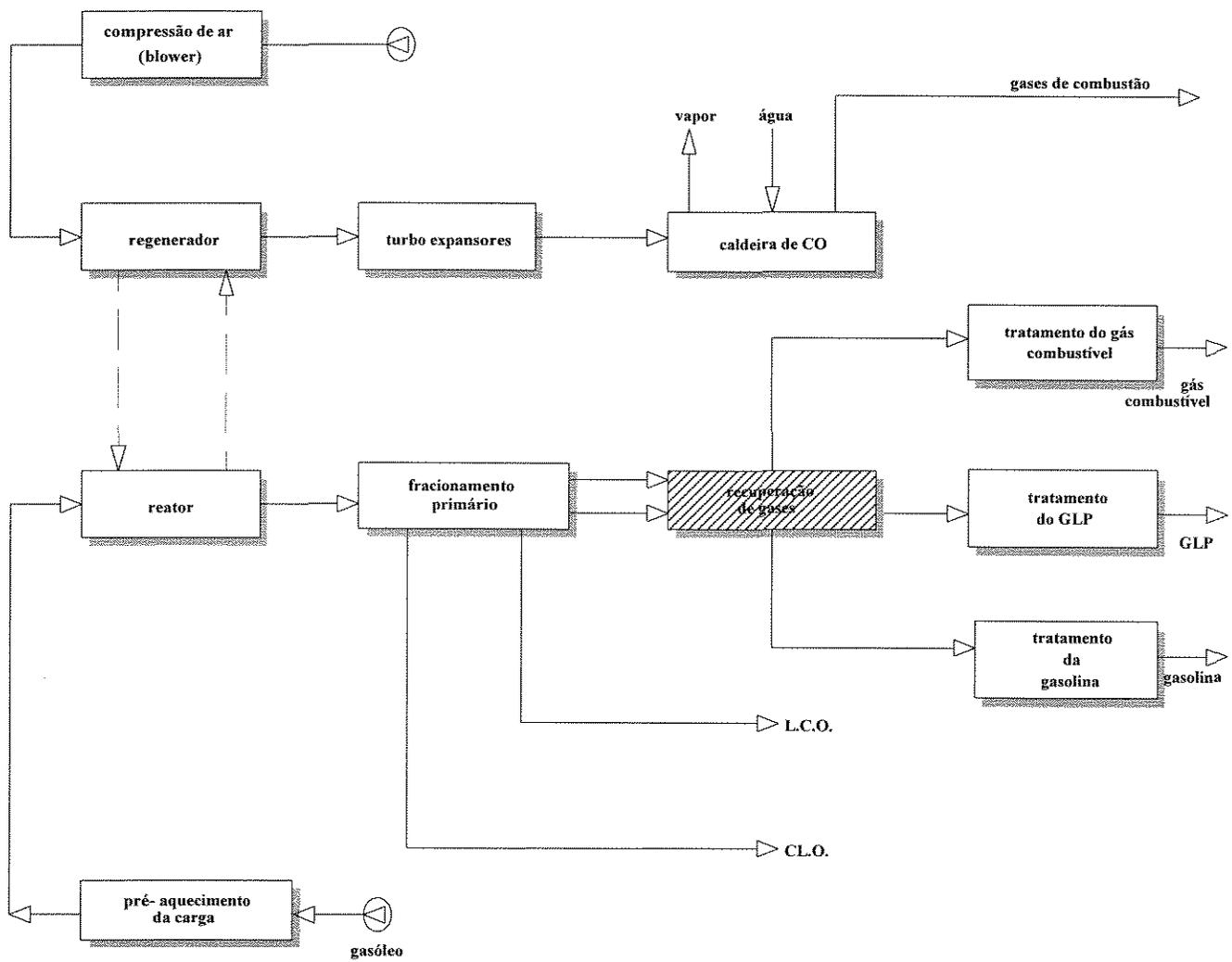


Figura 3.1 Diagrama de Blocos de uma Unidade de Craqueamento Catalítico

Pelo topo da fracionadora principal sai uma corrente gasosa contendo hidrocarbonetos na faixa de 1 a 12 átomos de carbono que, uma vez resfriada e condensada parcialmente gera no tambor de acúmulo duas correntes. Uma corrente gasosa composta de hidrocarbonetos leves (1 a 4 átomos de carbono) e uma corrente líquida constituída de nafta (5 a 12 átomos de carbono) com uma grande quantidade de hidrocarbonetos leves nela dissolvidos. Ambas as corrente são enviadas à seção de recuperação de gases. A fracionadora produz ainda uma corrente intermediária, denominada óleo leve ou LCO (light cicle oil) e uma corrente de fundo denominada óleo clarificado ou CLO (Clarified Oil).

A seção de recuperação de gases tem como objetivo promover o processamento das correntes de nafta e hidrocarbonetos leves, provenientes da fracionadora principal, separando-as em três frações distintas: o gás combustível (hidrocarbonetos de 1 a 2 átomos de carbono); o gás liquefeito de petróleo (hidrocarbonetos de 3 a 4 átomos de carbono) e a gasolina (hidrocarbonetos de 5 a 12 átomos de carbono). Para tanto realizam-se operações de compressão, absorção, retificação e destilação em várias etapas visando promover condições para que haja uma eficiente separação destes três produtos, com a maior recuperação possível de gás liquefeito de petróleo (GLP).

A recuperação de gases em uma unidade de craqueamento catalítico pode ser subdividida em três sistemas distintos, porém interligados: o sistema de compressão de gases; o sistema de absorção-retificação e o sistema de fracionamento. O objetivo do sistema de compressão de gases e do sistema de absorção-retificação é a obtenção de uma corrente de gás combustível praticamente isenta de GLP. Ao mesmo tempo, estes sistemas fazem com que o GLP, antes presente na corrente de gases, seja totalmente concentrado e absorvido pela nafta. A este produto dá-se o nome de nafta instabilizada.

O sistema de fracionamento da seção de recuperação de gases tem por objetivo separar a gasolina do gás liquefeito de petróleo. O sistema inicia-se com o bombeio da nafta instabilizada para uma coluna debutanizadora ou estabilizadora. Neste equipamento promove-se a separação da nafta instabilizada em duas correntes. A de topo, contendo hidrocarbonetos na faixa de 3 a 4 átomos de carbono e a de fundo, com a faixa restante. A figura 3.2 apresenta um fluxograma do sistema seção de fracionamento - seção de recuperação de gases de uma unidade de craqueamento catalítico, no qual a coluna debutanizadora aparece em destaque.

A pressão de operação da debutanizadora situa-se em torno de 12.0 kgf/cm². Este nível de pressão é suficiente para que o produto de topo, o gás liquefeito de petróleo, condense-se totalmente quando resfriado à temperatura ambiente.

A operação de debutanização deve satisfazer condições severas no que diz respeito às especificações dos produtos. O processo tem como finalidade especificar a pressão de vapor da nafta e o intemperismo do GLP. Pelo fundo da coluna sai a nafta estabilizada (gasolina), pronta para ser submetida ao tratamento para redução de enxofre e, após este, para a estocagem. Pelo topo saem os vapores de GLP que, após o resfriamento, são liquefeitos e coletados em um tambor de acúmulo. O calor necessário à operação da coluna é fornecido por trocadores refeedores de nafta localizados na base da debutanizadora. O fluido de aquecimento é normalmente uma corrente de refluxo circulante de HCO (heavy cycle oil).

Durante o processo realizam-se vários ensaios com o intuito de caracterizar as frações obtidas. Estes ensaios têm o objetivo de assegurar a operação das unidades de maneira conveniente garantindo, desta forma, a qualidade dos produtos. Muitas vezes, estes ensaios não são conduzidos de forma a medir uma propriedade física ou química, mas sim, controlar indiretamente outra variável empírica capaz de caracterizar o produto.

Nas colunas debutanizadoras as variáveis que controlam a qualidade dos produtos de topo e fundo são, respectivamente, o intemperismo do GLP e a pressão de vapor da nafta. Desta forma, uma coluna debutanizadora deve operar de modo a manter o intemperismo do GLP e a pressão de vapor da nafta enquadrados nas normas existentes. No entanto, a operação deste tipo de coluna tem mostrado que a pressão de vapor da nafta sempre satisfaz a sua especificação quando o intemperismo do GLP encontra-se enquadrado na dele. Assim sendo, o simples enquadramento do intemperismo GLP na sua especificação garante o cumprimento da especificação da pressão de vapor da nafta. Logo, o conhecimento do intemperismo do GLP é de fundamental importância na operação deste tipo de equipamento.

O intemperismo é definido como a temperatura na qual 95%, em volume, do produto estão volatilizados à pressão atmosférica. O ensaio do intemperismo tem por objetivo controlar o teor de hidrocarbonetos mais pesados que o butano (C₅ +), que podem estar presentes no GLP. Isto deve-se à necessidade de se ter um produto de fácil vaporização à pressão atmosférica.

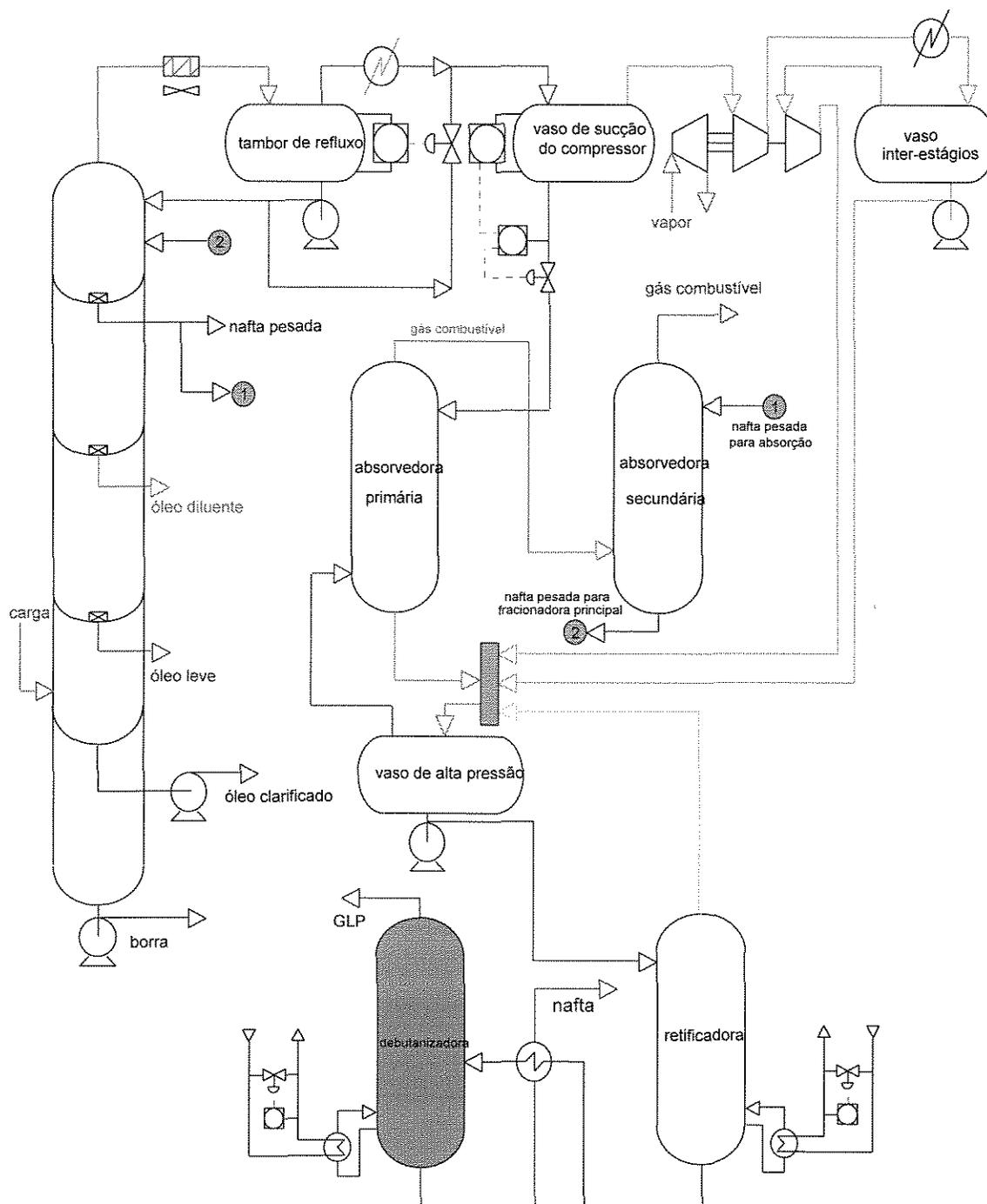


Figura 3.2- Fluxograma Seção de Fracionamento/ Recuperação de Gases de uma Unidade de Craqueamento Catalítico

O ensaio do intemperismo descrito na norma ASTM D 1837-86 ⁽¹³⁾ e MB-285/1970 da ABNT ⁽¹⁴⁾ pode ser resumido no seguinte procedimento.

Coleta-se uma amostra de 100 ml do produto em um tubo de evaporação como o apresentado na figura 3.3. A seguir, deixa-se o líquido evaporar sob condições específicas (pressão atmosférica) e observa-se a temperatura quando 95%, em volume, da amostra houverem sido evaporados. Deve-se fazer correção para variação de pressão barométrica.

O ensaio dura em média 30 minutos e apresenta uma repetibilidade de 0.56 e uma reprodutibilidade de 1 °C.

As tabelas 3.1 e 3.2 apresentam as especificações do GLP e da gasolina para o mercado brasileiro. Estas especificações, porém, são para os produtos finais da unidade após terem recebido o tratamento posterior ao processo de separação. As especificações a serem obtidas na debutanizadora são apresentadas na tabela 3.3.

Tabela 3.1- Especificações do Gás Liquefeito de Petróleo para o Mercado Nacional

Pressão de Vapor a 37.8 °C (kgf/cm ²)	15.0 (máx)
Intemperismo do GLP Ponto de ebulição (°C) 95% evaporados (volume) (760 mmHg)	2.0 (máx)

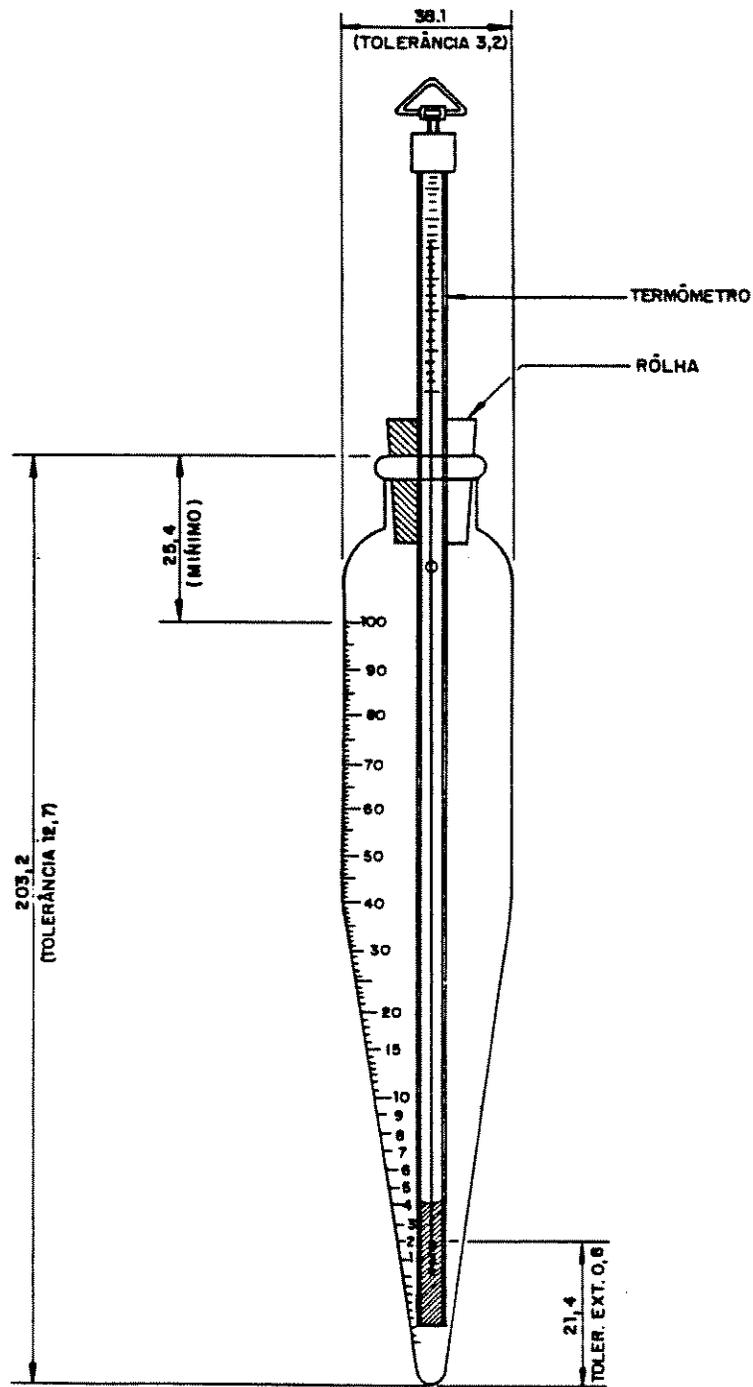


Figura 3.3- Equipamento para a determinação experimental do intemperismo

Tabela 3.2- Especificação da Gasolina para o Mercado Nacional

Pressão de Vapor a 37.8 C (kgf/cm ²)	0.7 (máx)
Ponto de Ebulição (°C) 10% evaporados (volume) (760 mmHg)	70.0 (máx)
Ponto de Ebulição (°C) 50% evaporados (volume) (760 mmHg)	140.0 (máx)
Ponto de Ebulição (°C) 100% evaporados (volume) (760 mmHg)	220.0 (máx)

Sgarbosa & Mendes ⁽¹⁵⁾ desenvolveram dois métodos especialmente úteis para o cálculo do intemperismo a partir de modelagem e simulação do ensaio experimental. Estes métodos baseiam-se no cálculo do intemperismo a partir da composição do GLP.

No método dos Flashes Sucessivos assume-se que o ensaio do intemperismo pode ser representado por uma bateria de tambores flash colocados em série. Uma carga com a composição do GLP alimenta a bateria de tambores flash. No primeiro tambor a carga é parcialmente vaporizada, sendo a vazão de vapor lançada para a atmosfera e a vazão de líquido enviada como carga para o segundo tambor. O mesmo procedimento é repetido no tambor seguinte, e assim, sucessivamente.

Para cada um dos tambores, uma porcentagem fixa de vaporização igual a 95/Ni, em relação à carga do primeiro estágio, é fixada, sendo que Ni é o número de estágios de flash. A pressão é constante e igual a pressão atmosférica em todos os estágios.

Conhecendo-se a pressão, a composição e a porcentagem vaporizada no estágio é possível se obter a temperatura no mesmo. O intemperismo é a temperatura no estágio no qual se tem 95% da alimentação vaporizada. Para se conseguir o valor final do intemperismo faz-se necessário um mínimo de 50 estágios.

Devido ao grande número de estágios necessários para a obtenção do valor final do intemperismo, o tempo de execução do programa é relativamente longo para ser utilizado acoplado a um algoritmo de otimização, principalmente, levando-se em conta o elevado número de vezes que esta rotina deve ser executada.

No método da destilação em batelada assume-se que o ensaio experimental pode ser representado por uma destilação diferencial. Este método reduziu em 1/3 o tempo de computação necessário para o cálculo do intemperismo quando comparado ao método dos flashes sucessivos. Porém, esta redução não foi o suficiente para viabilizar a otimização on-line deste tipo de coluna. Deste modo, o desenvolvimento de um modelo empírico para inferir o intemperismo do GLP apresenta-se como uma alternativa natural para a solução deste tipo de problema.

<i>Tabela 3.3- Especificações para a Coluna Debutanizadora</i>	
Pressão de Vapor a 37.8 °C (kgf/cm ²)	0.7 (máx)
Intemperismo do GLP Ponto de ebulição (°C) 95% evaporados (volume) (760 mmHg)	2.0 (máx)

4. INFERÊNCIA DO INTEMPERISMO VIA FUNÇÕES RACIONAIS

Uma metodologia para o desenvolvimento de um modelo inferencial empírico deve, fundamentalmente, ser dividida em três etapas. A primeira delas consiste na obtenção dos dados a serem utilizados no modelo. A segunda etapa a ser desenvolvida é a de seleção das variáveis inferenciais com o melhor poder preditivo. A etapa final é a de ajuste dos dados ao modelo escolhido utilizando regressão linear ou não-linear.

Na sequência deste trabalho apresenta-se, separadamente, cada uma destas etapas no desenvolvimento de um modelo empírico para inferir o intemperismo do GLP em uma coluna debutanizadora.

4.1 Simulação da Coluna em Regime Estacionário

O ponto de partida para o desenvolvimento de um modelo inferencial empírico é a construção da matriz de dados do processo. A etapa de construção da matriz de dados do processo não deve ser menosprezada pois, quanto mais volumosos os dados, maior a chance de problemas de consistência, compatibilidade, armazenamento, etc. Assim, o sucesso no desenvolvimento de um modelo empírico para inferir o intemperismo está diretamente relacionado ao conjunto de dados coletados. Algumas questões importantes devem ser observadas no que diz respeito à coleta de dados. A primeira delas é que os dados coletados devem conter informações sobre todas as perturbações e variáveis manipuladas importantes no processo. Alguns métodos propostos para a construção de modelos inferenciais baseiam-se na coleta de dados através de simulação rigorosa do processo. Se dados reais são coletados para um período representativo de operação, as respostas do processo para todas as perturbações relevantes nas variáveis da alimentação devem ser incluídas.

A segunda e a mais importante questão a ser observada é que o modelo inferencial empírico obtido é válido para a estrutura de controle no qual o processo encontra-se submetido durante a coleta de dados. Assim, o modelo pode ser utilizado para inferir o comportamento do processo somente durante o período em que o processo estiver operando dentro de uma estrutura de controle similar à utilizada na coleta de dados. A introdução de uma nova configuração de controle pode alterar significativamente o modo de operação de um processo. Logo, desejando-se obter um modelo empírico para o controle inferencial de uma coluna de destilação, faz-se necessária a coleta de dados dentro de um esquema de controle o mais próximo possível daquele a ser utilizado.

Sendo o principal objetivo deste trabalho investigar a eficiência da utilização de funções racionais no desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos, achou-se interessante analisar o problema da forma menos restrita possível, ou seja, sem considerar uma configuração de controle específica. Além disto, um modelo empírico para inferência do intemperismo, desenvolvido a partir de dados coletados em malha aberta, mostra-se perfeitamente aplicável na otimização on-line de colunas debutanizadoras.

A coleta de dados para a construção do modelo foi feita a partir de uma simulação da coluna em regime estacionário. O método utilizado para este fim foi o método de Naphtali-Sandholm ⁽¹⁶⁾. Este método propõe a resolução simultânea global das equações que compõem o modelo da coluna. Além de prático, o método considera a eficiência dos pratos de maneira simplificada. As equações são agrupadas estágio por estágio e então linearizadas. O conjunto de equações resultantes forma um bloco de estrutura diagonal que é resolvido de forma simultânea utilizando o método de Newton-Raphson.

A técnica proposta por Naphtali-Sandholm apresenta uma série de vantagens. A linearização das equações acelera a convergência a medida que se aproxima da solução. Pode ser aplicado a colunas complexas com qualquer número de alimentações e correntes laterais. A faixa de volatilidade dos componentes não afeta a convergência. É um método rápido; a maioria dos problemas são resolvidos em menos de dez iterações.

Devido a estas vantagens e à comprovada eficiência do método no meio acadêmico e industrial optou-se pela utilização do mesmo na simulação rigorosa da coluna. O programa implementado foi o proposto por Fredenslund et al ⁽¹⁷⁾. A este

programa foram adicionadas as mudanças necessárias para adaptá-lo ao problema estudado. Uma sub-rotina para o cálculo do intemperismo a partir da composição do produto de topo foi acoplada ao simulador. A sub-rotina acoplada ao simulador tem o seu procedimento de cálculo baseado no método da destilação em batelada proposto por Sgarbosa & Mendes. O ANEXO-1 apresenta detalhadamente o procedimento utilizado para o cálculo do intemperismo bem como o fluxograma da sub-rotina utilizada para este fim.

A operação da coluna não fica definida apenas pelo conjunto de equações que compõem o seu modelo, fazendo-se necessária a especificação de um conjunto de variáveis para a definição completa do problema. As variáveis especificadas para a simulação da operação da coluna debutanizadora através do método de Naphtali-Sandholm foram :

- Composição da alimentação;
- Vazão da alimentação;
- Temperatura da alimentação;
- Pressão na coluna (constante);
- Razão de refluxo;
- Vazão do destilado.

Estas variáveis formam um conjunto de $NC+4$ especificações necessárias para a definição completa do problema, sendo NC o número de componentes na carga alimentada. Com estas especificações o programa fornece o perfil de temperatura, as concentrações dos componentes nas fases líquido e vapor que deixam os estágios e as cargas térmicas do condensador e do refeedor. A figura 4.1 apresenta um fluxograma do procedimento de cálculo do método de Naphtali-Sandholm. Uma análise dos graus de liberdade da coluna debutanizadora é apresentada no ANEXO-2.

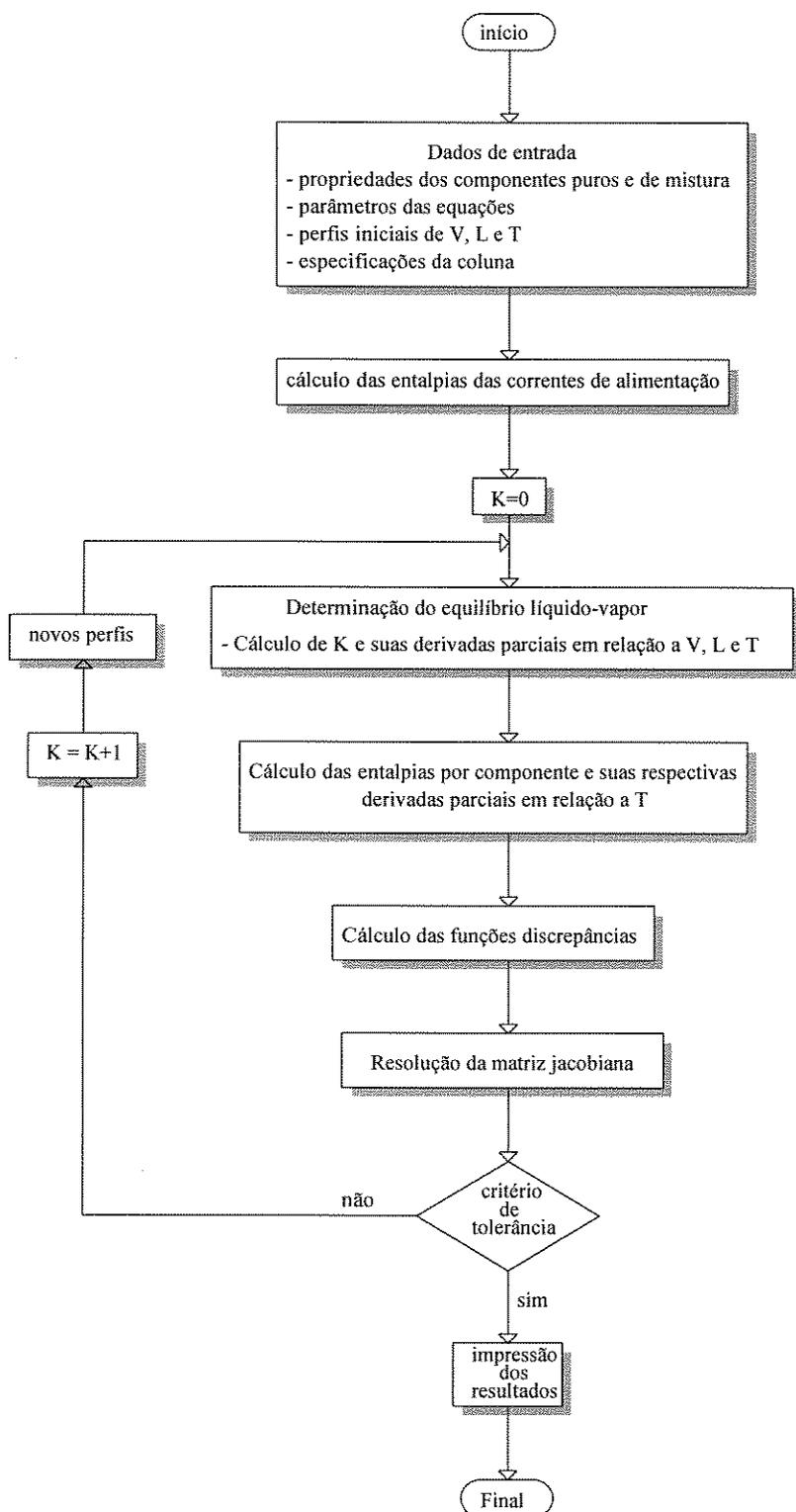


Figura 4.1- Procedimento de Cálculo do Método de Naphtali-Sandholm

4.2- Seleção das Variáveis Inferenciais

A matriz de dados do processo, obtida na etapa de simulação da coluna, pode ser particionada em dois conjuntos de variáveis: o das variáveis dependentes e o das variáveis explicativas. O primeiro conjunto é composto pelas variáveis cujo comportamento se deseja modelar. O segundo é composto pelas variáveis que podem ser utilizadas para prever o valor da variável dependente. No caso da coluna debutanizadora, o conjunto das variáveis dependentes é formado pelos valores obtidos para o intemperismo nas diferentes situações operacionais simuladas na etapa anterior. Em um primeiro momento é possível dizer que o conjunto das variáveis explicativas é formado pelas demais variáveis do processo; no entanto, para uma definição mais precisa do conjunto de variáveis explicativas a serem utilizadas no modelo, faz-se necessária uma análise mais elaborada de alguns aspectos que envolvem o problema.

O primeiro destes aspectos diz respeito ao fato da coluna debutanizadora apresentar variáveis operacionalmente mensuráveis e operacionalmente não-mensuráveis. Variáveis operacionalmente não-mensuráveis não podem ser consideradas variáveis explicativas. A composição da carga de alimentação, por exemplo, é uma variável que não pode ser operacionalmente mensurada. Assim, ela não pode ser utilizada para prever o valor da variável dependente (intemperismo). Este fato reduz o conjunto das variáveis explicativas do processo ao conjunto das variáveis operacionalmente mensuráveis.

O segundo aspecto a ser analisado diz respeito à capacidade de prever o comportamento da variável dependente, poder preditivo, que deve estar associado às variáveis explicativas. Em termos operacionais, as variáveis que definem a composição dos produtos em uma coluna de destilação são as variáveis de entrada do sistema. Desta forma pode-se dizer que a composição dos produtos em uma coluna debutanizadora é determinada não só pela pressão, razão de refluxo e calor do refeedor mas também pelas variáveis que caracterizam a carga de alimentação (composição, vazão e temperatura). Sendo o intemperismo uma propriedade que caracteriza a composição do produto de topo da debutanizadora, estas variáveis apresentam-se como as candidatas naturais à condição de variáveis explicativas em um modelo com a finalidade de inferir esta propriedade. Assim, define-se o conjunto das variáveis explicativas como sendo o conjunto das variáveis de entrada do sistema.

Visto que a composição da carga de alimentação não pode fazer parte do conjunto de variáveis explicativas do intemperismo, faz-se necessária a inclusão de outras variáveis neste conjunto para a sua substituição. O perfil de temperatura da coluna aparece como o melhor candidato entre as variáveis que poderiam ser utilizadas para este fim. Entre as vantagens decorrentes da inclusão do perfil de temperatura no conjunto de variáveis explicativas do modelo encontram-se a intensa associação dos perfis de temperatura e de composição neste tipo de equipamento e a facilidade com que estas variáveis podem ser operacionalmente mensuradas.

Quando existe um número elevado de variáveis explicativas, o problema de se determinar quais variáveis explicativas serão utilizadas no modelo de regressão torna-se complexo, pois seria necessário tentar todas as combinações de variáveis para selecionar o melhor modelo. Além disto, é muito comum a presença de variáveis explicativas com forte dependência linear entre si. Este fato é conhecido como colinearidade entre as variáveis. A presença de colinearidade entre as variáveis significa que algumas das variáveis do conjunto de dados explicativos apresentam-se correlacionadas com outras variáveis do conjunto e, portanto, contém informações redundantes. Quando isto ocorre, a determinação dos parâmetros dos modelos de regressão múltipla pode ser prejudicada resultando em modelos de predição pouco eficientes.

No conjunto das variáveis explicativas previamente selecionadas, as variáveis que apresentam colinearidade com maior frequência são as variáveis que compõem o perfil de temperatura da coluna. Assim sendo, a seleção de algumas poucas temperaturas para a representação do perfil de temperatura completo é um procedimento recomendável. Além de reduzir o número de combinações necessárias para o estabelecimento do modelo, este procedimento deve ter como objetivo principal a seleção de temperaturas que sejam ao mesmo tempo descorrelacionadas e sensíveis às mudanças operacionais no processo.

Métodos baseados na análise gráfica da sensibilidade da temperatura dos estágios para diferentes mudanças operacionais na coluna nem sempre fornecem informações relevantes para a escolha das temperaturas mais convenientes. Além disto, a análise gráfica da sensibilidade da temperatura dos estágios para diferentes mudanças operacionais na coluna pode garantir a seleção das temperaturas mais sensíveis, porém não garante que as temperaturas escolhidas sejam descorrelacionadas.

Com o objetivo de contornar estas dificuldades, no presente trabalho, introduzem-se alguns conceitos e uma técnica deles decorrente que se mostraram úteis na compreensão e análise do problema da seleção de temperaturas no desenvolvimento de modelos inferenciais para colunas de destilação.

O primeiro conceito a ser introduzido é conhecido como Análise de Componentes Principais (18, 19, 20). A análise de componentes principais (PCA) faz parte de um conjunto de técnicas propostas por uma área da estatística denominada Análise de Dados Multivariados. O objetivo da PCA é determinar uma transformação linear das variáveis originais, geralmente correlacionadas, que resulte em novas variáveis, chamadas de Componentes Principais - \mathbf{a}_i , com as seguintes propriedades:

- As componente principais são descorrelacionadas;
- A variância total das componentes é a mesma das variáveis originais;
- $\text{Var}(\mathbf{a}_1) \geq \text{Var}(\mathbf{a}_2) \geq \dots \geq \text{Var}(\mathbf{a}_p)$, sendo $\text{Var}(\mathbf{a}_i)$ a variância dos dados na direção determinada pela componente principal \mathbf{a}_i e p o número de variáveis originais.

A transformação linear procurada é obtida através do seguinte produto:

$$\mathbf{XA} = \mathbf{Y} \quad (4.1)$$

onde:

\mathbf{X} é uma matriz $n \times m$ de dados centrados e escalados;

\mathbf{A} é uma matriz $m \times m$, cujas colunas são os autovetores normalizados da matriz de covariância $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$;

\mathbf{Y} é uma matriz $n \times m$, cujas colunas são projeções da matriz \mathbf{X} nos eixos determinados pelas colunas da matriz \mathbf{A} .

Para atingir o seu objetivo a PCA cria variáveis novas expressas em um sistema de eixos dado pelos autovalores da matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$. Devido ao fato dos autovalores da matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ ocuparem o mesmo espaço que as variáveis originais eles podem ser usados como um conjunto novo de eixos para a matriz \mathbf{X} . Assim, cada ponto da amostra tem um conjunto novo de coordenadas definido pela sua projeção sobre os eixos novos.

Estes eixos novos são mais úteis para descrever a variação ou dispersão dos dados. O primeiro autovetor da matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ é, por definição, a direção no espaço, definida pelas variáveis de \mathbf{X} , que descreve a máxima variação ou dispersão das amostras. Analogamente, o segundo autovetor da matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ é a direção no espaço que descreve a segunda maior variação ou dispersão das amostras. Este fato se repete para todos os os autovetores da matriz $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$. A PCA pode ser interpretada geometricamente como uma rotação dos eixos coordenados no espaço definido pelas variáveis originais. A figura 4.2 apresenta um exemplo da aplicação da PCA em um conjunto hipotético de dados.

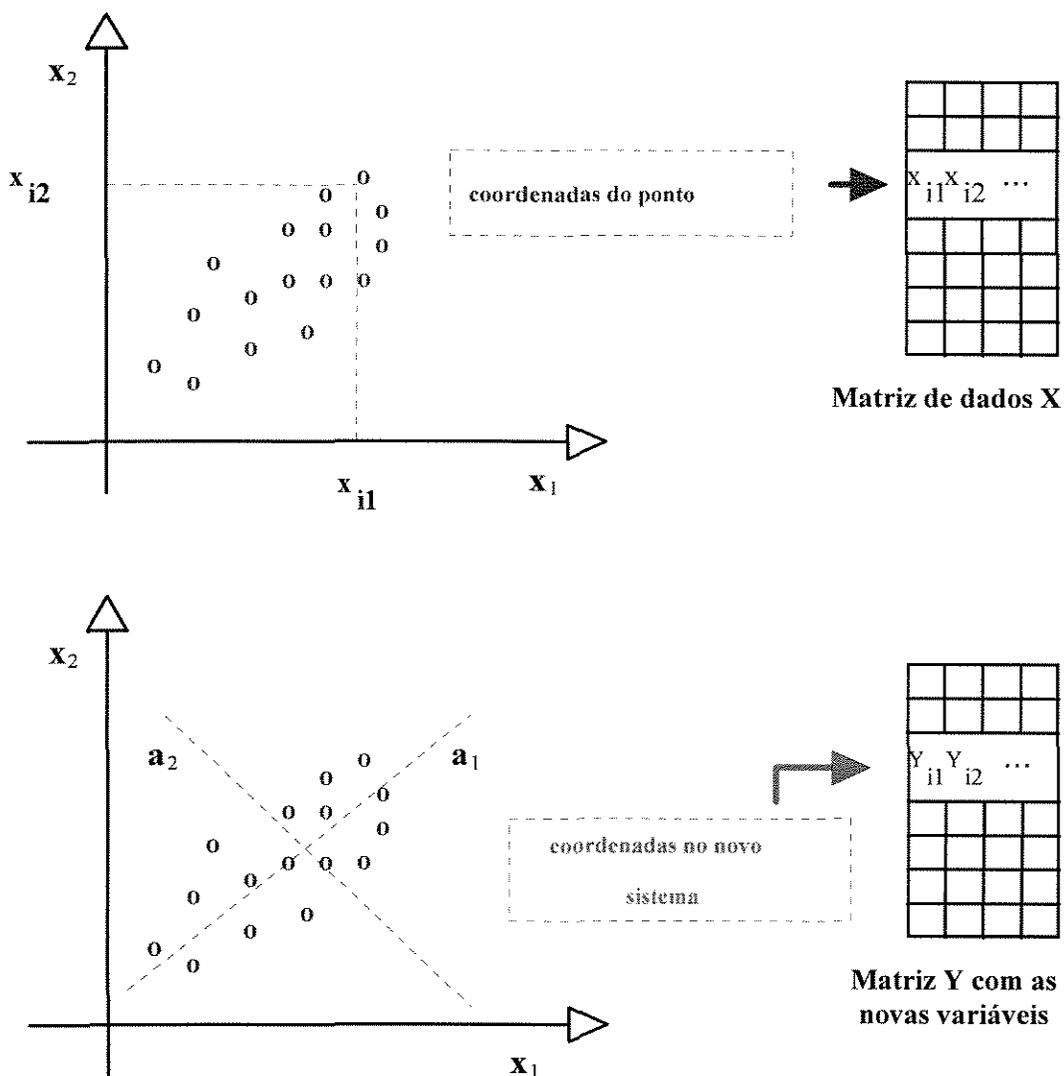


Figura 4.2- Exemplo de Aplicação da PCA em um conjunto hipotético de dados

Um conhecimento importante para a aplicação da PCA é o conhecimento do conceito de Decomposição em Valores Singulares. A decomposição em valores singulares (SVD) é um conceito da álgebra linear que pode ser aplicado a processos industriais na forma de numerosas técnicas que fornecem informações qualitativas sobre controlabilidade, alocação de sensores, emparelhamento de malhas de controle e desacoplamento de controle multivariável (Desphande ⁽¹⁸⁾).

A SVD é um algoritmo numérico desenvolvido para minimizar erros computacionais envolvendo operações com matrizes grandes. A decomposição em valores singulares de uma matriz \mathbf{K} resulta em três matrizes componentes (Noble & Daniel ⁽¹⁹⁾):

$$\mathbf{K} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T \quad (4.2)$$

onde:

\mathbf{K} é uma matriz $n \times m$;

\mathbf{U} é uma matriz ortonormal $n \times n$, cujas colunas \mathbf{u}_i são chamadas de "Vetores Singulares Esquerdos" ;

\mathbf{V} é uma matriz ortonormal $m \times m$, cujas colunas \mathbf{v}_i são chamadas de "Vetores Singulares Direitos" ;

$\mathbf{\Sigma}$ é uma matriz diagonal $n \times m$ de escalares σ_i , chamados de "Valores Singulares" e organizados em ordem decrescente da seguinte forma:

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \sigma_3 \geq \dots \geq \sigma_m \geq 0$$

O número σ_i^2 fornece os autovalores da matriz $\mathbf{K}^T \mathbf{K}$, sendo as colunas \mathbf{v}_i de \mathbf{V} os autovetores a eles associados. Similarmente, o número σ_i^2 fornece os autovalores da matriz $\mathbf{K} \mathbf{K}^T$, sendo as colunas \mathbf{u}_i de \mathbf{U} os autovetores a eles associados. Os vetores singulares direito e esquerdo são relacionados por :

$$\mathbf{K}\mathbf{v}_i = \mathbf{u}_i\sigma_i \quad (4.3)$$

A SVD é projetada para determinar o posto e o condicionamento da matriz e para mostrar geométricamente o comportamento do conjunto de equações a ela associado de forma que erros envolvendo cálculos numéricos com a matriz possam ser evitados. Algoritmos para a determinação da SVD de uma matriz têm sido estudados por analistas numéricos e podem ser aplicados com grande eficiência.

A conexão entre os conceitos da PCA e da SVD pode ser facilmente entendida através de uma comparação das equações 4.1 e 4.3. Assumindo-se que a matriz \mathbf{A} da equação 4.1 seja submetida a decomposição em valores singulares representada pela equação 4.2 é possível perceber que os vetores \mathbf{y}_i que compõem a matriz \mathbf{Y} procurada correspondem aos vetores $\mathbf{u}_i\sigma_i$ apresentados na equação 4.3. Assim, os algoritmos disponíveis para a determinação da SVD podem ser aplicados para a solução de problemas que envolvem a análise de componentes principais.

O procedimento utilizado para a seleção dos estágios com as temperaturas que melhor representam o perfil de temperatura da debutanizadora baseou-se na análise dos componentes principais da matriz dos ganhos de temperatura na coluna. Em primeiro lugar montou-se uma matriz de dados com os ganhos de temperatura produzidos por cada uma das variáveis de entrada do sistema em cada um dos estágios da coluna. Esta matriz é uma escala física da sensibilidade da temperatura em cada estágio para mudanças em cada uma das variáveis de entrada do sistema. Os elementos $\mathbf{K}_{i,j}$ da matriz \mathbf{K} dos ganhos de temperatura foram determinados através de simulação em estado estacionário e foram definidos pela seguinte expressão:

$$\mathbf{K}_{i,j} = \frac{d\mathbf{T}_i}{d\mathbf{E}_j} \quad (4.4)$$

onde

$d\mathbf{T}_i$ é a variação de temperatura no estágio i

e

$d\mathbf{E}_j$ é a variação da variável de entrada j .

Uma vez determinada a matriz dos ganhos de temperatura, esta matriz foi decomposta em valores singulares. Calculou-se o produto $\mathbf{u}_i\sigma_i$ dos vetores singulares esquerdos com os seus respectivos valores singulares e, com base nestes resultados, fez-se a seleção dos estágios com as temperaturas que melhor representam o perfil de temperatura completo da coluna para diferentes mudanças nas variáveis de entrada do sistema.

Conforme visto anteriormente, os vetores $\mathbf{u}_i\sigma_i$ são as coordenadas da projeção dos dados da matriz \mathbf{K} no sistema de coordenadas determinado pelas componentes principais. Desta forma pode-se dizer que o vetor $\mathbf{u}_1\sigma_1$ corresponde as coordenadas da projeção dos dados da matriz \mathbf{K} no eixo determinado pela primeira componente principal. Analogamente, o vetor $\mathbf{u}_2\sigma_2$ corresponde as coordenadas da projeção dos dados da matriz \mathbf{K} no eixo determinado pela segunda componente principal e assim por diante.

O critério utilizado para a seleção dos estágios com as melhores temperaturas foi o da escolha do elemento com a maior coordenada, em valor absoluto, no vetor $\mathbf{u}_i\sigma_i$. A temperatura do estágio selecionado com base no vetor $\mathbf{u}_1\sigma_1$ corresponde à temperatura que melhor representa as variações produzidas no perfil de temperatura da coluna através de mudanças nas variáveis de entrada do sistema. Analogamente, a temperatura do estágio selecionado com base no vetor $\mathbf{u}_2\sigma_2$ corresponde à segunda melhor temperatura para a representação de variações produzidas no perfil de temperatura da coluna através de mudanças nas variáveis de entrada do sistema. Além disto, as temperaturas dos estágios selecionados com base nos vetores $\mathbf{u}_1\sigma_1$ e $\mathbf{u}_2\sigma_2$ são independentes uma vez que $\mathbf{u}_1\sigma_1$ e $\mathbf{u}_2\sigma_2$ são vetores ortogonais. Este mesmo raciocínio pode ser estendido para as temperaturas dos estágios selecionados com base nos outros vetores $\mathbf{u}_i\sigma_i$.

Com a determinação das temperaturas que melhor representam o perfil de temperatura da coluna debutanizadora o conjunto das variáveis explicativas a serem utilizadas na etapa de seleção e ajuste do modelo para inferir o intemperismo fica completamente definido. Este conjunto é conhecido como o conjunto das variáveis inferenciais do processo.

4.3- Seleção e Ajuste do Modelo

Uma das características das funções racionais que mais tem chamado a atenção para o seu uso no desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos é a sua grande habilidade na representação de fenômenos não lineares.

Uma função racional multivariável apresenta a seguinte forma geral:

$$\mathbf{f} = \frac{\mathbf{p}(\mathbf{x})}{\mathbf{q}(\mathbf{x})}, \quad (4.5)$$

onde \mathbf{p} e \mathbf{q} são polinômios em \mathbf{x} . Tais funções são excelentes na representação de dados não lineares e fornecem um maior grau de não-linearidade para um dado número de parâmetros que as funções polinomiais. Até mesmo funções racionais de primeira ordem:

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1\mathbf{x}}{\mathbf{1} + \mathbf{b}_1\mathbf{x}}, \quad (4.6)$$

apresentam um poderoso grau de não-linearidade que tem sido explorado em inúmeras aplicações.

Uma propriedade chave das funções racionais de primeira ordem aparece na sua forma multivariável:

$$\mathbf{y} = \frac{\mathbf{a}_0 + \mathbf{a}_1\mathbf{x}_1 + \mathbf{a}_2\mathbf{x}_2 + \mathbf{a}_3\mathbf{x}_3 + \dots}{\mathbf{1} + \mathbf{b}_1\mathbf{x}_1 + \mathbf{b}_2\mathbf{x}_2 \dots}, \quad (4.7)$$

uma vez que esta função além de incorporar não-linearidade em cada uma das variáveis, assim como faz a forma monovariável, também incorpora interações não-lineares entre as diferentes variáveis. As funções racionais multivariáveis de primeira ordem incorporam, em certo grau, interações de ordem n entre todas as variáveis. Apesar disto, o número de parâmetros cresce apenas linearmente com o acréscimo no número de variáveis (11,12). Neste fato reside uma das grandes vantagens deste tipo de função em relação às funções polinomiais e às redes neurais, uma vez que estas apresentam, respectivamente, crescimento fatorial e polinomial no número de parâmetros.

A determinação dos parâmetros em funções racionais multivariáveis é baseada em regressão não-linear. Embora existam métodos específicos para a determinação dos parâmetros de funções racionais (23) eles também podem ser obtidos pelos vários métodos gerais de otimização largamente utilizados para estimar parâmetros de modelos não-lineares. Entre eles podemos citar o métodos de Gauss-Newton e Levenberg-Marquardt. Estes métodos são computacionalmente eficientes e apresentam rápida convergência quando boas estimativas iniciais são fornecidas.

O método utilizado para o ajuste dos parâmetros das funções racionais, nos modelo testados no presente trabalho, foi o de Levenberg-Marquardt. As estimativas iniciais dos parâmetros do modelo foram obtidas através da técnica proposta por Ratkowsky (24). Nesta técnica faz-se uma transformação da função racional original segundo a fórmula:

$$y = \sum_{i=0}^N a_i x_i - \sum_{i=1}^N b_i x_i y \quad (4.8)$$

onde

y = variável a ser inferida

x_i = variável inferencial i

a_i = parâmetro no polinômio p

b_i = parâmetro no polinômio q

i = índices para os parâmetros nos polinômios p e q

N = número de variáveis inferenciais

e

$x_0 = 1$.

A função obtida apresenta um comportamento próximo do linear. Assim, boas estimativas iniciais para os parâmetros da função racional original podem ser obtidas através da resolução do problema dos mínimos quadrados da função transformada.

Selecionado o método de ajuste dos parâmetros e conhecido o conjunto das variáveis inferenciais candidatas a serem utilizadas no modelo inicia-se a busca do modelo inferencial empírico mais conveniente para estimar o intemperismo do GLP. No presente trabalho, o software MATLAB ⁽²⁵⁾ foi utilizado para este fim. O procedimento utilizado na busca do modelo mais conveniente para estimar o intemperismo pode ser dividido em duas fases: a fase de calibração e a fase de predição. Na primeira, faz-se o ajuste dos parâmetros do modelo com base em um conjunto de dados previamente definido. Na segunda, faz-se uma avaliação do poder preditivo do modelo ajustado para um conjunto diferente de dados. Vários modelos baseados em combinações entre as variáveis previamente selecionadas foram testados. Os resultados obtidos nas etapas de seleção e ajuste modelo serão apresentados no próximo capítulo.

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

5.1 - Obtenção dos Valores do Intemperismo para Diferentes Condições Operacionais da Coluna

O método selecionado para a simulação estática da coluna debutanizadora foi apresentado no capítulo 4. A coluna estudada possui 31 estágios reais e condensador total, sendo que os estágio número 1 e 31 representam respectivamente o condensador e o refeedor. A alimentação é feita no estágio número 16, contado a partir do topo da coluna. A figura 5.1 apresenta uma representação esquemática da coluna debutanizadora. As condições operacionais típicas da debutanizadora estudada estão apresentadas na tabela 5.1.

A carga da coluna debutanizadora é uma mistura de GLP e nafta. O GLP é rotineiramente analisado por cromatografia. A nafta é rotineiramente analisada por destilação ASTM D-86, uma vez que análises cromatográficas da nafta são esporádicas e difíceis de se fazer. Assim sendo, escolheu-se uma composição de carga fruto da combinação da composição do GLP, obtida via cromatografia, e da composição da nafta. Esta última foi selecionada para reproduzir valores típicos para a destilação ASTM D-86 (especificação de 220 °C máximo para 100% vaporizados). A tabela 5.2 apresenta as especificações das cargas utilizadas na simulação da debutanizadora.

O conjunto de dados necessários para o desenvolvimento do modelo foi obtido através do seguinte procedimento. Em primeiro lugar, simulou-se o comportamento da debutanizadora para as condições operacionais típicas em regime estacionário. Este caso foi assumido como o caso base no estudo desenvolvido. A seguir, simulou-se o comportamento da coluna para as mudanças, apresentadas nas tabelas 5.1 e 5.2, nas variáveis operacionais deste equipamento.

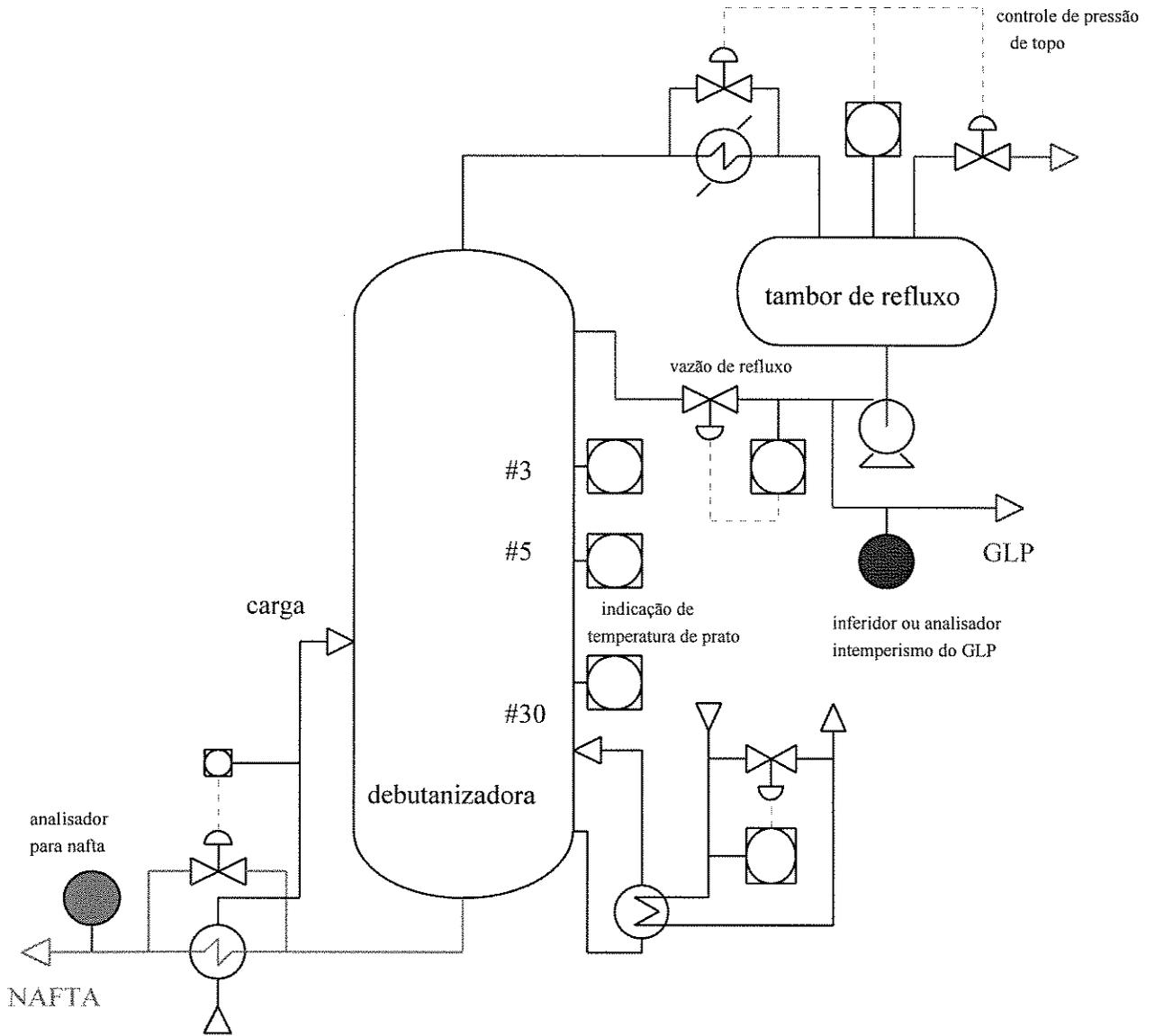


Figura 5.1- Representação Esquemática da Coluna Debutanizadora

Inicialmente simulou-se o comportamento da coluna para as mudanças nas variáveis da alimentação (composição, vazão e temperatura) apresentadas nas tabelas 5.1 e 5.2. Os casos simulados basearam-se em mudanças simultâneas nas três variáveis a partir do caso base. Eles incluíram todas as combinações possíveis para as mudanças, apresentadas nas tabelas 5.1 e 5.2, nos valores destas variáveis. Desta forma, um sub-conjunto com 8 simulações foi obtido.

Tabela 5.1- Especificações utilizadas na simulação da coluna em regime estacionário

	Caso Base	Mudanças nas Variáveis
Vazão de Alimentação (kgmol/h)	1567	±10%
Temperatura de Alimentação (oC)	120	±5%
Vazão do destilado (kgmol/h)	600	±10%
Razão de Refluxo	1.5	±20%
Eficiência dos Pratos	0.75	constante
Pressão em todos os pratos (kgf/cm ²)	12.0	±8%
Calor no refeedor (GJ/h)	16.80	_____
Intemperismo (oC)	1.19	_____

Tabela 5.2- Caracterização da Carga de Alimentação

i	componente	carga 1 (caso base)	carga 2	carga 3
		55% pesados	50% pesados	60% pesados
1	propano	0.0593	0.0659	0.0527
2	propeno	0.1459	0.1621	0.1297
3	n-butano	0.0282	0.0314	0.0251
4	i-butano	0.0686	0.0762	0.0610
5	i-buteno	0.0827	0.0919	0.0735
6	trans-buteno2	0.0652	0.0725	0.0580
7	i-pentano	0.1375	0.1250	0.1500
8	3-metil-cis-penteno2	0.1650	0.1500	0.1800
9	ciclohexano	0.1375	0.1250	0.1500
10	1-metil-3-etilbenzeno	0.1100	0.1000	0.1200

Procedimento análogo foi utilizado para a obtenção de novos sub-conjuntos de dados. Desta vez, cada um dos casos simulados no conjunto anterior foi considerado como sendo o caso base. Mudanças simultâneas nos valores das variáveis pressão, razão de refluxo e vazão do destilado foram utilizadas nas novas simulações. Estas mudanças seguiram os valores apresentados na tabela 5.1. Assim, foram obtidos 8 sub-conjuntos compostos de 8 simulações.

Foram simulados casos com valores intermediários aos apresentados na tabela 5.1 para as mudanças nas variáveis razão de refluxo e vazão do destilado com o intuito de complementar o conjunto de dados.

O procedimento utilizado no levantamento dos dados teve como objetivo construir uma superfície de resposta em torno do caso base de forma a garantir a qualidade do modelo. O conjunto de dados obtidos contém 118 casos simulados e cobre um intervalo de variação do intemperismo de $-5\text{ }^{\circ}\text{C}$ a $21\text{ }^{\circ}\text{C}$.

As tabelas 5.3 e 5.4 apresentam uma comparação entre os resultados obtidos através do método de Naphtali-Sandholm e os obtidos através do simulador Hysim na simulação do caso base estudado. Os dados apresentados nestas tabelas mostram uma boa concordância entre resultados obtidos com o simulador baseado no método de Naphtali-Sandholm e os obtidos com o simulador Hysim, comprovando a eficiência do método utilizado para o levantamento dos dados utilizados no modelo.

Tabela 5.3- Resultados obtidos pelo Método de Naphtali-Sandholm e pelo simulador Hysim para a composição molar dos produtos

Componente	Naphtali-Sandhom		Hysim	
	Topo	fundo	topo	fundo
propano	0.154326	0.000333	0.154327	0.000355
propeno	0.380514	0.000314	0.380556	0.000343
n-butano	0.045145	0.017688	0.044759	0.017932
i-butano	0.138858	0.025008	0.138356	0.025336
i-butenos	0.155891	0.037289	0.155133	0.037777
trans-butenos2	0.104572	0.040776	0.103810	0.041258
i-pentano	0.020689	0.210019	0.023050	0.208526
3metil-cis-penteno2	0.000005	0.267428	0.000007	0.267387
ciclohexano	0.000001	0.222858	0.000001	0.222825
1-metil-3-etilbenzeno	0.000000	0.178287	0.000000	0.178261

Tabela 5.4- Resultados obtidos pelo método de Naphtali-Sandholm e pelo simulador Hysim para o calor e temperatura na debutanizadora.

	Naphtali-Sandholm	Hysim
Temperatura de Topo (°C)	47.5	47.4
Temperatura de fundo (°C)	155,0	155.3
Calor do condensador (GJ/h)	24.941	25.012
Calor do refeedor (GJ/h)	16.797	16.786

5.2- Seleção das Temperaturas do Conjunto de Variáveis Inferenciais do Processo

De acordo com o procedimento apresentado no capítulo 4, o primeiro passo para a seleção dos estágios com as temperaturas mais convenientes para a representação do perfil de temperatura da coluna é a montagem da matriz dos ganhos de temperatura em estado estacionário. A tabela 5.5 apresenta os dados utilizados no processo de simulação da coluna destinado para este fim.

Tabela 5.5- Dados das simulações utilizadas na construção da matriz dos ganhos de temperatura na coluna debutanizadora

	Caso Base	Mudanças nas Variáveis de Entrada
Composição da carga (% pesados)	55	±5
Temperatura da carga (°C)	120.0	±8%
Vazão da carga (kgmol/h)	1567	±10%
Calor do refeedor (GJ/h)	16.797	±11%
Pressão (kgf/cm ²)	12.0	±8%
razão de refluxo	1.5	±20%

As figuras 5.2-5.7 apresentam os resultados obtidos com a aplicação da metodologia apresentada no capítulo 4 para a seleção das temperaturas do conjunto de variáveis inferenciais do processo. Através da análise gráfica dos valores das coordenadas dos vetores $u_i \sigma_i$ nos estágios é possível perceber que os estágios com as temperaturas mais convenientes para a representação do perfil de temperatura são, em ordem decrescente, os estágios 8, 31, 16, 1, 21 e 15. A tabela 5.6 apresenta valores singulares obtidos pela decomposição em valores singulares da matriz dos ganhos de temperatura.

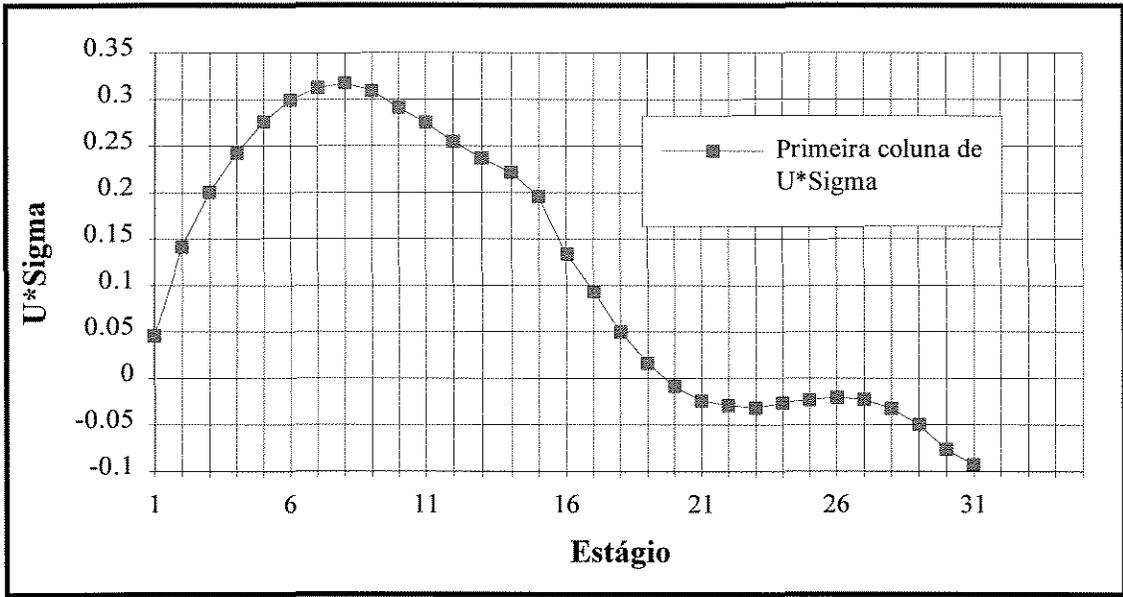


Figura 5.2- Análise de componentes principais - gráfico $u_1\sigma_1$ x estágio

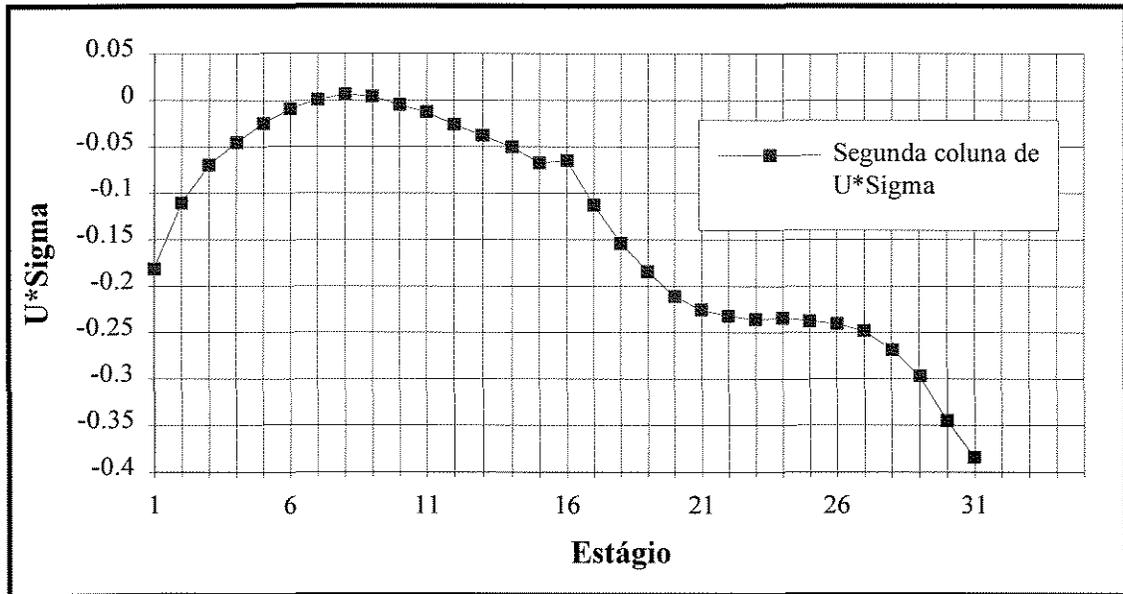


Figura 5.3- Análise de componentes principais - gráfico $u_2\sigma_2$ x estágio

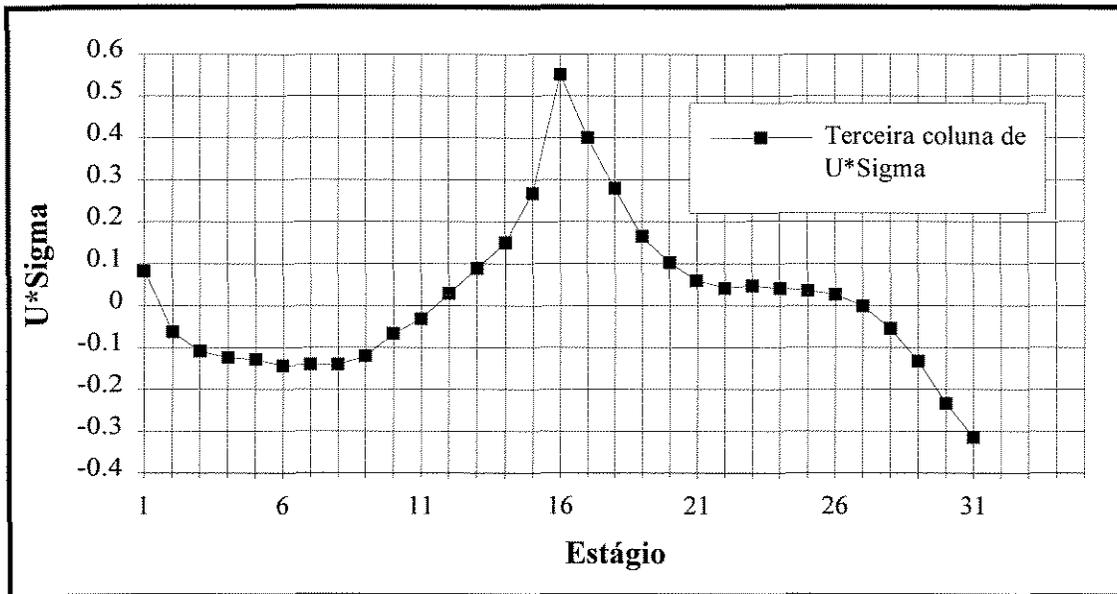


Figura 5.4 - Análise de componentes principais - gráfico $u_3\sigma_3$ x estágio

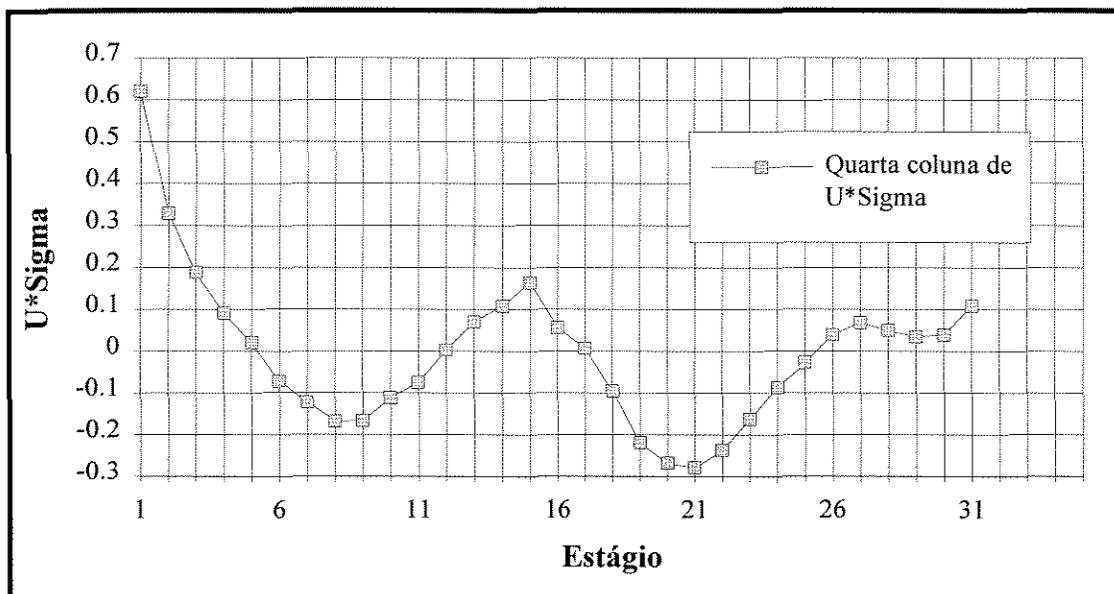


Figura 5.5- Análise de componentes principais - gráfico $u_4\sigma_4$ x estágio

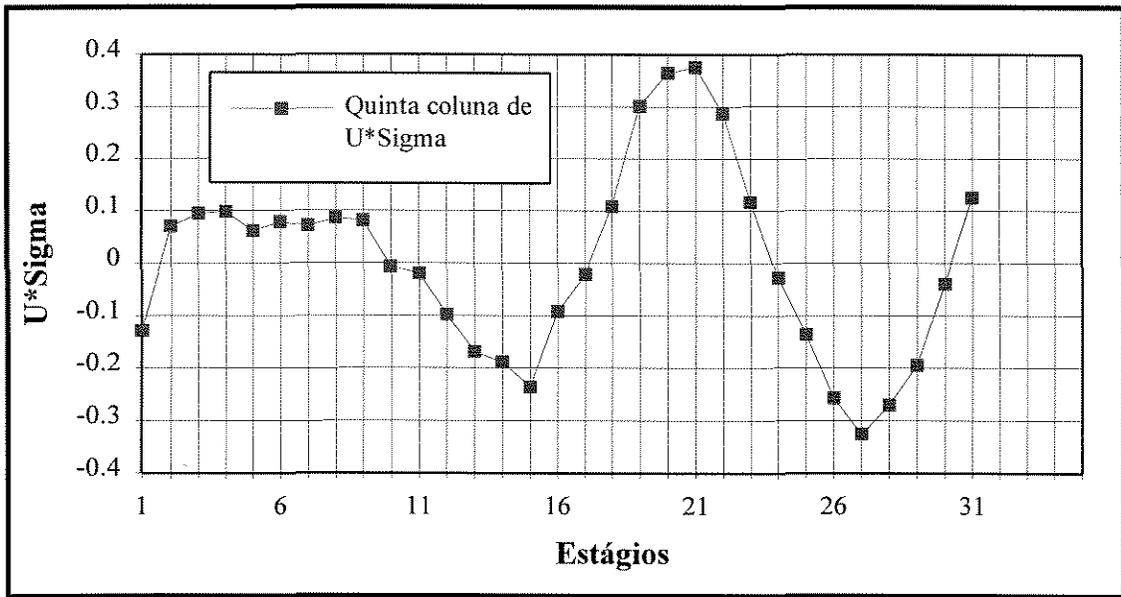


Figura 5.6- Análise de componentes principais - gráfico $u_5\sigma_5$ x estágio

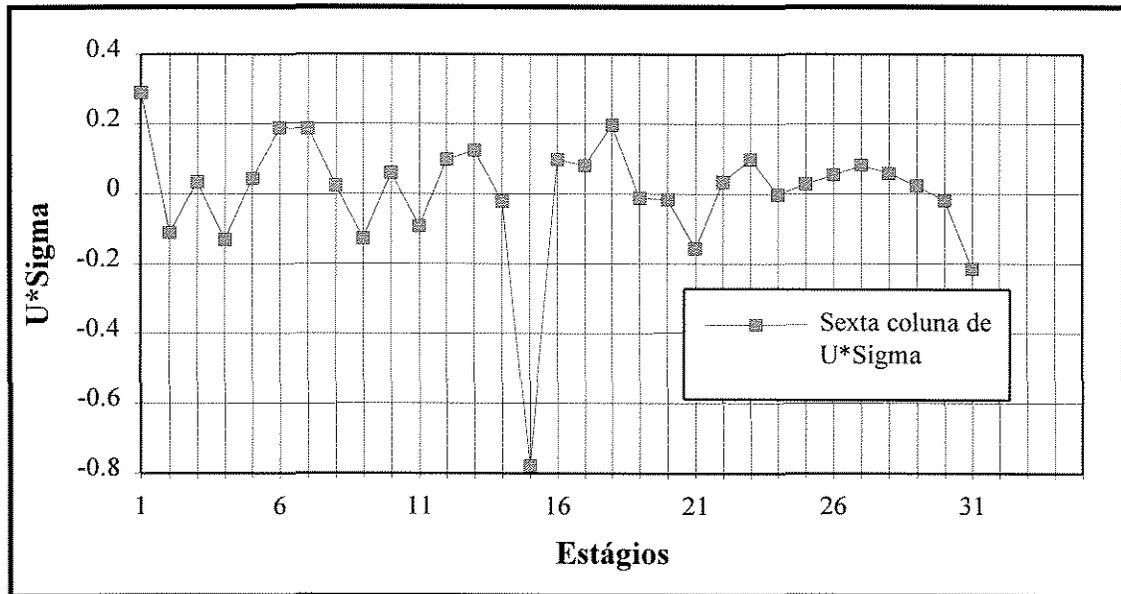


Figura 5.7- Análise de componentes principais - gráfico $u_6\sigma_6$ x estágio

Tabela 5.6- Valores Singulares Obtidos pela Decomposição em Valores Singulares da Matriz dos Ganhos de Temperatura.

i	σ_i
1	63.354
2	19.532
3	2.201
4	1.026
5	0.488
6	0.004

5.3- Calibração do Modelo

Selecionado o conjunto das variáveis inferenciais a serem utilizadas no desenvolvimento do modelo iniciou-se a etapa de seleção do modelo mais conveniente para estimar o intemperismo. Nesta etapa utilizou-se 88 dos 108 casos obtidos na etapa de simulação do processo. Esta redução no conjunto de dados teve como objetivo restringir os dados utilizados no ajuste do modelo a uma faixa de intemperismo de -5°C a 9°C . O conjunto de dados selecionados para esta etapa foi então dividido em dois conjuntos. O primeiro deles, com 48 pontos, foi utilizado para a calibração do modelo. O segundo, com 40 pontos, foi utilizado para verificar a capacidade de predição do modelo previamente ajustado. Estes conjuntos foram chamados, respectivamente, de conjunto de calibração e de predição.

O critério utilizado para a comparação dos modelos testados durante a etapa de calibração foi o da soma do quadrado dos erros. Ele foi obtido através da seguinte expressão:

$$SQE = \sum_{i=1}^{48} (y_{i_{\text{real}}} - y_{i_{\text{est}}})^2 \quad (5.1)$$

onde

$y_{i_{\text{real}}}$ = valor do intemperismo obtido através da simulação

$y_{i_{\text{est}}}$ = valor do intemperismo obtido através do modelo.

Modelos inferenciais baseados em funções lineares multivariáveis foram desenvolvidos com a finalidade de comparar os resultados produzidos por estes modelos com os produzidos pelos modelos baseados em funções racionais multivariáveis.

A seguir apresentam-se os resultados obtidos na etapa calibração dos modelos. Os resultados apresentados são os dos modelos que se mostraram mais convenientes para inferir o intemperismo do GLP.

a-) Modelo Empírico com Três Variáveis Inferenciais.

O modelo empírico com três variáveis que apresentou os melhores resultados na inferência do intemperismo foi o modelo baseado na função racional da temperatura do estágio número 8, razão de refluxo e pressão. A figura 5.8 apresenta os resultados obtidos por este modelo na determinação dos valores do intemperismo para os casos do conjunto de calibração. A figura 5.9 apresenta os resultados obtidos pelo modelo linear multivariável para a mesma situação. As figuras 5.10 e 5.11 apresentam os gráficos da dispersão dos erros produzidos por estes dois modelos na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

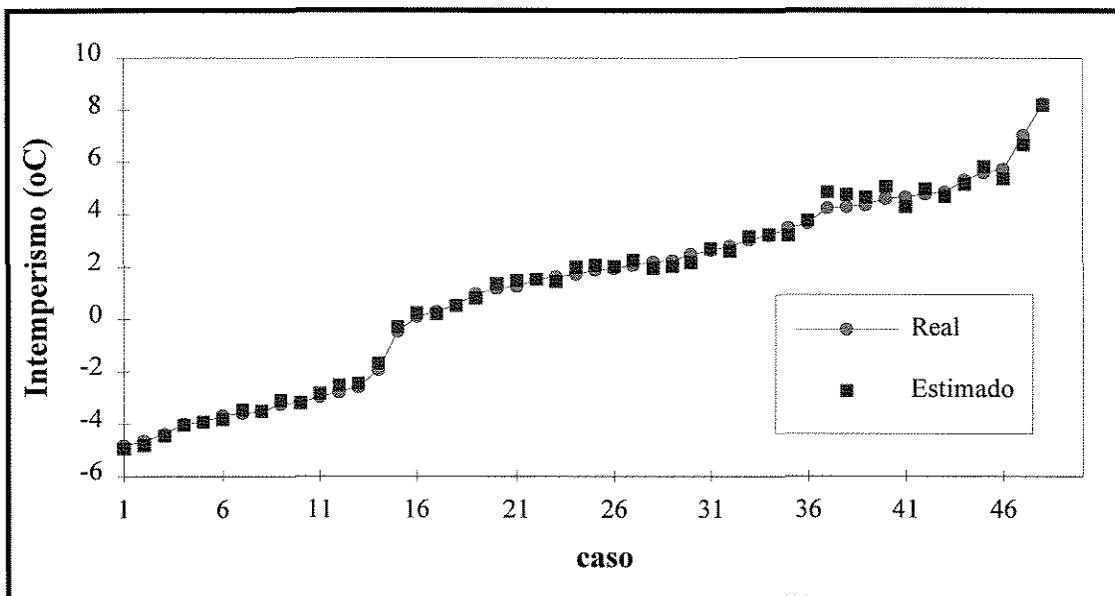


Figura 5.8- Intemperismo do GLP via função racional de T_g , R e P - Conjunto de Calibração.

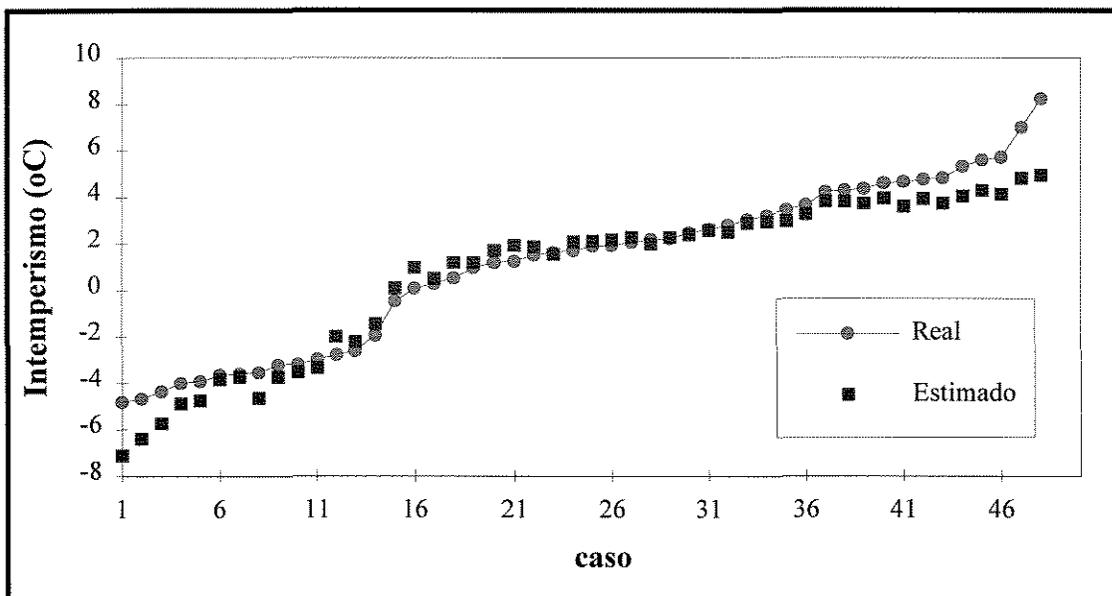


Figura 5.9- Intemperismo do GLP via função linear de T_g , R e P - Conjunto de Calibração.

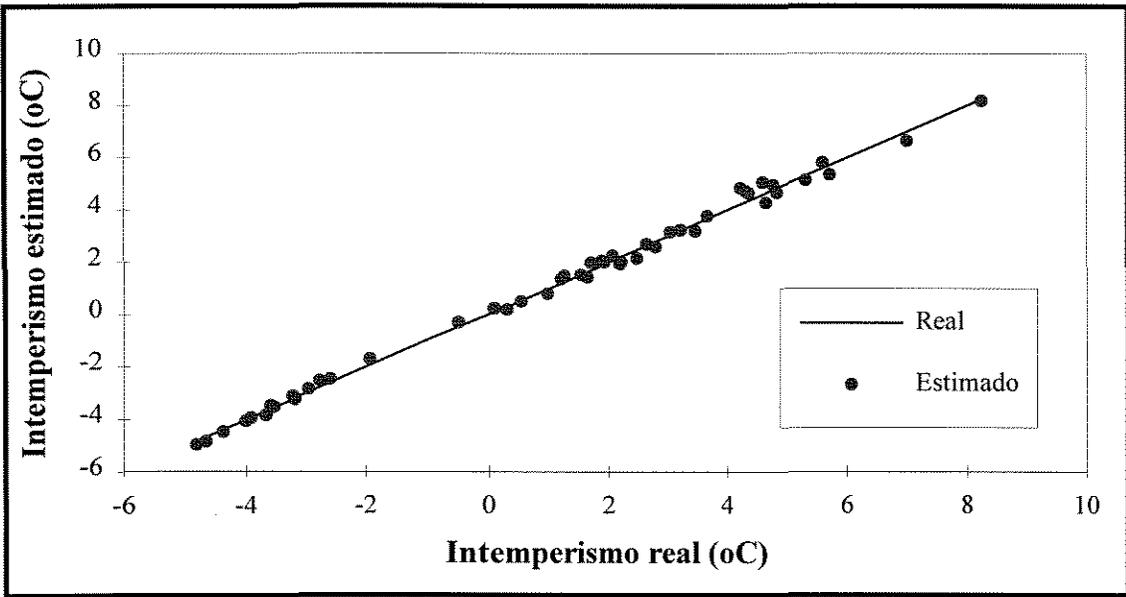


Figura 5.10- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_g , R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

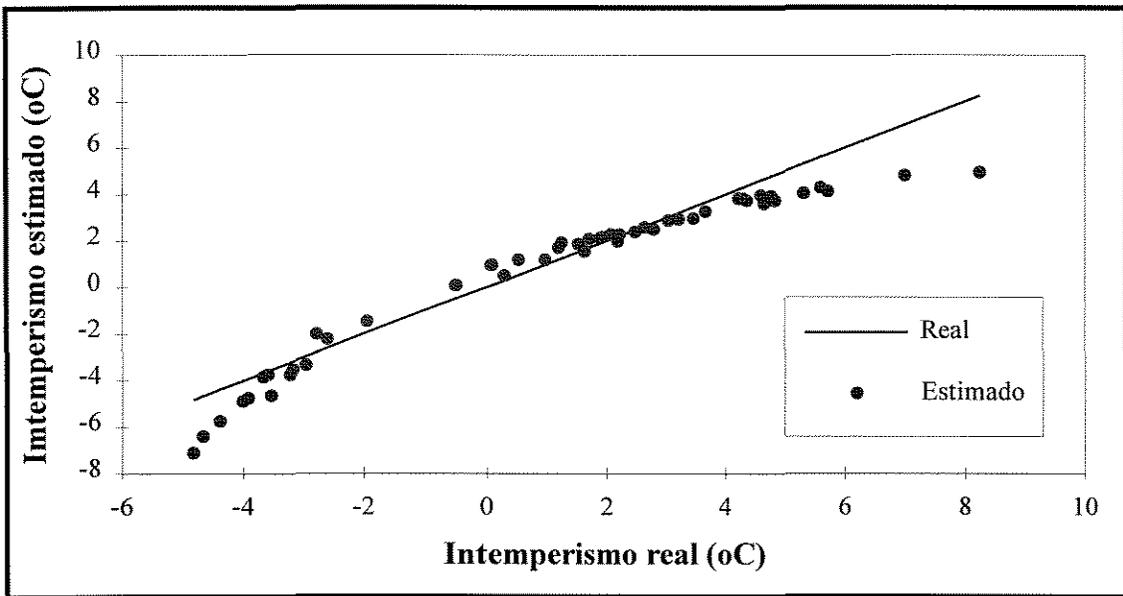


Figura 5.11- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_g , R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

Analisando os resultados apresentados nos gráficos das figuras 5.8 e 5.9 é possível observar que o modelo baseado na função racional de T_8 , R, e P mostrou-se mais adequado para estimar os valores do intemperismo que o modelo baseado na função linear destas mesmas variáveis. O mesmo fato pode ser observado através dos gráficos da dispersão dos erros produzidos na estimativa do intemperismo. Comparando os gráficos apresentados nas figuras 5.10 e 5.11 é possível observar que os erros produzidos na estimativa do intemperismo via função racional encontram-se melhor distribuídos que os produzidos na estimativa do intemperismo via função linear. Além disto, observando-se atentamente o gráfico da figura 5.11 é possível perceber uma distribuição tendenciosa dos erros. Este fato denuncia a inadequação do modelo adotado na representação dos dados do conjunto.

b-) Modelo Empírico com Quatro Variáveis Inferenciais.

O modelo empírico com quatro variáveis inferenciais que apresentou os melhores resultados na inferência do intemperismo foi o modelo baseado na função racional das temperaturas dos estágios 8 e 31, razão de refluxo e pressão. A figura 5.12 apresenta os valores do intemperismo inferidos através deste modelo para o conjunto dos dados de calibração. A figura 5.13 apresenta os resultados obtidos pelo modelo linear equivalente para o mesmo conjunto de dados.

Analisando os resultados apresentados nos gráficos das figuras 5.12 e 5.13 pode-se observar que o modelo baseado na função racional de T_8 , T_{31} , R e P apresentou um desempenho melhor que o modelo baseado na função linear destas mesmas variáveis na estimativa do intemperismo.

As figuras 5.14 e 5.15 apresentam os gráficos da dispersão dos erros produzidos na estimativa do intemperismo por estes dois modelos. Mais uma vez é possível perceber que os erros produzidos na estimativa do intemperismo via função racional encontram-se melhor distribuídos que os produzidos via função linear. A distribuição tendenciosa dos erros produzidos pelo modelo linear comprova a inadequação deste modelo na representação dos dados do conjunto.

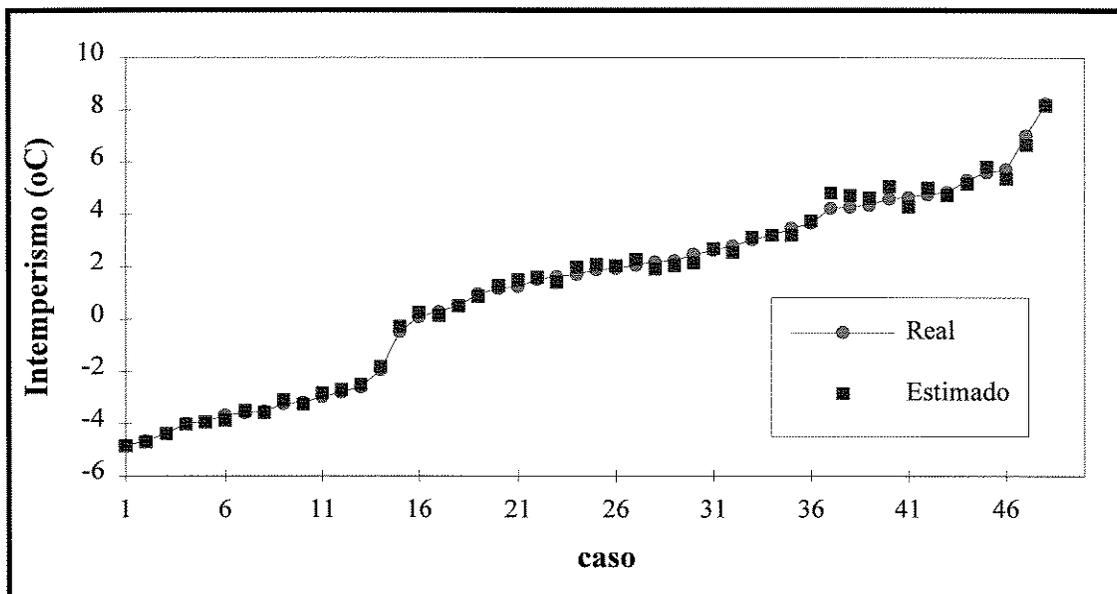


Figura 5.12- Intemperismo do GLP via função racional de T_8 , T_{31} , R e P - Conjunto de Calibração.

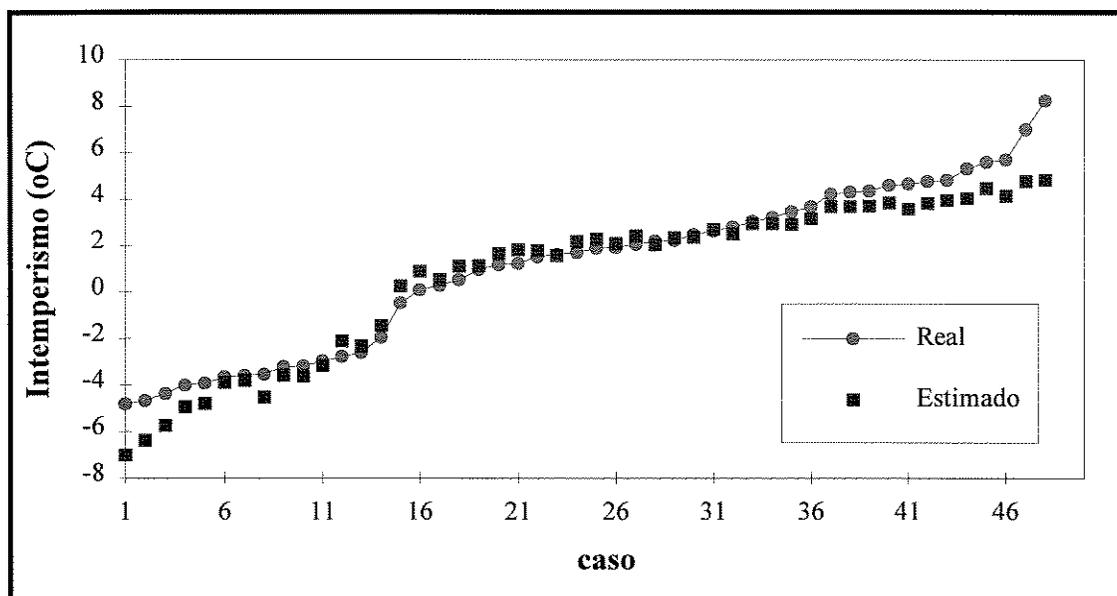


Figura 5.13- Intemperismo do GLP via função linear de T_8 , T_{31} , R e P - Conjunto de Calibração.

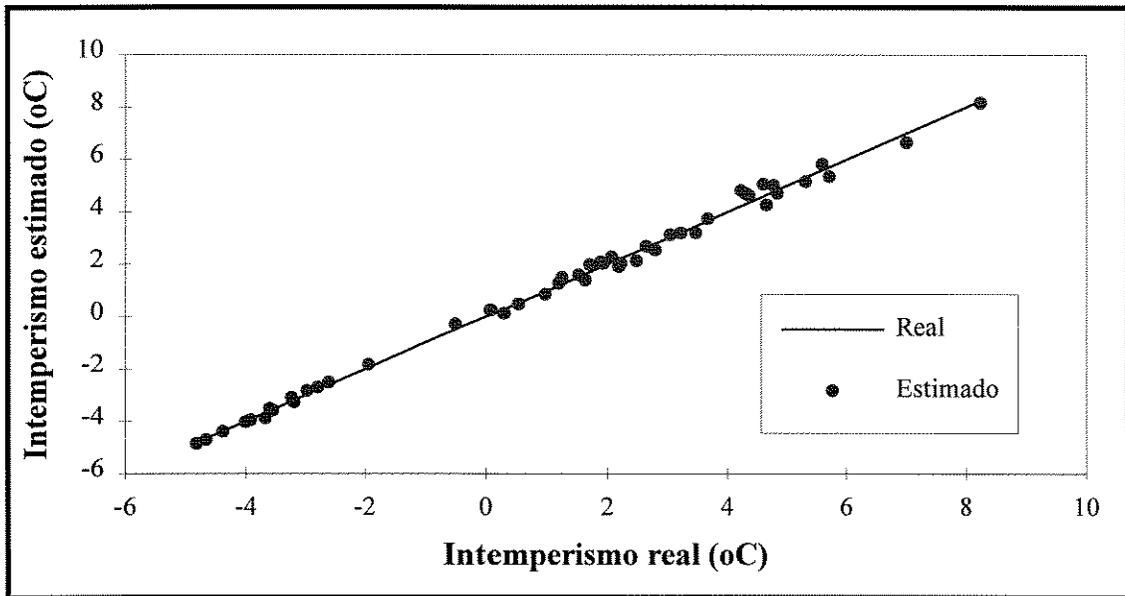


Figura 5.14- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_8, T_{31}, R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

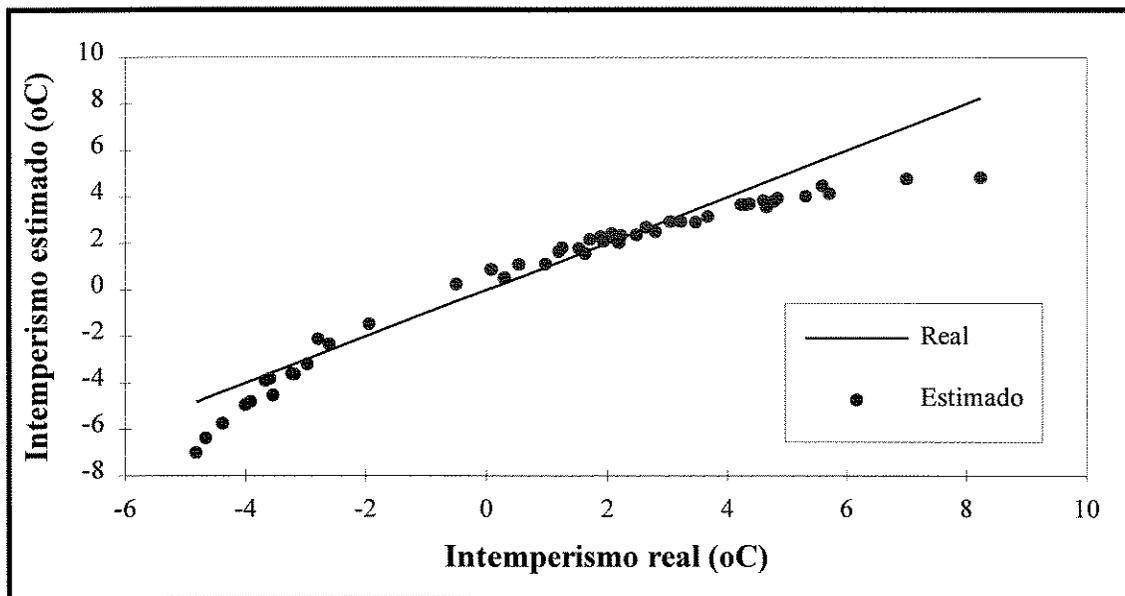


Figura 5.15- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_8, T_{31}, R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

c-) Modelo Empírico com Cinco Variáveis Inferenciais.

O modelo empírico com cinco variáveis inferenciais que apresentou os melhores resultados na inferência do intemperismo foi o modelo baseado na função racional das temperaturas dos estágios 8 e 31, calor no refervedor, razão de refluxo e pressão. A figura 5.16 apresenta os valores estimados para o intemperismo através deste modelo nos casos do conjunto de calibração. Os resultados obtidos pelo modelo linear multivariável equivalente estão apresentados na figura 5.17. As figuras 5.18 e 5.19 apresentam os gráficos da dispersão dos erros produzidos na estimativa do intemperismo pelos modelos baseados na função racional e na função linear destas variáveis.

Através da análise dos gráficos apresentados nas figuras 5.16 e 5.17 é possível observar a superioridade dos resultados produzidos pelo modelo baseado na função racional de T_8 , T_{31} , Q, R e P em relação aos produzidos pelo modelo baseado na função linear destas variáveis. Esta superioridade é confirmada pelos gráficos da dispersão dos erros produzidos na estimativa do intemperismo pelos dois modelos. Os erros obtidos nas estimativas do intemperismo através do modelo baseado na função linear de T_8 , T_{31} , Q, R e P apresentam distribuição tendenciosa mostrando mais uma vez a inadequação deste tipo de modelo na representação do fenômeno estudado.

Uma melhor avaliação dos resultados obtidos pode ser feita através da comparação da soma do quadrado dos erros produzidos na estimativa dos dados do conjunto. A tabela 5.7 apresenta a soma do quadrado dos erros para os diferentes modelos apresentados.

<i>Tabela 5.7- Soma do quadrado dos erros produzidos na estimativa do intemperismo para o conjunto dos dados de calibração</i>		
Variáveis Inferenciais	SQE Função Racional	SQE Função linear
T_8 , R e P	2.2661	43.8674
T_8 , T_{31} , R e P	2.4053	43.5700
T_8 , T_{31} , Q, R e P	2.8417	44.8804

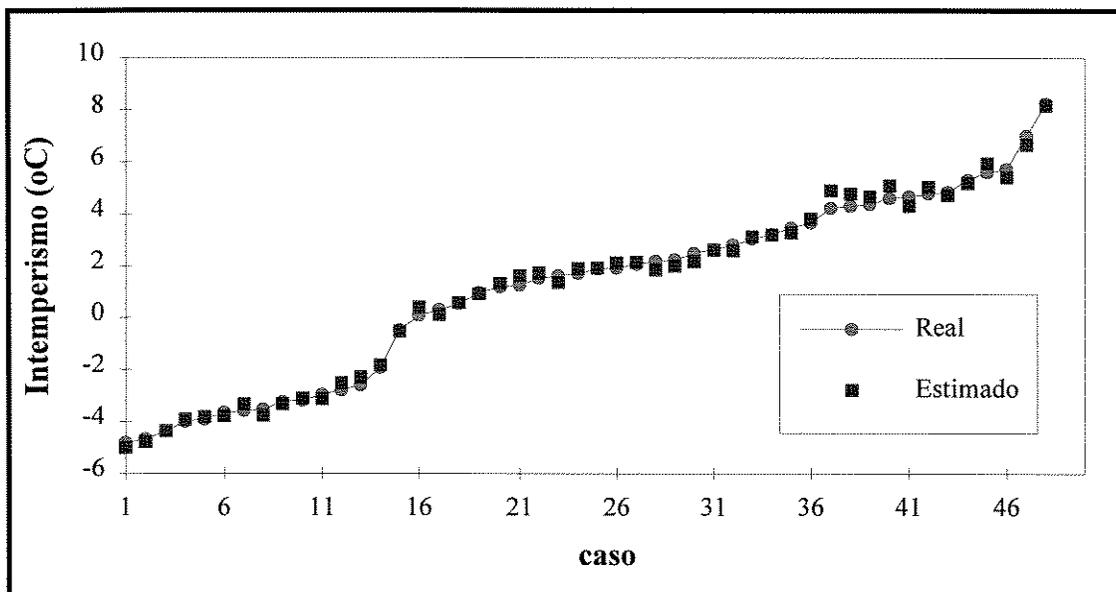


Figura 5.16- Intemperismo do GLP via função racional de T_8, T_{31}, Q, R e P - Conjunto de Calibração.

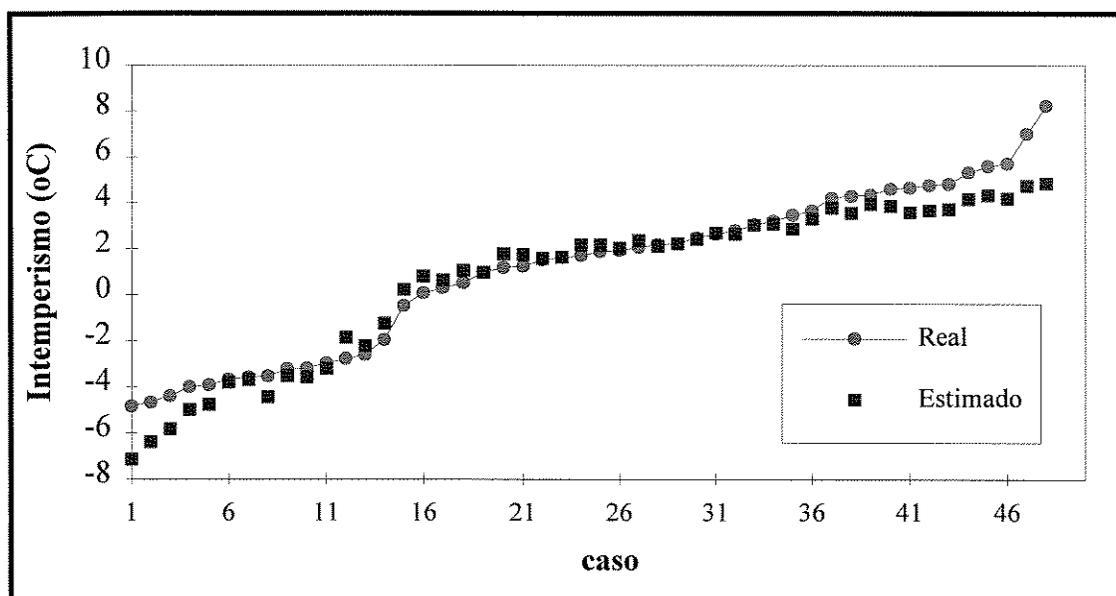


Figura 5.17- Intemperismo do GLP via função linear de T_8, T_{31}, Q, R e P - Conjunto de Calibração.

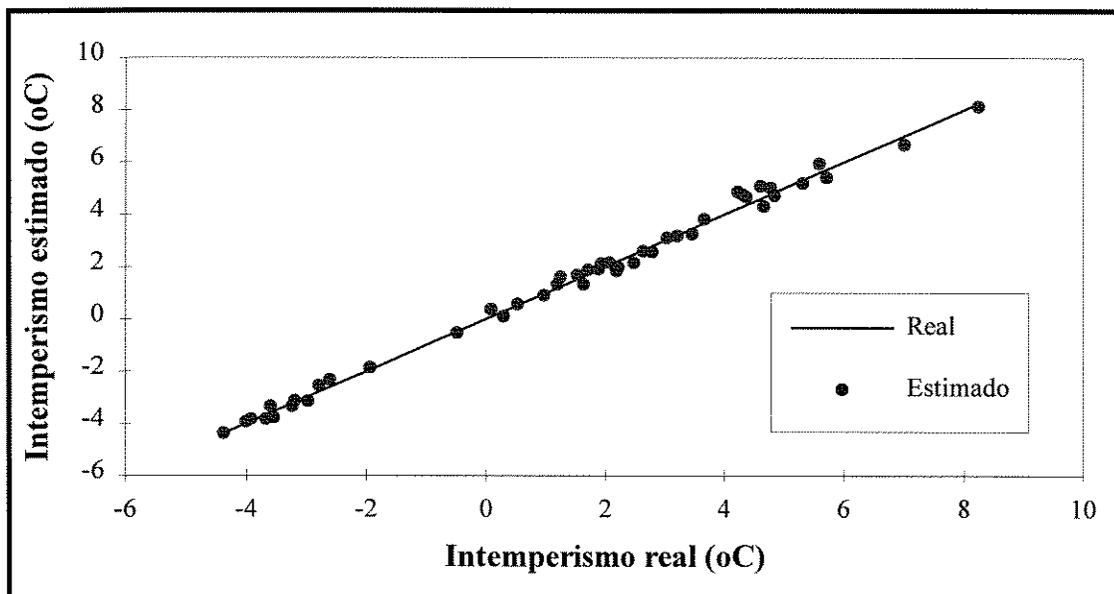


Figura 5.18- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_8, T_{31}, Q, R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

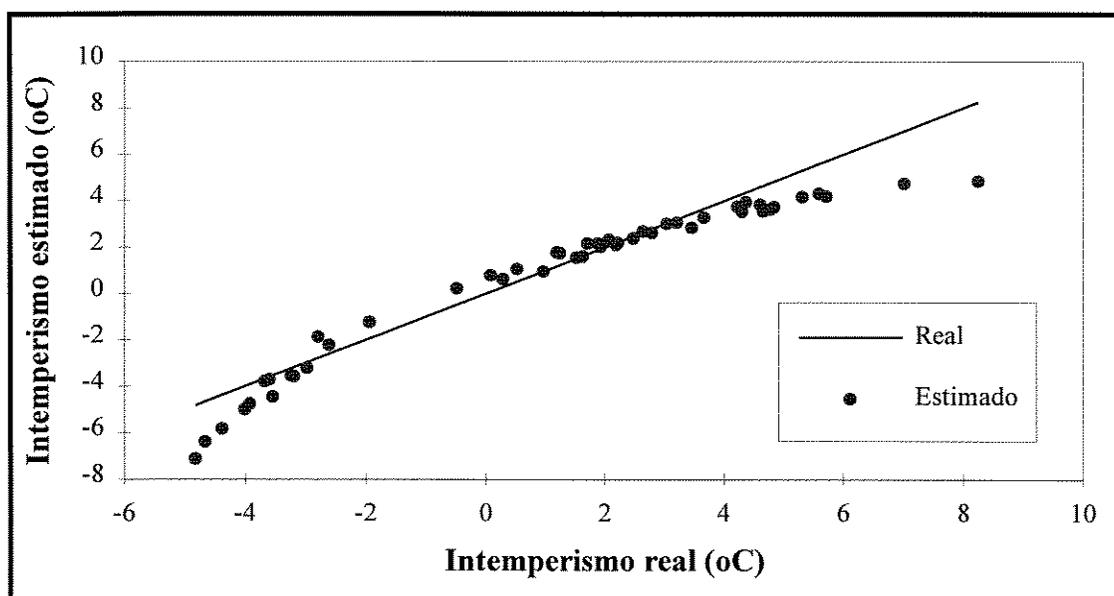


Figura 5.19- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_8, T_{31}, Q, R e P na estimativa dos dados do conjunto de calibração.

5.4- Análise da Capacidade de Predição do Modelo

O desempenho dos modelos definidos e ajustados na etapa de calibração deve ser avaliado para um conjunto de dados diferente do conjunto utilizado na fase de calibração. Neste trabalho, o conjunto utilizado com a finalidade de analisar a capacidade de predição dos modelos obtidos foi o conjunto denominado conjunto de predição. Nesta seção, apresenta-se os resultados obtidos na análise da capacidade de predição dos modelos ajustados na seção anterior.

A figura 5.20 apresenta as estimativas do intemperismo obtidas através do modelo baseado na função racional de T_g , R e P para os casos do conjunto de predição. A figura 5.21 apresenta os resultados obtidos pelo modelo linear de T_g , R e P para a mesma situação. Nas figuras 5.22 e 5.23 encontram-se os gráficos da dispersão dos erros produzidos por estes dois modelos na estimativa dos dados do mesmo conjunto. Os gráficos correspondentes aos apresentados nas figuras 5.20-5.23 para os modelos com três variáveis inferenciais são apresentados nas figuras 5.24-5.27 e 5.28-5.31 para os respectivos modelos com quatro e cinco variáveis inferenciais.

Analisando os resultados apresentados nos gráficos das figuras 5.20 e 5.21 é possível observar que o modelo baseado na função racional de T_g , R e P mostrou-se mais adequado na predição dos valores do intemperismo que o modelo baseado na função linear destas mesmas variáveis. Este comportamento é semelhante ao comportamento apresentado por estes mesmos modelos na predição do intemperismo para o conjunto dos dados de calibração. Os gráficos da dispersão dos erros apresentados nas figuras 5.22 e 5.23 confirmam este resultado. Neles é possível observar que os erros produzidos nas estimativas feitas com a função racional de T_g , R e P encontram-se melhor distribuídos que os produzidos nas estimativas feitas com o modelo linear. A exemplo do que já havia sido observado nas estimativas feitas com estes mesmos modelos para o conjunto de calibração, os resultados demonstram uma distribuição tendenciosa dos erros no modelo linear. Este fato confirma a inadequação do modelo linear na representação dos dados do conjunto. Resultados semelhantes aos obtidos na análise da capacidade de predição dos modelos com três variáveis inferenciais foram observados na análise da capacidade de predição dos modelos com quatro e cinco variáveis inferenciais.

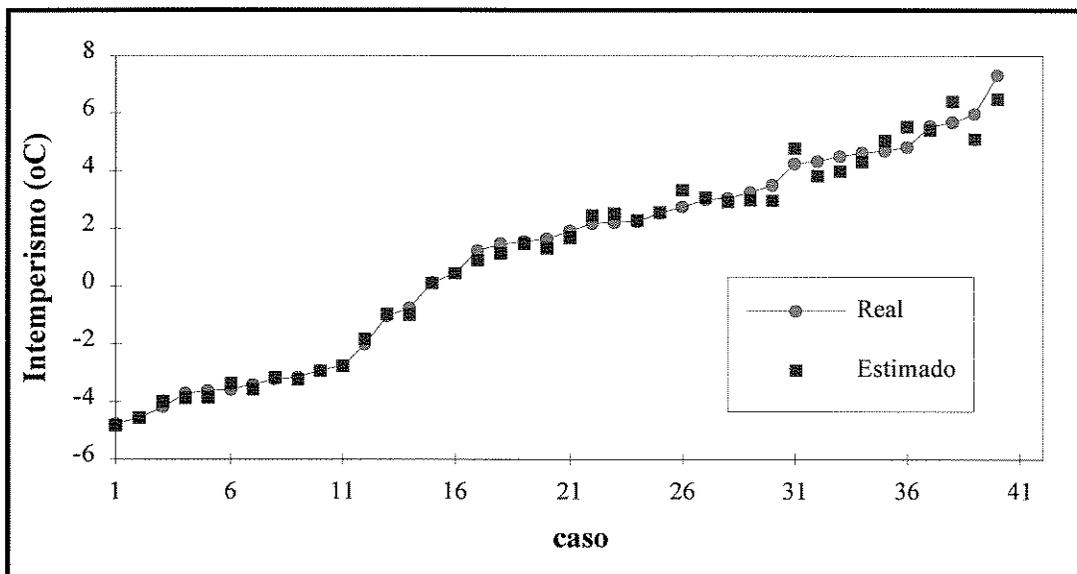


Figura 5.20- Intemperismo do GLP via função racional de T_g , R e P - Conjunto de Predição.

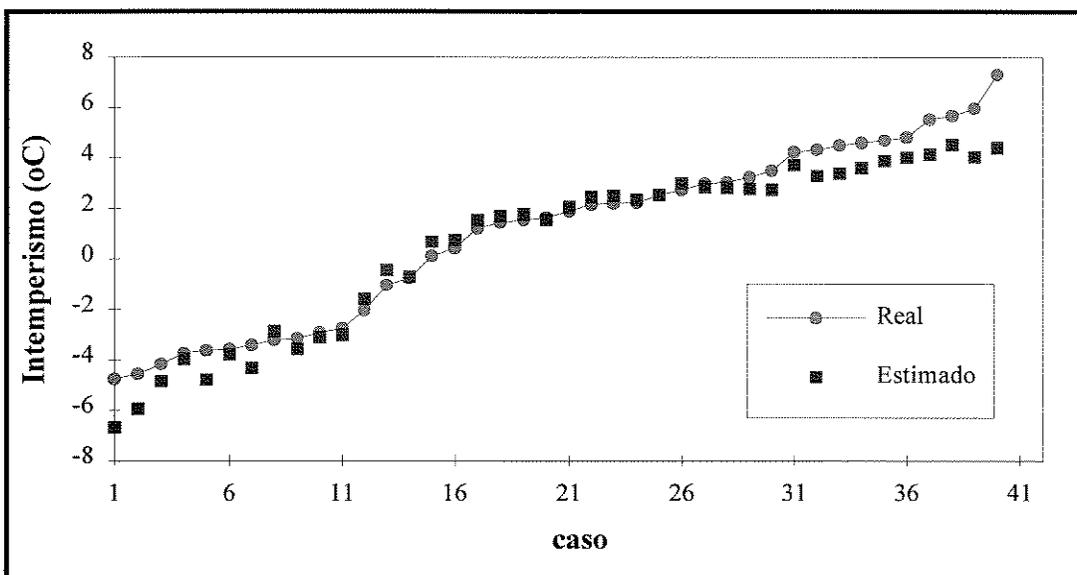


Figura 5.21- Intemperismo do GLP via função linear de T_g , R e P - Conjunto de Predição.

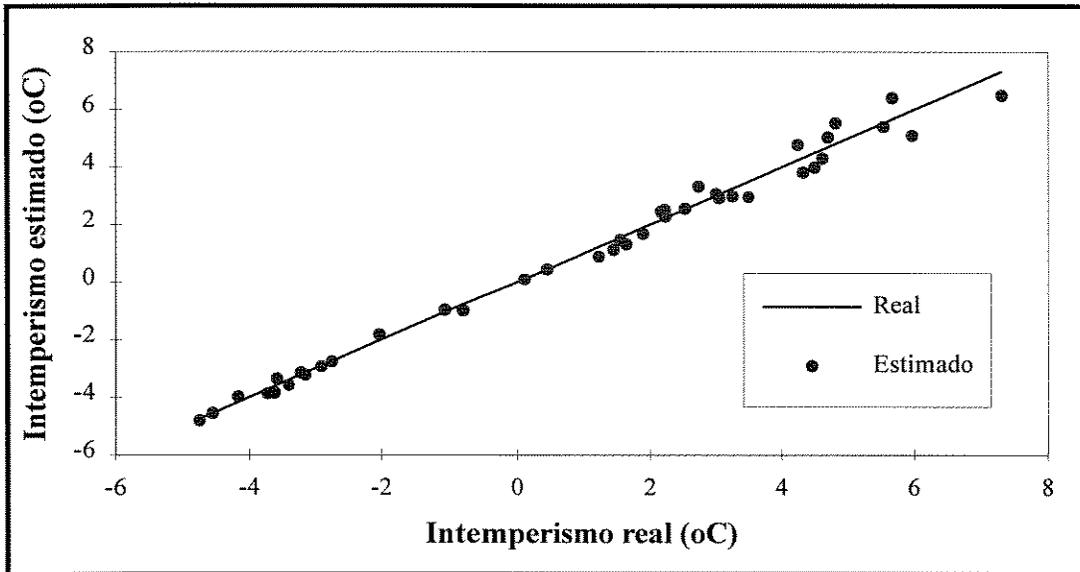


Figura 5.22- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_8 , R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

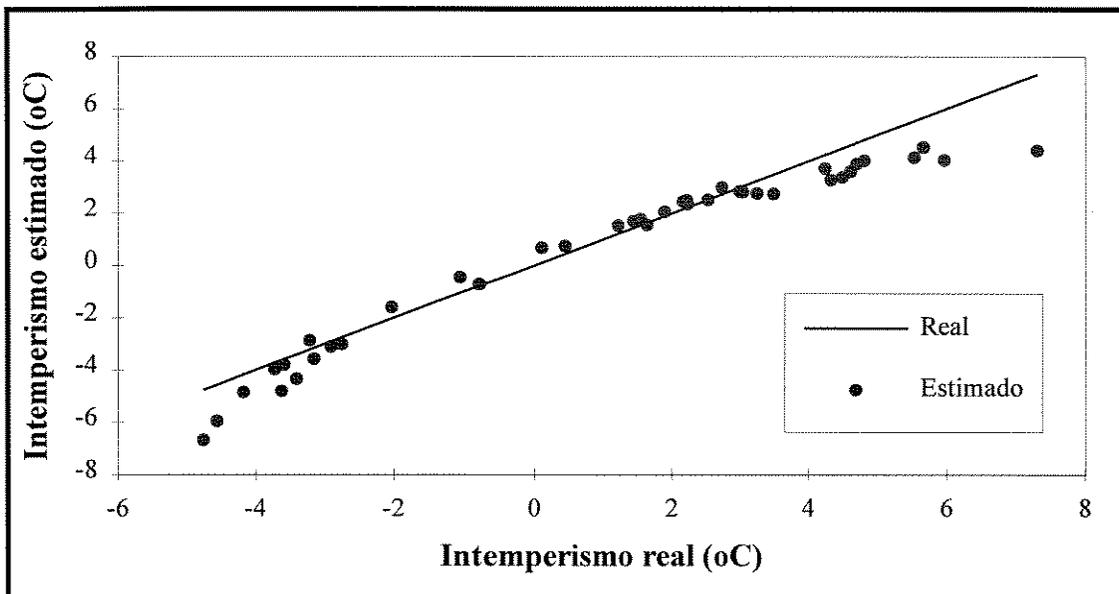


Figura 5.23- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_8 , R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

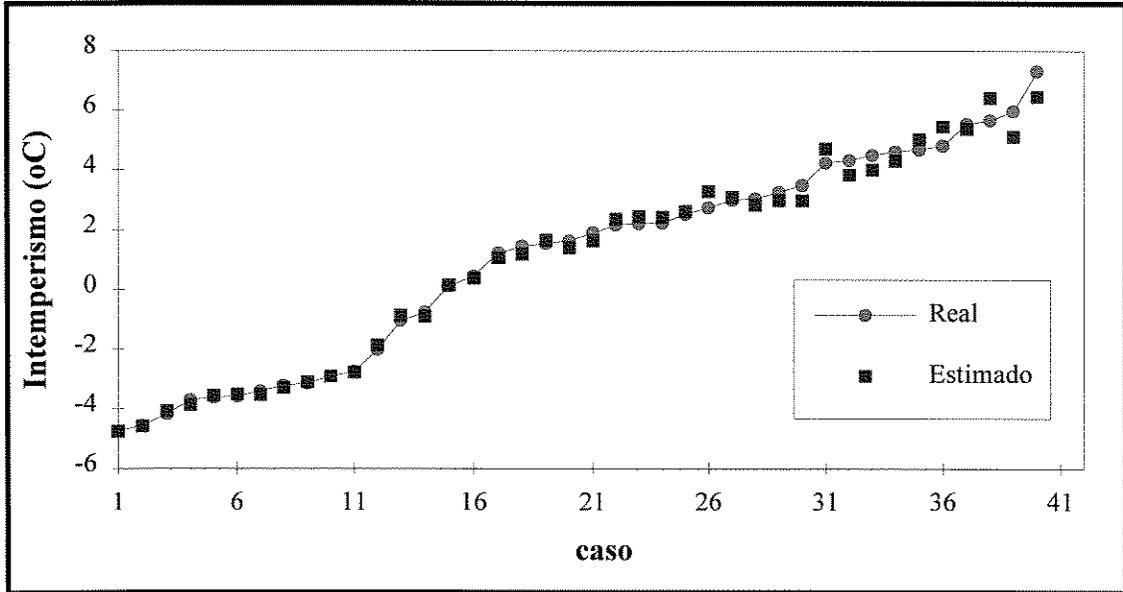


Figura 5.24- Intemperismo do GLP via função racional de T_8, T_{31}, R e P - Conjunto de Predição.

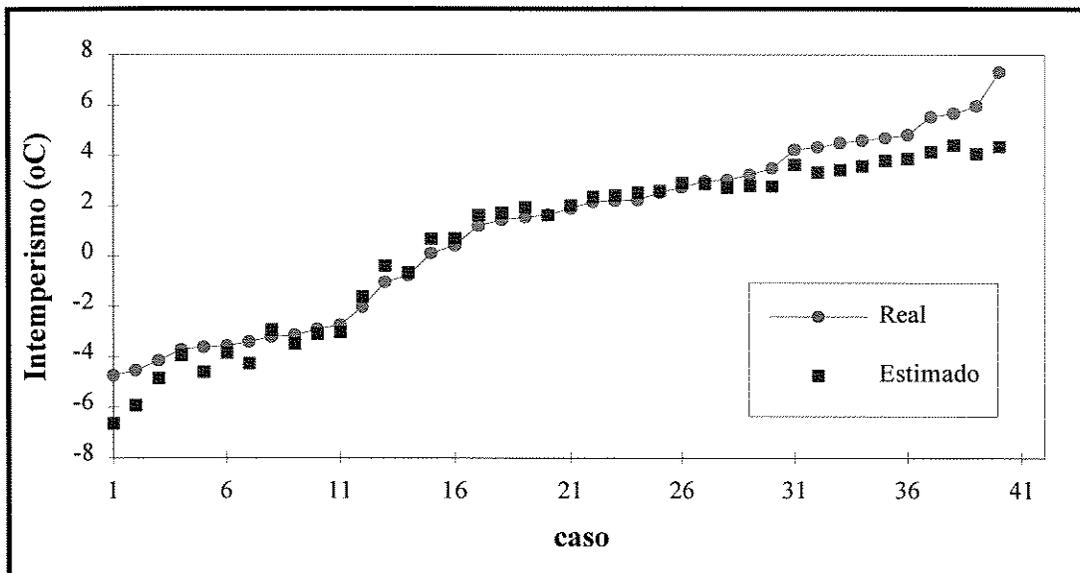


Figura 5.25- Intemperismo do GLP via função linear de T_8, T_{31}, R e P - Conjunto de Predição.

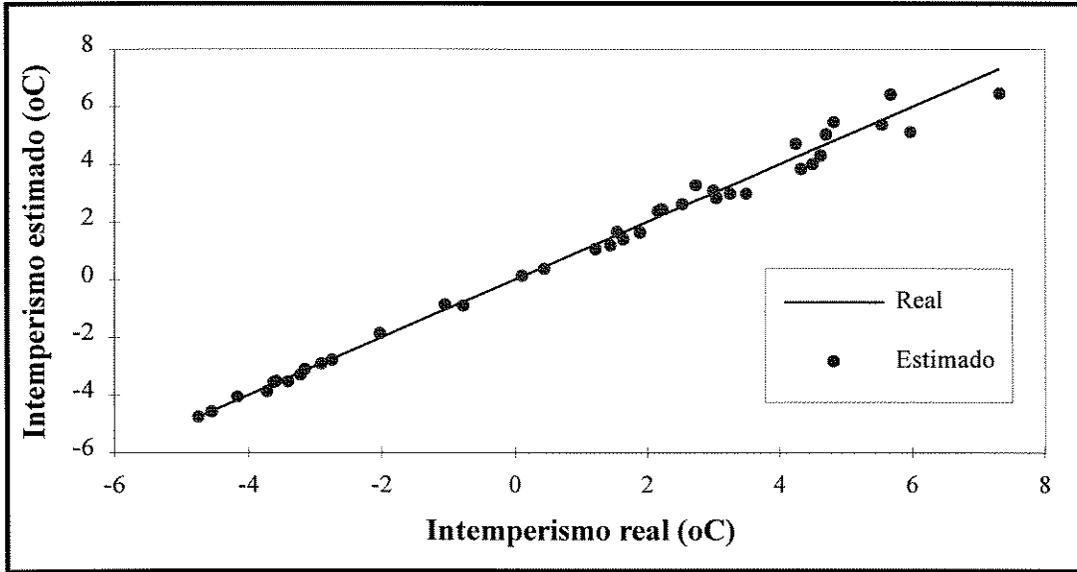


Figura 5.26- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_8, T_{31}, R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

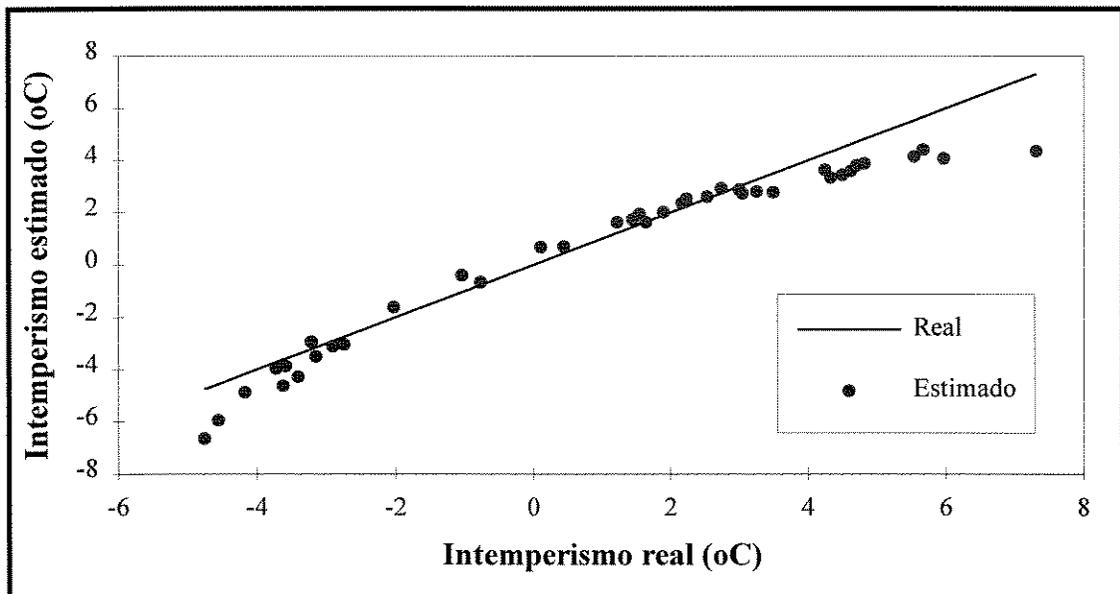


Figura 5.27- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_8, T_{31}, R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

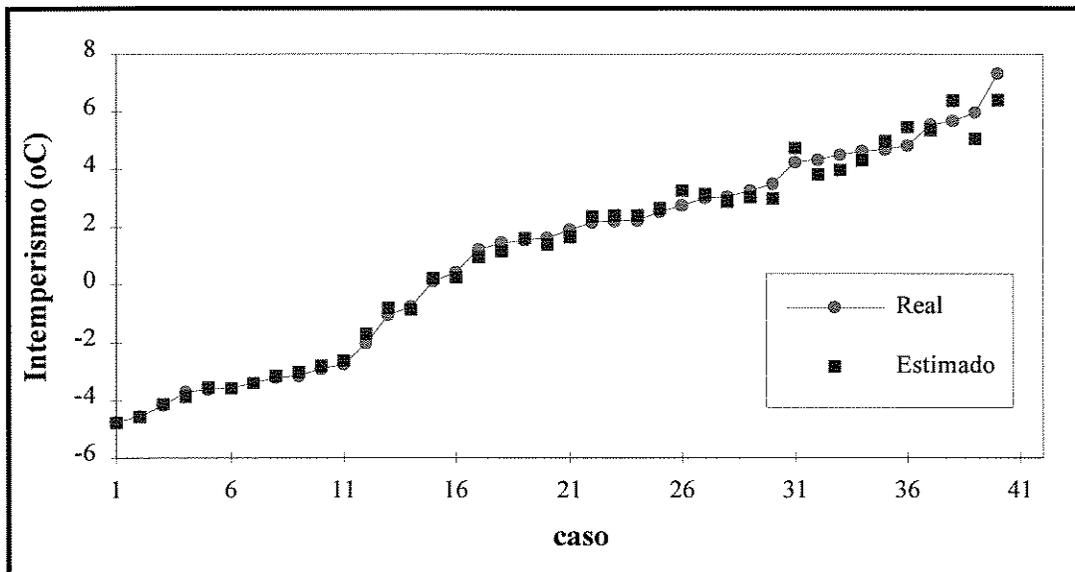


Figura 5.28- Intemperismo do GLP via função racional de T_8, T_{31}, Q, R e P - Conjunto de Predição.

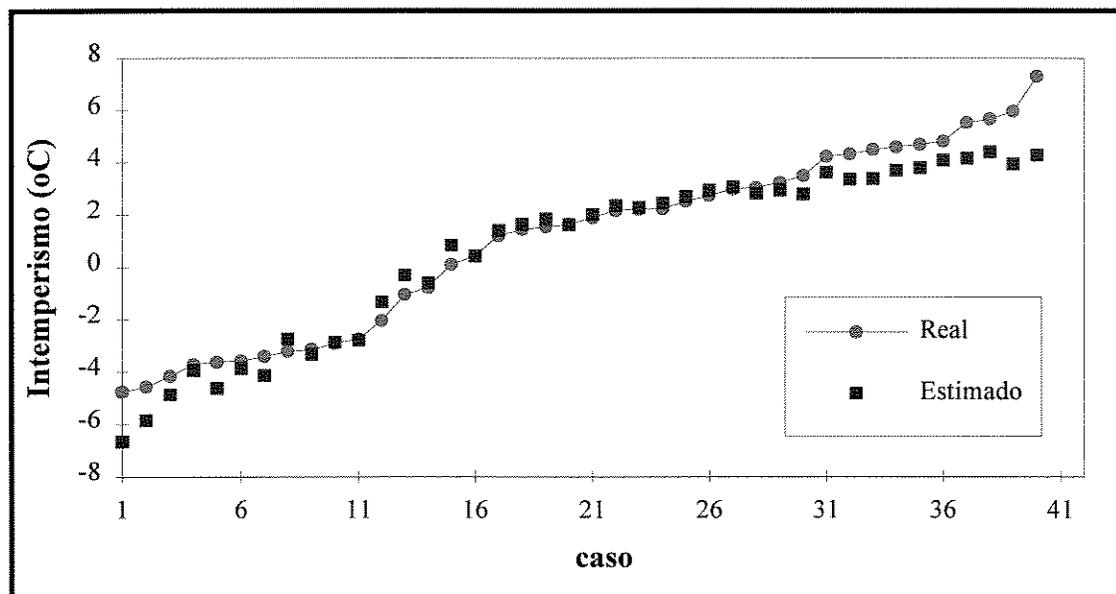


Figura 5.29- Intemperismo do GLP via função linear de T_8, T_{31}, Q, R e P - Conjunto de Predição.

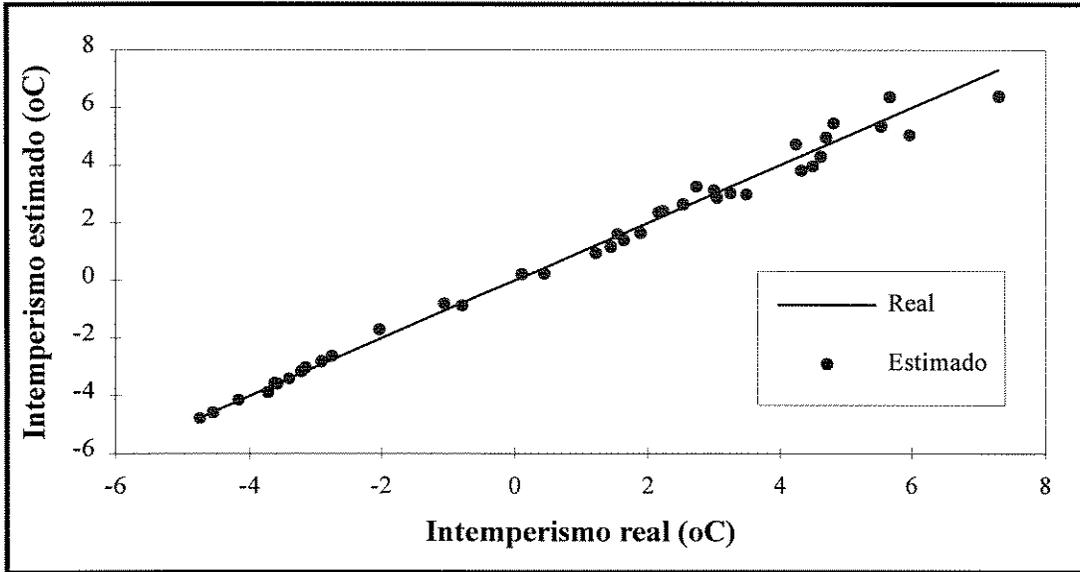


Figura 5.30- Dispersão dos erros produzidos pela função racional de T_8, T_{31}, Q, R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

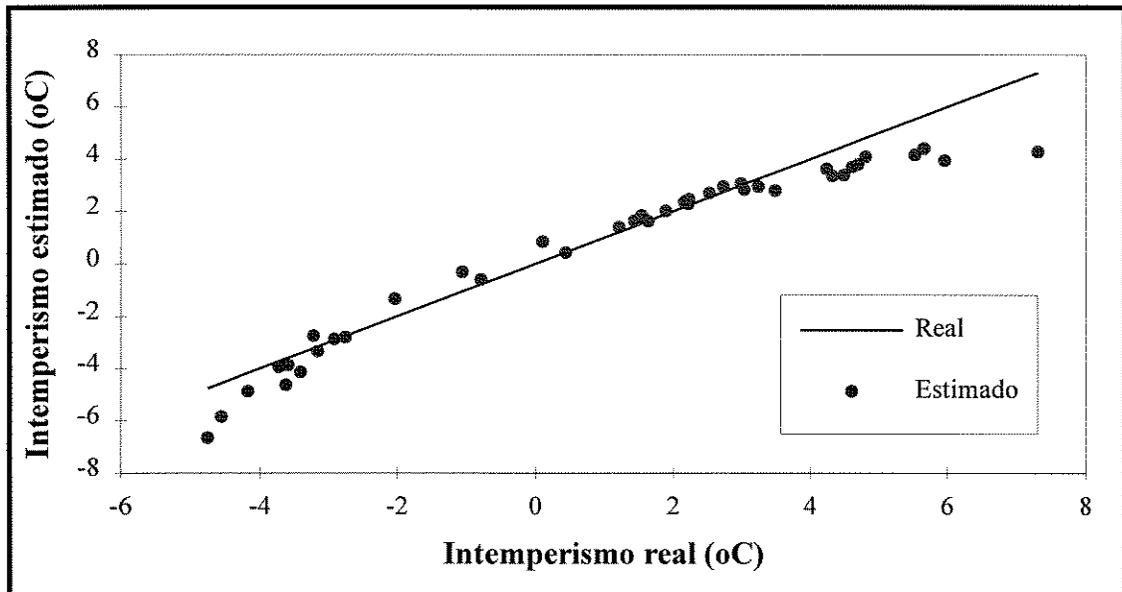


Figura 5.31- Dispersão dos erros produzidos pela função linear de T_8, T_{31}, Q, R e P na estimativa dos dados do conjunto de predição.

O critério utilizado na avaliação do desempenho dos estimadores obtidos foi o erro quadrático médio das predições. O erro quadrático médio das predições (MSEP) é uma medida do erro esperado para futuras predições. Ele foi obtido através da seguinte expressão:

$$\text{MSEP} = \frac{1}{40} \sum_{i=1}^{40} (y_{i_{\text{real}}} - y_{i_{\text{est}}})^2 \quad (5.2)$$

onde

$y_{i_{\text{real}}}$ = valor do intemperismo obtido através da simulação

$y_{i_{\text{est}}}$ = valor do intemperismo obtido através do modelo.

A tabela 5.8 apresenta erro quadrático médio das predições calculado para os modelos inferenciais empíricos baseados em funções racionais. A tabela 5.9 apresenta o erro quadrático médio das predições correspondente aos modelos inferenciais empíricos baseados em funções lineares multivariáveis.

<i>Tabela 5.8- Erro Quadrático Médio das Predições - Funções Racionais.</i>	
Modelo	MSEP (°C ²)
$Y = \frac{-8.3585 + 0.2755 * T_8 - 2.4103 * R - 0.7990 * P}{1 - 0.0222 * T_8 + 0.3982 * R + 0.0574 * P}$	0.1150
$Y = \frac{-8.0826 + 0.2778 * T_8 - 0.0053 * T_{31} - 2.1969 * R - 0.7984 * P}{1 - 0.0199 * T_8 - 0.0013 * T_{31} + 0.4225 * R + 0.0536 * P}$	0.1241
$Y = \frac{-9.1289 + 0.2925 * T_8 + 0.0036 * T_{31} - 0.0145 * Q - 2.4554 * R - 0.8}{1 - 0.0230 * T_8 + 0.0009 * T_{31} - 0.0036 * Q + 0.4389 * R + 0.0537}$	0.1284

Tabela 5.9- Erro Quadrático Médio das Predições- Funções Lineares Multivariáveis

Modelo	MSEP (°C²)
$Y = -12.0213 + 0.4402 * T_8 - 4.6200 * R - 1.2474 * P$	0.7863
$Y = -11.9202 + 0.4495 * T_8 - 0.0064 * T_{31} - 4.3953 * R - 1.2668 * P$	0.7995
$Y = -13.2574 + 0.4243 * T_8 + 0.0195 * T_{31} - 0.0406 * Q - 4.5619 * R - 1.2357 * P$	0.7960

6- Conclusões e Sugestões

Os resultados apresentados no capítulo 5 demonstram a habilidade dos modelos inferenciais empíricos baseados em funções racionais em prever o intemperismo do GLP com uma boa precisão. Comparando o erro quadrático médio das previsões dos modelos baseados em funções racionais com o do equivalente modelo baseado em função linear é possível observar que o erro esperado para futuras previsões, em modelos obtidos via função racional, é aproximadamente sete vezes menor que o esperado em modelos lineares. Este fato comprova a superioridade de modelos baseados em funções racionais em lidar com a não-linearidade do processo.

A análise dos resultados apresentados no capítulo 5 permite concluir que o modelo baseado na função racional de T_g , R e P apresenta-se como o modelo mais conveniente para a inferência do intemperismo na coluna debutanizadora. Deve-se ressaltar que, a exemplo do modelo com três variáveis inferenciais, os modelos com quatro e cinco variáveis inferenciais apresentaram erro quadrático médio das previsões em torno de $0.1 \text{ } ^\circ\text{C}^2$. Assim, o modelo baseado em 4, ou o modelo baseado em 5, variáveis inferenciais pode ser mais conveniente para propósitos de controle se a habilidade do modelo em lidar com problemas associados à falha de sensores for um fator decisivo na escolha do modelo mais conveniente. Portanto, sugere-se que seja feita sempre uma análise da sensibilidade dos modelos, frente a eventuais falhas nos sensores, antes da sua real aplicação.

Um interessante fato a ser observado é a constante presença da variável inferencial T_g nos modelos que apresentaram os melhores resultados. Na verdade, durante o desenvolvimento do trabalho observou-se uma forte degradação dos resultados nos modelos que prescindiram da utilização desta variável. A relação entre a temperatura dos estágios da coluna com a composição do produto é bastante conhecida. Porém, a identificação de estágios que são bons indicadores da composição do produto não é muito simples. A identificação de um estágio que apresenta temperaturas com tão bom poder preditivo demonstra a grande habilidade do método baseado na SVD em selecionar variáveis inferenciais relevantes para a construção de modelos empíricos.

As principais dificuldades de se obter modelos inferenciais empíricos, confiáveis, para o controle e a otimização de colunas de destilação são: a natureza altamente correlacionada das variáveis mensuráveis e a não linearidade do processo. Os resultados apresentados no capítulo 5 demonstraram a habilidade dos modelos desenvolvidos através da metodologia apresentada neste trabalho em lidar com estes problemas.

Deve-se ressaltar que a utilização de funções racionais multivariáveis, juntamente com a técnica de seleção de temperaturas baseada na decomposição em valores singulares, generaliza um procedimento para a obtenção de estimadores estáticos para a qualidade do produto em colunas de destilação.

O implantação de um modelo inferencial empírico no controle de uma coluna de destilação deve ser um processo iterativo. O primeiro passo é o desenvolvimento de um modelo inferencial para os dados coletados considerando-se qualquer esquema de controle existente na coluna. Não existindo nenhum esquema de controle deve-se coletar os dados em malha aberta. O modelo desenvolvido deve então ser aplicado no esquema de controle inferencial a ser implantado. Quando um número suficiente de dados tiver sido coletado, com a operação do equipamento dentro do esquema de controle implantado, deve-se re-estimar os parâmetros do modelo. Este procedimento deve ser repetido até a obtenção de um modelo que produza estimativas com suficiente precisão.

A análise do trabalho, dentro de uma ótica global, permite concluir que a metodologia aqui apresentada, quando utilizada de forma conveniente, constitui-se em uma ferramenta importante na resolução dos problemas associados ao desenvolvimento de modelos inferencias empíricos, para o controle e a otimização de colunas de destilação.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. MEJDELL, T. & SKOGESTAD, S. Estimation of Distillation Composition from Multiple Temperature Measurements Using Partial-Least-Square Regression *Ind. Eng. Chem. Res.*, **30** (12) : 2543-2555, 1991.
2. TOLLIVER, T.L. & McCUNE, L.C. Finding the Optimum Temperature Control Trays for Distillation Columns. *InTech.*, 75-80, 1980.
3. MOORE, C. ; HACKNEY, J. ; CANTER, D. Selecting Sensor Location and Type for Multivariate Processes. *Shell Process Control Workshop*, Butterworths, Toronto, 1986.
4. WEBER, R. & BROSILOW, C.B. The Use of Secondary Measurements to Improve Control. *AIChE Journal*, **18** (3) : 614-623, 1972.
5. JOSEPH, B. & BROSILOW, C.B. Inferential Control of Process. *AIChE Journal*, **24** (3) : 485-509, 1978.
6. JOSEPH, B. & BROSILOW, C.B. Multi-Temps Give Better Control. *Hydrocarbon Processes*, march, 1976.
7. CHOO, K.P. & SAXENA, A.C. Inferential Composition Control of an Extractive Distillation Tower. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **26** (12) : 2442-2444, 1987.
8. KRESTA, J.V. ; MARLIN, T.E.; MACGREGOR, J.F. Development of Inferencial Process Model Using PLS. *Computers Chem. Engng.*, **18** (7) : 597-611, 1994.
9. KING, M.B. & QUEEN, N.M. Use of Rational Functions for Representing Data. *Journal of Chemical Engineering Data*, **24** (3) : 178-181 , 1979.
10. HEISER, R.F. & PARRISH, W.H. Representing Physical Data with Rational Functions. *Ind. Eng. Chem. Res.*, **28** (4) : 484-489, 1989.

11. PONTON, J.W. The Use of Multivariable Rational Functions for Nonlinear Data Representation and Classification. *Computers Chem. Engng.*, **17** (10) : 1047-1052, 1993.
12. PONTON, J.W. & KLEMES, J. Alternative to Neural Networks for Inferential Measurements. *Computers Chem. Engng.*, **17** (10) : 991-1000, 1993.
13. AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. Standard Method for Volatility of Liquefied Petroleum Gases. Philadelphia, PA, 1986. ASTM-D 1837.
14. ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. Ponto de Ebulição dos 95% evaporados no GLP. Rio de Janeiro, 1970. ABNT MB-285.
15. SGARBOSA, M. & MENDES, M.J. *Otimização On-Line de uma Coluna Debutanizadora*. Campinas, FEQ / UNICAMP, 1993. 100p. (Tese de Mestrado).
16. NAPHTALI, L.M. & SANDHOLM, D.P. Multicomponent Separation Calculation by Linearization. *AIChE Journal*, **17** (1) : 148-153, 1971.
17. FREDENSLUND, A. ; GMEHLING, J. ; RASMUSSEN, P. *Vapor-Liquid Equilibria Using UNIFAC*. Amsterdam, Elsevier Scientific Publishing Company, 1977. 380p.
18. DILLON, M. & GOLDSTEIN, P. *Multivariate Analysis - Methods and Application*. New York, John Wiley & Sons, 1984. 245p.
19. BEEBE, K.R. & KOWALSKI, B.R. An Introduction to Multivariate Calibration and Analysis. *Analytical Chemistry*, **59** (17) : 1007-10017, 1987.
20. WOLD, S. ; ESBENSEN, K. ; GELADI, P. Principal Component Analysis. *Chemometrics and intelligent Laboratory Systems*, **2** : 37-52 , 1987.
21. DESHPANDE, P.B. *Multivariable Process Control*. North Carolina, Instrument Society of America, 1989. 244p.

22. NOBLE, B. & DANIEL, J.W. *Applied Linear Algebra*. 3 ed. New Jersey, Prentice-Hall / Englewood Cliffs, 1988. 521p.
23. KAMENSKY, D.I. & DIMITROV, S.D. A Parameter Estimation Method for Rational Functions. *Computers Chem. Engng.*, **15** (9) : 657-662, 1991.
24. RATKOWSKY, D.A. The Statistical Properties and Utility of Rational Functions Models. *The Canadian Journal of Chem. Engng.*, **65** : 845-851, 1987.
25. MATLAB. Department of Computer Science, University of New Mexico.
26. YU,C. & LUYBEN,W.L. Use of Multiple Temperatures for the Control of Multicomponent Distillation Columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, **23** (3) : 590-597, 1984.
27. QUINTERO, E.M. & LUYBEN,W.L. Inferential Model-Based Control of Multicomponent Batch Distillation. *Chem. Engng. Science*, **47** (4) : 887-898, 1982.

ANEXO

Anexo1 - Cálculo do Intemperismo.

Anexo 2 - Análise dos Graus de Liberdade
da Coluna Debutanizadora.

ANEXO 1

Cálculo do Intemperismo

No método da destilação em batelada assume-se que o ensaio experimental pode ser representado por uma destilação diferencial. Assim, simula-se a destilação diferencial do GLP fazendo-se a consideração que a evaporação do GLP na proveta de ensaio é proporcional ao número de moles presentes. Deste modo, chamando-se de N_0 a quantidade inicial de moles do produto tem-se:

$$\frac{dN}{dt} = -k \cdot N \quad (\text{A.1})$$

com

N = número de moles do produto em um instante qualquer;

t = tempo

k = constante de tempo.

Integrando-se a equação (A.1) obtém-se:

$$N = N_0 \cdot e^{-k \cdot t} \quad (\text{A.2})$$

Sabendo-se que é necessário um tempo aproximado de 30 minutos para a determinação experimental do intemperismo e fazendo-se a seguinte aproximação:

$$\frac{N}{N_0} = \frac{V}{V_0} = \frac{5}{100} = 0.05 \quad (\text{A.3})$$

é possível determinar k substituindo-se a equação (A.3) e $t = 0.5$ h (tempo médio do experimento) na equação (A.2).

Sendo,

$$\frac{d(N \cdot X_j)}{dt} = -k \cdot N \cdot Y_j \quad (\text{A.4})$$

com

X_j = fração molar do componente j na fase líquida;

Y_j = fração molar do componente j na fase vapor.

a equação (A.4) pode ser escrita como:

$$X_j \cdot \frac{dN}{dt} + N \cdot \frac{dX_j}{dt} = -k \cdot N \cdot K_j \cdot X_j \quad (\text{A.5})$$

onde K_j é a constante de equilíbrio do componente j .

Substituindo-se a equação (A.1) na equação (A.5), obtém-se a equação:

$$\frac{dX_j}{dt} = k \cdot (1 - K_j) \cdot X_j \quad (\text{A.6})$$

que, após integrada, resulta em:

$$X_j \cdot (t + \Delta t) = X_j(t) \cdot e^{-k \cdot (1 - K_j) \cdot \Delta t} \quad (\text{A.7})$$

O volume de mistura pode ser obtido por:

$$V(t) = \sum_{j=1}^N \frac{X_j(t) \cdot PM_j}{\rho_j} \quad (\text{A.8})$$

onde:

PM_j = peso molecular do componente j

e

ρ_j = densidade do componente j.

A partir de um processo iterativo baseado nas equações (A.2), (A.7) e (A.8) é possível obter o valor do intemperismo. A figura A.1 apresenta um fluxograma do procedimento de cálculo utilizado para a determinação do intemperismo.

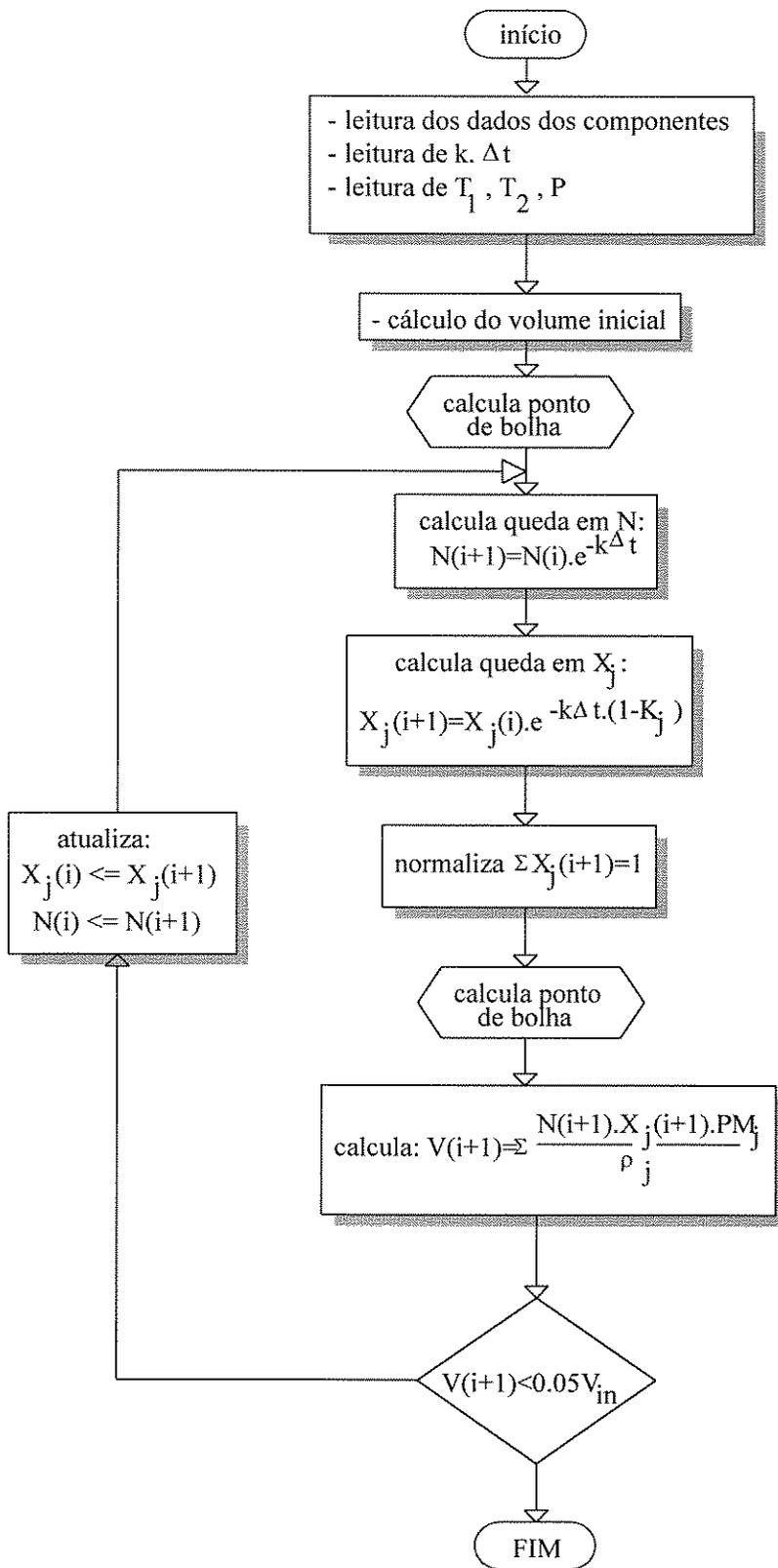


Figura A.1- Procedimento de Cálculo do Intemperismo.

ANEXO 2

Análise dos graus de Liberdade da Coluna Debutanizadora

O problema de decisão de quantas variáveis devem ser especificadas para definir uma única solução na simulação de colunas de destilação em regime estacionário é um problema bastante comum. A solução será única quando o número de equações independentes for igual ao número de variáveis.

Contudo, na formulação de um problema de destilação, o número de variáveis é em geral maior que o número de equações, o que leva a introdução do conceito de graus de liberdade, N_i , que é o número de variáveis que devem ser especificadas para definir uma solução única. Os graus de liberdade do sistema são determinados através da diferença:

$$N_i = N_v - N_e ,$$

onde

N_v = número total de variáveis (incógnitas) envolvidas no processo

e

N_e = número total de equações independentes.

Considerando que a coluna debutanizadora possui condensador total, alimentação única, NC componentes e N estágios (incluindo refeedor e condensador) tem-se:

Número Total de Equações

- Balanço de massa dos componentes	NC.N
- Balanço de Energia	N
- Relações de equilíbrio termodinâmico	NC.N
- Constante de equilíbrio como função de T, P e X	NC.N
$K = K (T, P, X)$	
- Entalpia de cada fase como função de estado da fase	
$H = H (T, Y, P)$	N
$h = h (T, X, P)$	N
- Definição de fração molar	
$\Sigma Y = 1$	N
$\Sigma X = 1$	N
$\Sigma Z = 1$ (Alimentação)	N
TOTAL	(3NC + 5).N + 1

Número Total de Incógnitas

- Composição das fases líquido (X) e vapor (Y) nos estágios e nos produtos	2NC.N
- Temperatura, vazão molar global e composição dos componentes na alimentação	NC + 2
- Vazões molares globais das fases líquido (L) e vapor (V) para os vários estágios	2.N
- Entalpias das fases líquido (h) e vapor (H) para os vários estágios	2.N
- Taxa de calor fornecido ao refeedor (Q_R) e retirado do condensador (Q_C)	2
- Coeficiente de distribuição de cada componente nos vários estágios	NC.N
- Temperatura nos vários estágios.....	N
- Pressão na coluna (a mesma para todos os estágios)	1
TOTAL	(3NC + 5).N + NC + 5

Assim, o número de variáveis que devem ser especificadas para a coluna debutanizadora é:

$$N_i = (3NC + 5).N + NC + 5 - [(3NC + 5).N + 1] = NC + 4$$

Estas $NC + 4$ variáveis descrevem completamente a coluna e se elas forem especificadas a separação obtida estará completamente determinada.

ABSTRACT

Inferential variables are often used in chemical process industries in place of direct on-line measurement of controlled variables. They are mainly used in processes where direct measurement is expensive, unreliable and adds significant delay. Simplified fundamental models are often not available for inferential control. In this case, empirical models must be used. This work investigates the development of an empirical inferential model based on multivariate rational functions to estimate the product quality in distillation columns. The methodology developed includes the use of singular value decomposition (SVD) to select the process variables with the best predictive power. The results obtained show that models based on multivariate rational functions show good predictive power and have significant advantages, when compared with models based on multivariate linear functions, in the estimation of the products quality in distillation columns.