



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

MODELAGEM E CONTROLE DE UNIDADES DE
CRAQUEAMENTO CATALÍTICO - FCC

Autora: Pleycienne Trajano Ribeiro

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Campinas – São Paulo

Fevereiro de 2007



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

MODELAGEM E CONTROLE DE UNIDADES DE
CRAQUEAMENTO CATALÍTICO - FCC

Dissertação de Mestrado apresentada à
Faculdade de Engenharia Química como parte
dos requisitos exigidos para a obtenção do título
de Mestre em Engenharia Química.

Autora: Pleycienne Trajano Ribeiro

Orientador: Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Campinas – São Paulo

Fevereiro de 2007

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

R355m Ribeiro, Pleycienne Trajano
 Modelagem e controle de unidades de craqueamento
 catalítico – FCC / Pleycienne Trajano Ribeiro.--Campinas,
 SP: [s.n.], 2007.

 Orientador: Rubens Maciel Filho
 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

 1. Craqueamento catalítico. 2. Redes neurais
 (Computação). 3. Controle preditivo. I. Maciel Filho,
 Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade
 de Engenharia Química. III. Título.

Título em Inglês: Modeling and Control of Catalytic Cracking Units – FCCU.
Palavras-chave em Inglês: Catalytic cracking, Neural networks, Predictive control
Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos
Titulação: Mestre em Engenharia Química
Banca examinadora: Valdir Apolinário de Freitas, Eduardo Coselli de Toledo
Data da defesa: 23/02/2007
Programa de Pós-Graduação: Engenharia Química

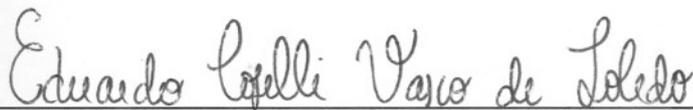
Tese de Mestrado defendida por Pleycienne Trajano Ribeiro e aprovada em 23 de fevereiro de 2007 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. Rubens Maciel Filho (Orientador)
Universidade Estadual de Campinas



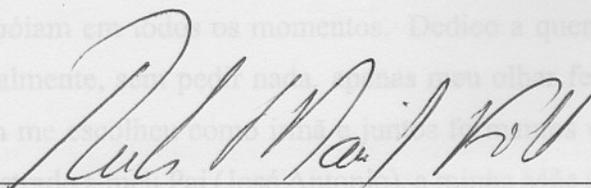
Dr. Valdir Apolinário de Freitas
RHODIA



Dr. Eduardo Coselli Vasco de Toledo
Petrobras

Dedicatória

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.

A handwritten signature in black ink, appearing to read 'Rub. Maria Kelly', written over a horizontal line.

Orientador

Muito obrigada.

Dedicatoria

Dedico essa tese as pessoas mais importantes de minha vida, aos verdadeiros pilares que me sustentam e apóiam em todos os momentos. Dedico a quem me gerou, cuidou e me ama incondicionalmente, sem pedir nada, apenas meu olhar feliz. Dedico a quem me dá carinho, a quem me escolheu como irmã e juntos formamos uma grande família. Dedico essa tese de mestrado a meu Pai (José Antonio), a minha Mãe (Terezinha) e a meus irmãos Pleycianna, Pleyston Rômulo e Pablo Rafael.

Muito obrigada.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus por está comigo em todos os momentos, por me amar e colocar em minha vida todas as alegrias e desafios que fazem com que eu me sinta viva, feliz e amada.

Agradeço a meu Mentor Espiritual que trilha esses caminhos comigo, que me ajuda mesmo nos erros, que me apóia, levanta e enfim que é minha companhia, meu amigo e mentor.

Agradeço a toda a minha Família, minha vó Eliza e todos os meus parentes que me apoiaram em todas as decisões de minha vida.

Agradeço a meu irmão de coração Agremis, pela ajuda, pelas noites de estudo e por me adotar, dividindo comigo sua Família, Luiza, Lourdes e a minha amada amiga e irmã Ana Paula.

Agradeço ao professor Rubens e à professora Maria Regina pela oportunidade de convivência e aprendizado que tenho ao seu lado.

Agradeço aos meus amigos do LOPCA, que juntos trilhamos o caminho do conhecimento sem esquecer da amizade.

Agradeço aos amigos que fiz ao longo desses dois anos de desenvolvimento desta tese, Arlete, Lia, Sarita, Luciene e seu filho Alexandre, que tive a felicidade de ajudá-lo um pouquinho no seu nascimento.

Agradeço aos meus amigos do Melrose Place simplesmente pela amizade, Fernanda, Thaís, Valdir, Guilherme, Luciana e Elaine.

Agradeço a Heliton e aos meus amigos do Centro Espírita ASAS-PB - Associação Amor e Sabedoria.

Agradeço aos amigos do Centro Espírita Alan Kardec-Campinas/SP pela ajuda espiritual, Nina, Gilmar, Rafael, Camila, todos os amigos do grupo de estudo e todos os voluntários do Grupo de Apoio e do Bazar.

Agradeço aos amigos que não estão tão perto de mim, mas estão dentro do meu coração, pois a distância não apaga as verdadeiras amizades.

Agradeço ao meu amigo Nagel, pelo apoio sempre dado aos amigos.

Agradeço a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo - FAPESP pelo apoio financeiro dado para o desenvolvimento desta tese.

Agradeço a Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP pela oportunidade de estudar em suas instalações.

Resumo

Por representar um importante processo de conversão da indústria petroquímica, o craqueamento catalítico é um dos processos de conversão mais estudados. Nele, moléculas de alto peso molecular são quebradas em moléculas com menor peso molecular, obtendo-se assim produtos economicamente mais desejáveis.

Os estudos do processo, de sua modelagem matemática e dos seus sistemas de controle, podem garantir o conhecimento necessário para alcançar condições operacionais ótimas que levem à máxima conversão da carga.

Neste contexto, este trabalho teve como objetivos: a pesquisa e utilização de uma modelagem matemática para o conversor FCC (*Fluid Catalytic Cracking*); o estudo do processo sob influência de um controlador PID clássico, muito utilizado em refinarias; a estruturação de uma rede neural artificial (RNA) e o seu posterior uso como modelo interno de um controlador avançado tipo preditivo desenvolvido a partir dos estudos feitos no processo de craqueamento catalítico.

Em paralelo, foi criada uma ferramenta de simulação que possibilitou o meio mais amigável e prático para realização de todas as simulações necessárias para o desenvolvimento do presente trabalho. O FCCGUI (*Fluid Catalytic Cracking Graphical User Interface*), nome dado ao simulador, proporciona a escolha de parâmetros de simulação, diferentes estruturas de controle (PID, DMC e MPC - baseado em redes neurais), a visualização de diferentes variáveis manipuladas, controladas e sinais de válvulas e facilidades para perturbar o sistema.

Através das simulações foi possível acompanhar o comportamento das variáveis de processo em diferentes condições testadas, realizar a estruturação da rede neural e obter as respostas das variáveis controladas para os dois tipos de controladores estudados.

Os resultados obtidos foram bastante satisfatórios, visto que a modelagem matemática escolhida representa bem o sistema e o controlador MPC-Neural desenvolvido se mostrou eficiente, por conseguir manter o processo estável e próximo ao *setpoint*, mesmo após a aplicação de perturbações no processo.

Abstract

Catalytic cracking is one of the most studied conversion processes due its importance in the petrochemical industry. In this process high weight molecules are broken into lighter ones, yielding more economically valuable products.

The study about the process, its mathematical modeling, and its control systems may guarantee the necessary knowledge needed to reach optimal operational conditions which lead to maximum load conversion.

In this context, the present work thesis has as main objectives the research and use of a mathematical modeling for a FCC (Fluid Catalytic Cracking) conversion unit, the study of the system under PID control loop widely used in refineries, structuring of an artificial neural network (ANN) with its use as an internal model of a predictive control system developed for catalytic cracking.

Parallel to this, it was developed a computational tool which in a friendly and practical way made possible to carry out simulations needed to accomplish this work. FCCGUI (Fluid Catalytic Cracking Graphical User Interface), name given to this simulator, allows to choose simulation parameters, different control systems (PID, DMC, and MPC-ANN Based), graphical visualization of many different variables, such as manipulated and controlled variables plus valve signals, also it allows for and easy means for disturbing the system while the simulation continues.

Through the simulations it was possible to follow the behavior of many process variables under different tested operational conditions, to structure the neural network, and to obtain controlled variables responses for both types of control systems studied.

The obtained results were quite satisfactory since the chosen mathematical modeling represents well the system and the developed MPC-ANN controller showed to be efficient to maintain the process stable and close to the set points even after the introduction of disturbances in the process. Taking all these into account, compared to PID controller, MPC-ANN showed to be less oscillatory and to be more effective.

Sumário

Lista de Figuras	p. xix
Lista de Tabelas	p. xxv
Abreviaturas	p. xxvii
Símbolos	p. xxxiii
1 Introdução	p. 35
1.1 Organização da Tese	p. 37
2 Revisão Bibliográfica e Estado da Arte	p. 39
2.1 Introdução	p. 39
2.2 Processo de Craqueamento Catalítico	p. 39
2.3 Redes Neurais	p. 43
2.4 Controle Preditivo	p. 47
2.5 Conclusão	p. 48
3 Conceitos Fundamentais	p. 51

3.1	Introdução	p. 51
3.2	Processo de Refino do Petróleo	p. 51
3.3	Craqueamento Catalítico	p. 55
3.4	Redes Neurais Artificiais	p. 60
3.4.1	Arquiteturas de redes	p. 65
3.4.2	Processo de Aprendizagem	p. 70
3.4.3	Modelos de Relacionamento da Rede Neural com o seu Ambiente	p. 71
3.4.4	Função de Ativação	p. 72
3.4.5	Rede Multicamada <i>Feedforward</i> do Tipo Perceptron Multica- madas	p. 74
3.4.6	Algoritmo de Retropropagação (<i>Backpropagation</i>)	p. 76
3.4.7	Estimação de Modelos Neurais	p. 77
3.5	Controle Preditivo	p. 79
3.5.1	MPCs Baseados em Modelos Não-lineares	p. 80
3.5.2	Formulação Geral do Controlador Preditivo Não-Linear	p. 82
3.6	Conclusão	p. 84
4	Descrição do Processo de Craqueamento Catalítico	p. 87
4.1	Introdução	p. 87
4.2	O Processo	p. 87
4.3	Descrição da Entrada das Variáveis e Perturbações do Sistema	p. 90
4.4	Restrições de Processo	p. 92

4.5	Malhas de Controle	p. 93
4.6	Conclusão	p. 96
5	Modelagem Matemática	p. 97
5.1	Introdução	p. 97
5.2	Modelagem Matemática	p. 97
5.3	Conclusão	p. 109
6	Planejamento Fatorial	p. 111
6.1	Introdução	p. 111
6.2	Planejamento de Experimentos	p. 111
6.3	Aplicação ao Caso de Estudo - FCC	p. 113
6.3.1	Primeiro Planejamento	p. 115
6.3.1.1	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RX}	p. 119
6.3.1.2	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG1}	p. 123
6.3.1.3	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG2}	p. 126
6.3.1.4	d) Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída Severidade da Reação	p. 129
6.3.2	Segundo Planejamento	p. 132

6.3.2.1	a) Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RX}	p. 136
6.3.2.2	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG1}	p. 140
6.3.2.3	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG2}	p. 144
6.3.2.4	Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída Severidade da Reação	p. 148
6.4	Conclusão	p. 151
7	Resultados	p. 153
7.1	Introdução	p. 153
7.2	Resultados da Primeira Etapa	p. 153
7.2.0.5	Primeiro caso: Aplicação do degrau na variável T_{AI} :	p. 154
7.2.0.6	Segundo caso: Aplicação do degrau na variável R_{TF} :	p. 159
7.3	Resultados da Segunda Etapa	p. 162
7.4	Resultados da Terceira Etapa	p. 171
7.4.1	Comparação Entre o Controlador Preditivo (Rede Neural como Modelo Interno) e o Modelo Fenomenológico com o PID	p. 179
7.4.1.1	Primeiro caso - $T_{AI} +10\%$	p. 179
7.4.1.2	Segundo caso - $T_{AI} -10\%$	p. 182
7.5	Conclusão	p. 185

8 Simulador FCCGUI	p. 187
8.1 Introdução	p. 187
8.2 Simulador FCCGUI	p. 187
8.3 Conclusão	p. 194
9 Conclusão	p. 195
Referências	p. 199
Apêndice A – Algoritmo de Retropropagação	p. 205
A.1 Melhorias no Desempenho do Algoritmos de Treinamento	p. 205
Apêndice B – Método de Levenberg-Marquardt (LM)	p. 209
B.1 Método de Levenberg-Marquardt	p. 209
Apêndice C – Abordagens para Treinamento de Redes Neurais	p. 213
C.1 Modelagem Direta	p. 213
C.2 Modelagem Inversa	p. 215

Lista de Figuras

1	Representação dos aspectos químicos de uma refinaria.	p. 52
2	Esquema de um processo de refino do petróleo.	p. 54
3	Ilustração simplificada do processo de craqueamento (ERTHAL, 2003).	p. 55
4	Esquema simplificado de conversor FCC (ERTHAL, 2003).	p. 56
5	Representação em diagrama de blocos do sistema nervoso.	p. 61
6	Modelo simplificado de um neurônio biológico.	p. 62
7	Modelo não-linear de um neurônio.	p. 63
8	Rede alimentada acíclica com uma única camada de neurônios (HAYKIN, 2004)	p. 66
9	Rede alimentada acíclica totalmente conectada com uma camada oculta e uma camada de saída (HAYKIN, 2004).	p. 67
10	Rede recorrente sem laço de auto-alimentação e sem neurônios ocultos (HAYKIN, 2004).	p. 68
11	Rede recorrente com neurônios ocultos (HAYKIN, 2004).	p. 69
12	Representação esquemática dos elementos básicos do controle preditivo	p. 82
13	Unidade “FCC” de Craqueamento Catalítico.	p. 89
14	Malhas de controle da unidade FCC.	p. 95

15	Modelo do regenerador.	p. 107
16	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos T_{RX}	p. 120
17	Tabela 5 - Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX} . p.	121
18	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos, para T_{RX}	p. 122
19	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG1}	p. 124
20	Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} . p.	125
21	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG2}	p. 127
22	Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} . p.	128
23	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para $SEVER$	p. 130
24	Superfície de resposta para a variável Severidade, entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV}	p. 131
25	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos T_{RX}	p. 137
26	Superfície de resposta para a variável T_{RX} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} . p.	138
27	Superfície de resposta para a variável T_{RX} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} . p.	139
28	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG1}	p. 141
29	Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV}	p. 142
30	Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} . p.	143
31	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG2}	p. 145
32	Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} . p.	146
33	Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} . p.	147

34	Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para <i>SEVER</i>	p. 149
35	Superfície de resposta para a variável Severidade, entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV}	p. 150
36	Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável T_{AI}	p. 156
37	Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável T_{AI}	p. 156
38	Resposta da variável <i>SEVER</i> a perturbação dada na variável T_{AI}	p. 157
39	Resposta da variável T_{RX} a perturbação dada na variável T_{AI}	p. 157
40	Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável R_{TF}	p. 160
41	Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável R_{TF}	p. 160
42	Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável R_{TF}	p. 161
43	Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável R_{TF}	p. 161
44	Degaus aplicados na variável manipulada R_{AI}	p. 164
45	Degaus aplicados na variável manipulada R_{TF}	p. 164
46	Degaus aplicados na variável manipulada R_{AI}	p. 165
47	Degaus aplicados na variável manipulada R_{TF}	p. 165
48	Representação da rede neural proposta, seguindo a seguinte estruturação 8 x 20 x 4.	p. 168
49	Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável temperatura de saída do <i>riser</i>	p. 169
50	Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável. severidade da reação.	p. 169

51	Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável T_{RG1}	p. 170
52	Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável T_{RG2}	p. 170
53	Diagrama de bloco representando a estratégia de controle.	p. 172
54	Esquema do sistema de controle do FCC - Rede Neural como modelo interno do controlador preditivo, inserido no controle convencional do processo.	p. 173
55	Comportamento da variável T_{RG1} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 175
56	Comportamento da variável T_{RG2} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 175
57	Comportamento da variável T_{RX} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 176
58	Comportamento da variável $SEVER$ a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 176
59	Comportamento da variável T_{RG1} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 177
60	Comportamento da variável T_{RG2} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 177
61	Comportamento da variável T_{RX} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 178
62	Comportamento da variável $SEVER$ a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.	p. 178

63	Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RX}	p. 180
64	Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável Severidade	p. 180
65	Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG1}	p. 181
66	Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG2}	p. 181
67	Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RX}	p. 183
68	Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável Severidade	p. 183
69	Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG1}	p. 184
70	Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG2}	p. 184
71	Tela principal.	p. 188
72	Barra de ferramentas.	p. 188
73	Janela para escolha da variável para acompanhamento.	p. 189
74	Janela para ativação da simulação e visualização da descrição das variáveis.	p. 189
75	Gráfico da variável T_{RG1} em tempo de execução.	p. 190
76	Gráfico da variável T_{RG1} após um determinado período de tempo.	p. 190

77	Janela com os dados de operação.	p. 191
78	Janela com os parâmetros do PID.	p. 192
79	Janela com os parâmetros do DMC.	p. 192
80	Janela com os parâmetros do simulador.	p. 192
81	Janela com os parâmetros do MPC - Rede Neural.	p. 193
82	Janela para o treinamento de uma nova rede neural.	p. 193
83	Identificação de uma planta utilizando RNA.	p. 214
84	Modelagem neural direta-inversa.	p. 215

Lista de Tabelas

1	Faixa de limites para cada variável manipulada	p. 115
2	Matriz de planejamento completo	p. 116
3	Valores dos níveis (-1 e +1) das variáveis de entrada	p. 117
4	Valores de respostas das variáveis de saída.	p. 118
5	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX}	p. 119
6	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG1}	p. 123
7	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG2}	p. 126
8	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo $SEVER$	p. 129
9	Faixa de limites para cada variável manipulada.	p. 132
10	Matriz de planejamento completo para os valores codificados	p. 133
11	Valores dos níveis (-1 e +1) das variáveis de entrada dados reais.	p. 134
12	Valores de respostas das variáveis de saída.	p. 135
13	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX}	p. 136
14	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG1}	p. 140
15	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG2}	p. 144
16	Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo $SEVER$	p. 148

- 17 Conjunto de degraus impostos as variáveis manipuladas p. 163
- 18 Variáveis Manipuladas e os seus respectivos valores de limites p. 163

Abreviaturas

A_{LCV} - Abertura da Válvula de Catalisador

A_{RG1} - Área Transversal do Primeiro Estágio do Regenerador

A_S - Calor Específico do Ar e dos Gases de Combustão

$BFGS$ - Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno

C - Saída do Controlador do Vaso Separador

C_{arb1} - Queima de Carbono

C_c - Kg de Carbono/Kg de Catalisador

C_{cat} - Carbono Catalítico

CH_x - Coque Depositado no Catalisador

$[CO]$ - % Molar de CO na Fase Diluída

C/O - Relação entre a Circulação de Catalisador e a Vazão da Carga

C_{RC} - Teor de Carbono no Catalisador Regenerador

C_{RC1} - Teor de Carbono no Catalisador do Primeiro Estágio do Regenerador

C_{RC2} - Teor de Carbono no Catalisador do Segundo Estágio do Regenerado

C_{SC} - Teor de Carbono no Catalisador Gasto

$CSTR$ - *Contínuos Stirred tank Reactor* - Reator Tanque de Mistura Contínua

C_{VLC} - Coeficiente de Vazão

DMC - *Dynamic Matrix Control*

D_{TF} - Massa Específica da Carga

F_{AR12} - Vazão de Ar Arrastada para o segundo Estágio do Regenerador

F_{AT1} - Relação Molar O_2 consumido/ C queimado

FCC - *Fluid Catalytic Cracking*

$FCCGUI$ - *Fluid Catalytic Cracking User Interface*

F_G - Vazão de Gases de Combustão

F_{GK1} - Vazão de Gases de Combustão

F_i - Vazão de Gases de Combustão Gerados

F_o - Vazão de Gases de Combustão Enviados para a Caldeira de CO

GLP - Gás Liquefeito de Petróleo

h - Altura do Catalisador no Vaso Separador

ΔH_{CR} - Calor de Craqueamento

ΔH_{FV} - Calor de Vaporização da Carga

H_{RA} - Inventário de Catalisador no Reator

ΔH_{RG1} - Calor de Combustão do Coque

H_{RIS} - Inventário do Catalisador no *riser*

h_{SP} - Altura do *Stand-pipe*

h_v - Altura do Vertedor

IA - Inteligência Artificial

IMC - Controle por Modelo Interno

LM - Método de Levenberg-Marquardt

K_{cc} - Constante Experimental

K_{CO} - Constante Pré-Exponencial

MPC - *Multivariable Predictive Control*

NMPC - Controle Preditivo Não-Linear

[O₂] - % Molar de O₂ na Fase Diluída

O_{FG1} - % Molar de O₂ nos Gases de Combustão do Primeiro Estágio

P_{CV} - Válvula de Pressão

PI - *Proportional Integral*

PID - *Proportional Integral Derivative*

ΔP_{LCV} - Perda de Carga

PM - Peso Molecular

P_{O_2} - Pressão Parcial Média Logarítmica de O₂

P_{RA} - Pressão no Vaso Separador

P_{Reg} - Pressão do Regenerador

P_{Suc} - Pressão de Sucção do Compressor

QDMC - Quadrática por Matriz Dinâmica

R_{AI1m} - Vazão Molar de Ar

R_{AI} - Vazão de Ar para Queima de Coque no Regenerador

R_{CB1} - Velocidade de Queima de Coque

R_{CF} - Velocidade de Formação do Carbono

R_{CO} - Velocidade da Fase Diluída do Primeiro Estágio do Regenerador

RNA - Rede Neural Artificial

R_{OC} - Velocidade das Reações Craqueamento

R_{RC} - Circulação de Catalisador para o *Riser*

R_{RC1} - Vazão do Catalisador do Primeiro para o Segundo Estágio

R_{TF} - Vazão de Alimentação para o Conversor

S_C - Calor Específico do Catalisador

SCG - Gradiente Conjugado Escalonado

$SEVER$ - Severidade da Reação

S_F - Calor Específico da Carga

$SEVCONT$ - Severidade da Reação

T_{AI} - Temperatura de Ar para o Regenerador

T_{CV} - Válvula de Controle de Temperatura

T_{D1} - Temperatura de Saída da Fase Diluída do Primeiro Estágio do Regenerador

T_{D2} - Temperatura de Saída da Fase Diluída do Segundo Estágio do Regenerador

T_{FP} - Temperatura da Corrente de Alimentação

T_{DG} - Temperatura da Fase Diluída Geral

T_{RG1} - Temperatura do Regenerador das Fases Densas do Primeiro Estágio

T_{RG2} - Temperatura do Regenerador das Fases Densas do Segundo Estágio

T_{RX} - Temperatura de Saída do *Riser*

V_{DI1} - Volume da Fase Diluída do Primeiro Estágio

V_{de1} - Volume da Fase Densa do Primeiro Estágio do Regenerador

W_{HSV} - Velocidade Espacial

Símbolos

Símbolos Latinos

A - Área Transversal do Vaso Separador

b_k - Bias

f - Função Ativação

J - Jacobiano

k - Representação do Instante Atual

K - Neurônio

M - Número de Conexões Sinápticas de um Neurônio

N_c - Horizonte de Controle

N_p - Horizonte de Predição

s_p - *Setpoint*

$Tanh$ - Tangente Hiperbólica

U - Malhas de Controle

w - Peso Sináptico

x_j - Entrada da Sinapse j

Y_i - Saída do Neurônio

Símbolos Gregos

v - Campo local induzido

$\varphi(v)$ - Função Ativação

σ_w^2 - Variância

σ^2 - Variância do Campo Induzido

Δ - Variação ou Delta de uma determinada variável

Δu - Vetor com os Incrementos das Variáveis Manipuladas

λ - Fator de Ponderação

α - Fator de Ponderação

ρ - Densidade dos Gases de Combustão

ρ^m - Densidade Molar dos Gases de Combustão

β - Relação em CO_2/CO

ρ_{cat} - Massa Específica Média do Leito do Primeiro Estágio do Regenerador

ρ_v - Massa Específica do Catalisador no Vaso Separador

γ - Peso Específico do Catalisador Fluidizado

1 *Introdução*

O craqueamento catalítico consiste nas reações de quebra de moléculas de cadeias carbônicas de compostos pesados, tais como gasóleos e resíduos do processo de refino do petróleo. No caso específico do Brasil, a importância do desenvolvimento deste processo é reforçada pela exploração de poços contendo petróleos pesados. Qualquer aumento da eficiência na conversão de cargas mais pesadas, aliado a uma maior produção diária, pode representar um ganho significativo no final de um determinado período.

Ao entrar em contato com o catalisador a alta temperatura, a carga recebe energia suficiente para se aquecer, vaporizar e promover a quebra das cadeias produzindo hidrocarbonetos mais leves, com maior valor comercial, como a gasolina e a GLP. O processo de craqueamento catalítico ocorre em equipamentos chamados de conversores. Um conversor FCC (*Fluid Catalytic Cracking*) é composto basicamente de um tubo vertical (*riser*), um vaso separador/*stripper* e um regenerador. O conversor recebe gasóleo e resíduos previamente aquecidos provenientes das torres de destilação atmosférica e a vácuo, que são convertidos em produtos e enviados a uma coluna fracionados.

A crescente exigência de operar o conversor com alta performance impõe restrições cada vez maiores aos seus sistemas de controle. Ao projetar sistemas de controle para operações de processos com alta eficiência e desempenho, deve-se garantir que o controlador seja capaz de atender às especificações de produção sem violar as restrições.

Para um caso qualquer a modelagem serve de ferramenta para o acompanhamento

e ajuste do processo e a capacidade de processamento das plataformas computacionais pode surgir como fator limitante. Por outro lado, as simulações dinâmicas do FCC podem ser empregadas para avaliar controladores em desenvolvimento. Para esses controladores torna-se também necessário um modelo dinâmico que possa ser executado em tempo real. Assim sendo, o desenvolvimento de modelos dinâmicos reduzidos da unidade FCC é importante para a obtenção desses controladores. Os modelos lineares dinâmicos, devido à sua versatilidade e simplicidade, têm sido muito utilizados, porém devido à complexidade da unidade FCC, estes não são adequados para representar bem esse sistema. Dentre os desenvolvimentos mais recentes em sistemas de controle avançado, destacam-se aqueles caracterizados pela forte ligação entre as áreas de modelagem, utilizando principalmente as redes neurais artificiais e o projeto de sistemas de controle baseados em modelo.

A motivação que leva ao estudo das redes neurais, como modelo interno do controlador preditivo, vem da idéia de adaptabilidade e capacidade de aprendizado proporcionado a partir de seqüências de cálculos para representação do comportamento do sistema em estudo.

Assim, a proposta deste trabalho é o estudo de um modelo matemático determinístico para o processo de craqueamento (através de balanços de massa e energia), implementação das equações matemáticas (modelo) em linguagem de programação (FORTRAN), desenvolvimento de uma estrutura neuronal para treinamento das variáveis do processo, avaliação das mesmas com relação aos dados de treinamento fornecidos para a rede, o desenvolvimento e a implementação de controladores preditivos, utilizando redes neurais como modelo interno do controlador e a comparação deste controlador preditivo com um outro controlador PID clássico.

1.1 Organização da Tese

Este trabalho está organizado da seguinte forma: o Capítulo 2 refere-se à revisão bibliográfica realizada sobre os temas abordados no trabalho de pesquisa. O Capítulo 3 apresenta conceitos fundamentais dos temas estudados, como: craqueamento catalítico, redes neurais e controle preditivo. O Capítulo 4 é referente à descrição do processo de craqueamento catalítico e apresentação das variáveis usadas tanto na modelagem matemática como no programa computacional. O Capítulo 5 trata da modelagem matemática utilizada para simular o funcionamento do conversor FCC. O Capítulo 6 traz as análises estatísticas realizadas nas variáveis manipuladas e controladas. Foi realizado um planejamento estatístico para verificação dos efeitos que cada variável exerce sobre o processo e os efeitos de suas interações. O Capítulo 7 traz os resultados obtidos neste trabalho. O capítulo se divide em três partes: na primeira são apresentadas as simulações realizadas com o programa desenvolvido, a partir de perturbações no sistema, para análise do comportamento do programa. Na segunda parte tem-se o estudo realizado para elaboração de uma rede neural que represente o processo de craqueamento e na terceira etapa o desenvolvimento do controle preditivo utilizando como modelo interno à rede neural. No Capítulo 8 é apresentada a interface gráfica desenvolvida para o simulador FCC. São apresentadas as janelas que compõem o programa e a forma de visualização gráfica das variáveis envolvidas no processo. O Capítulo 9 apresenta a conclusão dos trabalhos, trazendo um resumo dos resultados mais importantes obtidos e sugestões para trabalhos futuros.

2 *Revisão Bibliográfica e Estado da Arte*

2.1 Introdução

Este capítulo apresenta uma revisão da bibliografia encontrada sobre os assuntos abordados nesta dissertação. Serão descritos conceitos e estudos realizados sobre o processo de craqueamento catalítico na indústria de refino de petróleo. Também serão abordados modelos de redes neurais artificiais obtidos através de algoritmo de aprendizagem e controladores preditivos baseados em modelo que são, segundo vários autores, a estratégia de controle multivariável mais empregada na indústria de processos.

2.2 Processo de Craqueamento Catalítico

O processo de craqueamento catalítico em leito fluido consiste basicamente na quebra de moléculas de cadeias carbônicas de alto peso molecular em cadeias mais leves e com maior valor comercial.

A carga de alimentação (gasóleo e resíduos), que é previamente aquecida, entra em contato com o catalisador (material sólido a base de sílica e alumina) a alta temperatura, provocando sua vaporização quase que instantânea. Devido à ação da temperatura e das propriedades catalíticas do meio, as moléculas da carga são quebradas principalmente em

compostos separadas por três frações distintas: gás combustível, moléculas contendo 1 a 2 átomos de carbono, C1 e C2, de 3 a 12 átomos de carbono GLP (gás liquefeito de petróleo) e nafta de craqueamento (gasolina automotiva) de 5 a 12 átomos de carbono, C5 a C12 (LCO e Óleo Clarificado). Estas correntes em seguida passam por uma unidade de tratamento químico onde são reduzidos os teores de enxofre. No craqueamento também é formando o coque que consiste primordialmente de cadeias carbônicas não craqueadas, metais pesados e compostos aromáticos com características próximas a do grafite, que é o responsável pela desativação do catalisador.

O processo de craqueamento ocorre em equipamentos chamados de conversores que são composto basicamente de um tubo vertical (*riser*), um vaso separador/*stripper* e um regenerador e por possuírem elevada interação entre suas variáveis de processo e em função da complexidade das cinéticas químicas envolvidas nas reações catalíticas, apresentam comportamento não linear e conseqüentemente dificuldades para operar e controlar (VIEIRA, 2002).

Uma forma mais rápida e de baixo custo de avaliar o processo de FCC e de alternativamente treinar pessoal para operar a planta reside na modelagem matemática e simulação computacional. A modelagem e a simulação consistem em representar por meio de equações matemáticas leis físico-químicas que regem os fenômenos de interesse e resolvê-las para diferentes condições (ex.: diferentes cargas, relações catalisador/óleo, catalisador, etc.) Estas condições podem ser manipuladas facilmente dependendo do objetivo da análise, tornando o processo muito vantajoso, principalmente quando sua reprodução experimental for onerosa ou demorada.

Dependendo da finalidade, a modelagem do FCC pode assumir vários níveis de complexidade. Quanto maior a complexidade, menor o número de considerações restritivas sobre as equações governantes e em geral uma representação mais fiel do fenômeno físico. Em contrapartida, o tempo computacional será bem maior para a determinação das variáveis do problema. Alguns trabalhos têm sido desenvolvidos no intuito de obter um

modelo, tanto do conjunto conversor como dos equipamentos em separado (*riser*, vaso separador/*stripper* e regenerador), que alie fidelidade ao fenômeno físico com rapidez computacional.

Como as velocidades das reações endotérmicas dependem do mecanismo de transferência de calor e da quantidade de movimento entre as fases sólida e gasosa, é preciso investigar o processo de transporte das partículas pelos gases. Ding e Gidaspow (1990) e Tsuo e Gidaspow (1990) apresentaram modelos de escoamento gás-sólido baseados nas equações de Navier-Stokes, onde são mostrados os campos de velocidade ao longo de leitos fluidizados.

Lansarin (1997) propôs o desenvolvimento de modelos matemáticos para o *riser* e para o regenerador, os quais foram usados para simular o comportamento do estado estacionário dos reatores individualmente e em conjunto. O *riser* foi considerado um reator tubular, adiabático e em fluxo pistonado, com as reações de craqueamento ocorrendo conforme o modelo cinético de dez *lumps*¹. O regenerador foi modelado como um reator de mistura ideal. Os dois modelos reproduziram com boa precisão, individualmente ou conjugados, o comportamento dos reatores da Refinaria Alberto Pasqualine (REFAP).

Foram encontrados trabalhos publicados apenas com a modelagem matemática do *riser*. No trabalho de Martignoni (2000) baseado em dados experimentais de uma unidade piloto, foi apresentada uma modelagem unidimensional específica para *riser* de FCC, utilizando um modelo de seis *lumps*: LCO, gasolina, GLP, coque, gásóleo e gás combustível. Todos os modelos cinéticos dependem da obtenção das constantes de reação e energias de ativação. Pareek *et al.* (2003) propôs um modelo para um *riser* não-isotérmico. Em seu trabalho ele encontrou um modelo que tanto poderia ser usado para encontrar melhores esquemas de temperaturas para o equipamento, como também sugerir um comprimento para o *riser*, com o objetivo de obter novos sistemas que melhorassem o rendimento de gasolina.

¹*Lumps* são frações distintas ou agrupamentos de compostos de classe com características similares entre si, como massa molecular e ponto de ebulição.

Penteado *et al.* (2002) trabalhou com a modelagem da etapa de regeneração do conversor considerando duas regiões para o equipamento: a fase densa e a fase diluída. A fase densa foi dividida entre bolha e emulsão sendo elas modeladas como reatores de mistura. O modelo é capaz de fornecer a temperatura e a quantidade de coque no catalisador regenerado bem como a composição dos gases na saída do regenerador.

Dehghani *et al.* (2000) propôs um modelo cinético para o leito fluidizado do reator. Este modelo é diferente de outros principalmente pela taxa de decomposição do coque no catalisador poder ser predita a partir da conversão do gásóleo e ser isolada do rendimento do gás C1 a C4. Por este modelo, para 4 *lumps*, pode-se também concluir que o rendimento do gás C1 a C4 aumenta com a temperatura crescente do reator quando a produção de gasolina e coque diminuem e com o decréscimo da velocidade espacial o rendimento da produção aumenta.

A modelagem de todo o conversor surgiu a partir da necessidade de controle das plantas. McFarlane (1990) desenvolveu um modelo voltado para a análise da variação de determinados parâmetros potenciais para controle, com equações diferenciais ordinárias contemplando apenas variações temporais. Entretanto, abriu-se mão de uma análise detalhada dos componentes, com o objetivo de reduzir o esforço computacional. O modelo do *riser* não contempla a cinética de conversão da carga, e por isso, o balanço de energia, que é fortemente afetado pelas reações endotérmicas de craqueamento, fica comprometido. O regenerador é modelado segundo duas regiões: uma densa e outra diluída, sendo analisadas como CSTR's (*Continuous Stirred Tank Reactor* - Reator Tanque de Mistura Contínua), ou seja, como meios contínuos e homogêneos. O modelo prevê aplicação de perturbações nas temperaturas da carga e do ambiente, na tendência de formação de coque da carga e no ajuste do diferencial de pressão entre o reator e o regenerador.

al (2000), focaram seus trabalhos num modelo para explicar o comportamento do *riser*, do *stripper* e do regenerador. O modelo é constituído por um jogo de equações diferenciais ordinárias, relativamente fáceis de resolver e apropriado para simulação em

unidades de craqueamento. Outros pesquisadores, (HAN *et al.*, 2003), apresentaram em seu artigo um modelo em estado estacionário, um estimador de parâmetros deste modelo e um otimizador para o processo de FCC. O modelo matemático descreve tanto o *riser*, o regenerador e o reator (vaso separador/*stripper*), como a fracionadora principal e a maioria das unidades auxiliares incluindo o pré-aquecimento da alimentação, válvulas e outros equipamentos do conversor.

Neste trabalho é considerado a modelagem matemática desenvolvida por Moro (1992). O modelo desenvolvido inclui as principais não-linearidades das seções de craqueamento e regeneração (considerando que o leito do equipamento é dividido em dois estágios distintos em forma agrupada), de modo a reduzir o esforço computacional a níveis razoáveis. O mesmo é comparado, para várias perturbações como: vazão da carga, do catalisador e ar para regeneração, com dados reais de operação, coletados de um conversor Kellogg Ortho-flow F, existente na Refinaria Henrique Lage. Os resultados conseguidos nesta tese foram bastante promissores, considerando-se assim a utilização do modelo como ferramenta para este trabalho.

2.3 Redes Neurais

A era moderna das redes neurais (RN) começou com o trabalho pioneiro de McCulloch e Pitts (apud HAYKIN, 2004). No seu clássico artigo descreveram um cálculo lógico das redes neurais que unificava os estudos de neurofisiologia e da lógica matemática. Eles assumiram que o seu modelo formal de um neurônio segue uma lei “tudo ou nada”. Com um número suficiente dessas unidades simples e com conexões sinápticas ajustadas apropriadamente operando de forma síncrona, eles mostraram que uma rede assim constituída realizaria, a princípio, a computação de qualquer função. Este era um resultado muito significativo e com ele é geralmente aceito o nascimento das disciplinas de redes neurais e inteligência artificial (HAYKIN, 2004).

Nos anos seguintes, vários pesquisadores dedicaram-se a estudar e publicar sob o tema, mas na época não se havia máquinas poderosas o suficiente para emular algumas atividades do cérebro humano que surgiriam em um curto espaço de tempo. Um período de pesquisa silenciosa seguiu-se durante 1967 a 1982, quando poucas pesquisas foram publicadas devido aos fatos ocorridos anteriormente. Entretanto, aqueles que pesquisavam nesta época, e todos os que se seguiram no decorrer de treze anos conseguiram novamente estabelecer um campo concreto para o renascimento da área.

Apenas nos anos 80 emergiram soluções para problemas básicos, com o surgimento de computadores digitais mais rápidos e com a descoberta de métodos eficientes de treinamento. Foi nesta década que houve a publicação dos artigos de Kohonen (apud HAYKIN, 2004), sobre mapas auto-organizáveis utilizando uma estrutura de rede unidimensional ou bidimensional. A publicação de livros como o *Vehicles: experiments in Synthetic Psychology* de Braitenberg e o célebre livro em dois volumes, *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition*, editado por Rumelhart e McClelland contribuiu muito para a difusão do potencial da RN. Este livro exerceu uma grande influência na utilização da aprendizagem por retropropagação, que emergiu como o algoritmo de aprendizagem mais popular para o treinamento de perceptrons de múltiplas camadas. Em 1986, Rumelhart *et al.* (apud HAYKIN, 2004) relataram o desenvolvimento do algoritmo de retropropagação (*backpropagation*). Mais tarde, Linsker (apud HAYKIN, 2004) descreveu um novo princípio para a auto-organização em uma rede perceptiva. Também em 1988, Broomhead e Lowe (apud HAYKIN, 2004) descreveram um processo para o projeto de redes alimentadas adiante, em camadas utilizando funções de base radial (RBF - *Radial Basis Function*), as quais fornecem uma alternativa aos perceptrons de múltiplas camadas (HAYKIN, 2004). Foi no final dos anos 80 que surgiram as primeiras aplicações de redes neurais na engenharia química.

E assim, durante os anos 90, houve uma continuação na pesquisa sobre as redes neurais artificiais. Atualmente, muitas outras arquiteturas de redes neurais são conhecidas, entre elas: Adaline; Perceptron; Counterpropagation; Neocognitron; Mapas Auto-Organizáveis,

dentre outras (JR., 1993 apud VIEIRA, 2002). As aplicações das RNA (Redes Neurais Artificiais) nos dias atuais atingem diversos campos do conhecimento como: robótica, controle, otimização, medicina, ciências sociais, psicologia, entre outras, mas é na área das ciências exatas que elas se apresentam em maior peso.

Entre os artigos pesquisados, tem-se o de Kalogirou (2003), que mostrou a importância das técnicas de AI (inteligência artificial) na modelagem, predição do desempenho e do controle de processos de combustão e Bolla *et al.* (2003), que apresentou um modelo híbrido para unidades industriais. Esse modelo foi comparado com o modelo de uma planta piloto e um modelo puro com rede neural. Todos os dois artigos mostram o sucesso na utilização das redes neurais, principalmente o que se refere à exatidão da predição.

Mas especificamente ligado ao processo de craqueamento catalítico pode-se citar algumas publicações: Batista (1996), apresentou um trabalho de desenvolvimento de um *software* para a simulação do sistema de regeneração de uma unidade industrial de craqueamento catalítico. Inicialmente, modelos determinísticos foram desenvolvidos, e em seguida, utilizam-se redes neurais. O sistema de regeneração é simulado usando redes neurais de retropropagação. Variáveis como perfis de concentração dos componentes e perfis de temperatura foram obtidos.

Santos *et al.* (1998), desenvolveu pesquisas envolvendo redes neurais e sua aplicação em unidades de craqueamento catalítico (descrito como um exemplo típico de um processo complexo, multivariável e não-linear). A pesquisa consiste na identificação e no controle da unidade usando as técnicas de RNA. Os resultados da identificação e do controle do processo com as redes indicam viabilidade da técnica empregada.

Assis (2001), estudou possibilidades de identificação de sistemas dinâmicos utilizando modelos empíricos, com ênfase nos métodos baseados em redes neurais artificiais. Ele trabalhou com dois processos: tanques conectados em série e evaporador de duplo efeito e apresentou a possibilidade de identificação e controle utilizando as RNA's.

Ender (2002), realizou estudos em redes neurais aplicadas em estratégias de controle não-linear, explorando o uso em estratégias de controle multivariável, enfatizando situações em que estas são utilizadas como modelos dinâmicos na geração de predições, bem como na definição de estratégias de controle totalmente baseadas em redes neurais com aprendizagem *on line*.

Vieira (2002), utilizou em sua tese redes neurais do tipo multicamadas *feedforward* para representar o modelo fenomenológico de uma unidade FCC. A configuração da RNA escolhida como modelo interno foi 8 x 1 5x 4 (camada de entrada, oculta e de saída, respectivamente), apresentando um erro relativo máximo de 1% quando comparado com os resultados do modelo rigoroso.

Duarte (2004), propôs um aperfeiçoamento da estratégia de controle CONDEG (Controle Neural Direto Baseado no Erro Global). A estratégia está baseada em redes neurais, com aprendizagem em tempo real, de acordo com as alterações que ocorrem no processo. Foram utilizados dois processos não-lineares para avaliar a estratégia proposta, um reator catalítico de leito fixo e um processo fermentativo extrativo para produção de etanol.

Pimentel (2005), desenvolveu modelos empíricos baseados em RNA e na quimiometria, capazes de relacionar as variáveis de entrada com as variáveis de saída do processo de craqueamento catalítico fluido. Para um bom desempenho das redes foi utilizada a técnica de análise dos componentes principais (PCA) para um pré-processamento dos dados e em seguida foram usadas redes MLP com os seguintes algoritmos de treinamento supervisionado: Método de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS); Método do gradiente conjugado escalonado (SCG) e Levenberg-Marquardt (LM). No trabalho, foram conseguidos bons resultados para a planta piloto e para unidade industrial (que neste caso foi usada para obtenção dos dados experimentais).

2.4 Controle Preditivo

A metodologia MPC (*multivariable Predictive Control*) originou-se na indústria de petróleo em 1970 (JIA *et al.*, 2003). O controle preditivo é assim denominado devido à forma como é feito o cálculo da lei de controle. No instante atual, chamado instante k é feita a previsão do processo para instantes futuros, $k + 1, k + 2, \dots, k + N_P$ onde N_P é denominado horizonte de predição. O ponto de partida para esta predição é representado pelos sinais das variáveis controladas e manipuladas atuais provenientes da unidade industrial. A partir de um modelo, previamente definido, são feitas previsões das respostas do processo simulando alterações nas variáveis manipuladas para N_C instantes futuros, onde N_C representa o horizonte de controle; normalmente $N_C < N_P$. São feitas, então, seleções destas variáveis de forma a escolher aquelas que fornecem somente respostas com determinadas características. Após implementação, o tempo é atualizado para $k+1$ e todo o cálculo é repetido (VIEIRA, 2002). Alguns trabalhos foram publicados utilizando o conceito de controle preditivo aplicado em unidades de craqueamento catalítico.

Filete (1995), em sua pesquisa procurou uma representação não-fenomenológica e não-linear, implementando um controlador preditivo com modelo baseado em redes neurais artificiais para um processo de destilação em batelada. Em que, sendo treinadas a cada intervalo de amostragem, fornecem previsões de comportamento do processo em determinado horizonte de tempo.

Vieira (2002), desenvolveu controladores preditivos multivariáveis para serem implantados em unidades de craqueamento catalítico, utilizando redes neurais artificiais como modelo interno do controlador. Este controlador foi implantado dentro da rotina do modelo fenomenológico, sendo então realizados testes para verificar seu desempenho, comparando o resultado com o sistema aberto e também com o controlador DMC (*Dynamic Matrix Control*) existente. Assim como ele, Assis (2001) também estudou a implementação de redes neurais como modelo interno de um controlador preditivo para dois processos: dois reatores tanques conectados em série e evaporador de duplo efeito, obtendo bons

resultados.

Cristea *et al.* (2003) utilizou um modelo matemático para desenvolver um simulador dinâmico de uma unidade de craqueamento catalítico implementando um modelo de controle preditivo (MPC). Diferentes MPC foram testados para as mais importantes variáveis do reator e regenerador do FCC. Também foi realizada uma comparação de desempenho entre o controlador tipo PID e o controlador preditivo.

Gentilin (2004) também estudou unidades de craqueamento utilizando o controle baseado em modelos preditivos. Segundo Gentilin, controladores preditivos podem ser bem aplicados em sistemas instáveis em malha aberta e em sistemas de fase não mínima, tendo um comportamento estável desejado até mesmo em sistemas não-lineares. O controle preditivo necessita de um modelo da planta, já que o controlador preditivo atua sobre uma planta com base em suas respostas preditas. Desta forma, foi utilizada a metodologia de controle por modelo interno (IMC), a qual baseia-se na representação numérica da dinâmica do processo, obtida através de um modelo de resposta ao impulso. Os resultados obtidos por ele concluíram que o controlador IMC responde de forma satisfatória às alterações de *setpoints* aplicadas nas variáveis controladas. Também apresentam uma comparação entre os controladores IMC + PI e os tradicionais PI utilizados na indústria.

Pimentel (2005) em suas pesquisas, estudou métodos de predição para aumentar a capacidade de predição da rede, assim como em Santos *et al.* (1998), que estudou uma unidade de craqueamento catalítico por ser um processo complexo, multivariável e não-linear, onde controles preditivos são indicados.

2.5 Conclusão

Neste capítulo foram apresentados alguns trabalhos considerados relevantes no decorrer do estudo sobre o processo de craqueamento catalítico, controle preditivo e redes neurais artificiais. Os pontos levantados nas pesquisas apresentadas foram especialmente

considerados devido a sua aplicação no processo de controle de unidades de craqueamento catalítico e por terem acrescentado relevantes contribuições para a preparação deste trabalho.

3 *Conceitos Fundamentais*

3.1 Introdução

Neste capítulo são apresentados conceitos básicos sobre os temas abordados neste trabalho. É realizada uma explanação sobre o processo de refino e como o craqueamento catalítico se encontra inserido nele. É discutido com mais ênfase o processo de craqueamento catalítico, as reações e os equipamentos que fazem parte do conjunto do conversor. São introduzidos conceitos sobre redes neurais, que são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura de uma célula nervosa e por fim são apresentados conceitos pertinentes ao controle preditivo, uma estratégia de controle que faz uso de um modelo do processo.

3.2 Processo de Refino do Petróleo

O óleo cru raramente é usado em sua composição original, devendo ser processado em seus vários produtos, geralmente como meios de dar forma a produtos com um índice de hidrogênio diferente daquele da corrente de alimentação original Figura 1. Assim, o processo químico de refino é constituído por uma série de operações de beneficiamento do petróleo bruto, que envolve a separação, o processamento e a industrialização e resulta em produtos específicos e vendáveis.

Os óleos crus contêm milhares de compostos diferentes que variam do peso molecular

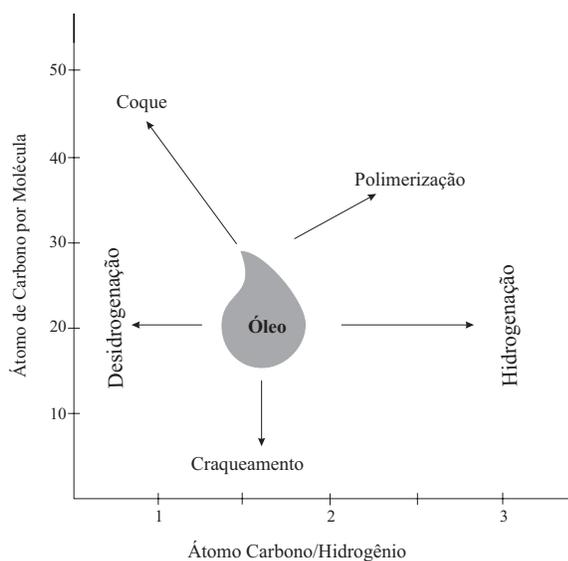


Figura 1: Representação dos aspectos químicos de uma refinaria.

do metano ($\text{CH}_4 = 16$) a mais de 2000 (BODUSZYNSKI, 1989 apud PEIGHT, 1998). Esta larga escala em pesos moleculares resulta em pontos de ebulição que variam de aproximadamente 160°C a temperaturas na ordem de quase 1100°C . Muitos dos constituintes do óleo cru são parafinas. Conforme a qualidade do petróleo (leve ou pesado) as parcelas dos derivados variam. Assim, os petróleos mais leves dão maior quantidade de gás liquefeito de petróleo e naftas (produtos leves), enquanto os mais pesados originam volumes maiores de óleos combustíveis e asfaltos (produtos pesados). No meio da cadeia estão os produtos médios, como o óleo diesel e o querosene. De uma determinada quantidade de petróleo processada numa refinaria apenas parte insignificante se perde em decorrência das reações químicas ali verificadas.

O processo de refino envolve o uso de vários processos térmicos e catalíticos para converter moléculas de frações mais pesadas em frações de moléculas menores que destilam em temperaturas mais baixas (PEIGHT, 1998). Esta eficiência se traduz em uma forte vantagem econômica, conduzindo ao uso difundido de processos de conversão nas refinarias de hoje. A compreensão dos princípios de craqueamento catalítico e dos princípios da

adsorção e da reação em superfícies contínuas é valiosa (SAMORJAI, 1994 apud PEIGHT, 1998).

Uma refinaria é uma rede complexa de processos integrados com a finalidade de produzir uma variedade de produtos do óleo cru (Figura 2). Cada refinaria tem sua própria escala de corrente de alimentação preferido de óleo cru para o qual uma distribuição desejada dos produtos é obtida. Não obstante, os processos da refinaria podem ser divididos em três tipos principais:

- i. Separação - divisão do óleo cru em várias correntes (ou em frações) dependendo da matéria-prima.
- ii. Conversão - a produção de materiais vendáveis a partir do óleo cru, normalmente por alterações estruturais, ou mesmo por alterações de natureza química dos constituintes do óleo cru.
- iii. Finalização - a purificação das correntes de produto através de uma gama de processos que removem impurezas do produto. Por conveniência, os processos que alteram a estrutura molecular, tais como a reforma, são também incluídas nesta categoria.

O craqueamento catalítico, principal processo para a produção de gasolina, foi introduzido em 1942 pela *Standard Oil*, que, posteriormente, desenvolveu a tecnologia de reforma catalítica para a produção de gasolina de alta octanagem, resultando em produtos aromáticos, como o benzeno, o tolueno e o xileno, matérias-primas básicas para a então emergente indústria petroquímica. O craqueamento catalítico é um processo de conversão que muda o número de átomos do carbono por molécula, altera a relação molecular do carbono-hidrogênio, ou muda a estrutura molecular do material sem afetar o número de átomos do carbono por molécula Figura 1.

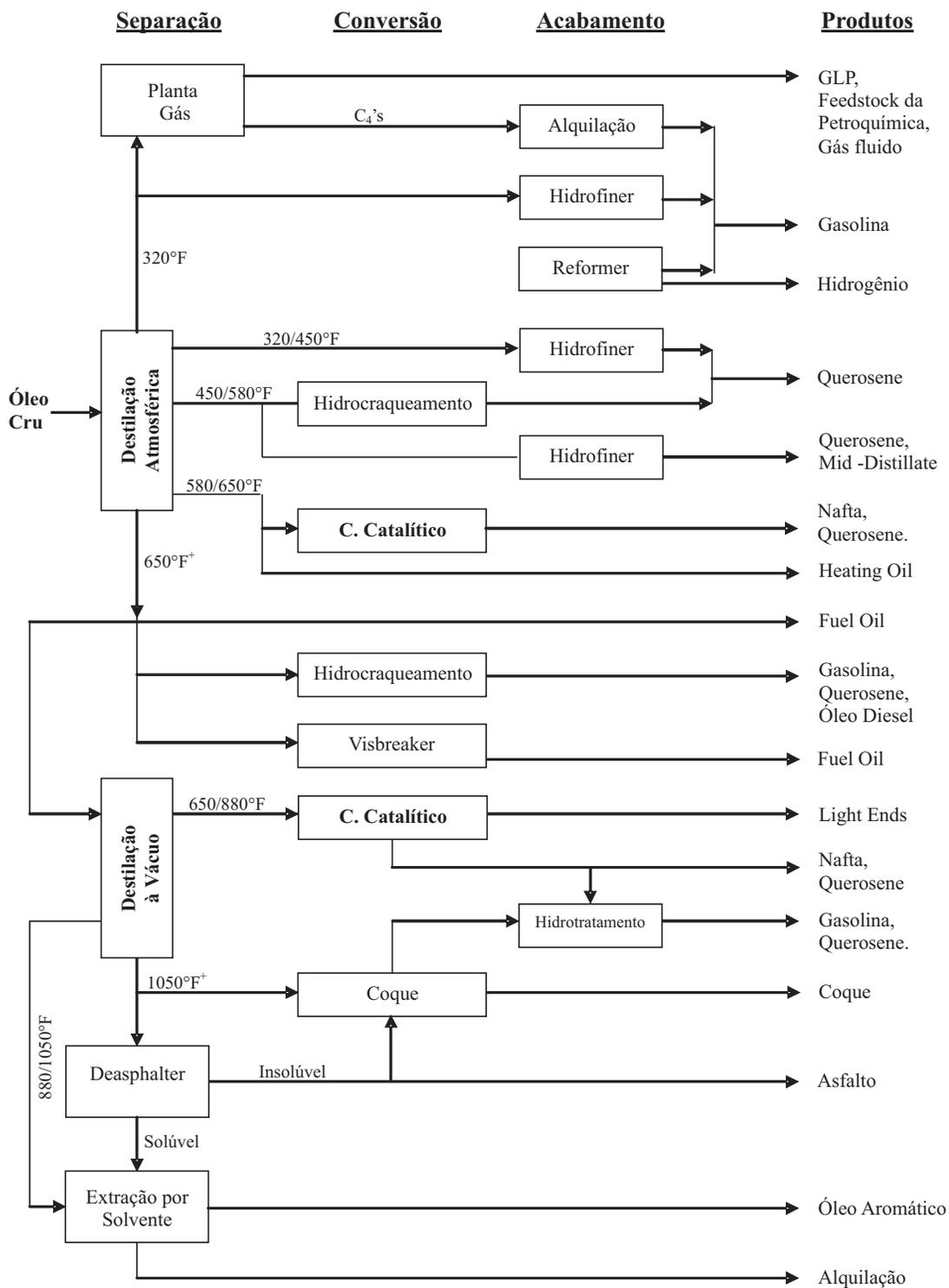


Figura 2: Esquema de um processo de refino do petróleo.

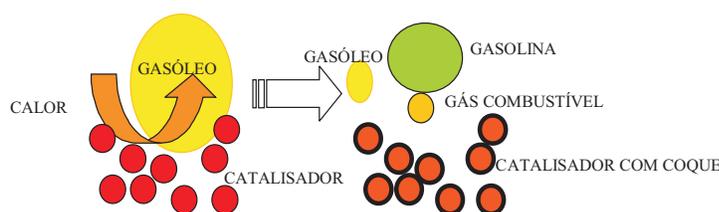


Figura 3: Ilustração simplificada do processo de craqueamento (ERTHAL, 2003).

3.3 Craqueamento Catalítico

O FCC é um processo utilizado para a conversão de hidrocarbonetos com peso molecular mais elevado, tais como gás-óleo (proveniente da unidade de destilação a vácuo) e resíduos do processo de refino do petróleo, em produtos mais leves e de maior valor comercial, através do contato com um catalisador pulverizado em condições apropriadas de processo (Figura 3).

O FCC é hoje um processo largamente difundido em todo o mundo, devido principalmente a dois fatores: grande flexibilidade, no sentido de ajustar sua produção às reais necessidades do mercado consumidor e o segundo fator está ligado ao aspecto econômico das frações residuais, frações de baixo valor comercial são convertidas em derivados nobres de alto valor, tais como a gasolina e o GLP.

O processo de craqueamento catalítico ocorre em equipamentos chamados de conversores. O conversor recebe gás-óleo e resíduos previamente aquecidos provenientes da destilação a vácuo e carga que foi proveniente do fundo da torre de destilação atmosférica. Essas frações, após penetrar na unidade, são aquecidas, em torno de 250 °C e juntamente com vapor d'água, são encaminhadas para base do *riser*. Neste ponto é colocado em contato com uma grande quantidade de catalisador particulado em alta temperatura (em torno de 700 °C), o que provoca a instantânea vaporização do óleo, fluidizando o catalisador.

Um conversor é composto basicamente de um tubo vertical (*riser*), um vaso separador/*stripper* e um regenerador (Figura 4).

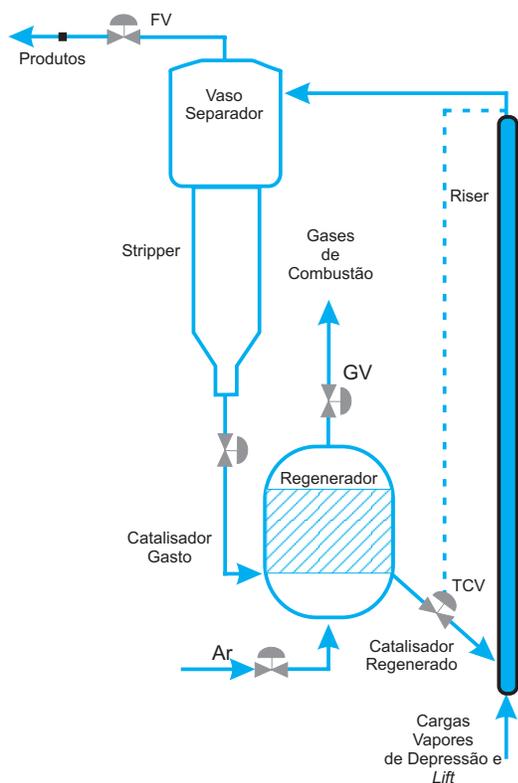


Figura 4: Esquema simplificado de conversor FCC (ERTHAL, 2003).

O *riser* é uma tubulação de grande comprimento e pequeno diâmetro, por onde sobem a mistura de catalisador e vapores de hidrocarbonetos. As moléculas vaporizadas penetram nos poros do catalisador, onde ocorrem efetivamente as reações de craqueamento enquanto, progressivamente, o coque vai se depositando na superfície dos sólidos. O coque é um resíduo do craqueamento catalítico e consiste primordialmente de cadeias carbônicas não craqueadas, metais pesados e compostos aromáticos com características próximas a do grafite e é o responsável pela desativação do catalisador. A velocidade de escoamento ao longo do *riser* é bastante elevada, fazendo com que o tempo efetivo da reação seja muito pequeno (1 a 4 segundos), suficiente, entretanto, para que todas as reações desejadas ocorram, formando os produtos. Caso as reações não sejam interrompidas, os produtos na saída do *riser* serão apenas carbono, metano e hidrogênio, indesejáveis para

comercialização.

Os catalisadores são constituídos basicamente por um componente ativo (zeólita), por uma matriz e por ingredientes funcionais. A matriz pode ser inerte (caolim), ativa (alumina) ou sintética (sílica). Em essência, o uso de um catalisador permite uma rota alternativa para a reação de craqueamento, abaixando a energia de ativação necessária para a reação.

O vaso separador/*stripper* é um equipamento localizado lateralmente ao conversor, conectado ao reator, o qual recebe uma mistura de gás-catalisador, em torno de 530°C. É destinado a propiciar um espaço físico para que ocorra a separação inercial entre as partículas do catalisador e os gases provenientes do craqueamento. Esta separação é feita pela diminuição súbita da velocidade dos vapores em ascensão e pelo aumento do diâmetro do equipamento. As partículas finas de catalisador que sobem junto à corrente gasosa (vapores de hidrocarbonetos craqueados, vapor d'água e gases inertes), são retirados por equipamentos fixos denominados ciclones e devolvidas ao leito do catalisador. Os ciclones são dispositivos montados no interior do vaso separador, que utilizam a força centrífuga e da gravidade para separar o catalisador dos gases (mais leves). O catalisador tem sua trajetória retilínea convertida num movimento de rotação, quando em contato com a superfície interna do ciclone e, devido a gravidade, tem sua velocidade diminuída, provocando sua queda no leito do vaso separador. Em seguida, o catalisador dirige-se por gravidade ao *stripper*, onde sofre um processo de agitação por mudança de direção do escoamento, combinado com a sua lavagem por injeção de vapor d'água. Isto provoca a remoção da maior parte dos hidrocarbonetos remanescentes no corpo do catalisador, arrastados pela corrente ascendente de vapor d'água. Embora as reações de craqueamento ocorram no *riser*, por uma razão histórica se denomina “reator” o conjunto destes dois equipamentos: vaso separador e *stripper*. O efluente gasoso, após passar por essa câmara, segue através de uma linha de transferência para a secção de fracionamento onde, por meio de uma torre de destilação, há uma separação preliminar dos produtos (ABADIE, 1997).

O catalisador gasto (impregnado de coque) chega então ao regenerador que tem a função de queimar os depósitos carbonosos alojados na superfície do catalisador, transformando-os em gases de combustão, enquanto, devido a essa eliminação, reativa-se as partículas de catalisador. Essa combustão ocorre devido à alta temperatura de chegada do catalisador ao regenerador (490°C a 550°C), à presença do coque depositado e à grande vazão de ar injetada pela parte inferior do regenerador.

A queima do coque causa não só a regeneração do catalisador, mas também uma intensa liberação de calor, elevando a temperatura do catalisador regenerado para cerca de 650°C a 740°C. Essa grande liberação de energia provinda da combustão do coque é a maior fonte de calor para o processo, uma vez que, devido à contínua remoção de catalisador regenerado levado à base do *riser*, a energia carregada por ele é suficiente para não só aquecer e vaporizar a carga, como também suprir todas as necessidades térmicas das reações de craqueamento, permitindo que no vaso de separação, a temperatura de saída do catalisador possa atingir ainda 490°C a 550°C.

A passagem de ar através da massa de catalisador no interior do regenerador causa a formação de bolhas, produzindo um efeito semelhante à de um líquido em ebulição. O íntimo contato entre o ar, progressivamente transformado em gases de combustão, e os sólidos, permite a formação de um leito fluidizado, ou seja, o conjunto gases-partículas tende a se comportar como se fosse um líquido. Essa região onde predomina a massa de sólidos é conhecida como fase densa. Acima do leito há uma outra região onde predominam agora os gases de combustão, existindo porém uma grande quantidade de partículas arrastadas, conhecida como fase diluída. Esses finos de catalisador arrastados são quase totalmente recuperados pelo conjunto de ciclones do regenerador, normalmente de duplo estágio (dois ciclones em série) (ABADIE, 1997).

Na caldeira, os gases recebem uma quantidade extra de ar e por meio de um conjunto auxiliar de queimadores, o CO é convertido quase que totalmente em CO_2 . Parte da energia produzida na queima é aproveitada na produção de vapor d'água, utilizado no

acionamento de sopradores e compressores de gás e o restante é empregado em outras unidades da refinaria. A caldeira de CO é de grande importância, tanto pela sua grande produção de energia, quanto na eliminação de gases CO, contribuindo assim como agente antipoluidor. Depois da passagem pela caldeira, os gases são lançados na atmosfera por uma chaminé de grande altura.

O catalisador, com baixo teor de coque e portanto, com sua atividade recuperada, é devolvido ao *riser* por uma linha de transporte chamada *stand-pipe* passando através de uma válvula de controle de temperatura, TCV. Sua vazão controla a temperatura do catalisador no topo do *riser* e é função da abertura e do diferencial de pressão entre o regenerador e o *riser*. Chegando ao *riser*, o catalisador finalmente é misturado novamente à carga de alimentação, completando assim o ciclo (ABADIE, 1997).

3.4 Redes Neurais Artificiais

Redes neurais artificiais (RNA) são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura de organismos inteligentes e que adquirem conhecimento através da experiência.

O trabalho em redes neurais artificiais, usualmente denominadas “redes neurais”, tem sido motivado desde o começo pelo reconhecimento de que o cérebro humano processa informações de uma forma geral inteiramente diferente do computador digital convencional. O cérebro é um computador (sistema de processamento de informações), altamente complexo, não-linear e paralelo. Ele tem a capacidade de organizar seus constituintes estruturais, conhecidos por neurônios, de forma a realizar certos processamentos muito mais rapidamente que o mais rápido computador digital hoje existente.

Um neurônio em “desenvolvimento” é sinônimo de um cérebro “plástico”, a plasticidade permite que o sistema nervoso em desenvolvimento se adapte ao seu meio ambiente. Assim como a plasticidade parece ser essencial para o funcionamento dos neurônios como unidades de processamento de informação do cérebro humano, também ela o é com relação às redes neurais construídas com neurônios artificiais. Na sua forma geral, uma rede neural é uma máquina que é projetada para modelar a maneira como o cérebro realiza uma tarefa particular ou função de interesse, a rede é normalmente implementada utilizando-se componentes eletrônicos ou é simulada por programação em um computador digital. Pode-se então definir uma rede neural vista como uma máquina adaptativa.

Uma rede neural é um processador maciçamente paralelamente distribuído constituído de unidades de processamento simples, que têm a propensão natural para armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para o uso. Ela se assemelha ao cérebro em dois aspectos (HAYKIN, 2004):

- i. O conhecimento é adquirido pela rede a partir de seu ambiente através de um processo de aprendizagem.

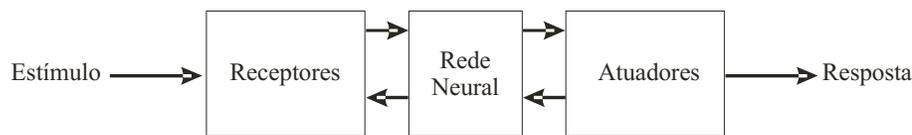


Figura 5: Representação em diagrama de blocos do sistema nervoso.

- ii. Forças de conexão entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

O procedimento utilizado para realizar o processo de aprendizagem é chamado de algoritmo de aprendizagem, cuja função é modificar os pesos sinápticos da rede de uma forma ordenada para alcançar o objetivo de projeto desejado.

O sistema nervoso humano pode ser visto como um sistema de três estágios, como mostrado no diagrama de bloco da Figura 5. O centro do sistema é o cérebro, representado pela rede neural, que recebe continuamente informações, percebe-a e toma decisões apropriadas. Dois conjuntos de setas são mostrados na figura. Aquelas que apontam da esquerda para a direita indicam a transmissão para frente do sinal do portador de informações, através do sistema. As setas apontando da direita para a esquerda indicam a presença de realimentação no sistema. Os receptores convertem estímulos do corpo humano ou do ambiente externo em impulsos elétricos que transmitem informação para a rede neural (cérebro). Os atuadores convertem impulsos elétricos gerados pela rede neural em respostas discerníveis como saídas do sistema.

Um neurônio é uma unidade de processamento de informação que é fundamental para a operação de uma rede neural. Análogo ao sistema biológico, uma rede neural é um sistema de processamento de informação que possui algumas características de desempenho em comum. As Figuras 6 e 7 respectivamente apresentam um modelo simplificado de um neurônio biológico e um modelo básico de um neurônio artificial.

Na Figura 6, o neurônio biológico apresenta alguns setores, são eles:

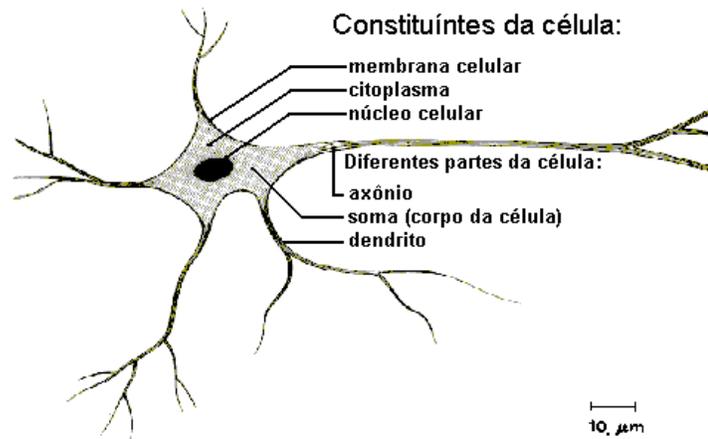


Figura 6: Modelo simplificado de um neurônio biológico.

- Os dendritos que são zonas receptoras de entrada de informações que chegam na forma de pulsos elétricos;
- Uma região onde as informações são processadas, definidas como soma ou junção aditiva e;
- Os axônios que são as linhas de transmissão, onde ocorre a saída e transmissão de informação processada para os dendritos de outros neurônios.

O espaço existente entre o axônio de um neurônio e os dendritos de outros neurônios é chamado de sinapse ou região sináptica.

O diagrama em bloco da Figura 7 mostra o modelo de um neurônio, que forma a base para o projeto de redes neurais artificiais. Aqui é possível identificar três elementos básicos do modelo neuronal.

- Um *conjunto de sinapses* ou elos de conexão, cada uma caracterizada por um peso ou função própria. Especificamente, um sinal x_j na entrada da sinapse j conectada ao neurônio k é multiplicado pelo peso sináptico w_{kj} . É importante notar a maneira

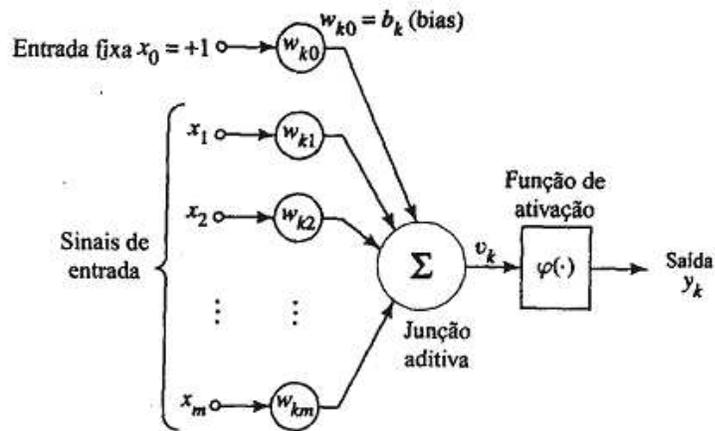


Figura 7: Modelo não-linear de um neurônio.

como são escritos os índices do peso sináptico w_{kj} . O primeiro índice se refere ao neurônio em questão e o segundo se refere ao terminal de entrada da sinapse à qual o peso se refere. Ao contrário de uma sinapse do cérebro, o peso sináptico de um neurônio artificial pode estar em um intervalo que inclui valores negativos bem como positivos.

- ii. Um *somador* para somar os sinais de entrada, ponderados pelas respectivas sinapses do neurônio; as operações descritas aqui constituem um combinador linear.
- iii. Uma *função de ativação* para restringir a amplitude da saída de um neurônio. A função de ativação é também referida como função restritiva já que restringe intervalo permissível de amplitude do sinal de saída de um valor finito. Tipicamente, o intervalo normalizado da amplitude da saída de um neurônio é escrito como intervalo unitário fechado $[0, 1]$ ou alternativamente $[-1, 1]$.

O modelo neuronal da Figura 7 inclui também um bias aplicado externamente, representado por b_k . O bias b_k tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo se ele é positivo ou negativo, respectivamente. Em termos

matemáticos, pode-se descrever um neurônio k escrevendo o seguinte par de equações:

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j \quad (3.1)$$

$$Y_k = \phi(u_k + b_k) \quad (3.2)$$

Onde x_1, x_2, \dots, x_m são os sinais de entrada; W_1, W_2, \dots, W_m , são os pesos sinápticos do neurônio k . u_k é a saída do combinador linear devido aos sinais de entrada; b_k é o bias; $\phi(\Delta)$ é a função de ativação; e Y_k é o sinal de saída do neurônio. O uso do bias b_k tem o efeito de aplicar uma transformação afim à saída u_k do combinador linear no modelo da Figura 7, como mostrado por:

$$v_k = u_k + b_k \quad (3.3)$$

Uma rede neural funciona com vários neurônios, trabalhando como descrito anteriormente, organizados em grupos (ou camadas) seqüenciados. Os dados são alimentados na camada de entrada e a resposta da rede ao seu efeito é observada na saída. Podem existir uma ou mais camadas, denominadas de camadas ocultas, entre a entrada e a saída da rede. O seu número é dado pelas características de cada sistema.

3.4.1 Arquiteturas de redes

A maneira pela qual os neurônios de uma rede neural estão estruturados está intimamente ligada com o algoritmo de aprendizagem usado para treinar a rede. Podemos, portanto, falar de algoritmos (regras) de aprendizagem utilizando projetos de redes neurais como sendo estruturados. Em geral pode-se identificar três classes de arquiteturas de rede fundamentalmente diferentes:

a) Quanto ao número de camadas

a.1) Redes Alimentada Adiante com Camada Única

Em uma rede neural em camadas, os neurônios estão organizados na forma de camadas. Na forma mais simples de uma rede em camadas, tem-se uma camada de entrada de nós de fonte que projeta sobre uma camada de saída de neurônios (nós computacionais) e vice-versa. Em outras palavras, esta rede é estritamente do tipo alimentada adiante ou acíclica. Ela é ilustrada na Figura 8 para o caso de quatro nós tanto de camada de entrada como na de saída.

a.2) Redes Alimentadas Diretamente com Múltiplas Camadas

A segunda classe de uma rede neural alimentada adiante se distingue pela presença de uma ou mais camadas ocultas, cujos nós computacionais são chamados correspondentemente de *neurônios ocultos* ou *unidades ocultas*. A função dos neurônios ocultos é intervir entre a entrada externa e a saída da rede de uma maneira útil. Adicionando-se uma ou mais camadas ocultas, torna-se a rede capaz de extrair estatísticas de ordem elevada. Em um sentido bastante livre, a rede adquire uma perspectiva global apesar de sua conectividade local, devido ao conjunto extra de conexões sinápticas e da dimensão extra de interações neurais (CHURCHLAND; SEJNOWSKI, 1992 apud HAYKIN, 2004). A rede neural da Figura 9 é dita *totalmente conectada*, no sentido de que um dos nós de uma camada da rede está conectado a todos os nós da camada adjacente seguinte. Entretanto, se alguns

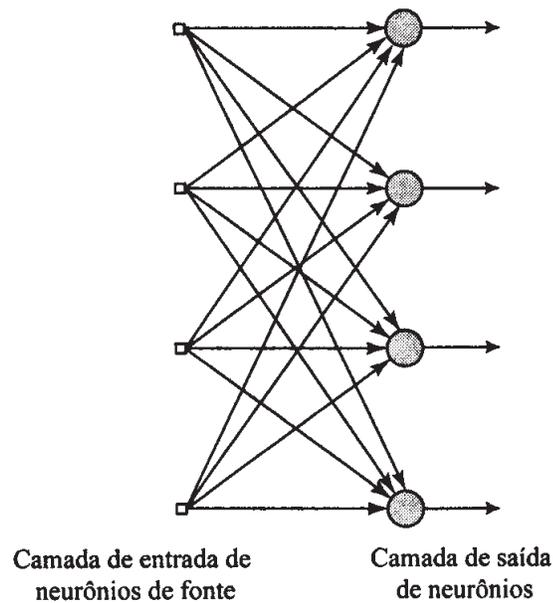


Figura 8: Rede alimentada acíclica com uma única camada de neurônios (HAYKIN, 2004)

elos de comunicação (conexões sinápticas) estiverem faltando na rede, diz-se que a rede é *parcialmente conectada*.

Um perceptron de múltiplas camadas tem três características distintas:

- i. O modelo de cada neurônio da rede inclui uma função ativação não-linear. O ponto importante a se enfatizar aqui é que a não-linearidade é suave (i. e., diferenciável em qualquer ponto). Uma forma normalmente utilizada de não-linearidade que satisfaz essa exigência é uma não-linearidade sigmóide definida pela função logística:

$$Y_i = \frac{1}{1 + e^{(-v_i)}} \quad (3.4)$$

Onde v_i é o campo local induzido (i. e. a soma ponderada de todas as entradas sinápticas acrescidas do bias) do neurônio j , e Y_i é a saída do neurônio.

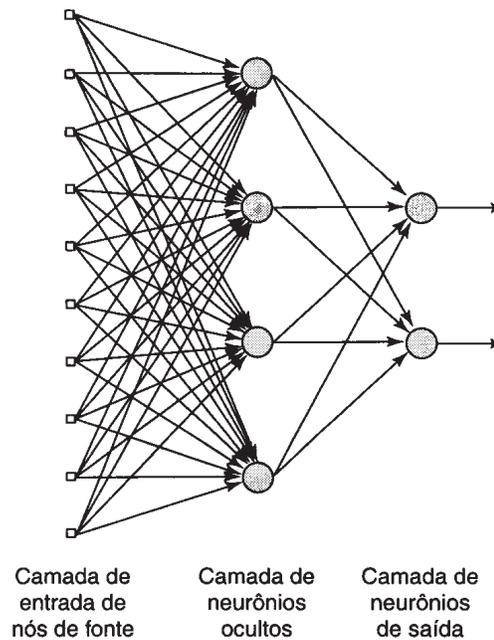


Figura 9: Rede alimentada acíclica totalmente conectada com uma camada oculta e uma camada de saída (HAYKIN, 2004).

- ii. A rede contém uma ou mais camadas de neurônios ocultos, que não são parte da entrada ou da saída da rede. Estes neurônios ocultos capacitam a rede a aprender tarefas completas extraindo progressivamente as características mais significativas dos padrões (vetores) de entrada.
- iii. A rede exibe um alto grau de conectividade, determinado pelas sinapses da rede. Uma modificação na conectividade da rede requer uma mudança na população das conexões sinápticas ou de seus pesos.

As redes neurais podem ser caracterizadas por 3 partes principais: a topologia da rede; a característica computacional de seus elementos e a regra de treinamento (HERNÁNDEZ; ARKUN, 1992 apud VIEIRA, 2002).

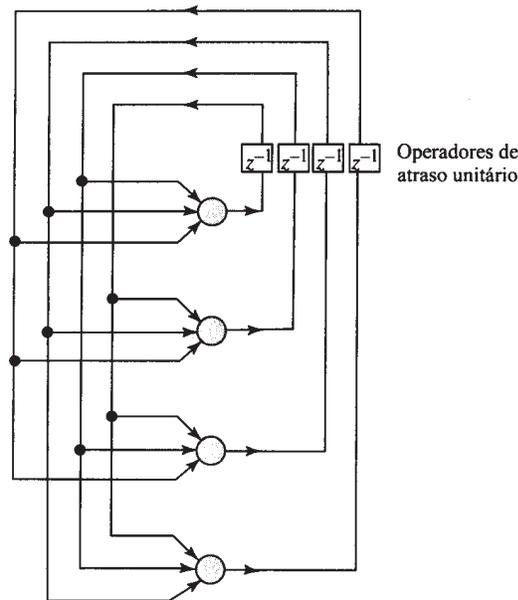


Figura 10: Rede recorrente sem laço de auto-alimentação e sem neurônios ocultos (HAYKIN, 2004).

a.3) Redes Recorrentes

Uma rede neural recorrente se distingue de uma rede neural alimentada adiante por ter pelo menos um laço de realimentação. Uma rede recorrente pode consistir, por exemplo, de uma única camada de neurônios com cada neurônio alimentando seu sinal de saída de volta para a entrada de todos os outros neurônios, como ilustrado na Figura 10. Na estrutura representada nesta figura, não há laços de auto-realimentação na rede; auto-alimentação se refere a uma situação onde a saída de um neurônio é realimentada para a sua própria entrada. A rede recorrente ilustrada na Figura 10 também não tem neurônios ocultos. Na Figura 11, é ilustrada uma outra classe de redes recorrentes com neurônios ocultos. As conexões de realimentação mostradas na Na Figura 11 se originam dos neurônios ocultos bem como dos neurônios de saída.

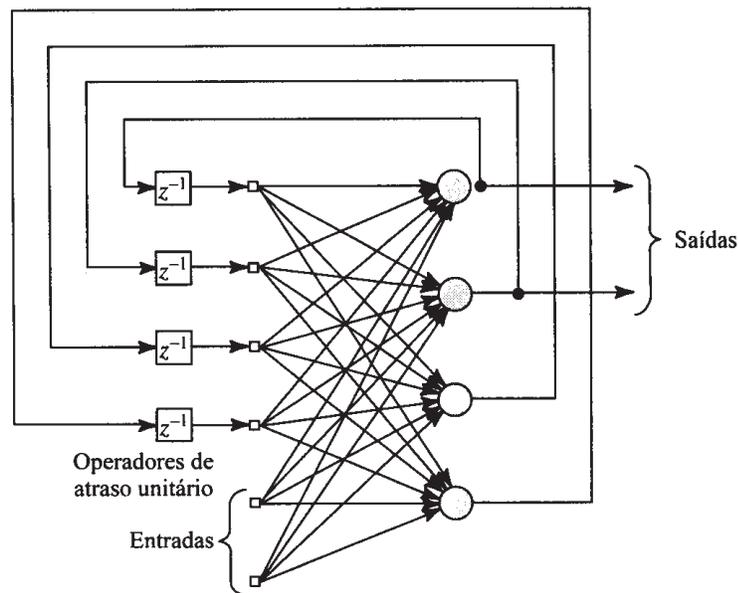


Figura 11: Rede recorrente com neurônios ocultos (HAYKIN, 2004).

b) Quanto aos tipos de conexões entre neurônios, tem-se:

- i. *Feedforward* ou acíclica. A saída do neurônio na i -ésima camada não pode ter entradas que se projetam para a camada de saída;
- ii. *Feedback* ou cíclica. A saída do neurônio na i -ésima camada tem entradas com neurônios em camadas de índice menor ou igual a i .

c) Finalmente, quanto a sua conectividade, tem-se:

- i. Rede fracamente (ou parcialmente) conectada;
- ii. Rede completamente conectada.

3.4.2 Processo de Aprendizagem

A propriedade que é de importância primordial para uma rede neural é a sua habilidade de aprender a partir de seu ambiente e de melhorar o seu desempenho através da aprendizagem. A melhoria do desempenho ocorre com o tempo de acordo com algumas medidas preestabelecidas. Uma rede neural aprende acerca do seu ambiente através de um processo interativo de ajustes aplicados a seus pesos sinápticos e níveis de bias. Idealmente, a rede se torna mais instruída sobre o seu ambiente após cada iteração do processo de aprendizagem. Utiliza-se uma definição de aprendizagem que é adaptada de (HAYKIN, 2004): aprendizagem é um processo pelo qual os parâmetros livres de uma rede neural são adaptados através de um processo de estimulação pelo ambiente no qual a rede está inserida. O tipo de aprendizagem é determinado pela maneira pela qual a modificação dos parâmetros ocorre.

Esta definição do processo de aprendizagem implica a seguinte seqüência de eventos:

- i. A rede neural é estimulada por um ambiente.
- ii. A rede neural sofre modificações nos seus parâmetros livres como resultado desta estimulação.
- iii. A rede neural responde de uma maneira nova ao ambiente, devido às modificações ocorridas na sua estrutura interna.

Um conjunto preestabelecido de regras bem-definidas para a solução de um problema de aprendizagem é denominado um algoritmo de aprendizagem. Como se pode esperar, não há um algoritmo de aprendizagem único para o projeto de redes neurais. Em vez disso, tem-se um conjunto de ferramentas representado por uma variedade de algoritmos de aprendizagem, cada qual oferecendo vantagens específicas. Basicamente, os algoritmos de aprendizagem diferem entre si pela forma como é formulado o ajuste de um peso sináptico do neurônio. Outro fator a ser considerado é a maneira pela qual uma rede neural,

construída de um conjunto de neurônios interligados, se relaciona com seu ambiente, que pode ser supervisionado ou não supervisionado, que será visto a seguir (HAYKIN, 2004).

3.4.3 Modelos de Relacionamento da Rede Neural com o seu Ambiente

O objetivo do processo de aprendizagem é encontrar o valor do ajuste do vetor de pesos w , podendo ser classificado basicamente em três paradigmas distintos: aprendizagem supervisionada (ou aprendizagem com um professor) e aprendizagem não-supervisionada (ou aprendizagem sem um professor) e aprendizagem por reforço.

a) Aprendizagem supervisionada

Ocorre quando o vetor de padrão possui as características e o rótulo da classe a que o objeto pertence. Frequentemente, as saídas são fornecidas por um supervisor humano. Em termos conceituais, pode-se considerar o professor como tendo o conhecimento sobre o ambiente, sendo este conhecimento representado por um conjunto de entrada-saída. Entretanto, o ambiente é desconhecido pela rede neural de interesse. Suponha agora que o professor e a rede neural sejam expostos a um vetor de treinamento retirado do ambiente. Em virtude de seu conhecimento prévio, o professor é capaz de fornecer à rede neural uma resposta desejada para aquele vetor de treinamento. Na verdade, a resposta desejada representa a ação ótima a ser realizada pela rede neural. Os parâmetros da rede são ajustados sob a influência combinada do vetor de treinamento e do sinal de erro. O conhecimento do ambiente disponível ao professor é transferido para a rede neural através de treinamento, da forma mais completa possível. Quando esta condição é alcançada, podemos então dispensar o professor e deixar a rede neural lidar com ambiente inteiramente por si mesma.

b) Aprendizado não-supervisionado

Diferente do anterior, não existe a necessidade de um professor para supervisionar

o processo. Isso implica que não há exemplos rotulados da função a serem aprendidos pela rede. Em vez disso, são dadas condições para realizar uma medida independente da tarefa da qualidade da representação que a rede deve aprender e os parâmetros livres da rede que são otimizados em relação a esta medida. Uma vez que a rede tenha se ajustado às regularidades estatísticas dos dados de entrada, ela desenvolve a habilidade de formar representações internas para codificar as características da entrada e, desse modo, de criar automaticamente novas classes.

c) **Aprendizado por reforço**

É um modelo intermediário entre as duas anteriores. O conjunto de dados não contém a resposta desejada. Em vez disso, a rede retorna um sinal de reforço ou penalidade conforme a melhora ou não do desempenho da rede, sendo que o objetivo é maximizar o reforço e conseqüentemente, a melhora do desempenho.

3.4.4 **Função de Ativação**

A função de ativação define a saída (em geral não-linear) de um neurônio, após o processamento da informação recebida pelo neurônio. A seguir serão descritos os tipos de função de ativação (representada por $\varphi(v)$) mais usados:

1. Função de Ativação Limiar

Pode ser expressa pela seguinte função:

$$\varphi(v) = \begin{cases} 1 & \text{se } v \geq 0 \\ 0 & \text{se } v < 0 \end{cases} \quad (3.5)$$

Na literatura, esta forma de função é conhecida como função de Heaviside. Correspondentemente à saída do neurônio k que emprega esta função de limiar é expressa como:

$$Y_k = \begin{cases} 1 & \text{se } v_k \geq 0 \\ 0 & \text{se } v_k < 0 \end{cases} \quad (3.6)$$

Onde v_k é o campo local induzido do neurônio, isto é:

$$v_k = \sum_{j=1}^m W_{kj} X_j + b_k \quad (3.7)$$

2. Função Linear por partes

Para a função linear por partes temos:

$$Y_k = \begin{cases} 1, & \text{se } v_k \geq +1/2 \\ v, & \text{se } +1/2 > v_k > -1/2 \\ 0, & \text{se } v_k \leq -1/2 \end{cases} \quad (3.8)$$

Onde assume-se que o fator de amplificação da região linear de operação é a unidade. Esta forma de função de ativação pode ser vista como uma aproximação de um amplificador não-linear.

3. Função Sigmóide

É de longe a forma mais comum de função ativação utilizada na construção de redes neurais. Ela é definida como uma função estritamente crescente que exibe um balanceamento adequado entre comportamento linear e não-linear.

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + e^{(-av)}} \quad (3.9)$$

Enquanto que a função de limiar assume o valor de 0 ou 1, uma função sigmóide assume um intervalo contínuo de valores entre 0 e 1. Nota-se também que a função sigmóide

é diferenciável, enquanto que a função de limiar não o é.

4. Função Tangencial Hiperbólica

$$\varphi(v) = \text{Tanh}(v) \quad (3.10)$$

Esta função pode assumir valores negativos, ou no limite do intervalo entre -1 e 1.

3.4.5 Rede Multicamada *Feedforward* do Tipo Perceptron Multicamadas

As redes neurais *feedforward* são provavelmente o tipo de modelo neural mais utilizado nas tarefas de identificação e controle de sistemas dinâmicos não-lineares. Uma das razões para este sucesso está relacionada ao fato destas estruturas serem capazes de modelar adequadamente tanto relações funcionais simples quanto complexas. Esta habilidade tem sido verificada através de um número significativo de aplicações teóricas (simulações) e práticas (MELEIRO, 2002).

As redes neurais mais utilizadas são do tipo perceptron multicamadas com estrutura *feedforward*. Segundo (HAYKIN, 2004), um perceptron é a forma mais simples de uma rede neural usada para a classificação de padrões ditos linearmente separáveis. Basicamente, ele consiste de um único neurônio com pesos sinápticos ajustáveis e bias.

Nas redes tipo perceptron multicamadas com estrutura *feedforward* todos os neurônios de uma camada se conectam com todos os neurônios da camada seguinte, não havendo conexão com neurônios da mesma camada ou camadas anteriores. Tais modelos apresentam a importante característica de serem aproximadores universais. A saída de um neurônio com m entradas é dado por:

$$X = f \left(\sum_{j=1}^m W_j X_j + b \right) \quad (3.11)$$

onde os bias b e os pesos W_j são constantes (ajustados durante o treinamento e mantidos fixos durante a operação) e f é uma função de ativação não-linear. Há vários tipos de função ativação, porém a utilizada com mais frequência é do tipo sigmóide:

$$f(X) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3.12)$$

Neste tipo de redes, a saída de um neurônio Equação 3.11 é conectada à entrada de outro neurônio, assim, uma rede neural com uma única saída e apenas uma camada oculta é descrita por uma função não-linear nos parâmetros dada por:

$$Y(K) = f_S \left\{ \sum_{i=1}^r W_i f_i \left(\sum_{j=1}^m W_{ij} x_j + b_i \right) + b_S \right\} \quad (3.13)$$

onde f_S é a função de ativação e b_S é o termo de polarização do neurônio da camada de saída; W_j são os pesos da saída de cada neurônio da camada oculta e W_{ij} são os pesos de conexão da entrada j ao i -ésimo neurônio da camada oculta.

Como consequência da saída da rede neural ser descrita por uma função não-linear, seus parâmetros devem ser determinados por algoritmos específicos para estimação não-linear. Existem muitos tipos de algoritmos específicos para a estimação de parâmetros de redes neurais, dentre os quais se destaca o método do gradiente como o algoritmo utilizado com maior frequência (embora não seja o mais eficiente).

O treinamento supervisionado de redes neurais artificiais com várias camadas envolve uma etapa crucial - a determinação dos pesos das conexões sinápticas - que pode ser vista como um problema de otimização não-linear irrestrita, onde uma função do erro global é minimizada através do ajuste dos parâmetros (pesos) da rede neural. Castro (apud ME-

LEIRO, 2002), implementou, incluindo refinamentos às propostas já existentes, alguns dos mais citados algoritmos de otimização específicos para o treinamento supervisionado de redes neurais, dando ênfase aos métodos que recorrem à informação de 2ª ordem, pois tais métodos são atualmente considerados os mais eficientes para o treinamento supervisionado de redes neurais do tipo MLP, um exemplo é o método do gradiente conjugado, que utiliza um procedimento de busca unidimensional para a determinação da taxa de aprendizagem (MELEIRO, 2002).

Assim como os demais modelos não-lineares, as redes neurais artificiais também apresentam o problema relacionado com a determinação da estrutura dos modelos, ou seja, deve-se determinar a priori os regressores que serão utilizados na estrutura (ou topologia) da rede neural. Este problema envolve também a escolha do número de neurônios da(s) camada(s) oculta(s), o número de camadas e o tipo de função ativação.

3.4.6 Algoritmo de Retropropagação (*Backpropagation*)

O emprego do termo “retropropagação” (*backpropagation*) parece ter sido desenvolvido após 1985, quando seu uso foi popularizado pela publicação do livro seminal, intitulado *Parallel Distributed Processing* (RUMELHART *et al.*, 1986.a apud HAYKIN, 2004).

O desenvolvimento de algoritmos de retropropagação representa um marco nas redes neurais, pois fornece um método computacional eficiente para o treinamento de preceptrons de múltiplas camadas. Os preceptrons de múltiplas camadas têm sido aplicados com sucesso para resolver diversos problemas difíceis, através do seu treinamento de forma supervisionada com um algoritmo muito popular conhecido como algoritmo de retropropagação de erro (*error backpropagation*). Este algoritmo é baseado na regra de aprendizagem por correção de erro, é também referido na literatura como algoritmo de retropropagação (*backpropagation*).

Basicamente, a aprendizagem por retropropagação de erro consiste de dois passos

através das diferentes camadas da rede: um passo para frente, a propagação, e um passo para trás, a retropropagação. No passo para frente, um padrão de atividade (vetor de entrada) é aplicado aos nós sensoriais da rede e seu efeito se propaga através da rede, camada por camada. Finalmente, um conjunto de saídas é produzido como a resposta real da rede. Durante o passo de propagação, os pesos sinápticos da rede são todos fixos. Durante o passo para trás, por outro lado, os pesos sinápticos são todos ajustados de acordo com uma regra de correção de erro. Especificamente, a resposta real da rede é subtraída de uma resposta desejada (alvo) para produzir um sinal de erro. Este sinal de erro é então propagado para trás através da rede, contra a direção das conexões sinápticas - vindo daí o nome de “retropropagação de erro” (error *backpropagation*). Os pesos sinápticos são ajustados para fazer com que a resposta real da rede se mova para mais perto da resposta desejada, em um sentido estatístico (HAYKIN, 2004).

Existem métodos que melhoram significativamente o desempenho do algoritmo de retropropagação, alguns encontram-se descritos no Apêndice A:

Algoritmos de otimização para treinamento supervisionado

Existem três métodos para otimização não-linear irrestrita para treinamento de redes multicamadas: Levenberg-Marquardt (LM), Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS) e Gradiente conjugado escalonado (SCG). O treinamento de redes neurais com várias camadas pode ser entendido como um caso especial de aproximação de funções, onde não é levado em consideração nenhum modelo explícito dos dados (PIMENTEL, 2005).

Para estruturação da rede neural que foi utilizada neste trabalho, optou-se pelo método de Levenberg-Marquardt, o qual se encontra descrito no Apêndice B.

3.4.7 Estimação de Modelos Neurais

A estimação de modelos é conhecida como o processo de seleção de um modelo a partir de uma estrutura previamente determinada. Ao se tratar de redes neurais, no entanto,

é tratado como treinamento ou aprendizado (NORGAARD *et al.*, 2000 apud MELEIRO, 2002).

A partir da escolha de um conjunto de modelos candidatos, escolhe-se um modelo particular deste conjunto. Esta escolha é feita, normalmente, baseada em algum critério de desempenho, que deve estar relacionado com a futura aplicação do modelo. A estratégia mais freqüente é escolher o modelo que exibe o melhor desempenho em predições um passo adiante em termos de menor erro quadrático médio entre as saídas observadas e as predições do modelo. Todavia, este critério pode não ser adequado para aplicações em estratégias de controle avançado, onde o desempenho desejado é não apenas a melhor predição um passo adiante, mas também predições com a maior precisão possível em um horizonte relativamente grande (predições k passos adiante). A necessidade de modelos que forneçam bons resultados em simulações recursivas está intimamente relacionada com a filosofia dos controladores preditivos (MELEIRO, 2002).

As abordagens mais utilizadas para o treinamento de redes é a modelagem direta e inversa. Estas modelagens encontram-se descritas no Apêndice C.

3.5 Controle Preditivo

O Controle preditivo foi originado nos anos setenta e teve considerável desenvolvimento desde então. O termo Modelo de Controle Preditivo não designa uma estratégia de controle específica, mas uma ampla extensão de métodos de controle que fazem explícito uso de um modelo de processo para obter o sinal de minimização em funções objetivo. Segundo Henson e Serlorg (apud MELEIRO, 2002), o controle de sistemas não-lineares vem recebendo grande atenção, tanto da indústria como da academia. Este interesse pelo projeto de controladores não-lineares deve-se a vários fatores e, segundo estes autores, o principal é o desempenho inadequado apresentado pelos controladores lineares quando utilizados em sistemas fortemente não-lineares ou mesmo a sistemas moderadamente não-lineares que operam em uma faixa ampla de condições. Por outro lado, tem havido um progresso significativo no desenvolvimento de novas estratégias de identificação e de projeto de controladores baseados em modelo para sistemas não-lineares. Estas técnicas empregam o modelo não-linear diretamente no algoritmo de cálculo do controlador, sem que seja necessário realizar uma linearização local em torno do ponto operacional.

O desenvolvimento de estratégias de identificação e controle voltadas para sistemas não-lineares também tem sido motivada pelas seguintes razões (HENSON; SERLORG, 1997 apud MELEIRO, 2002):

- Avanços na teoria de sistemas não-lineares que possibilitam o projeto de controladores aplicáveis a uma grande classe de problemas de controle não-lineares.
- O desenvolvimento de métodos de identificação eficientes para modelos não-lineares empíricos.
- A contínua melhoria na capacidade dos *softwares* e *hardwares* voltados para controle através de computador, tornando possível incorporar modelos não-lineares complexos nos sistemas de controle dos processos.

O sucesso dos controladores preditivos baseados em modelos lineares motivou a extensão desta metodologia para os problemas de controle não-lineares. A formulação do problema de controle é análoga à abordagem linear, exceto que a predição do comportamento futuro do processo é feita por um modelo dinâmico não-linear. As ações de controle são calculadas através da solução de um problema de programação não-linear em cada instante de amostragem. Esta abordagem é genericamente chamada de *Controle Preditivo Baseado em Modelo Não-linear* - NMPC - ou simplesmente *Controle Preditivo Não-linear*.

3.5.1 MPCs Baseados em Modelos Não-lineares

O uso de modelos não-lineares na estratégia de controle preditivo tem atraído um grande número de pesquisadores nos últimos anos (RAWLINGS, 2000 apud MELEIRO, 2002). O principal obstáculo na abordagem NMPC é a necessidade de resolver um problema de otimização dinâmica não-linear em cada instante de amostragem.

Existem basicamente três diferentes classes de NMPC's, que podem ser agrupadas como segue:

- i. Extensões não-lineares do Controle por Matriz Dinâmica - DMC e do Controle Quadrático por Matriz Dinâmica - QDMC - A matriz dinâmica utilizada pelo algoritmo DMC pode ser calculada através da linearização do modelo não-linear em torno do estado estacionário ou através da aplicação de um degrau no próprio modelo não-linear. Este algoritmo apresenta como vantagem a facilidade de adaptação para a versão NLQDMC - Controle Quadrático Não Linear por Matriz Dinâmica (onde as ações de controle podem ser calculadas como solução de um problema quadrático a cada instante de amostragem).
- ii. Algoritmos NMPC com Critérios de Otimização Baseados no Método de Newton - As abordagens mais representativas desta classe de algoritmos foram propostas por

Biegler e colaboradores (LI; BIEGLER; OLIVEIRA; BIEGLER, 1989, 1995 apud MELEIRO, 2002), cuja idéia principal é linearizar o modelo não-linear, na representação de espaço de estados, em torno de uma trajetória de referência determinada pela seqüência de entradas calculada no instante de amostragem anterior. Obtêm-se modelos de resposta ao impulso ou degrau, a partir do modelo no espaço de estados linearizado e variante no tempo. Uma nova seqüência de entradas é calculada sobre o horizonte de predição através da solução de um novo problema quadrático (resolvido em cada instante de amostragem), seguido de uma busca unidimensional onde o critério de otimização quadrática é calculado baseado no modelo não-linear.

- iii. Algoritmos NMPC com Critérios de Otimização Baseados em Técnicas de Programação Não-Linear - Esta abordagem combina técnicas de programação não-linear com modelos não-lineares, geralmente descritos na forma de espaço de estados, para a resolução do problema de otimização. As principais diferenças são o modo como as equações do modelo são resolvidas e o método de otimização utilizado.

A experiência acumulada no projeto de controladores preditivos baseados em modelos lineares do tipo entrada-saída, sugere que a versão não-linear destes modelos é um forte candidato para o desenvolvimento de NMPCs. Os tipos de modelos entrada-saída não-lineares estudados com mais freqüência para aplicação em estratégias de controle preditivo não-linear são:

- Redes neurais artificiais;
- Modelos nebulosos;
- Modelos de Volterra;
- Modelos polinomiais do tipo NARX.

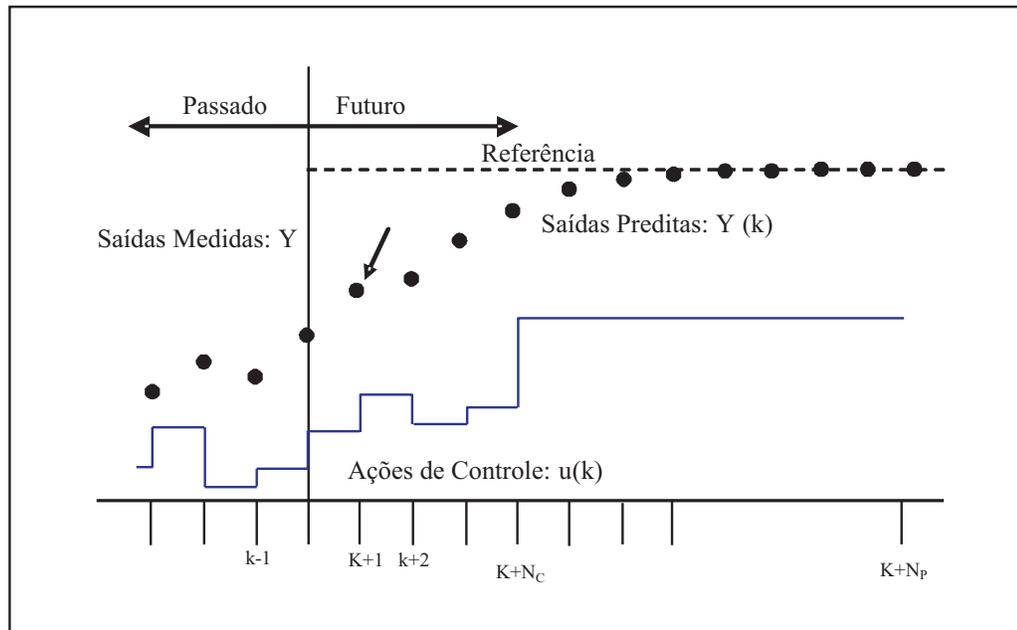


Figura 12: Representação esquemática dos elementos básicos do controle preditivo

3.5.2 Formulação Geral do Controlador Preditivo Não-Linear

A Figura 12 ilustra o princípio geral do controle preditivo. No instante de amostragem k , o algoritmo de controle recebe informações sobre o estado atual do sistema e, baseado nesta informação e no modelo do processo, calcula as ações de controle futuras para que a saída do processo siga as referências. A trajetória de entradas futuras é calculada otimizando algum critério e, no algoritmo preditivo, somente a primeira ação de controle é implementada até a próxima amostragem, quando todo o processo é repetido baseado nas novas informações medidas (MELEIRO, 2002).

Considere um processo multivariável com V_C variáveis controladas e V_m variáveis manipuladas. O objetivo de um controlador do tipo NMPC é calcular um conjunto de ações de controle futuras de forma a minimizar a seguinte função objetivo.

$$J = \sum_{j=1}^{V_V} (\hat{Y}_{j,k+1}^C)^2 + \sum_{j=1}^{V_m} \lambda_j \sum_{i=1}^{N_C} (\Delta_{j,k+1} - 1)^2 \quad (3.14)$$

onde λ é o vetor com os fatores de ponderação (parâmetros de ajuste que penalizam as ações de controle), Δu é o vetor contendo os incrementos nas variáveis manipuladas, N_1 é o horizonte inicial, N_P é o horizonte de predição, N_C é o horizonte de controle, w é o vetor com as trajetórias de referência (*setpoints*) para cada variável de saída e \hat{Y} é o vetor contendo as previsões corrigidas dos modelos não-lineares. Estas previsões são obtidas recursivamente até um total de N_y previsões futuras para cada variável controlada, V_C e corrigidas da seguinte forma:

$$\hat{Y}_{k+i}^C = \hat{Y}_{k+i} + d_k, (i = 1, \dots, N_P) \quad (3.15)$$

Na Equação 3.15, \hat{Y}_{k+i} são as previsões realizadas utilizando o modelo não-linear para as saídas controladas do processo no instante de amostragem futuro, $k + 1$ e d_k são os termos de correção dados por:

$$d_k = Y_k - \hat{Y}_K \quad (3.16)$$

onde Y_k são as saídas medidas do processo no instante de amostragem presente e \hat{Y}_K são as respectivas previsões do modelo, calculadas no instante de amostragem anterior.

O algoritmo de otimização calcula os incrementos, Θu , para as variáveis manipuladas minimizando a função objetivo, Equação 3.14. As ações de controle futuras são então derivadas a partir dos incrementos ótimos de controle:

$$u_{k+i} = u_{k+i+1} + \Delta u_{k+1}, (i = 0, \dots, N_C - 1) \quad (3.17)$$

É importante observar que somente as primeiras N_C ações de controle são otimizadas,

enquanto que as demais são mantidas constantes, ou seja:

$$u_{k+i} = u_k + N_u - 1, (i = 0N_C, \dots, N_P - 1) \quad (3.18)$$

O problema de otimização também está sujeito às seguintes restrições:

$$Y_{\min} \leq \hat{Y}_{k+i} \leq Y_{\max}, (i = 1, \dots, N_P) \quad (3.19)$$

$$u_{\min} \leq u_{k+i-1} \leq u_{\max}, (i = 1, \dots, N_C) \quad (3.20)$$

$$|u_{k+i-1} - u_{k+i-2}| \leq \Delta u_{\max}, (i = 1, \dots, N_C) \quad (3.21)$$

Finalmente, aplica-se a estratégia do “Horizonte Móvel” (*Receding Horizon*) (SOETERBOEK; CAMACHO; BORDONS; GARCIA; MORARI, 1992, 1999, 1998 apud MELEIRO, 2002), onde somente a primeira ação de controle (para cada variável manipulada), u_k , é implementada e o problema de otimização é resolvido novamente em cada instante de amostragem.

3.6 Conclusão

Este capítulo teve como objetivos a descrição sucinta do processo de refino do petróleo, a descrição teórica de um dos mais importantes processos de conversão de cargas pesadas na refinaria, o processo de craqueamento catalítico, o estudo sobre as redes neurais artificiais, seus princípios, tipos e uma discussão sobre o seu algoritmo de treinamento. Foi também apresentada uma formulação geral de controle preditivo aplicada aos processos não-lineares. A base teórica formulada neste capítulo contribuiu para elaboração das

demais etapas deste trabalho.

4 *Descrição do Processo de Craqueamento Catalítico*

4.1 **Introdução**

Este capítulo tem como objetivo apresentar uma descrição do processo de craqueamento catalítico. São detalhados os equipamentos básicos do conversor e suas respectivas variáveis de processo, sendo diferenciadas entre elas as variáveis utilizadas como manipuladas e controladas. Como também é apresentado um esquema das malhas de controle do processo.

4.2 **O Processo**

A corrente de alimentação é introduzida no conversor FCC (*riser*), onde ocorre a reação de craqueamento catalítico, que demanda temperaturas na faixa de 500 a 550°C. Os produtos formados contendo as frações mais leves de hidrocarbonetos são levados para a etapa de recuperação, constituída de colunas de destilação ou “fracionadoras” e absorvedoras.

Durante o processo, o coque formado pelas reações secundárias de polimerização deposita-se sobre as partículas de catalisador, reduzindo drasticamente a sua atividade e fazendo com que seja necessário um procedimento de regeneração, que é feito através

de combustão. Esse processo constitui-se basicamente de duas seções: a de reação, onde o catalisador é colocado em contato com a carga e a de regeneração, onde o coque é queimado. Na seção de reação ocorre consumo de energia, formação de coque e desativação do catalisador, que passa a ser chamado de catalisador gasto. Na seção de regeneração, onde a temperatura se situa na faixa de 700°C , ocorre a queima do coque com a conseqüente reativação do catalisador e geração de energia, que será utilizada na seção de reação. É extremamente importante a existência de um controle que permita balancear termicamente o sistema, ou seja, que faça com que o calor gerado na combustão seja igual ao necessário para o craqueamento e que as temperaturas sejam mantidas dentro dos limites considerados adequados (MORO, 1992). O catalisador regenerado é enviado continuamente para o *riser* para catalisar novamente a reação. A Figura 13 traz um esquema do conversor FCC, como descrito acima.

O Conversor pode ser dividido em três partes:

1) *Riser*: Local onde ocorre a reação de craqueamento em leito de arraste na presença de catalisador sob condições de controle de temperatura (T_{RX}). O *riser* é assumido como sendo um reator tubular. A vazão de catalisador introduzida no *riser* é controlada pela abertura de uma válvula (C_{TCV}). A vazão (R_{TF}) e a temperatura (T_{RF}) da corrente de alimentação são variáveis também usadas para controlar a operação do conversor. A temperatura do *riser* (T_{RX}) deve ser controlada para permitir a obtenção de uma conversão adequada da reação de craqueamento, a qual pode ser caracterizada pela severidade da reação (*SEVER*).

2) Reator: Local onde os produtos gasosos da reação são separados do catalisador pela ação da gravidade. Os produtos (vapores) provenientes da reação são levados para uma coluna de destilação (fracionadora) principal e separados de acordo com o seu ponto de ebulição, enquanto que o catalisador coqueado (desativado) passa por um *stripper*, onde o vapor d'água é usado para retirar o excesso de hidrocarbonetos do sólido e entra na terceira parte da unidade FCC, o regenerador.

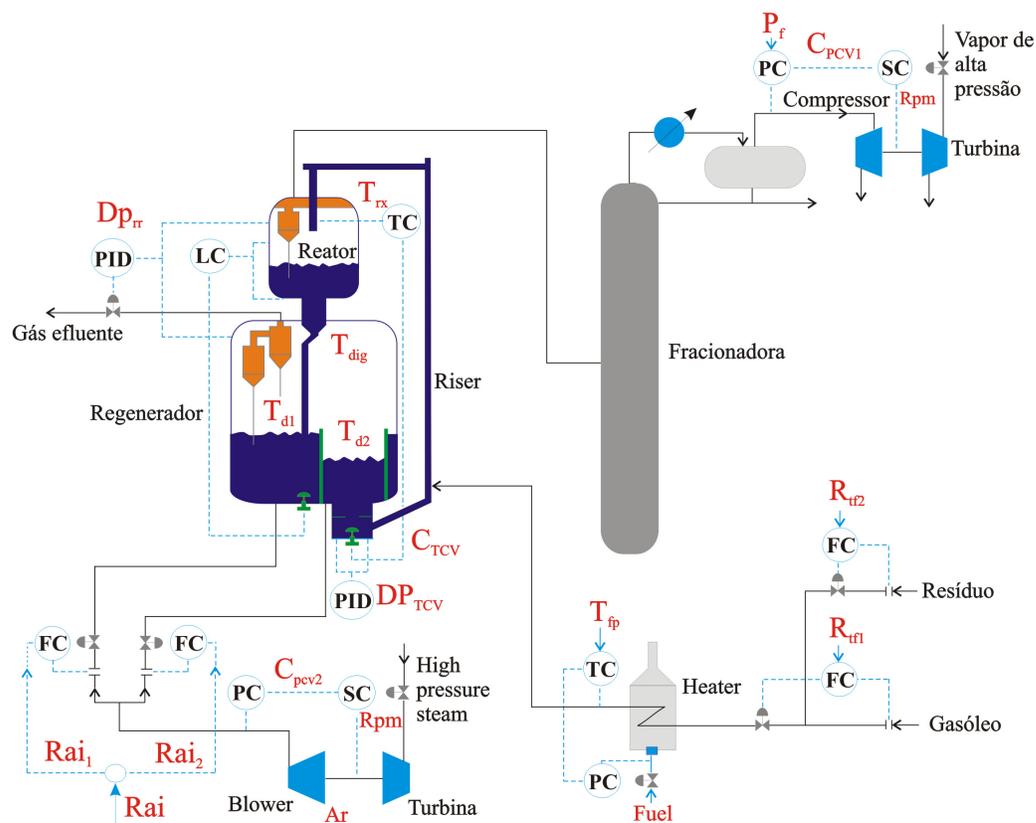


Figura 13: Unidade “FCC” de Craqueamento Catalítico.

3) Regenerador: Local onde ocorre a regeneração do catalisador. O coque (depósito de carbono que fica aderido à superfície do catalisador impedindo que a reação catalítica ocorra) é queimado na presença de ar, cuja vazão (R_{AI}) é manipulada. O regenerador é ainda dividido em cinco partes descritas a seguir. O catalisador que vem do reator é depositado no compartimento, denominado “primeiro estágio da fase densa”, onde sofre a primeira combustão. O catalisador então transborda para o segundo compartimento, denominado “segundo estágio da fase densa”, onde depois de uma segunda queima de coque, o catalisador regenerado retorna ao riser. Acima dos compartimentos de depósito de catalisador, encontram-se os gases de combustão, os quais apresentam características distintas em diferentes partes do regenerador, sendo que três zonas principais podem ser

identificadas:

A primeira zona, denominada “primeiro estágio da fase diluída” localiza-se acima da fase densa do primeiro estágio e é constituída pelos gases de combustão provenientes da queima do coque desta fase. A segunda zona “segundo estágio da fase diluída” similarmente, é formada pelos gases de combustão proveniente da queima do coque da segunda fase densa. A terceira zona, denominada “fase diluída geral” é formada pela mistura dos gases das outras fases, dando origem a uma região ainda mais diluída cujos gases são levados para uma fornalha.

Cada uma das fases do conversor é modelada como um reator de mistura perfeita.

4.3 Descrição da Entrada das Variáveis e Perturbações do Sistema

A seguir tem-se a descrição das variáveis manipuladas e controladas no processo e como elas são identificadas no modelo matemático e no programa computacional desenvolvido.

i) Variáveis Manipuladas:

- R_{TF} - Vazão da corrente de alimentação - Normalmente não seria considerada uma variável manipulada, pois é determinada por outros fatores externos à unidade. Caso a carga deva ser um valor fixo, os limites máximo e mínimo deverão ser definidos iguais ou próximos.
- T_{FP} - Temperatura da corrente de alimentação - É uma variável importante para ajuste da severidade e do balanço térmico. Existindo limitações de valores (máximos e mínimos).
- R_{AI} - Vazão de ar que entra no regenerador para a queima do coque - Apenas a

vazão total para os dois estágios é manipulada. De um modo geral esta variável possui apenas limite máximo, dado pela limitação dos sopradores.

- C_{TCV} - Abertura da válvula de catalisador regenerado para o *riser* - Tem-se nesse caso um controle por atuação direta, com o computador atuando diretamente sobre um elemento final de controle. Esta variável possui limite máximo para impedir a ocorrência de reversão de fluxo e limite mínimo para prevenir a interrupção do fluxo de catalisador por aeração.

ii) *Perturbações Medidas*: Propriedades da carga (densidade, viscosidade, etc.), temperatura ambiente e outras que não são medidas diretamente, mas inferidas como os calores específicos dentro do conversor que podem ser estimadas através da temperatura.

iii) *Perturbações Não Medidas*: Variações nos parâmetros cinéticos devido às incrustações no catalisador, erros de modelagem, etc.

(iv) *Variáveis Controladas*

- T_{RX} - Temperatura da saída do *riser* - É considerada como uma das mais importantes variáveis para ajuste da conversão e dos rendimentos da unidade. Nela têm-se limites máximos e mínimos, pois além de existirem limitações de material, uma temperatura excessivamente alta limita o processamento de carga pela grande produção de gás combustível que acarreta. Já uma temperatura muito baixa proporcionará conversões muito baixas.
- T_{RG1} ou T_{RG2} - Temperaturas do regenerador das fases densas do primeiro e segundo estágio - Utiliza-se essa duas variáveis para controle explícito, visto que, na programação linear são utilizados limites bastante amplo de variação, pois a variável que realmente quer se limitar é a temperatura da fase diluída do segundo estágio, pois ela é a melhor indicação do grau de regeneração do catalisador.

- *SEVER* - Severidade da reação - Representa um valor estimado da conversão da reação obtido empiricamente (Capítulo 5, Equações 5.6 e 5.7). Seu controle pode ser feito alterando-se a temperatura do reator, ou a temperatura da carga. É importante observar a estreita relação entre a temperatura de saída do *riser* e a severidade da reação, de forma que se alterando o valor de referência de uma, necessariamente irá afetar o valor da outra (VIEIRA, 2002).

4.4 Restrições de Processo

Para manter operando uma unidade de craqueamento catalítico, algumas restrições de processo devem ser conhecidas e controladas, assim. Quais sejam:

- Compressor: Deve-se limitar a vazão processada na unidade através da vazão de alimentação introduzida no conversor, pois os produtos leves obtidos na fracionadora são impulsionados por um compressor e, assim, a capacidade de produção da unidade pode estar limitada pela capacidade deste compressor.
- Temperaturas: No *riser*, esta restrição (T_{RX}) está associada à conversão da reação catalítica, enquanto que no reator/regenerador a restrição T_{RG1} (ou T_{RG2}), T_{D1} (ou T_{D2}), que são as temperaturas da fase diluída do primeiro e segundo estágios do regenerador, respectivamente, diz respeito à integridade mecânica e metalúrgica do conversor, pois em temperaturas muito altas atinge os limites de resistência mecânica dos ciclones e da linha de gás combustível. Além disso, a circulação de catalisador diminui o acréscimo da temperatura do leito, uma vez que menos catalisador será necessário para manter a temperatura do *riser* dentro do objetivo de controle, podendo reduzir a conversão (severidade) da reação e temperaturas mais baixas podem forçar a abertura total da válvula de catalisador regenerado, válvula que permite a circulação do catalisador do regenerador para o leito do reator limitando assim a capacidade de processamento da unidade.

- Soprador: O ar usado na combustão do coque (R_{AI}) é alimentado por um soprador que apresenta restrições operacionais. O controle da capacidade deste soprador é afetado pela regulagem do ângulo das lâminas do soprador (restrita a limite inferior e superior). Essa capacidade é também indiretamente limitada pela velocidade superficial máxima permitida no regenerador, a qual deve ser mantida abaixo de um limite para prevenir entrada de ar através do leito fluidizado.
- Aquecedor: A temperatura da corrente de alimentação (T_{FP}) depende da capacidade do aquecedor.
- Válvulas: O manuseio das válvulas (T_{CV} - válvula de temperatura, P_{CV1} e P_{CV2} - válvulas de pressão, etc.) deve ser feito de forma adequada, ou seja, limitando as ações de controle para evitar danos mecânicos.

É importante entender que nem todas as restrições são encontradas simultaneamente durante a operação da unidade. Uma carga mais pesada, por exemplo, pode gerar uma quantidade maior de coque e relativamente pouco gás de craqueamento. Isto sobrecarrega o soprador de ar e faz aumentar a temperatura do leito, mas deixa a temperatura de saída do *riser* e a pressão de sucção do compressor bem dentro de suas faixas de controlabilidade. Reciprocamente, uma carga leve tende a forçar estas duas saídas de controle até seus limites enquanto alivia a operação do soprador (VIEIRA, 2002).

4.5 Malhas de Controle

A carga, normalmente proveniente do sistema de tancagem, possui um controle de vazão que controla a entrada dessa carga em permutadores de calor e posteriormente em um forno de aquecimento (V_3). A temperatura da carga na saída do forno é controlada por meio de um controle de vazão de combustível para o forno (V_4). A temperatura de saída do *riser* é controlada pela válvula de admissão do catalisador regenerado (Na malha U_2). O

nível de catalisador no vaso separador é controlado pela válvula de catalisador gasto (Na malha U_7). As temperaturas dos leitos, fases densas e diluídas são controladas pela vazão de ar para regeneração (Na malha U_1). O diferencial de pressão dos subsistemas reação e regeneração e indiretamente a pressão do regenerador, são controlada pela válvula de gases de combustão (VIEIRA, 2002).

Na Figura 14, tem-se um esquema das malhas de controle utilizadas para o conversor FCC. As malhas estão representadas pelas letras de U_1 a U_8 . É importante destacar que três dessas malhas são controladas pelo controlador PID, são elas U_5 , U_6 e U_7 , que controlam válvulas de vazão e pressão. Quando o sistema estiver sobre a atuação do outro controlador, o controlador preditivo desenvolvido, o sistema terá a atuação dos dois controladores ao mesmo tempo de forma integrada. Assim, têm-se três malhas sob a atuação do controlador PID (U_5 a U_6) e quatro controladas pelo preditivo (U_1 , U_2 , U_4 , U_8). Esta medida se faz necessário para aproximar as simulações da realidade, visto que essa medida é tomada para garantir a segurança do processo.

Legenda

- A - Riser
- B - Reator
- C - Leito do reator com catalisador desativado (“coqueado”)
- D - Primeiro estágio da fase densa do regenerador
- E - Segundo estágio da fase densa do regenerador
- F - Fase diluída geral
- G - Válvula do catalisador regenerado
- H - Válvula do catalisador desativado

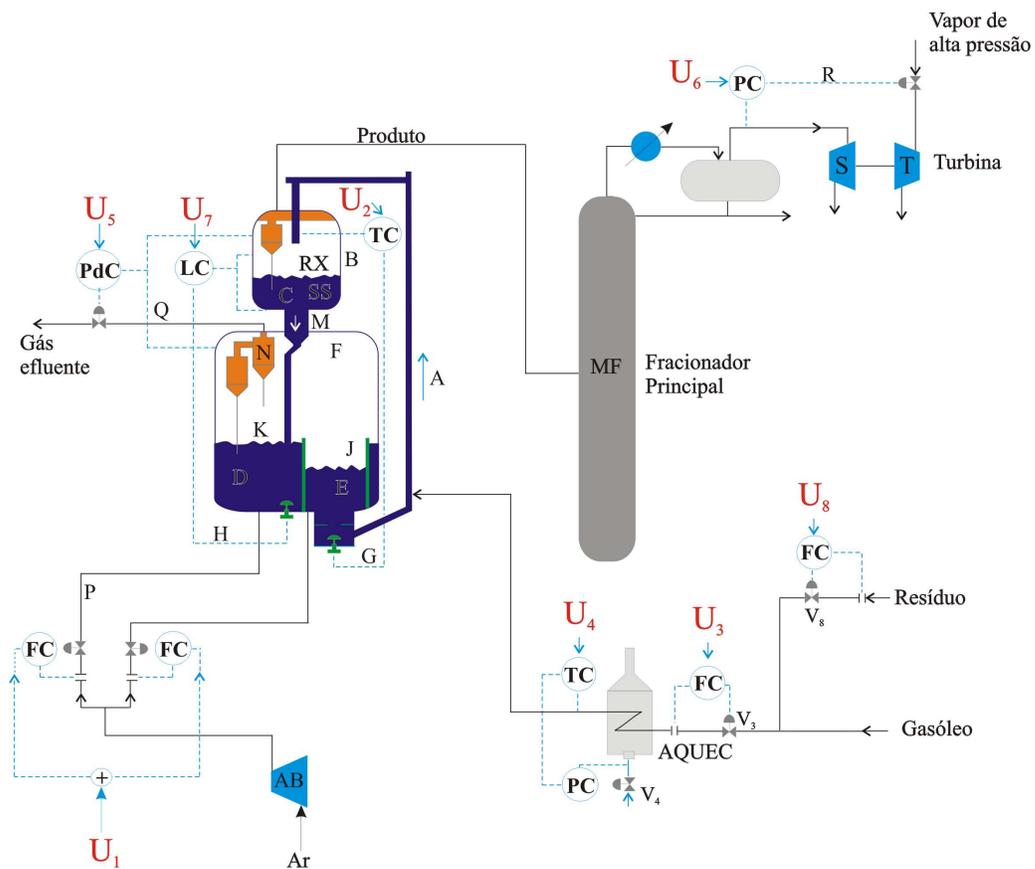


Figura 14: Malhas de controle da unidade FCC.

- I - Ciclones do reator
- J - Primeiro estágio da fase diluída do regenerador
- K - Segundo estágio da fase diluída do regenerador
- L - Regenerador
- M - *Stripper*
- N - Ciclones do regenerador

- Malha U_1 : A recuperação do catalisador (queima de coque) é feita manipulando-se a vazão de ar (R_{AI}) que é enviada pelo soprador (AB).
- Malha U_2 : A temperatura do *riser* (T_{RX}) é controlada manipulando-se a vazão de catalisador regenerado.
- Malha U_3 : Controla a vazão de alimentação da carga (R_{TF}) através da manipulação da válvula V_3 .
- Malha U_4 : Controla a temperatura da corrente de alimentação (T_{FP}) através da manipulação da válvula V_4 .
- Malha U_5 : A pressão do regenerador (P_{REG}) é controlada manipulando-se a vazão do gás efluente. Este controle é muito importante para que a mistura reagente no *riser* não retorne ao regenerador, provocando uma explosão.
- Malha U_6 : O controle da pressão do compressor (P_{suc}) é feito através da manipulação da vazão de vapor na turbina.
- Malha U_7 : O nível do leito de catalisador desativado (H_{RA}) no regenerador é controlado pela válvula de vazão de catalisador desativado que vem do reator. O controle desse nível controla os níveis de catalisador das fases R_{G1} e R_{G2} .
- Malha U_8 : Manipula a vazão de resíduo alimentado à corrente de alimentação.

4.6 Conclusão

Neste capítulo foi realizada uma descrição do processo de craqueamento e das variáveis manipuladas e controladas, bem como apresentada as malhas de controle do sistema. Essa identificação é de suma importância para que se entenda o algoritmo do programa computacional e como essas variáveis são dispostas no mesmo, este esquema de processo é a base para a implementação de outros tipos de controladores avançados no sistema.

5 *Modelagem Matemática*

5.1 Introdução

Neste capítulo são apresentadas as equações provenientes do balanço de massa e energia pertinente aos equipamentos básicos que formam o modelo do conversor do processo de craqueamento catalítico.

5.2 Modelagem Matemática

O modelo proposto aqui é baseado no trabalho de Moro (1992), onde se tem o *riser* e dois estágios do regenerador com queima parcial do CO. O vaso reator e as fases densas e diluídas dos dois estágios do regenerador são considerados sistemas de parâmetros em *lumps*. Os balanços de massa e de energia conduzem a um conjunto de equações diferenciais ordinárias não-lineares.

Este modelo foi escolhido por ter sido desenvolvido e validado com dados reais coletados na unidade de craqueamento da Refinária Henrique Lage e o modelo oferece a possibilidade de adequação a outras refinárias, alterando-se valores referentes as dimensões dos equipamentos (MORO, 1992). A simulação permite prever o comportamento ao longo do tempo das seguintes variáveis:

- Teor de carbono no catalisador gasto (C_{sc})

- Teor de carbono no catalisador regenerado do primeiro estágio (C_{rc1})
- Teor de carbono no catalisador regenerado do segundo estágio (C_{rc2})
- Temperatura na saída do *riser* (T_{RX})
- Temperatura do leito denso do primeiro estágio de regeneração (T_{RG1})
- Temperatura do leito denso do segundo estágio de regeneração (T_{RG2})
- Inventário de catalisador no reator (H_{RA})
- Inventário de catalisador no primeiro estágio de regeneração (H_{RG1})
- Inventário de catalisador no segundo estágio de regeneração (H_{RG2})
- Temperatura da fase diluída do primeiro estágio de regeneração (T_{D1})
- Temperatura da fase diluída do segundo estágio de regeneração (T_{D2})
- Temperatura da fase diluída geral (T_{DG})
- Teor de O_2 nos gases de combustão
- Pressão no regenerador

As principais variáveis manipuladas são:

- Vazão de carga para *riser* (R_{TF})
- Temperatura da carga na entrada do *riser* (T_{FP})
- Vazões de ar para o primeiro e o segundo estágios de regeneração (R_{AI1} e R_{AI2})
- Circulação de catalisador regenerado para o *riser* (R_{RC}) (o sinal dessa válvula será representado pela sigla C_{TCV} , no simulador).

- Circulação de catalisador gasto para o regenerador (R_{SC})
- Vazão de gases de combustão

A seguir são apresentadas as equações obtidas destes balanços, que representam o modelo usado neste estudo para simulação do conversor.

Balanco de carbono no catalisador do reator

O carbono gerado pela reação de craqueamento é geralmente conhecido como carbono catalítico. O balanço de massa do carbono catalítico na secção da reação (reator mais o *riser*), pode ser escrito como:

$$H_{RA} \frac{dC_{cat}}{dt} = -R_{RC} \times C_{cat} + 100 \times R_{CF} \quad (5.1)$$

onde: H_{RA} - Inventário de catalisador no reator (ton); C_{cat} - Carbono catalítico (% massa); R_{RC} - Circulação de catalisador para o *riser* (ton/min); R_{CF} - Por sua vez, representa a velocidade de formação de carbono e é obtido pela seguinte equação em estado estacionário,

$$R_{CF} = \frac{K_{CC} \times P_{RA} [C/O]^{0,65}}{C_{cat} \times C_{RC}^{0,06}} \times W_{HSV}^{0,35} \times \exp\left[\frac{-1500}{R \times (T_{RX} + 273)}\right] \times \frac{R_{TF} \times D_{TF}}{1440} \quad (5.2)$$

onde: K_{CC} - Constante experimental (Assume-se o valor igual a 4.2); C/O - Relação entre a circulação de catalisador e a vazão de carga; conhecida como relação % catalisador/Óleo (ton/ton); T_{RX} - Temperatura na saída do *riser* (°C); R_{TF} - Vazão de carga (m^3 / dia); D_{TF}

- Massa específica da carga (ton/m^3); P_{RA} - Pressão na zona de reação (kgf/cm^2); W_{HSV} - Velocidade espacial (ton carga/h / ton catalisador); C_{RC} - Teor de carbono no catalisador regenerado (% massa).

O catalisador gasto - representado pelo catalisador que deixa o vaso separador, por sua vez, é dado por,

$$H_{RA} \times \frac{dC_{SC}}{dt} = R_{RC} \times (C_{RC2} - C_{SC}) + 100 \times R_{CF} \quad (5.3)$$

onde: C_{SC} - Teor de carbono no catalisador gasto (% massa); C_{RC2} - Teor de carbono no catalisador regenerado (% massa).

Balço de Energia no riser

O balanço foi efetuado considerando o *riser* como sendo um reator de mistura perfeita (CSTR), apesar deste ser um reator tubular. A dinâmica da reação de craqueamento no *riser* é insignificante quando comparada às constantes dominantes do tempo do sistema. Isto é justificado pelo tempo de residência pequeno (aproximadamente 2 segundos) do hidrocarboneto e do catalisador no *riser*, é aceitável supor que o sistema de reação está num estado quase estacionário. Isto conduz à seguinte equação de balanço de energia:

$$H_{RIS} \times S_C \times \frac{dT_{RX}}{dt} = S_C \times R_{RC} \times (T_{RG2} - T_{RX}) + \frac{S_F \times D_{TF} \times R_{TF} \times (T_{FP} - T_{RX})}{1440} - \frac{\Delta H_{FV} \times D_{TF} \times R_{TF}}{1440} - \Delta H_{CR} \times R_{OC} \quad (5.4)$$

onde: H_{RIS} - Inventário de catalisador no *riser* (ton); S_C - Calor específico do catalisador (Kcal/kg/°C); T_{RG2} - Temperatura do leito do segundo estágio de regeneração (°C); S_F -

Calor específico da carga, constante e igual ao dos produtos (Kcal/kg / °C); T_{FP} - Temperatura da carga na entrada do riser (°C); H_{FV} - Calor de vaporização da carga (Kcal/kg); H_{CR} - Calor de craqueamento (Kcal/kg); R_{OC} - Velocidade das reações de craqueamento (ton/min).

A velocidade das reações de craqueamento pode ser obtida por,

$$R_{OC} = K_{CR} \times \frac{A}{(1-A)} \times R_{TF} \times \frac{D_{TF}}{1440} \quad (5.5)$$

onde K_{CR} é uma constante obtida experimentalmente e A representa a severidade, sendo definida pela equação:

$$A = \frac{4040}{C_{CAT} \times C_{RC}^{0,06}} \times P_{RA} \times [C/O]^{0,65} \times W_{HSV}^{0,35} \times \exp\left[\frac{-15000}{R \times (T_{RX} + 273)}\right] \quad (5.6)$$

onde R é a constante dos gases.

Na verdade, (MORO; ODLOAK, 1995), a severidade da reação catalítica é determinada a partir da expressão:

$$SEVCONT = 100 \times \frac{A}{(1+A)} \quad (5.7)$$

A fração mássica da carga convertida pode ser obtida por,

$$Converso(\%m) = \frac{R_{OC} \times D_{TF}}{1440 \times R_{TF}} \quad (5.8)$$

Balanço de Catalisador no Vaso Separador

A equação que descreve o balanço é dada por:

$$\frac{dH_{RA}}{dt} = R_{RC} - R_{SC} \quad (5.9)$$

onde a vazão de catalisador gasto (R_{SC}) é manipulada por uma válvula situada no *stand-pipe*, controlada pelo controlador de nível do vaso separador. A vazão de catalisador depende do diferencial de pressão disponível para a válvula, que por sua vez, depende das pressões do reator e do regenerador e do nível do leito de catalisador e pode ser calculada pela seguinte expressão:

$$\Delta P_{LCV} = P_{RA} + \gamma h + \gamma_{hSP} - P_{REG} \quad (5.10)$$

onde: P_{LCV} - Perda de carga disponível para a válvula; P_{RA} - Pressão no vaso separador; γ - Peso específico do catalisador fluidizado (assumindo = $500 \text{kgf}/\text{m}^3$); h_{SP} - Altura do *stand-pipe* (m); P_{REG} - Pressão do regenerador.

A altura de catalisador no vaso separador h é dado por:

$$h = \left(\frac{H_{RA}}{\rho \times A} \right) \times 1000 \quad (5.11)$$

onde: ρ - Massa específica do catalisador no vaso separador (assumindo = $500 \text{kg}/\text{m}^3$); A - Área transversal do vaso separador (m^2)

A vazão de catalisador através da válvula é dada por:

$$R_{SC} = CV_{LCV} \times A_{LCV} \times (\Delta P_{LCV})^{0,5} \quad (5.12)$$

onde: A_{LCV} - Abertura da válvula; CV_{LCV} - Coeficiente de vazão.

A dinâmica desta válvula, assim como de todas as outras, foi considerada de primeira ordem, então:

$$\tau_{LCV} \times \frac{dA_{LCV}}{dt} = C - A_{LCV} \quad (5.13)$$

onde: C - Saída do controlador do vaso separador.

Balço de Energia no Vaso Separador

A temperatura do catalisador é obtida por uma equação que supõe calor específico constante com a temperatura e leva em conta apenas a capacidade térmica do catalisador, desprezando o efeito do vapor d'água ou hidrocarbonetos

$$H_{RA} \times \frac{dT_{RA}}{dt} = R_{RC} \times T_{RX} - R_{SC} \times T_{RA} \quad (5.14)$$

Balço de Energia no Leito do Primeiro Estágio do Regenerador

O regenerador é considerado um reator de mistura, com temperatura e concentrações homogêneas, calores específicos constantes na faixa de temperatura normal e considerando também que 10% do ar é arrastado para o segundo estágio e que esta corrente é aquecida até a temperatura do leito, mas não participa da reação de queima de coque. A equação obtida é:

$$H_{RG1} \times S_C \times \frac{dT_{RG1}}{dt} = S_C \times R_{SC} \times T_{RA} - S_C \times R_{RC1} \times T_{RG1} \quad (5.15)$$

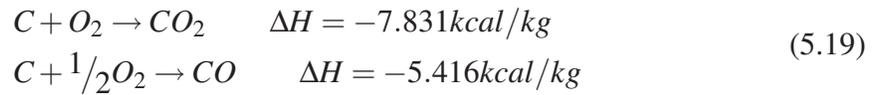
$$+ 0.0215 \times S_A \times R_{AI1} \times (T_{AI} - F_{AR12} \times T_{RG1}) \quad (5.16)$$

$$- \frac{F_{G1} \times S_A \times T_{RG1}}{100} - \frac{\Delta H_{C1} \times C_{ARB1} \times 12}{1000} \quad (5.17)$$

onde: H_{RG1} - Inventário de catalisador no primeiro estágio do regenerador; S_A - Calor específico do ar e dos gases de combustão (Kcal/kg/°C); R_{AI1} - Vazão de ar injetada no primeiro estágio de regeneração (KNm^3/h); T_{AI} - Temperatura do ar injetado (°C); F_{AR12} - Vazão de ar arrastada para o segundo estágio, proporcional à vazão de catalisador (10%); F_{G1} - Vazão de gases de combustão (kg mol/min); C_{arb1} - Carbono queimado (kg mol/min); H_{RG1} - Calor de combustão do coque, considerado função apenas da relação CO_2/CO nos gases de combustão, sendo calculada por:

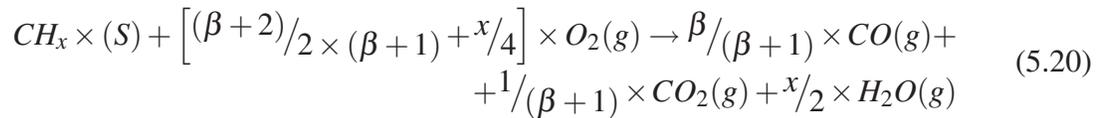
$$\Delta H_{RG1} = \left(7831 + \frac{5416}{(CO_2/CO)} \right) / \left(1 + \frac{1}{(CO_2/CO)} \right) \quad (5.18)$$

A Equação 5.18 supõe que as reações de combustão são:



onde esta equação considera apenas o coque constituído apenas de carbono (grafite), desprezando o hidrogênio, enxofre, etc. Esta simplificação não poder ser aceitável ao projeto do regenerador, mas com a finalidade do controle da simulação é aceitável. A relação de CO_2/CO é uma função da temperatura.

A queima do coque na fase densa é representada pela equação:



sendo que, na fase diluída, ocorre à reação,



onde: C_{Hx} - Coque depositado no catalisador; β - Relação CO_2/CO intrínseca no catalisador (mol/mol).

e

A velocidade de queima de carbono é representada por,

$$r_C = -K_{CO} \times e^{\frac{-E_C}{R \times T}} \times P_{O_2} \quad (5.22)$$

onde:

K_{CO} - Constante pré-exponencial ($KPa^{-1} \cdot S^{-1}$); $E_C/R = 18.900$ K; C_C - kg carbono/kg de catalisador; P_{O_2} - Pressão parcial média logarítmica de O_2 ao longo do leito (KPa).

No trabalho de Moro (1992) foi utilizado uma equação aproximada para representar a velocidade de queima de coque, dada por:

$$R_{CB1} = K_{OR} \times \exp\left(\frac{-18.900}{(T_{RG1} + 273)}\right) \times C_{RC1} \times OF_{G1} \times P_{RG} \quad (5.23)$$

onde: R_{CB1} - Velocidade de queima de coque (% C/min); C_{RC1} - Teor de carbono no catalisador do primeiro estágio (% massa); OF_{G1} - Teor de O_2 no gás de combustão do primeiro estágio (% vol); P_{RG} - Pressão do regenerador (kgf/cm^2); C_{arb1} - Queima de carbono em kg mol/min, dada por:

$$C_{arb1} = \frac{10}{12} \times R_{CB1} \times H_{RG1} \quad (5.24)$$

Balço de Catalisador no Leito do Primeiro Estágio do Regenerador

Considerando a Figura 15, que mostra esquematicamente o fluxo do catalisador no regenerador. O catalisador gasto vem do reator através da válvula de controle nivelado do reator. O catalisador regenerado flui do primeiro estágio ao segundo estágio, dependendo da altura do leito fluidizado sobre o vertedor que separa os dois estágios. O nível de catalisador no primeiro estágio é dado por:

$$h_F = \frac{H_{RG1}}{\rho_{Cat} \times A_{RG1}} \quad (5.25)$$

onde: ρ_{Cat} - Massa específica média do leito do primeiro estágio (kg/m^3); A_{RG1} - Área transversal do primeiro estágio (m^2).

A vazão é dada por:

$$R_{RC1} = K \times (h_F - h_v)^{0,5} \quad (5.26)$$

onde: R_{RC1} - Vazão do catalisador do primeiro para o segundo estágio (ton/min); h_v - Altura do vertedor (4 metros).

Assim o balanço de massa do catalisador resulta em:

$$\frac{dH_{RG1}}{dt} = R_{SC} - K(h_F - h_v)^{0,5} \quad (5.27)$$

Balanço de Carbono no Catalisador do Regenerador

O balanço de carbono no regenerador no primeiro estágio é representado pela equação:

$$\frac{dC_{RC1}}{dt} = \left(\frac{R_{SC} \times C_{SC} - R_{RC1} \times C_{RC1}}{H_{RG1}} \right) \times R_{CB1} \quad (5.28)$$

Balanço de Oxigênio nas Fases Densa e Diluída

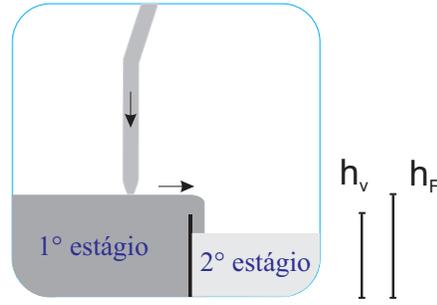


Figura 15: Modelo do regenerador.

Na fase densa do regenerador o balanço de massa do oxigênio corresponde a:

$$\frac{V_{de1} \times \rho^m}{100} \times \frac{dOF_{G1}}{dt} = 0,21 \times R_{AI1}^m - \frac{F_{GM1} \times OF_{G1}}{100} - \frac{10}{12} \times R_{CB1} \times H_{RG1} \times F_{AT1} \quad (5.29)$$

onde: V_{de1} - Volume da fase densa do primeiro estágio (m^3); m - Densidade molar dos gases de combustão ($kgmol/m^3$); R_{AI1}^m - Vazão molar de ar, já descontado arraste para o segundo estágio ($kg\ mol/min$); OF_{G1} - % Molar de O_2 nos gases de combustão na saída da fase densa; F_{AT1} - Relação molar O_2 consumido/C queimado, fornecida por:

$$F_{AT1} = \frac{(\beta + 2)}{2 \times (\beta + 1)} + \frac{x}{4} \quad (5.30)$$

onde já foi visto anteriormente que β é a relação entre CO_2/CO intrínseca no catalisador (mol/mol).

Estes cálculos são repetidos de maneira análoga para o segundo estágio de regeneração.

Na fase diluída do primeiro estágio é utilizada a equação:

$$R_{CO} = -K_{CO} \times \exp \left[-\frac{15.000}{(T_{DI1} + 273)} \right] \times [O_2]^{0,5} \times [CO] \times P_{RG}^{1,5} \quad (5.31)$$

onde: R_{CO} - em kg mol de $CO/m^3/s$; $[O_2]$ - % molar de O_2 na fase diluída; $[CO]$ - % molar de CO na fase diluída.

O balanço de massa para o O_2 é dado por:

$$\frac{V_{DI1} \times \rho^m}{100} \times \frac{d[O_2]}{dt} = F_{gm} \times \frac{(O_{FG1} - [O_2])}{100} - 30 \times R_{CO} \times V_{DI1} \quad (5.32)$$

onde: V_{DI1} - Volume da fase diluída do primeiro estágio (m^3).

Balanço de Energia na Fase Diluída

A equação que representa o balanço é dada por:

$$\frac{dT_{DI1}}{dt} = \frac{F_G \times (T_{RG1} - T_{DI1})}{\rho \times V_{DI1}} + 4.058 \times 10^6 \times \frac{R_{CO}}{\rho \times S_A} \quad (5.33)$$

onde: T_{DI1} - Temperatura da fase diluída do primeiro estágio ($^{\circ}C$); F_G - Vazão de gases de combustão (kg/min); ρ - Densidade dos gases de combustão (kg/m^3).

Cálculo análogo é feito para a fase diluída do segundo estágio e para a fase diluída geral.

$$\frac{dT_{DI2}}{dt} = \frac{F_G \times (T_{RG2} - T_{DI2})}{\rho \times V_{DI2}} + 4.058 \times 10^6 \times \frac{R_{CO}}{\rho \times S_A} \quad (5.34)$$

onde: T_{DI2} - Temperatura da fase diluída do segundo estágio ($^{\circ}C$); V_{DI2} - Volume da fase diluída do segundo estágio (m^3).

Balanço de Pressão no Regenerador

O balanço é feito considerando o regenerador como sendo apenas uma capacitância, de acordo com a equação:

$$V_{DI1} \times \frac{d\rho}{dt} = F_i - F_o \quad (5.35)$$

onde: F_i - Vazão de gases de combustão gerados (kg/min); F_o - Vazão de gases de combustão enviados para a caldeira de CO (kg/min).

Foi considerado comportamento de gás ideal, logo:

$$\rho = \frac{P_{RG} \times PM}{R \times (T_{DI1} + 273)} \quad (5.36)$$

onde: PM -Peso molecular dos gases de combustão (kg/kg mol).

Daí tem-se:

$$V_{DI1} \times \frac{PM}{R \times (T_{DI1} + 273)} \times \frac{dP_{RG}}{dt} = F_i - F_o \quad (5.37)$$

onde F_o é controlado pela válvula *slide* de gases de combustão sob comando do controlador de pressão diferencial entre o regenerador e o reator. Esta válvula foi simulada de maneira semelhante às válvulas do catalisador.

5.3 Conclusão

Neste capítulo foram apresentadas as equações que descrevem o modelo matemático de uma unidade FCC. As equações mostradas envolvem balanços de massa e energia ao longo de todos os equipamentos básicos que formam um conversor FCC e que são utilizadas no simulador.

6 *Planejamento Fatorial*

6.1 **Introdução**

Neste capítulo é apresentado o estudo estatístico realizado sobre as variáveis de entrada ou manipuladas do processo de craqueamento catalítico. Com este estudo pôde-se avaliar a influência dessas variáveis nas respostas do sistema assim como suas interações nas variáveis de saída ou controladas. Para este estudo é utilizada uma técnica chamada de Planejamento Experimental baseado em princípios estatísticos. Com ela pode-se extrair do sistema o máximo de informações possíveis com um número mínimo de simulações.

6.2 **Planejamento de Experimentos**

Posteriormente ao estudo realizado para verificação da adequação do modelo matemático adotado para o processo de craqueamento catalítico, feito com a ajuda de simulações do programa computacional, foi realizado um planejamento fatorial com o objetivo de determinar a influência das variáveis de entrada nas variáveis de saída do processo, buscando as variáveis que exercem maior influência no processo, assim como nas possíveis interações.

O planejamento fatorial (ou experimental) é uma técnica baseada em princípios estatísticos, que vem sendo cada vez mais usada. Através dela, pesquisadores podem determinar

as variáveis que exercem maior influência no desempenho de um determinado processo.

Um dos problemas mais comuns para quem faz experimentos é determinar a influência de uma ou mais variáveis de entrada (fatores) sobre uma outra variável de interesse (resposta). Os fatores em geral são variáveis manipuladas pelo processo e as respostas são variáveis controladas. Para isso é preciso definir os objetivos que se pretende atingir com os experimentos, os fatores, os valores dos fatores usados nos estados (níveis) e as respostas de interesse.

Para fazer um planejamento fatorial completo, deve-se realizar experimentos em todas as possíveis combinações dos níveis dos fatores. Para k fatores, isto é, k variáveis controladas pelo experimentador, um planejamento completo é representado por y^k , onde y é o número de níveis do planejamento, ou seja, para dois níveis exige-se a realização de $2 \times 2 \times \dots \times 2 = 2^k$ ensaios diferentes, sendo chamado por isso de planejamento fatorial 2^k . As 2^k combinações possíveis dos dois níveis podem ser listadas na chamada matriz de planejamento (NETO *et al.*, 2001).

Quando o efeito de uma variável depende do nível de outra pode-se dizer que as duas variáveis interagem e pode-se calcular o efeito de interação entre elas.

O efeito principal é por definição a média dos efeitos das variáveis (respostas) nos dois níveis. Mas apenas com o cálculo do efeito de interação e o efeito principal não se pode informar nada a respeito da reprodutibilidade do sistema, ou seja, não se tem nenhuma informação de quão grande é o erro inerente aos experimentos e assim não se pode afirmar que os efeitos calculados são estatisticamente significativos. Desta forma, para a obtenção do erro experimental, pode-se efetuar ensaios idênticos no centro da faixa experimental, os quais são chamados de pontos centrais.

Nos planejamentos de dois níveis costuma-se identificar os níveis superior e inferior com os sinais (+) e (-), respectivamente.

O número de fatores envolvidos em um planejamento fatorial completo pode muitas

vezes ser grande, o que eleva o número de ensaios (ou no caso dos trabalhos computacionais, simulações) a serem realizadas. Por exemplo, com 8 fatores, é necessário fazer 256 simulações em um planejamento fatorial completo. Além disso, um número alto de fatores aumenta a chance de que um ou mais fatores não influenciem significativamente a resposta, seja através de efeitos principais, seja através de efeitos de interações. Sendo assim, não se faz necessária a realização de todos os experimentos (ou simulações) do planejamento completo. Uma alternativa ao planejamento fatorial completo é o planejamento fatorial fracionário que permite fazer uma triagem das variáveis selecionando as mais importantes e usando um número menor de ensaios (experimentos). Para fazer um planejamento fatorial completo com 4 variáveis, seria necessário realizar 16 experimentos (ou simulações). Uma fração e meia deste planejamento é representada por 2^{4-1} , indicando ter 4 fatores, cada um com dois níveis, mas apenas 8 ensaios (simulações). Nota-se que o planejamento fatorial completo foi dividido por dois, o que é mostrado pelo -1 no expoente. Caso ele fosse dividido em quatro partes, o expoente seria 4^{-2} e assim, sucessivamente (NETO *et al.*, 2001 apud REZENDE, 2003).

6.3 Aplicação ao Caso de Estudo - FCC

A opção pela utilização desta técnica estatística surgiu da necessidade de estudar os efeitos das variáveis de entrada, determinando quais exercem maior influência no processo. A importância da busca por esses efeitos se deve ao fato de que eles indicariam se todas as variáveis manipuladas influenciavam as controladas como esperado e ainda serviria para indicar uma possível variável que exercesse pouca ou nenhuma influência e assim retirá-la do treinamento da rede neural. Assim foram realizados dois planejamentos fatoriais, um com os limites (máximo e mínimo) bem próximos aos limites do processo (levando em conta até as restrições do processo) e um outro planejamento com faixas arbitrárias dentro desses limites.

Para a realização de ambos os planejamentos fatoriais aplicado ao caso do processo

de craqueamento catalítico, foi utilizado o programa *Statistica (StarSoft)*. Foram consideradas 4 variáveis de entrada (todas variáveis manipuladas) e 4 variáveis de saída ou resposta. É importante ressaltar que primeiro foi feito um outro planejamento estatístico contendo todas as variáveis de entrada possíveis. Pelo resultado obtido pôde-se avaliar que apenas quatro das sete testadas tinham algum tipo de influência ou efeito nas variáveis controladas. Isso já era esperado, por observações feitas nas primeiras simulações do comportamento do processo. Assim, após eliminadas essas variáveis, partiu-se para o estudo efetivo dos efeitos das variáveis de saída.

As variáveis de entrada utilizadas no planejamento foram:

- R_{AI} - Vazão de ar que entra no regenerador;
- C_{TCV} - Abertura da válvula de catalisador regenerado;
- R_{TF} - Vazão da corrente de alimentação;
- T_{FP} - Temperatura da corrente de alimentação.

As variáveis de saída (respostas) consideradas foram:

- T_{RX} - Temperatura na saída do *riser* (ou temperatura de reação);
- T_{RG1} - Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração;
- T_{RG2} - Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração;
- $SEVER$ - Severidade da reação.

Os planejamentos realizados tiveram as seguintes características: planejamento fatorial completo com dois níveis, ou seja, 24, sendo realizadas 16 simulações com combinações diferentes e mais uma que é o valor do ponto central, somando ao todo 17 simulações. Foram utilizados níveis de confiança de 95% para definição dos valores estatisticamente significativos.

6.3.1 Primeiro Planejamento

No primeiro planejamento realizado utilizaram-se critérios diferentes para escolha das faixas de limites, com a idéia central de estudar o comportamento das variáveis manipuladas. A seguir na Tabela 1 se encontra a descrição de cada variável com sua respectiva faixa de limite (ponto central, máximo ou +1 e mínimo ou -1).

Tabela 1: Faixa de limites para cada variável manipulada

	Valor Mínimo	Valor Máximo	Ponto Central	Nível -1	Nível +1
$R_{AI}(KNm^3/hr)$	201	231	216	212,16	229,84
$R_{TF}(m^3/d)$	7900	10100	9700	9312	10085
$T_{FP}(^{\circ}C)$	215	245	230	255,6	244,4
C_{TCV}	0,42	0,92	0,67	0,42	0,92

A matriz do planejamento fatorial completo 2^4 gerados utilizando-se o *software Statistica* para as 16 combinações mais um ponto central, está descrita na Tabela 2.

Na Tabela 3 estão os valores das variáveis de entrada de acordo com os níveis superior e inferior substituídos na matriz de planejamento.

Na Tabela 4 encontram-se as respostas para as 17 combinações simuladas referentes aos valores de saída (ou resposta) no estado estacionário.

Tabela 2: Matriz de planejamento completo

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}
1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1
3	-1	1	-1	-1
4	1	1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1
6	1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1
8	1	1	1	-1
9	-1	-1	-1	1
10	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1
12	1	1	-1	1
13	-1	-1	1	1
14	1	-1	1	1
15	-1	1	1	1
16	1	1	1	1
17	0	0	0	0

Tabela 3: Valores dos níveis (-1 e +1) das variáveis de entrada

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}
1	201,00	9312,00	215,00	0,4200
2	231,00	9312,00	215,00	0,4200
3	201,00	10085,00	215,00	0,4200
4	231,00	10085,00	215,00	0,4200
5	201,00	9312,00	245,00	0,4200
6	231,00	9312,00	245,00	0,4200
7	201,00	10085,00	245,00	0,4200
8	231,00	10085,00	245,00	0,4200
9	201,00	9312,00	215,00	0,9200
10	231,00	9312,00	215,00	0,9200
11	201,00	10085,00	215,00	0,9200
12	231,00	10085,00	215,00	0,9200
13	201,00	9312,00	245,00	0,9200
14	231,00	9312,00	245,00	0,9200
15	201,00	10085,00	245,00	0,9200
16	231,00	10085,00	245,00	0,9200
17	216,00	9698,00	230,00	0,6700

Tabela 4: Valores de respostas das variáveis de saída.

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}	T_{RX}	T_{RG1}	T_{RG2}	$SEVER$
1	201,00	9312,00	215,00	0,4200	466,2537	648,1509	667,9594	52,4484
2	231,00	9312,00	215,00	0,4200	470,9427	659,1093	668,8767	54,4476
3	201,00	10085,00	215,00	0,4200	464,8703	636,5934	664,7335	51,3126
4	231,00	10085,00	215,00	0,4200	467,2549	651,0638	666,5134	52,2689
5	201,00	9312,00	245,00	0,4200	471,3259	661,7018	673,1225	53,0873
6	231,00	9312,00	245,00	0,4200	472,4712	665,6125	669,7194	53,7609
7	201,00	10085,00	245,00	0,4200	463,7254	650,7877	667,2441	49,3443
8	231,00	10085,00	245,00	0,4200	468,2445	659,7515	667,6042	51,3234
9	201,00	9312,00	215,00	0,9200	534,1146	642,1900	670,6328	77,7554
10	231,00	9312,00	215,00	0,9200	553,7354	675,6210	705,8556	80,9799
11	201,00	10085,00	215,00	0,9200	516,8217	625,8635	654,3611	72,8493
12	231,00	10085,00	215,00	0,9200	536,8833	660,3959	690,9351	76,8391
13	201,00	9312,00	245,00	0,9200	549,3666	659,5351	648,9179	80,2903
14	231,00	9312,00	245,00	0,9200	570,0695	690,8289	720,8663	83,3334
15	201,00	10085,00	245,00	0,9200	534,3314	642,4059	670,8502	76,4379
16	231,00	10085,00	245,00	0,9200	552,8449	675,2009	705,6255	79,5993
17	216,00	9698,00	230,00	0,6700	520,4708	666,1023	697,2865	71,1898

Tabela 5: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX}

Variáveis/ interações	Efeitos 506,6898	p 0,000000
R_{AI} (1)	11,4546	0,008411
R_{TF} (2)	-10,4129	0,012758
T_{FP} (3)	8,9379	0,023763
C_{TCV} (4)	75,3849	0,000000
1 e 2	-0,0849	0,978132
1 e 3	-0,2344	0,939689
1 e 4	8,2701	0,031860
2 e 3	-0,6088	0,844421
2 e 4	-6,1883	0,082434
3 e 4	7,3265	0,048742

6.3.1.1 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RX}

Na Tabela 5, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RX} (Temperatura de saída do *riser*) e na Figura 16 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 5. Pelos valores de efeito encontrados pode-se concluir que:

- i. Todas as variáveis de entrada (R_{AI} , R_{TF} , T_{FP} e C_{TCV}), são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura de saída do *riser* (T_{RX}), em 10,4%;
- iii. Para as variáveis R_{AI} , C_{TCV} e T_{FP} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura de

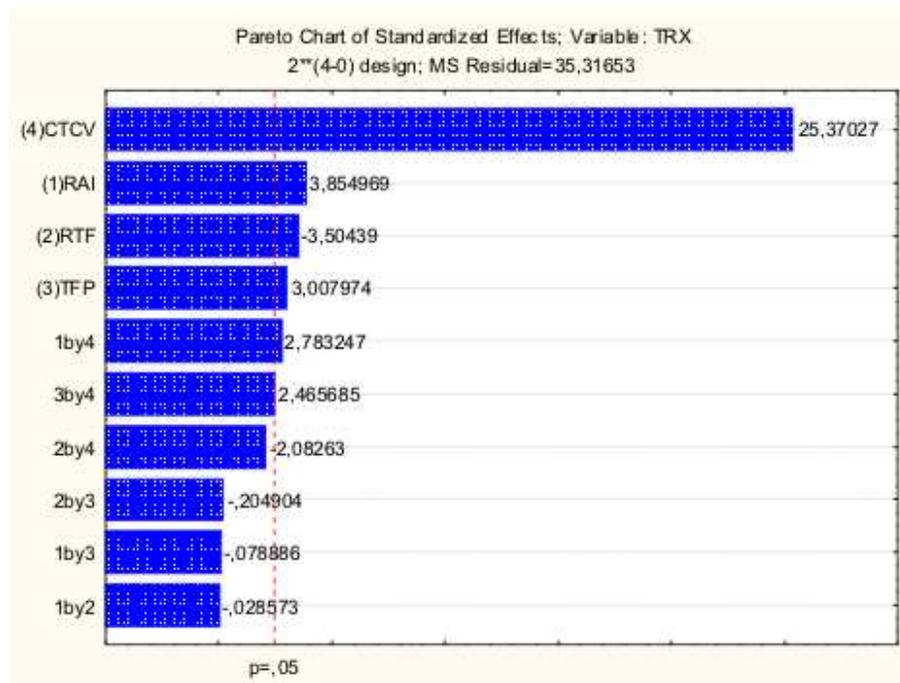


Figura 16: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos T_{RX}

saída do *riser* (T_{RX}), em 11,4% para a variável R_{AI} , 75,3% para a variável C_{TCV} e 8,9% para a variável T_{FP} ;

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que as interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e T_{FP} e C_{TCV} (3 e 4), são estatisticamente significativas, assim quando aumentamos os valores das duas variáveis ao mesmo tempo, do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 8,2% da temperatura - T_{RX} para a interação entre R_{AI} e C_{TCV} e um aumento de 7,3% da temperatura - T_{RX} para a interação entre T_{FP} e C_{TCV} .
- v. As interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} e R_{TF} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

As Figuras 17 e 18 a seguir representam a superfície de resposta, que é uma outra

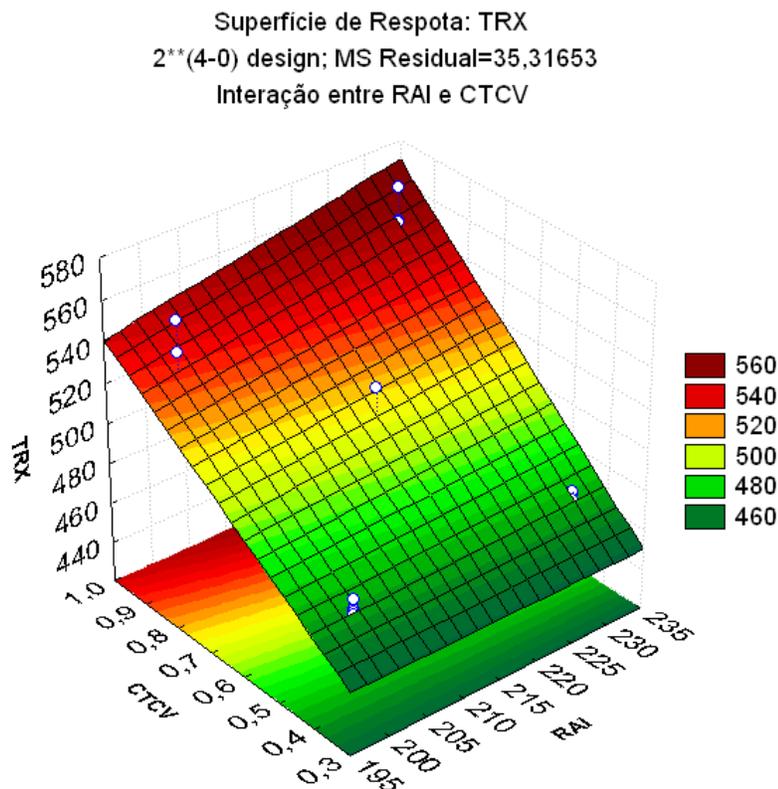


Figura 17: Tabela 5 - Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX} .

forma de visualização da interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e T_{FP} e C_{TCV} (3 e 4). Na área em vermelho pode-se notar as áreas onde a combinação de valores entre as variáveis manipuladas geram melhores valores para T_{RX} . No primeiro gráfico (Figura 17), valores maiores de R_{AI} e C_{TCV} , levam a uma maior temperatura na saída do riser, ou seja, a medida que se aumenta a vazão de catalisador regenerado e a vazão para queima do catalisador no regenerador, leva a um aumento de T_{RX} para valores próximos ao *setpoint*. O mesmo se aplica para o gráfico da Figura 18, onde o aumento de T_{FP} e C_{TCV} também leva a valores de T_{RX} para área de valores próximos ao *setpoint*.

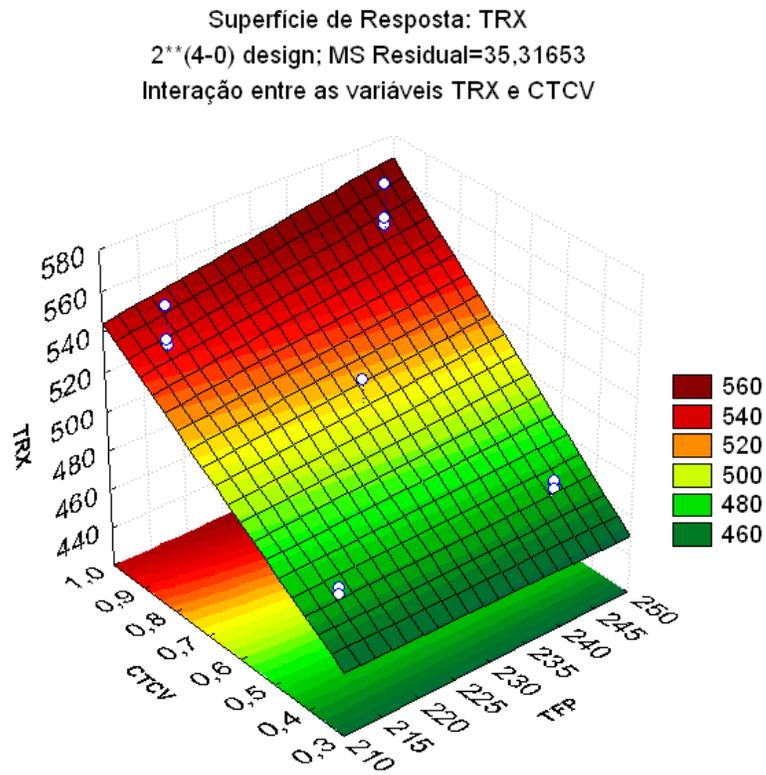


Figura 18: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos, para T_{RX} .

Tabela 6: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG1}

Variáveis/ interações	Efeitos 656,9361	p 0,000000
R_{AI} (1)	21,6694	0,000046
R_{TF} (2)	-12,2109	0,001086
T_{FP} (3)	12,9796	0,000788
C_{TCV} (4)	4,5338	0,072290
1 e 2	1,0210	0,641270
1 e 3	-1,6786	0,450846
1 e 4	12,0936	0,001142
2 e 3	0,5778	0,790690
2 e 4	-3,1163	0,185070
3 e 4	2,2455	0,322210

6.3.1.2 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG1}

Na Tabela 6, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RG1} (Temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador) e na Figura 19 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 6.

Pelos valores de efeito encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{AI} e R_{TF} são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador (T_{RG1}), em 12,2%;
- iii. Para a variável R_{AI} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura da fase densa do

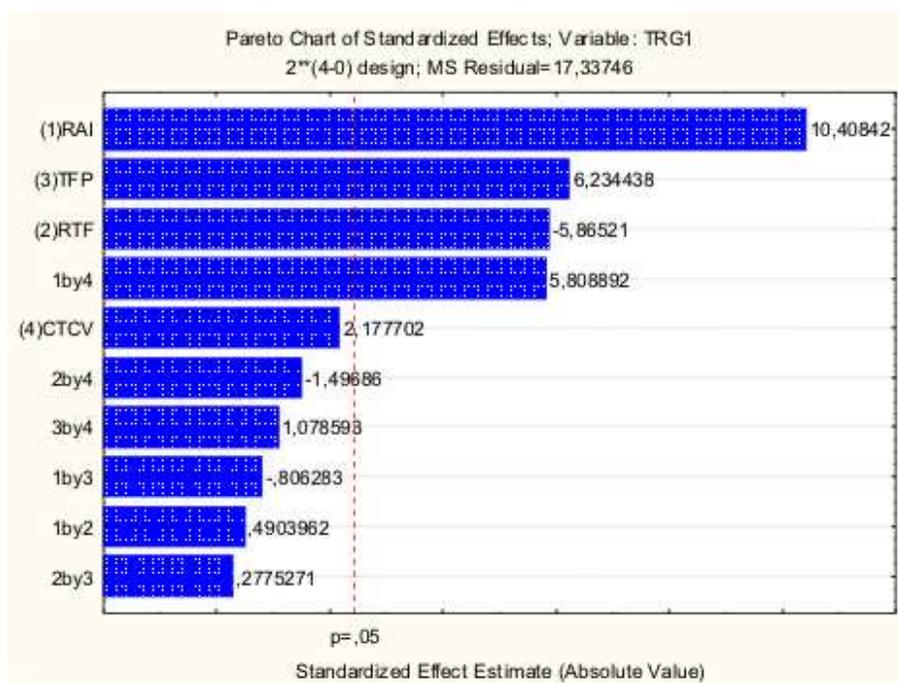


Figura 19: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG1}

primeiro estágio do regenerador (T_{RG1}), em 21,6%;

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que a interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) é estatisticamente significativa, assim quando aumentamos os valores das duas variáveis ao mesmo tempo, do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 12,1% em T_{RG1} ;
- v. As interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} , R_{TF} e C_{TCV} e T_{FP} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

A Figura 20 a seguir representa a superfície de resposta da interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4). Pelo gráfico (Figura 20), pode-se notar que para obter-se valores maiores de T_{RG1} , tem que elevar os valores da vazão de catalisador regenerado (C_{TCV}) e da vazão de ar para queima de catalisador regenerado a próximo dos limites máximos.

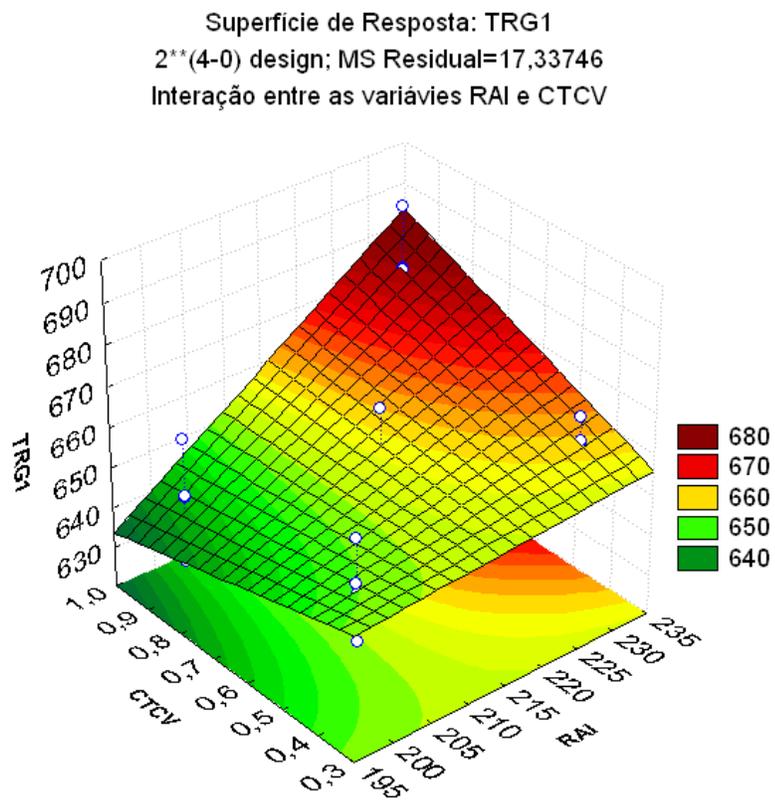


Figura 20: Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} .

Tabela 7: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG2}

Variáveis/ interações	Efeitos 677,1238	p 0,000000
R_{AI} (1)	22,2718	0,011554
R_{TF} (2)	-4,7604	0,472414
T_{FP} (3)	4,2603	0,518311
C_{TCV} (4)	15,2839	0,049044
1 e 2	-3,8995	0,553183
1 e 3	3,6483	0,578302
1 e 4	22,3583	0,011362
2 e 3	4,4349	0,501962
2 e 4	-1,3647	0,833343
3 e 4	1,8585	0,774828

6.3.1.3 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG2}

Na Tabela 7, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RG2} (Temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador) e na Figura 21 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 7.

Pelos valores de efeito encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{AI} e C_{TCV} são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para as variáveis R_{AI} e C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador (T_{RG2}), em 22,3% para R_{AI} e 15,3% para C_{TCV} ;
- iii. Para as interações analisadas, pode-se concluir que as interações entre as variáveis

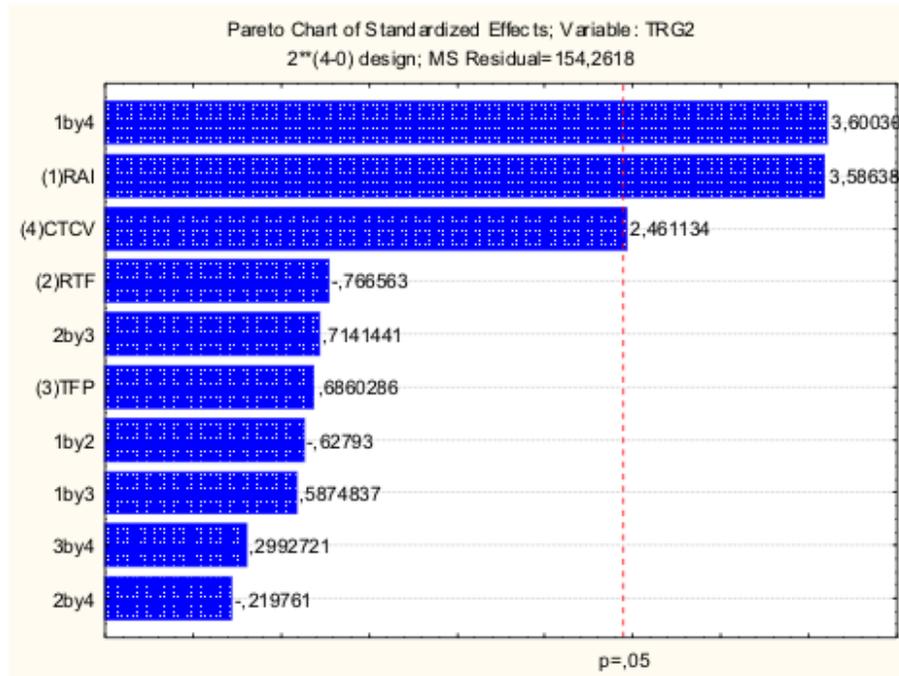


Figura 21: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG2}

R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e R_{TF} e C_{TCV} (2 e 3), são estatisticamente significativas, assim quando aumentamos os valores das variáveis ao mesmo tempo, do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 22,3% (R_{AI} e C_{TCV}) e 1,36% (R_{TF} e C_{TCV}), na temperatura da fase densa do 2^o estágio do regenerador (T_{RG2});

- iv. As interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} , R_{TF} e C_{TCV} e T_{FP} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

A Figura 22 a seguir representa a superfície de resposta da interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4). Assim como T_{RG1} , T_{RG2} também possuirá valores máximos ou valores próximos ao *setpoint* quando as variáveis manipulada R_{AI} e C_{TCV} tem os seus valores aumentados para próximos aos seus limites.

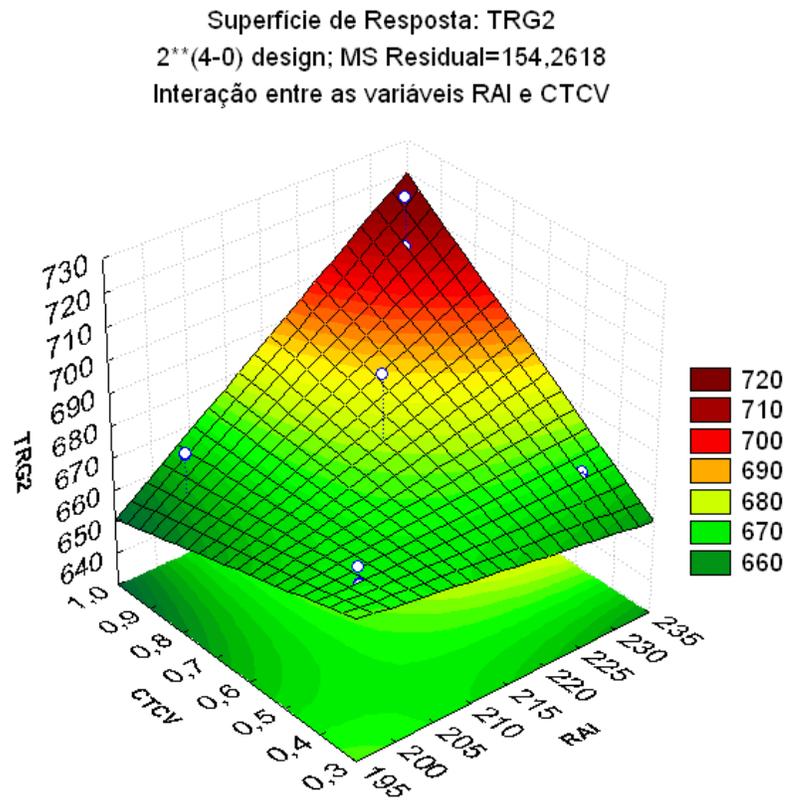


Figura 22: Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} .

Tabela 8: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo *SEVER*.

Variáveis/ interações	Efeitos 65,7216	p 0,000000
R_{AI} (1)	2,3784	0,091658
R_{TF} (2)	-3,2661	0,033084
T_{FP} (3)	1,0345	0,416481
C_{TCV} (4)	26,2614	0,000001
1 e 2	0,1433	0,907760
1 e 3	-0,1641	0,894462
1 e 4	0,9763	0,441733
2 e 3	-0,1757	0,887046
2 e 4	-0,8923	0,480163
3 e 4	1,7749	0,185040

6.3.1.4 d) Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída Severidade da Reação

Na Tabela 8, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada *SEVER* (Severidade da reação) e na Figura 23 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 8.

Pelos valores de efeito encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{TF} e C_{TCV} , são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da severidade da reação (*SEVER*), em 3,3%;
- iii. Para a variável C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível

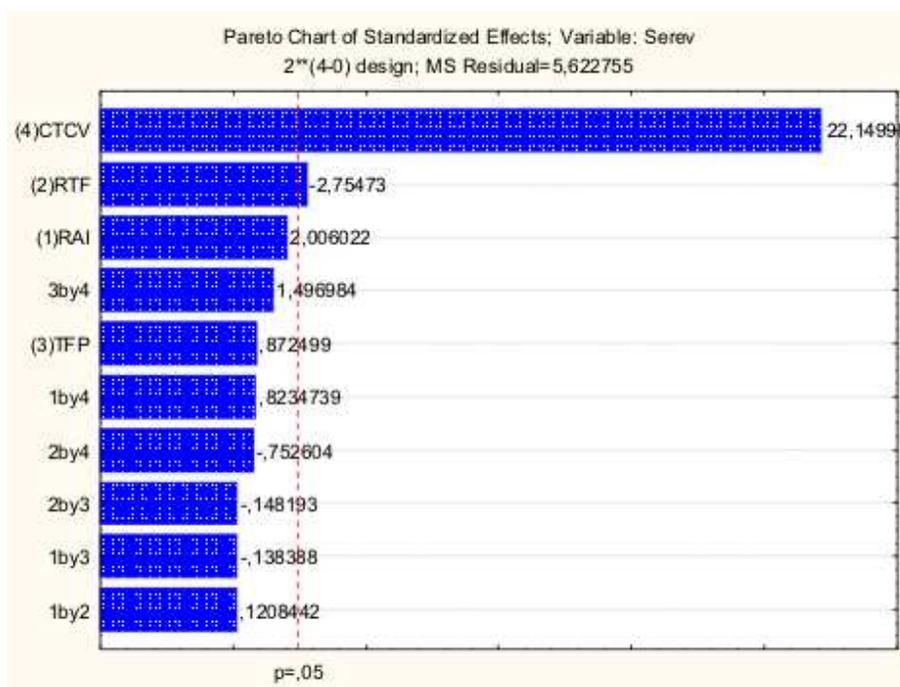


Figura 23: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para *SEVER*

superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da severidade da reação (*SEVER*), em 26,2%;

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que nenhuma das interações analisadas é estatisticamente significativa.

A Figura 35 a seguir representa a superfície de resposta entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} (1 e 4). O crescimento dos valores das duas variáveis R_{TF} e C_{TCV} pode levar a um aumento da severidade, ou seja, da conversão da reação para uma área próxima ao *setpoint*, assim como pode ser observado na Figura 35.

Por esse primeiro planejamento estatístico foi possível iniciar o estudo das variáveis que mais influenciam no processo de craqueamento catalítico. Assim, foi possível observar que todas as variáveis que estão sendo manipuladas têm influência sobre as variáveis

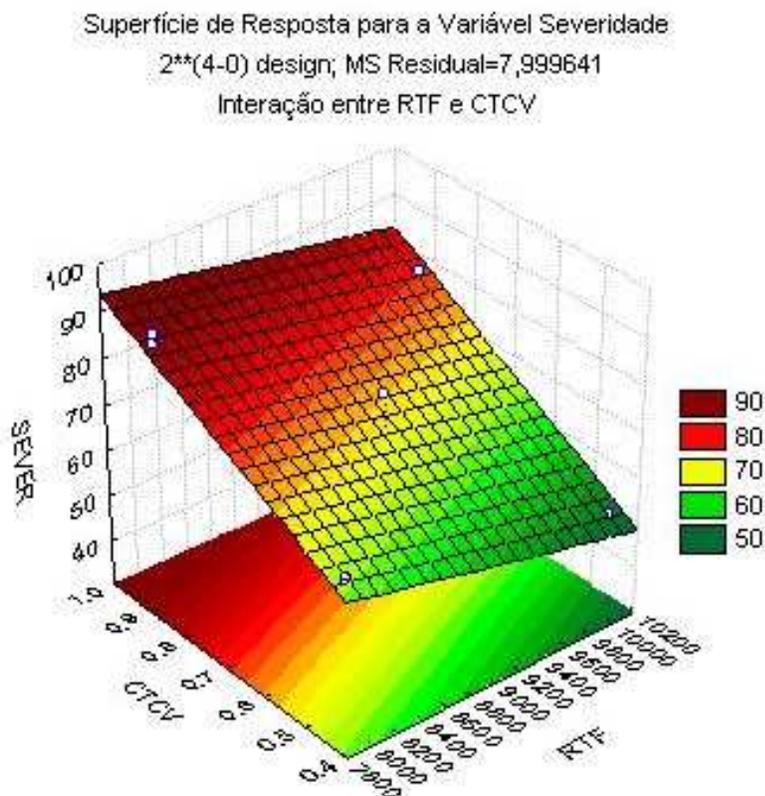


Figura 24: Superfície de resposta para a variável Severidade, entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV}

controladas, mas observou-se também que a variável T_{FP} (temperatura da alimentação no *riser*) possui menos influência (estatisticamente) que as demais variáveis. Foi visto também que a interação que mais influencia em um maior número de variáveis é a interação entre a vazão de ar para o regenerador (R_{AI}) e a abertura da válvula de catalisador regenerado (C_{TCV}). Pelos gráficos de superfície, já mostrados, pode-se notar que o aumento nos valores das variáveis manipuladas eleva os valores das variáveis controladas para uma área específica, apresentada em vermelho, que são áreas de valores próximos ao ótimo dessas variáveis, próximo ao *setpoint* das mesmas, para essas condições operacionais testadas (limites das variáveis manipuladas) e tipo de planejamento escolhido.

Tabela 9: Faixa de limites para cada variável manipulada.

	Valor Mínimo	Valor Máximo	Ponto Central	Percentual de Variação	Nível -1	Nível +1
$R_{AI}(KNm^3/hr)$	201	231	216	6%	203,04	228,96
$R_{TF}(m^3/d)$	7900	10100	9700	12%	7920	10080
$T_{FP}(^{\circ}C)$	215	245	230	6%	216,2	243,8
C_{TCV}	0,42	0,92	0,67	35%	0,4355	0,9045

6.3.2 Segundo Planejamento

Para esse planejamento, cada uma das variáveis de entrada possuía faixas de limites operacionais diferentes e bem próximos às restrições do processo, com isso pretendia-se cobrir toda faixa entre o valor mínimo e máximo das variáveis. A seguir, na Tabela 9, se encontra a descrição de cada variável com sua respectiva faixa de limite, o valor do ponto central e os valores dos níveis (+1 ou valor máximo e o -1 ou valor mínimo).

A matriz do planejamento fatorial completo 24 gerado utilizando-se o *software Statistica* para as 16 combinações mais um ponto central com os valores codificados, está descrita na Tabela 10.

Na Tabela 11 estão os valores das variáveis de entrada de acordo com os níveis superior e inferior substituídos na matriz de planejamento.

Na Tabela 12 encontram-se as respostas para as 17 combinações simuladas referentes aos valores de saída (ou resposta) no estado estacionário.

Tabela 10: Matriz de planejamento completo para os valores codificados

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}
1	-1	-1	-1	-1
2	1	-1	-1	-1
3	-1	1	-1	-1
4	1	1	-1	-1
5	-1	-1	1	-1
6	1	-1	1	-1
7	-1	1	1	-1
8	1	1	1	-1
9	-1	-1	-1	1
10	1	-1	-1	1
11	-1	1	-1	1
12	1	1	-1	1
13	-1	-1	1	1
14	1	-1	1	1
15	-1	1	1	1
16	1	1	1	1
17	0	0	0	0

Tabela 11: Valores dos níveis (-1 e +1) das variáveis de entrada dados reais.

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}
1	203,04	7920,00	216,20	0,4355
2	228,96	7920,00	216,20	0,4355
3	203,04	10080,00	216,20	0,4355
4	228,96	10080,00	216,20	0,4355
5	203,04	7920,00	243,80	0,4355
6	228,96	7920,00	243,80	0,4355
7	203,04	10080,00	243,80	0,4355
8	228,96	10080,00	243,80	0,4355
9	203,04	7920,00	216,20	0,9045
10	228,96	7920,00	216,20	0,9045
11	203,04	10080,00	216,20	0,9045
12	228,96	10080,00	216,20	0,9045
13	203,04	7920,00	243,80	0,9045
14	228,96	7920,00	243,80	0,9045
15	203,04	10080,00	243,80	0,9045
16	228,96	10080,00	243,80	0,9045
17	216,00	9000,00	230,00	0,6700

Tabela 12: Valores de respostas das variáveis de saída.

	R_{AI}	R_{TF}	T_{FP}	C_{TCV}	T_{RX}	T_{RG1}	T_{RG2}	$SEVER$
1	203,04	7920,00	216,20	0,4355	500,0081	688,9791	694,4558	65,1287
2	228,96	7920,00	216,20	0,4355	494,2738	686,2683	685,8385	63,3766
3	203,04	10080,00	216,20	0,4355	465,0656	651,7041	668,0134	49,9623
4	228,96	10080,00	216,20	0,4355	468,7711	659,6877	668,3688	51,5785
5	203,04	7920,00	243,80	0,4355	500,0081	688,9791	694,4558	65,1287
6	228,96	7920,00	243,80	0,4355	494,2738	686,2683	685,8385	63,3766
7	203,04	10080,00	243,80	0,4355	465,0656	651,7041	668,0134	49,9623
8	228,96	10080,00	243,80	0,4355	468,7711	659,6877	668,3688	51,5785
9	203,04	7920,00	216,20	0,9045	584,9496	692,1118	720,5096	86,9894
10	228,96	7920,00	216,20	0,9045	604,4522	723,3118	749,6329	88,9813
11	203,04	10080,00	216,20	0,9045	533,3873	644,2409	673,0252	76,0503
12	228,96	10080,00	216,20	0,9045	550,0397	673,0641	703,5179	79,0142
13	203,04	7920,00	243,80	0,9045	584,9496	692,1118	720,5096	86,9894
14	228,96	7920,00	243,80	0,9045	604,4522	723,3118	749,6329	88,9813
15	203,04	10080,00	243,80	0,9045	533,2004	644,0511	672,8337	76,0052
16	228,96	10080,00	243,80	0,9045	550,0397	673,0641	703,5179	79,0142
17	216,00	9000,00	230,00	0,6700	543,3922	689,1087	718,1795	77,1680

Tabela 13: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RX}

Variáveis/ interações	Efeitos 526,1824	p 0,000000
R_{AI} (1)	8,5549	0,066880
R_{TF} (2)	-41,6284	0,000036
T_{FP} (3)	-0,0234	0,995330
C_{TCV} (4)	86,1542	0,000001
1 e 2	1,6708	0,677858
1 e 3	0,0234	0,995330
1 e 4	9,5693	0,046585
2 e 3	-0,0234	0,995330
2 e 4	-11,4058	0,024678
3 e 4	-0,0234	0,995330

6.3.2.1 a) Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RX}

Na Tabela 13, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RX} (Temperatura de saída do *riser*) e na Figura 25 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 13. Pelos valores de efeito encontrados pode-se concluir que:

- i. As variáveis de entrada R_{TF} e C_{TCV} são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura de saída do *riser* (T_{RX}), em 41,6%;
- iii. Para a variável C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura de saída do *riser* (T_{RX}), em 86,1%;

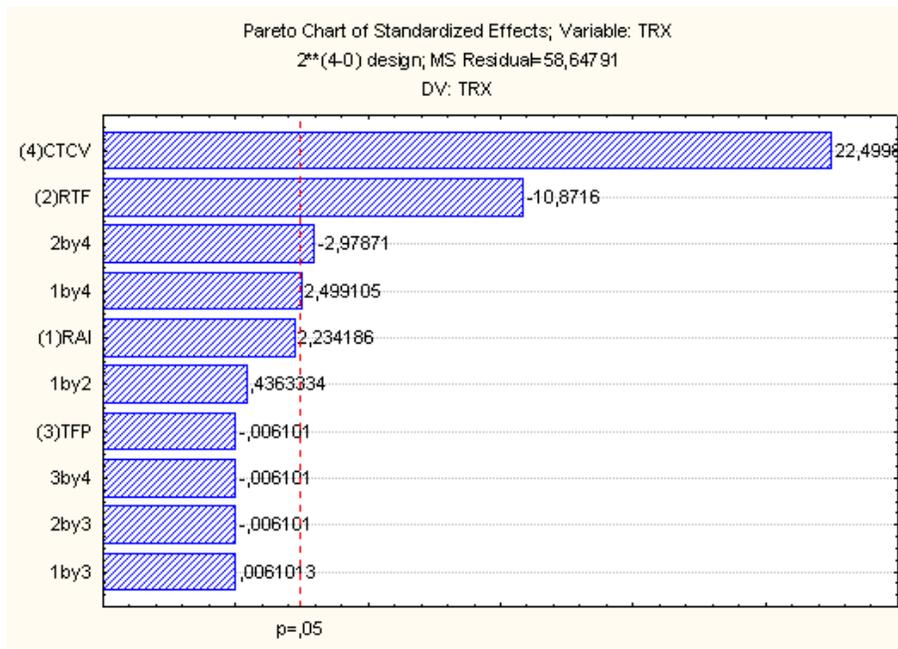


Figura 25: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos T_{RX}

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que as interações entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e R_{TF} e C_{TCV} (2 e 4), são estatisticamente significativas. Para a interação entre R_{AI} e C_{TCV} , quando aumenta-se os valores das duas variáveis ao mesmo tempo, do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 9,5%. Na interação entre R_{TF} e C_{TCV} quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura de saída do riser (T_{RX}), em 11,4%;
- v. A variável R_{AI} e T_{FP} e as interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} e T_{FP} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

As Figuras 26 e 27 a seguir representam a superfície de resposta, que é uma outra forma de visualização da interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e R_{TF} e C_{TCV} (2 e 4).

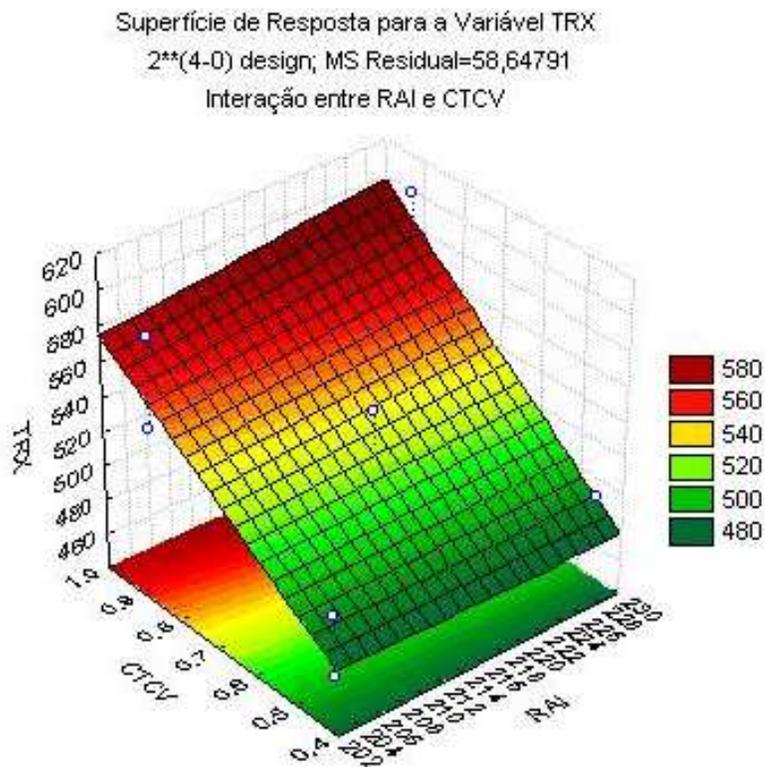


Figura 26: Superfície de resposta para a variável T_{RX} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} .

No primeiro gráfico (Figura 26), valores maiores de R_{AI} e C_{TCV} , levam a uma maior temperatura na saída do *riser*, ou seja, a medida que se aumenta a vazão de catalisador regenerado e a vazão para queima do catalisador no regenerador, leva a um aumento de T_{RX} para valores próximos ao *setpoint*. O mesmo se aplica para o gráfico da Figura 26, onde a diminuição do valor de R_{TF} e o aumento de C_{TCV} , também leva a valores de T_{RX} para área de valores próximos ao *setpoint*.

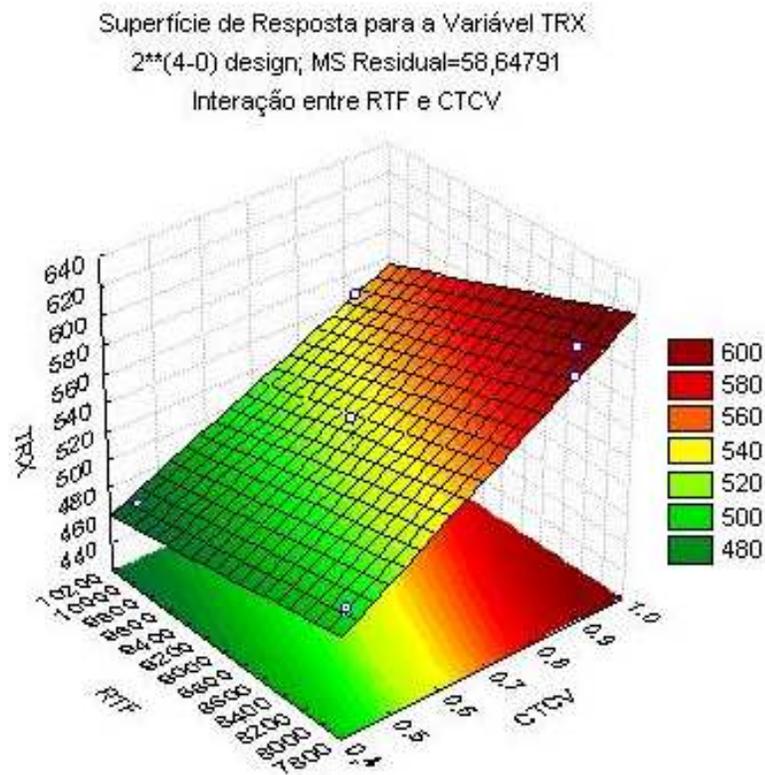


Figura 27: Superfície de resposta para a variável T_{RX} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} .

Tabela 14: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG1}

Variáveis/ interações	Efeitos 678,0973	p 0,000000
R_{AI} (1)	16,3477	0,000865
R_{TF} (2)	-40,5173	0,000001
T_{FP} (3)	-0,0237	0,993195
C_{TCV} (4)	11,4986	0,005045
1 e 2	2,1031	0,460655
1 e 3	0,0237	0,993195
1 e 4	13,7113	0,002141
2 e 3	-0,0237	0,993195
2 e 4	-8,5895	0,018171
3 e 4	-0,0237	0,993195

6.3.2.2 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG1}

Na Tabela 14, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RG1} (Temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador) e na Figura 31 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 14.

Pelos valores dos efeitos encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{AI} , R_{TF} e C_{TCV} são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95% e com valores de $p < 0,05$;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador (T_{RG1}), em 40,5%;
- iii. Para as variáveis R_{AI} e C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura da

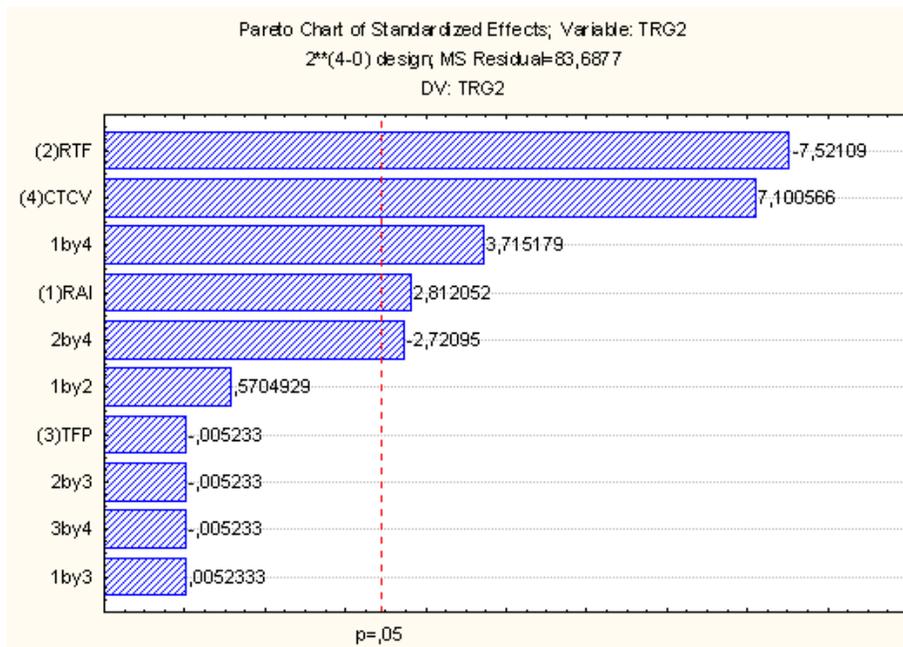


Figura 28: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG1}

fase densa do 1º estágio do regenerador (T_{RG1}), em 16,3% (R_{AI}) e 11,5% (C_{TCV});

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que as interação entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e R_{TF} e C_{TCV} (2 e 4), são estatisticamente significativas. Para a interação entre R_{AI} e C_{TCV} , quando aumentamos os valores das duas variáveis ao mesmo tempo, do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 13,7%. Na interação entre R_{TF} e C_{TCV} quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador, em 8,5%;
- v. A variável T_{FP} e as interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} e T_{FP} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

As Figuras 29 e 30 a seguir representam as superfícies de resposta das interações entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} e C_{TCV} e R_{TF} . Na Figura 29 pode-se observar que pra obter-se

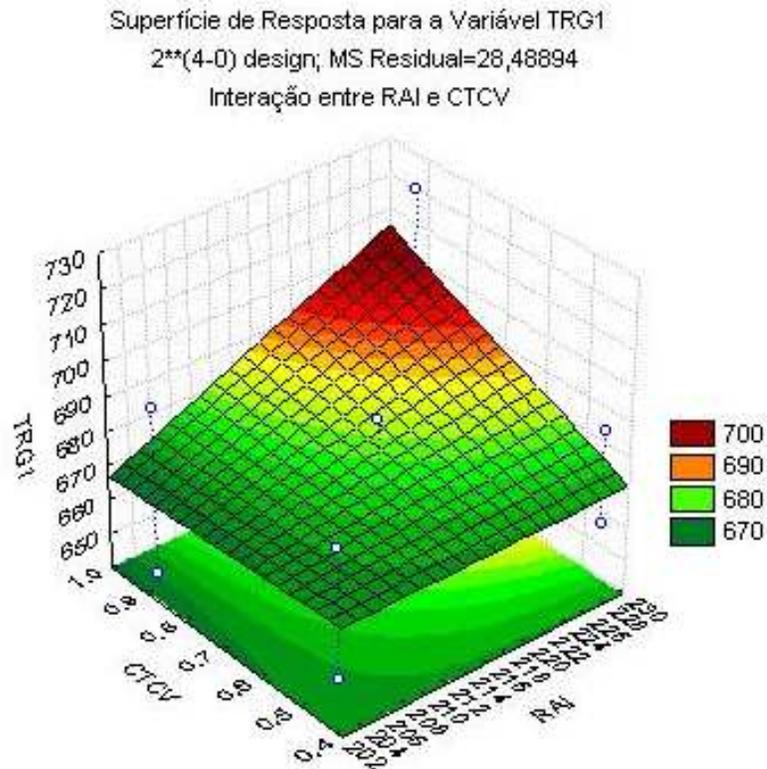


Figura 29: Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} .

valores de T_{RG1} próximos ao *setpoint* é necessário o aumento da vazão de ar para queima do coque no regenerador (R_{AI}) e vazão de catalisador para o *riser* (C_{TCV}). Na Figura 30, para uma região ótima de T_{RG1} observa-se a necessidade de aumento no valor da vazão de catalisador para o *riser* (C_{TCV}) e menor vazão de alimentação (R_{TF}).

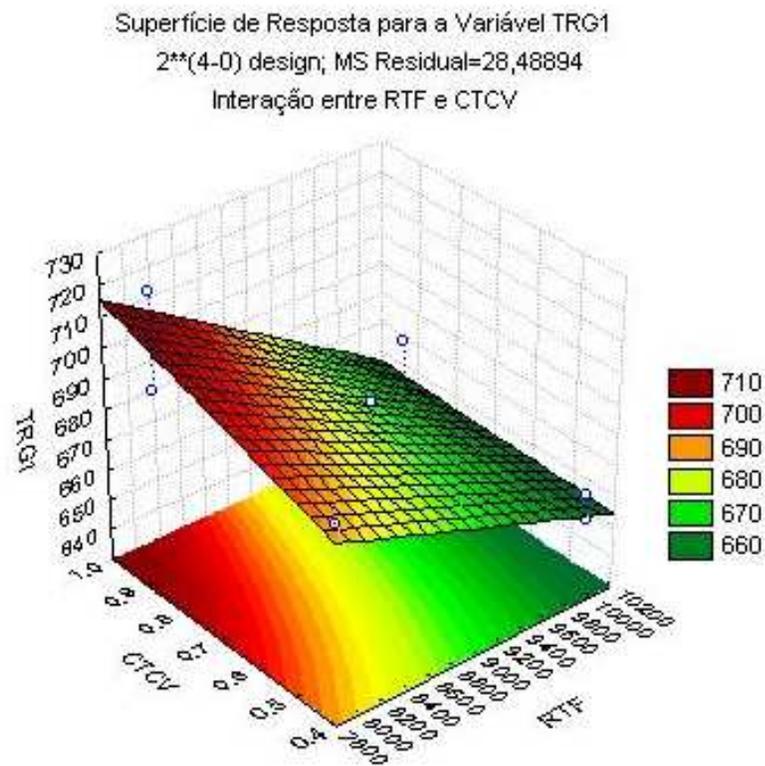


Figura 30: Superfície de resposta para a variável T_{RG1} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} .

Tabela 15: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo T_{RG2}

Variáveis/ interações	Efeitos 696,7478	p 0,000000
R_{AI} (1)	12,8625	0,030673
R_{TF} (2)	-34,4018	0,000286
T_{FP} (3)	-0,0239	0,995994
C_{TCV} (4)	32,4783	0,000392
1 e 2	2,6095	0,589054
1 e 3	0,0239	0,995994
1 e 4	16,9934	0,009909
2 e 3	-0,0239	0,995994
2 e 4	-12,4458	0,034599
3 e 4	-0,0239	0,995994

6.3.2.3 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída T_{RG2}

Na Tabela 15, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada T_{RG2} (Temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador) e na Figura 31 o diagrama de pareto, onde pode-se observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 15.

Pelos valores dos efeitos encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{AI} , R_{TF} e C_{TCV} são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95% ($p < 0,05$);
- ii. Para as variáveis R_{AI} e C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador (T_{RG2}), em 12,8% para R_{AI} e 36,4% para C_{TCV} ;
- iii. Para as interações analisadas, pode-se concluir que a interação entre as variáveis

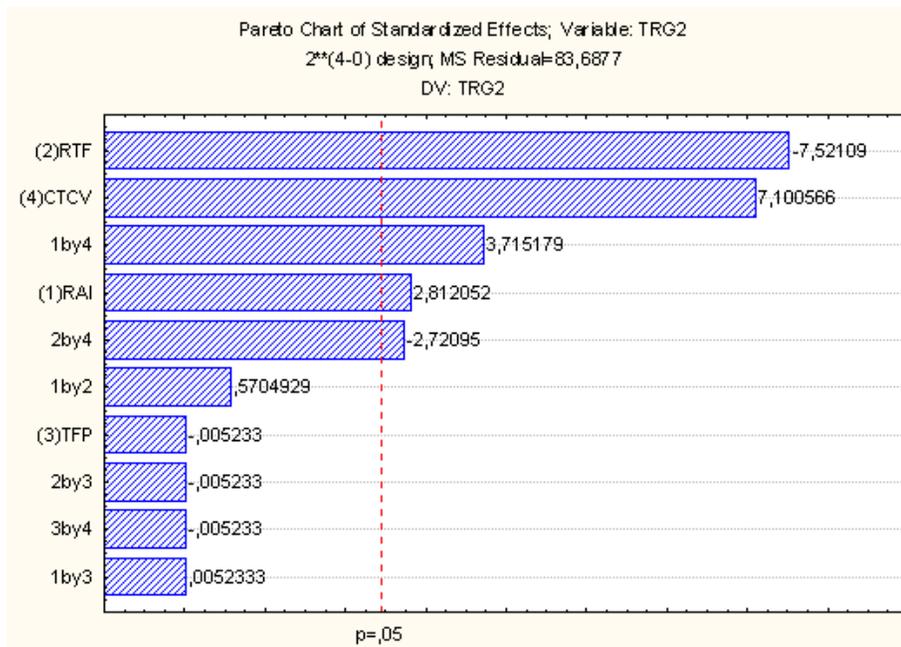


Figura 31: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para T_{RG2}

R_{AI} e C_{TCV} (1 e 4) e R_{TF} e C_{TCV} (2 e 4) são estatisticamente significativas. Assim quando aumentamos os valores das variáveis R_{AI} e C_{TCV} , do nível inferior para o nível superior, ocorre um aumento de 16,9% na temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador (T_{RG2}) e para R_{TF} e C_{TCV} ocorre uma diminuição de 12,4% em T_{RG2} ;

- iv. A variável T_{FP} e as interações entre: R_{AI} e R_{TF} , R_{AI} e T_{FP} , R_{TF} e T_{FP} e T_{FP} e C_{TCV} não são estatisticamente significativas.

As Figuras 32 e 33, a seguir, representam as superfícies de resposta das interações entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} e R_{TF} e C_{TCV} . Assim como em T_{RG1} , T_{RG2} apresenta as mesmas variáveis estatisticamente significativas e com o mesmo comportamento, isso é esperado visto a influência dessas duas variáveis no regenerador.

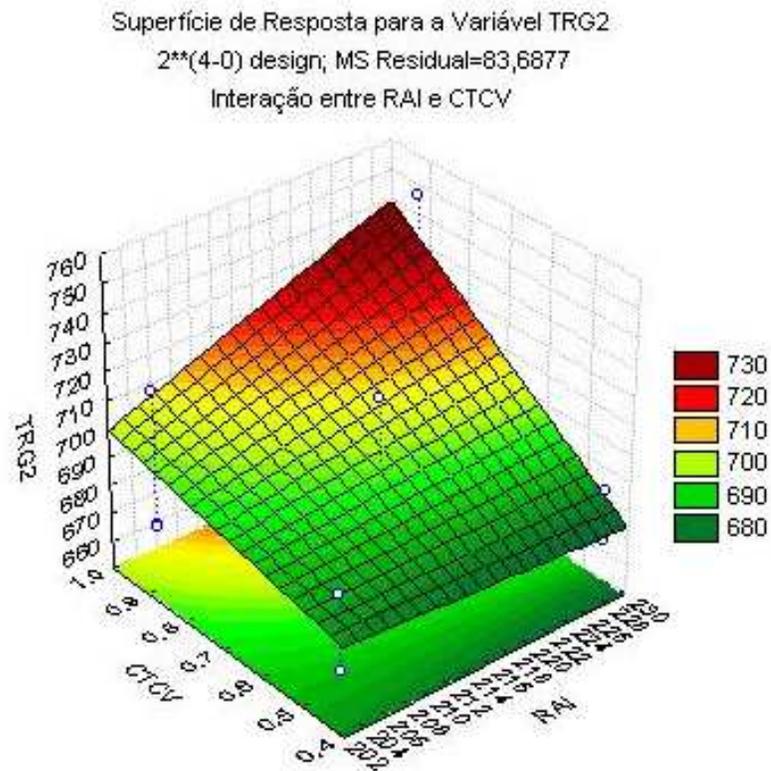


Figura 32: Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{AI} e C_{TCV} .

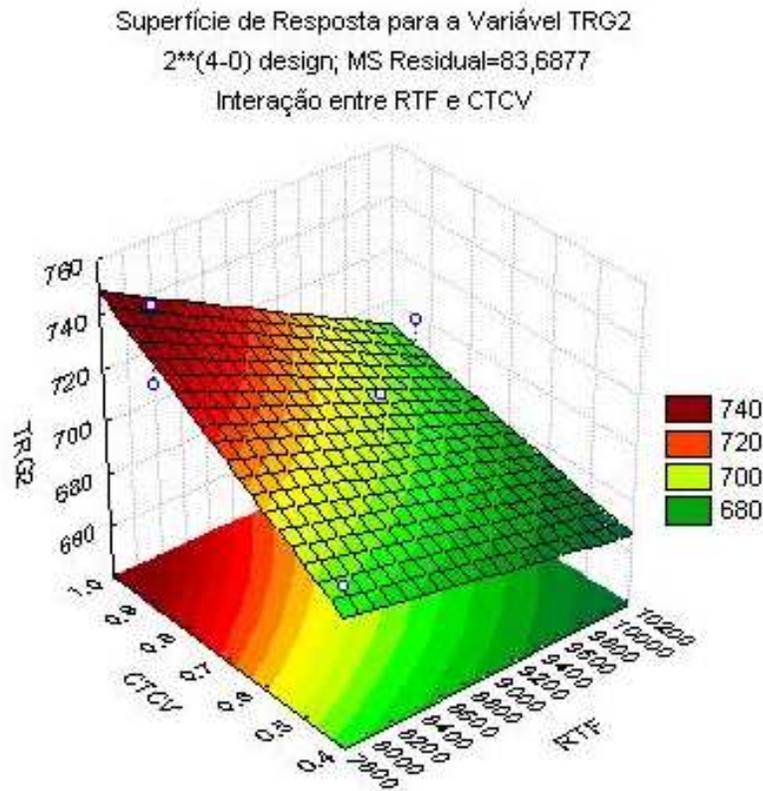


Figura 33: Superfície de resposta para a variável T_{RG2} , entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} .

Tabela 16: Efeitos das variáveis de entrada sobre a variável de estudo *SEVER*.

Variáveis/ interações	Efeitos 70,5462	p 0,000000
R_{AI} (1)	1,2106	0,424831
R_{TF} (2)	-11,9733	0,000148
T_{FP} (3)	-0,0056	0,996949
C_{TCV} (4)	25,2416	0,000002
1 e 2	1,0907	0,469822
1 e 3	0,0056	0,996949
1 e 4	1,2786	0,400784
2 e 3	-0,0056	0,996949
2 e 4	1,5089	0,327010
3 e 4	-0,0056	0,996949

6.3.2.4 Estudo das variáveis de entrada sobre a variável de saída Severidade da Reação

Na Tabela 16, pode-se observar os valores dos efeitos para cada variável de entrada sobre a variável estudada *SEVER* (Severidade da reação) e na Figura 34 o diagrama de pareto, onde pode-se melhor observar os efeitos das variáveis que são estatisticamente significativas.

As variáveis estatisticamente significativas se encontram em negrito na Tabela 16.

Pelos valores dos efeitos encontrados pode-se concluir que:

- i. Apenas as variáveis de entrada R_{TF} e C_{TCV} , são estatisticamente significativas, para um nível de confiança de 95%;
- ii. Para a variável R_{TF} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível superior, na faixa estudada, ocorre uma diminuição do valor da severidade da reação (*SEVER*), em 11,93%;
- iii. Para a variável C_{TCV} , quando ocorre um aumento do nível inferior para o nível

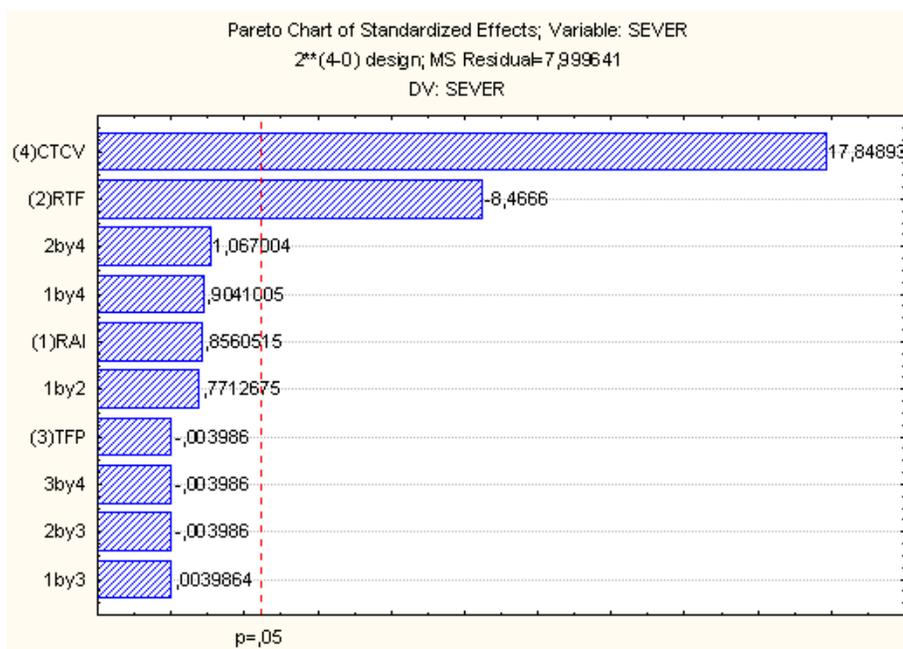


Figura 34: Gráfico de pareto em função dos valores estatísticos para *SEVER*

superior, na faixa estudada, ocorre um aumento do valor da severidade da reação (*SEVER*), em 25,2%;

- iv. Para as interações analisadas, pode-se concluir que nenhuma das interações analisadas é estatisticamente significativa, assim como as variáveis R_{AI} e TFP .

A Figura 35 a seguir representa a superfície de resposta entre as variáveis R_{TF} e C_{TCV} (1 e 4). A interação entre essas duas variáveis, a vazão de alimentação (R_{TF}) com valores próximos ao do limite mínimo e a vazão de catalisador regenerado (C_{TCV}) próximos ao máximo, proporcionam valores altos da conversão da reação, na região próxima ao *setpoint*.

Por este segundo estudo estatístico realizado foi possível identificar que as variáveis Vazão de ar para o regenerador (R_{AI}), Vazão de alimentação (R_{TF}) e válvula que regula a Vazão de catalisador regenerado (C_{TCV}) são as que mais influenciam no processo de

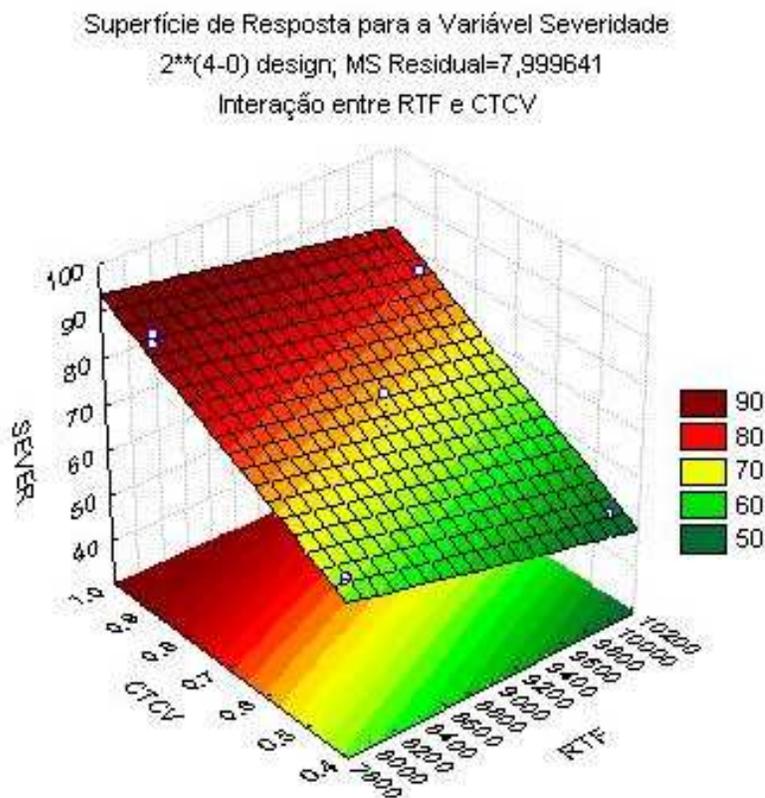


Figura 35: Superfície de resposta para a variável Severidade, entre as variáveis R_{TF} e $CTCV$.

craqueamento catalítico. Essas variáveis apresentaram maiores efeitos nas variáveis de saída; a única das variáveis manipuladas que não obteve efeito estatisticamente significativo foi a temperatura da alimentação (T_{FP}). Os resultados foram conseguidos a partir do modelo matemático usado, considerando as restrições e suposições adotadas na sua formulação.

6.4 Conclusão

Pelo estudo estatístico realizado é possível concluir que as variáveis manipuladas que mais influenciam no processo de craqueamento catalítico são: Vazão de ar para o regenerador (R_{AI}), Vazão de alimentação (R_{TF}) e abertura da válvula de catalisador regenerado (C_{TCV} - que regula a vazão de catalisador regenerador para o *riser*). Essas variáveis apresentaram maiores efeitos nas variáveis de saída ou controladas. A interação entre essas variáveis proporciona, nas variáveis controladas ou de saída, a possibilidade de atingirem valores ótimos, identificados nos gráficos de superfície (mostrados nas áreas em vermelho), onde esses pontos ótimos aproximam-se dos valores dos *setpoints* dessas variáveis de saída.

A variável temperatura da alimentação (T_{FP}) foi a que apresentou menor efeito no primeiro planejamento e nenhum no segundo. Como um dos objetivos buscados neste planejamento foi a possível seleção de variáveis para construção da rede neural, utilizada como modelo interno do controlador para o processo FCC, optou-se, num primeiro momento por realizar a implementação e treinamento da rede neural sem esta variável. No decorrer dos treinamentos notou-se que a rede não possuía uma resposta satisfatória sem a presença desta variável, com a reprodução do comportamento aquém do aceitável.

Assim, mesmo entendendo que o planejamento estatístico é uma importante ferramenta de estudo, foi considerado apenas o estudo das influências/efeitos das variáveis manipuladas e respostas das controladas e não foi excluída nenhuma das variáveis manipuladas do treinamento da rede neural.

7 *Resultados*

7.1 **Introdução**

Este capítulo tem o objetivo de apresentar os resultados obtidos neste trabalho. Os resultados são divididos em três etapas: Na primeira são apresentados os primeiros estudos realizados com o modelo matemático para avaliação do comportamento do conversor, a partir de perturbações geradas no sistema. Na segunda etapa é apresentada a estruturação e o treinamento da rede neural artificial para o processo de craqueamento catalítico. Na terceira etapa o desenvolvimento e implementação de um controlador preditivo baseado em modelo, tendo como modelo interno uma rede neural.

7.2 **Resultados da Primeira Etapa - Estudo do Programa Computacional**

Foram realizados estudos para especificação do comportamento do conversor de craqueamento catalítico operando apenas com a ação do controlador PID. O programa computacional foi desenvolvido em linguagem FORTRAN baseado no modelo matemático apresentado no Capítulo 5.

No processo de FCC, pode-se ter várias variáveis controladas e manipuladas, neste caso são admitidas as mesmas variáveis controladas e manipuladas mostradas na descri-

ção do processo, escolhidos por sua importância e influência no processo.

A partir da simulação computacional, foram obtidos conjuntos de dados que descrevem o sistema com ação apenas de controladores tipo PID, para duas diferentes condições de operação. Para isso foram implementados degraus em duas das variáveis denominadas como de perturbação, esperando com isso obter respostas do sistema.

No primeiro teste foram aplicados dois degraus numa variável que influencia diretamente no regenerador do conversor, a temperatura do ar para o regenerador - T_{AI} , alterando seu valor em $\pm 10\%$. No segundo teste também foram aplicados dois degraus de $\pm 10\%$ em relação ao valor inicial na variável R_{TF} - vazão de alimentação da carga, que influencia diretamente em todo conversor, mais especialmente na reação de craqueamento catalítico e na severidade da reação.

Em todos os testes, as variáveis que foram acompanhadas foram:

- Temperatura na saída do *riser* (ou temperatura de reação) (T_{RX});
- Temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração (T_{RG1});
- Temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração (T_{RG2});
- Severidade da reação ($SEVER$).

A aplicação dessas perturbações tinha como objetivo tanto a verificação do desempenho do simulador com o modelo matemático adotado, como também realizar estudos sobre o comportamento das variáveis manipuladas e controladas do conversor.

7.2.0.5 Primeiro caso: Aplicação do degrau na variável T_{AI} :

Para esse primeiro caso teste foram implementadas duas perturbações/degraus de $\pm 10\%$ no valor inicial da variável T_{AI} - temperatura de ar para o regenerador, o seu valor inicial

que era de 190 °C foi modificado para 209 °C (+10%) e numa segunda simulação de 190 °C para 171 °C (-10%), ou seja, um incremento de ± 19 °C para cada uma das simulações. Nos gráficos a seguir pode-se observar as perturbações e o efeito nas variáveis controladas, como também a linha indicando o início da perturbação causada no sistema e o *setpoint* das mesmas.

As Figuras 36 e 37 correspondem às respostas das variáveis T_{RG1} (temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador) e T_{RG2} (temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador). Como esperado, conforme foi dado um acréscimo na temperatura de ar foram observadas elevações nas temperaturas das fases densas do regenerador.

A diminuição do valor da temperatura de ar leva as temperaturas do regenerador a caírem, isso porque como a temperatura da carga injetada afeta diretamente a queima do coque, o regenerador e conseqüentemente suas variáveis, são os primeiros afetados quando ocorrem modificações nessa variável.

Como houve elevação da temperatura do catalisador regenerado, houve elevação também na temperatura de saída do *riser* e na severidade da reação (gráficos a seguir).

Na Figura 39 pode-se observar o comportamento da variável T_{RX} (temperatura do *riser*), a perturbação dada na variável T_{AI} . Essa temperatura deve ser monitorada e controlada para permitir a obtenção de uma conversão adequada da reação de craqueamento. O gráfico mostra a elevação da temperatura em decorrência da elevação na temperatura de ar no regenerador e a diminuição com a redução da temperatura, como o regenerador teve o valor de suas temperaturas reduzidos o catalisador injetado no *riser* também terá sua temperatura diminuída interferindo assim no *riser* e nas reações de craqueamento e por isso vai influir também na conversão da reação (severidade da reação). Essa resposta observada na variável mostra a explícita interação entre as variáveis controladas, mas não condições ótimas de processo, visto a diferença obtida na resposta do controle e o valor desejado para a variável (*setpoint*). A Figura 38 mostra a elevação da severidade da reação, resposta do sistema à perturbação causada pela variável temperatura de ar no regenerador.

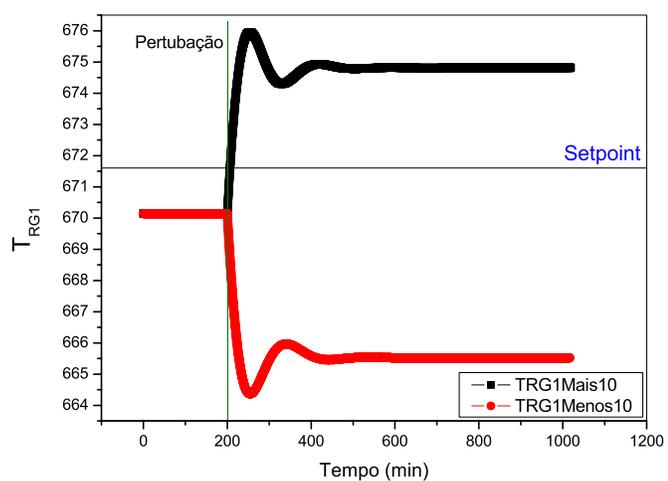


Figura 36: Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável T_{AI}

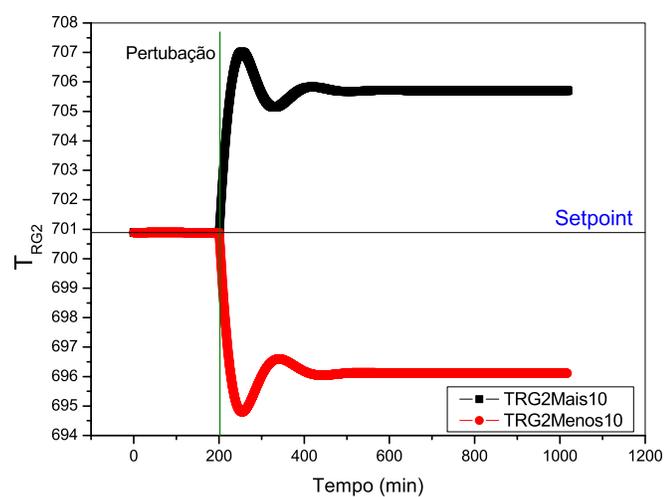


Figura 37: Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável T_{AI}

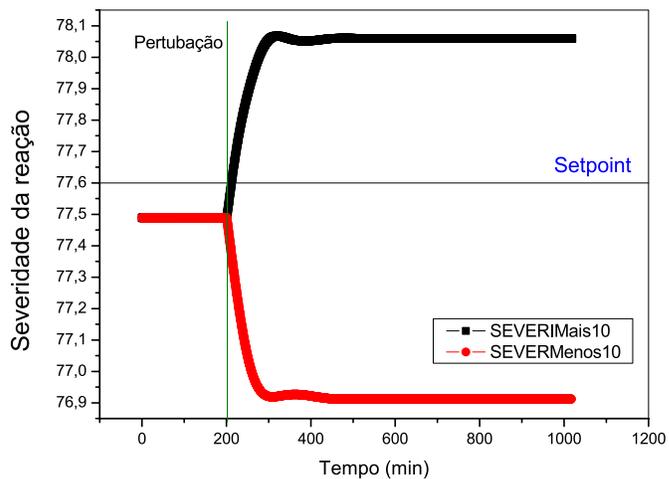


Figura 38: Resposta da variável SEVER a perturbação dada na variável T_{AI}

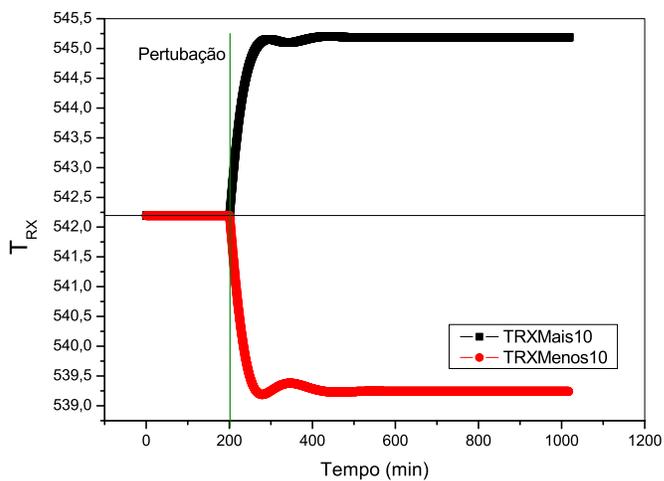


Figura 39: Resposta da variável T_{RX} a perturbação dada na variável T_{AI}

É possível observar a dependência entre essas duas variáveis controladas, claramente visto na expressão de cálculo da severidade que é função de T_{RX} (vide Equações 5.6 e 5.7 no Capítulo 5).

7.2.0.6 Segundo caso: Aplicação do degrau na variável R_{TF} :

Para o segundo caso teste foram implementados duas perturbações degraus de $\pm 10\%$ no valor inicial da variável R_{TF} - Vazão da corrente de alimentação para o *riser*, o valor inicial em estado estacionário da mesma era de $9700m^3/d$ e foi para $10670m^3/d$ com o acréscimo de $970m^3/d$ (+10%) e para $87300m^3/d$ com a redução de -10%. No gráfico pode-se observar também a linha indicando o início da perturbação causada no sistema e o *setpoint* das variáveis controladas.

Em todas as respostas obtidas foram observadas:

- Diminuições das condições iniciais das variáveis analisadas, isso se dá devido à maior quantidade de carga entrando no conversor, sem alterar outras variáveis como, por exemplo, temperatura de ar para queima do coque no regenerador. Esse distúrbio ou aumento na carga de entrada reflete diretamente na necessidade de aumento da temperatura do regenerador, este aumento resulta numa alteração da quantidade de catalisador em circulação, o quê, por sua vez, altera também a temperatura do reator e a conversão, assim tem-se abaixamento na temperatura do *riser* e abaixamento nas temperaturas das fases densas e diluídas do regenerador
- Acréscimos das condições iniciais das variáveis analisadas, quando ocorre a diminuição do valor da vazão de alimentação para o *riser*, isso se dar porque o conversor com menos carga e com demais condições operacionais mantidas, a exemplo das temperaturas, pode levar a obtenção de condições mais favoráveis para algumas variáveis aqui analisadas, como a conversão da reação, isso sem levar-se em conta a quantidade de produto obtido ou demais condições de custos.

Os gráficos obtidos podem ser observadas nas Figuras 40, 41, 42 e 43.

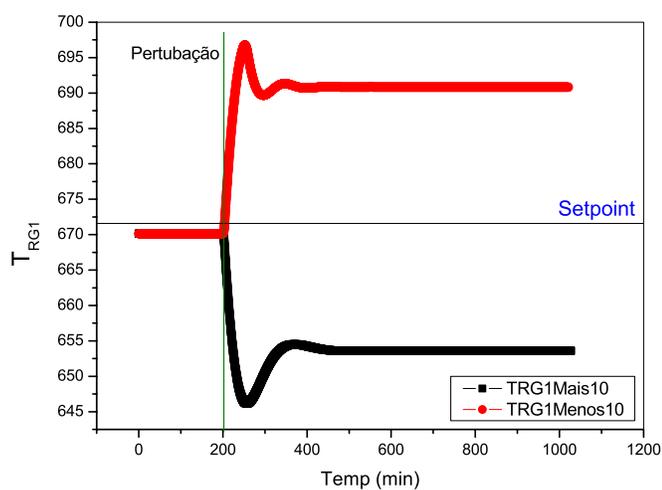


Figura 40: Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável R_{TF}

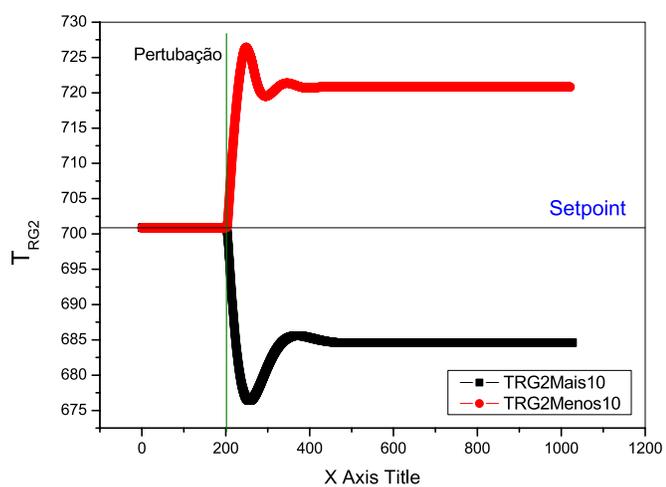


Figura 41: Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável R_{TF}

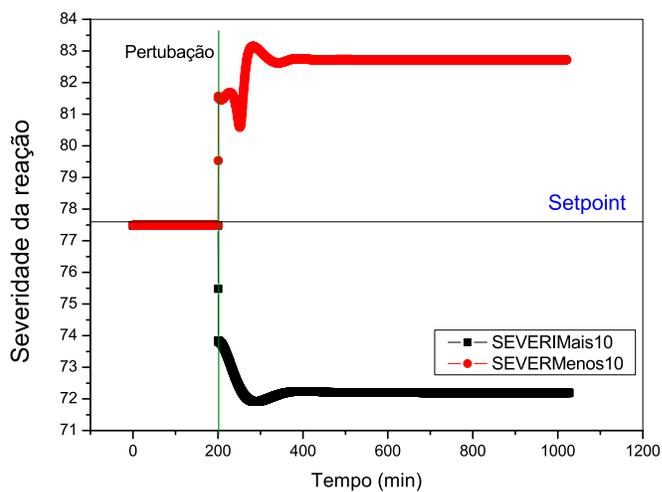


Figura 42: Resposta da variável T_{RG1} a perturbação dada na variável R_{TF}

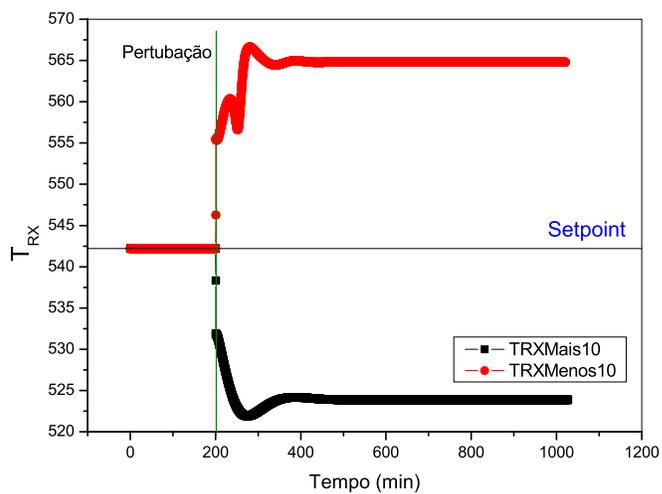


Figura 43: Resposta da variável T_{RG2} a perturbação dada na variável R_{TF}

7.3 Resultados da Segunda Etapa - Estruturação da Rede Neural

Visando o objetivo de implementar um controlador preditivo baseado em modelo, nesta etapa do trabalho foi realizada a estruturação de uma rede neural para ser utilizado como modelo interno desse controlador, segundo a seguinte seqüência: coleta e classificação dos dados, configuração da estrutura da rede, seu treinamento e validação deste treinamento.

Na fase de coleta de dados, procurou-se manter as mesmas condições das restrições (apresentadas no Capítulo 4) e faixas de limites das variáveis manipuladas existentes no programa computacional original e através dele foram gerados os conjuntos de treinamento da rede.

Os dados gerados foram obtidos através de simulações feitas no programa, o qual apresentava três malhas de controle tipo PID (apresentado no Capítulo 4). Para a obtenção deste conjunto de dados foram implementadas perturbações durante a execução do simulador.

As variáveis controladas pelo processo são: temperatura na saída do *riser* (ou temperatura de reação - T_{RX}), temperatura da fase densa do primeiro estágio de regeneração (T_{RG1}), temperatura da fase densa do segundo estágio de regeneração (T_{RG2}) e severidade da reação (*SEVER*). As variáveis manipuladas e suas respectivas limitações se encontram na Tabela 18, a seguir.

Um passo importante na obtenção dos dados foi a devida escolha do conjunto de perturbações a serem introduzidas durante a simulação e a escolha do intervalo de tempo para cada uma delas. Vários testes foram realizados até chegar num conjunto adequado de degraus para cada uma das variáveis de entrada, a freqüência e o tempo entre esses degraus. As demais condições testadas e conseqüentemente o seus conjuntos de dados, após o treinamento ou não eram validados ou mesmo sendo validados quando utilizados

Tabela 17: Conjunto de degraus impostos as variáveis manipuladas

Variáveis manipulada	Valor original	Degraus							Tempo (em cada perturbação)
		1°	2°	3°	4°	5°	6°	7°	
R_{AI}	$221kNm^3/hr$	0	-5	-9	-3	+1	+4	-	500 min
R_{TF}	$9700m^3/d$	0	-6	-10	-4	+2	+7	-	500 min
T_{FP}	0,8200	0	-7	-12	-5	+2	+11	+4	500 min
C_{TCV}	$235^{\circ}C$	0	-5	-8,5	-3	+1	+4	-	500 min

Tabela 18: Variáveis Manipuladas e os seus respectivos valores de limites

	Nome da variável	Valor médio	Valor máximo	Valor mínimo
R_{AI}	Vazão de ar que entra no regenerador	$216kNm^3/hr$	$231kNm^3/hr$	$201kNm^3/hr$
R_{TF}	Vazão da corrente de alimentação	$9000m^3/d$	$10100m^3/d$	$7900m^3/d$
T_{FP}	Temperatura da corrente de alimentação	0,6700	0,92	0,42
C_{TCV}	Abertura da válvula de catalisador regenerado	$215^{\circ}C$	$245^{\circ}C$	$230^{\circ}C$

no controlador não obtiam os resultados esperado com relação a ação do controlador e do comportamento do processo. Assim, obteve-se um conjunto de treinamento que abrange toda a faixa de operação e pode ser usado no treinamento da rede neural. Na Tabela 17, pode-se observar as variáveis manipuladas, os degraus impostos a cada uma delas e o intervalo de tempo entre os degraus. É importante resaltar que as perturbações foram dadas na sequência que se encontram na tabela, assim como a sequência das variáveis, ou seja, começou com R_{AI} , sofrendo sua sequência de perturbações e terminou em T_{FP} , também após toda a sua sequência de perturbações.

Nas Figuras 44, 45, 46 e 47 a seguir, pode-se observar os gráficos que representam as perturbações nas variáveis manipuladas e que resultou no conjunto de treinamento da rede.

O desenvolvimento da estrutura da rede neural foi implementado utilizando a biblioteca FANN - *Fast Artificial Neural Network*, codificada em C++. A FANN é uma biblioteca de código livre que implementa redes neurais artificiais em C com suporte a redes total ou parcialmente conectadas e inclui um *framework* para tratamento e treinamento de conjun-

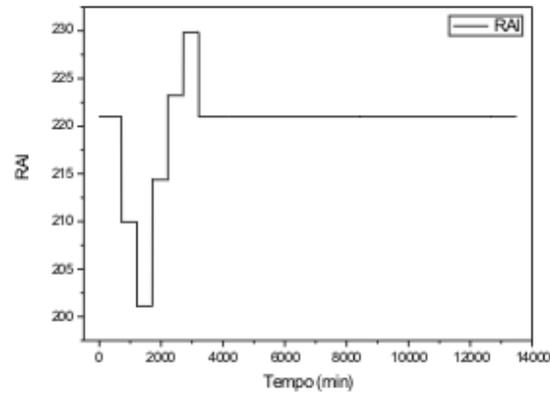


Figura 44: Degraus aplicados na variável manipulada R_{AI} .

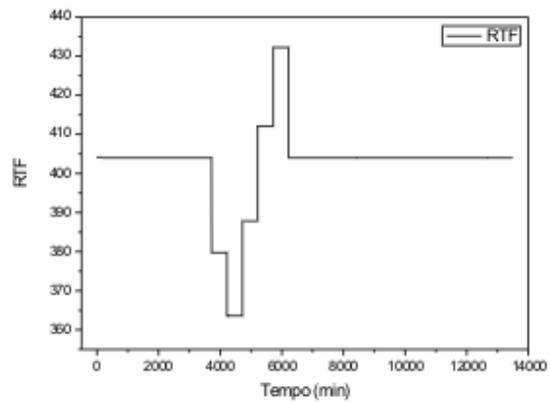


Figura 45: Degraus aplicados na variável manipulada R_{TF} .

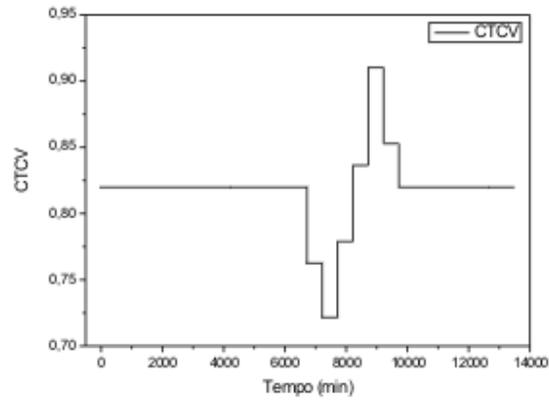


Figura 46: Degraus aplicados na variável manipulada R_{AI} .

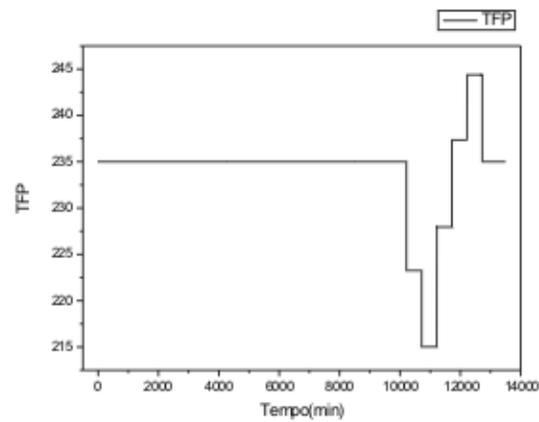


Figura 47: Degraus aplicados na variável manipulada R_{TF} .

tos de dados. Suas principais características são a disponibilidade para uso com diversas linguagens de programação e a velocidade de treinamento. Essa biblioteca foi criada por Steffen Nissen e conta com contribuições de diversos pesquisadores em todo o mundo devido ao seu caráter aberto de desenvolvimento (STEFFEN, 2005).

O algoritmo utilizado para estruturação da rede foi o *backpropagation* com o método de Levenberg-Marquardt para minimização do erro quadrático e a função de ativação escolhida foi a sigmoïdal simétrica (pesos entre -1 e +1).

Para realizar o treinamento da rede neural ainda faltava definir a configuração da rede, ou seja, o número de neurônios na camada de entrada, na camada de saída e na camada oculta.

Para a camada de entrada foram testadas algumas configurações diferentes, como mencionado no Capítulo 6 (Planejamento Estatístico), tentou-se retirar uma das variáveis manipuladas para facilitar no treinamento da rede (variável T_{FP} - Temperatura da alimentação), com isso a rede possuía um total de sete neurônios na camada de entrada (três manipuladas e quatro controladas). Depois do treinamento realizado, apesar de ter-se obtido um erro inferior a 0,005, quando aplicada como modelo interno do controlador essa rede não possuía uma boa representação do comportamento do sistema e um novo treinamento precisou ser realizado com outra configuração de rede.

Então optou-se pela utilização de oito variáveis na camada de entrada como é mais comum na literatura (VIEIRA, 2002), isso porque somou-se as quatro variáveis de saída obtidas no instante atual k às quatro variáveis manipuladas, também no mesmo instante atual, ou seja, T_{RG1_k} , T_{RG2_k} , T_{RX_k} , $SEVER_k$, R_{AI_k} , R_{TF_k} , T_{FP_k} e C_{TCV_k} .

Na camada de saída foram utilizadas as quatro variáveis controladas obtidas num instante futuro $k+1$, ou seja, $T_{RG1_{k+1}}$, $T_{RG2_{k+1}}$, $T_{RX_{k+1}}$, $SEVER_{k+1}$.

Para a camada oculta foi necessário descobrir a quantidade de neurônios ocultos para o caso específico do processo. Após várias simulações, aumentando gradativamente o nú-

mero de neurônios na camada oculta (5, 10, 15, 20, 30, 40 e 50), para poder se encontrar a melhor configuração da rede, foi obtido o número de 20 neurônios na camada oculta. Essa quantidade de neurônios representa um erro inferior a 0,005 (média aritmética dos erros quadráticos entre os neurônios de saída e os valores verdadeiros dos pares de treinamento). As configurações utilizando mais que 20 neurônios apresentaram maior tempo de treinamento e os resultados obtidos, como por exemplo o erro, não sofreram muitas modificações. Este procedimento de treinamento foi citado em Meleiro (2002). Segundo ele, o procedimento mais simples para determinar o número adequado dos nós na camada oculta é aumentar gradativamente o número de neurônios e avaliar a relação entre as capacidades de aproximação e generalização do modelo neural gerado. Quando o procedimento chegar a um ponto onde o aumento do número de neurônios não corresponde a uma melhora significativa do modelo, considera-se que a arquitetura da rede está determinada.

Assim foi possível realizar o treinamento da rede neural a partir da estrutura escolhida para descrever o caso de estudo: 8 neurônios na camada de entrada, 20 na camada oculta e 4 neurônios na camada de saída, para uma rede totalmente conectada. A configuração da rede usada é ilustrada na Figura 48.

Após a realização do treinamento da rede neural iniciou-se a etapa de validação da mesma. A validação é utilizada para verificar a habilidade de generalização do modelo frente às amostras. Assim, essa etapa foi feita a partir de outro conjunto de dados gerados aleatoriamente, diferentes dos dados usados na etapa de treinamento. Nas figuras a seguir, pode-se observar a comparação gráfica desses dois conjuntos de dados diferente, gerados pelo programa original e gerados pela rede neural, os valores dos gráficos encontram-se normalizados (*SEVER* - Figura 50, T_{RX} - Figura 49, T_{RG1} - Figura 51 e T_{RG2} - Figura 52).

Nos gráficos mostrados pode-se observar as curvas de comportamento obtidas pelos dois sistemas. Esse resultado indica que a configuração da rede escolhida, arquitetura 8 x 20 x 4, representa bem o modelo fenomenológico do processo de craqueamento catalítico.

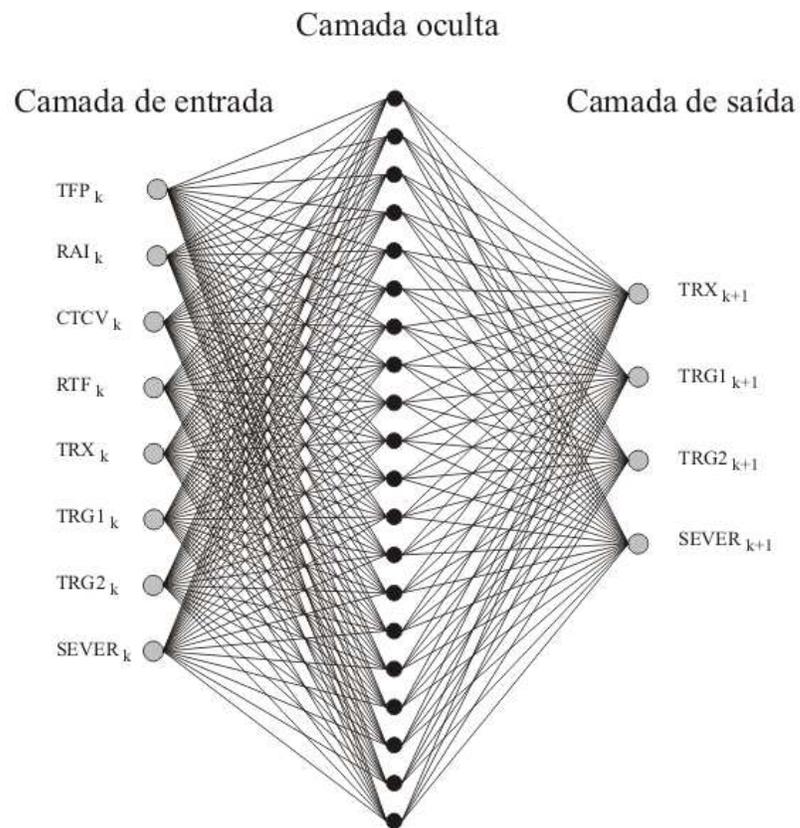


Figura 48: Representação da rede neural proposta, seguindo a seguinte estruturação 8 x 20 x 4.

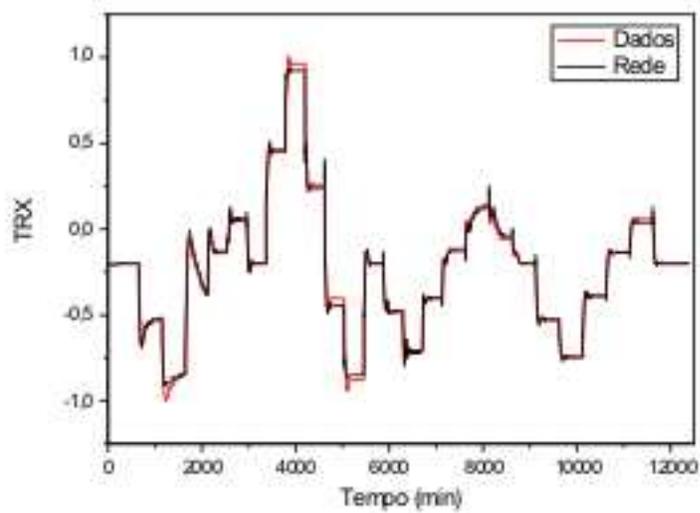


Figura 49: Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável temperatura de saída do *riser*.

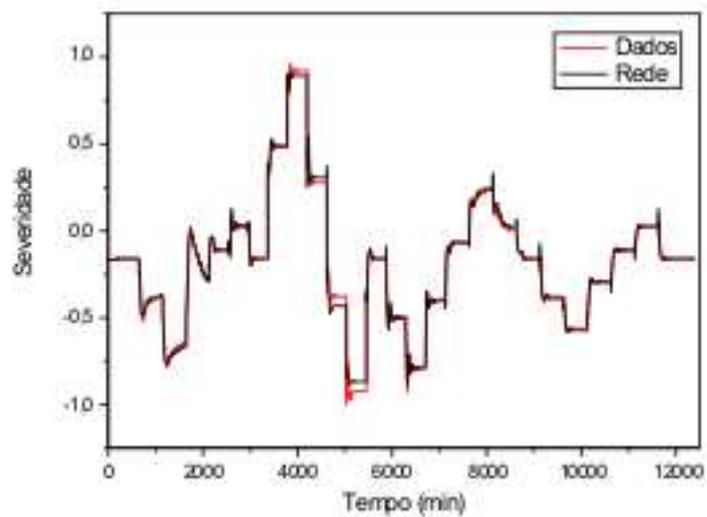


Figura 50: Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável. severidade da reação.

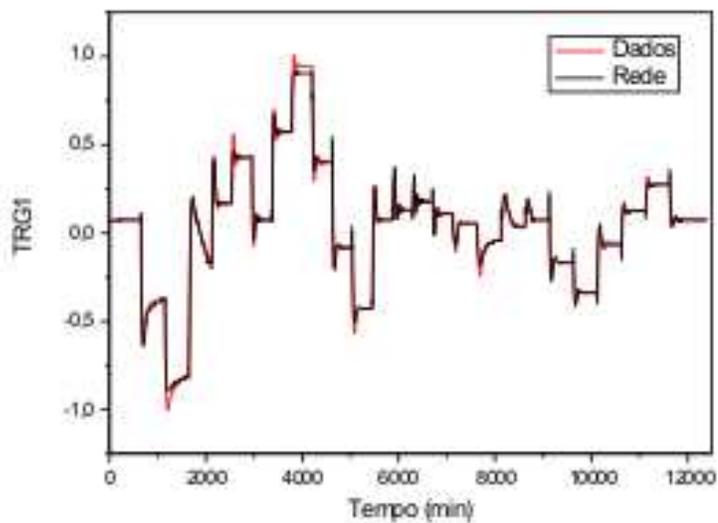


Figura 51: Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável $TRG1$.

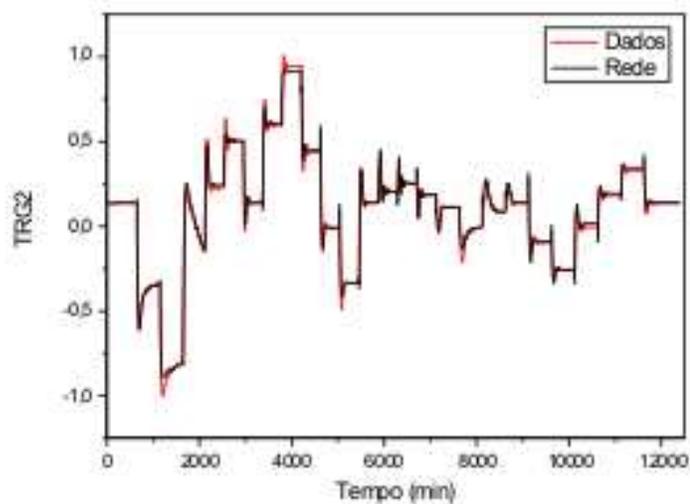


Figura 52: Comparação entre os valores de saída obtidos pelo modelo matemático e a rede neural para uma mesma entrada, para a variável $TRG2$.

7.4 Resultados da Terceira Etapa - Controle Preditivo Utilizando a Rede Neural como Modelo Interno do Sistema

Depois de percorrer todo o caminho de estudo das variáveis, foi feito em paralelo à estruturação, treinamento e validação da rede neural, o desenvolvimento de um controlador preditivo multivariável para o FCC. Esse controle preditivo é do tipo baseado em modelo (MPC - *Model Predictive Control*) e desenvolvido em linguagem FORTRAN.

Como apresentado na etapa passada, a rede neural treinada utilizou um conjunto de dados fornecidos a partir dos degraus nas variáveis manipuladas, assim a estratégia de controle desenvolvida prevê a atuação em todas as variáveis manipuladas simultaneamente, ou seja, foi desenvolvido um controlador multivariável.

A estratégia de controle desenvolvida pode ser assim descrita: durante a simulação são obtidos os dados das variáveis controladas e manipuladas que são as entradas para o controle. O algoritmo de controle resolve um problema de minimização da função objetivo a qual utiliza um modelo baseado em rede neural para prever a resposta dessas ações nas variáveis controladas em um dado número de horizontes de predição, dentro da função objetivo descrita na Equação 3.14, na qual se minimiza o erro entre as trajetórias de referência e as variáveis controladas e os degraus na ação de controle. Os resultados dessas predições resultam nas ações do controlador, em todo horizonte de controle. Seleccionadas as ações que minimizam as diferenças entre as trajetórias de referência e as variáveis controladas no horizonte de controle, a primeira ação de controle nas variáveis manipuladas é enviada de volta ao programa do modelo fenomenológico gerando os dados de impressão de resultados e então todo o ciclo se repete. Este procedimento é mostrado esquematicamente na Figura 53.

A minimização da função objetivo foi realizada empregando-se a rotina LCONF da biblioteca IMSL. Na Figura 53 pode-se observar um esquema do sistema de controle predi-

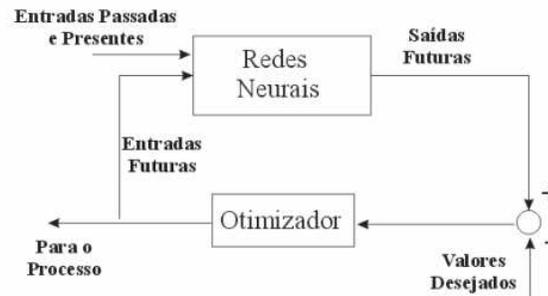


Figura 53: Diagrama de bloco representando a estratégia de controle.

tivo proposto com a rede neural como modelo interno, ou seja, pode-se observar o controle atuando sobre as quatro malhas (U_1 , U_2 , U_4 e U_8) de processo, malhas essas já descritas no Capítulo 4.

Várias simulações foram realizadas para ajustes do controlador preditivo, pois era necessário encontrar valores satisfatórios para o horizonte de predição N_P , o horizonte de controle N_C , e os valores de *lambda* e *alfa* (λ , α), que representam os fatores de ponderação das ações do controle.

Durante essas simulações foram testados vários horizontes de predição (5, 10, 15, 20, 25, 30, 40 e 50) sendo escolhido apenas aquele que representava resultados significativos, assim foi escolhido um horizonte de predição N_P igual a 20 para um horizonte de controle N_C igual a 1, pois valores de N_C acima de 1 apresentaram dificuldades no ajuste do controlador.

Para os fatores de ponderação nas ações de controle (λ , α), pequenos ajustes nos valores representavam grandes alterações no comportamento do controlador e conseqüentemente o sistema estacionava em valores muito diferentes dos *setpoints* esperados para as variáveis controladas. Assim, depois de muitas simulações o valor que melhor representou desempenho do controlador foi igual a 1 para ambas as variáveis.

Para mostrar a ação do controlador MPC-Neural no processo, foram dadas duas per-

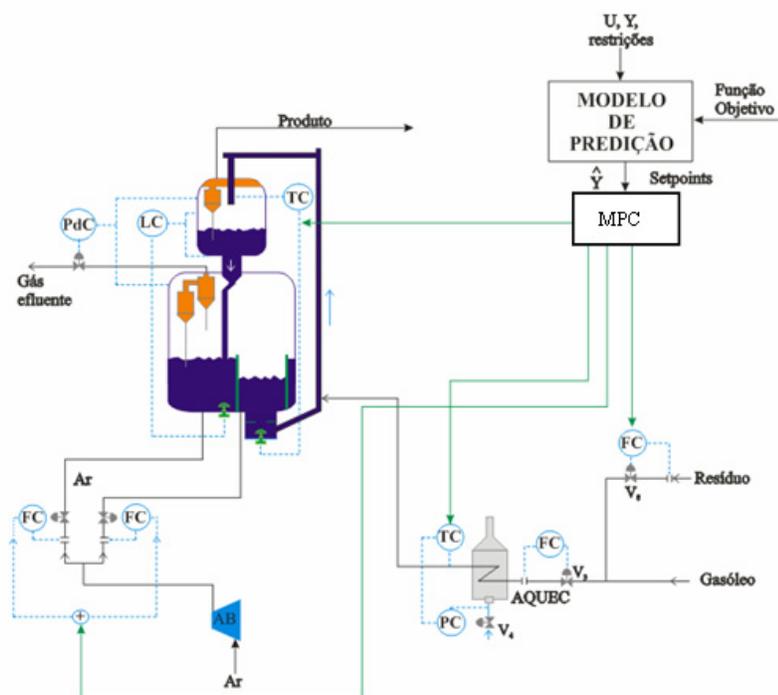


Figura 54: Esquema do sistema de controle do FCC - Rede Neural como modelo interno do controlador preditivo, inserido no controle convencional do processo.

turbações na variável R_{TF} - vazão da corrente de alimentação. Na primeira alterou-se seu valor de $9700m^3/d$ para $10670m^3/d$, ou seja, foi dado um acréscimo de $970m^3/d$ ou +10%. (T_{RG1} - Figura 55, T_{RG2} - Figura 56, T_{RX} - Figura 57 e $SEVER$ - Figura 58)

Pelos gráficos mostrados, pode-se observar que o controlador MPC-Neural conseguiu levar o sistema a estabilidade, após a perturbação, para valores próximos ao *setpoint* das variáveis controladas.

No segundo teste alterou-se seu valor de $9700m^3/d$ para $10185m^3/d$, ou seja, foi dado um decréscimo de $485m^3/d$ ou +5%. (T_{RG1} - Figura 59, T_{RG2} - Figura 60, T_{RX} - Figura 61 e $SEVER$ - Figura 62)

Após oscilações o controlador, a exemplo do que aconteceu anteriormente para o incremento de +10%, o sistema (com a perturbação de +5%), apresentou uma estabilização e com valores próximos aos desejados das variáveis controladas.

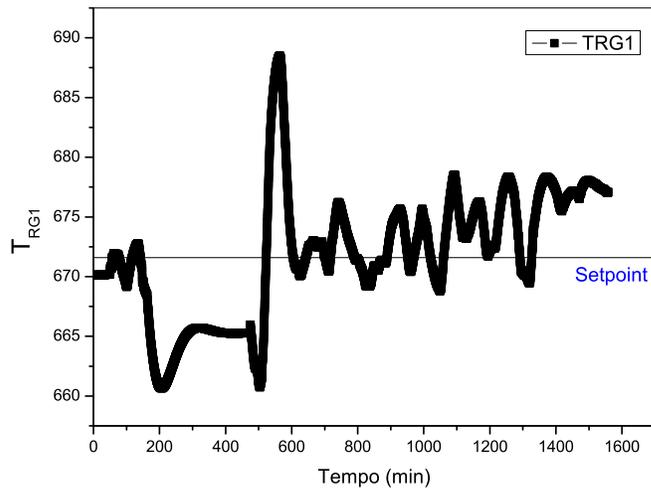


Figura 55: Comportamento da variável T_{RG1} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

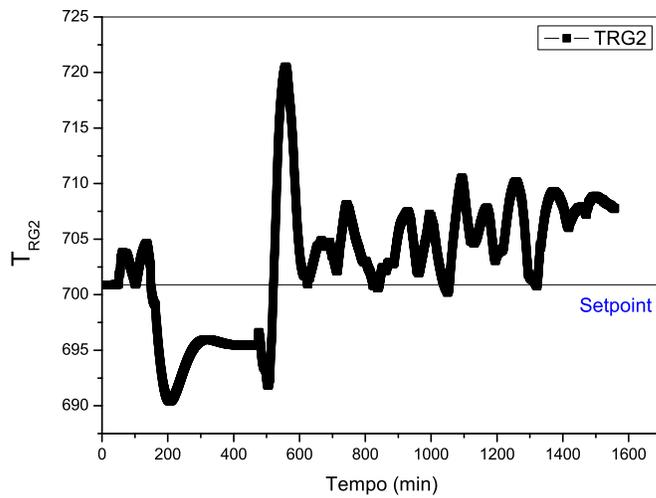


Figura 56: Comportamento da variável T_{RG2} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

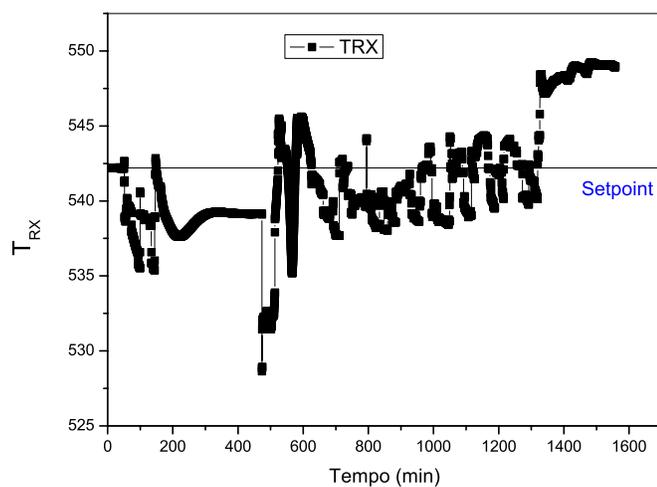


Figura 57: Comportamento da variável T_{RX} a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

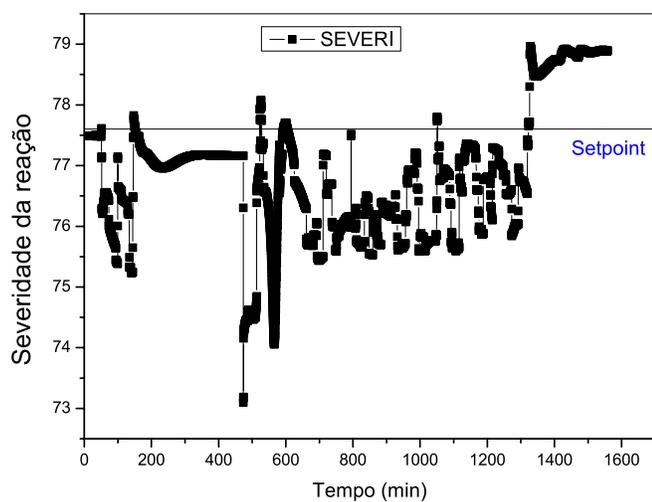


Figura 58: Comportamento da variável $SEVERI$ a perturbação (+10%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

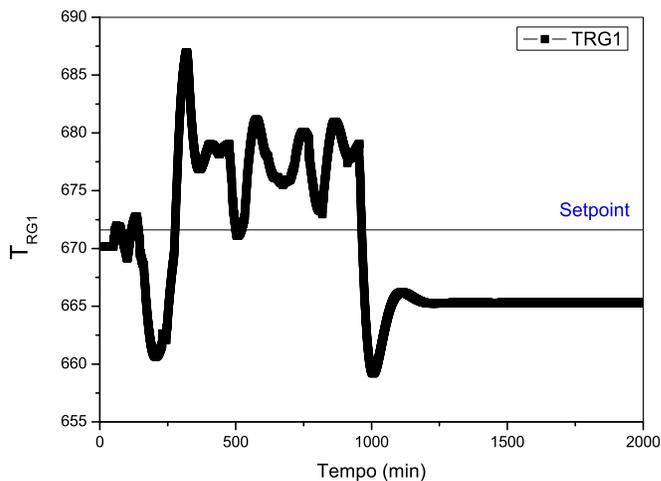


Figura 59: Comportamento da variável T_{RG1} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

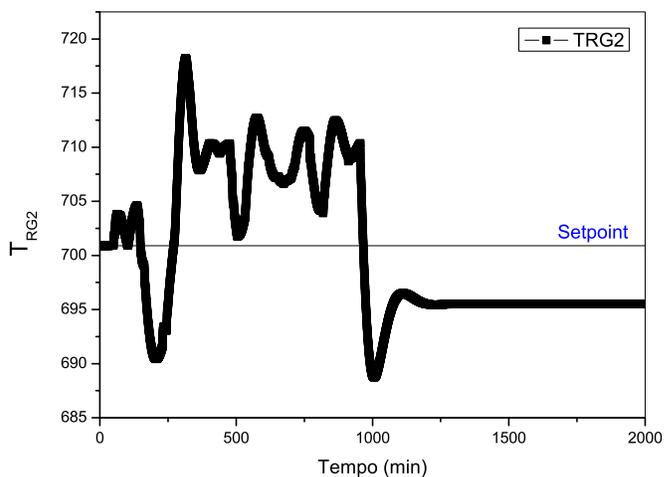


Figura 60: Comportamento da variável T_{RG2} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

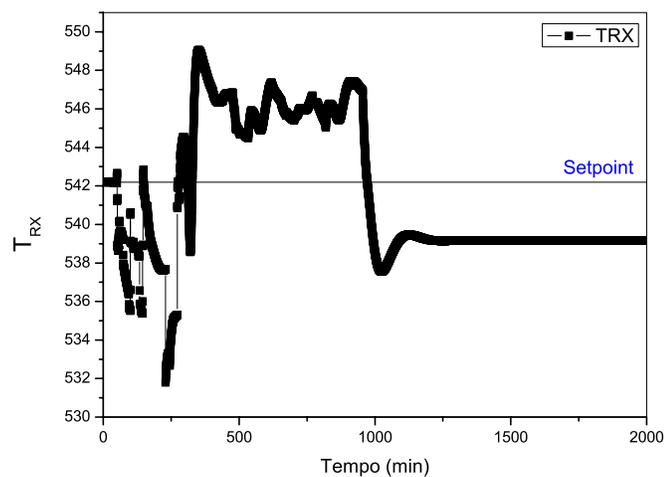


Figura 61: Comportamento da variável T_{RX} a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

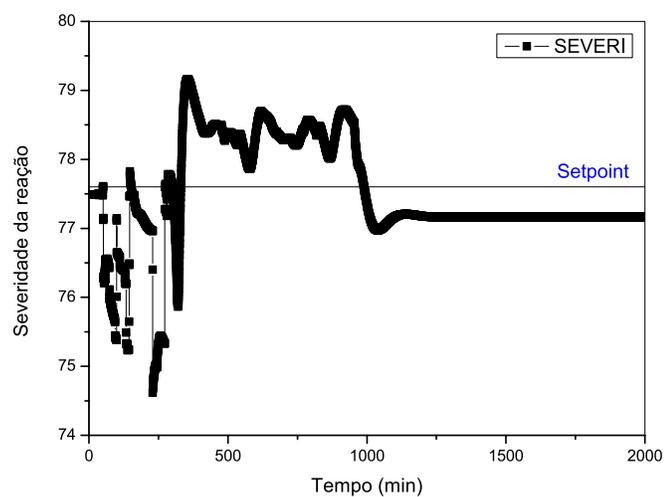


Figura 62: Comportamento da variável $SEVER$ a perturbação (+5%) na variável R_{TF} , sistema sob ação do controlador MPC-Neural.

7.4.1 Comparação Entre o Controlador Preditivo (Rede Neural como Modelo Interno) e o Modelo Fenomenológico com o PID

Para comparação e validação da estrutura de controle montada, comparou-se os dados obtidos com o controlador preditivo utilizando como modelo interno a rede neural, com o modelo fenomenológico com o controlador PID.

Nos gráficos a seguir pode-se observar as duas curvas, seus comportamentos e os *setpoints* esperados para cada uma das variáveis controladas, ou seja, T_{RX} (temperatura da saída do *riser*), T_{RG1} (Temperatura da fase densa do primeiro estágio do regenerador), T_{RG2} (Temperatura da fase densa do segundo estágio do regenerador) e *SEVER* (Severidade da reação).

Foram implementadas duas perturbações, em cada uma das estratégias de controle, de $\pm 10\%$ no valor inicial da variável T_{AI} - Temperatura de ar para o regenerador, o valor inicial da mesma era de 190°C e com o incremento foi para 209°C , ou seja, um acréscimo de $+19^{\circ}\text{C}$ ou 10% para o primeiro caso e no segundo o valor da variável foi alterado de 190°C (seu valor original) para 171°C (-10%).

Nos gráficos a seguir pode-se observar comportamentos distintos para as duas perturbações implementadas no sistema ($\pm 10\%$ na variável T_{AI}). No conjunto de Figuras 65, 66, 63 e 64 têm-se os gráficos que representam o comportamento das variáveis controladas quando essas sofrem uma perturbação positiva de $+10\%$ no valor original da variável perturbação e nas Figuras 69, 70, 67 e 68 têm-se os gráficos para a perturbação negativa -10% em T_{AI} .

7.4.1.1 Primeiro caso - $T_{AI} +10\%$

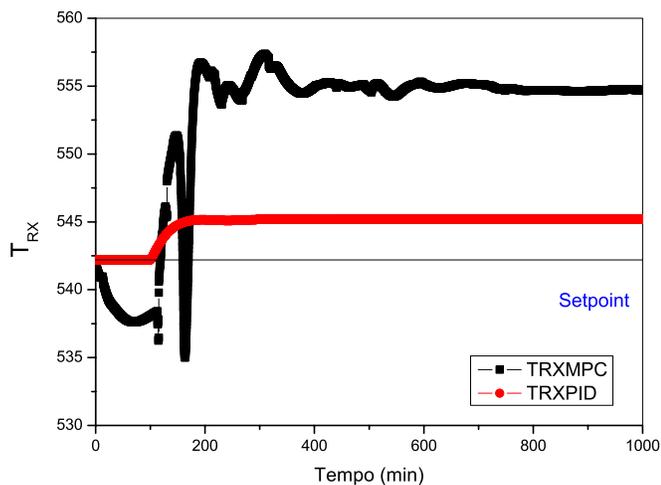


Figura 63: Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RX}

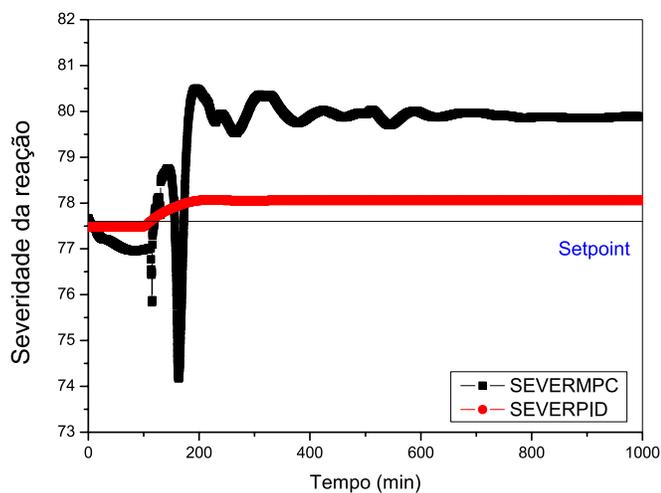


Figura 64: Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável Severidade

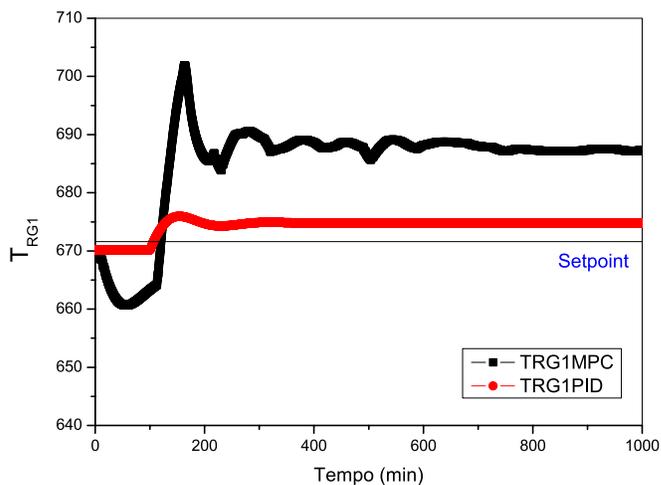


Figura 65: Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG1}

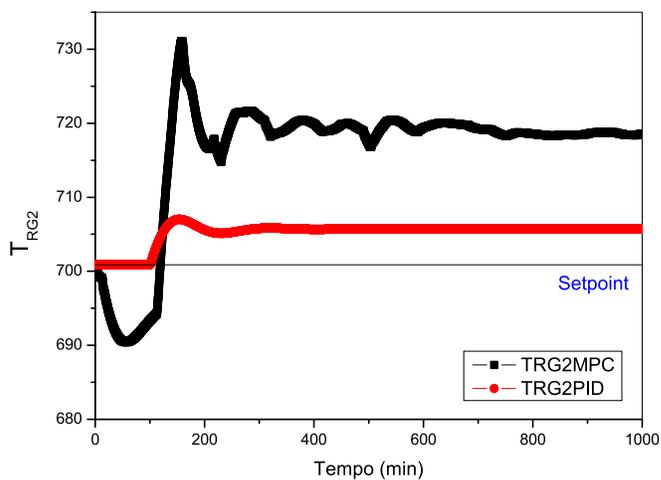


Figura 66: Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG2}

7.4.1.2 Segundo caso - T_{AI} -10%

Pelo gráficos pode-se notar que quando perturba-se o sistema para +10% no valor de T_{AI} o controlador MPC-Neural ainda não apresenta resultados satisfatórios quando comparado com os resultados apresentados pelo controlador PID, apesar de conseguir manter o comportamento do processo próximo ao *setpoint* e dentro dos limites estabelecidos para as variáveis. Isso pode ocorrer pela discrepância e imperfeições das condições apresentadas pelos dois controladores, visto que a perturbação foi aplicada no MPC-Neural sem a real estabilização do sistema diferentemente do que ocorre com o controlador PID.

Por outro lado para a perturbação de -10% no valor original de T_{AI} o controlador MPC-Neural tende a não ter *offset* em relação ao *setpoint*, mesmo apresentando mais oscilações que o PID. O controlador alcança valores próximos aos valores desejados para variáveis controladas, tendendo a estabilização do sistema.

A comparação entre os valores obtidos pelo controlador DMC, implementado e baseado no trabalho de Moro (1992) e o controlador preditivo desenvolvido não será realizada porque sua estratégia de controle atua no sentido de maximizar a severidade da reação para produzir um aumento na produção de *nafta*, o que não é feito diretamente no controlador preditivo baseado em rede neural neste trabalho.

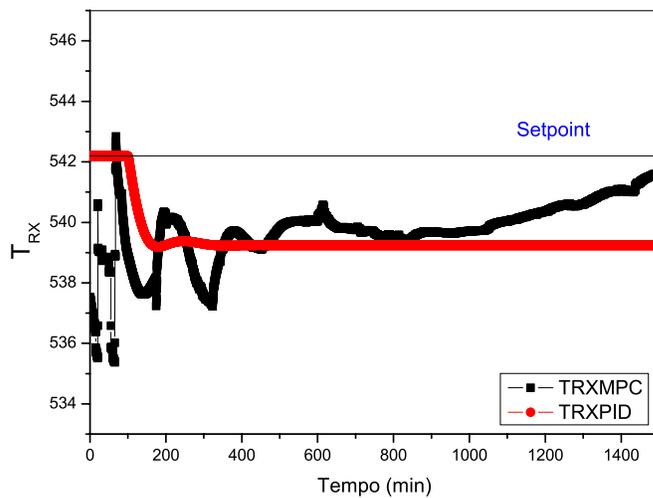


Figura 67: Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RX}

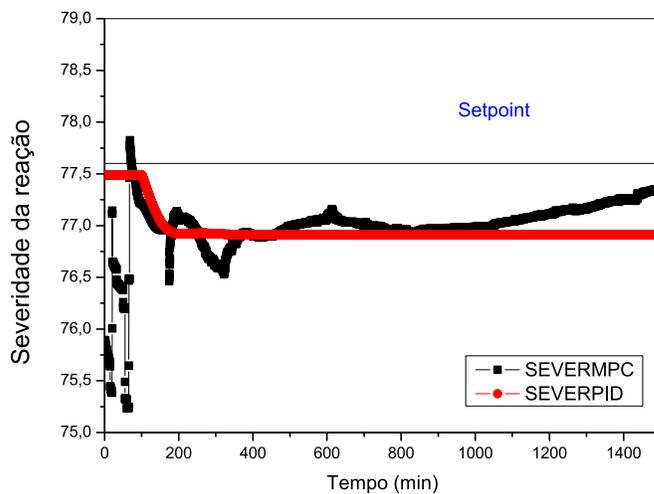


Figura 68: Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável Severidade

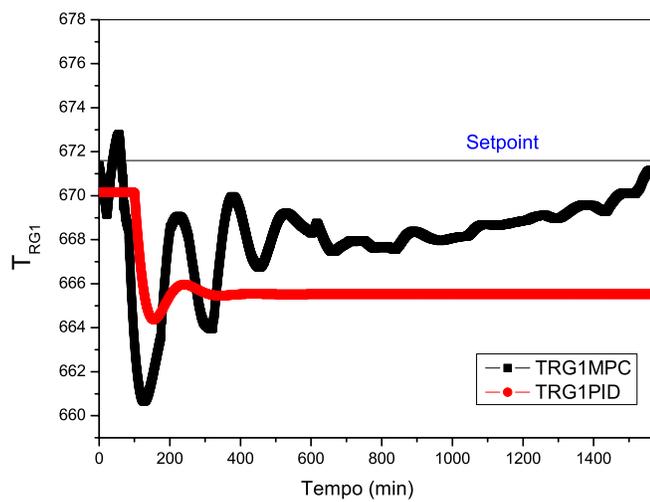


Figura 69: Comparação entre as respostas obtidas pelo sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG1}

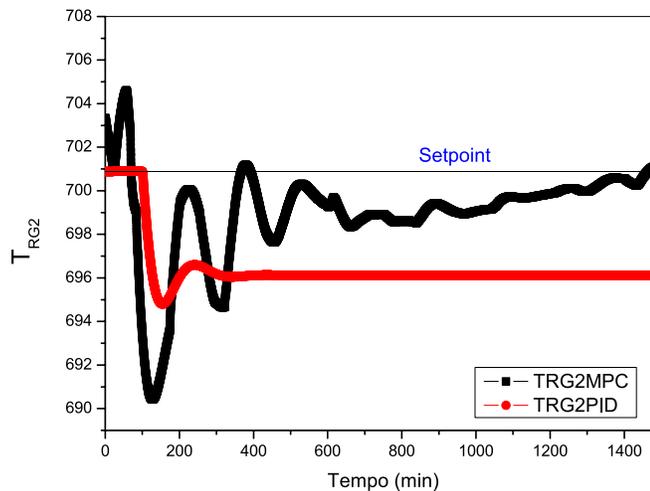


Figura 70: Comparação entre as respostas obtidas sistema com controle PID e com o controle preditivo com rede neural - Variável T_{RG2}

7.5 Conclusão

Neste Capítulo foram apresentados os resultados para as etapas de simulação e análise do comportamento do processo, do programa computacional, da rede neural e do desenvolvimento do controle preditivo realizados do projeto.

Na etapa do estudo do comportamento do processo foram analisadas todas as restrições e variáveis do processo. Essas análises estão representadas nos gráficos do estudo realizado sobre as perturbações feitas no sistema e a análise das respostas obtidas pelo programa computacional. Os resultados ajudaram a avaliar o comportamento da unidade sujeita à ação apenas de controladores PID que mantêm a segurança da operação. Isto permitiu verificar a influência das variáveis perturbadas no comportamento do sistema.

Na segunda etapa, da estruturação da rede neural, foi sugerida um estrutura composta de 8 neurônios na camada de entrada, 20 neurônios na camada oculta e 4 neurônios na camada de saída. Os resultados foram satisfatórios, obtendo uma rede que reproduziu o comportamento do processo.

Na terceira etapa, do desenvolvimento do controle preditivo, foi elaborada uma estrutura onde a rede neural estava inserida no controlador preditivo. Várias simulações foram realizadas na tentativa de ajuste do controlador e após muitas simulações, para o ajuste do controlador, foi obtida uma configuração que apresentou bons resultados, apesar do controlador ainda necessitar de mais ajustes para um funcionamento ideal.

8 *Simulador FCCGUI*

8.1 Introdução

Neste capítulo é apresentada a interface gráfica desenvolvida para o simulador do processo de craqueamento catalítico batizado de FCCGUI - *Fluid Catalytic Cracking Graphical User Interface*. Esta interface oferece ao usuário uma forma mais prática e cognitivamente confortável para realização de simulações, acompanhamento de variáveis e estudo de estratégias de controle.

8.2 Simulador FCCGUI

O FCCGUI é um simulador desenvolvido utilizando duas linguagens de programação diferentes, Delphi e FORTRAN, as quais combinadas proporcionaram a criação de um programa robusto, com uma interface amigável para o usuário e bastante didático para visualização de diferentes condições operacionais para o processo de craqueamento catalítico. Uma das características mais úteis do FCCGUI é o fato de ele operar em um “loop infinito” que só é interrompido quando o usuário assim desejar. Isso permite estudar as respostas do sistema a entradas, planejadas previamente ou não, ou modificações nas configurações dos controladores de forma instantânea e sem a necessidade de se recorrer a outros aplicativos.

A tela principal é apresentada na Figura 71, nela pode-se optar pela visualização grá-

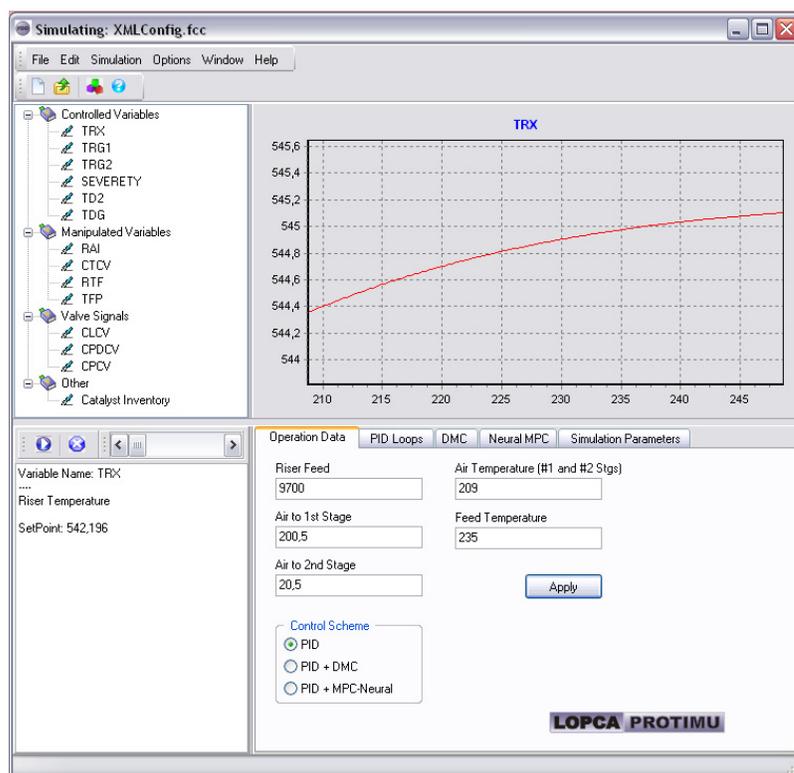


Figura 71: Tela principal.

fica das variáveis envolvidas, o tipo de controlador que se quer agindo sobre o processo e oferece a opção de alteração de outros parâmetros envolvidos, como a configuração dos controladores e do simulador.

Na tela principal do programa tem-se uma barra de ferramentas padrão, onde é possível carregar os dados para a simulação a partir de um arquivo de dados já especificado, salvar e configurar os parâmetros do conversor FCC, Figura 72.

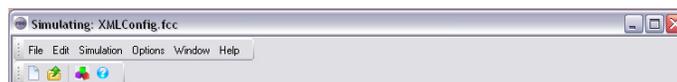


Figura 72: Barra de ferramentas.

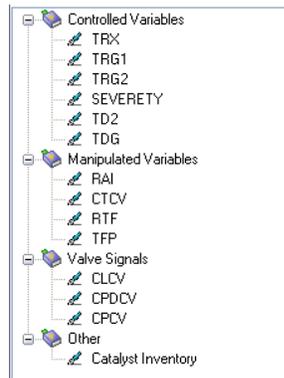


Figura 73: Janela para escolha da variável para acompanhamento.



Figura 74: Janela para ativação da simulação e visualização da descrição das variáveis.

Na parte esquerda da tela principal, Figura 73 tem-se uma janela para escolha das variáveis que se deseja visualizar, o usuário pode optar por visualizar o comportamento das variáveis controladas, manipuladas, válvulas e o inventário do catalisador no reator. Quando a variável é escolhida, o usuário tem a opção de escolher a forma de visualização do gráfico e a escala.

Na parte inferior esquerda tem-se os comandos para iniciar, pausar e parar/resetar, a simulação, uma barra de rolagem para escolha da velocidade de simulação e uma breve descrição da variável que foi escolhida para visualização (Variável, Nome e *Setpoint*).

Na parte superior direita fica o gráfico, o qual pode ser visualizado de duas formas, em tempo de execução ou visualizar num determinado período de tempo. As duas formas de visualização do comportamento das variáveis se encontram nas Figuras 75 e 76.

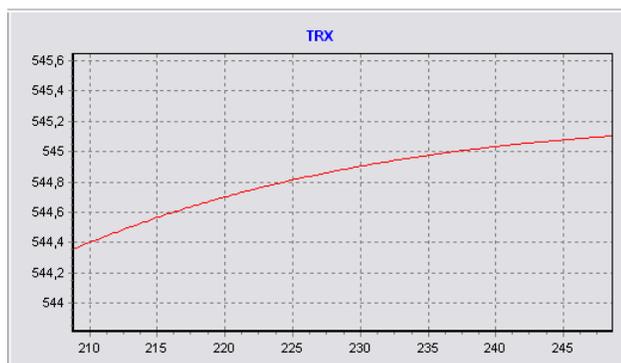


Figura 75: Gráfico da variável T_{RG1} em tempo de execução.

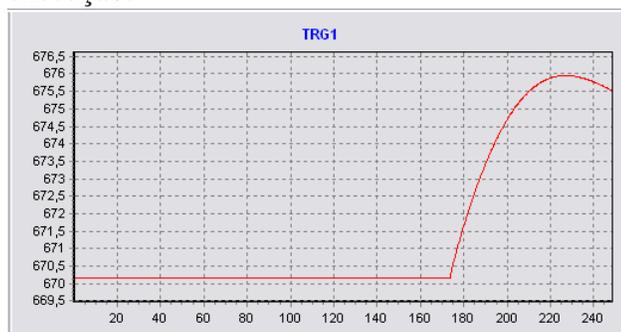
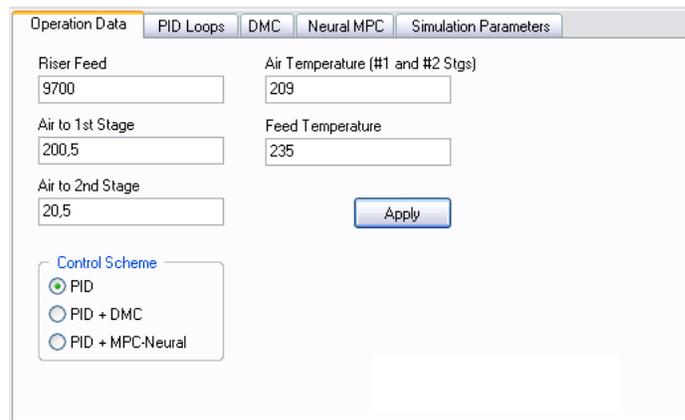


Figura 76: Gráfico da variável T_{RG1} após um determinado período de tempo.

Na parte inferior direita está a janela para configuração do simulador e controlador que podem ser alterados ao longo da simulação. São cinco abas: Dados de operação, parâmetros do controlador PID, parâmetros do DMC, parâmetros do MPC - com a rede neural e por último os parâmetros do simulador. A janela com os dados de operação está na Figura 77, nela pode-se visualizar as variáveis manipuladas, que podem ser alteradas



The screenshot shows a software window titled 'Operation Data' with several tabs: 'PID Loops', 'DMC', 'Neural MPC', and 'Simulation Parameters'. The 'Operation Data' tab is active. It contains the following fields and controls:

- Riser Feed:** Input field with value 9700.
- Air Temperature (#1 and #2 Stgs):** Input field with value 209.
- Air to 1st Stage:** Input field with value 200,5.
- Air to 2nd Stage:** Input field with value 20,5.
- Feed Temperature:** Input field with value 235.
- Apply:** A blue button to apply the changes.
- Control Scheme:** A section with three radio buttons:
 - PID
 - PID + DMC
 - PID + MPC-Neural

Figura 77: Janela com os dados de operação.

para gerar perturbações no sistema e a estratégia de controle para o sistema (PID, DMC, MPC - Rede Neural).

Nas Figuras 78 e 79, são encontradas os parâmetros relacionados com os controladores PID e DMC.

Na Figura 80 pode-ser observar a janela com os parâmetros do simulador, que podem ser alterados para direcionar a simulação de acordo com o estudo que estiver sendo realizado.

Na aba correspondente ao MPC - Rede Neural é possível alterar os parâmetros da rede neural treinada (modelo interno do controlador MPC), ou se se desejar realizar outro treinamento da rede com valores diferentes para o tempo entre cada uma das perturbações impostas ao sistema, por exemplo. Depois de realizado esse novo treinamento é possível carregá-lo e visualizá-lo graficamente.

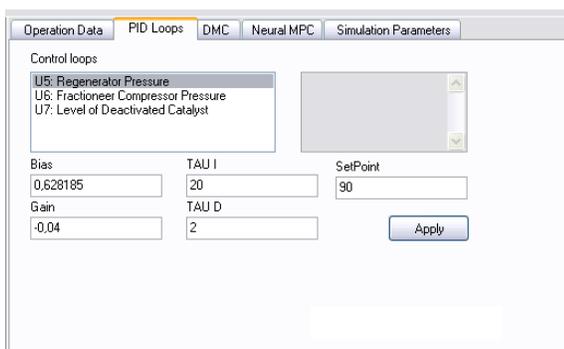


Figura 78: Janela com os parâmetros do PID.

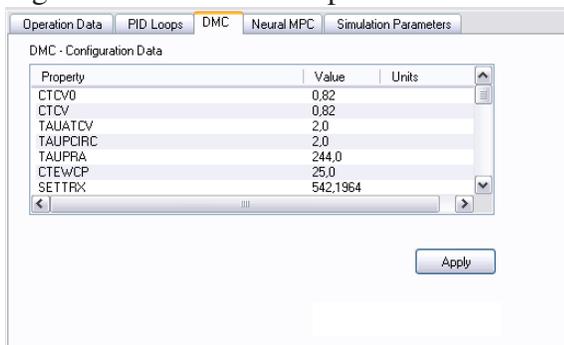


Figura 79: Janela com os parâmetros do DMC.

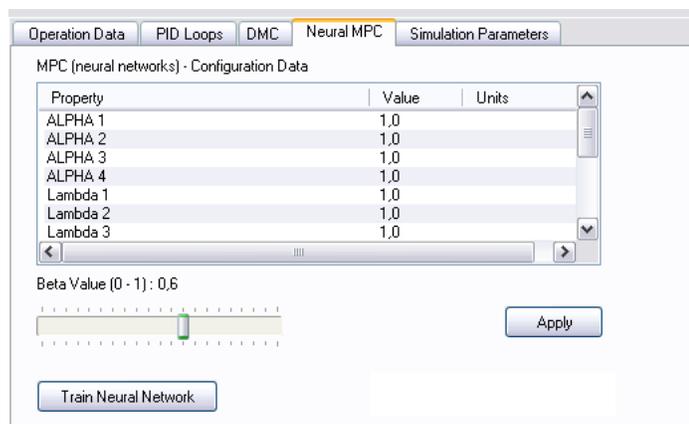


Figura 80: Janela com os parâmetros do simulador.

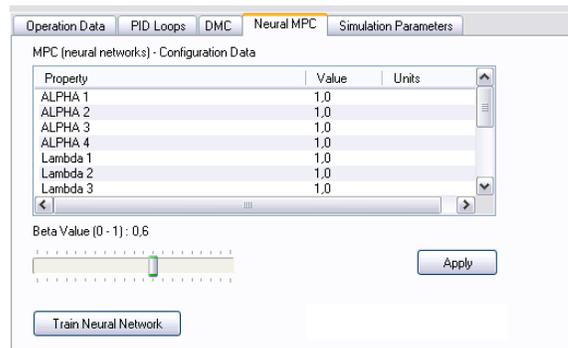


Figura 81: Janela com os parâmetros do MPC - Rede Neural.

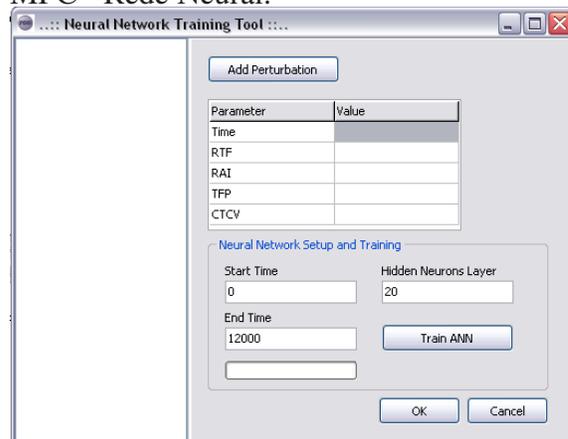


Figura 82: Janela para o treinamento de uma nova rede neural.

8.3 Conclusão

Neste capítulo foram apresentadas as telas que compõem a interface gráfica desenvolvida a partir do simulador do processo de craqueamento catalítico. Essa interface permite uma maior interação com o simulador, possibilitando o estudo das variáveis com maior facilidade e praticidade. Com a alteração de dados, parâmetros e estratégias de controle é possível realizar acompanhamentos e desenvolver propostas a partir das respostas apresentadas pelas variáveis manipuladas e controladas do processo.

9 *Conclusão*

O estudo do processo de craqueamento catalítico (adequação de um modelo matemático) e o desenvolvimento de um controlador preditivo com o modelo interno baseado em redes neurais foram os principais objetivos desta dissertação de mestrado. Para alcançar o objetivo proposto foi desenvolvido um simulador baseado no modelo matemático proposto por Moro e Odloak (1995).

Antes de implementar o controlador foram necessários vários estudos sobre o comportamento do sistema e principalmente das variáveis manipuladas e controladas. Para auxiliar no estudo dessas variáveis foi realizado um planejamento estatístico onde foram classificadas de acordo com o efeito que as mesmas provocavam no sistema, bem como também foram realizadas simulações apenas com o controlador PID agindo em três malhas de controle do processo (válvulas de pressão e vazão), respondendo a perturbações no sistema. Assim pode-se acompanhar as respostas das variáveis e confirmar as tendências de comportamento esperadas.

Um passo importante para se chegar ao objetivo foi o treinamento da rede neural. Várias configurações foram testadas, até que se chegou a que melhor representou o comportamento do processo, configuração 8 x 20 x 4 (oito neurônios na camada de entrada, vinte na camada oculta e quatro na camada de saída). Com isso foi possível implementar essa rede no controlador preditivo e realizar os ajustes necessários para que o controlador conseguisse manter o sistema sob controle e próximo ao *setpoints*. Os gráficos apresentados na Seção 7.4 mostram que o controlador após sofrer perturbações consegue manter o sistema

dentro das faixas de limites e restrições de processo e para algumas condições operacionais consegue apresentar resultados satisfatórios quando comparado com o controlador PID. O controlador MPC-Neural consegue, para uma perturbação de -10% do valor inicial da variável T_{AI} , alcançar resultados melhores que o PID, visto que pelas curvas plotadas o sistema aproxima-se mais do *setpoint* das variáveis controladas.

Para completar o trabalho foi desenvolvida uma interface gráfica para o simulador. Essa permitiu aliar os três tipos de controle proposto (PID, DMC e MPC - com a rede neural), numa interface mais prática para o estudo e visualização do comportamento das variáveis envolvidas no processo. Para trabalhos futuros podem ser sugeridas as seguintes ações:

- i. O planejamento estatístico é uma importante ferramenta para análise de efeitos de variáveis, planejamento de experimentos e simulações. Nesta dissertação foram feitos planejamentos para estudo das variáveis manipuladas. Apenas para a variável TFP (temperatura de alimentação) não foram alcançadas conclusões definitivas sobre seu efeito. Logo, propõem-se novos planejamento/estudos desta variável para determinar o real efeito dela no processo de craqueamento.
- ii. Para conseguir bons resultados do controlador preditivo com a rede neural como modelo interno, foram realizadas várias simulações no sentido de ajuste dos fatores de ponderação nas ações de controle. Ao final das simulações decidiu-se considerar esses valores como sendo igual a 1. Para trabalhos futuros propõem-se novas simulações para estudo de outros valores para esses fatores e seu impacto sobre o resultado esperado para o controlador.
- iii. O Simulador FCCGUI, simulador computacional desenvolvido neste trabalho, apresenta-se como uma excelente ferramenta para estudos de caso, comparações entre estratégias de controle e variáveis de processo. Em trabalhos futuros propõem-se a utilização deste simulador para os estudos de outras condições de operação.

-
- iv. Para minimização da função objetivo foi utilizada neste trabalho a rotina LCONF da biblioteca IMLS. Apesar de alcançar os objetivos, essa rotina mostrou-se lenta para resolução do problema. Assim, propõem-se a análise de outras rotinas de minimização para o controlador baseado em modelo neural.
 - v. Realizar perturbações seqüenciadas para avaliar o comportamento das variáveis controladas e verificar a ação das válvulas de processo controladas pelo PID.
 - vi. Avaliar a sensibilidade dos parâmetros da carga nas variáveis manipuladas e controladas.
 - vii. Completar o modelo cinético com outras reações além das consideradas neste trabalho.

Referências

- ABADIE, E. *Craqueamento Catalítico*. Rio de Janeiro, 1997.
- ABU-MOSTAFA, Y. S. Hints. *Neural Computation*, v. 7, p. 192–198, 1995.
- AL, J. M. A. et. Modelling fcc units under steady and unsteady state conditions. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 78, Fevereiro 2000.
- ASSIS, A. J. de. *Identificação e Controle de Processos Não-Lineares Utilizando Redes Neurais*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 2001.
- BATISTA, L. M. F. L. *Desenvolvimento de Software Usando Modelos Determinísticos e Redes Neurais para o Processo de Craqueamento Catalítico*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 1996.
- BODUSZYNSKI, M. M. Div. petrol. chem. am. *Chem. Soc.*, v. 34, n. 2, 1989.
- BOLLAS, G. M. *et al.* Using hybrid neural networks in scaling up an fcc model from a pilot plant to an industrial unit. *Chemical Engineering and Processing*, v. 42, p. 697–713, 2003.
- BROOMHEAD, D. S.; LOWE, D. Multivariable functional interpolation and adaptive control. *Complex Systems*, v. 2, p. 321–355, 1988.
- CAMACHO, E. F.; BORDONS, C. Model predictive control. *Springer-Verlog*, 1999.
- CASTRO, L. N. de. *Análise e Síntese de Estratégias de Aprendizado para Redes Neurais Artificiais*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP, 1998.
- CHEN, S.; BILLINGS, S.; GRAND, P. Non-linear system identification using neural networks. *International Journal of Control*, v. 51, p. 1191–1214, 1990.

- CHURCHLAND, P. S.; SEJNOWSKI, T. J. *The Computational Brain*. Cambridge: MA: MIT Press, 1992.
- CRISTEA, M. V.; AGACHI, S. P.; MARINOIU, V. Simulation and model predictive control of a uop fluid catalytic cracking unit. *Chemical Engineering and Processing*, v. 42, p. 67–91, 2003.
- DEGHANI, A. *et al.* Kinetic model of catalytic cracking in fluid bed reator. In: *The 2nd Oil Gás and Petrochemical Congress*. [S.l.: s.n.], 2000.
- DING, J.; GIDASPOW, D. A bubbling fluidization model using kinetic theory of granular flow. *AIChE Journal*, v. 36, 1990.
- DUARTE, E. R. *Estratégia de Controle Não-linear Baseada em Redes Neurais Artificiais com Aprendizagem On-Line*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 2004.
- ENDER, L. *Redes Neurais Aplicadas em Estratégias de Controle Não-linear*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 2002.
- ERTHAL, R. H. *Modelagem e Simulação Dinâmica de um Conversor de Craqueamento Catalítico*. Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica e de Materiais, CEFET-PR, Curitiba, 2003.
- FILETE, A. M. F. *Controle em destilação batelada: Controle Adaptativo e Controle Preditivo com Modelo Baseado em Redes Neurais Artificiais*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 1995.
- GARCIA, C. E.; MORARI, D. M. P. anda M. Model predictive control: Theory and practive-a survey. *Autemática*, v. 25, p. 335–348, 1998.
- GENTILIN, C. W. J. *Controle preditivo por Modelo Interno Aplicado a Unidade de Craqueamento Catalítico*. Dissertação (Mestrado) — Centro Federal de Educação Tecnológica do Paraná, 2004.
- HAN, I.-S.; RIGGS, J. B.; CHUNG, C.-B. Modelling and optimization of fluidized catalytic crackin process under full and partial combustion modes. *Chemical Engineering and Process*, v. 43, p. 1063–1084, 2003.
- HAYKIN, S. *Redes Neurais - Princípios e Práticas*. Segunda. Porto Alegre: [s.n.], 2004.
- HENSON, M. A.; SERLORG, D. E. Nonlinear process control predivite. *Prentice Hall*, 1997.

- HERNÁNDESZ, E.; ARKUN, Y. Study of the control-relevant proprieties of backpropagation neural network models of nonlinear dynamical systems. *Computers Chemical Engng.*, v. 16, n. 4, p. 227–240, 1992.
- JIA, C.; ROHANI, S.; JUTAN, A. Fcc unit modeling identification and model predictive control, a simulation study. *Chemical Engineering and Processing*, v. 42, p. 311–325, 2003.
- JR., M. B. de S. *Redes Neurais Multicamadas Aplicadas a Modelagem e Controle de Processos Químicos*. Tese (Doutorado) — COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 1993.
- JÚNIOR, C. B. *et al.* Redes neurais artificiais aplicadas para a predição do comportamento dinâmico-mecânico de compósitos de matriz epóxi reforçados com fibras de carbono. *Scientific Electronic Library Online*, v. 12, n. 2, 2008.
- KALOGIROU, S. A. Artificial intelligence for the modeling and control of combustion process: a review. *Process in Energy and Combustion Science*, v. 29, p. 515–566, 2003.
- KOHONEN, T. Self-organized formation of topologically correct feature maps. *Biological Cybernetics*, v. 43, p. 59–69, 1982.
- LANSARIN, M. A. *Modelagem e Simulação da Seção de Conversão de uma Unidade FCC*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, 1997.
- LECUN, Y. Efficient learning and second-order methods. *A Tutorial at NIPS 93*, 1993.
- LI, W. C.; BIEGLER, L. T. Multistep newton-type control strategies for constrained nonlinear process. *Chemical Engineering Research e Design*, v. 67, p. 562–577, 1989.
- LINSKER, R. Self-organization in a perceptual network. *Computer*, v. 21, p. 105–117, 1988a.
- MARTIGNONI, W. P. *Desenvolvimento de Modelagem e Simulação de Risers de FCC Modelo 1-D*. [S.l.], 2000.
- MCCLLOCH, W. S.; PITTS, W. A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical*, v. 5, p. 115–133, 1943.
- MCFARLANE, R. C. Dynamic simulator for a model iv fluid catalytic cracking unit. *AIChE Journal*, 1990.

- MELEIRO, L. A. da C. *Projeto de Aplicação de Controle Baseado em Modelos Lineares, Neurais e Nebulosos*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, 2002.
- MORO, L. F. *Desenvolvimento de um Controlador Preditivo Multivariável para um Conversor Industrial de Craqueamento Catalítico*. Dissertação (Mestrado) — Universidade de São Paulo-USP, 1992.
- MORO, L. F.; ODLOAK, D. Constrained multivariable control of fluid catalytic cracking converters. *J. Proc. Control*, v. 5, n. 1, p. 29–39, 1995.
- NETO, B. de B.; SCARMINIO, I. S.; BRUNS, R. E. *Como Fazer Experimentos - Pesquisa e Desenvolvimento na Ciência e na Indústria*. [S.l.]: Editora da UNICAMP, 2001.
- NORGAARD, M. *et al. Neural Networks for Modelling and Control of Dynamic Systems*. [S.l.]: Springer-Verlag, 2000.
- OLIVEIRA, N. M. C.; BIEGLER, L. T. Na extension of newton-type algoritmos for nonlinear process control. *Automation*, v. 31, n. 2, p. 281–286, 1995.
- PAREEK, V. K. *et al.* Modeling of a non-isothermal fcc riser. *Chemical Engineering Journal*, 203.
- PEIGHT, J. G. *The Chemistry and Technology of Petroleum*. Terceira. [S.l.]: Marcel Dekker Inc, 1998.
- PENTEADO, J. C. *et al.* Modelagem de regeneradores em leito fluidizado em unidades de fcc. In: *Resumos do 30º Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados*. São Carlos-SC: [s.n.], 2002.
- PIMENTEL, W. R. O. *Aplicação de Redes Neurais Artificiais e de Quimiometria na Modelagem do Processo de Craqueamento Catalítico*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 2005.
- RAWLINGS, J. B. Tutorial overview of model predictive control. *IEEE Control Systems Magazine (Special Section - Industrial Process Control)*, p. 38–51, 2000.
- REZENDE, M. C. A. F. *Controle e Otimização de um Reator de Hidrogenação Trifásico*. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, 2003.
- RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations of back-propagation erros. *Nature (London)*, v. 323, p. 533–536, 1986.a.

SAMORJAI, G. Introduction to surface chemistry and catalysis. *John Wiley & Sons Inc.*, 1994.

SANTOS, V. M. L.; CARVALHO, F. R.; JUNIOR, M. B. S. Predictive control based on neural networks: Na application to a fluid catalytic cracking industrial. *Unit Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 15, n. 1, p. 39–49, 1998.

SOETERBOEK, R. Predictive control - a unified approach. *Prentice Hall*, 1992.

STEFFEN. Implementation of a fast artificial neural network library.
<http://leenissen.dk/fann/index.php>, 2005.

TSUO, Y. P.; GIDASPOW, D. Computation of flow patterns in circulating fluidized beds. *AIChE Journal*, v. 36, n. 6, p. 885–896, 1990.

VIEIRA, W. G. *Controle Preditivo e Identificação Via Redes Neurais*. Tese (Doutorado) — Universidade Estadual de Campinas-UNICAMP, Campinas-SP, 2002.

APÊNDICE A – Algoritmo de Retropropagação

Neste apêndice são apresentados alguns métodos que melhoram significativamente o desempenho do algoritmos de retropropagação (HAYKIN, 2004), métodos esses que foram levados em conta para o treinamento da rede neural desenvolvida neste trabalho.

A.1 Melhorias no Desempenho do Algoritmos de Treinamento

Entre os métodos existentes pode-se citar:

- i. Atualização seqüencial comparada à atualização por lote - o modo seqüencial da aprendizagem por retropropagação (envolvendo atualização de padrão em padrão) é computacionalmente mais rápido que o modo por lote. Isto é verdade especialmente quando o conjunto de dados de treinamento for grande e altamente redundante.
- ii. Maximização do conteúdo de informação - Como regra geral, todo exemplo de treinamento apresentado ao algoritmo de retropropagação deve ser escolhido de forma que o seu conteúdo de informação seja o maior possível para a tarefa considerada (LECUN, 1993 apud HAYKIN, 2004). Dois modos de alcançar este objetivo são:
 - O uso de um exemplo que resulte no maior erro de treinamento.

- O uso de um exemplo que seja radicalmente diferente de todos os outros usados anteriormente.

Essas duas heurísticas são motivadas por um desejo de ampliar a busca no espaço de pesos. Nas tarefas de classificação de padrões usando a aprendizagem por retropropagação sequencial, uma técnica simples bastante utilizada é tornar aleatória a ordem em que os exemplos são apresentados ao perceptron de múltiplas camadas de uma época para a seguinte.

- iii. Função ativação - Um perceptron de múltiplas camadas treinado com o algoritmo de retropropagação pode, em geral, aprender mais rápido (em termos do número de interações de treinamento necessárias) quando a função de ativação sigmóide incorporada no modelo do neurônio da rede for antissimétrica do que quando ela for não-simétrica. Dizemos que uma função é anti-simétrica se

$$\varphi(-v) = -\varphi(v) \quad (\text{A.1})$$

- iv. Valores alvos - É importante que os valores-alvo (resposta desejada) sejam escolhidos dentro do intervalo da função ativação sigmóide. Caso contrário, o algoritmo de retropropagação tende a levar os parâmetros livres da rede para o infinito e dessa forma reduzir a velocidade do processo de treinamento, levando os neurônios ocultos à saturação.

- v. Normalizar as entradas - Cada variável de entrada deve ser pré-processada de modo que o seu valor médio, calculado sobre todo o conjunto de treinamento, ou seja, próximo de zero, ou ainda, pequeno comparado com o desvio padrão (LECUN, 1993 apud HAYKIN, 2004).

- vi. Inicialização - Uma boa escolha para os valores iniciais dos pesos sinápticos e limites da rede pode ajudar para que o projeto da rede seja bem sucedido. Atributos

iniciais grandes podem levar os neurônios da rede à saturação. Atributos de valores iniciais pequenos para os pesos sinápticos, o algoritmo de retropropagação pode operar em uma área muito plana em torno da origem da superfície de erro. A escolha adequada para a inicialização se encontra em algum lugar entre estes dois casos. Pode-se descrever uma boa estratégia para inicializar os pesos sinápticos se o desvio padrão do campo local induzido de um neurônio caia na área de transição entre as partes linear e saturada da sua função ativação sigmóide. Pode-se expressar a média e a variância do campo local induzido como:

$$\mu_v = \sum_{i=1}^m E [W_{ji}] \sum E [y_i] = 0 \quad (\text{A.2})$$

$$\sigma^2 = m\sigma_w^2 \quad (\text{A.3})$$

onde m é o número de conexões sinápticas de um neurônio, σ_w^2 é a variância, σ^2 é a variância do campo induzido.

vii. Aprendizagem por indícios - Aprendizagem a partir de um conjunto de exemplos de treinamento lida com uma função mapeamento de entrada-saída desconhecida $f(\cdot)$. Na verdade, o processo de aprendizagem explora a informação contida nos exemplos sobre a função $f(\cdot)$ para inferir uma implementação aproximada para ela. O processo de aprendizagem, por exemplo, pode ser generalizado para incluir aprendizagem por indícios, o que é obtido permitindo-se que a informação prévia que tenhamos sobre a função $f(\cdot)$ seja incluída no processo de aprendizagem (ABU-MOSTAFA, 1995 apud HAYKIN, 2004). Tal informação pode incluir propriedades invariantes, simétricas, ou qualquer outro conhecimento sobre a função $f(\cdot)$ que pode ser usado para acelerar a busca por sua realização aproximada e, mais importante que isto, melhorar a qualidade da estimativa final.

viii. Taxas de aprendizagem - Todos os neurônios do perceptron de múltiplas camadas

devem aprender com a mesma taxa. As últimas camadas normalmente têm gradientes locais maiores do que as camadas anteriores da rede. Assim, deve-se atribuir ao parâmetro da taxa de aprendizagem η valores menores nas últimas camadas do que nas camadas anteriores. Neurônios com muitas entradas devem ter um parâmetro da taxa de aprendizagem menor do que neurônios com menos entradas, para manter um tempo de aprendizagem similar a todos os neurônios da rede.

APÊNDICE B – Método de Levenberg-Marquardt (LM)

Neste apêndice é apresentado o método otimização não-linear de Levenberg-Marquardt, utilizado para o treinamento da rede neural multicamadas desenvolvida neste trabalho.

B.1 Método de Levenberg-Marquardt

Essencialmente, o algoritmo Levenberg-Marquardt é um algoritmo para ajustamento de comportamentos não-lineares baseado no método dos mínimos-quadrados que procura encontrar o melhor ajustamento para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre a curva ajustada e os dados (tais diferenças são chamadas de resíduos) (JÚNIOR *et al.*, 2008).

Este método é bastante eficiente quando estamos tratando de redes que não possuem mais do que algumas centenas de conexões a serem ajustadas Pimentel (2005). Isto se deve principalmente ao fato de que estes algoritmos necessitam armazenar uma matriz quadrada cuja dimensão é da ordem do número de conexões da rede (PIMENTEL, 2005).

Todas as letras minúsculas em negrito (**a**, **b**) representam vetores, as letras maiúsculas em negrito (**A**, **B**) representam matrizes e as letras em itálico (*a*, *b*) representam escalares. Se for considerado como funcional de erro a soma dos erros quadráticos e ainda for le-

vado em conta que o problema pode-se ter múltiplas saídas, podendo-se obter a seguinte expressão para o funcionamento de erro:

$$J(\theta) = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^m (g_{ij}(\mathbf{X}) - \hat{g}_{ij}(\mathbf{X}, \theta))^2 = \sum r_i^2 \quad (\text{B.1})$$

Onde $J(\theta)$ é o funcional de erro, $\hat{g}_{ij}(\mathbf{x}, \theta)$ é o modelo que procura aproximar a função $g_{ij}(\mathbf{x})$, N é o número de amostras, l o número de unidades intermediárias, r o erro residual, m o número de saídas, e o q o produto $N \times m$.

Seja \mathbf{J} o jacobiano (matriz das derivadas primeiras) do funcional J dado pela Equação B.3.

$$\frac{\partial J}{\partial b_i} = \frac{\partial J}{\partial u_i^m} \frac{\partial u_i^m}{\partial b_i} \quad (\text{B.2})$$

Porém,

$$u_i^m = \sum_{j=1}^{s^{m-1}} w_{i,j}^m y_j^{m-1} + b_i^m \quad (\text{B.3})$$

,logo

$$\frac{\partial u_i^m}{\partial w_{i,j}^m} = y_j^{m-1}, \frac{\partial u_i^m}{\partial b_i^m} = 1 \quad (\text{B.4})$$

Onde u é o vetor de saída da camada oculta.

Esta matriz pode ser escrita da seguinte forma:

$$J = \begin{bmatrix} \nabla r_1^T \\ \nabla r_2^T \\ M \\ \nabla r_q^T \end{bmatrix} \quad (\text{B.5})$$

onde r é o denominador erro residual.

Diferenciando a Equação B.1 obtém-se:

$$\nabla J = 2\mathbf{J}^T \mathbf{r} = 2 \sum_{k=1}^q r_k \nabla \mathbf{r}_k \quad (\text{B.6})$$

$$\nabla^2 J = 2 \left(\mathbf{J}^T \mathbf{J} = \sum_{k=1}^q r_k \nabla^2 \mathbf{r}_k \right) \quad (\text{B.7})$$

A matriz de derivada segundas do funcional de erro é chamada de matriz hessiana. Quando os erros residuais são suficientemente pequenos, a matriz hessiana pode ser aproximada pelo primeiro termo da Equação B.7, resultando em:

$$\nabla^2 J \approx 2\mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (\text{B.8})$$

Esta aproximação geralmente é válida em um mínimo de J para a maioria dos propósitos e é base para o método de Gauss-Newton Pimentel (2005). A lei de atualização torna-se então:

$$\Delta \theta = [\mathbf{J}^T \mathbf{J}]^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{r} \quad (\text{B.9})$$

A modificação de Levenberg-Marquardt para o método de Gauss-Newton é:

$$\Delta\theta = [\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I}]^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{r} \quad (\text{B.10})$$

O efeito da matriz adicional $\mu \mathbf{I}$ é adicionar μ a cada autovetor de $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$. Uma vez que a matriz $\mathbf{J}^T \mathbf{J}$ é semidefinida positiva e, portanto o autovalor mínimo possível é zero, qualquer valor positivo, pequeno, mas numericamente significativo, de μ será suficiente para restaurar a matriz aumentada e produzir uma direção descendente de busca.

Os vetores de μ podem ser escolhidos de várias maneiras; a mais simples é escolhê-lo igual à zero ao menos que a matriz hessiana encontrada na iteração i seja singular. Quando isso ocorrer, um valor pequeno como $\mu = 10^{-4} \sum_1^N (\mathbf{J}^T \mathbf{J})_{ii}$ pode ser usado.

É importante observar que, quanto maior for o valor de μ , menor é a influência da informação de segunda ordem e mais este algoritmo se aproxima de um método de primeira ordem.

APÊNDICE C – Abordagens para Treinamento de Redes Neurais

Neste apêndice são apresentados dois modelos utilizados para o treinamento de RNA's são eles: modelagem direta e modelagem inversa.

C.1 Modelagem Direta

Seja uma planta dinâmica discreta, causal, invariante no tempo cuja entrada, $u(t)$, é uma função do tempo uniformemente limitada e cuja saída é representada por $y_p(t)$. A planta é considerada estável, com parametrização conhecida, mas com os valores dos parâmetros desconhecidos. O objetivo da identificação é construir um modelo neural adequado de modo que, quando submetido à mesma entrada u da planta, forneça uma saída y_m que se aproxime de y_p segundo um determinado critério. Este processo de identificação está representado graficamente na Figura 83 (MELEIRO, 2002)

O procedimento de treinamento de uma rede neural para representar a dinâmica de uma planta é conhecido como modelagem direta (*“forward modelling”*). O modelo neural é colocado em paralelo com a planta e os erros entre as saídas do sistema e as da rede neural (os erros de predição) são utilizados como sinal para o treinamento da rede. Considerando que a planta é descrita pela equação diferencial não-linear a seguir:

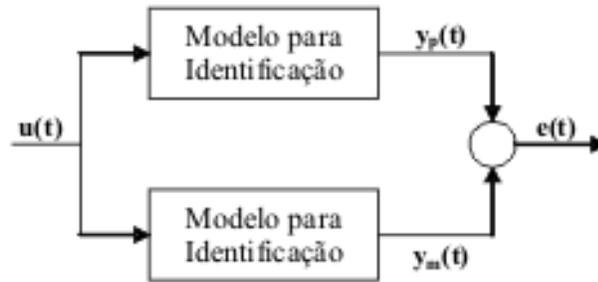


Figura 83: Identificação de uma planta utilizando RNA.

$$y_p(t+1) = F[y_p(t), \dots, y_p(t-n+1); u(t), \dots, u(t-m+1)] \quad (\text{C.1})$$

A saída da planta y_p no tempo $t+1$ depende dos n valores passados da própria saída e dos m valores passados da entrada u . Neste ponto, somente a parte dinâmica da resposta da planta será considerada; o modelo não representa explicitamente as possíveis perturbações agindo sobre a planta (CHEN *et al.*, 1990 apud MELEIRO, 2002). A abordagem mais comum para a modelagem de sistemas é escolher a estrutura de entrada-saída da rede idêntica à do sistema que se deseja modelar. Denotando a saída da rede neural por y_m , obtendo-se a seguinte representação:

$$y_p(t+1) = \hat{F}[y_p(t), \dots, y_p(t-n+1); u(t), \dots, u(t-m+1)] \quad (\text{C.2})$$

onde $\hat{F}(\cdot)$ representa o mapeamento não-linear entrada-saída realizado pela rede neural para aproximar o mapeamento $F(\cdot)$ da planta. Pode-se observar que as entradas da rede neural incluem os valores passados da saída da planta e não os valores passados da saída da rede, ou seja, a rede não apresenta realimentação (*feedback*).

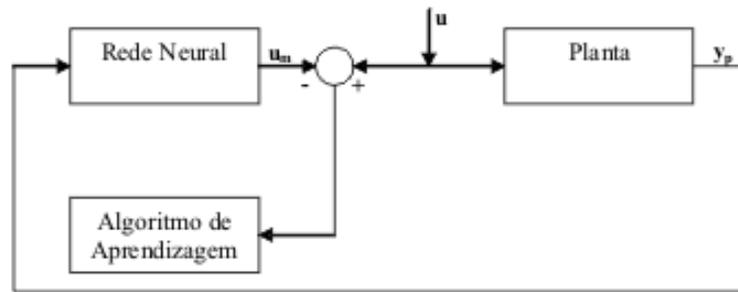


Figura 84: Modelagem neural direta-inversa.

C.2 Modelagem Inversa

Na modelagem inversa o modelo do sistema dinâmico fornece a entrada para a saída desejada. Conceitualmente, a abordagem mais simples é a modelagem direta inversa, mostrada na Figura 84, onde um sinal de treinamento sintético (a entrada da planta) é introduzido no sistema. A saída da planta é utilizada como entrada para a rede neural e a saída desta é então comparada com o sinal de treinamento (a entrada do sistema). O erro gerado é utilizado para ajustar os parâmetros da rede neural através de um algoritmo de treinamento. Esta estrutura força a rede neural a representar a inversa da planta.

Uma análise da estrutura entrada-saída da modelagem neural inversa, verifica-se que a determinação da inversa F^{-1} que leva à obtenção de $u(t)$ a partir da Equação C.1, requer o conhecimento do valor futuro $y_p^{(t+1)}$. Para superar este problema, pode-se substituir este valor por $y_p^{ref(t+1)}$ que admite-se estar disponível no tempo t . Esta consideração é bastante razoável uma vez que y_p^{ref} está relacionado com o sinal de referência que, por sua vez, normalmente é conhecido de antemão. Assim, o mapeamento não-linear entrada-saída da modelagem neural inversa é dado por:

$$u(t) = F^{-1} \left[y_p(t), \dots, y_p(t-n+1); y_p^{ref}(t+1); u(t-1), \dots, u(t-m+1) \right] \quad (C.3)$$