

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Desenvolvimento de
Analisadores Virtuais Aplicados a
Colunas de Destilação Industriais**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Vanessa Conz

Porto Alegre

2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Desenvolvimento de
Analisadores Virtuais Aplicados a
Colunas de Destilação Industriais**

Vanessa Conz

Dissertação de Mestrado apresentada como
requisito parcial para obtenção do título de
Mestre em Engenharia Química

Área de concentração: Controle de Processos

Orientador:
Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Porto Alegre

2005

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação *Desenvolvimento de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação Industriais*, elaborada por Vanessa Conz, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química.

Comissão Examinadora:

Prof. Dr. Luís Gustavo Soares Longhi (REFAP e PUCRS)

Prof. Dr. Nilo Sérgio Medeiros Cardozo (DEQUI /UFRGS)

Profa. Dra. Talita Furlanetto Mendes (DEQUI /UFRGS)

*Há tempos ouço os sussurros do vento,
Entretanto não entendo sobre o que vem falar.
Desconfio, porém, de um belo conselho:
- Imitá-lo de forma a ser dele um espelho,
E seguir sempre em frente como ele a voar...*

Para meus pais,

*Por dar-me a vida,
E dela cuidar perfeitamente.*

Para Rogério,

*Por cruzar o meu caminho,
Juntá-lo ao seu
E criar o nosso: lindo e cheio de esperança...*

Agradecimentos

Agradeço ao Departamento de Engenharia Química da UFRGS pela oportunidade de ingressar no programa de pós-graduação, a todos os professores e a meu orientador Jorge, pela condução deste trabalho.

Agradeço a COPESUL, pela oportunidade, pela bolsa concedida, especialmente ao Time de Controle e a Unidade de Aromáticos. Agradeço pela atenção dos engenheiros Ricardo Abech e Odila Wonderlich dos Santos, e aos engenheiros e operadores de Aromáticos, que gentilmente permitiram e apoiaram os testes realizados.

Agradeço ao Farenzena, em primeiro lugar pela nossa amizade e em segundo lugar pela orientação e apoio nas simulações, o que foi fundamental neste trabalho.

Agradeço ao Samuel, pelos algoritmos, pela paciência, pelas explicações, pela amizade, enfim por toda a participação neste trabalho, imensamente importante.

Agradeço a todas os amigos do GIMSCOP, do PPGEQ, e do DEQ, em especial a Irma, a Luciane, o Farenzena, a Letícia, o Ariel e o Samuel e a todos que de alguma forma estiveram presentes no meu dia-a-dia.

Agradeço a meus pais, Dante e Maria, que mais uma vez compreenderam minha vontade de estudar. Agradeço imensamente pelo apoio em todos os sentidos, pela segurança, pelo carinho, pela compreensão.

Agradeço a minha irmã Andressa e minha prima Daiana, que mais uma vez participaram de um momento importante na minha vida, por cuidarem de tudo o que eu não tive tempo de cuidar, sempre entendendo minha ausência. Obrigado por nosso lar tão especial!

Agradeço a minhas amigas Ana, Letícia, Flávia, Karina, Carol e Marlisa, pela nossa amizade tão especial, por todos os conselhos, pelos carinhos, pelas risadas, pelas festas, pelos abraços, por nossos planos, pela paciência, pela ajuda, pela sexta-sim!

Agradeço a minha nona, Teresinha, por rezar por mim todas as noites e por se preocupar comigo como ninguém, por ser tão bondosa e tão querida.

Agradeço ao Rogério, por ter sido meu amigo, minha família e meu anjo da guarda nesses últimos anos tornando possível a realização deste trabalho. Agradeço imensamente por todo o carinho e pela presença em todos os momentos, que faz com que cada sonho meu realizado seja a concretização de um dos nossos.

Resumo

Nas indústrias de processo, algumas variáveis como as composições de topo de colunas de destilação são quantificadas através de análises laboratoriais e ou de analisadores em linha. Este tipo de controle apresenta algumas limitações tais como custos de manutenção e o tempo de amostragem (em geral análises laboratoriais ocorrem de 1 a 3 vezes ao dia). Para melhoria destes métodos, as variáveis podem ser continuamente estimadas a partir de sua relação com as variáveis medidas diretamente no processo. Através de um algoritmo matemático, um analisador virtual de propriedades pode ser construído, sendo necessário para o seu desenvolvimento um modelo simplificado do processo.

Este trabalho teve como objetivo a construção de dois analisadores virtuais para estimação das composições de topo de duas colunas fracionadoras de tolueno presentes em uma indústria petroquímica. Para tal, estudou-se as metodologias existentes para construção de analisadores voltados para aplicações em colunas de destilação.

O desenvolvimento de analisadores virtuais tem como base três etapas: seleção de variáveis secundárias, construção de modelos e correção/adaptação de modelos. Tais etapas, baseadas principalmente em métodos estatísticos, foram estudadas e as técnicas que melhor se adaptaram ao caso em questão foram empregadas com resultados satisfatórios. Realizaram-se também estudos comparativos entre modelos estacionários e dinâmicos e modelos construídos a partir de dados de simulação e de processo. As simulações foram conduzidas nos softwares Aspen Plus[®] e Aspen Dynamics[®] e o software usado para implementação dos analisadores na indústria foi o Aspen IQ[®].

Abstract

In the most part of chemical process, the measures of key variables used for the accomplished of final product quality (e.g., top composition, melt index) are expensive and involve high sampling times during analyses. This kind of problem might be solved through the connection between variables of easy on-line measurement and the desired primary variables. This kind of technique is normally called virtual analyzer or softsensor.

A typical virtual analyzer is composed by three main pillars: the process model, the variables used by the model and an update technique. A mathematical model can be classified in terms of the process knowledge within it, going from the physical first principle equations to pure multivariate statistical methods. First principles models are very knowledge-intensive and are referred as “white box”, while multivariate models are data-intensive, and usually named as “black box”.

There are several species of “black box” models, since simple multivariate regression techniques (MLR) till techniques based on the rigorous dynamic models. The present work intends to investigate how a virtual analyzer can be developed to estimate the top composition of industrial distillation columns. For that two different approaches are analyzed and compared. The first approach consists of first to develop a nonlinear rigorous dynamic model which can satisfactorily describe the column and then based on the simulation data generate a virtual analyzer which use different standard black box techniques available for that. Nowadays, due to the facility to use rigorous simulators to model distillation column, this approach could interesting, since without extensive plant perturbation, it could be possible to generate a simple virtual analyzer based on black-box model, which could capture the process behavior and would be simple to implement and maintain during on-line application. The main reasons to follow this approach are to reduce the plant perturbation and increase the plant knowledge through a dynamic nonlinear model. The second analyzed approach consists of to apply the black-box techniques directly to the actual plant data. In this thesis we analyze both approaches determining which one gives the best results for actual toluene distillation columns. The simulations were driven in the softwares Aspen Plus[®] and Aspen Dynamics[®] and the implementation of the inferential sensors was made in the Aspen IQ[®].

Simbologia e Nomenclatura

AG	Algoritmo genérico
AR	Água de refrigeração
BE	Método de seleção de variáveis : <i>Backward elimination</i>
BENZ	Benzeno
BTPLS	Método de construção de modelos: <i>Box Tidwell Least Squares Regression</i>
C ₄ -C ₁₀	Hidrocarbonetos com cadeia carbônica variando de 4 a 10 elementos
C ₈ ARO	Compostos {m – p – o} – xilenos e etil-benzeno
C ₉ ARO	Composto aromático de 9 carbonos
CM	Condensado de média pressão
dT	Diferencial de Temperatura
E	Vetor residual da decomposição das entradas no PLS
E _M	Eficiência de Murphree
E _T	Eficiência Total
E _v	Eficiência de vaporização
F	Vetor residual da decomposição das saídas no PLS
FB	Fracionadora de benzeno
FIC	Controlador e indicador de vazão
FT-1	Fracionadora de tolueno 1
FT-2	Fracionadora de tolueno 2
FS	Método de seleção de variáveis : <i>Forward selection</i>
G	Taxa de gás escoando no estágio <i>n</i>
HC	Hidrocarbonetos
L	Taxa de líquido escoando no estágio <i>n</i>
Lab.	Análise laboratorial
LIC	Controlador e indicador de nível
logP	Logaritmo da pressão de topo das colunas de destilação
LPLS	<i>Linear partial least squares</i>
LPLS	Método de construção de modelos do Aspen IQ: <i>Linear partial least squares</i>
MLR	Método de construção de modelos: <i>Multivariate least regression</i>
Não-ARO	Compostos naftênicos e parafínicos de C ₆ a C ₁₀
N	Número de amostras do conjunto de teste
N _{ideal}	Número de estágios ideal
NLPLS	Modelo PLS não-linear
NN	Método de construção de modelos: <i>Neural network</i>
NN Monotonic	Método de construção de modelos do Aspen IQ ⁰ : <i>Neural network Monotonic</i>
NNPLS	Método de construção de modelos: <i>Neural network / Partial least squares</i>
N _{real}	Número de estágios real
NRTL	Modelo termodinâmico <i>Non Random two-liquid</i>
p _h	<i>Loading vector</i> (entradas PLS)
P	Pressão
PCA	Tratamento estatístico: <i>Principal component analysis</i>
PCL	<i>Principal Components Loadings</i>
PCR	Método de construção de modelos <i>Principal component regression</i>
PI	Indicador de pressão
PLS	Método de construção de modelos: <i>Partial least squares</i>
ppm	Partes por milhão

PR	Modelo termodinâmico <i>Peng Robinson</i>
PRESS	Erro preditivo quadrático
P_{topo}	Pressão de topo das colunas de destilação
P_v	Pressão de vapor da mistura em ebulição
q_h	<i>Loading vector</i> (saídas PLS)
Q	Taxa de calor
QPLS	Método de construção de modelos: <i>Quadratic Partial Least Squares</i>
R	Vazão de refluxo
R^2	R-Quadrado : quadrado da correlação entre variáveis
RD	Razão entre as vazões de refluxo e destilado
RF	Razão entre as vazões de refluxo e carga
RWS	Modelo termodinâmico <i>Soave-Redlich-Kwong</i>
Sens. sim.	Conjunto de dados baseado em análises de sensibilidade Simulação
SR	Método de seleção de variáveis : <i>Stepwise regression</i>
SRMP	Método de seleção de variáveis : <i>Stepwise regression based on model predictions</i>
TDIC	Controlador e indicador de diferencial de temperatura
t_h	<i>Scores vector</i> (entradas PLS)
T	Temperatura ou conjunto de dados de perfil de temperatura
T_c	Temperatura da mistura em ebulição
TI	Indicador de temperatura
TP	Conjunto de dados de perfil de temperatura e pressão de topo
TRP	Conjunto de dados de perfil de temperatura, razões entre vazões e pressão de topo
TVP	Conjunto de dados de perfil de temperatura, vazões e pressão de topo
u_h	<i>Scores vector</i> (saídas PLS)
UNIF.	Modelo termodinâmico UNIFAC
UNIQ.	Modelo termodinâmico UNIQUAC
VA	Vapor de alta pressão (42 kgf cm ⁻²)
VF	Razão entre as vazões de vapor no refeedor e carga
VL	Variáveis latentes do método PLS
VM	Vapor de média pressão (15 kgf cm ⁻²)
X	Conjunto de dados de entrada
x_i	Fração molar do componente <i>i</i> no líquido
x_k	Composição do componente <i>i</i> numa mistura de <i>k</i> componentes
Y	Conjunto de dados de saída
y	Dado de saída
y_i	Medição da saída da amostra <i>i</i>
y_f	Predição do modelos com correção de BIAS
\hat{y}	Predição do modelo sem correção de BIAS
\bar{y}	Média entre medições da saída
y_i	Medida da saída para a amostra <i>i</i>
\hat{y}_i	Predição do modelo para a amostra <i>i</i>
y_n	Concentração de vapor no estágio <i>n</i>
y_{n-1}	Concentração de vapor no estágio <i>n-1</i>
y_n^*	Concentração de vapor em equilíbrio no estágio <i>n</i>
α_{ij}	Volatilidade relativa de componente <i>i</i> em relação ao componente <i>j</i>
θ	Tempo morto
τ	Tempo de assentamento

Sumário

Introdução	1
1.1 Por que se Precisa de Analisadores Virtuais?	1
1.2 Breve Histórico de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação	2
1.2.1 Geração de Modelos	3
1.2.2 Seleção de Variáveis	4
1.3 Estrutura da Dissertação	5
1.4 Técnicas de Construção de Modelos e Seleção de Variáveis Utilizadas no Trabalho	6
Descrição da Unidade	8
2.1 Unidade de Aromáticos	8
2.1.1 Coluna de Benzeno (FB)	9
2.1.2 Colunas de Tolueno (FT-1 e FT-2)	11
2.1.2.1 Localização e Imprecisão das Medições das Colunas de Tolueno	12
2.1.2.2 Análises Laboratoriais	14
2.2 Objetivos a Serem Atingidos com os Analisadores Virtuais	15
Modelos Estacionários e Dinâmicos	18
3.1 Desenvolvimento do Modelo Estacionário	18
3.1.1 Coleta e Tratamento dos Dados	19
3.1.2 Escolha do Modelo Termodinâmico	20
3.1.3 Determinação da Eficiência	22
3.2 Desenvolvimento do Modelo Dinâmico	23
3.2.1 Informações Adicionais	23
3.2.2 Análise do Comportamento Dinâmico das Colunas de Tolueno	24
3.3 Aperfeiçoamento dos Modelos Estacionários e Dinâmicos	26
3.3.1 Planejamento de Perturbações nas Colunas Industriais a Partir das Simulações Estacionária e Dinâmica	26
3.3.2 Dados de Planta e Relato da Forma como Foram Realizados os Experimentos	35
3.3.3 Melhorias nos Modelos Estacionário e Dinâmico	45
Desenvolvimento de Analisadores Virtuais	49
4.1 Etapas do Desenvolvimento de Analisadores Virtuais	49
4.1.1 Geração de Dados para o Desenvolvimento do Analisador	49
4.1.2 Escolha das Variáveis Secundárias	49
4.1.3 Escolha do Modelo	52
4.1.4 Técnicas de Correção de Modelos	54
4.2 Desenvolvimento do Analisador Usando Técnicas PLS	55
4.2.1 Técnica PLS	55
4.2.2 Geração de Dados	57
4.2.3 Seleção de Variáveis	58
4.2.4 Construção de Modelos	59

4.3 Desenvolvimento do analisador usando Aspen IQ®	74
4.3.1 Técnicas Disponíveis para Seleção de Variáveis e Construção de Modelos	74
4.3.2 Geração de Modelos no Aspen IQ®	75
Implementação de Analisadores Virtuais na Indústria	79
5.1 Modelos para Inferência de Tolueno – FT-1.....	80
5.1.1 Validação de Modelos Estacionários de Simulação.....	80
5.1.2 Validação de Modelos de Planta	82
5.2 Modelos para Inferência de Não-ARO - FT-1	84
5.2.1 Validação de Modelos Estacionários de Simulação e de Planta	84
5.3 Modelos para a Coluna FT-2.....	86
5.4 Implementação dos Modelos via Aspen IQ®	87
5.4.1 Aplicação de Técnicas de Correção e Adaptação de Modelos.....	89
5.5 Inferência <i>Off-Line</i>	90
Conclusão	92
6.1 Considerações Finais.....	92
6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros.....	95
Referências Bibliográficas.....	137
APÊNDICE A	97
APÊNDICE B	101
APÊNDICE C	105
APÊNDICE D	125
Lista de figuras	13
Lista de tabelas	15

Lista de figuras

Figura 2.1: Representação da FB com suas medições de temperatura da FB.	11
Figura 2.2: Descrição geral das colunas de tolueno FT-1 e FT-2.	15
Figura 3.1: Análise de sensibilidade da FB para o componente benzeno no topo da FB.	29
Figura 3.2: Análise de sensibilidade da FB para o componente tolueno no topo da FB.	29
Figura 3.3: Análise de sensibilidade da FB para os componentes não-ARO no topo da FB.	30
Figura 3.4: Análise de sensibilidade da FB para o componente tolueno no produto de topo da FT-1.	30
Figura 3.5: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente tolueno.	32
Figura 3.6: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente benzeno.	32
Figura 3.7: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente não-ARO.	33
Figura 3.8: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente tolueno.	33
Figura 3.9: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente benzeno.	34
Figura 3.10: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente não-ARO.	34
Figura 3.11: Variações na FB durante os testes.	35
Figura 3.12: Composição de tolueno no topo da FB (pontos, eixo da direita) – variações no TDIC (linha contínua, eixo da esquerda).	36
Figura 3.13: Composição de tolueno no topo da FB (pontos, eixo da direita) – variações na vazão de vapor (linha contínua, eixo da esquerda).	36
Figura 3.14: Comportamento do perfil de temperatura da FB durante a realização de degraus na mesma.	37
Figura 3.15: Perfil de temperatura da FT-1 frente às perturbações no TDIC e na vazão de vapor da FB.	38
Figura 3.16: Variações ocorridas na FT-1 durante os testes.	38
Figura 3.17: Variações ocorridas na FT-1 durante os testes - RD e RF.	39
Figura 3.18 (a,b): Variação na composição de tolueno na corrente de topo da FT-1.	40
Figura 3.19 (a,b): Variação na composição de C8 ARO na corrente de topo da FT-1.	40
Figura 3.20 (a,b): Variação na composição de não-ARO no topo da FT-1.	40
Figura 3.21: Perfil de temperatura da FT-1 durante as perturbações no TIC e na vazão de refluxo.	41
Figura 3.22: Variações ocorridas na FT-2 durante os testes.	42
Figura 3.23: Variações ocorridas na FT-2 durante os testes - RD e RF.	43
Figura 3.24 (a,b): Variação na composição de tolueno na corrente de topo da FT-2.	43
Figura 3.25 (a,b): Variação na composição de C8 aro na corrente de topo da FT-2.	44
Figura 3.26 (a,b): Variação na composição de não-ARO no topo da FT-2.	44
Figura 3.27: Perfil de temperatura da coluna FT-2 durante as perturbações no refluxo e no TIC.	45
Figura 4.1: Representação esquemática de redes neurais.	53
Figura 4.2: Rotação de dados na PCA.	55
Figura 4.4: Comparação entre modelos com 1, 5, 9 e 13 VL – caso QPLS.	62
Figura 4.5: TOL - comparação entre modelos TVP, TRP e TP – caso LPLS.	64
Figura 4.7: Modelos SRMP e Sens. – caso LPLS.	66

Figura 4.8: Efeito da adição de novas variáveis latentes para modelos de Não-ARO - caso LPLS.	68
Figura 4.9: Efeito da adição de novas variáveis latentes para modelos de Não-ARO - caso LPLS.	69
Figura 4.10: Não-ARO - comparação entre modelos TVP, TRP e TP – caso QPLS.	70
Figura 4.11: Não-ARO - comparação entre modelos TP e T – caso QPLS.....	71
Figura 4.12: Não-ARO - comparação entre os modelos TP e T,logP – caso LPLS.	73
Figura 4.13: Não-ARO - comparação entre os modelos TP e T,logP – caso QPLS.....	73
Figura 4.14: Comparação entre um modelo QPLS e Fuzzy-PLS com 1VL.....	78
Figura 5.1: Aplicação do modelo LPLS em dados de planta com os valores médios das predições e dos dados laboratoriais.....	81
Figura 5.2: Aplicação do modelo QPLS em dados de planta com os valores médios das predições e dos dados reais de planta.	82
Figura 5.3: Aplicação dos modelos estacionário e dinâmico de planta em dados de planta.	83
Figura 5.4: Modelo LPLS de planta para não-ARO.	85
Figura 5.5: Modelo LPLS com estimativa do erro absoluto para não-ARO.	86
Figura 5.6: Modelo para inferência de TOL no topo da FT-2.	87
Figura 5.7: Modelo para inferência de não-ARO no topo da FT-2.	87
Figura 5.8: Aplicação do modelo linear para inferência de tolueno – influência da correção de BIAS.	90
Figura 5.9: Analisador virtual <i>off-line</i> da FT-2.....	91
Figura 6.1: Gráfico esquemático do ganho de informação observado na realização deste trabalho baseado nos estudos realizados com simulações estacionárias (Aspen Plus) e com simulações dinâmicas (Aspen Dynamics).	93

Lista de tabelas

Tabela 2.1: Composições das correntes de alimentação da fracionadora de benzeno.....	9
Tabela 2.2: Correntes da FB – valores típicos.	10
Tabela 2.3: Dimensões da FB.	10
Tabela 2.4: Valores médios das correntes das colunas FT-1 e FT-2.	12
Tabela 2.5: Dimensões das colunas FT-1 e FT-2.....	12
Tabela 2.6: Medidores de vazão das FT-1 e FT-2.	13
Tabela 2.7: Medidores de temperatura das colunas FT-1 e FT-2.	13
Tabela 2.8: Especificações da composição do produto de topo das colunas de tolueno.	15
Tabela 3.1: Comparação entre dados de simulação e de planta.	19
Tabela 3.2: Modelos termodinâmicos testados.	20
Tabela 3.3: Comparação entre os valores reais de planta e os valores de simulação das composições de topo dos principais componentes das colunas de benzeno e tolueno para diferentes modelos termodinâmicos simulados.	21
Tabela 3.4: Dados usados no desenvolvimento da simulação dinâmica.	24
Tabela 3.5: Tempo de assentamento e tempo morto das temperaturas e na composição de TOL (topo) das colunas FT-1 e FT-2.	24
Tabela 3.6: Variações em cada estágio de temperatura das colunas FT-1 e FT-2.	26
Tabela 3.7: Regiões definidas para realização dos testes.	27
Tabela 3.8: Perturbações realizadas na carga da FB e composições da corrente de benzeno produto.	31
Tabela 3.9: Perturbações realizadas na carga da FB e composições das correntes de topo de tolueno.	31
Tabela 3.10: Verificação das composições de topo de TOL na simulação estacionária.	46
Tabela 3.11: Verificação das composições de topo de TOL na simulação dinâmica.	47
Tabela 4.1: Intervalos definidos para construção de dados estacionários da FT-1.....	58
Tabela 4.2: Intervalos definidos para construção de dados estacionários da FT-2.....	58
Tabela 4.3: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos LPLS.....	60
Tabela 4.4: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos QPLS.	61
Tabela 4.5: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos BTPLS.	62
Tabela 4.6: TOL - comparação entre modelos TPV, TPR e TP.	63
Tabela 4.7: TOL - comparação entre modelos TP e T.	64
Tabela 4.8: Aplicação das técnicas SRMP e análise de sensibilidade à construção de modelos LPLS e QPLS.	65
Tabela 4.9: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos LPLS para não-ARO.	67
Tabela 4.10: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos QPLS para Não-ARO.	68
Tabela 4.11: Não-ARO - comparação entre modelos TPV, TPR e TP.....	70
Tabela 4.12: Não-ARO - comparação entre modelos TP e T.	71
Tabela 4.13: Não-ARO – comparação entre os modelos T,logP e TP.....	72
Tabela 4.14: Não-ARO – resultados da aplicação dos modelos Sens. LPLS e QPLS.....	74
Tabela 4.15: TOL – comparação entre modelos TRP.	76

Tabela 4.16: TOL – comparação entre os métodos AG, SRMP e Sens.....	77
Tabela 4.17: Não-ARO – comparação entre modelos TRP.	77
Tabela 5.1: Modelos estacionários de simulação.	80
Tabela 5.2: Modelos estacionários e dinâmicos de planta.	83
Tabela 5.3: Modelos de simulação e de planta para inferência de não-ARO.	84
Tabela 5.4: Modelos aplicados para a coluna FT-2.	86

Capítulo 1

Introdução

1.1 Por que se Precisa de Analisadores Virtuais?

Nas indústrias químicas em geral, e principalmente nas indústrias petroquímicas, o número de propriedades a serem controladas nos processos produtivos é muito alto, tornando imprescindível a utilização de técnicas que possam medir ou estimar tais propriedades. Temperaturas, assim como vazões e pressões podem ser medidas de forma contínua através de medidores específicos, tais como termopares, placas de orifício e manômetros, entretanto existem variáveis que só podem ser quantificadas através de métodos mais elaborados, como por exemplo, análises laboratoriais. Neste grupo de variáveis se enquadram composições de correntes de topo e fundo em colunas de destilação, índices de fluidez de reatores poliméricos etc. A determinação destas variáveis geralmente implica na utilização de análises de laboratório que em geral apresentam algumas desvantagens como alto custo (devido às técnicas e a utilização de mão-de-obra) e o tempo de análise, que conforme a aplicação pode ser elevado. Estas duas desvantagens implicam em uma terceira, que consiste na periodicidade baixa de análises (em geral, as análises são realizadas com uma periodicidade de uma a três vezes ao dia), o que impossibilita o acompanhamento contínuo das variáveis.

Atualmente a alternativa mais viável a ser aplicada na substituição de análises laboratoriais é a implementação de analisadores virtuais, que se caracterizam pela determinação indireta de variáveis de difícil aquisição. O desenvolvimento de analisadores virtuais é um bom exemplo de uso de informação útil de um banco de dados visando a otimização de um processo industrial, uma vez que utiliza dados do processo para encontrar uma relação matemática entre as variáveis medidas continuamente numa planta e as que devem ser determinadas. Em resumo, um analisador virtual pode ser considerado um algoritmo que tem como dados de entrada as variáveis do processo que estejam altamente correlacionadas com as propriedades a serem determinadas, que por sua vez são retornadas pelo algoritmo como saídas após serem calculadas através de um modelo matemático determinado de forma empírica ou fenomenológica. Tais modelos podem apresentar relações matemáticas entre as variáveis lineares ou não lineares, dependendo das técnicas de geração de modelos empregadas.

Desde o início do estudo de inferidores de propriedades (final da década de 1960), o emprego de analisadores virtuais voltou-se para várias áreas, entre as quais se destacou a destilação. Em 1991, MEJDELL e SKOGESTAD utilizaram as medições de temperatura de uma coluna de destilação em escala piloto para inferir as composições da mesma. O uso de inferidores tem sido tão amplo que suas aplicações vão desde a determinação de propriedades físico-químicas em indústrias químicas e petroquímicas até a determinação da concentração de poluentes na atmosfera. São exemplos destas diversas aplicações: inferências de ponto de fusão de polímeros (MORINAGA *et al.*, 1999), conversão em reatores (TADÉ e YU-CHU TIAN, 2000) e determinação da concentração de ozônio na atmosfera (ABDUL-WABAH, BAKHEIT e ALAWI, 2005).

1.2 Breve Histórico de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação

Atualmente, o desenvolvimento de analisadores virtuais é realizado através de técnicas de seleção de variáveis secundárias, técnicas para desenvolver modelos lineares ou não-lineares, e técnicas de implementação dos analisadores. De uma forma geral, em virtude da disponibilidade de técnicas existentes e da variabilidade de processos em que analisadores virtuais podem ser empregados, a determinação de qual técnica é a mais indicada para um determinado caso depende basicamente da complexidade deste processo, que em outras palavras resume a suas características não-lineares, assim como depende também da quantidade de variáveis secundárias disponíveis. Por exemplo, se um determinado processo tem características lineares, uma técnica de modelagem linear poderá ser empregada, entretanto, se não houver um número suficiente de variáveis de fácil aquisição para serem relacionadas à variável principal (variável a ser inferida), a modelagem será mais complexa podendo até ser impraticável. Por outro lado, se um determinado processo altamente não-linear possuir um grande número de variáveis medidas fortemente correlacionadas com a variável de saída, a construção do modelo tende a ser beneficiada.

Especificamente em destilação, as variáveis comumente inferidas são as composições de topo e fundo das colunas, uma vez que o controle de tais propriedades depende de análises laboratoriais esparsas ou de analisadores em linha. As variáveis secundárias neste caso em questão são temperaturas, vazões, níveis e pressões, que se caracterizam pela fácil aquisição. O acompanhamento frequente das composições de topo e fundo em uma coluna de destilação costuma ser importante principalmente porque estas composições além de serem dependentes de variáveis como refluxo e aquecimento no retervedor, são também afetadas por variações súbitas de composição na carga. Outro fator, que está ligado às análises de laboratório, é o atraso de transporte entre o local de amostragem de laboratório e a corrente específica que deve ser analisada. Por exemplo, a amostragem de concentração de topo de uma coluna de destilação é geralmente realizada depois do vaso de topo, ou seja, onde já ocorreu uma diluição em relação aos minutos anteriores. Dessa forma, uma análise laboratorial neste ponto corresponde a uma média entre os valores de composição que ocorreram no intervalo de tempo de acúmulo do vaso de topo, e não necessariamente correspondendo à composição de topo. Já uma inferência de concentração via analisador virtual estima a corrente de topo sem

acúmulo do vaso pois utiliza as variáveis da coluna medidas em um momento específico para realizar o cálculo.

Nesta seção serão apresentadas as principais técnicas em uso atualmente para seleção de variáveis, construção de modelos e implementação dos mesmos.

1.2.1 Geração de Modelos

Em geral, para colunas de destilação, métodos empíricos multivariáveis são usados na construção de modelos, tanto pela sua praticidade quanto pelos bons resultados. Os modelos empíricos se diferem dos fenomenológicos e semi-empíricos pelo fato de que não utilizam relações físico-químicas entre as variáveis de entrada e saída, e sim tratamentos estatísticos que as relacionem. Tais modelos são conhecidos na literatura como modelos do tipo “*black-box*”, enquanto que os modelos fenomenológicos são chamados “*white-box*”.

O modelo “*black-box*” mais simples é o MLR (*Multivariate Least Regression*), que justamente por ser uma regressão linear simples pelo método dos mínimos quadrados apresenta muitas limitações e desta forma não tem sido comumente empregado. Este método pode levar à soluções instáveis no caso de matrizes posto-deficientes quando invertidas ou a soluções indefinidas, no caso do sistema possuir mais variáveis que amostras.

Outra técnica de maior aplicação que a MLR é a PCR (*Principal Component Regression*), que utiliza a regressão por mínimos quadrados, mas resolve os problemas numéricos da MLR realizando um tratamento nos dados de entrada chamado PCA (GLEN, DUN III e SCOTT, 1989). O PCA (*Principal Component Analysis*) trata-se da redução de dimensionalidade num conjunto de dados multivariável, transformando as variáveis em projeções ortogonais (variáveis latentes) que eliminam a correlação entre elas mesmas e concentram as informações importantes. MEDJELL e SKOGESTAD (1993) utilizaram PCR em uma coluna de destilação de alta pureza.

Entretanto, a técnica mais utilizada nos últimos anos para inferir propriedades de colunas de destilação é a PLS (*Partial Least Squares*), que utiliza PCA nos dados de entrada e saída, de modo a maximizar a covariância entre os mesmos. O modelo resultante desta técnica é simplesmente a relação existente entre as variáveis latentes, que pode ser linear ou não-linear. Originalmente foi desenvolvido o LPLS (*Linear Partial Least Squares*), mas como a maioria dos sistemas é governada por comportamentos não-lineares, vários métodos novos foram desenvolvidos. O primeiro deles foi o QPLS (*Quadratic Partial Least Squares*) proposto por WOLD, KETTANEH-WOLD and SKAGERBERG (1989), em que funções quadráticas são utilizadas na regressão interna do PLS.

Alternativamente às técnicas PLS, redes neurais também podem ser aplicadas a inferências em colunas de destilação (GUPTA, GUPTA e SINGH, 2005). Neste método, conhecido como NN (*Neural Network*), os modelos obtidos provêm de mecanismos que imitam o funcionamento de uma rede de neurônios.

Além das técnicas apresentadas, tornou-se comum a partir da década de 90, o uso de técnicas conjugadas, que foram criadas principalmente para suprir as limitações decorrentes dos modelos LPLS, QPLS e das redes neurais quando usados isoladamente. Os modelos LPLS e QPLS não conseguem representar fidedignamente um processo de alta não linearidade, ao passo que as redes neurais quando processam muitos dados apresentam uma lenta convergência. Redes neurais somadas ao PLS (NNPLS) e lógica Fuzzy somada ao PLS são exemplos de modelos conjugados, em que as projeções do PLS são utilizadas para remover colinearidade e reduzir dimensionalidade, enquanto que as redes neurais e a lógica Fuzzy são utilizadas como modelo interno para capturar a não-linearidade no espaço projetado pelas variáveis latentes.

QIN e McAVOY (1992) propuseram a técnica que alia NN com PLS e mostraram que a rede neural quando utilizada em conjunto com PLS é melhor que quando usada isoladamente. BAFFI, MARTIN e MORRIS (1999) também mostraram bons resultados quando aplicaram NNPLS em uma inferência de pH.

BANG, YOO e LEE (2003) foram os primeiros a aliar uma técnica baseada na inteligência humana, a lógica Fuzzy à técnica PLS, concluindo que a combinação entre os dois métodos é efetivamente de simples implementação comparativamente à técnica que utiliza redes neurais.

A técnica Fuzzy, por sua vez, além de ser aplicada com PLS, pode ser usada com a própria NN, como mostrou LUO, SHAO e ZHANG (1995), que utilizou a técnica Fuzzy para construir a rede neural responsável pela geração de um modelo aplicado a uma coluna de alta pureza, simplificando dessa forma a rede neural para diminuir seus problemas de lenta convergência.

1.2.2 Seleção de Variáveis

A seleção de variáveis é dividida em três importantes grupos: busca exaustiva, métodos evolutivos e métodos de busca aleatória.

Os métodos de busca exaustiva não são empregados com frequência, pois consistem na elaboração de modelos com todas as combinações possíveis entre as variáveis. Dessa forma, só devem ser empregados em casos de sistemas com poucas variáveis de entrada, caso contrário o custo computacional e o tempo de convergência são elevados.

Entre os métodos evolutivos estão: o *Forward Selection* (FS), o *Backward Elimination* (BE), o *Stepwise Regression* (SR) e o *Stepwise Regression based on Model Predictions* (SRMP). Os três primeiros são métodos clássicos já bastante conhecidos e explorados na literatura (MONTGOMERY e PECK, 1982) e o SRMP (FINKLER, 2003) é uma modificação do SR, e desta forma pode-se dizer que é um refinamento do mesmo.

No FS, o modelo é construído em etapas e a cada uma delas uma variável é introduzida ao modelo. A adição de variáveis finda quando não há mais melhora significativa no modelo ou todas as variáveis já foram incluídas. O BE é similar ao FS, mas ao invés de adição, é utilizada a remoção de variáveis a cada etapa. O SR é uma combinação dos FS e BE, onde a

cada adição de variável é realizada uma verificação para eliminar variáveis redundantes. Os critérios utilizados para quantificar a influência das variáveis no modelo podem ser a PRESS (*Predictive Error Sum of Squares*) ou a correlação das variáveis com a saída. Por fim, o SRMP é similar ao SR, no entanto se difere pelo fato de levar em consideração conjuntos de entrada divididos randomicamente entre os dados, reservando uma parte para validação.

Entre os métodos de busca aleatória o mais utilizado em destilação é Algoritmo Genético (AG), técnica inspirada nos mecanismo de evolução natural e na genética. O algoritmo modela uma solução para um problema específico em uma estrutura de dados como a de um cromossomo aplicando operadores que recombina estas estruturas preservando informações críticas. Numa interpretação formal, o algoritmo genético refere-se ao modelo introduzido e estudado por HOLLAND (1975) e seus estudantes (e.g., DEJONG, 1975). Ainda hoje a maior parte da teoria existente sobre algoritmos genéticos aplica-se totalmente ou primariamente ao modelo introduzido por Holland, assim como variações do que é referido em seu artigo como algoritmo genético canônico. Numa utilização mais abrangente do termo, um algoritmo genético é qualquer modelo baseado em população que utiliza operadores de seleção e recombinação para gerar novos pontos amostrais em um espaço de busca.

Existem ainda outros métodos, como o Recozimento Simulado (*Simulated Annealing*), introduzido por KIRKPATRICK (1983). Este método é o mais antigo e é o segundo mais utilizado depois do AG. Como vantagem, apresenta uma implementação simples, entretanto não tem sido utilizado com tanta frequência na seleção de variáveis de colunas de destilação como os AG. Resumidamente, esta técnica simula o cozimento de um sólido que passa a ser lentamente resfriado até a cristalização em um nível mínimo de energia. De ponto de vista de otimização, o Recozimento Simulado explora a característica chave do processo de gerar transições para estados de energia mais altos, aplicando a novos estados um critério de probabilidade de aceitação/rejeição (SUTTER e KALIVAS, 1993).

1.3 Estrutura da Dissertação

Resumidamente, nesta dissertação são mostrados os resultados referentes à construção e implementação de analisadores virtuais em duas colunas de destilação de tolueno em uma indústria petroquímica. Dessa forma, todas as técnicas utilizadas neste trabalho são discutidas enfatizando suas aplicações em destilação.

No Capítulo 2, a unidade estudada é detalhada, pois a compreensão de seu funcionamento é imprescindível no desenvolvimento dos analisadores. No Capítulo 3 é apresentada a formulação de simulações estacionárias e dinâmicas da unidade, que são usadas tanto no estudo do processo quanto no desenvolvimento dos analisadores. Além disso, este capítulo aborda a coleta de dados na planta.

No Capítulo 4 aborda-se o desenvolvimento de modelos e seleção das variáveis que os constituem. São realizadas comparações entre modelos lineares e não-lineares utilizando as técnicas LPLS, QPLS, BTPLS e Fuzzy-PLS. São comparadas também as técnicas de seleção

de variáveis SRMP e AG. Por fim, no Capítulo 5 é mostrada a implementação dos modelos na indústria e no Capítulo 6 são apresentadas as conclusões do trabalho.

1.4 Técnicas de Construção de Modelos e Seleção de Variáveis Utilizadas no Trabalho

Construção de modelos: Optou-se somente por utilizar métodos empíricos no que diz respeito à construção de modelos. Em geral os modelos com base fenomenológica quando aplicados em processos que não apresentam uma grande complexidade tendem a representar com eficiência o comportamento real da planta. Entretanto, para sistemas complexos, seu equacionamento torna-se complicado, requerendo muito tempo em seu desenvolvimento. Além disso, podem surgir dificuldades na estimação de parâmetros, principalmente quando o número de fatores a serem estimados é alto. Os modelos empíricos, por serem tratamentos estatísticos, necessitam apenas de dados de processo representativos para que sofram transformações e dêem origem a um modelo matemático. Dessa forma, por serem de fácil aplicação, representam uma boa alternativa de uso. Os modelos escolhidos que serão mostrados no Capítulo 4 são todos baseados nas técnicas PLS lineares e não-lineares e combinações destas técnicas. Tais técnicas foram escolhidas principalmente por estas serem as alternativas mais aplicáveis no caso de colunas de destilação dentre os modelos empíricos disponíveis, uma vez que conseguem lidar com a alta correlação entre as variáveis de entrada, agrupando-as em variáveis latentes. Além disso, nos modelos do tipo PLS as variáveis de saída também são combinadas e transformadas em variáveis latentes, o que simplifica o processo.

O método empírico MLR, por exemplo, é o modelo empírico disponível de mais simples implementação, entretanto apresenta problemas quando os dados de entrada são fortemente correlacionados. Em colunas de destilação, as temperaturas dos estágios, umas em relação às outras, apresentam em geral o mesmo comportamento quando sofrem mudanças. Aplicar um método de regressão a tais variáveis altamente correlacionadas leva a erros numéricos e singularidades.

Este problema pode ser contornado através da seleção de variáveis que sejam independentes entre si. No entanto quando não se dispõe de muitas medições torna-se difícil encontrar um número suficiente de variáveis para construção do inferidor, além de existir a possibilidade de se perder informações importantes contidas nas variáveis que não foram escolhidas.

O método PCR também não foi usado, pois utiliza a técnica PCA somente nos dados de entrada. As redes neurais geralmente apresentam problemas quanto ao tempo de processamento e exigem um grande conhecimento da técnica, pois se os parâmetros de ajuste tais como o número de neurônios que compõem a rede estiver impróprio para o caso estudado, a rede não conseguirá efetivamente prever o comportamento do sistema quando aplicada.

Seleção de variáveis: Optou-se neste trabalho por utilizar métodos de seleção de variáveis evolutivos e aleatórios, a fim de comparar os resultados aplicados ao caso estudado. Entre os evolutivos optou-se pelo SRMP, por este ser mais aperfeiçoado em relação ao SR, que por sua vez é uma evolução dos métodos FR e BE. O AG também foi testado, devido aos bons resultados obtidos com esta técnica quando comparada à técnicas clássicas. XU. e ZHANG (2001) mostraram que o AG é melhor que os métodos FR e BE e que apresenta resultados similares ou melhores quando comparado à técnica SR. Foi identificado que o grande problema dos métodos FR e BE é a não garantia de obtenção do melhor conjunto de dados no final das iterações, visto que nestes métodos, quando uma variável é adicionada/removida, não pode mais ser removida/adicionada. LEARDI e GONZÁLEZ (1998) mostraram que o AG pode gerar bons resultados quando for bem empregado apresentando-se como uma alternativa mais rápida que os métodos clássicos quando um grande número de variáveis é considerado.

Os métodos de busca exaustiva não foram usados devido ao elevado custo computacional, entretanto foram feitas comparações entre modelos que utilizam os métodos de seleção citados acima e combinações de variáveis tais como: perfil de temperatura mais vazões mássicas e pressão de topo, perfil de temperatura mais razões entre vazões, perfil de temperatura e pressão e perfil de temperatura.

Capítulo 2

Descrição da Unidade

2.1 Unidade de Aromáticos

O trabalho realizado foi feito dentro de uma unidade responsável pelo processamento de compostos aromáticos a qual faz parte de uma indústria petroquímica de 1º geração (COPEL S.A). Todos os produtos gerados nesta unidade são subprodutos da nafta, a principal matéria-prima da indústria em questão. Toda a alimentação da unidade de aromáticos é advinda de uma unidade de olefinas, que produz basicamente eteno e propeno, escoando uma corrente rica em compostos que variam de C4 até C10 para a unidade estudada. Esta por sua vez é dividida nas seguintes áreas:

- **Hidrogenação de compostos insaturados:** é responsável pela hidrogenação seletiva de alguns compostos aromáticos presentes na corrente C4-C10 e também pela separação dos compostos C4, C5 e C10 para obtenção de uma corrente C6-C9.

- **Extração de compostos aromáticos:** nesta área os compostos não-aromáticos (C6-C9) são separados dos compostos aromáticos através de um processo de extração líquido-líquido.

- **Separação de aromáticos:** é responsável pela separação dos aromáticos C6-C9 através de destilação. Os produtos desta área são: benzeno, tolueno, {*o-p-m*}- xilenos e C9 ARO.

- **Hidrodesalquilação de tolueno: é** responsável pela hidrogenação de tolueno para geração de uma corrente rica em benzeno que é processada na área de separação de aromáticos.

Os analisadores virtuais foram empregados em duas colunas de destilação de tolueno da unidade de extração de compostos aromáticos. Esta unidade possui cinco fracionadoras, conforme listadas abaixo:

- **Fracionadora de benzeno (FB):** recebe alimentação da unidade de extração de aromáticos e da unidade de hidrodesalquilação de tolueno. Separa o benzeno no topo da coluna dos demais produtos (tolueno, xilenos e compostos aromáticos C9-C9 ARO).

-Fracionadoras de tolueno (FT-1 e FT-2): têm como carga o fundo da fracionadora de benzeno e são responsáveis pela produção de tolueno (produto de topo). Os xilenos são o produto de fundo destas colunas.

-Fracionadora de xileno: Separa os xilenos (orto, para e meta) no topo dos compostos C9 ARO.

- Fracionadora de C9: Separa o C9 ARO de resíduos C10 que não foram excluídos na unidade de hidrogenação dos compostos C4-C10.

O detalhamento das colunas de destilação estudadas (FB, FT-1 e FT-2) será dado nas próximas seções.

2.1.1 Coluna de Benzeno (FB)

A alimentação da fracionadora de benzeno (FB) é composta basicamente de duas cargas que possuem vazões e composições diferentes. A primeira delas (Alimentação 1), de aproximadamente 40000 kg h^{-1} , é proveniente da unidade de extração de compostos aromáticos. A segunda carga (Alimentação 2), de aproximadamente 5000 kg h^{-1} é proveniente da unidade de hidrodesalquilação de tolueno. Eventualmente, a unidade opera apenas com a Alimentação 1. No Capítulo 3 serão apresentadas simulações realizadas com base em dados de planta do período de julho a agosto de 2004. A faixa de composições apresentada pelas duas alimentações durante este período pode ser vista na Tabela 2.1. Para simplificar, os compostos parafínicos e naftênicos serão chamados compostos não-ARO e o grupo dos xilenos e do etil-benzeno será chamado de C8 ARO.

Tabela 2.1: Composições das correntes de alimentação da fracionadora de benzeno.

	Alimentação 1 (% massa)	Alimentação 2 (% massa)
Benzeno	40-56	70-90
Tolueno	25-31	6-20
C8 ARO ({p,m,o}-xilenos e etil-benzeno)	15-25	0,5-6
C6, C7, C8 e C9 não-ARO (naftênicos e parafínicos)	0,000021-0,5	-
C9 ARO	1,3-5,1	-
Difenila	0-0,09	0-5

As composições de carga desta torre são obtidas através de análises laboratoriais, que são realizadas com a frequência de três vezes ao dia no caso da Alimentação 1 e de uma vez ao dia no caso da Alimentação 2. A FB opera com 55 pratos valvulados, sendo que o benzeno produto com 99,9% (massa) de pureza é removido pela retirada lateral da coluna, presente no prato 51 (fundo para topo) e a retirada de fundo segue para as duas colunas de tolueno. A alimentação da carga é realizada no prato 28. Nesta unidade existe a circulação de água proposital que em contato com o benzeno forma um azeótropo, o que facilita a retirada de benzeno pelo topo da coluna. Cerca de 1 kg/h de água é removido pelo topo da coluna após

separação no vaso de topo. A carga térmica do refeedor da coluna é resultante da circulação de vapor de média pressão (VM) no fundo da coluna. A torre possui uma medição de pressão no topo e 9 medições de temperatura ao longo da coluna. A Tabela 2.2 mostra os valores típicos das correntes da FB, como vazões, temperaturas, pressões e carga térmica.

Tabela 2.2: Correntes da FB – valores típicos.

Corrente / Local	Item	Unidade	Valor*
Carga	Vazão mássica	kg h ⁻¹	40000
	Temperatura	°C	130
Refluxo	Vazão mássica	kg h ⁻¹	56600
	Temperatura	°C	81
Fundo	Vazão mássica	kg h ⁻¹	15000
	Temperatura	°C	133-140
Retirada lateral	Vazão mássica	kg h ⁻¹	25000
	Temperatura	°C	82
Topo da coluna	Pressão manométrica	kgf cm ⁻²	0,14 – 0,19
Fundo da coluna	Pressão manométrica	kgf cm ⁻²	0,3 - 0,6
	Carga térmica	Mcal h ⁻¹	5,3

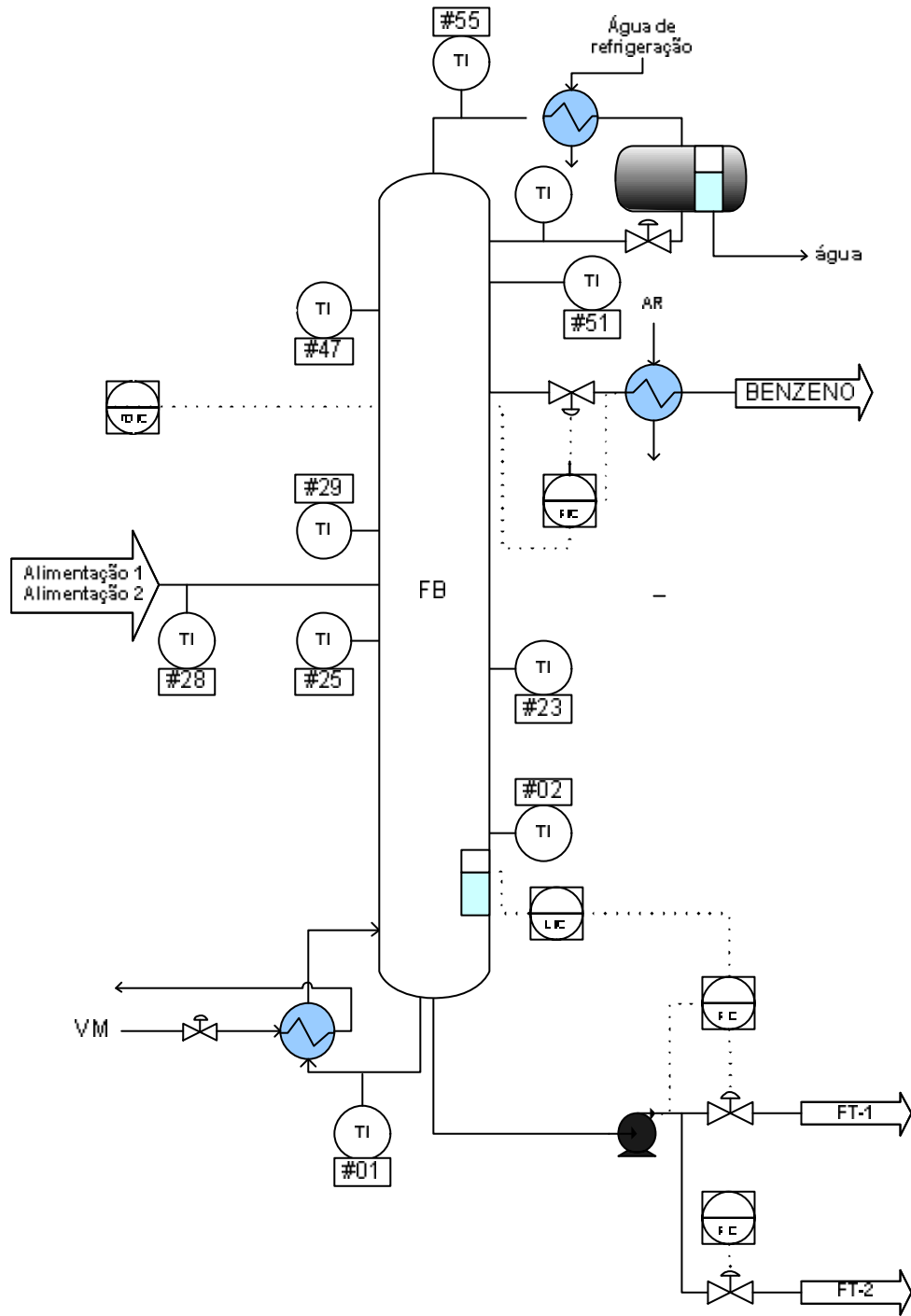
*Média dos valores de planta do período de janeiro a agosto de 2004.

A coluna opera com a retirada lateral controlada pela diferença de temperatura entre os pratos 29 e 47 e com o nível controlado pela vazão de alimentação da FT-1. A ilustra a FB com a localização das medições de temperatura. Cada medidor de temperatura é identificado pela sua localização (#23 – medidor de temperatura do estágio 23).

As dimensões da FB estão listadas na Tabela 2.3.

Tabela 2.3: Dimensões da FB.

Item	Unidade	Valor
Diâmetro	m	2,4
Espaçamento entre pratos	m	0,6



Esta coluna opera com vazão de carga de projeto em torno de 13000 Kg h⁻¹. Parte do tolueno produzido pode ser enviada diretamente à unidade de hidrodesalquilação de tolueno, e o restante é enviado para vasos intermediários (*shift*), de onde segue para tancagem de produto final, se estiver especificado.

O fundo da torre é enviado para a torre de xilenos, responsável pela separação de xilenos dos compostos mais pesados (C9 e C10).

A FT-2 opera de maneira similar a FT-1, diferenciando-se apenas no tamanho e consequentemente na quantidade de carga processada (aproximadamente metade em relação a FT-1). Esta coluna possui 63 pratos valvulados, com alimentação nos pratos 30 ou 36. A coluna opera no limite de carga de 7500 kg h⁻¹ e com uma razão de refluxo mantida em torno de 2. De maneira análoga a FT-1, nesta coluna a temperatura do prato 10 pode ser controlada pela retirada de condensado do refeedor.

A Tabela 2.4 mostra os valores médios de vazão, pressão, razão de refluxo e carga térmica das correntes das colunas FT-1 e FT-2 no período que serviu de base para o desenvolvimento das simulações (julho de 2004 a agosto de 2004). As dimensões das colunas estão listadas na Tabela 2.5.

Tabela 2.4: Valores médios das correntes das colunas FT-1 e FT-2.

Corrente / Local	Item	Unidade	FT-1	FT-2
Carga	Vazão mássica	kg h ⁻¹	14000	7500
Destilado	Vazão mássica	kg h ⁻¹	7500	4500
Fundo	Vazão mássica	kg h ⁻¹	6500	3000
Topo coluna	Pressão manométrica	kgf cm ⁻²	0,08	0,09
	Razão de refluxo		1,75	1,8
Fundo coluna	Carga térmica	Mcal h ⁻¹	2	1

Tabela 2.5: Dimensões das colunas FT-1 e FT-2.

Equipamento	Item	Unidade	FT-1	FT-2
Coluna	Diâmetro	m	1,6	1,2
	Espaçamento entre pratos	m	0,45	0,45
	Altura	m	31,6	39,5

2.1.2.1 Localização e Imprecisão das Medições das Colunas de Tolueno

A Tabela 2.6 mostra a listagem dos medidores de vazão existentes nas duas colunas de tolueno, com as respectivas imprecisões nas medidas calculadas com base no erro dos instrumentos de medição (placas de orifício) e dos transmissores. Verificou-se que a imprecisão para todos os medidores é de aproximadamente 0,78% do fundo de escala do medidor, ou seja, da vazão máxima de operação. O cálculo da imprecisão dos medidores é

importante devido à futura utilização das medidas on-line na construção e na implementação do analisador virtual nas duas colunas. Desta forma, a confiabilidade de cada equipamento torna-se imprescindível, pois reflete diretamente nas predições que serão realizadas.

Tabela 2.6: Medidores de vazão das FT-1 e FT-2.

	Medidor	Vazão máxima (Kg h⁻¹)	Imprecisão (Kg h⁻¹)
FT-1	Carga	22060	171,23
	VA para refeedor	5937	46,08
	Refluxo	16433	127,55
	Tolueno	10373	80,52
	Fundo	9500	73,74
FT-2	Carga	8100	62,87
	Tolueno	4508	34,99
	Refluxo	8309	64,50
	CM do refeedor	2795	21,70
	Fundo	3592	27,88

De forma similar às medições de vazão, estimou-se a inacuracidade das medições de temperatura das torres. Encontrou-se um valor de 1,5°C para todos os medidores que são do tipo termo resistências Pt100.

Na Tabela 2.7, encontra-se a listagem das termorresistências presentes nas duas torres. Observa-se que o nome dado a cada medidor é vinculado a sua localização para facilitar o desenvolvimento do trabalho.

As localizações dos medidores de vazão e temperatura listados acima, assim como os de pressão e nível podem ser visualizadas na Figura 2.2.

Tabela 2.7: Medidores de temperatura das colunas FT-1 e FT-2.

FT-1		FT-2	
Medidor	Localização	Medidor	Localização
#01	corrente de fundo	#01	corrente de fundo
#02	prato 02	#02	prato 02
#15	prato15	#22	prato 22
#20	prato 20	#29	prato 29
#21	prato 21	#34	prato 34
#29	prato29	#37	prato 37
#31	prato 31	#58	prato 58
#55	prato 55	#62	corrente de refluxo
#59	corrente de refluxo	#63	corrente de topo
#60	corrente de topo		

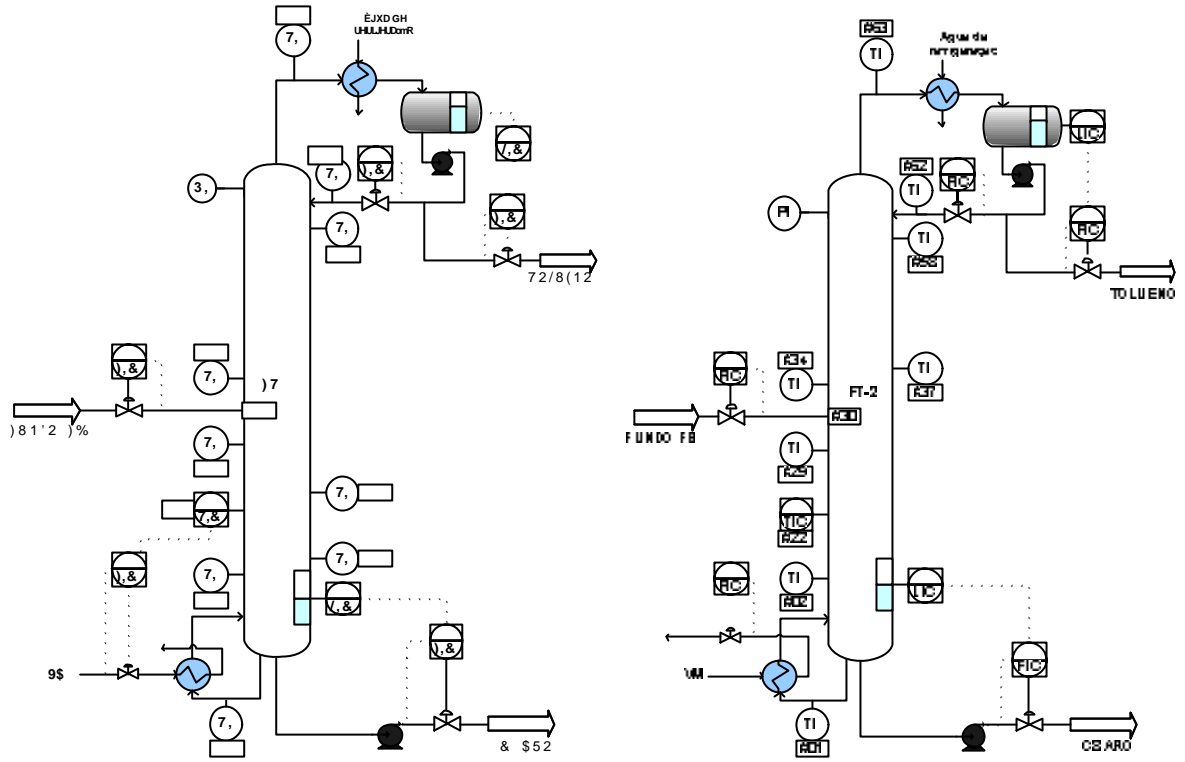
2.1.2.2 Análises Laboratoriais

As purezas do tolueno no topo das fracionadoras FT-1 e FT-2 são medidas através de análises laboratoriais realizadas diariamente que fornecem as composições das correntes de produto, incluindo os contaminantes, que são responsáveis pela perda de especificação do tolueno. Além do topo, são realizadas análises nos vasos de *shift*, que são vasos intermediários para onde o produto segue antes de ir para tancagem final. Desta forma, se houver alguma contaminação devido a algum distúrbio nas colunas, o produto ainda pode ser diluído nesta tancagem intermediária. As duas fracionadoras não contam com análises de composição de carga, e desta forma as análises de topo e dos vasos de *shift* são os únicos indicativos de contaminação.

Os contaminantes que podem estar presentes no topo destas duas torres são:

- **Compostos não aromáticos (não-ARO)**: Teores acima de 5000 ppm destes contaminantes podem tirar o tolueno de sua especificação. A presença destes contaminantes em alta quantidade se deve principalmente a problemas ocorridos na unidade extratora de aromáticos, que fornece a alimentação para a FB.
- **Benzeno (BENZ)**: Sua presença ocorre devido a problemas de operação na FB, que ocasionam perda de benzeno pelo fundo da fracionadora.
- **C8 aromáticos (C8 ARO)**: Por ser produto de fundo, sua presença ocorre devido problemas de operação nas próprias fracionadoras de tolueno, tais como temperaturas elevadas nos pratos das torres.

A Tabela 2.8 mostra a especificação do tolueno e com os valores limites de contaminantes no topo das duas colunas de tolueno.



problemas poderiam ser resolvidos através do aumento da frequência de análises laboratoriais, ou mesmo com a instalação de analisadores em linha, que podem fornecer medidas de composição em intervalos curtos (minutos em minutos) com uma alta confiabilidade. Entretanto, nos dois casos, os custos relacionados à implementação e a manutenção dessas medidas são altos. No caso específico de um analisador em linha as principais desvantagens são as seguintes:

- Uso de equipamentos auxiliares: os analisadores em linha requerem amostradores, padrões para calibração, proteções ambientais, instrumentos estes que precisam ser instalados e mantidos;
- Acompanhamento freqüente: analisadores em linha requerem uma grande atenção por parte dos engenheiros e técnicos para garantir alta confiabilidade;
- Tempo de resposta: alguns analisadores possuem elevado tempo de resposta, principalmente se forem utilizados para diversos pontos de análise;
- Especificidade: analisadores em linha devem ser selecionados e implementados com diferentes detalhamentos conforme sua aplicação.

Um analisador virtual, neste caso, torna-se uma solução viável economicamente e que pode ser desenvolvida com simplicidade. O custo de implementação relacionado a um analisador virtual consiste no custo de seu desenvolvimento e de manutenção, que tende a ser mínimo em relação ao custo de manutenção de analisadores em linha por exemplo, uma vez que se trata de um cálculo realizado num sistema *on-line*. A manutenção neste caso, pode ser a atualização do modelo se porventura ele vir a se tornar desatualizado devido a mudanças operacionais.

Na etapa de desenvolvimento, o custo associado se refere primeiramente ao levantamento de dados de planta, o que pode exigir alguns testes na unidade em que os analisadores são empregados com a realização de análises laboratoriais extras durante um período. De posse destes dados, são utilizadas ferramentas matemáticas e de engenharia a fim de se obter um modelo matemático que dará origem ao analisador que será empregado.

Em resumo, os analisadores desenvolvidos para as colunas de tolueno têm como objetivo reduzir custos operacionais devido a uma possível redução das análises laboratoriais e a não-utilização de vasos de *shift*, e melhorar o controle do processo, para que os operadores da unidade possam tomar medidas corretivas em tempo hábil quando ocorrem contaminações na unidade.

Os componentes de topo a serem inferidos nas colunas de tolueno são: o tolueno, que por ser o produto de topo deve ter sua composição controlada com uma alta frequência e os compostos não-ARO, que são os principais distúrbios das duas colunas de tolueno. Uma vez identificada a contaminação por não-ARO é possível corrigir os problemas que ocasionam seu aparecimento e que provém da unidade extratora de compostos aromáticos. O benzeno por sua vez não aparece com frequência fora da especificação desejada no topo das duas colunas,

e quando o desvio ocorre, pode ser facilmente identificado através de problemas de operação na FB. A concentração do grupo C8 ARO é inversamente proporcional à quantidade de tolueno. É observado que quando ocorre queda no percentual de tolueno no topo, a quantidade de C8 ARO aumenta.

Capítulo 3

Modelos Estacionários e Dinâmicos

Neste capítulo as modelagens das colunas de benzeno e tolueno são abordadas, pois são importantes ferramentas auxiliares para o desenvolvimento dos analisadores. Um modelo do processo desenvolvido em simulações fornece as características estacionárias e dinâmicas do sistema em estudo que podem ser utilizadas na geração dos modelos matemáticos usados na construção dos inferidores.

Primeiramente é mostrado o desenvolvimento de simulações estacionárias, seguido das simulações dinâmicas. Dentro desses itens, aborda-se a coleta e tratamento de dados, a escolha do modelo termodinâmico, a eficiência das colunas de destilação, as análises de sensibilidade e o estudo do comportamento dinâmico das variáveis presentes nas fracionadoras.

Por fim são apresentados resultados referentes à realização de testes na planta utilizados na validação das simulações. Os testes além de indicarem os pontos fracos e fortes das simulações foram utilizados para identificação prévia de quais variáveis independentes possuem maior sensibilidade a variações nas saídas (composições de tolueno e não-ARO). As variáveis mais sensíveis são candidatas a serem usadas nas construções dos modelos para inferência, abordados no Capítulo 4.

3.1 Desenvolvimento do Modelo Estacionário

Uma simulação estática que reproduza com fidelidade o comportamento da unidade estudada é fundamental para a realização de estudos específicos sobre o comportamento das colunas de benzeno e tolueno, uma vez que nas simulações podem ser realizados testes que na unidade industrial seriam inviáveis. Além disso, a simulação estacionária serve de base para a construção de uma simulação dinâmica, onde as constantes de tempo são incorporadas, e por consequência o processo é representado com maior fidelidade. Basicamente, pelo processo estar representado tanto nas simulações estacionária e dinâmica, é possível utilizá-las para estudar a unidade, levantar dados e realizar testes com o analisador virtual desenvolvido.

Entretanto, para o desenvolvimento da simulação estacionária, primeiramente é preciso coletar dados representativos do processo para serem utilizados como entradas na simulação, definir qual será a modelagem termodinâmica adequada para este processo e determinar a eficiência dos estágios de equilíbrio líquido-vapor das colunas. Estes assuntos serão explorados nos próximos itens desta seção. As simulações estacionária e dinâmica foram desenvolvidas nos simuladores comerciais ASPEN PLUS[®] v. 11 e ASPEN DYNAMICS[®] v. 11, respectivamente.

3.1.1 Coleta e Tratamento dos Dados

Os dados necessários para a construção da simulação foram obtidos através de um banco de dados do processo, de onde foi possível coletar os valores das vazões, pressões, temperaturas, níveis e composições referentes às três colunas estudadas. Os dados foram coletados com uma frequência de 1 minuto num período de um ano e, após, analisados para identificar um período de tempo estacionário, onde os valores não são afetados por distúrbios e transientes. Este tratamento é fundamental para que a simulação consiga reproduzir quaisquer dados em estado estacionário.

A seguir, com o intervalo já definido, os valores médios obtidos foram utilizados nas especificações das correntes e dos equipamentos no simulador e a partir da simulação pronta, vários outros intervalos foram testados para verificar a reprodutibilidade da simulação. Dessa forma, foi possível quantificar a qualidade das medições das colunas, uma vez que a imprecisão das medidas pode afetar o desempenho da simulação. Como exemplo, a Tabela 3.1 mostra uma comparação de dados de simulação e planta num determinado intervalo (o modelo termodinâmico utilizado foi o NRTL, escolhido conforme metodologia apresentada no item 3.1.2).

Tabela 3.1: Comparação entre dados de simulação e de planta.

	Simulação	Planta	Erro Abs.
FT-1			
Tolueno produto (kg h ⁻¹)	7813	7542	271
Fundo (kg h ⁻¹)	6143	5742	401
Razão refluxo	1,85	1,91	0,05
Carga térmica refeedor (Mkcal h ⁻¹)	1,96	2,11	0,02
Benzeno topo (kg kg ⁻¹)	0,000002	0,000001	0,000001
Tolueno topo (kg kg ⁻¹)	0,9970	0,9970	0
Não-aro topo (kg kg ⁻¹)	0,002674	0,002896	0,000222
FT-2			
Tolueno produto (kg h ⁻¹)	4132	4470	338
Fundo (kg h ⁻¹)	3246	3190	56
Razão refluxo	1,98	1,83	0,1
Carga térmica refeedor (Mkcal h ⁻¹)	1,08	1,12	0,04
Benzeno topo (kg kg ⁻¹)	0,0000018	0,0000008	0,000001
Tolueno topo (kg kg ⁻¹)	0,9969	0,9968	2E-05
Não-aro topo (kg kg ⁻¹)	0,0028160	0,0030575	0,0002415

De acordo com os dados relativos a Tabela 3.1, é possível concluir que a simulação está representativa, pois os valores de composições estão com um erro absoluto admissível e o erro absoluto das vazões estão na faixa de erro de medição. Foram construídas duas simulações estacionárias: uma delas com as duas alimentações na FB (Alimentação 1 e 2) outra contando apenas com a Alimentação 1.

3.1.2 Escolha do Modelo Termodinâmico

A escolha do modelo termodinâmico é fundamental no desenvolvimento de qualquer simulação, pois se refere à modelagem do equilíbrio de fases presentes no sistema (no caso de uma destilação, das fases líquida e vapor) que podem apresentar desvios do comportamento ideal, necessitando nesses casos, de um modelo que leve estes desvios em consideração. No presente estudo, como as simulações foram construídas com a FB, e esta apresenta a formação de um azeótropo entre água e benzeno (Capítulo 2, Seção 2.1.1), é necessário testar vários modelos, pois a formação deste azeótropo se caracteriza por ser um desvio da idealidade.

Em geral para a maior parte das destilações um modelo termodinâmico baseado em equações de estado tanto para a fase líquida quanto para a fase vapor já são suficientes, no entanto quando existem não idealidades, alguns modelos que utilizam o cálculo do coeficiente de atividade para a fase líquida são necessários.

O ASPEN PLUS[®] possui modelos de equação de estado e de coeficiente de atividade, tornando possível o teste de diferentes modelos e realização de uma comparação. Foram escolhidos os modelos que se adaptam a petroquímica, com base nas recomendações do software, os quais são listados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Modelos termodinâmicos testados.

Modelo termodinâmico	Classificação	Recomendações
Peng-Robinson (PR)	Equação de estado	Aplicações com hidrocarbonetos, como processos petroquímicos
Soave-Redlich-Kwong (RWS)	Equação de estado	Processos petroquímicos
UNIFAC (UNIF)	Coeficiente de atividade	Processos com alta não-linearidade e não idealidade
UNIQUAC (UNIQ)	Coeficiente de atividade	Processos com alta não-linearidade e não idealidade
Van-Laar	Coeficiente de atividade	Processos com alta não-linearidade e não idealidade
NRTL (non-random two-liquid)	Coeficiente de atividade	Processos com alta não-linearidade e não idealidade

Os modelos da Tabela 3.2 foram testados e observou-se o comportamento da composição no topo das colunas. Os perfis de temperatura e de composições ao longo das colunas foram observados, entretanto não houve diferenças significativas entre os modelos nestes casos. Já nas concentrações de topo, principalmente da FB, observou-se uma diferença entre os modelos que foi considerada como fator determinante na escolha. Dessa forma, o modelo que mais se aproximou das concentrações da planta foi o NRTL, o que pode ser visto na Tabela 3.3.

Tabela 3.3: Comparação entre os valores reais de planta e os valores de simulação das composições de topo dos principais componentes das colunas de benzeno e tolueno para diferentes modelos termodinâmicos simulados.

Coluna	Componente de topo	Planta	NRTL	PR	RWS	UNIF	UNIQ	VAN LAAR
FB	BENZ	0,9993	0,9994	0,9988	0,9986	0,9994	0,9993	0,9962
	TOL	3,61E-05	6,17E-05	1,38E-06	1,22E-05	1,33E-06	9,05E-07	8,54E-05
	Não-ARO	6,54E-04	5,91E-04	1,12E-03	1,31E-03	5,80E-04	6,54E-04	1,81E-03
FT-1	BENZ	8,11E-07	4,15E-07	4,95E-07	2,79E-09	2,17E-04	2,06E-07	1,32E-08
	TOL	0,9970	0,9980	0,9974	0,9980	0,9980	0,9980	0,9978
	Não-ARO	2,90E-03	1,81E-03	2,36E-03	1,87E-03	1,63E-03	1,83E-03	2,02E-03
FT-2	BENZ	7,55E-07	2,20E-07	4,79E-05	2,71E-09	2,10E-04	2,00E-07	1,28E-08
	TOL	0,9969	0,9969	0,9966	0,9969	0,9969	0,9969	0,9967
	Não-ARO	3,06E-03	2,64E-03	3,17E-03	2,70E-03	2,47E-03	2,54E-03	2,81E-03

As equações do modelo NRTL implementadas no ASPEN são:

$$\ln g_i = \frac{\sum_j x_j t_{ji} G_{ji}}{\sum_k x_k G_{ki}} + \sum_j \frac{x_j G_{ij}}{\sum_k x_k G_{kj}} \left(t_{ij} - \frac{\sum_m x_m t_{mj} G_{mj}}{\sum_k x_k G_{kj}} \right) \quad (3.1)$$

$$G_{ij} = \exp(-a_{ij} t_{ij}) \quad (3.2)$$

$$t_{ij} = a_{ij} + \frac{b_{ij}}{T} + e_{ij} \ln T + f_{ij} T \quad (3.3)$$

$$a_{ij} = c_{ij} + d_{ij}(T - 273.15K) \quad (3.4)$$

$$t_{ij} = 0 \quad (3.5)$$

$$G_{ii} = 1 \quad (3.6)$$

onde $a_{ij}, b_{ij}, c_{ij}, d_{ij}, e_{ij}, f_{ij}$ são parâmetros binários determinados através de regressão e que estão presentes no banco de dados do simulador.

3.1.3 Determinação da Eficiência

Quando se reproduz uma coluna de destilação em uma simulação, é preciso levar em consideração a eficiência dos pratos desta coluna, uma vez que num processo de separação como a destilação, ocorrem desvios no equilíbrio líquido vapor. Tais desvios existem devido a limitações na transferência de massa, que impedem que o vapor que deixa um determinado estágio esteja em perfeito equilíbrio com o líquido correspondente.

A eficiência em uma coluna varia segundo o conceito e pode ser obtida experimentalmente ou estimada através de correlações empíricas.

Existem quatro tipos de eficiências comumente usadas (LOCKETT, 1986):

- Global;
- Murphree;
- Local;
- Vaporização.

A eficiência global (E_T) diz respeito a toda a coluna, relacionando o número de pratos ideal e o número de pratos real, de acordo com a equação (3.7):

$$E_T = \frac{N_{ideal}}{N_{real}} \quad (3.7)$$

Já a eficiência de Murphree se refere à eficiência em um estágio específico da coluna, definida como a razão entre a mudança real na concentração média do vapor entre dois estágios e a mudança que ocorreria se o vapor estivesse em equilíbrio com o líquido que sai do estágio. A equação (3.8) descreve a eficiência de Murphree referida à fase vapor.

$$E_M = \frac{\bar{y}_n - \bar{y}_{n-1}}{y_n^* - \bar{y}_{n-1}} \quad (3.8)$$

A eficiência de vaporização é definida a partir da equação de Murphree tomando simplesmente a razão entre a composição de vapor que deixa um estágio e a composição de vapor que deixaria o mesmo estágio em equilíbrio termodinâmico.

$$E_v = \frac{y_n}{y_n^*} \quad (3.9)$$

Por fim, a eficiência pode ser tratada como local (ou pontual), se referindo a uma determinada região pertencente a um estágio. Lewis obteve uma relação entre a eficiência global e a eficiência de Murphree, dada pela equação (3.10) (LUYBEN, 1992):

$$E_T = \frac{\ln[1 + E_M(I - 1)]}{\ln I} \quad (3.10)$$

onde

$$I = \frac{mG}{L} \quad (3.11)$$

e

$$m = \frac{a_{ij}}{[1 + (a_{ij} - 1)x_i]^2} \quad (3.12)$$

Nas equações (3.11) e (3.12), G e L são as taxas de gás e líquido respectivamente no prato em questão, a_{ij} é a volatilidade relativa do componente mais volátil (i) em relação ao menos volátil (j), e x_i é a fração molar de i no líquido.

No caso das colunas de benzeno e tolueno, estimou-se a eficiência global na época em que as mesmas foram projetadas, obtendo-se um valor em torno de 70%. Calculando-se m e λ a partir das equações (3.11) e (3.12) com base em dados de simulação, chegou-se a uma eficiência de Murphree de 90% em cada prato a partir da equação (3.10), considerando que todos os pratos atuam com a mesma eficiência. Este parâmetro foi utilizado como entrada nas simulações para as três colunas estudadas.

3.2 Desenvolvimento do Modelo Dinâmico

3.2.1 Informações Adicionais

Para o desenvolvimento da simulação dinâmica, é necessário especificar qual é o acúmulo nos vasos de refluxo e no fundo das colunas bem como suas dimensões. A Tabela 3.4 mostra as dimensões dos vasos de refluxo e do fundo das colunas.

Especificaram-se também informações referentes à geometria dos pratos bem como o tipo de prato, para que possam ser feitas estimativas de área ativa e a relação L_v/D (razão entre o comprimento do vertedouro e o diâmetro da bandeja). Existem modelos para o cálculo desses fatores no Aspen Plus[®], que dependem da simplicidade dos pratos. Neste caso, como as colunas possuem pratos valvulados, o tipo de prato considerado foi simples.

Tabela 3.4: Dados usados no desenvolvimento da simulação dinâmica.

	FB	FT-1		FT-2	
	Fundo	Refluxo	Fundo	Refluxo	Fundo
Tipo	-	Horizontal	-	Horizontal	-
Forma da cabeça	Elíptica	Hemisférica	Hemisférica	Elíptica	Hemisférica
Diâmetro (m)	0,94	1,2	0,864	1	0,438
Comprimento/Altura (m)	3,05	3,5	3,05	3	2,5
Fração do volume ocupado pelo líquido	0,66	0,6	0,5	0,5	0,5

Da mesma forma que a simulação estacionária, construíram-se duas simulações dinâmicas, uma para a situação em que a FB recebe apenas a Alimentação 1 e outra em que a FB recebe as duas alimentações existentes.

3.2.2 Análise do Comportamento Dinâmico das Colunas de Tolueno

A análise do comportamento dinâmico das colunas de tolueno é importante no estudo do processo, pois permite averiguar questões relativas ao tempo morto e de assentamento das variáveis chaves e secundárias das colunas. Em outras palavras, permite a determinação de quanto tempo a composição de topo, por exemplo, levará para chegar ao estado estacionário (tempo de assentamento) depois de ser feita uma alteração na operação da coluna, e ainda, quanto tempo ela levará para começar a variar depois da alteração (tempo morto).

Determinando o tempo de assentamento de cada medição de temperatura das colunas e comparando com o tempo de assentamento das composições de topo, é possível determinar se estas temperaturas são indicativos imediatos de mudança de composição.

Para realizar esta análise, foram feitos degraus de 1 tn/h nas vazões de refluxo e de 3° C na temperatura dos pratos de controle das duas colunas de tolueno. Os tempos de assentamento e morto encontrados médios para cada variável são mostrados na Tabela 3.5. Observa-se que a única composição de topo mostrada foi de TOL, uma vez que as outras (não-ARO, BENZ, C8 ARO) apresentaram os mesmos valores de tempo.

Tabela 3.5: Tempo de assentamento e tempo morto das temperaturas e na composição de TOL (topo) das colunas FT-1 e FT-2.

	FT-1		FT-2		
	q (tempo morto (h))	t (tempo de assentamento (h))	q (tempo morto (h))	t (tempo de assentamento (h))	
TOL	0,2	2,5	TOL	0,1	2
#01	0,2	2,7	#01	0,1	2,5

#02	0,2	2,7	#02	0,1	2,5
#15	0,2	3,7	#22	0,1	2
#20	0,2	3,5	#29	0,1	1,5
#21	0,2	3,5	#34	0,1	1,5
#29	0,2	0,4	#37	0,1	1,5
#31	0,2	0,6	#58	0,1	3
#55	0,2	2,0	#63	0,1	2,5
#60	0,2	2,0			

O estudo dinâmico cujos resultados foram mostrados na Tabela 3.5 foi de extrema importância para verificação das características dinâmicas das duas colunas, mas além disso, esse estudo proporcionou a avaliação das diferenças existentes entre as fracionadoras, tanto dinâmicas quanto físicas. A primeira diferença identificada foi em relação aos tempos de assentamento, os quais variaram substancialmente conforme a localização dos pratos no caso da coluna FT-1, entretanto no caso da coluna FT-2 este comportamento não foi verificado. Na coluna FT-1 os tempos de assentamento dos estágios intermediários variam de 3,5 a 3,7 h, enquanto que nos demais estágios a variação é menor (0,4 a 2 h). Já na coluna FT-2 observou-se que os tempos de assentamento variaram em menor grau em relação uns aos outros atingindo um máximo de 3 h. Estudando-se então as origens da diferença de comportamento dinâmico, observou-se que a coluna FT-1 apresenta variações mais altas de temperatura quando submetida a degraus no refluxo e no prato de controle em relação à FT-2, e que para os estágios em que as alterações são maiores, os tempos de assentamento também são mais pronunciados. Em outras palavras, observou-se que as temperaturas da coluna FT-1 são mais sensíveis que as temperaturas da FT-2 quando se realizam alterações na simulação, indicando que o perfil de temperatura da FT-1 pode ser um bom indicativo de mudança de composição no topo da mesma.

A Tabela 3.6 mostra os estágios de cada coluna e as variações máximas que ocorreram quando as fracionadoras foram submetidas a variações na vazão de refluxo. É importante notar que na FT-2 as variações são similares em todos os estágios, exceto no estágio 58, que foi justamente o que apresentou o maior tempo de assentamento (3 h). Já a FT-1 apresentou alguns estágios de maior sensibilidade, que também foram os que apresentaram o maior tempo de assentamento. A identificação destes estágios de maior sensibilidade é importante pois fornece um indicativo de que variáveis são mais representativas para compor um modelo para inferência de tolueno e não-ARO no topo das colunas. Analisando a 3.6 conclui-se que os estágios mais sensíveis da coluna FT-1 são: #02, #15, #20, #21 e #55, e para a FT-2 são os estágios #22 e #58.

Tabela 3.6: Variações em cada estágio de temperatura das colunas FT-1 e FT-2.

FT-1		FT-2	
Variável	Variação (°C)	Variável	Variação(°C)
#01	0,4	#01	1,3
#02	2	#02	0,5
#15	10	#22	2
#20	12	#29	0,3
#21	8	#34	0,3
#29	1	#37	0,5
#31	1	#58	4
#55	6	#63	0,7
#60	1,5		

3.3 Aperfeiçoamento dos Modelos Estacionários e Dinâmicos

Para o desenvolvimento do analisador virtual para as duas colunas de tolueno é fundamental que se disponha de dados de processo em regiões de operação distintas, para que o modelo gerado que será posteriormente utilizado no analisador abranja todos os intervalos de operação possíveis, incluindo aqueles em que os produtos saem de especificação. Com esse objetivo foi realizado um planejamento de testes a fim de gerar dados teóricos a partir das simulações que possam prever o comportamento da planta real submetida a perturbações. Estes resultados foram fundamentais para a definição das perturbações que foram efetivamente empregadas na planta real e auxiliaram significativamente na realização do que foi proposto.

3.3.1 Planejamento de Perturbações nas Colunas Industriais a Partir das Simulações Estacionária e Dinâmica

O planejamento de perturbações consistiu de várias etapas:

- Escolha das variáveis de processo que foram alteradas nos testes;
- Definição da região teste das variáveis escolhidas;
- Definição do número mínimo de pontos (perturbações dentro do intervalo definido).

Escolha das variáveis de processo

As perturbações foram realizadas nas colunas FB (fracionadora de benzeno), FT-1 e FT-2. Para cada uma delas, escolheram-se variáveis de fácil manipulação na planta e que possam

causar variações de composição nos produtos de topo das mesmas. Para a FB, escolheram-se como variáveis:

- TDIC - Controla a diferença de temperatura entre os estágios 29 e 47 da coluna através da vazão de benzeno (retirada lateral no estágio 51). Neste caso é alterado o valor do *set-point*;
- Carga térmica do refeedor da coluna – É indiretamente manipulada pela variação de vazão de vapor de média pressão (VM) na entrada do refeedor;
- Vazão de alimentação da FB - Variações realizadas através do aumento da carga vinda do vaso de carga da unidade, que recebe o produto da unidade de extração de aromáticos.

Para a FT-1 e a FT-2, que possuem estruturas de controle similares, escolheram-se as mesmas variáveis. As correspondentes à FT-1 são listadas abaixo:

- Vazão de Refluxo ;
- Temperatura do estágio 20 (#20) - É controlada pela variação da carga térmica, ou melhor pela variação da vazão de vapor de alta pressão (VA) no refeedor. Neste caso é alterado o valor do *set-point*. Esta temperatura também é citada no texto como Temperatura do prato de controle ou TIC.

Analogamente para a FT-2 as variáveis são:

- Vazão de Refluxo ;
- Temperatura do estágio 22 (#22) - É controlada pela variação da carga térmica, ou melhor pela variação da vazão de vapor de média pressão (VM) no refeedor. Neste caso é alterado o valor do *set-point*. Esta temperatura também é citada no texto como Temperatura do prato de controle ou TIC.

Definição da Região Teste das Variáveis de Perturbação

Para se chegar aos intervalos de variação utilizados em testes na planta, realizaram-se degraus nas simulações dinâmicas. A partir desses degraus, foi possível analisar a resposta de todo o sistema frente a perturbações consecutivas realizadas em uma variável após a outra, verificando em que pontos é possível observar sensibilidade nas concentrações e quais são os limites máximos de variação, ou seja, aqueles em que os produtos atingem um valor fora de especificação muito elevado e que prejudique o processo. A Tabela 3.7 mostra as regiões definidas para cada coluna. Os valores iniciais são os referentes aos da simulação, que por sua vez, referem-se a um intervalo de tempo de operação na planta. As faixas são definidas, desde valores menores até valores maiores do que os da simulação.

Tabela 3.7: Regiões definidas para realização dos testes.

Coluna	Perturbação	Faixa	Valor simulação
FB	TDIC (ΔT)	10,15 a 14,15 °C	12,15 °C
	Q	25 a 27 GJ h ⁻¹	27,27 GJ h ⁻¹
	Vazão de VM	13300 a 15440 kg h ⁻¹	14387 kg h ⁻¹

	Carga	37500 a 45500 kg h ⁻¹	41500 kg h ⁻¹
FT-1	Vazão de refluxo	10000 a 18000 kg h ⁻¹	14960 kg h ⁻¹
	Temp. #20	133 a 138 °C	134,7 °C
FT-2	Vazão de refluxo	6000 a 10000 kg h ⁻¹	8200 kg h ⁻¹
	Temp. #22	151 a 157 °C	154,2 °C

Através de simulações estacionárias, testaram-se perturbações em duas variáveis simultaneamente para os intervalos definidos acima, escolhendo pontos de operação dentro das faixas obtidas. O emprego simultâneo de duas variáveis pode reduzir na planta o período de testes. Só no caso da variável carga da FB, utilizou-se perturbação individual. No caso das colunas de tolueno analisaram-se as seguintes composições de topo: tolueno (TOL) e dos contaminantes benzeno (BENZ) e não-aromáticos (não-ARO).

No caso da coluna de benzeno, foram analisadas as composições de BENZ, TOL e não-ARO na corrente de benzeno (retirada lateral) e ainda a composição de tolueno no topo da FT-1, para verificar a influência das perturbações na FB nas outras torres seguintes.

Após obterem-se as respostas em termos de composição para os pontos que foram simulados (pertencentes às faixas de operação escolhidas), realizaram-se interpolações lineares para estimar os demais pontos do intervalo que não foram simulados. O resultado destas interpolações pode ser visualizado nas figuras presentes nos próximos itens referentes às análises de sensibilidade em cada coluna.

Análise de Sensibilidade na Coluna de Benzeno (FB)

As Figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4 mostram as variações que ocorrem nas concentrações de topo da FB e FT-1 frente às perturbações realizadas na FB ocorrendo simultaneamente no TDIC (representado por dT nas figuras) e na carga térmica (representada pela vazão de VM nas figuras).

Pela análise das figuras 3.1, 3.2, 3.3 e 3.4, nota-se que para nenhuma perturbação o benzeno sai de sua especificação (99,9%), entretanto o tolueno no topo da FT-1 sai de Especificação para valores abaixo de 12,65°C no TDIC em toda a faixa de vazão de vapor e para valores abaixo de 12,15°C para $Q < 22,27 \text{ GJ h}^{-1}$ (14387 kg h⁻¹). Observa-se também que para valores acima de 12,65°C no TDIC, a quantidade de benzeno cai no topo da FB, e ao mesmo tempo ocorre um aumento de tolueno e não-aromáticos, devido ao fato de a coluna estar mais aquecida quando o valor de TDIC é maior.

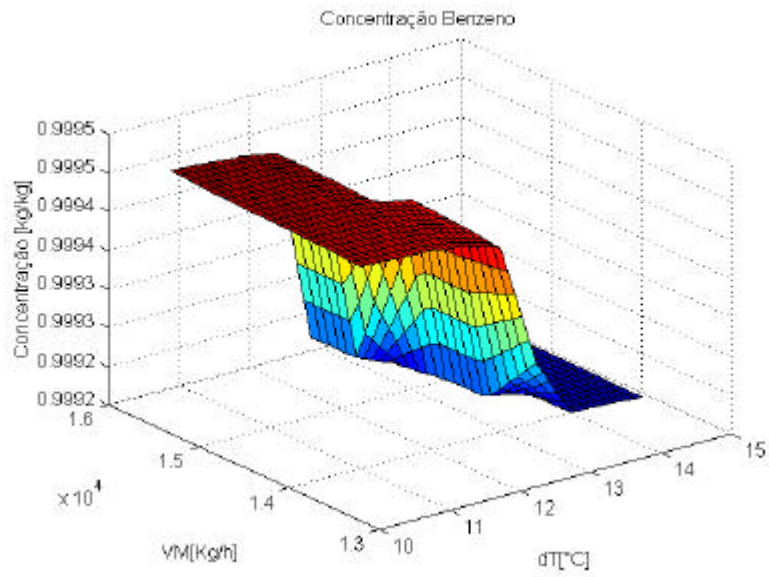


Figura 3.1: Análise de sensibilidade da FB para o componente benzeno no topo da FB.

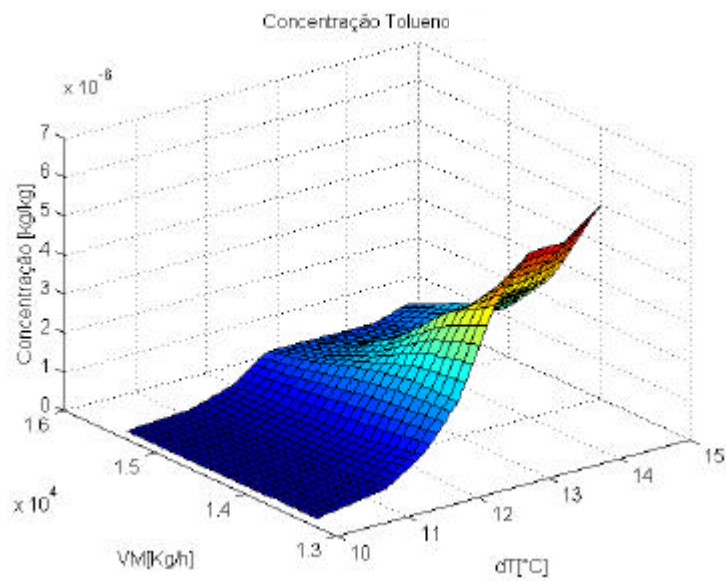


Figura 3.2: Análise de sensibilidade da FB para o componente tolueno no topo da FB.

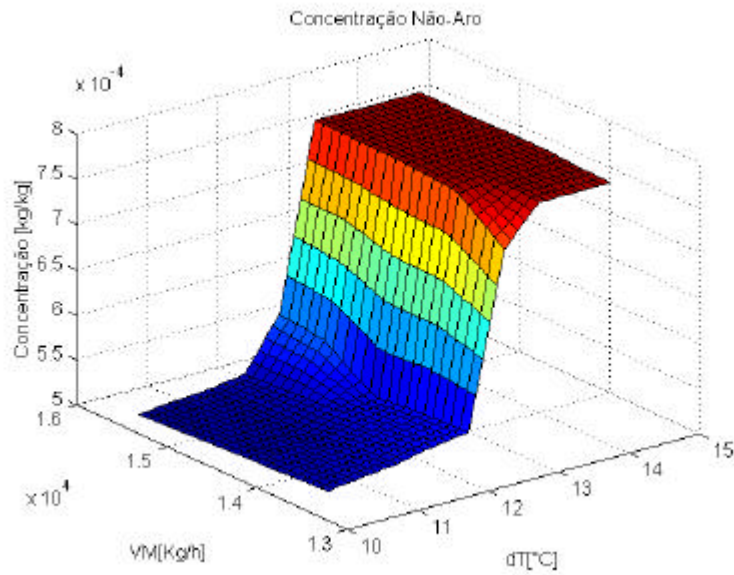


Figura 3.3: Análise de sensibilidade da FB para os componentes não-ARO no topo da FB.

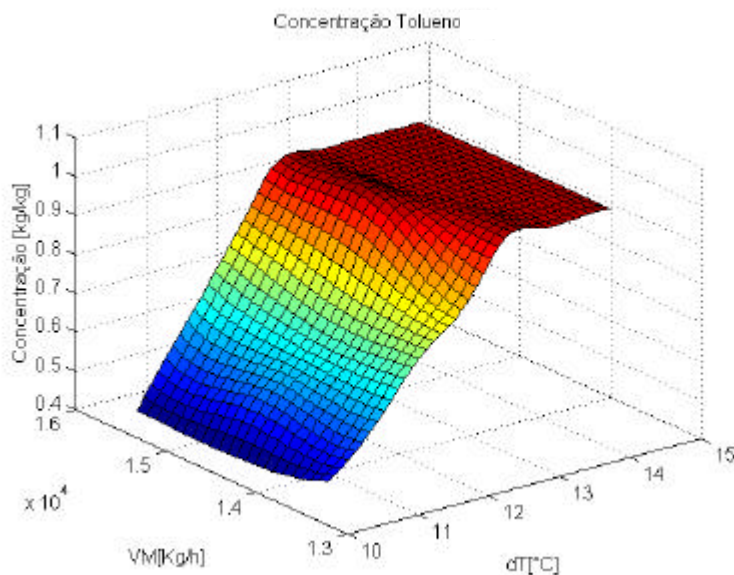


Figura 3.4: Análise de sensibilidade da FB para o componente tolueno no produto de topo da FT-1.

Quanto à carga, realizaram-se perturbações individuais que variam até 4ton acima e 4ton abaixo do valor da simulação. Analisaram-se os resultados nas composições da corrente de benzeno produto (Tabela 3.8) e nas correntes de topo das torres FT-1 e FT-2 (Tabela 3.9). Os produtos fora de especificação estão em negrito.

Tabela 3.8: Perturbações realizadas na carga da FB e composições da corrente de benzeno produto.

D (kg h ⁻¹)	Carga (kg h ⁻¹)	Não-ARO (kg kg ⁻¹)	Tolueno (kg kg ⁻¹)	Benzeno (kg kg ⁻¹)
-4000	37477	7,77E-04	4,02E-07	0,9992
-3000	38477	7,79E-04	5,05E-07	0,9992
-2000	39477	7,81E-04	6,39E-07	0,9992
-1000	40477	7,82E-04	8,15E-07	0,9992
-	41477	7,83E-04	1,05E-06	0,9992
1000	42477	7,95E-04	1,34E-06	0,9992
2000	43477	6,70E-04	1,81E-06	0,9993
3000	44477	5,43E-04	1,81E-06	0,9994
4000	45477	5,44E-04	1,68E-06	0,9994

Tabela 3.9: Perturbações realizadas na carga da FB e composições das correntes de topo de tolueno.

Δ (kg h ⁻¹)	Carga (kg h ⁻¹)	FT-1			FT-2		
		Não-ARO (kg kg ⁻¹)	Tolueno (kg kg ⁻¹)	Benzeno (kg kg ⁻¹)	Não-ARO (kg kg ⁻¹)	Tolueno (kg kg ⁻¹)	Benzeno (kg kg ⁻¹)
-4000	37477	2,15E-03	0,9976	9,47E-08	2,77E-03	0,9860	9,33E-08
-3000	38477	2,05E-03	0,9974	1,23E-07	2,78E-03	0,9895	1,21E-07
-2000	39477	1,97E-03	0,9972	1,66E-07	2,79E-03	0,9958	1,61E-07
-1000	40477	1,94E-03	0,9972	2,37E-07	2,80E-03	0,9968	2,26E-07
-	41477	1,93E-03	0,9973	3,64E-07	2,79E-03	0,9969	3,39E-07
1000	42477	1,94E-03	0,9973	8,18E-07	2,89E-03	0,9970	7,46E-07
2000	43477	2,16E-03	0,9974	1,06E-05	3,02E-03	0,9975	9,81E-06
3000	44477	2,53E-03	0,9390	5,71E-02	3,30E-03	0,9456	5,11E-02
4000	45477	2,43E-03	0,8968	9,68E-02	3,18E-03	0,9084	8,84E-02

Pela análise das duas tabelas acima, conclui-se que degraus acima de 2 toneladas podem gerar contaminação nas torres de tolueno por benzeno e compostos não -ARO.

Análise de Sensibilidade na Coluna de Tolueno 1 (FT-1)

Variando-se a vazão de refluxo e o valor da #20 da FT-1 obtêm-se os resultados mostrados nas Figuras 3.6, 3.5 e 3.7. A análise destas figuras leva a concluir que o tolueno é contaminado quando a T#20 passa de 134,7°C e o refluxo é menor que 16000 kg h⁻¹. Essa contaminação ocorre devido à contaminação com C8 ARO, uma vez que pela análise das

Figuras 3.6 e 3.7 vê-se que o BENZ e os não-ARO estão dentro de sua especificação para todo o intervalo de variação do refluxo e da #20.

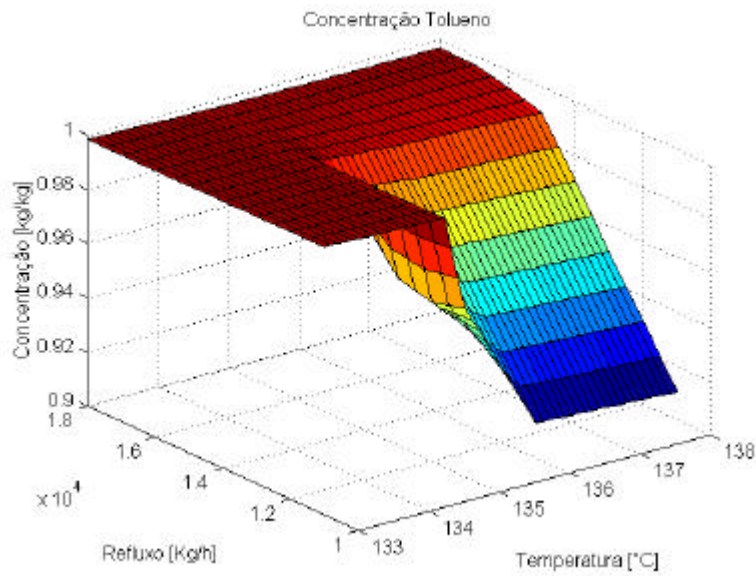


Figura 3.5: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente tolueno.

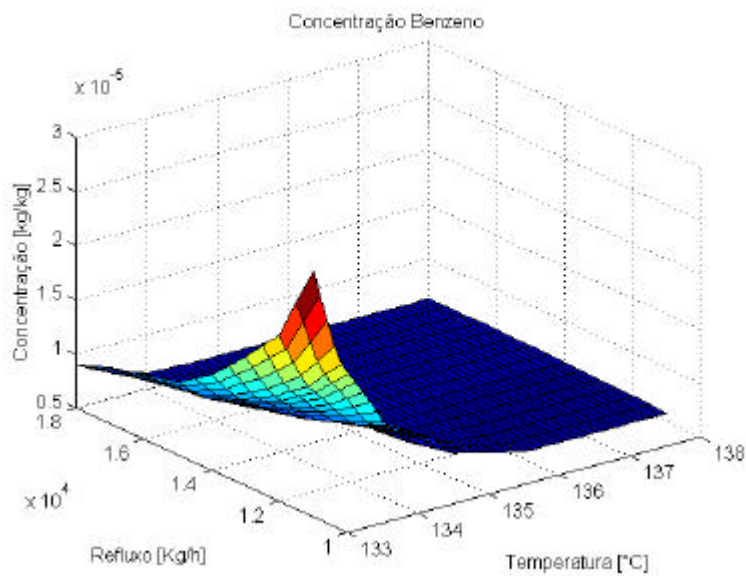


Figura 3.6: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente benzeno.

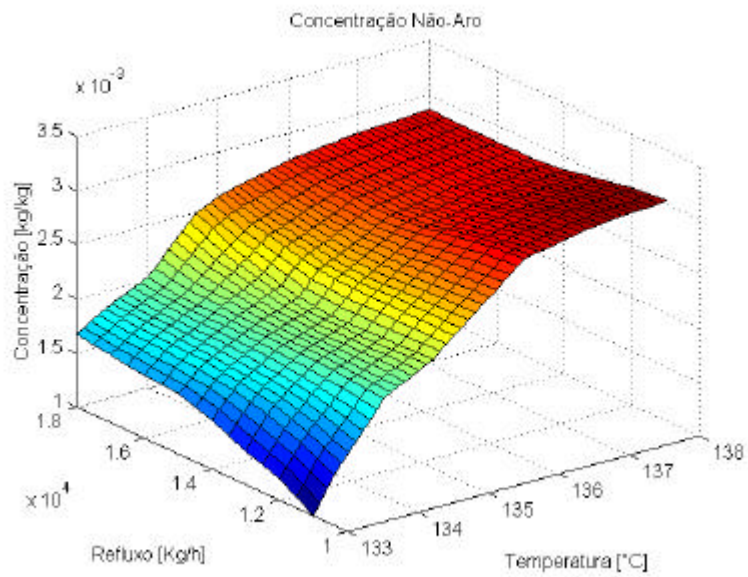


Figura 3.7: Análise de sensibilidade da FT-1 para o componente não-ARO.

Análise de Sensibilidade na Coluna de Tolueno 2 (FT-2)

Os resultados das variações da FT-2 podem ser visualizados nas Figuras 3.8, 3.9 e 3.10.

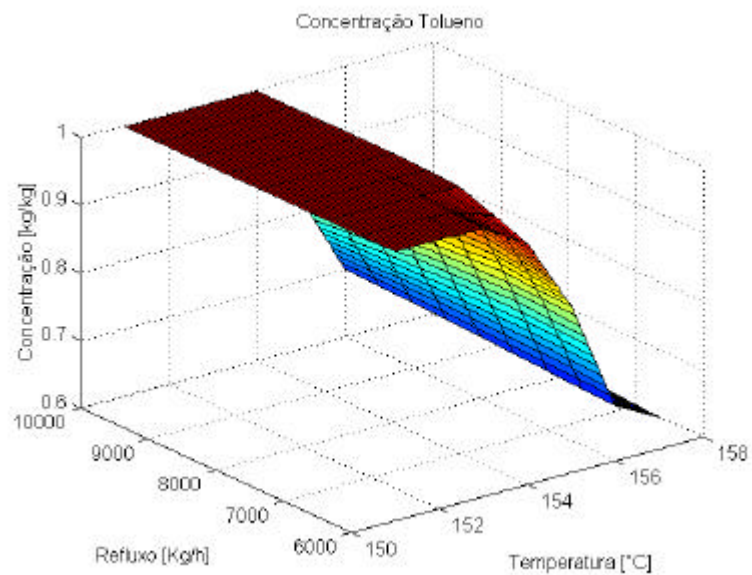


Figura 3.8: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente tolueno.

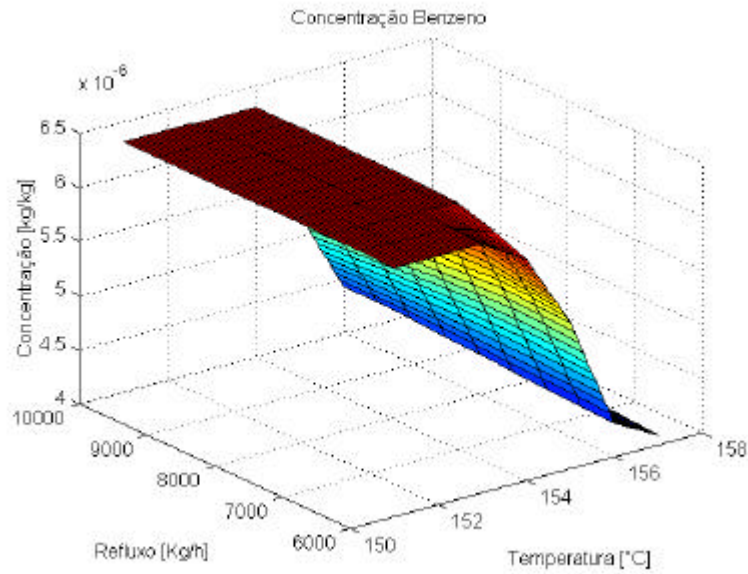


Figura 3.9: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente benzeno.

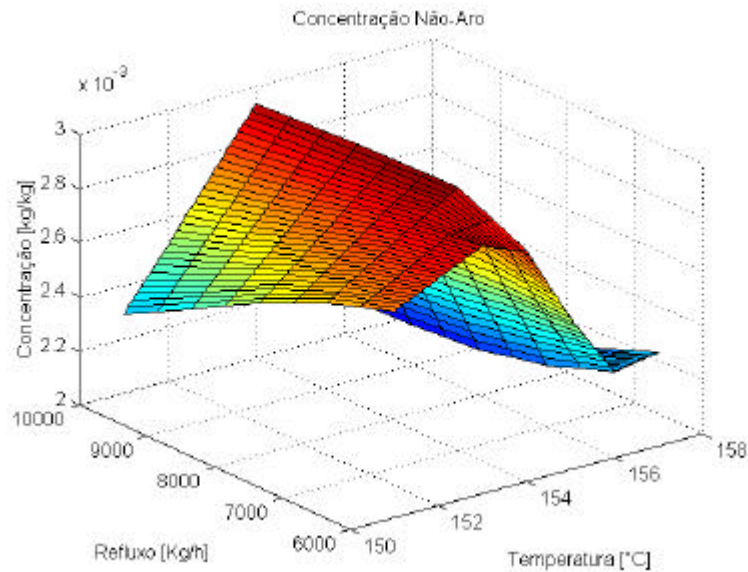


Figura 3.10: Análise de sensibilidade da FT-2 para o componente não-ARO.

A análise das Figuras 3.8, 3.9 e 3.10 leva a concluir que o tolueno é contaminado quando a #22 passa de 154,2°C, independentemente do refluxo utilizado. Pela análise das figuras vê-se que o BENZ e os não-ARO estão dentro de sua especificação para todo o intervalo de variação do refluxo e da #22.

3.3.2 Dados de Planta e Relato da Forma como Foram Realizados os Experimentos

O objetivo principal da realização de testes na planta é o levantamento de dados em diversas condições de operação. No entanto, além desta utilidade, os testes podem servir para detectar quais são as variáveis do sistema mais sensíveis a contaminações, para que estas possam servir como variáveis secundárias na elaboração de um modelo. Desta forma, optou-se por analisar a reação de todas as variáveis frente aos degraus realizados na planta. O resultado desta análise será mostrado separadamente para cada coluna estudada nos próximos itens.

Coluna de Benzeno - FB

Na Figura 3.11 são mostradas as perturbações realizadas na coluna de benzeno e suas implicações em outras variáveis da planta. As variáveis manipuladas foram a vazão de VA e o TDIC (linhas em vermelho na Figura 3.11).

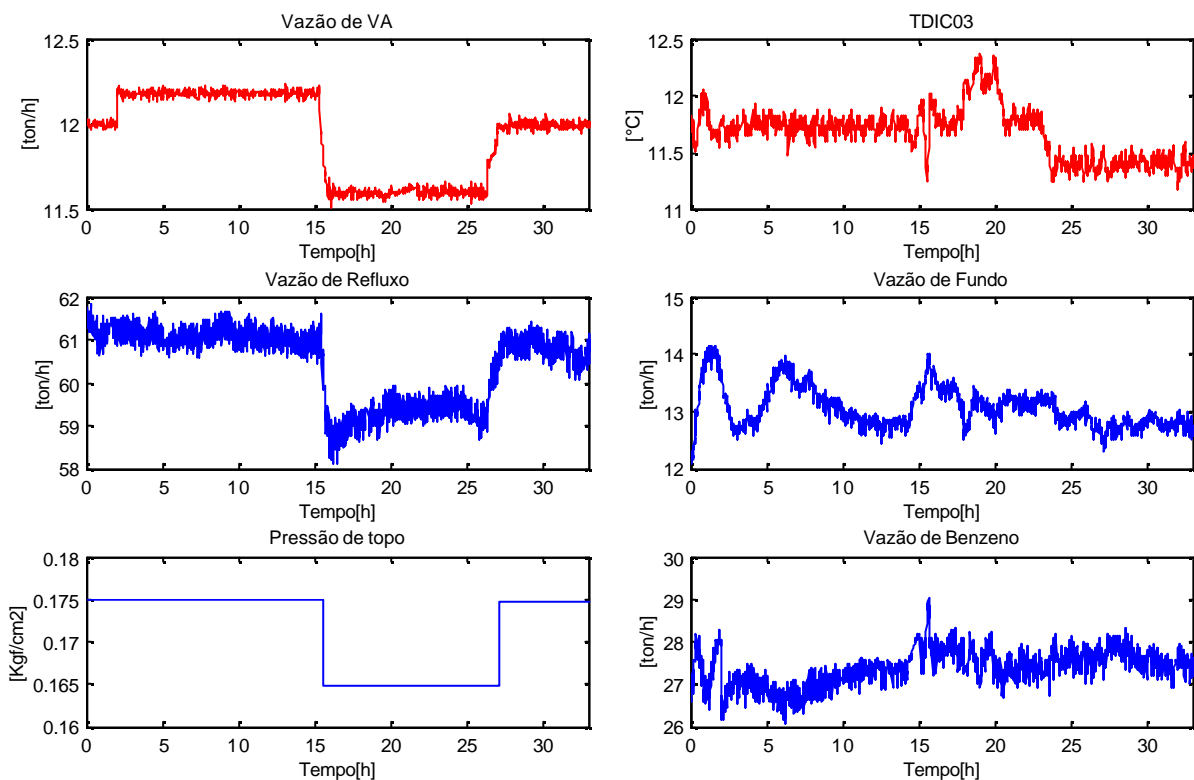


Figura 3.11: Variações na FB durante os testes.

Observa-se que o refluxo da torre e a pressão de topo acompanharam a variação de vapor, enquanto que a vazão de benzeno na corrente lateral acompanhou as variações no TDIC. Quanto a influência das variáveis manipuláveis na composição, observou-se contaminação no topo da FB por tolueno, que pode ser visualizada nas Figuras 3.12 e 3.13.

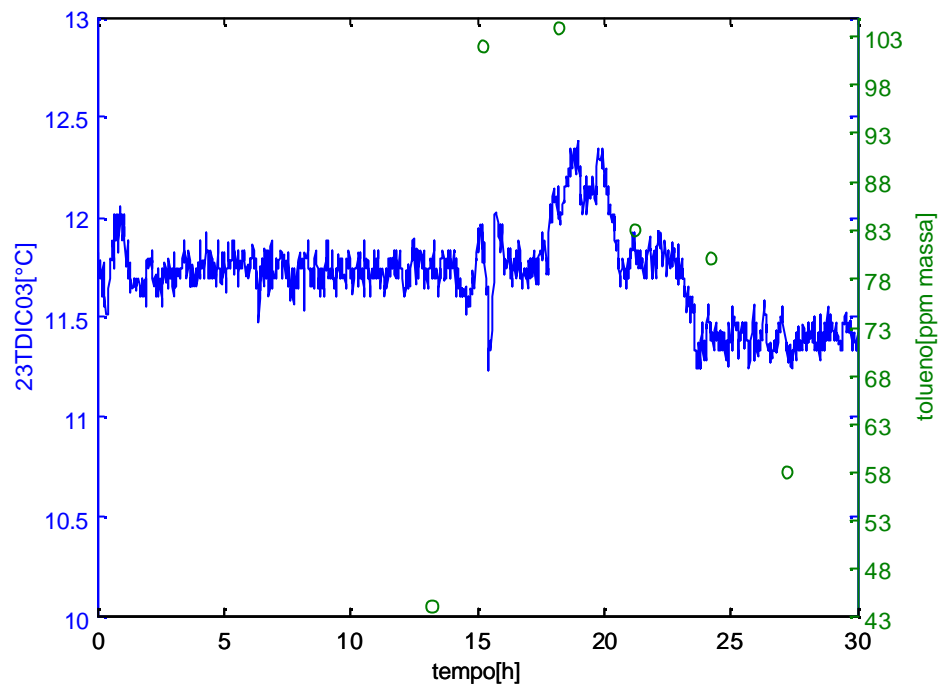


Figura 3.12: Composição de tolueno no topo da FB (pontos, eixo da direita) – variações no TDIC (linha contínua, eixo da esquerda).

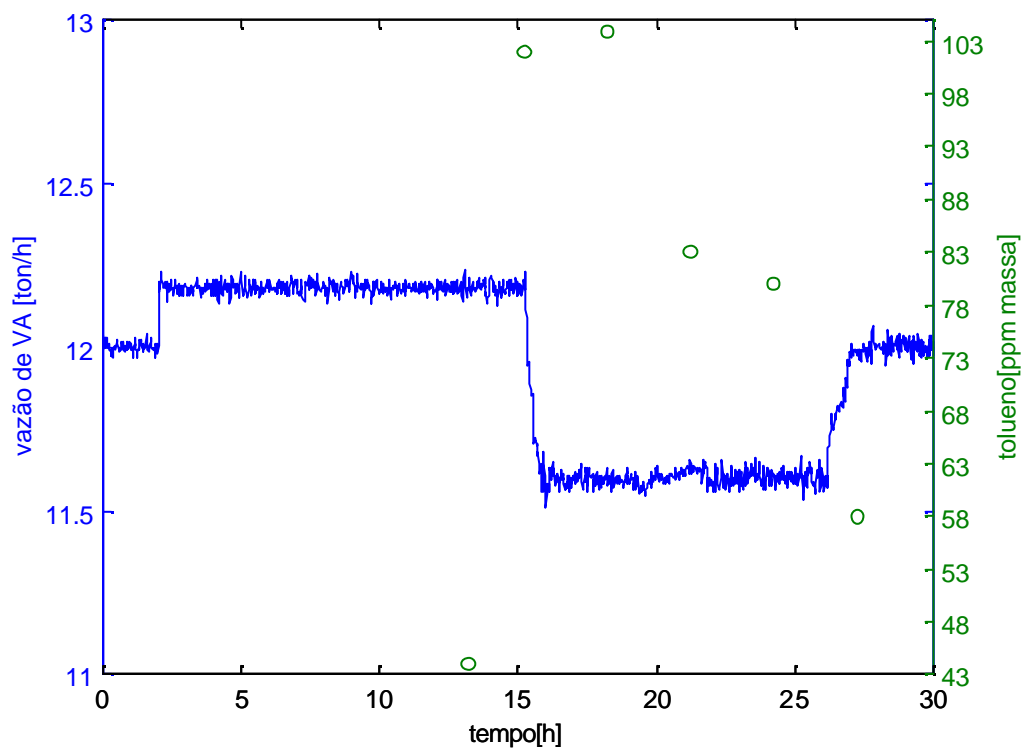


Figura 3.13: Composição de tolueno no topo da FB (pontos, eixo da direita) – variações na vazão de vapor (linha contínua, eixo da esquerda).

O comportamento do perfil de temperatura da coluna é mostrado na Figura 3.14.

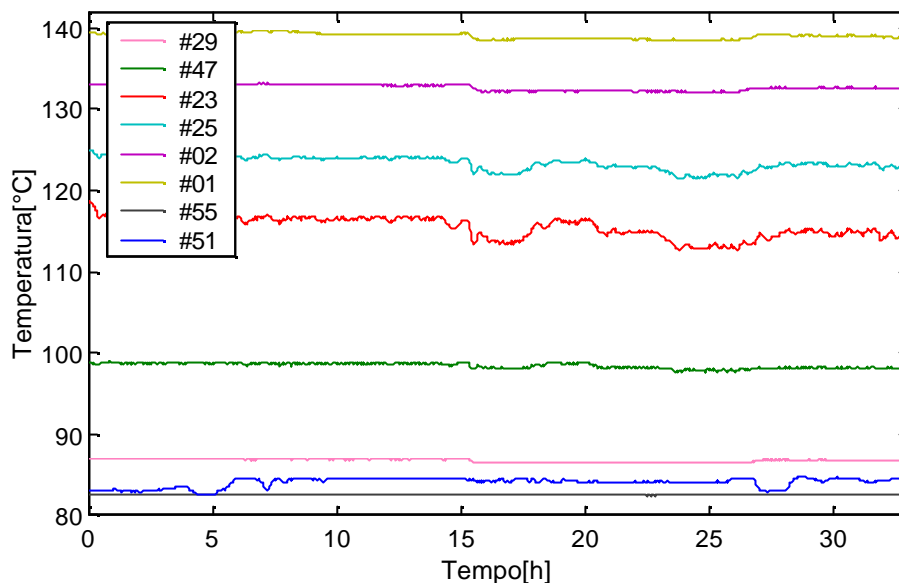


Figura 3.14: Comportamento do perfil de temperatura da FB durante a realização de degraus na mesma.

Em geral, as temperaturas da torre foram mais sensíveis às variações no vapor e os estágios que mais sofreram as variações foram os intermediários, correspondentes aos estágios 23 e 25. Estes estágios variaram até 4°C com as variações de vapor. Os demais estágios variaram em torno de 0,5°C a cada perturbação. Os estágios 29 e 47 acompanharam as variações no TDIC, visto que o mesmo é o resultado da diferença entre estes dois estágios.

Para testar a influência da FB nas duas colunas de tolueno, construiu-se a Figura 3.15, que representam o perfil de temperatura da coluna de tolueno FT-1 no momento em que ocorreram os movimentos na FB.

Observando a Figura 3.15 vê-se que o perfil da FT-1 não varia com as alterações realizadas na FB, mostrando que a sensibilidade das colunas de tolueno em relação à FB é baixa. De outra forma, pode-se dizer que através das variações possíveis no TDIC e na alimentação de VA da FB, não é possível capturar variações nas colunas de tolueno que reflitam em variações de composição. Cabe salientar que além das temperaturas, outras variáveis como composições de topo, por exemplo, das colunas de tolueno também não variaram. A figura relativa ao perfil foi mostrada pois as temperaturas refletem diretamente nos desvios de composição em uma coluna de destilação. Essa idéia inutiliza a hipótese de serem usadas, por exemplo, variáveis da FB para prever o comportamento das composições de topo das colunas de tolueno. Basicamente, as colunas de tolueno operam estáveis em relação a mudanças na FB, e sofrem contaminação nos momentos em que as suas próprias condições de operação são alteradas ou quando existe contaminação na carga.

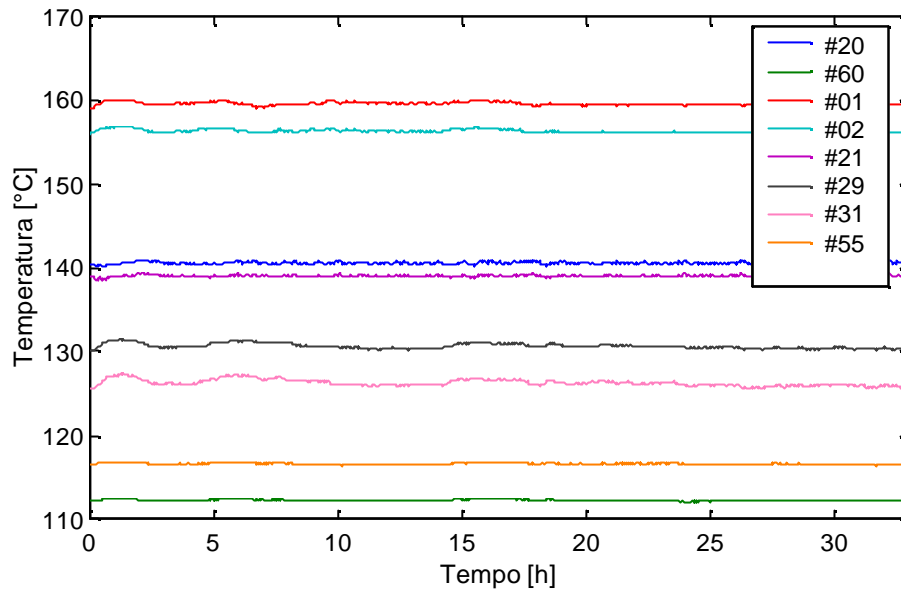


Figura 3.15: Perfil de temperatura da FT-1 frente às perturbações no TDIC e na vazão de vapor da FB.

Coluna de Tolueno - FT-1

Os movimentos realizados na coluna de tolueno FT-1 são mostrados na Figura 3.16, juntamente com o comportamento de outras variáveis da coluna. As variáveis manipuladas foram a temperatura do prato de controle (TIC) a a vazão de refluxo (linhas vermelhas na Figura 3.16).

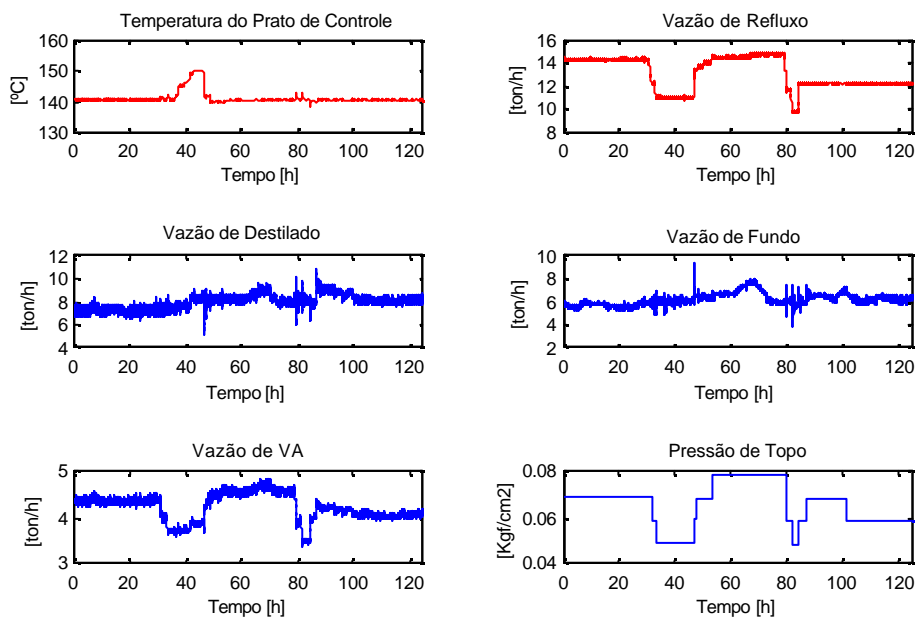


Figura 3.16: Variações ocorridas na FT-1 durante os testes.

Observa-se pela Figura 3.16 que a vazão de VA acompanha as variações de refluxo, pois quando o refluxo na coluna diminui, a temperatura nos estágios aumenta, o que faz com que haja um corte na vazão de vapor. A pressão no topo da torre reage da mesma forma, uma vez que o aumento do refluxo implica em aumento de vapor no topo e conseqüente aumento de pressão. As variações nas razões RD e RF são mostradas na Figura 3.17.

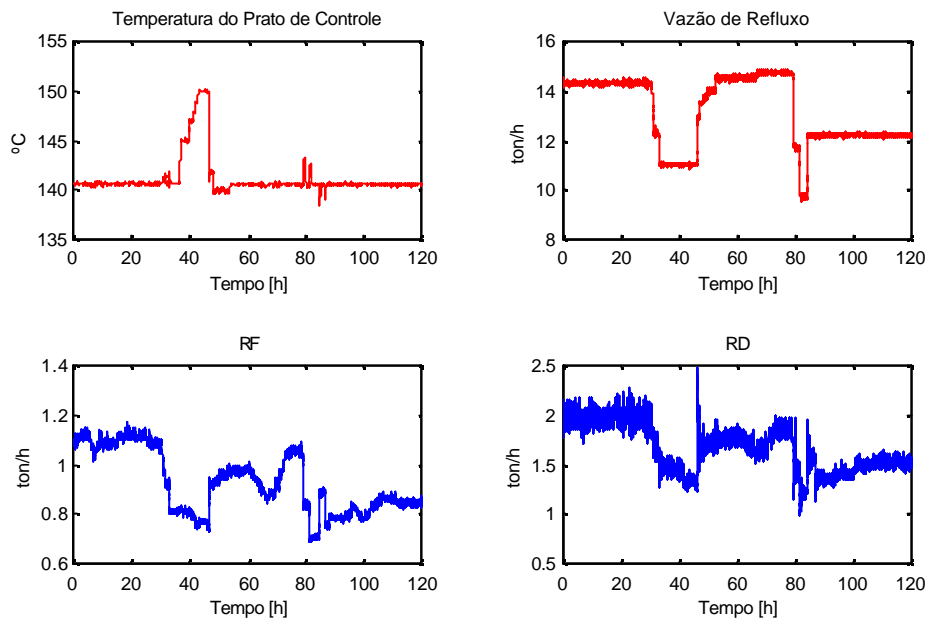


Figura 3.17: Variações ocorridas na FT-1 durante os testes - RD e RF.

De acordo com a Figura 3.17, observa-se que as razões RD e RF variam conforme o refluxo, por não existirem variações de carga e destilado significativas durante o período. Mas durante a operação normal de planta, estas razões podem representar bem os efeitos conjugados entre refluxo e as variáveis carga e destilado.

Quanto às variações ocorridas na composição de topo, observa-se que os dois primeiros degraus consecutivos realizados no refluxo, de 2 e 1 ton h⁻¹ não afetaram a composição de tolueno, e que o produto saiu de especificação apenas depois de serem reduzidas 5ton h⁻¹ (após os degraus de 2 e 3 ton h⁻¹), mostrando que esta coluna poderia estar operando com um refluxo de pelo menos 4 ton h⁻¹ a menos. Como esta coluna estava operando com um refluxo de 14700 kg h⁻¹, poderia estar operando com 11700 kg h⁻¹. Isto significa uma redução de 0,2 na razão refluxo/carga (RF=0,8) e 0,4 na razão refluxo/destilado (RD=1,5). Além disso observa-se que a mudança no TIC só foi significativa acima de 5°C. Observa-se pelas Figuras 3.18 (a,b), 3.19 (a,b) e 3.20 (a,b) que a perda de especificação ocorre pelo aumento de C8 ARO ao topo e que os compostos não-ARO são sensíveis as alterações. As análises de laboratório são representadas por pontos e pelo eixo à direita nas figuras.

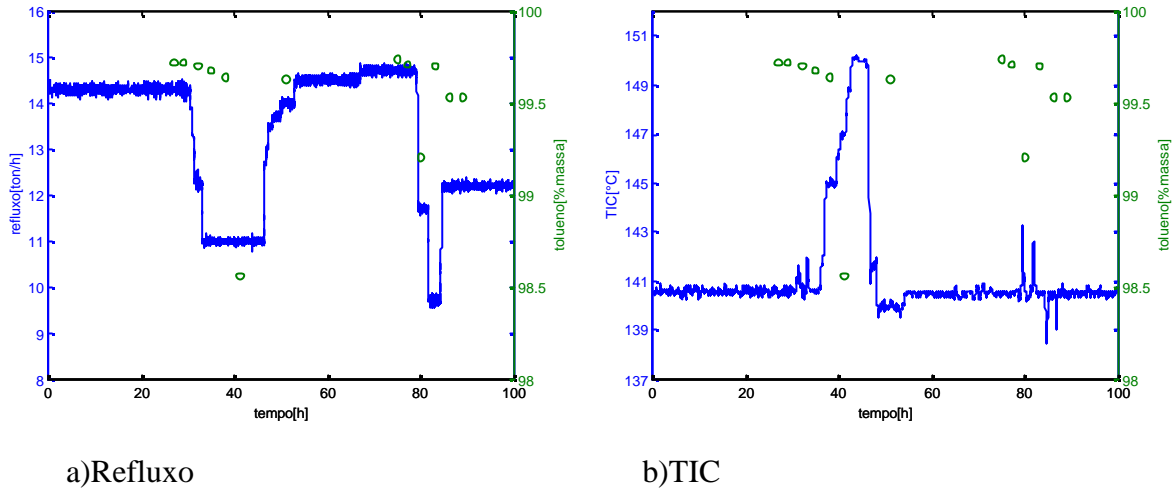


Figura 3.18 (a,b): Variação na composição de tolueno na corrente de topo da FT-1.

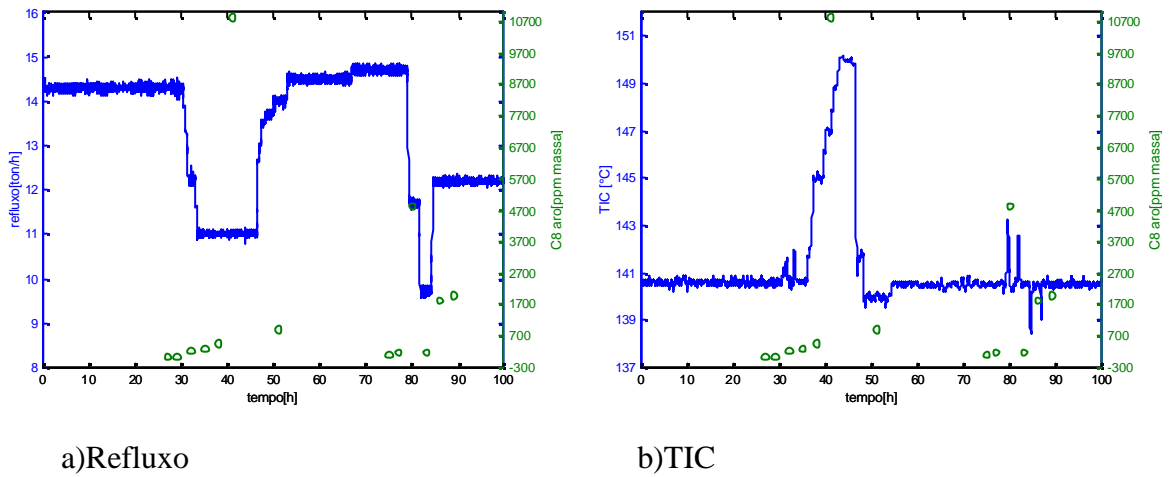


Figura 3.19 (a,b): Variação na composição de C8 ARO na corrente de topo da FT-1.

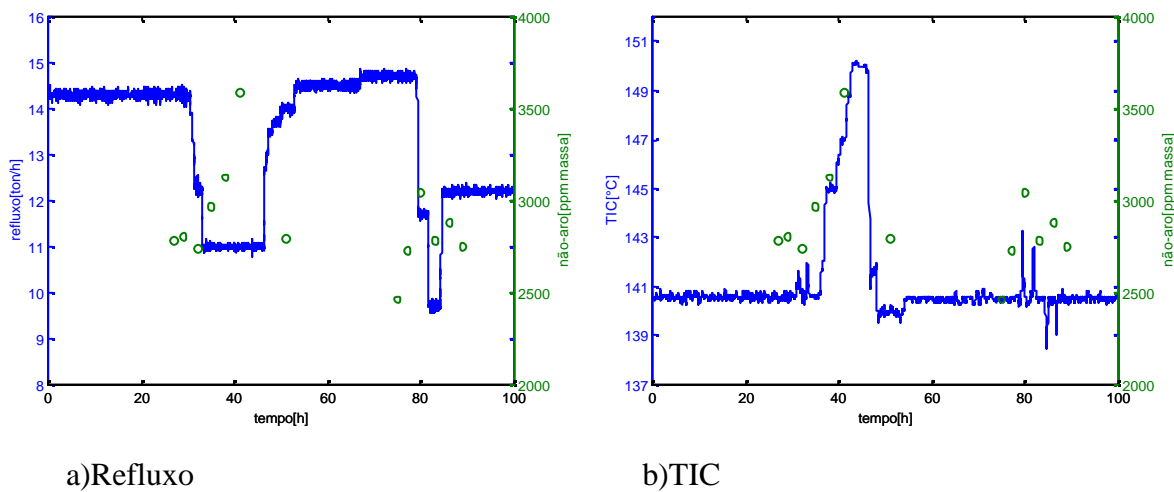


Figura 3.20 (a,b): Variação na composição de não-ARO no topo da FT-1.

A Figura 3.21 mostra a influência das perturbações no perfil de temperatura da coluna FT-1. Esta análise é extremamente importante, pois a sensibilidade das temperaturas frente aos degraus que causaram a variação de composições de topo é um fator decisivo na inclusão das temperaturas no modelo para inferências de composição.

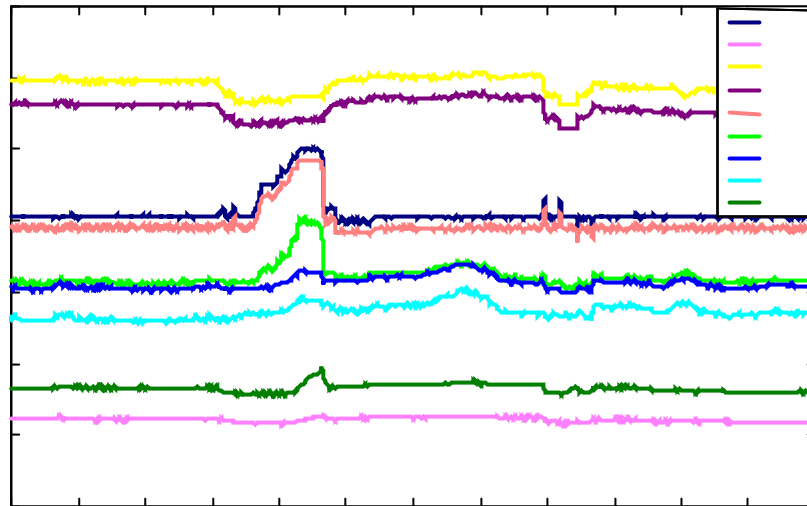


Figura 3.21: Perfil de temperatura da FT-1 durante as perturbações no TIC e na vazão de refluxo.

A Figura 3.21 mostra que as temperaturas em pontos intermediários da coluna, correspondentes aos pratos 15 e 21 são mais sensíveis às perturbações que as outras temperaturas, principalmente em relação às variações no TIC (#20), às quais estas temperaturas acompanham fielmente. Verifica-se que estas temperaturas acompanham levemente as quedas de refluxo, ao contrário das temperaturas de fundo – pratos 01 e 02. Observa-se que estas temperaturas de fundo diminuem com a retirada de refluxo. Isto ocorre pois quando a vazão de refluxo diminui, a coluna sofre um aquecimento, que provoca a subida momentânea de temperatura em todos os pratos, inclusive no prato de controle (estágio 20). Com isso o controlador de temperatura atua reduzindo a vazão de vapor no refeedor para recuperar o *set-point* no prato de controle. Com essa retirada de vapor, as temperaturas de fundo tendem a diminuir. Observa-se que a temperatura de topo é pouco sensível às perturbações. No entanto, a temperatura do prato logo abaixo – prato 55 apresenta pequenas variações ao longo do teste, mostrando-se um bom indicativo de perda de especificação, pois nos dois pontos em que o tolueno produto sai de especificação, esta temperatura apresentou picos. O primeiro ponto refere-se ao aumento do TIC da coluna e o outro se refere à diminuição mais acentuada no refluxo (degrau=5 ton h⁻¹).

Coluna de Tolueno - FT-2

Os movimentos realizados na coluna de tolueno FT-2 são mostrados na Figura 3.22 juntamente com o comportamento de outras variáveis da coluna. As variáveis manipuladas

foram a temperatura do prato de controle (TIC) a a vazão de refluxo (linhas vermelhas na Figura 3.22).

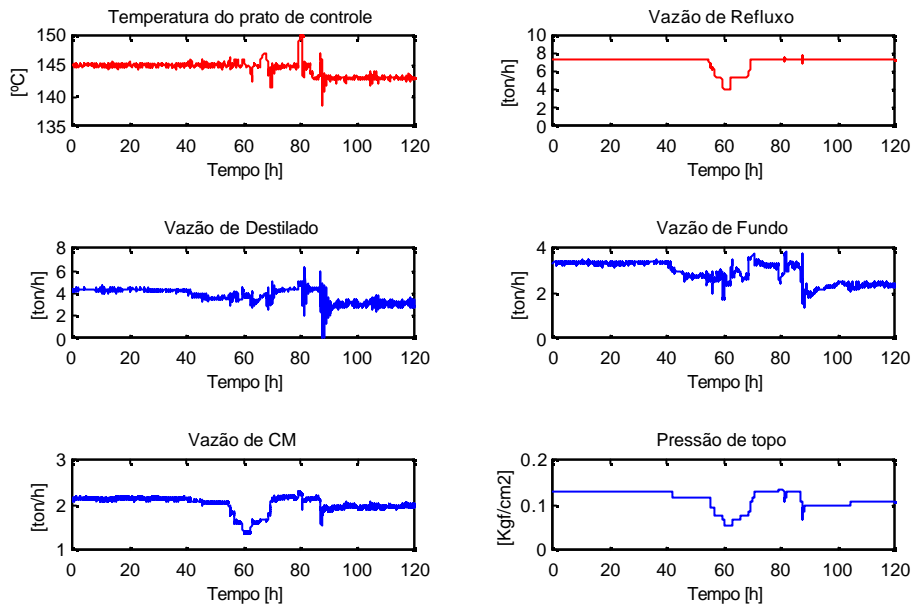


Figura 3.22: Variações ocorridas na FT-2 durante os testes.

Observa-se pela Figura 3.22 que a vazão de CM acompanha as variações de refluxo, pois quando o refluxo na coluna diminui, a temperatura nos estágios aumenta, o que faz com que haja um corte na vazão de vapor. A pressão no topo da torre reage da mesma forma, uma vez que o aumento do refluxo implica em aumento de vapor no topo e conseqüente aumento de pressão. As variações nas razões RD e RF são mostradas na Figura 3.23.

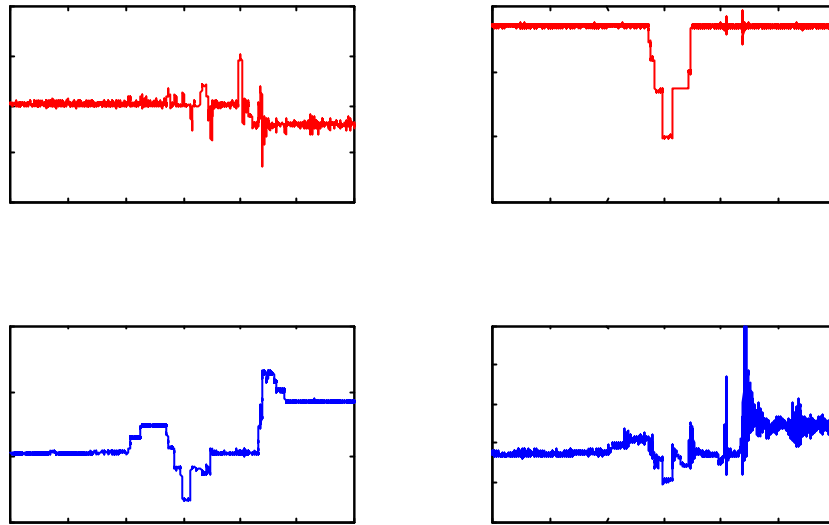
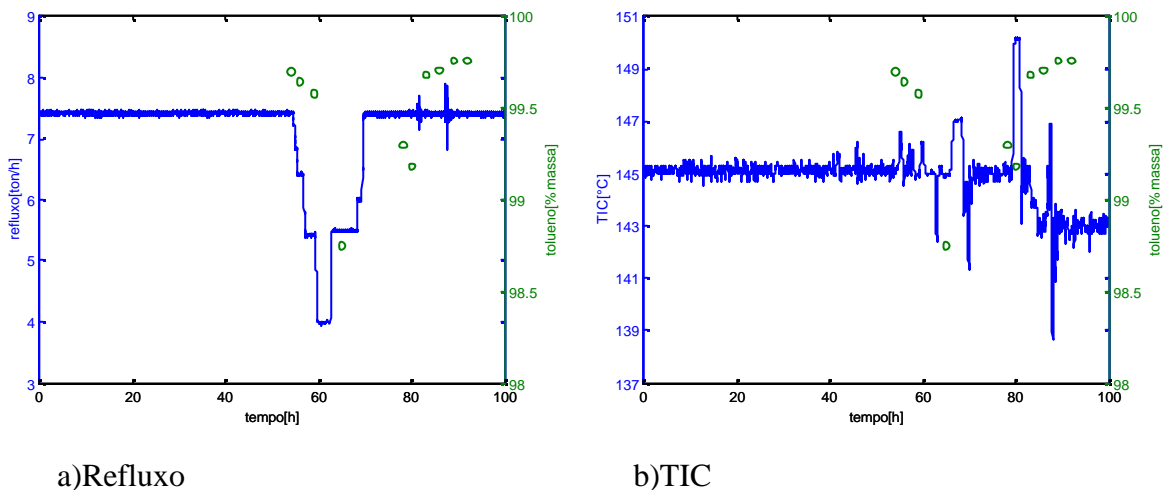


Figura 3.23: Variações ocorridas na FT-2 durante os testes - RD e RF.

De acordo com a Figura 3.23 observa-se que as razões RD e RF variam conforme o refluxo, por não existirem variações de carga e destilado significativas durante o período. Mas durante a operação normal de planta, estas razões podem representar bem os efeitos conjugados entre refluxo e as variáveis carga e destilado.

As próximas Figuras mostram a implicação da variações no refluxo e no TIC nas composições de topo da coluna FT-2.



a)Refluxo

b)TIC

Figura 3.24 (a,b): Variação na composição de tolueno na corrente de topo da FT-2.

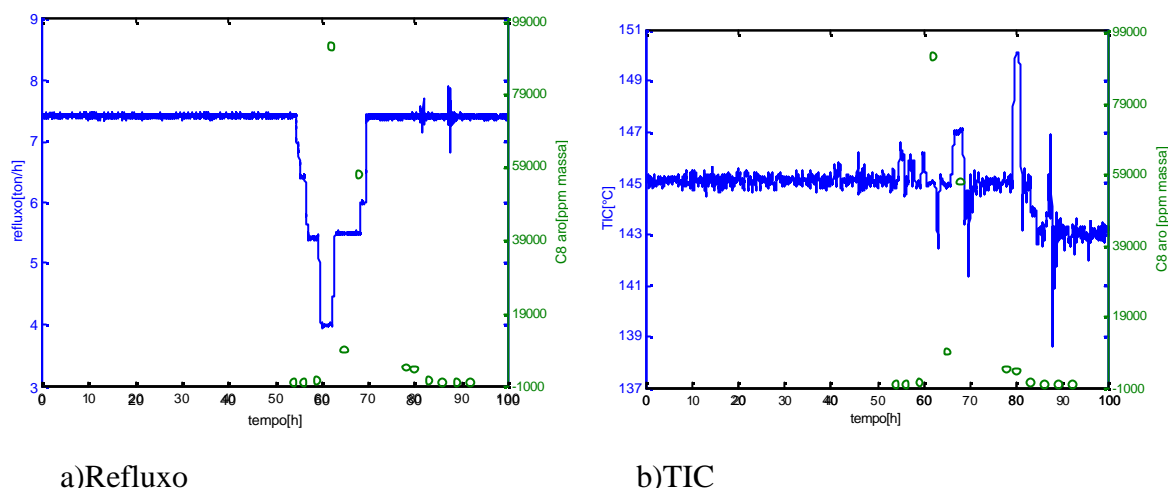


Figura 3.25 (a,b): Variação na composição de C8 aro na corrente de topo da FT-2.

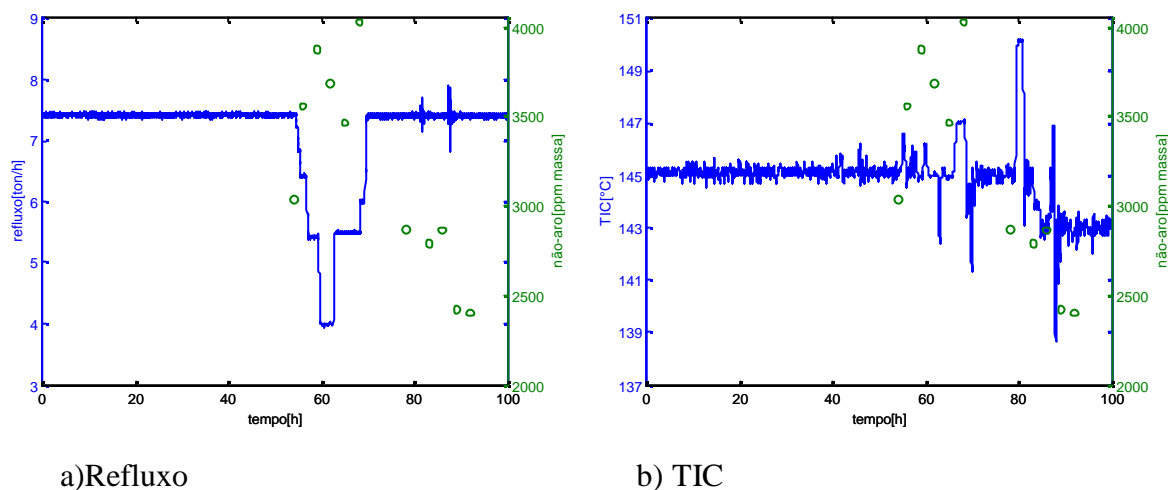


Figura 3.26 (a,b): Variação na composição de não-ARO no topo da FT-2.

A Figura 3.24 mostra a perda de especificação no tolueno produto ($< 99,5\%$) após o refluxo ter sido reduzido em 3 ton h^{-1} . Observa-se que uma redução de 2 ton h^{-1} seria possível, o que corresponde a uma diminuição de 0,5 na razão refluxo/destilado (RD) e 0,3 na razão refluxo/carga (RF). Na mesma figura observa-se que mesmo operando com um refluxo seguro, o acréscimo no TIC de 2°C já foi suficiente para manter o tolueno fora de sua especificação. Analisando a Figura 3.26, percebe-se que os compostos não aromáticos são sensíveis a diminuição no refluxo, pois sua composição no topo aumenta com esta ação. Por fim, pela Figura 3.25 vê-se claramente que o responsável pela perda de especificação do tolueno são os compostos C8 ARO, que após o último degrau no refluxo, apresentaram uma subida abrupta na composição de topo.

De maneira análoga à FT-1, foi realizada uma análise de sensibilidade com o perfil de temperatura da FT-2 conforme mostra a Figura 3.27.

A Figura 3.27 mostra que as temperaturas intermediárias da coluna, correspondentes aos pratos 29, 34 e 37 são mais sensíveis às perturbações que as outras temperaturas, principalmente em relação às variações no TIC, ao qual estas temperaturas acompanham fielmente. Já a temperatura de fundo mostra-se mais sensível às variações no refluxo da coluna. Observa-se que ela diminui com a retirada de refluxo. Isto ocorre pois quando a vazão de refluxo diminui, a coluna sofre um aquecimento, que provoca a subida momentânea de temperatura em todos os pratos, inclusive no prato de controle (estágio 22). Com isso o controlador TIC atua reduzindo a vazão de vapor no refeedor para recuperar o *set-point* no prato de controle. Com essa retirada de vapor, as temperaturas de fundo tendem a diminuir. É por isso que com a retirada de refluxo, somente as temperaturas de topo e do meio da coluna tenderam a subir. Observa-se que a temperatura de topo não é sensível às perturbações. No entanto a temperatura do prato logo abaixo – prato 58 apresenta pequenas variações ao longo do teste e variações significativas (3 a 7°C) justamente nos pontos em que o produto saiu de especificação. O primeiro ponto refere-se à diminuição do refluxo da coluna e os outros dois referem-se ao aumento no TIC.

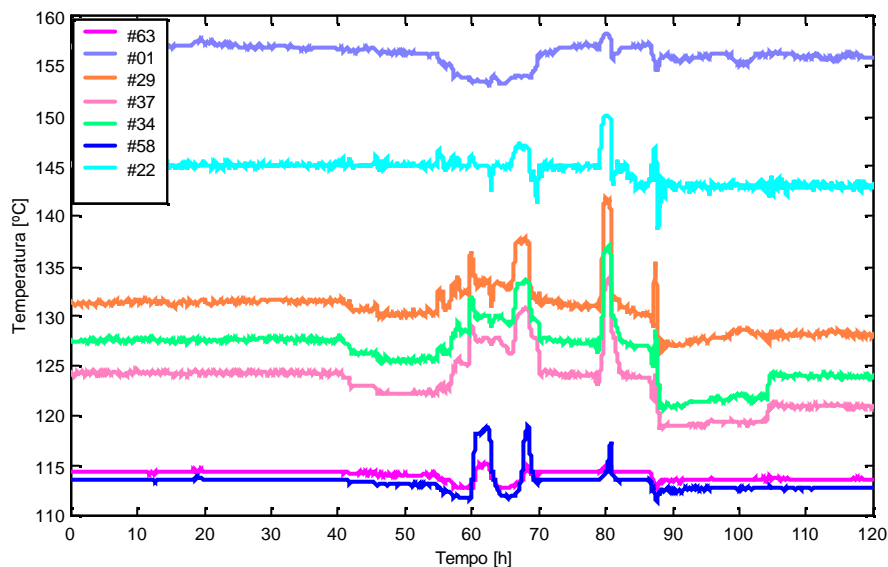


Figura 3.27: Perfil de temperatura da coluna FT-2 durante as perturbações no refluxo e no TIC.

3.3.3 Melhorias nos Modelos Estacionário e Dinâmico

O primeiro passo para melhoria das simulações foi a eliminação da coluna de benzeno das mesmas, uma vez que os testes indicaram que esta coluna não influencia consideravelmente a operação das colunas de tolueno. Desta forma, as simulações tornaram-se mais simplificadas e com menos erros numéricos, uma vez que a modelagem da coluna de benzeno é mais complexa do que a das demais colunas.

Para validar estas simulações, optou-se por executar nas simulações as mesmas perturbações dos testes realizados e verificar a convergência das mesmas.

Verificação da Qualidade do Modelo Estacionário

Aplicando as perturbações dos testes de planta na simulação estacionária obtiveram-se resultados satisfatórios. Os perfis de temperatura reproduziram o comportamento visto nas Figuras 3.21 e 3.27. As composições de topo de TOL e não-ARO em geral reproduziram o comportamento esperado, conforme mostrado na Tabela 3.10 para o componente tolueno.

Verificação da Qualidade do Modelo Dinâmico

Aplicando as mesmas perturbações dos testes na simulação dinâmica, verificou-se que as temperaturas comportaram-se igualmente na planta, entretanto houve diferenças nas composições de topo de tolueno, o que pode ser observado na Tabela 3.11. Os valores apresentados na tabela são estacionários, se referindo ao ponto estacionário que a simulação dinâmica alcança após ser submetida aos degraus dos testes. A FT-2 apresentou resultados mais confiáveis que a FT-1, onde a perda de especificação ocorreu antes do previsto.

Tabela 3.10: Verificação das composições de topo de TOL na simulação estacionária.

FT-1			FT-2		
Movimento	TOL – sim.	TOL – lab.	Movimento	TOL – sim.	TOL – lab.
R=refluxo (kg h ⁻¹)	(% massa)	(% massa)	R=refluxo (kg h ⁻¹)	(% massa)	(% massa)
T=#20 (°C)			T=#22 (°C)		
R=14250, T=140	99,72	99,72	R=7420, T=145	99,73	99,7
R=12250, T=140	99,70	99,72	R=6420, T=145	99,65	99,64
R=11250, T=140	99,70	99,70	R=5420, T=145	99,50	99,58
R=14700, T=145	99,65	99,68	R=4420, T=145	97,32	90,39
R=14700, T=147	99,54	99,64	R=5500, T=145	98,11	98,75
R=14700, T=150	99,01	98,56	R=5500, T=147	89,23	93,89
R=14700, T=143	99,64	99,63	R=7420, T=150	99,65	99,70
R=11700, T=143	99,72	99,71			
R=9700, T=143	98,89	99,21			
R=12200, T=143	99,66	99,7			

Dessa forma, a simulação dinâmica mostrou-se importante na predição do comportamento dinâmico das colunas e realização de análises de sensibilidade. As temperaturas consideradas

mais sensíveis no testes realizados em planta foram justamente as mais sensíveis durante os mesmos testes na simulação e apresentaram variações de mesmo grau. Entretanto para prever o comportamento em relação à composição, ela não mostrou-se tão adequada quanto a simulação estacionária.

Com base na Tabela 3.11 conclui-se que a simulação dinâmica embora tenha sido construída com base na simulação estacionária, apresentou resultados inferiores à mesma. Desta forma, é mais conveniente utilizar-se a simulação estacionária na geração de dados, que conforme a Tabela 3.10, apresentou resultados satisfatórios. A geração de dados para construção de modelos usados nas inferências de tolueno e não -ARO será discutida no Capítulo 4.

Os erros apresentados pela simulação dinâmica se devem principalmente às diferenças existentes entre os dois simuladores (estacionário e dinâmico). Observou-se que os erros numéricos existentes na simulação dinâmica são mais acentuados que os erros da simulação estacionária. Na passagem da simulação estacionária para a dinâmica, a pressão do sistema deve ser aumentada para que a simulação dinâmica seja gerada, o que já insere um erro. Além disso, a simulação dinâmica exige mais detalhes sobre o processo, como a inserção de controladores, daí a dificuldade de representar fielmente os sistemas de controle usados na planta industrial. É importante atentar que devido aos erros numéricos, o valor da tolerância ao erro na simulação dinâmica, por definição é maior que na estacionária podendo se igualar aos valores das impurezas.

Tabela 3.11: Verificação das composições de topo de TOL na simulação dinâmica.

FT-1			FT-2		
Movimento	TOL – sim.	TOL – lab.	Movimento	TOL – sim.	TOL – lab.
R=refluxo (kg h ⁻¹)	(% massa)	(% massa)	R=refluxo (kg h ⁻¹)	(% massa)	(% massa)
T=#20 (°C)			T=#22 (°C)		
R=14250, T=140	99,72	99,72	R=7420, T=145	99,80	99,7
R=12250, T=140	97,60	99,72	R=6420, T=145	99,72	99,64
R=11250, T=140	95,17	99,70	R=5420, T=145	99,70	99,58
R=14700, T=145	94,95	99,68	R=4420, T=145	94,22	90,39
R=14700, T=147	94,73	99,64	R=5500, T=145	99,41	98,75
R=14700, T=150	94,13	98,56	R=5500, T=147	99,44	93,89
R=14700, T=143	96,35	99,63	R=7420, T=150	99,76	99,70
R=11700, T=143	99,76	99,71			

R=9700, T=143	97,16	99,21	
R=12200, T=143	91,58	99,7	

Capítulo 4

Desenvolvimento de Analisadores Virtuais

4.1 Etapas do Desenvolvimento de Analisadores Virtuais

Para construir um analisador virtual é necessário, em primeiro lugar, obter dados representativos do processo em questão que possam ser usados como entradas nos algoritmos de seleção de variáveis e construção de modelos. Depois da obtenção dos dados, parte-se para seleção de variáveis, que pode ser realizada através de uma análise de sensibilidade ou através de algoritmos de seleção. Por fim, realiza-se a construção de modelos e sua implementação *on-line*. Nos próximos itens: 4.1.1, 4.1.2, 4.1.3 e 4.1.4, serão apresentadas as alternativas existentes para cada uma destas etapas.

4.1.1 Geração de Dados para o Desenvolvimento do Analisador

Os dados de entrada usados no desenvolvimento de um inferidor podem ser obtidos diretamente de dados históricos do processo ou de simulações estacionárias e dinâmicas. Independente da fonte é fundamental que os dados sejam representativos, ou seja, compreendam várias regiões de operação do processo, para que as inferências futuramente realizadas possam ser obtidas para qualquer região.

4.1.2 Escolha das Variáveis Secundárias

Após a coleta de dados, deve-se escolher quais serão as variáveis dentre estes dados que são adequadas para a construção de um modelo que as relacionem com a variável a ser inferida. É sabido que aumentar o número de variáveis numa equação de regressão melhora o ajuste dos dados de treino (usados na construção do modelo), mas a inclusão de muitas variáveis freqüentemente causa uma redução substancial na habilidade preditiva do modelo em relação aos dados de teste (validação). Então, é necessário selecionar um conjunto de variáveis que produza o melhor modelo preditivo. No caso das colunas de tolueno, cujas variáveis a serem inferidas são as composições de topo de tolueno e de contaminantes como o BENZ e os compostos não-ARO, devem ser construídos vários modelos (um para cada variável inferida). Dessa forma, as variáveis secundárias – aquelas que irão compor o modelo poderão variar de

modelo para modelo. Estas variáveis podem ser quaisquer dentre as que possuem medição no processo, ou seja, podem ser temperaturas, níveis, pressões e vazões. Em geral, os modelos para inferência de composição em colunas de destilação utilizam principalmente temperaturas e pressões, uma vez que estas variáveis possuem uma grande relação com a composição. Esta relação é advinda da física de transição das fases líquido-vapor presentes em misturas de hidrocarbonetos. Em geral, composição, temperatura e pressão de uma mistura em ebulição são termodinamicamente relacionadas conforme indicado abaixo (LUYBEN, 1992):

$$T_e = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k, P_v)$$

onde:

T_e = temperatura da mistura em ebulição;

x_k = composição do componente k em uma mistura de n componentes;

P_v = pressão de vapor da mistura em ebulição.

A complexidade da relação termodinâmica acima é que vai definir a efetividade de um sistema de controle baseado nestas variáveis. Se a pressão for constante, a inferência baseada apenas em temperaturas é mais simples e pode ser então mais efetiva. No entanto, considerando uma torre de destilação, deve ser levada em consideração a existência de um perfil de temperaturas, e não somente medições isoladas. Afinal, se o perfil de temperatura variar pouco, a efetividade da inferência de composição pode estar comprometida. Geralmente, este problema acontece em sistemas com componentes de pontos de ebulição próximos, caso em que a separação é difícil, e, portanto o perfil de temperatura apresenta uma variação mínima. Dessa forma, antes de iniciar a seleção de variáveis, é importante levarem-se em conta os pontos de ebulição dos componentes da coluna, bem como suas volatilidades relativas e observar o comportamento do perfil de temperatura e da pressão do sistema.

Já as vazões e os níveis podem ser utilizados também, mas não são recomendados, pois não são indicativos imediatos de mudança de composição. Na maior parte dos casos, uma mudança de vazão de carga numa coluna implica em variação de composição, mas que será “sentida” depois de um tempo maior e não imediatamente. Já nos casos das temperaturas e pressões, a dinâmica é mais rápida, pois variações nas mesmas implicam em mudanças de composição imediatas nos estágios em que ocorrem estas variações. A variação de uma composição em um determinado estágio da coluna é “sentida” num curto espaço de tempo na corrente de topo, comparativamente ao caso das vazões. Além disso, as vazões não podem ser consideradas isoladamente, pois o aumento de uma vazão geralmente implica na mudança de outras, e assim sendo não se pode levá-las em conta isoladamente. Dessa forma, em sistemas cujas temperaturas e pressões não são suficientemente explicativas ou não podem ser utilizadas, pode-se fazer uso de algumas relações entre as vazões, como por exemplo, as razões refluxo/carga e refluxo/destilado.

Baseando-se nas afirmações acima, é possível realizar-se a escolha das variáveis secundárias somente através de uma avaliação crítica das variáveis em uso. No entanto, se o número de

variáveis existentes for muito alto, existem algumas técnicas estatísticas que podem auxiliar na seleção. Além disso, podem ser feitas análises de sensibilidade, ou seja, provocar alterações nas variáveis inferidas e detectar quais são as variáveis secundárias que são mais sensíveis a estas alterações. De uma forma geral, é conveniente aliar todas as técnicas para obter um melhor resultado e para o caso específico de colunas de destilação, é importante levar em conta o número de medições existentes. Por exemplo, se uma coluna possui poucas medições de temperatura (uma no topo, uma no meio e uma no fundo), inicialmente todas elas poderão ser incluídas no modelo para não filtrar informação, podendo ser eliminadas após realizar uma análise de sensibilidade para ver se realmente as temperaturas têm relação com a variável inferida.

As técnicas estatísticas que eventualmente podem ser usadas são divididas em três grupos:

- Métodos de busca exaustiva;
- Métodos evolutivos;
- Métodos de busca aleatória.

Nos métodos de busca exaustiva são realizados modelos com todas as combinações possíveis de variáveis e assim as variáveis selecionadas são aquelas que apresentam um melhor modelo. As desvantagens deste método é que eles possuem um elevado custo computacional, e desta forma, para um número elevado de variáveis podem se tornar impraticáveis.

Já os métodos evolutivos se baseiam no princípio de inclusão e exclusão de variáveis a um conjunto. Entre eles podem-se citar quatro tipos como mais importantes (FACCHIN, 2005):

- **Forward Selection (FS):** o modelo é construído em etapas e a cada etapa uma variável é introduzida. A adição de variáveis acaba quando não há mais melhora significativa no modelo ou se todas as variáveis já foram incluídas. A melhora do modelo pode ser testada através da correlação entre a variável inferida e o valor real ou através do teste estatístico F (MONTGOMERY e PECK, 1982 e XU e ZHANG, 2001).

- **Backward Elimination (BE):** ao contrário do FS, este método inicia com todas as variáveis e a cada etapa uma delas é removida. A remoção de variáveis cessa quando o modelo gerado apresentar piora significativa. A primeira variável eliminada é aquela que possui a menor contribuição para a redução do erro preditivo quadrático (PRESS). (MONTGOMERY e PECK, 1982 e XU e ZHANG, 2001).

- **Stepwise Regression (SR):** é uma combinação dos métodos anteriores. A cada adição de variável é realizada uma etapa de verificação para eliminação de variáveis redundantes, ou seja, uma variável que entrou nas primeiras etapas da seleção pode ser eliminada nas últimas. A avaliação de performance é feita em função do coeficiente de correlação parcial. (MONTGOMERY e PECK, 1982 e XU e ZHANG, 2001).

- **Stepwise Regression based on model predictions (SRMP):** é uma modificação do procedimento stepwise (SR) onde além da PRESS ser utilizada como parâmetro de avaliação de performance preditiva, utiliza-se um critério para estabelecer quando o algoritmo deve cessar a escolha de variáveis. A construção do conjunto de treino e teste é feita de forma aleatória. (FINKLER, 2003).

Entre os métodos de busca aleatória, o método **Algoritmos Genéticos (AG)** é largamente utilizado. Este método baseia-se no comportamento evolutivo das espécies e dessa forma os modelos são denominados indivíduos e as variáveis são os respectivos genes. O primeiro passo desta técnica é a geração de uma população inicial, que consiste de um conjunto original de um dado tamanho (n cromossomos) aonde cada gene é nomeado com um bit igual a 0 ou 1. A partir desta população são realizadas iterações (chamadas gerações) que consistem de cruzamentos, mutações e cópias dos indivíduos mais qualificados.

O cruzamento é a operação mais importante e caracteriza-se pela troca de genes realizada entre os cromossomos disponíveis. Esta troca de genes realizada entre pares de cromossomos é realizada ao longo do comprimento dos mesmos dando origem a um novo par de cromossomos. Já a mutação, é uma simples alteração randômica na posição de um cromossomo.

Maiores detalhes sobre os Algoritmos Genéticos podem ser encontrados em SUDJANTO, WASSERMAN e SUDARBO (1996) e LEARDI e GONZÁLES (1998).

4.1.3 Escolha do Modelo

Existem várias possibilidades de aplicações de modelos para colunas de destilação. Em geral as técnicas mais usadas atualmente são empíricas, mas podem ser utilizados também modelos fenomenológicos. As categorias de modelagem podem ser divididas em três grupos:

- **Modelos fenomenológicos:** relacionam as variáveis secundárias e as primárias através de equações que descrevem o comportamento físico-químico do sistema, balanço de massa e energia, equações constitutivas, cinéticas de reação etc, ou seja, possuem um foco voltado ao fenômeno e usa leis e modelos teóricos para descrevê-lo.

- **Modelos empíricos:** são modelos sem qualquer base fenomenológica utilizando tipicamente técnicas de análise estatísticas mono ou multivariáveis e modelos de regressão para estabelecer uma relação entre dados de entrada e saída.

- **Modelos semi-empíricos:** são modelos baseados normalmente em simplificações de modelos fenomenológicos, os quais durante o processo de simplificação, acabam gerando parâmetros que precisam ser ajustados através de métodos estatísticos para estimação de parâmetros.

Dentre os modelos empíricos, os tipos mais utilizados são:

- **Multivariate Least Regression (MLR):** é uma regressão linear entre um conjunto de dados x e um vetor y , cujo parâmetro regressor é calculado através da técnica de mínimos quadrados. Este método não é muito utilizado devido suas características numéricas de mau condicionamento as quais podem gerar matrizes de posto-deficientes, as quais invertidas geram soluções indefinidas.

- **Principal Component Regression (PCR):** esta técnica surgiu para resolver parte dos problemas do MLR. A PCR consegue lidar com matrizes singulares através da aplicação da técnica PCA (*Principal Component Analysis*) na matriz de dados, eliminando a existência de dados correlacionados, e se necessário reduzindo a dimensão do sistema para que o mesmo

deixe de ser indeterminado. A realização de PCA (GLEN, DUNIII e SCOTT., 1989) nos dados de entrada gera um novo conjunto de dados ortogonais, o que garante uma inversa estável.

- **Partial Least Squares (PLS):** é uma técnica de redução de dimensionalidade para a maximização da covariância entre uma matriz de dados X e uma matriz de variáveis de resposta Y .

Enquanto que na PCR somente a matriz X é decomposta em um novo sistema, a fim de obter a máxima variância dos dados, na PLS ambos os conjuntos de dados X e Y são decompostos em um sistema tal que a covariância entre as projeções X e Y seja máxima. A técnica pode ser aplicada tanto para sistemas lineares quanto para sistemas não-lineares. Em GELADI e KOWALSKI, 1986, podem ser encontradas descrições mais detalhadas destas técnicas de regressão.

- **Redes Neurais:** são sistemas inspirados nos neurônios biológicos e na estrutura paralela do cérebro, com capacidade de adquirir, armazenar e utilizar conhecimento experimental. Através de um elemento processador que imita a estrutura de um neurônio artificial são recebidas as entradas dos sistemas pelas estruturas de interconexão, e a elas são atribuídos pesos como ocorre similarmente nas sinapses do cérebro. Quando as entradas são processadas, uma função de ativação, que pode ser linear, sigmoideal, ou de outras forma, transforma-as nas saídas que podem ou não ser realimentadas nas redes. Geralmente nos algoritmos são utilizadas camadas de neurônios múltiplas, imitando o processamento paralelo das informações no cérebro. A Figura 4.1 (a) mostra um exemplo de neurônio com função linear, onde x_1 , x_2 e x_3 são as entradas, a_1 , a_2 e a_3 são os pesos e y representa a saída do sistema. Na Figura 4.1 (b) é feita a representação de uma rede com camada múltipla, em que uma das camadas é chamada de camada escondida. Geralmente nos algoritmos usados para regressão, são definidos como parâmetros da rede os pesos, o número de camadas e o número de neurônios.

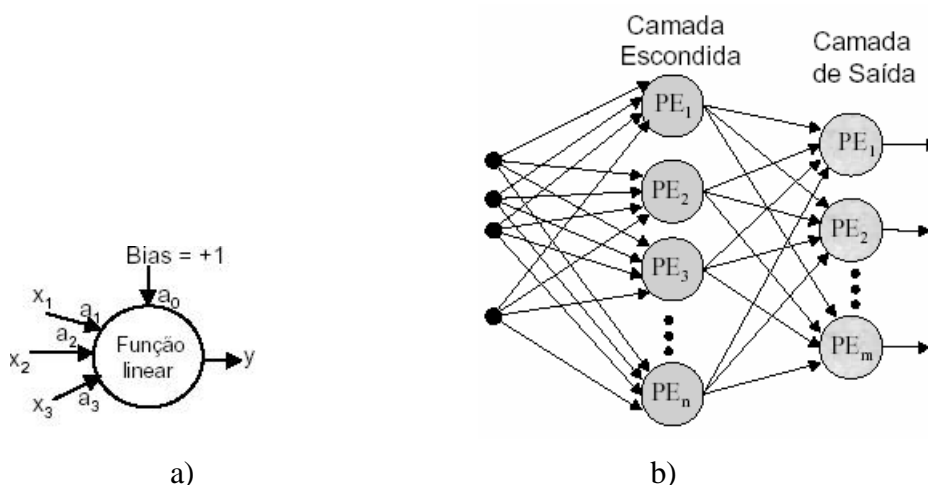


Figura 4.1: Representação esquemática de redes neurais.

As limitações existentes nas redes neurais se referem principalmente a sua arquitetura, visto que é muito difícil definir a arquitetura ideal da rede de forma que ela seja tão grande quanto

o necessário para conseguir obter as representações necessárias e ao mesmo tempo pequena o suficiente para se ter um treinamento mais rápido. Não existem regras claras para se definir quantas unidades devem existir nas camadas intermediárias, quantas camadas, ou como devem ser as conexões entre essas unidades.

4.1.4 Técnicas de Correção de Modelos

Modelos criados para predição do comportamento real de um determinado processo, por mais confiáveis que sejam, são suscetíveis a alterações no processo que ocorrem ao longo de tempo, podendo apresentar desvios relacionados a essas alterações no valor final de suas predições. Para evitar que os modelos se tornem obsoletos, é necessário que se apliquem técnicas para correção de seus desvios e para tal existem atualmente métodos tanto para adaptação dos modelos quanto para a correção dos desvios existentes nos valores preditos. Todas as técnicas fazem uso de valores de referência, tais como análises de laboratório, para realizar as adaptações e/ou correções. As principais estratégias existentes atualmente são descritas brevemente nesta seção.

- **Correção de BIAS:** é a técnica mais tradicional, e se trata também da mais simplificada, pois é a substituição do valor da predição no momento em que uma análise laboratorial for disponibilizada, pelo valor da predição acrescido da diferença (BIAS) entre o mesmo e a análise laboratorial. Convém ressaltar que as predições são realizadas geralmente em períodos curtos de tempo (minutos) enquanto que o valor do BIAS só pode ser calculado quando estiver disponível a análise laboratorial, o que geralmente ocorre em plantas petroquímicas de 1 a 3 vezes ao dia. Desta forma, a atualização das predições é realizada somente nestes períodos mais longos, e nos intervalos de tempo, o sistema fica suscetível a erros, pois entre uma análise e outra a predição será somada ao último BIAS calculado. A técnica pode ser descrita pela equação:

$$y_f = \hat{y} + BIAS \quad (4.1)$$

onde y_f é a predição final, \hat{y} é a predição sem correção e BIAS é a diferença entre \hat{y} e o valor do laboratório no momento em que a análise é fornecida, ou uma fração desta diferença a qual dependerá da confiabilidade da medida laboratorial.

- **Mínimos quadrados recursivos:** este método trata da correção dos parâmetros do modelo existente e dessa forma permite uma readaptação do modelo ao processo, diferentemente da correção de BIAS, podendo ser usado para os modelos do tipo PLS (MacGREGOR e DAYAL, 1997). Ao invés de atualizar os valores preditos diretamente, este método procede uma atualização das matrizes de variância das entradas ($X^T \cdot X$) e covariância entre as entradas e saídas ($X^T \cdot Y$).

- **Filtro de Kalman:** é o método mais versátil, pois distingue erros tanto no modelo quanto na medição, permitindo a adaptação do modelo a cada nova análise disponível. Detalhes sobre a técnica podem ser encontrados em BISHOP e WELCH, 2000.

4.2 Desenvolvimento do Analisador Usando Técnicas PLS

Na seção anterior discutiram-se genericamente as técnicas disponíveis para serem aplicadas nas diversas etapas que são empregadas para o desenvolvimento de analisadores virtuais. Das técnicas abordadas sucintamente, será discutida a seguir a técnica PLS que foi empregada intensivamente para gerar os analisadores virtuais estudados nesta dissertação. Em seguida, serão mostrados os resultados do desenvolvimento do analisador virtual de composição para a coluna FT-1. Os resultados referentes à coluna FT-2 não serão expostos neste capítulo, pois a metodologia e os resultados finais foram similares para as duas colunas, devido as suas características de operação semelhantes.

4.2.1 Técnica PLS

Antes de introduzir a técnica PLS é conveniente apresentar a técnica PCA (*Principal Component Analysis*), pois a PLS trata-se de uma evolução desta última.

PCA: é um método de transformação de dados que os rotaciona de tal forma que o eixo principal dos mesmos migra para a direção de máxima variância. A Figura 4.2 indica o resultado da rotação de um sistema com dois dados de entrada v_1 e v_2 :

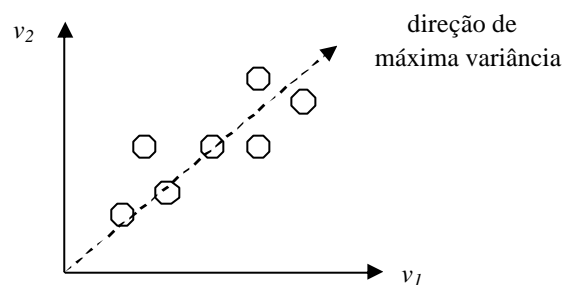


Figura 4.2: Rotação de dados na PCA.

As novas coordenadas dos dados são projeções dos dados em seus eixos principais que por sua vez são vetores no espaço de variáveis originais. Esses vetores são conhecidos como PCLs (*Principal Component Loadings*). O único tratamento necessário antes de submeterem-se dados a esta técnica é a normalização dos mesmos, para que não sejam comparadas variâncias de conjuntos de escalas diferentes no momento em que são executadas as projeções.

As principais vantagens resultantes da utilização deste método são: a redução do número de variáveis, a eliminação de direções limitadas e a aquisição de mais informação sobre o sistema. A PCA reduz conjuntos de dados que contêm muitas variáveis a poucas direções-chaves, o que simplifica a manipulação destes conjuntos e ao mesmo tempo descarta aquelas direções com pouca variação e que desta forma carregam informações limitadas sobre o sistema.

PLS: esta técnica, por sua vez, utiliza os mesmos princípios da PCA, entretanto os aplica entre os dados de entrada e saída, ou seja, enquanto a PCA orienta os dados para direções de máxima variância, na PLS a base para novos eixos é o máximo da covariância entre entradas e

saídas. Basicamente, o método PLS é um algoritmo de regressão multivariável que lida com entradas altamente correlacionadas e dados limitados. O algoritmo reduz a dimensão das variáveis de entrada (matriz X) e de resposta (matriz Y) projetando-as para direções (peso w -entrada e peso c -saída) que maximizam a covariância entre as entradas e saídas. As novas variáveis criadas são chamadas **variáveis latentes (VL)**. Este método de projeção decompõe variáveis de alta colinearidade em variáveis unidimensionais (vetores t -entrada e u -saída). A decomposição de X e Y nos vetores t e u é formulada como mostram as equações 4.2 e 4.3:

$$X = \sum_{h=1}^m t_h p_h^T + E \quad (4.2)$$

$$Y = \sum_{h=1}^m u_h q_h^T + F \quad (4.3)$$

Onde p e q são as posições no novo sistemas de coordenadas e E e F são os resíduos. Esta relação é conhecida como relação externa enquanto que a relação entre os vetores t_h e u_h é conhecida como relação interna. A relação interna conecta as duas relações externas rotacionando as entradas e saídas de forma a maximizar sua covariância.

Os modelos do tipo PLS são classificados como lineares ou não-lineares de acordo com a relação interna existente. Em sistemas cuja não-linearidade é alta, a relação interna deve contemplar este comportamento e dessa forma para estes casos uma modelagem linear é insuficiente. Nestes casos pode-se aplicar versões não lineares tais como QPLS e BTPLS.

O método **QPLS** foi abordado por WOLD, KETTANEH-WOLD e SKAGERBERG (1989) que propuseram a inserção de uma relação quadrática na relação interna do PLS, sendo então a base para o aprimoramento e desenvolvimento desta técnica não-linear, a equação polinomial de segunda ordem:

$$u = c_0 + c_1 \cdot t + c_2 \cdot t^2 + h \quad (4.4)$$

Outra alternativa é a utilização da relação linear de Box e Tidwell - **BTPLS** (1962) transformada para obter um sistema que permite a utilização de qualquer valor de x , tornando assim o sistema mais flexível do que o QPLS. Este modelo foi proposto por LI, MARTIN e MORRIS em 2001 e consiste na resolução do sistema mostrado na Equação (4.5):

$$y(x) = \beta_0 + \beta_1 \cdot r(x)$$

$$r(x) = \begin{cases} [\text{sgn}(x)]^d \cdot |x|^\alpha, & \alpha \neq 0 \\ [\text{sgn}(x)]^d \cdot \ln(|x|), & \alpha = 0 \end{cases} \quad d = 0 \quad \text{ou} \quad d = 1 \quad (4.5)$$

onde os parâmetros β_0 , β_1 , α e δ são determinados através de várias etapas.

Outro método que contempla a não-linearidade é o **Fuzzy-PLS**, cujos modelos serão abordados na seção 4.3. Esta técnica alia o PLS com a lógica Fuzzy, que foi estruturada em 1965, pelo Dr. Lofti A. Zadeh da Universidade da Califórnia para tratar e representar incertezas. A lógica Fuzzy é estruturada com base na afirmação de que o mundo não é constituído por fatos absolutamente verdadeiros ou falsos e dessa forma atribui valores de pertinência (grau de verdade) intermediários entre os valores de verdadeiro e falso da lógica clássica (bivalente). Para tal, constitui-se de regras condicionais para chegar na relação entre as entradas e saídas de um sistema e representá-la geralmente através de uma função gaussiana. Por exemplo, para um determinado processo cujas variáveis de entrada são $[x_1 \ x_2 \dots x_r]$ e a saída é y , aplica-se regras SE-ENTÃO de forma que:

SE $x_1=A_1, \dots, x_r=A_r,$

ENTÃO: $y = b_1x_1 + \dots + b_r x_r$

Sendo A_n as entradas do Fuzzy que são caracterizadas por uma função gaussiana $A_n(x_n)$ e b_n são parâmetros reais. Esta lógica é aplicada na relação interna do PLS para capturar não-linearidades enquanto que o PLS reduz a dimensionalidade do sistema e reduz a colinearidade existente. De forma similar, o PLS também pode ser combinado com redes neurais conforme ilustrado em QIN e Mc AVOY (1992).

Na seção 4.2.4, o método LPLS (Linear PLS) será comparado às abordagens não-lineares QPLS e BTPLS. Mas antes de proceder-se esta comparação, mostrar-se-á como os dados e as variáveis secundárias utilizadas neste estudo foram gerados.

4.2.2 Geração de Dados

O objetivo inicial deste trabalho era a comparação de analisadores virtuais criados a partir de modelos estacionários e dinâmicos. Entretanto, como a simulação dinâmica apresentou-se inadequada para representar a unidade industrial optou-se apenas pela geração de modelos baseados em conjuntos de dados estacionários.

Para tal, realizou-se primeiramente uma coleta de dados a partir da simulação estacionária discutida no Capítulo 3 validada (sem a FB) obtendo-se então pontos estacionários. Os pontos foram definidos de tal forma a contemplar o maior número de variações possíveis no perfil de temperatura, nas vazões e concentrações de carga das duas colunas, nas pressões de topo e nas razões de refluxo. Dessa forma cada variável foi variada em seu intervalo mantendo as outras constantes (dentro do ponto de operação normal) até se obter em torno de 50 pontos estacionários. Foram realizadas também algumas combinações entre variáveis, ou seja, varioaram-se, por exemplo, a razão de refluxo e a carga das torres concomitantemente. A Tabela 4.1 ilustra os intervalos definidos para cada variável da FT-1 e a Tabela 4.2 ilustra os intervalos definidos para a FT-2. Os conjuntos de dados abrangem os dados de entrada e de saída. Como entrada são utilizados os valores de todo o perfil de temperatura das colunas, da pressão de topo, das vazões de refluxo, carga, topo, fundo e vapor no refeedor e por fim as razões RD, RF e VF. Os dados de saída são as composições de TOL e não-ARO para cada ponto estacionário.

Tabela 4.1: Intervalos definidos para construção de dados estacionários da FT-1.

Variável	Faixa de variação	Valor inicial
#20 (°C)	136 - 150	140
Vazão de Refluxo (kg h ⁻¹)	9000 - 16000	14250
Vazão de Carga (kg h ⁻¹)	8000 - 15500	13400
P topo absoluta (kgf cm ⁻²)	1 – 1,12	1,06
Composição TOL carga (kg kg ⁻¹)	0,5 – 0,6	0,55

Tabela 4.2: Intervalos definidos para construção de dados estacionários da FT-2.

Variável	Faixa de variação	Valor inicial
#22 (°C)	140 - 150	142
Vazão de Refluxo (kg h ⁻¹)	4000 - 8000	7420
Vazão de Carga (kg h ⁻¹)	5000 - 15500	6840
P topo absoluta(kgf cm ⁻²)	1 – 1,6	1,12
Composição TOL carga (kg kg ⁻¹)	0,5 – 0,6	0,55

Além do conjunto de dados de treino (usado para construção de modelos) foi gerado um conjunto de dados de validação de 35 pontos estacionários a partir da mesma simulação. Este conjunto é de extrema importância, pois é nele que os modelos construídos são avaliados segundo os parâmetros R-Quadrado e PRESS. Os intervalos máximos e mínimos deste conjunto são os mesmos mostrados nas Tabelas 4.1 e 4.2 e as entradas e saídas do conjunto podem ser vistas no Apêndice A.

4.2.3 Seleção de Variáveis

No Capítulo 3 fez-se um estudo de como as variáveis presentes nas duas colunas de tolueno reagem frente às mudanças na operação e conseqüentemente na composição de topo. Verificou-se que as temperaturas dos estágios são um indicativo dessas mudanças, e, portanto são fundamentais na construção dos modelos. Observou-se ainda que algumas temperaturas são mais sensíveis do que outras, alertando para o fato de que provavelmente nem todo o perfil de temperatura deva ser utilizado. A fim de testar a veracidade destas informações, foram construídos modelos com base nestas temperaturas mais sensíveis e com base em todas as temperaturas. Além disso, foram testados modelos que contemplam as vazões, assim como pressões e razões entre vazões. As razões entre vazões escolhidas foram:

RD (refluxo/destilado): as variações no refluxo das torres implicam em alterações nas composições de topo das colunas, entretanto, o impacto do refluxo depende da vazão de

destilado, uma vez que vazões de destilado baixas implicam em compostos mais puros no topo.

RF (refluxo/carga): a carga também é um fator importante na alteração do refluxo – intuitivamente altas cargas demandam vazões de refluxo maiores. Dessa forma, é importante atrelar refluxo à carga através da razão entre ambos.

VF (vapor/carga): a vazão de vapor no refeedor das colunas altera diretamente o aquecimento das mesmas, que por sua vez depende da quantidade de hidrocarbonetos sendo alimentados nas colunas.

Além de construir modelos baseados nas análises de sensibilidade, foram construídos também modelos baseados na seleção da técnica SRMP (discutida na Seção 4.1.2). A aplicação de todos esses modelos é mostrada na Seção 4.2.4.

4.2.4 Construção de Modelos

Nesta seção, modelos para inferência de TOL e não-ARO baseados em dados estacionários de simulação são comparados e avaliados. Os métodos para construção de modelos usados foram o linear LPLS e os não-lineares QPLS e BTPLS, cujos algoritmos foram desenvolvidos por FACCHIN (2005). Os modelos foram avaliados a partir do parâmetro PRESS, calculado aplicando os modelos a dados de validação. A PRESS avalia a capacidade preditiva dos modelos e é definida como:

$$PRESS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.6)$$

onde y_i é a medida de composição do produto, \hat{y}_i é sua estimativa e N é o número de medidas. Os cálculos de PRESS são realizados utilizando-se um outro conjunto de dados que não o utilizado para estimar os parâmetros do modelo de predição.

Utilizou-se também como critério de avaliação o R-Quadrado (R^2), que é o critério mais comum adotado para comparar modelos de regressão. O R-Quadrado mede a proporção da variabilidade em y (saídas) que é explicada por x (entradas). É uma função direta da correlação entre as variáveis. Um valor de R-Quadrado muito próximo de um indica uma forte relação entre duas variáveis. O R-Quadrado é dado pela Equação 4.7,

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (4.7)$$

e \bar{y} na Equação 4.7 representa a média entre as medições existentes.

Uma vez que as duas colunas de destilação de tolueno FT-1 e FT-2 operam em condições similares, serão apresentados nesta seção somente resultados referentes à coluna FT-1.

4.3.4.1 Modelos para Inferência de Tolueno

Nesta seção são mostrados os modelos construídos para o componente TOL, ou seja, o produto de topo das colunas de tolueno. Antes, porém, é apresentado um estudo para avaliar a influência do número de variáveis latentes no desenvolvimento de modelos. Neste estudo utilizou-se o conjunto de dados de treino e de validação apresentados na Seção 4.2.2, descartando-se as vazões como variáveis de entrada, pois a utilização de vazões e razões entre vazões geraria redundâncias nos dados de entrada. Dessa forma, os dados de entrada utilizados foram o perfil de temperatura da coluna FT-1, a pressão de topo e as razões RD, RF e VF.

Determinação do número mínimo de variáveis latentes

O número máximo de variáveis latentes necessário para construir-se um modelo é o número de variáveis de entrada, afinal, o objetivo de sua utilização é justamente a minimização de variáveis de trabalho. Com o intuito de estudar a influência do número de variáveis latentes (VL) na construção de modelos LPLS e NLPLS, modelos para inferência de tolueno com até 13 VL foram construídos e comparados. Em geral observou-se que no caso do método LPLS, a cada adição de variáveis latentes houve um acréscimo no valor do R^2 e uma diminuição na PRESS, indicando que neste caso é favorável a utilização de número máximo de variáveis latentes. Entretanto observa-se que esta contribuição é significativa nas primeiras adições e nas últimas é irrisória. Em outras palavras, a diferença entre um modelo construído com 1 VL é significativa em relação a um modelo construído com 5 VL, mas a diferença entre um modelo com 9 VL e 13 VL é irrisória. Na Tabela 4.3, que mostra modelos do tipo LPLS, observa-se a evolução de modelos construídos com 1 até 13 VL. Convém ressaltar que as tabelas e figuras a seguir apresentam os resultados das predições do conjunto de dados de validação.

Tabela 4.3: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos LPLS.

Modelo	VL	R^2	PRESS
L1	1	0,6397	1,5573
L2	2	0,8165	0,7890
L3	3	0,9169	0,3594
L4	4	0,9521	0,2071
L5	5	0,9549	0,1950
L6	6	0,9563	0,1891
L7	7	0,9580	0,1815
L8	8	0,9678	0,1393
L9	9	0,9713	0,1241
L10	10	0,9750	0,1090
L11	11	0,9776	0,0969
L12	12	0,9799	0,0869
L13	13	0,9800	0,0866

A Figura 4.3 mostra o resultado da validação dos modelos L1, L5, L9 e L13. Observa-se que 1 VL não consegue prever o comportamento da planta, entretanto a adição de mais 4 VL já é suficiente para construir-se um modelo representativo. É importante destacar que a capacidade preditiva do modelo é avaliada somente nos pontos de simulação, entre um ponto e outro o comportamento do sistema não pode ser avaliado, pois pode ser linear ou não. Dessa forma, é importante analisar nas figuras comparativas entre os modelos se as linhas de predição estão reproduzindo os pontos de simulação.

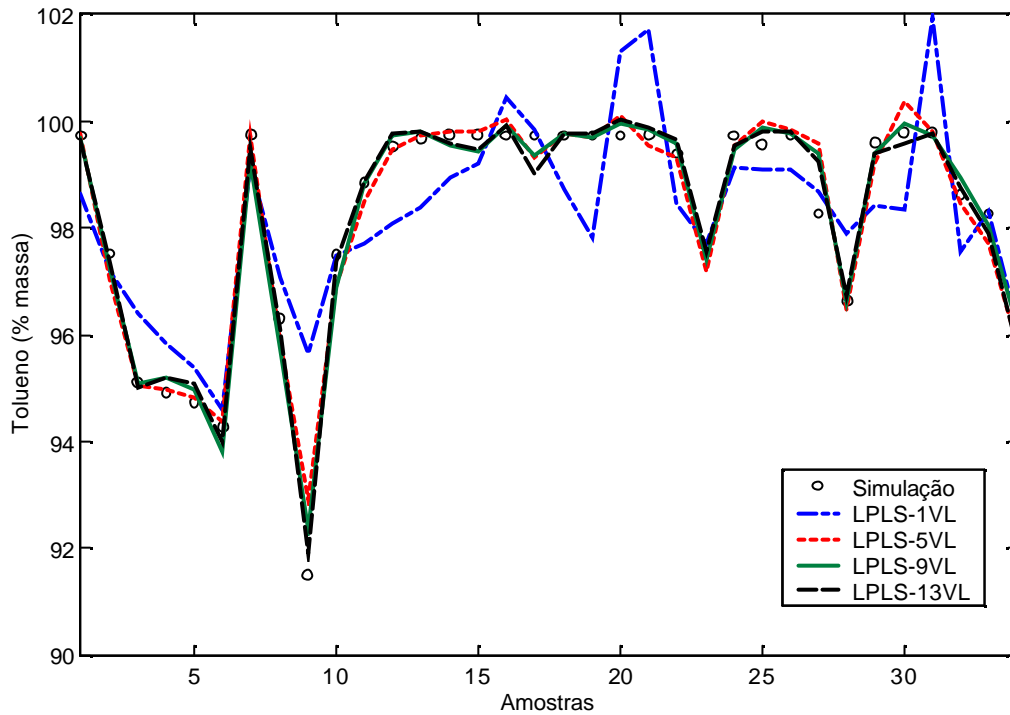


Figura 4.3: Comparação entre um modelo com 1, 5, 9 e 13 VL– caso LPLS.

Já o mesmo teste, realizado com modelos do tipo QPLS, mostra que a adição de novas variáveis latentes não é tão significativa quanto no caso linear, visto que o ajuste não-linear apresenta resultados melhores. Observa-se na Tabela 4.4, que com uma variável latente no modelo não-linear já se obtém um melhor resultado do que com 5 VL no linear. Na Figura 4.4 são mostrados os resultados para modelos do tipo QPLS que possuem 1, 5, 9 e 13 VL.

Testaram-se também modelos realizados com o método BTPLS, obtendo-se resultados inferiores aos do caso QPLS. No BTPLS, a partir de 8 VL não houve mais melhora no modelos (Tabela 4.5).

Tabela 4.4: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos QPLS.

Modelo	VL	R ²	PRESS
Q1	1	0,9884	0,0502
Q2	2	0,9957	0,0187
Q3	3	0,9975	0,0109

Q4	4	0,9980	0,0086
Q5	5	0,9982	0,0076
Q6	6	0,9988	0,0051
Q7	7	0,9991	0,0038
Q8	8	0,9992	0,0034
Q9	9	0,9992	0,0033
Q10	10	0,9993	0,0032
Q11	11	0,9993	0,0030
Q12	12	0,9993	0,0029
Q13	13	0,9993	0,0029

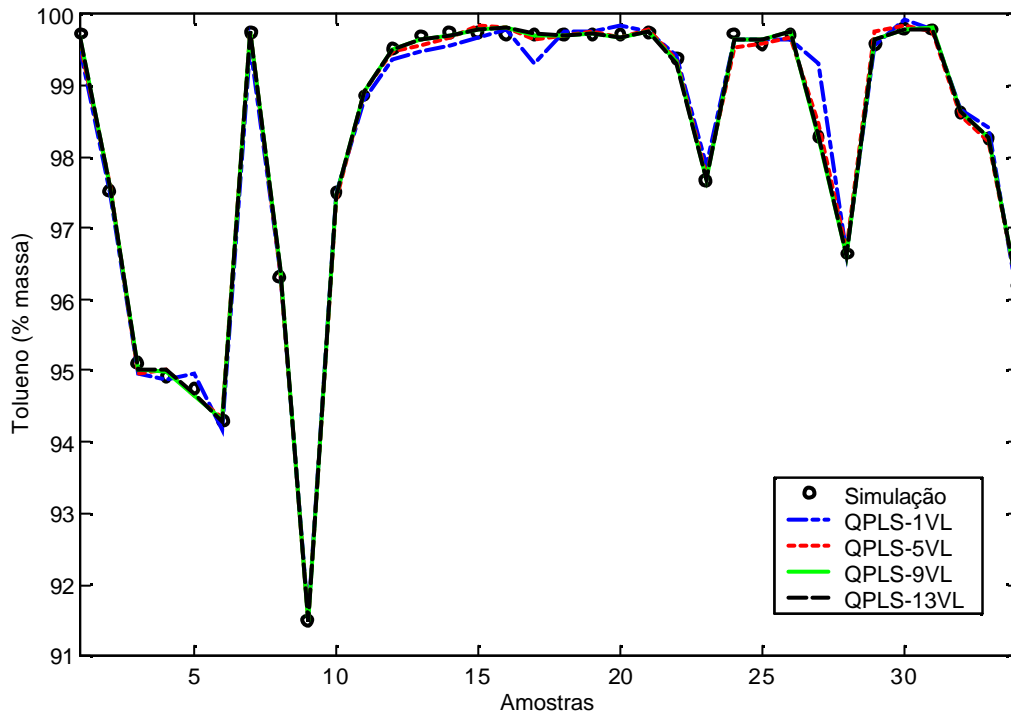


Figura 4.4: Comparação entre modelos com 1, 5, 9 e 13 VL – caso QPLS.

Com base no estudo de determinação do número de variáveis latentes optou-se pela utilização dos métodos LPLS e QPLS nos estudos comparativos entre modelos lineares e não-lineares do próximo item. O BTPLS apresentou resultados inferiores ao QPLS, por isso não será estudado. Em relação às variáveis latentes, optou-se por utilizar-se o número máximo, ou seja, o número de variáveis de entrada no caso LPLS, a fim de garantir que seja construído o modelo mais representativo, e 8 VL no caso QPLS, pois acima deste número não há variações significativas em valores de R^2 e PRESS.

Tabela 4.5: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos BTPLS.

Modelo	VL	R^2	PRESS
BT 1	1	0,9852	0,0640
BT 2	2	0,9852	0,0640
BT 3	3	0,9928	0,0310
BT 4	4	0,9957	0,0185
BT 5	5	0,9972	0,0121
BT 6	6	0,9973	0,0115

BT 7	7	0,9990	0,0045
BT 8	8	0,9990	0,0045
BT 9	9	0,9990	0,0045
BT 10	10	0,9990	0,0045
BT 11	11	0,9990	0,0045
BT 12	12	0,9990	0,0045
BT 13	13	0,9990	0,0045

Comparação entre modelos LPLS e QPLS

Na seção 4.1.2 discutiu-se a relação existente entre composição, temperatura e pressão, indicando que tanto o perfil de temperatura quanto as pressões de topo das colunas de tolueno devem ser utilizadas como entradas nos modelos. Além disso, viu-se que se as temperaturas e pressões não forem suficientes para gerar um modelo representativo, as vazões de carga, refluxo, fundo, vapor e destilado podem ser incluídas, assim como relações entre as mesmas. Neste item são mostrados modelos lineares e não-lineares construídos com diversas combinações entre as variáveis do conjunto de treino definido na seção 4.2.2, conforme a descrição abaixo:

T: modelo construído a partir de todo o perfil de temperatura da coluna;

TP: modelo construído a partir do perfil de temperatura e da pressão de topo da coluna;

TVP: modelo construído a partir do perfil de temperatura, da pressão de topo e das vazões;

TRP: modelo construído a partir do perfil de temperatura, da pressão de topo e das razões RD, RF e VF;

SRMP: modelo construído a partir da seleção de variáveis deste método (discutido na seção 4.1.2)

Sens.: modelo construído a partir das variáveis mais sensíveis a testes na planta (conforme visto no Capítulo 3).

Primeiramente, a influência das vazões e das razões entre vazões foi testada, para se verificar se existem ganhos relativos à inserção destas variáveis comparativamente aos modelos construídos somente a partir do perfil de temperatura e da pressão de topo. Desta forma, modelos TVP, TRP e TP LPLS e QPLS foram comparados através da Tabela 4.6.

Tabela 4.6: TOL - comparação entre modelos TPV, TPR e TP.

Modelo	Método	R ²	PRESS
TVP	LPLS	0,9803	0,0850
	QPLS	0,9997	0,0014
TRP	LPLS	0,9800	0,0866
	QPLS	0,9991	0,0029
TP	LPLS	0,9540	0,1990

QPLS

0,9971

0,0124

A Tabela 4.6 indica que tanto as utilizações de vazões quanto de razões entre vazões produzem inferências similares, que por sua vez são melhores que as inferências realizadas a partir do perfil de temperatura e da pressão de topo. No caso LPLS esta diferença é mais pronunciada, o que pode ser visto na Figura 4.5.

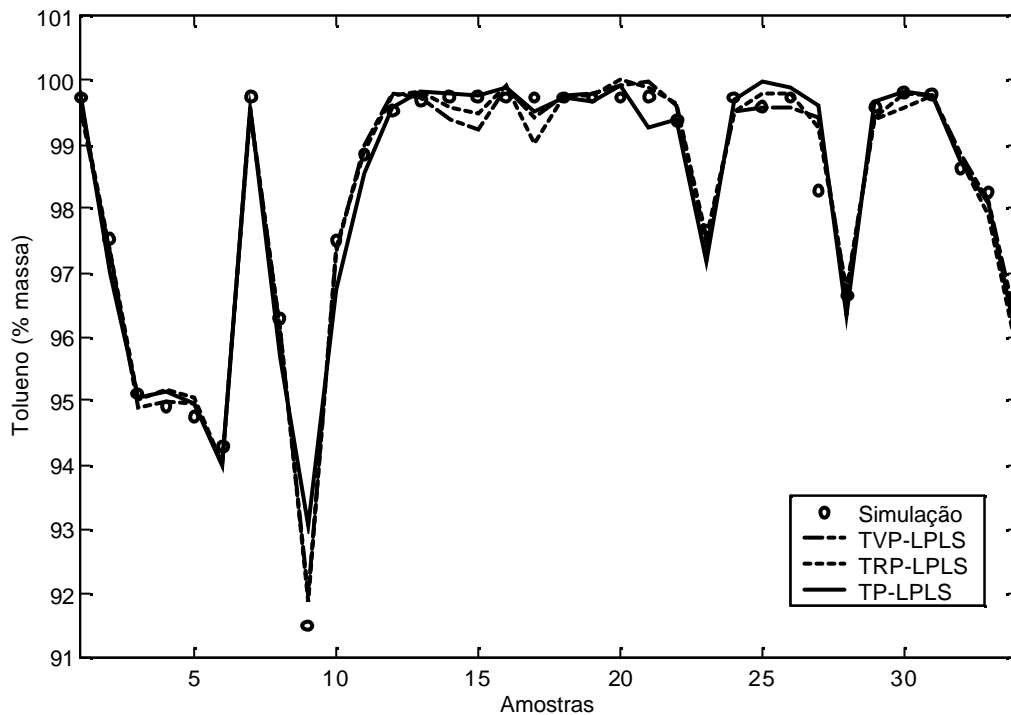


Figura 4.5: TOL - comparação entre modelos TVP, TRP e TP – caso LPLS.

Tendo sido verificada a importância da inclusão de vazões/razões entre vazões nos modelos para inferência de tolueno, investigou-se a influência da inserção da pressão nos modelos. Para testá-la, compararam-se modelos LPLS e QPLS construídos através das variáveis perfil de temperatura e pressão de topo da FT-1 (TP) e somente através do perfil de temperatura. A Tabela 4.7 mostra os valores de R^2 e PRESS para os modelos construídos, que por sua vez podem ser visualizados em sua aplicação (caso LPLS) a dados de validação na Figura 4.6.

Tabela 4.7: TOL - comparação entre modelos TP e T.

Modelo	Método	R^2	PRESS
TP	LPLS	0,9540	0,1990
	QPLS	0,9971	0,0124
T	LPLS	0,9481	0,2243
	QPLS	0,9952	0,0209

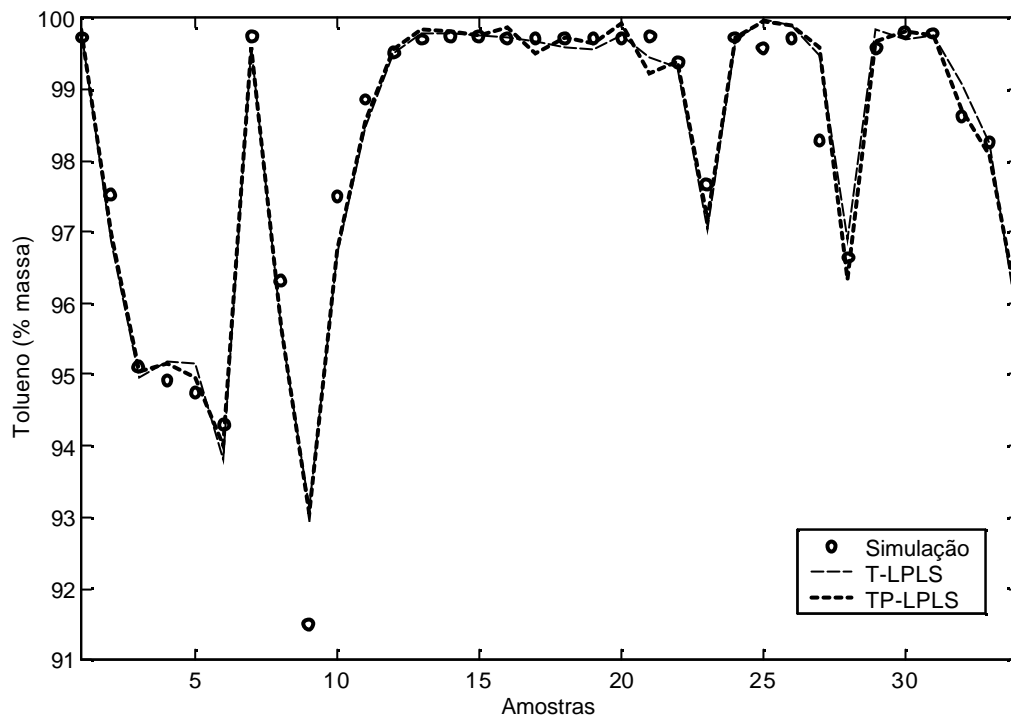


Figura 4.6: TOL - comparação entre modelos TP e T – caso LPLS.

Observa-se que a diferença entre os modelos TP e T é pequena, e desta forma a contribuição da pressão não é sensivelmente importante. Isto se deve ao fato da pressão não sofrer grandes variações nas regiões estudadas. Os modelos apresentados até então não passaram por nenhum método de seleção de variáveis, pois foram simplesmente realizadas combinações entre perfil de temperatura, pressão de topo, vazões mássicas e razões entre vazões. Embora os modelos descritos anteriormente tenham se mostrado satisfatórios quando aplicados em dados de teste, é conveniente construir-se modelos cujas variáveis sejam as mais correlacionadas com as saídas, reduzindo assim o custo computacional e evitando que variáveis que possuem uma relação irrisória com as saídas componham as inferências. Para tal o método SRMP (FINKLER, 2003) foi utilizado para selecionar variáveis, sendo comparado com modelos construídos a partir das variáveis mais sensíveis, segundo os testes na planta mostrados no Capítulo 3. Os dados de entrada foram o conjunto TRP.

A Tabela 4.8 mostra os resultados obtidos com os métodos LPLS e QPLS na aplicação das técnicas SRMP e da análise de sensibilidade realizados na FT-1.

Tabela 4.8: Aplicação das técnicas SRMP e análise de sensibilidade à construção de modelos LPLS e QPLS.

Sel. Var.	Método	Variáveis selecionadas	R ²	PRESS
SRMP	LPLS	#02, #55, P topo, VF	0,9535	0,2009
	QPLS	#55, P topo, VF	0,9862	0,0595

Sens.	LPLS	#02, #15, #20, #21, #55, P topo, RD, RF, VF	0,9692	0,1332
	QPLS	#02, #15, #20, #21, #55, P topo, RD, RF, VF	0,9931	0,0300

Observa-se que não houve melhora nos modelos com a inserção da seleção de variáveis. Os modelos obtidos com o método SRMP apresentaram resultados similares aos construídos a partir das variáveis TP (conforme a Tabela 4.7) Dessa forma, conclui-se que realmente não existe a necessidade de inclusão de todo o perfil de temperatura, mas as razões mássicas são importantes, pois neste caso a inclusão da variável VF compensou a falta de outras temperaturas. Já os modelos baseados na análise de sensibilidade apresentaram resultados similares aos TVP e TRP, uma vez que neste caso todas as razões mássicas foram incluídas. A Figura 4.7 mostra a diferença entre os modelos lineares SRMP e Sens.

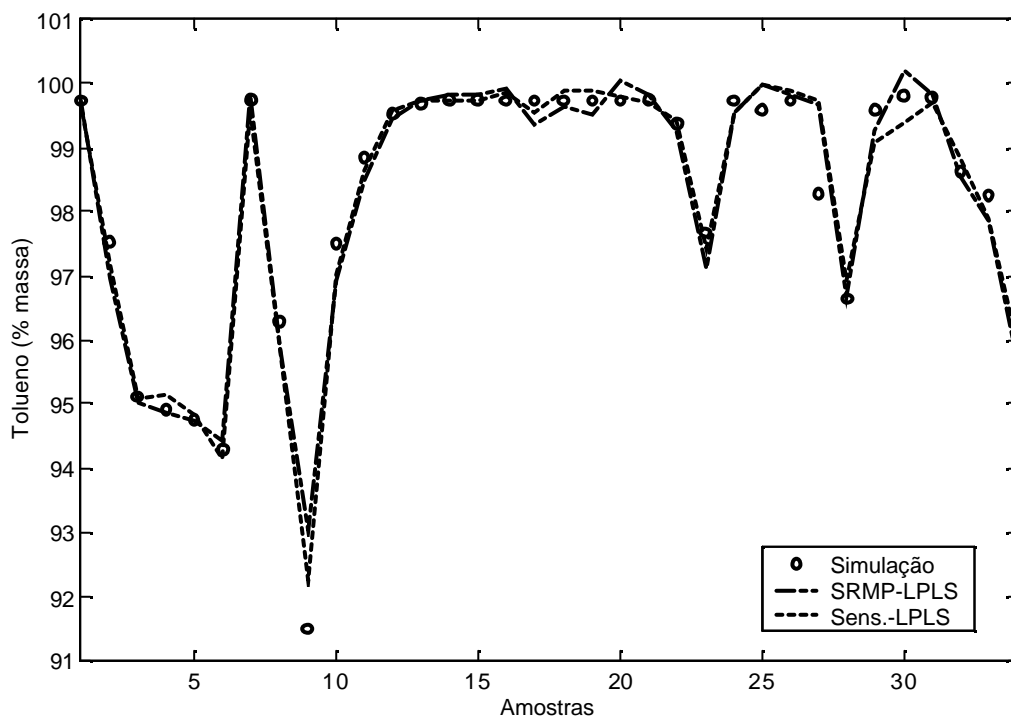


Figura 4.7: Modelos SRMP e Sens. – caso LPLS.

De uma forma geral, pode-se dizer que os modelos para inferência de tolueno apresentaram valores de R^2 e PRESS satisfatórios para a realização de inferências. Na Seção 4.3 serão mostrados mais modelos para tolueno realizados no software Aspen IQ[®] utilizando a técnica de seleção de variáveis baseada no Algoritmo Genético e de construção de modelos LPLS e Fuzzy-PLS. Mas antes de se fazer esta comparação, a próxima seção desenvolverá de forma equivalente modelos para inferir a concentração de não-ARO.

4.3.4.2 Modelos para inferência de não-ARO

Determinação do número mínimo de variáveis latentes

Da mesma forma que para inferência de tolueno, foi realizada a determinação do número de variáveis latentes para a inferência de compostos não-ARO, que são os principais contaminantes das colunas de tolueno. As técnicas estudadas foram LPLS e QPLS. Os dados de entrada utilizados neste estudo foram os mesmos utilizados na Seção 4.3.4.1, ou seja, o conjunto TRP.

O resultado da aplicação do método LPLS a este conjunto pode ser visto na Tabela 4.9, a qual indica que os modelos construídos para não-ARO apresentam erros de predição consideravelmente maiores que no caso dos modelos de tolueno. Isto ocorre devido à dificuldade que existe de atrelar contaminantes que se apresentam em quantidades pequenas (ppm) a variações de temperaturas, vazões, etc. Desta forma, neste caso, a adição de variáveis latentes é extremamente importante.

Tabela 4.9: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos LPLS para não-ARO.

Modelo	VL	R ²	PRESS
L1	1	0,0364	5,99 10 ⁶
L2	2	0,0467	5,93 10 ⁶
L3	3	0,0562	5,87 10 ⁶
L4	4	0,0763	5,74 10 ⁶
L5	5	0,0829	5,70 10 ⁶
L6	6	0,0935	5,63 10 ⁶
L7	7	0,1045	5,57 10 ⁶
L8	8	0,1066	5,55 10 ⁶
L9	9	0,1280	5,42 10 ⁶
L10	10	0,2418	4,75 10 ⁶
L11	11	0,2637	4,56 10 ⁶
L12	12	0,3569	3,99 10 ⁶
L13	13	0,3671	3,94 10 ⁶

A Figura 4.8 mostra a evolução dos modelos em decorrência da adição de VL aplicados aos dados de teste.

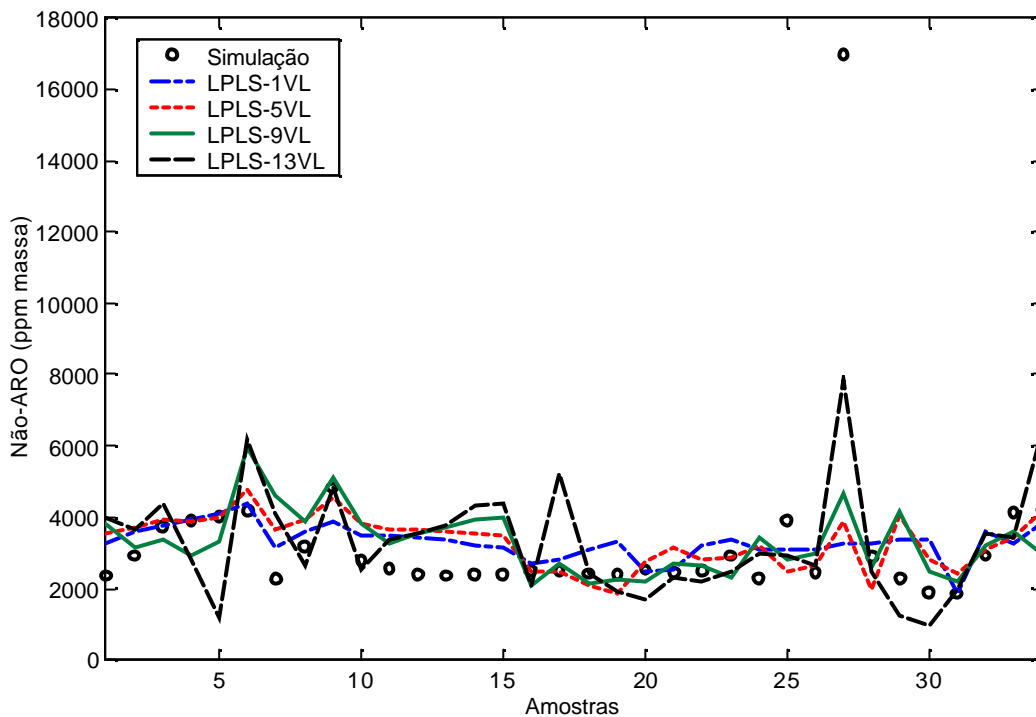


Figura 4.8: Efeito da adição de novas variáveis latentes para modelos de Não-ARO - caso LPLS.

O mesmo estudo realizado para modelos QPLS é mostrado na Tabela 4.10, onde é evidente a melhora dos modelos em relação aos modelos LPLS, tanto que as 4 últimas adições de variáveis não precisam ser realizadas na prática, pois com 9 VL já se obtém o melhor modelo possível. No caso LPLS, o número máximo de VL precisa ser usado, pois a cada adição de VL ocorrem mudanças no R^2 e na PRESS.

Tabela 4.10: Efeito do acréscimo de variáveis latentes em modelos QPLS para Não-ARO.

Modelo	VL	R^2	PRESS
Q1	1	0,8784	$7,56 \cdot 10^5$
Q2	2	0,9417	$3,63 \cdot 10^5$
Q3	3	0,9597	$2,50 \cdot 10^5$
Q4	4	0,9682	$1,98 \cdot 10^5$
Q5	5	0,9750	$1,55 \cdot 10^5$
Q6	6	0,9767	$1,45 \cdot 10^5$
Q7	7	0,9801	$1,24 \cdot 10^5$
Q8	8	0,9808	$1,19 \cdot 10^5$
Q9	9	0,9809	$1,19 \cdot 10^5$
Q10	10	0,9816	$1,14 \cdot 10^5$
Q11	11	0,9817	$1,14 \cdot 10^5$
Q12	12	0,9817	$1,14 \cdot 10^5$
Q13	13	0,9817	$1,14 \cdot 10^5$

A Figura 4.9 ilustra a evolução da adição de variáveis latentes no caso QPLS.

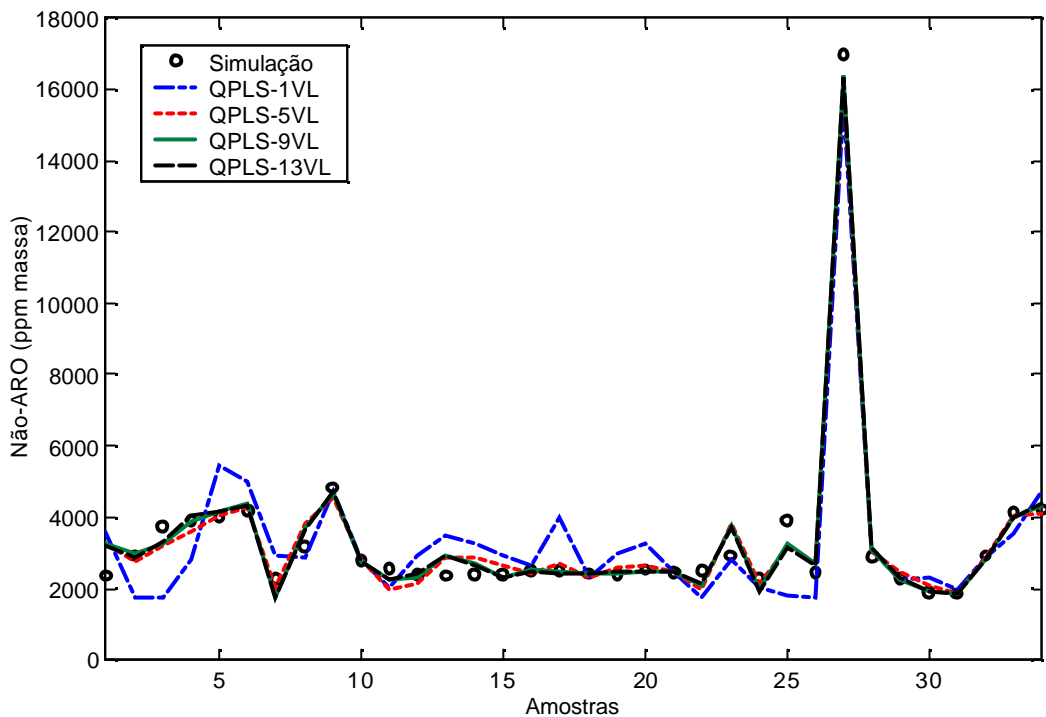


Figura 4.9: Efeito da adição de novas variáveis latentes para modelos de Não-ARO - caso LPLS.

Comparação entre modelos LPLS e QPLS

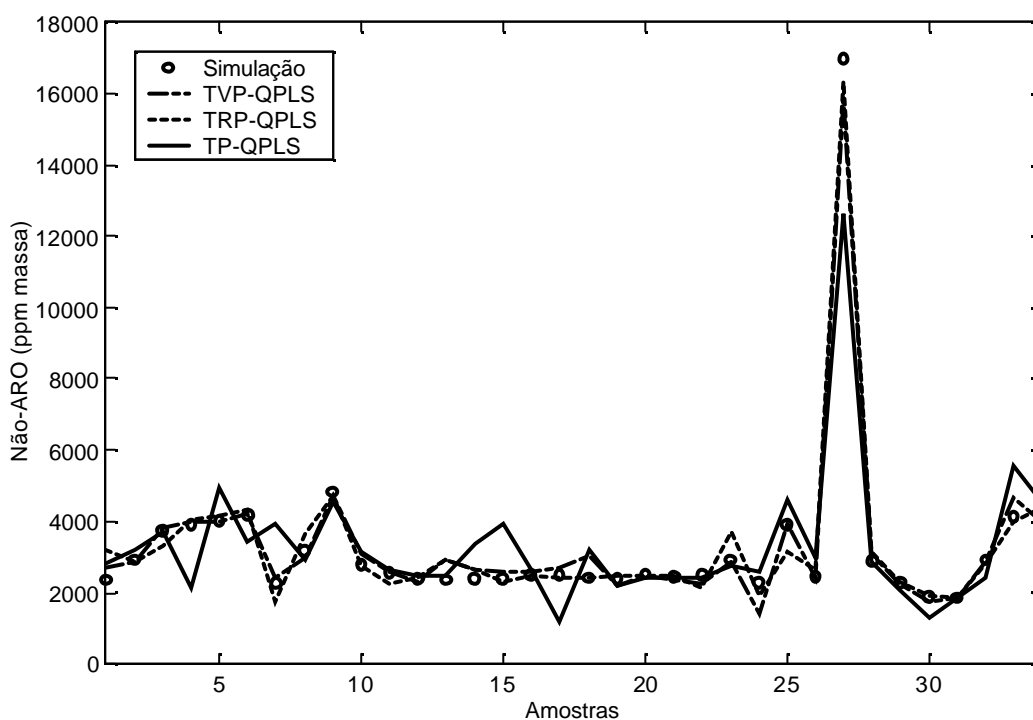
Neste item são discutidas as diferenças entre modelos para inferência de não-ARO construídos a partir de variáveis do tipo T, TP, TVP, TRP e ainda modelos submetidos a seleção de variáveis do método SRMP e da análise de sensibilidade mostrada no Capítulo 3. Será discutida também a inserção do logaritmo da pressão de topo da FT-1 ao invés do valor de pressão diretamente no modelo, pois é uma alternativa a qual pode melhorar a predição em inferências de impurezas como o não-ARO. Para modelos de tipo LPLS são utilizadas todas as variáveis latentes possíveis e para QPLS são utilizadas 9 VL.

Os primeiros modelos construídos foram a partir dos dados de entrada TP, TVP e TRP, conforme a Tabela 4.11.

A Tabela 4.11 mostra que a inclusão de vazões ou razões entre vazões é fundamental na modelagem para inferência de não-ARO, assim como na modelagem para inferência de tolueno. A Figura 4.10 mostra o comportamento dos modelos QPLS testados, onde é possível observar a diferença entre os modelos baseados somente em temperaturas e pressão e os restantes, que incluem também vazões e razões.

Tabela 4.11: Não-ARO - comparação entre modelos TPV, TPR e TP.

Modelo	Método	R ²	PRESS
TVP	LPLS	0,3227	4,21 10 ⁶
	QPLS	0,9825	1,08 10 ⁶
TRP	LPLS	0,3671	3,93 10 ⁶
	QPLS	0,9812	1,14 10 ⁶
TP	LPLS	0,1890	5,04 10 ⁶
	QPLS	0,8288	1,06 10 ⁶

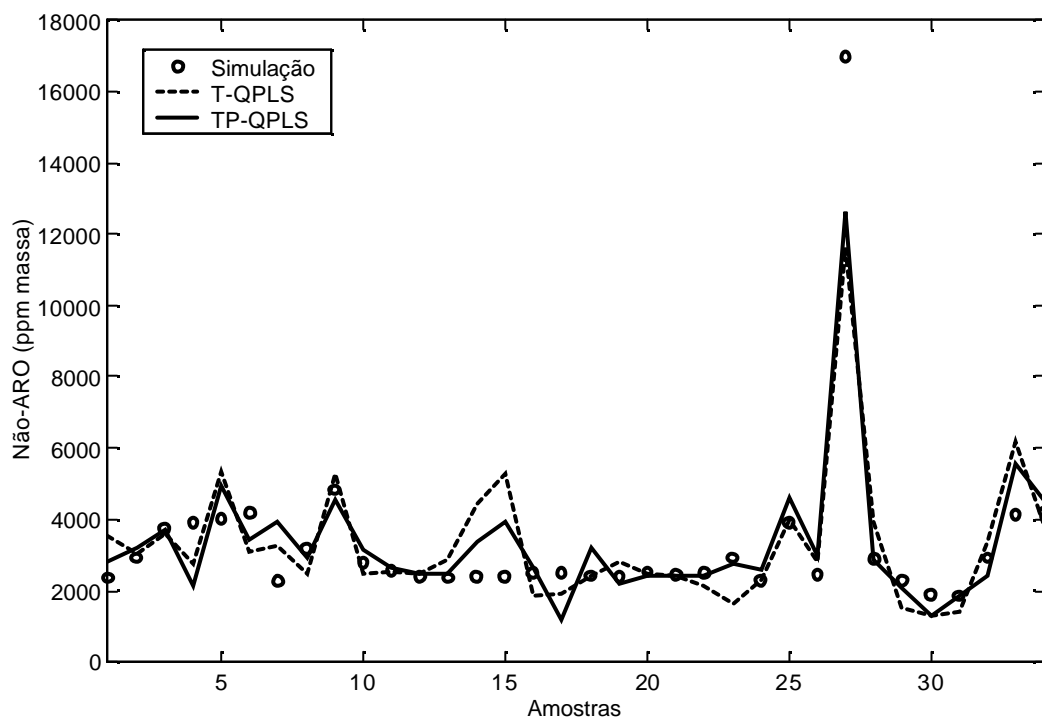
**Figura 4.10:** Não-ARO - comparação entre modelos TVP, TRP e TP – caso QPLS.

A mesma comparação foi feita com os modelos TP e T, a fim de estudar a necessidade de inserção da pressão nos modelos. A Tabela 4.12 mostra a diferença entre estes modelos.

Tabela 4.12: Não-ARO - comparação entre modelos TP e T.

Modelo	Método	R ²	PRESS
TP	LPLS	0,1890	5,04 10 ⁶
	QPLS	0,8288	1,06 10 ⁶
T	LPLS	0,1743	5,14 10 ⁶
	QPLS	0,7244	1,71 10 ⁶

Observa-se que a pressão deve ser considerada, pois eleva o R² e diminui a PRESS. Na Figura 4.11 é possível acompanhar a diferença existente entre os dois casos TP e T como dados de entrada da técnica QPLS.

**Figura 4.11:** Não-ARO - comparação entre modelos TP e T – caso QPLS.

Frente à necessidade de melhorar os modelos para inferência de não-ARO, testou-se a utilização do logaritmo da composição ao invés da composição diretamente. Esta transformação foi sugerida por RYSKAMP (1981), que concluiu que o uso de composições logarítmicas pode reduzir o efeito da não-linearidade presente em fracionadoras de alta pureza. SKOGESTAD e MORARI (1988) confirmaram este fato ao propor uma estrutura de controle linear para uma coluna de destilação, uma vez que a não-linearidade foi diminuída com o uso dos logaritmos das composições de fundo e de impurezas no topo. Além disso, inseriu-se como variável de entrada o logaritmo da pressão (logP) ao invés da pressão

diretamente (PANNOCCHIA e BRAMBILLA, 2003) assumindo uma dependência logarítmica entre as composições de topo e a pressão. Esta dependência é advinda da relação termodinâmica dada pela Lei de Antoine, que fornece a ligação entre as propriedades das fases líquido-vapor de uma mistura, conforme a Equação 4.8.

$$\ln P^{sat} = A - \frac{B}{T + C} \quad (4.8)$$

onde A, B e C são constantes termodinâmicas conhecidas para muitos compostos.

Uma vez que a inferência final será dada em logaritmo, realiza-se uma transformação para obter-se o resultado final em termos de composição. Esta transformação foi testada para os casos LPLS e QPLS, comparando-se com o modelo TP, mostrado anteriormente na Tabela 4.12, que não faz uso do logaritmo. Analisando a Tabela 4.13, percebe-se que a inserção do logaritmo não contribui praticamente para a melhora de ambos os modelos linear e não-linear. O modelo com logaritmo foi chamado de *T, logP*. As Figuras 4.12 e 4.13 mostram o resultado da aplicação destes modelos em dados de teste.

Tabela 4.13: Não-ARO – comparação entre os modelos T,logP e TP.

Modelo	Método	R ²	PRESS
TP	LPLS	0,1890	5,04 10 ⁶
	QPLS	0,8288	1,06 10 ⁶
T,logP	LPLS	0,1135	5,59 10 ⁶
	QPLS	0,9126	1,66 10 ⁶

Por fim, a técnica SRMP foi testada, mas não se obteve reprodutibilidade nas escolhas de variáveis do algoritmo, ou seja, a cada convergência do método obtinham-se variáveis diferentes, mostrando-se a não-aplicabilidade deste método neste caso.

Optou-se, então, por construir modelos a partir da análise de sensibilidade (conjunto de dados Sens.) mostrada no Capítulo 3. A Tabela 4.14 mostra quais são as variáveis mais sensíveis às perturbações na FT-1 e os modelos resultantes da utilização das mesmas.

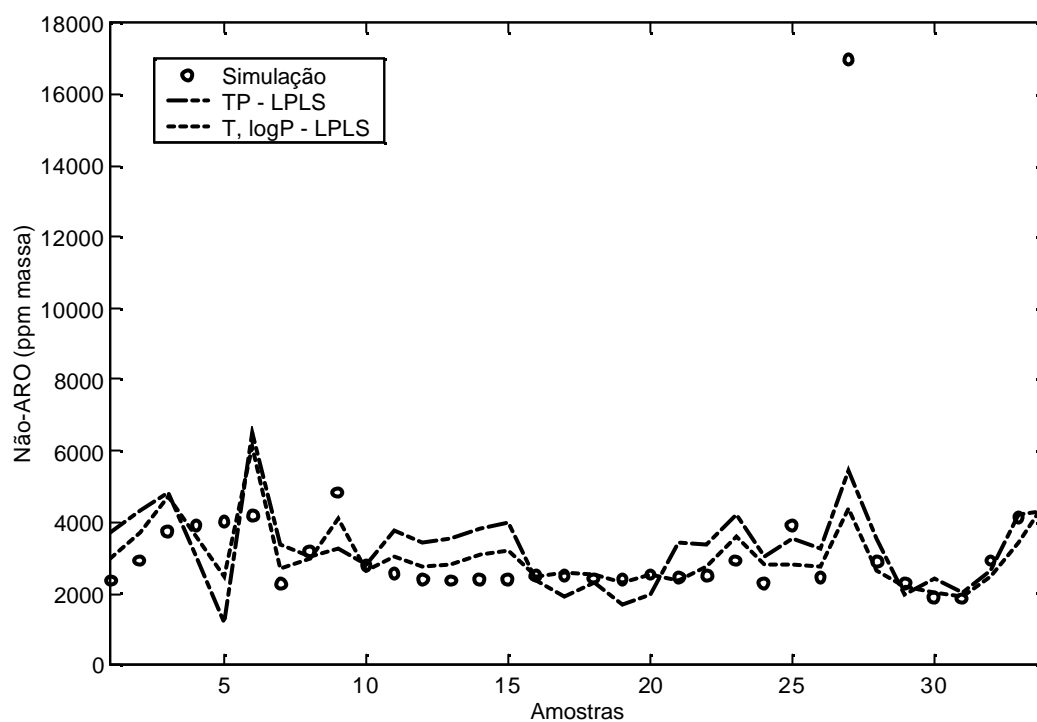


Figura 4.12: Não-ARO - comparação entre os modelos TP e T,logP – caso LPLS.

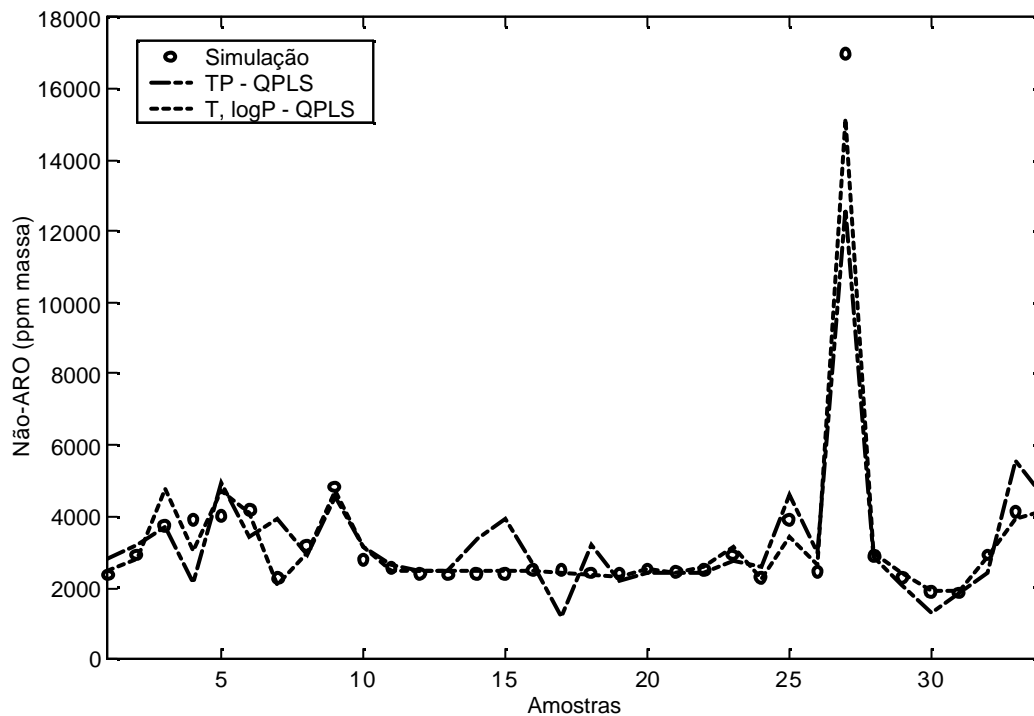


Figura 4.13: Não-ARO - comparação entre os modelos TP e T,logP – caso QPLS.

Tabela 4.14: Não-ARO – resultados da aplicação dos modelos Sens. LPLS e QPLS.

Técnica	Método	Variáveis selecionadas	R²	PRESS
Sens.	LPLS	#02, #15, #20, #21, #55, P topo, RD, RF, VF	0,1185	5,48 10 ⁶
	QPLS	#02, #15, #20, #21, #55, P topo, RD, RF, VF	0,6256	2,33 10 ⁶

Pela Tabela 4.14 conclui-se que a informação das variáveis mais sensíveis às perturbações são insuficientes no desenvolvimento de modelos para não-ARO, de modo que torna-se necessária a utilização de todo o perfil de temperatura para desenvolver modelos para tais componentes.

4.3 Desenvolvimento do analisador usando Aspen IQ[®]

O software AspenIQ[®] foi utilizado, pois permite uma implementação simples de um analisador virtual. Além disso, por este programa estar disponível na planta, pode ser o meio de implementação on-line do inferidor. O AspenIQ[®] possui vários módulos sendo um deles destinado ao desenvolvimento de modelos e os restantes destinados à configuração e implementação do analisador. Neste item, que se refere ao desenvolvimento do modelo, abordar-se-á apenas a utilização do primeiro módulo, chamado IQModel[®].

4.3.1 Técnicas Disponíveis para Seleção de Variáveis e Construção de Modelos

O AspenIQ[®] disponibiliza como ferramenta de seleção de variáveis o algoritmo genético, apresentado anteriormente na seção 4.1.2. O algoritmo genético implementado no AspenIQ[®] chega a uma solução ótima a partir das seguintes etapas:

- Inicialização de uma população randomicamente (dar aptidões aos indivíduos);
- Validação da aptidão de cada indivíduo através de uma função de custo;
- Criação de novos membros de uma população a partir do cruzamento de parentes, cópia e mutação;
- Exclusão de alguns membros e inserção de novos a partir de suas aptidões;
- Encerramento do algoritmo baseado em critérios de terminação.

O software permite a configuração dos parâmetros de entrada do algoritmo tais como: número máximo de iterações, técnicas para seleção de parentes, taxa em que ocorre a divisão de genes, múltiplo usado para aumento de população, etc. As taxas de cruzamento e mutação usadas neste caso foram 0,95 e 0,005, respectivamente, em relação à população total em cada geração.

Os métodos para construção de modelos disponíveis no IQmodel® são: PLS Linear, PLS não-linear/Fuzzy, NNPLS, NN Monotonic. Os modelos baseados em NN e NN Monotonic não foram utilizados, mas poderão ser desenvolvidos em trabalhos futuros.

O software disponibiliza também a possibilidade de incluir o comportamento dinâmico do sistema nos modelos. O módulo de construção de modelos dinâmicos disponibiliza ferramentas (AG ou correlação entre entradas e saídas) para o cálculo do tempo morto e da constante de tempo. Aplicações dos modelos dinâmicos podem ser vistas no Capítulo 5.

4.3.2 Geração de Modelos no Aspen IQ®

O mesmo conjunto de dados estacionários de simulação foi usado no Aspen IQ® para gerar modelos do tipo PLS e Fuzzy PLS. O modelo LPLS disponível no módulo de desenvolvimento de modelos (AspenIQmodel®), conceitualmente, é similar ao modelo linear utilizado na Seção 4.2, e portanto a diferença entre os modelos LPLS construídos no AspenIQ® e mostrados na Seção 4.2 será devida aos métodos de seleção e ao número de variáveis latentes utilizadas. Nos modelos construídos até então, escolheu-se o número de variáveis latentes, entretanto, no IQmodel®, o número ótimo de VL é calculado a partir de um mecanismo chamado *cross validation*, que a partir de um número máximo de VL especificado escolhe um número através de uma função que maximiza a média das variâncias obtidas a partir de um conjunto de dados de validação submetido ao modelo PLS. (ASPENTECH, 2003).

A segunda diferença é relativa aos métodos de seleção de variáveis. Na Seção 4.2 utilizou-se o método SRMP, além dos conjuntos T, TP, TVP e TRP. Pela necessidade comprovada de utilização das variáveis vazões ou razões entre vazões para a obtenção de modelos mais representativos, nesta seção foram abordados apenas modelos construídos com o conjunto TRP e pelo algoritmo de seleção de variáveis AG (por esta ser a técnica disponível no software).

Ainda, serão explorados, além dos modelos LPLS, modelos Fuzzy-PLS, que utilizam ao invés de uma relação quadrática na relação interna do PLS (caso QPLS), a lógica Fuzzy.

Para comparar com os modelos que não foram desenvolvidos no Aspen IQ® (apresentados na Seção 4.2) serão utilizadas as seguintes denominações:

LPLS: modelo linear desenvolvido por FACCHIN (2005)

LPLS-IQ: modelo linear disponível no Aspen IQ® versão 6.

QPLS: modelo não-linear desenvolvido por FACCHIN(2005)

Fuzzy-PLS-IQ: modelo não-linear

4.3.3.1 Modelos para inferência de tolueno

Similarmente aos modelos construídos na seção 4.2 para inferência de tolueno, nesta seção são apresentados os resultados referentes aos conjuntos de teste expressos através dos índices R^2 e PRESS descritos anteriormente.

Os primeiros modelos desenvolvidos utilizam o conjunto TRP da FT-1 como base, composto por todas as medições de temperatura, a pressão de topo e as razões RD, RF e VF. A Tabela 4.15 mostra a comparação destes modelos com os modelos desenvolvidos fora do Aspen IQ[®]. Uma vez que o Aspen IQ[®] calcula um número mínimo de VL, aplicaram-se os números obtidos nos outros métodos, para fins de comparação.

Tabela 4.15: TOL – comparação entre modelos TRP.

Modelo	Método	VL	R ²	PRESS
TRP	LPLS	9	0,9789	0,0853
	QPLS	5	0,9982	0,0076
TRP	LPLS-IQ	9	0,9789	0,0853
	Fuzzy-PLS-IQ	5	0,9754	0,1099

A Tabela 4.15 indica que o modelo quadrático se adapta melhor à inferência de tolueno do que o modelo Fuzzy-PLS. Os modelos lineares, por sua vez apresentaram uma diferença mínima em relação aos não-lineares (parâmetros R² e PRESS), mostrando que sua aplicação pode ser viável neste caso. Através destes dados é possível também avaliar a eficiência do método *cross-validation* do Aspen IQ[®] para determinação do número de VL. Neste caso, os valores determinados foram 9 e 5 VL respectivamente para LPLS e Fuzzy-PLS. O mesmo número de VL foi aplicado para o QPLS e observou-se que a utilização de 8 VL leva a um resultado melhor (Tabela 4.6). Dessa forma, conclui-se que o número de VL deve ser maximizado para gerar esses modelos.

Aplicando-se o método de seleção de variáveis AG (Algoritmos Genéticos) nos mesmos dados TRP, encontrou-se o mesmo resultado obtido sem a seleção, ou seja, com todos os dados de TRP. Isto ocorre porque ao efetuar a seleção do AG, o mesmo seleciona todas as variáveis para a construção do modelo, indicando que o melhor modelo para o caso da predição de tolueno deve mesmo, como visto na Seção 4.2, levar em conta todo o conjunto de dados TRP.

Entretanto, para estudar a diferença entre o AG e os métodos SRMP e Sens., fixou-se no AG um número máximo de 9 VL para induzi-lo a selecionar um número de variáveis baixo e assim realizar a comparação entre os métodos de seleção, uma vez que restringindo o número máximo de VL, o número de VL calculado pelo mecanismo *cross-validation* será menor e, conseqüentemente, o número de variáveis também. A comparação foi feita através do método de LPLS do Aspen IQ[®] e o número de VL considerado foi o número máximo possível para cada seleção de variáveis realizada.

Os resultados apresentados na Tabela 4.16 mostram que os métodos de seleção geram resultados parecidos, pois selecionam conjuntos de variáveis muito próximos. Desta forma, torna-se difícil escolher o melhor método de seleção de variáveis, mas é possível identificar que quando são comparados modelos de diferentes conjuntos de dados de entrada, observa-se

uma tendência a obterem-se melhores resultados com o conjunto que dispõe do maior número de variáveis.

Tabela 4.16: TOL – comparação entre os métodos AG, SRMP e Sens.

Sel. Var.	Método	Variáveis selecionadas	VL	R ²	PRESS
AG	LPLS-IQ	#02, #20, #21, #31, #55, RD, RF, VF e P topo	9	0,975	0,1463
SRMP	LPLS-IQ	#02, #55, P topo, VF	4	0,979	0,1341
Sens.	LPLS-IQ	#02, #15, #20, #21, #55, P topo, RD, RF, VF	4	0,979	0,1288

4.3.3.2 Modelos para inferência de não-ARO

Na seção 4.2, verificou-se que para inferência de não-ARO, similarmente ao que ocorre com TOL, a utilização de dados de vazão ou de razões entre vazões é necessária. Desta forma, os modelos desenvolvidos no Aspen IQ® utilizam o conjunto TRP da FT-1 como base, composto por todas as medições de temperatura, a pressão de topo e as razões RD, RF e VF. A Tabela 4.17 mostra a comparação destes modelos com os modelos desenvolvidos fora do Aspen IQ®.

Tabela 4.17: Não-ARO – comparação entre modelos TRP.

Modelo	Método	VL	R ²	PRESS
TRP	LPLS	1	0,036	5,99 10 ⁶
	QPLS	1	0,8784	7,56 10 ⁵
TRP	LPLS-IQ	1	0,038	5,99 10 ⁶
	Fuzzy-PLS-IQ	1	0,3019	8,51 10 ⁵

Para inferência de não-ARO, ao contrário do que ocorre para inferência de tolueno, o mecanismo de *cross-validation* não consegue determinar um número de VL maior que 1. Este resultado gera modelos com R² mais baixos que os gerados na seção 4.2, onde obteve-se R² de 0,367 e 0,981 para LPLS e QPLS, respectivamente (Tabela 4.11). No entanto, os resultados mostrados na Tabela 4.17 reforçam a mesma conclusão já obtida na Seção 4.2 de que para inferência de não-ARO, a diferença entre modelos lineares e não-lineares é considerável e, portanto, a aplicação de modelos não-lineares é indicada. Observa-se também que similarmente à inferência de tolueno, o modelo não-linear QPLS apresenta uma

capacidade preditiva maior que o Fuzzy-PLS. Esta diferença pode ser observada na Figura 4.14.

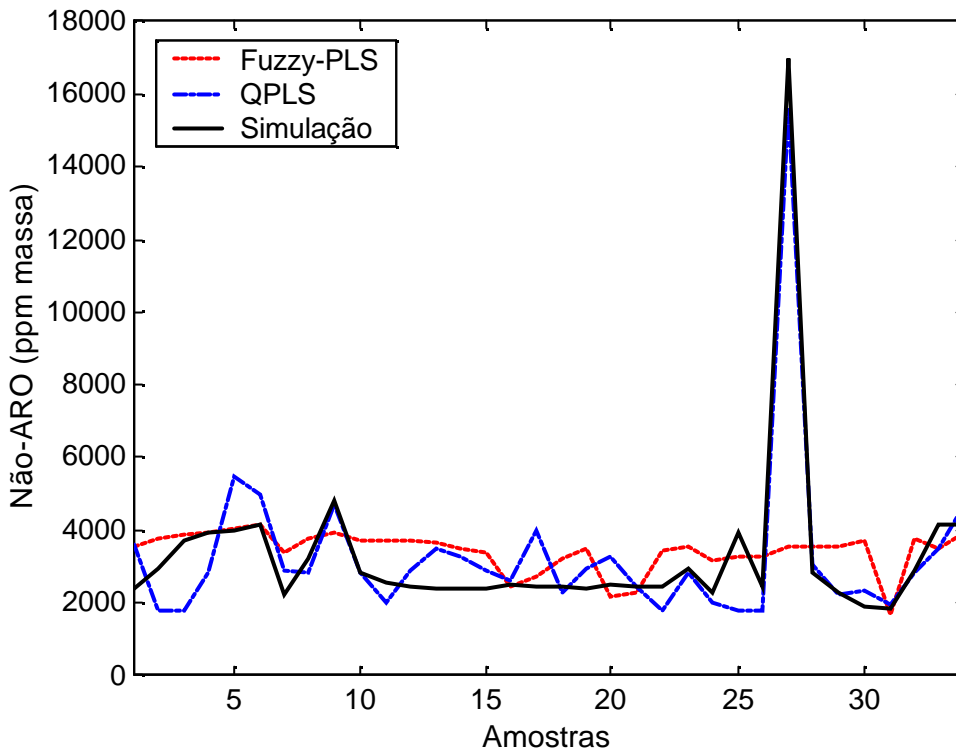


Figura 4.14: Comparação entre um modelo QPLS e Fuzzy-PLS com 1VL

No próximo Capítulo, trata-se da aplicação dos melhores modelos obtidos à dados de planta comparando-os com modelos gerados a partir de dados de planta. Esta aplicação será feita para os modelos construídos a partir do conjunto de dados TRP, uma vez que tanto para TOL quanto não-ARO estes foram os modelos lineares e não-lineares que apresentaram uma capacidade preditiva maior.

Capítulo 5

Implementação de Analisadores Virtuais na Indústria

No Capítulo 4, as principais técnicas existentes para o desenvolvimento de analisadores virtuais foram apresentadas e estudou-se quais dessas técnicas são mais apropriadas para aplicação nas colunas fracionadoras de tolueno FT-1 e FT-2. Com isso obtiveram-se vários modelos para inferência de tolueno e não-ARO com características e consequentemente, desempenhos variados frente à validação em dados de teste. No entanto, sendo estes modelos construídos a partir de dados de simulação e validados também a partir de um conjunto de dados de simulação, é fundamental que tais modelos sejam submetidos à validação em dados de planta para que se verifique a viabilidade de implementação. Quando se valida um modelo a um conjunto de dados diferente daquele utilizado para construí-lo, se verifica a aplicabilidade deste modelo a diferentes regiões de operação. Em se tratando de analisadores virtuais, como visto no capítulo 4, um bom modelo é fundamental para que as inferências realizadas sejam confiáveis.

Para facilitar a compreensão deste capítulo, a lista a seguir mostra a definição dos termos mais importantes usados no decorrer do capítulo:

- Modelos de simulação: as variáveis de entradas (pressões, temperaturas, composições, etc) que geram o modelo matemático são um conjunto de valores extraídos de simulações estacionárias, sendo que cada simulação é realizada com condições de operação distintas e portanto gerando valores estacionários de entrada diferentes.
- Validação a partir de dados de simulação: os modelos construídos (com dados de simulação ou de planta) são testados com dados de entrada que não são os mesmos usados na construção dos modelos, mas sim são pontos provenientes de outro conjunto de simulações estacionárias.

- Modelos construídos com dados de planta: as variáveis de entradas que geram o modelo matemático são um conjunto de valores extraídos de dados de planta.
- Validação a partir de dados de planta: os modelos construídos (com dados de simulação ou de planta) são testados com dados de entrada que não são os mesmos usados na construção dos modelos, mas sim são pontos provenientes de outro conjunto de dados de planta.
- Analisadores virtuais: independente de como foram validados, os modelos construídos a partir de dados de simulação ou de planta são usados para inferência de composição e portanto dão origem aos analisadores virtuais, que posteriormente podem ser incrementados com correções de dados de laboratório conforme explicado no capítulo 4.1.4.

A aplicação em dados de planta dos modelos estacionários que apresentaram menor PRESS e maior R^2 é mostrada neste capítulo, onde os mesmos modelos são comparados a outros desenvolvidos diretamente a partir de dados de planta. Modelos dinâmicos construídos a partir de dados de planta também são mostrados, com o fim de compará-los aos modelos estacionários.

5.1 Modelos para Inferência de Tolueno – FT-1

5.1.1 Validação de Modelos Estacionários de Simulação

Entre os modelos estacionários apresentados no Capítulo 4, destacaram-se em sua validação os descritos na Tabela 5.1.

A aplicação dos modelos estacionários em um conjunto de dados de planta resulta nas predições mostradas nas Figuras 5.1 e 5.2. Os eixos das ordenadas estão em escalas diferentes para visualizar se as predições acompanham a tendência dos valores de laboratório. Os valores de laboratório são resultantes de análises realizadas uma vez ao dia e as predições são calculadas de minuto em minuto, o que faz com que os valores das predições intermediárias (períodos onde não há análise) não possam ser comparados com dados laboratoriais. No entanto, nesses pontos intermediários, a tendências de aumento ou diminuição das predições podem ser avaliadas com os pontos de análises diários.

Tabela 5.1: Modelos estacionários de simulação.

Modelo	Tipo	VL	R^2	PRESS
TRP	LPLS	13	0,9800	0,0866
	QPLS	8	0,9991	0,0029

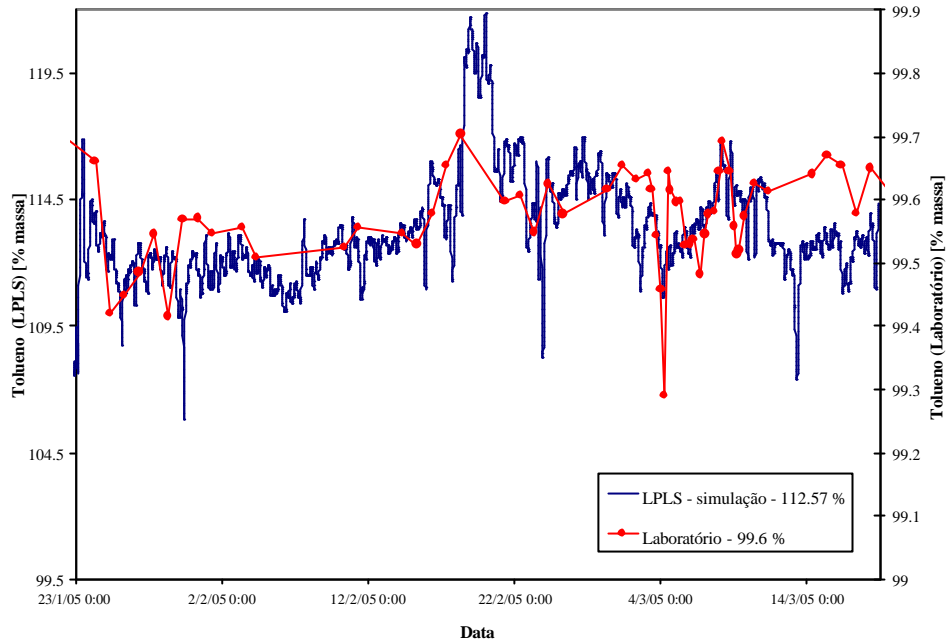


Figura 5.1: Aplicação do modelo LPLS em dados de planta com os valores médios das predições e dos dados laboratoriais.

Embora os modelos estacionários de simulação representem a tendência das análises de laboratório, conforme mostram as Figuras 5.1 e 5.2, observa-se um desvio comparando os ganhos destes modelos com os ganhos das análises laboratoriais. Pela Figura 5.1, por exemplo, observa-se que a média para o valor de tolueno predito pelo modelo de simulação é de 112,57 % massa, ou seja, 12,97 % a mais do que a média da análise laboratorial. No entanto, atribuição de um BIAS igual a esta diferença no valor final da predição geraria valores muito próximos ao real, pois as variações de um ponto a outro da predição estão consistentes com as variações de um ponto a outro dos dados laboratoriais. Já no caso QPLS (Figura 5.2) esta variação de um ponto a outro representa cerca de 20 % e mesmo com a atribuição de um BIAS para levar o modelo ao mesmo patamar do valores de planta, a cada variação do modelo as predições tenderiam para valores fora do esperado, pois a variação média que ocorre nos valores de planta é de 0,25 %.

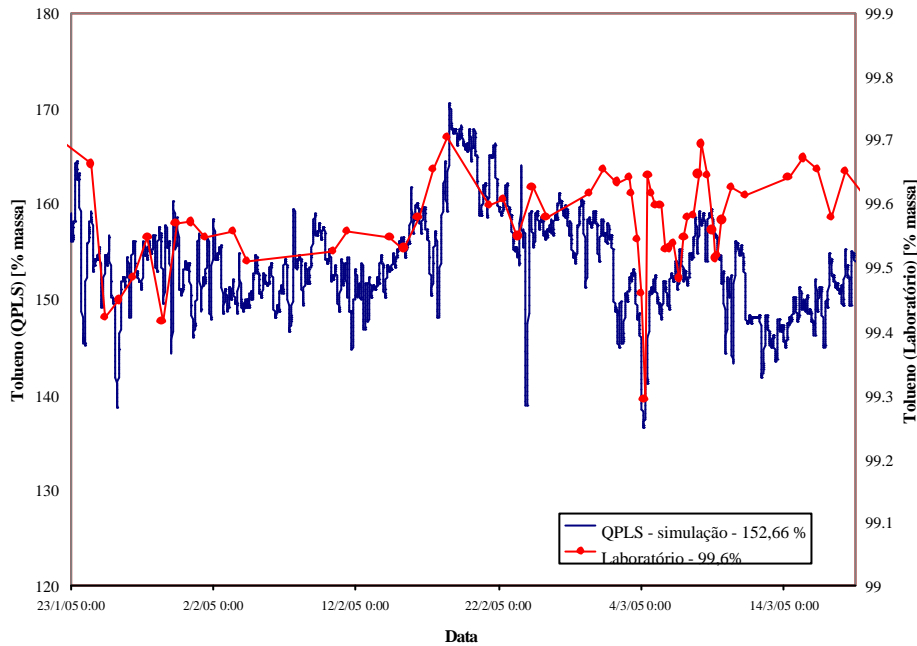


Figura 5.2: Aplicação do modelo QPLS em dados de planta com os valores médios das predições e dos dados reais de planta.

5.1.2 Validação de Modelos de Planta

Alternativamente aos modelos de simulação, realizou uma coleta de dados de planta para elaborar dois modelos de planta, sendo um estacionário e outro dinâmico. Dessa forma foi possível comparar modelos estacionários de planta e de simulação e ainda estudar uma outra alternativa que engloba o comportamento dinâmico do sistema.

A determinação tanto do modelo dinâmico quanto do estacionário foi realizada no Aspen IQ[®] e os modelos lineares apresentaram os melhores resultados. No caso do modelo dinâmico, o software calcula o tempo morto e a constante de tempo da variável de saída em relação a cada variável de entrada. A constante de tempo é definida como o tempo para variável dependente mudar seu valor até alcançar 63,2% do valor final em estado estacionário. A diferença básica entre os modelos estacionários e dinâmicos consiste no fato de que os modelos estacionários não consideram as variações no tempo e fornecem uma resposta instantânea da variável de saída frente a perturbações nas variáveis de entrada. Quanto ao desenvolvimento dos modelos, a principal diferença está na quantidade de dados necessários. Para capturar o comportamento dinâmico do sistema, é necessário um grande número de pontos assim como um grande número de amostras das variáveis de saída. Para desenvolver um modelo estacionário são necessários apenas cerca de 30-50 pontos desde que englobem diferentes regiões de operação (ASPENTECH, 2003). Na elaboração dos modelos em questão, utilizou-se como base o mesmo conjunto de dados referentes a um ano de operação. Desta forma, como são realizadas análises de laboratório uma vez ao dia no topo das colunas, gerou-se um conjunto de dados de aproximadamente 300 pontos para o caso estacionário, pois se tem 300 pontos de saída (composições de topo), sendo que para cada saída existe um número equivalente de dados de entrada. Já para o caso dinâmico, construiu-se um conjunto com 300 pontos de saída mais 6000 pontos de entrada, para que o modelo preveja a dinâmica existente entre cada ponto de

análise. Na Tabela 5.2, que mostra a validação dos modelos de planta estacionário e dinâmico, fica evidente que o modelo dinâmico apresentou um resultado inferior ao estacionário. Tais diferenças podem ser vistas na Figura 5.3, que mostra a comparação dos dois modelos (os dados de planta estão representados no eixo de ordenadas esquerdo, juntamente com a predição estacionária).

Tabela 5.2: Modelos estacionários e dinâmicos de planta.

Tipo	Variáveis	VL	R ²	PRESS
LPLS estacionário	#01,#02,#15,#20, #29,#31, #55, #59, #60, RD, RF, VF	7	0,551	0,0078
LPLS dinâmico	#01,#02,#15,#20, #29,#31, #55, #60, RD, RF, VF	2	0,086	13,32

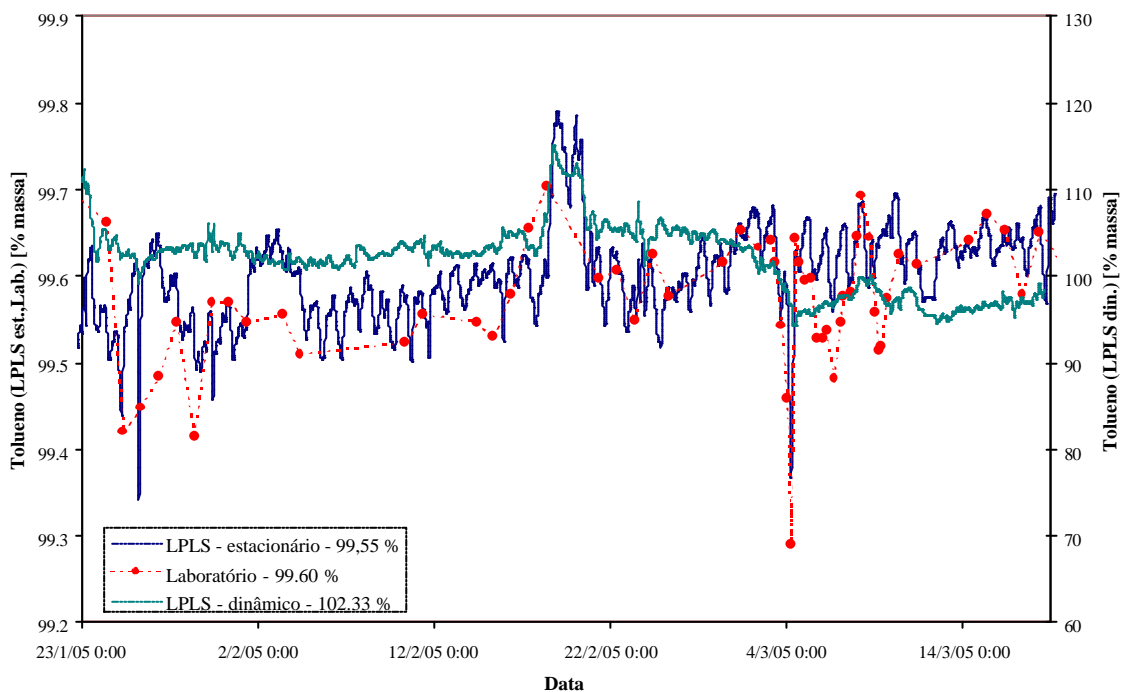


Figura 5.3: Aplicação dos modelos estacionário e dinâmico de planta em dados de planta.

A Figura 5.3 mostra que o modelo dinâmico acompanha suavemente as tendências do modelo, enquanto que o estacionário representa com um bom resultado os pontos laboratoriais, e principalmente detecta as perdas de especificação do tolueno. Verifica-se também que o ganho do modelo estacionário é compatível com a planta, diferentemente do modelo dinâmico (os eixos na Figura 5.3 estão em escalas diferentes). Desta forma, conclui-se que o melhor modelo construído para inferência de tolueno foi o modelo estacionário LPLS baseado em dados de planta. O modelo QPLS não foi mostrado pois apresentou um resultado

insatisfatório semelhante ao dinâmico mostrado na Figura 5.3. Os modelos de simulação embora não tenham representando os dados de planta com a mesma veracidade que o estacionário de planta, representaram a tendência das análises laboratoriais mostrando que o modelo LPLS pode ser utilizado sob alguns ajustes (inserção de BIAS, coleta de dados mais representativos, etc).

5.2 Modelos para Inferência de Não-ARO - FT-1

5.2.1 Validação de Modelos Estacionários de Simulação e de Planta

Como ocorrido para o caso do tolueno, os modelos de simulação que apresentaram os melhores resultados (conforme estudo no Capítulo 4) apresentaram ganhos diferentes dos valores de planta quando validados em dados de processo, chegando até a valores negativos de composição de não-ARO. Com isso, verificou-se que os modelos de simulação apresentam mais problemas quando tratam da inferência de compostos em baixa quantidade (ppm massa). Desta forma optou-se também pela construção de modelos baseados em dados de planta para o caso da inferência de não-ARO. O mesmo conjunto de dados usados no desenvolvimento de modelos para tolueno foi aplicado resultando no modelo estacionário mostrado na Tabela 5.3. Modelos dinâmicos não foram construídos visto que quando aplicados para o caso anterior (Seção 5.1) apresentaram baixo desempenho comparados aos estacionários. Na mesma tabela, para fins de comparação são mostrados também os índices obtidos na validação dos modelos de simulação. São mostrados apenas modelos LPLS, que foram os que apresentaram melhores resultados nas validações.

Tabela 5.3: Modelos de simulação e de planta para inferência de não-ARO.

Tipo	Variáveis	VL	R ²	PRESS
LPLS -IQ estacionário de simulação	#01,#02,#15,#20, #29,#31, #55, #59, #60, RD, RF, VF	13	0,3671	3,93 10 ⁶
LPLS -IQ estacionário de planta	#01,#02,#15,#20, #21, #29,#31, #55, #60, RD, RF, VF	3	0,550	5,65 10 ⁵

A Figura 5.4 mostra a aplicação do modelo estacionário de planta linear descrito na Tabela 5.3. Observa-se que os valores mais altos de laboratório não são avaliados pelo modelo e que ele só funciona adequadamente para a faixa de valores entre 2500 e 4500 ppm. Como as contaminações ocorrem acima de 5000 ppm, o modelo não satisfaz o objetivo principal de identificar perdas de especificação do produto. Uma análise detalhada dos dados de planta indicou que acima de 4500 ppm, não há mais variações significativas nas variáveis de entrada dos modelos, e dessa forma as contaminações não podem ser capturadas por estas variáveis, e sim apenas as tendências de queda e elevação de composição.

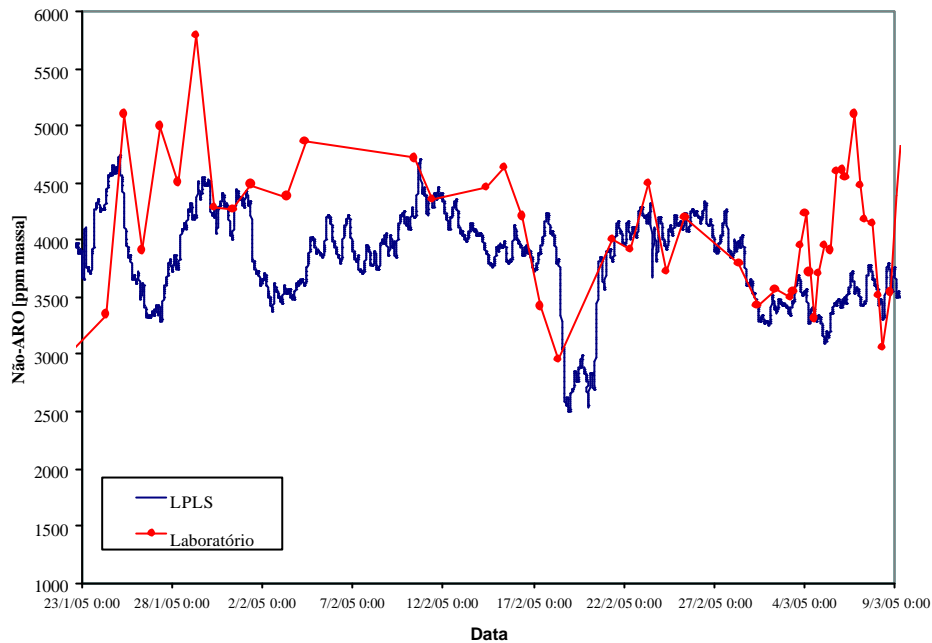


Figura 5.4: Modelo LPLS de planta para não-ARO.

A solução encontrada para estimar a composição de não-ARO foi manter o modelo desenvolvido para capturar a tendência e compor um novo modelo que estime o erro deste último a partir das variáveis da planta. Ou seja, o modelo mostrado na Figura 5.4 foi validado em um determinado conjunto de dados de planta equivalente a 7 meses de operação. O erro absoluto encontrado nas previsões gerou um novo conjunto de dados de onde foi desenvolvido um novo modelo que estima o erro através de variáveis de processo como temperaturas e relações entre vazões. Assim sendo, a estimativa final de não-ARO é a soma dos dois modelos desenvolvidos, ou seja, a predição acrescida do erro de predição. Quando aplicado em um novo conjunto de dados de teste, este novo modelo gerou um resultado satisfatório, que pode ser visualizado no intervalo mostrado na Figura 5.5. As variáveis utilizadas no modelo para predição do erro são as seguintes: RD, RF, VF, #01, #02, #15, #20, ##21, #29, #31, #55 e #60. A escolha das variáveis foi realizada segundo a metodologia mostrada no Capítulo 4, ou seja, testando os diferentes subconjuntos de dados (T, TP, TRP, TVP) e comparando-os através dos índices R^2 e PRESS.

O modelo que compreende a estimativa do erro possui a capacidade de alcançar os valores mais altos de contaminação, podendo até extrapolá-los. O mesmo comportamento é observado para valores mais baixos do componente. Entretanto, para segurança do processo, este modelo é mais conveniente que o desenvolvido sem o modelo do erro absoluto, pois indica as contaminações, mesmo que o valor das mesmas não seja exato.

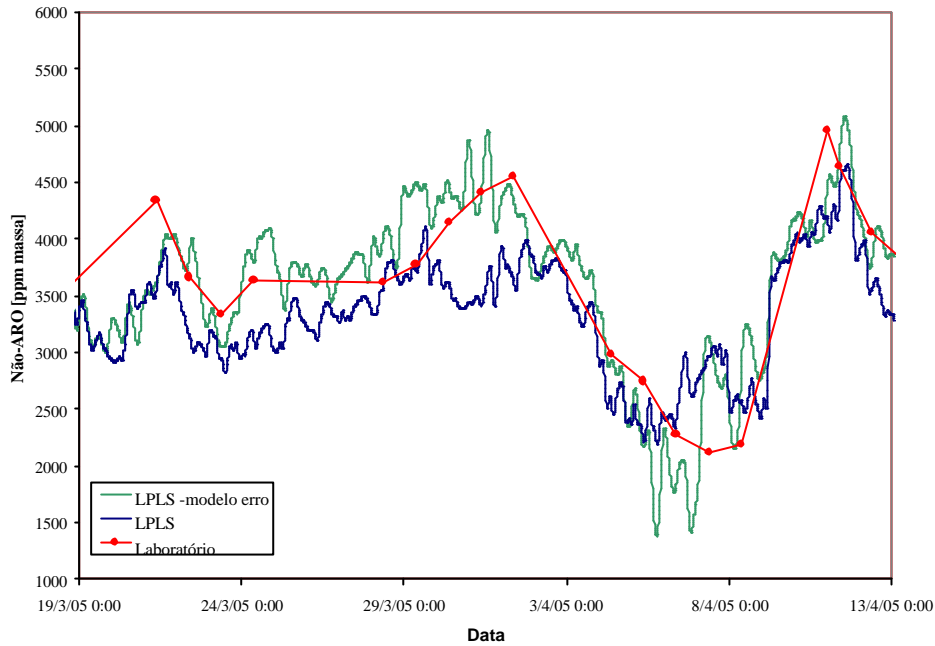


Figura 5.5: Modelo LPLS com estimativa do erro absoluto para não-ARO.

5.3 Modelos para a Coluna FT-2

Os modelos para inferência de tolueno e não-ARO na coluna FT-2 seguiram a metodologia aplicada para a FT-1. Primeiramente, testaram-se modelos de simulação que não representaram adequadamente o comportamento da planta. Em segundo lugar, realizou-se a coleta de dados de planta para construírem-se modelos com base nestes dados.

A Tabela 5.4 mostra os modelos que se adaptaram melhor aos dados de planta. No caso da inferência de não-ARO, utilizou-se a mesma alternativa usada na FT-1 de gerar um modelo para estimação do erro de predição e somá-lo a predição para chegar-se à quantidade final de não-ARO.

Tabela 5.4: Modelos aplicados para a coluna FT-2.

Inferência	Modelo	Variáveis	VL	R ²	PRESS
TOL	LPLS-IQ	#01, #22, #29, #34, #37, #58, #63, Ptopo, RD, RF, VF, DC	9	0,9871	0,3593
não-ARO	LPLS-IQ	#01, #22, #29, #34, #37, #58, #63, Ptopo, RD, RF, VF, DC	7	0,2637	5,18 10 ⁵

A aplicação dos modelos mostrados na Tabela 5.4 em dados de planta pode ser vista nas Figuras 5.6 e 5.7.

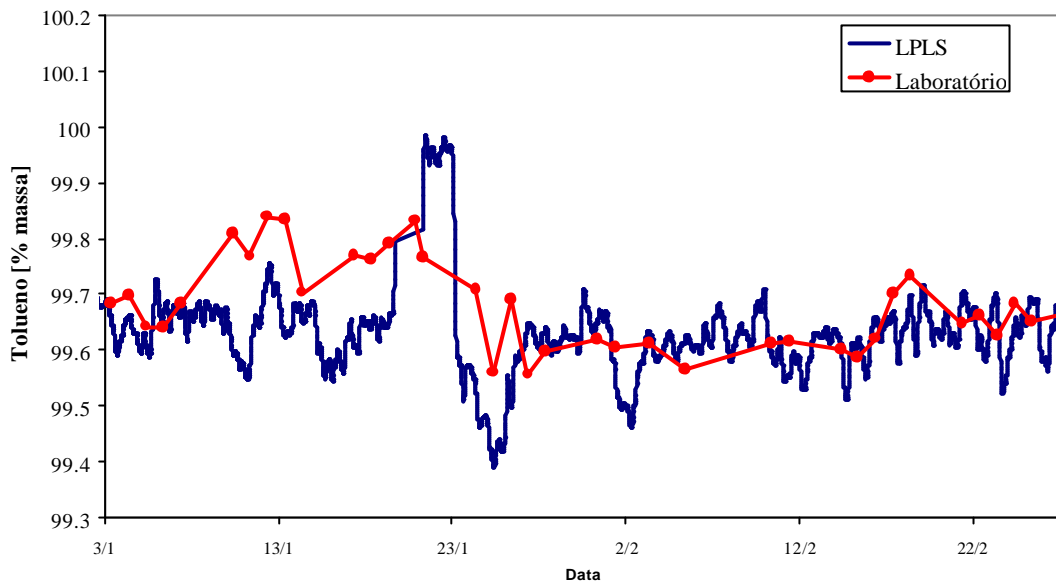


Figura 5.6: Modelo para inferência de TOL no topo da FT-2.

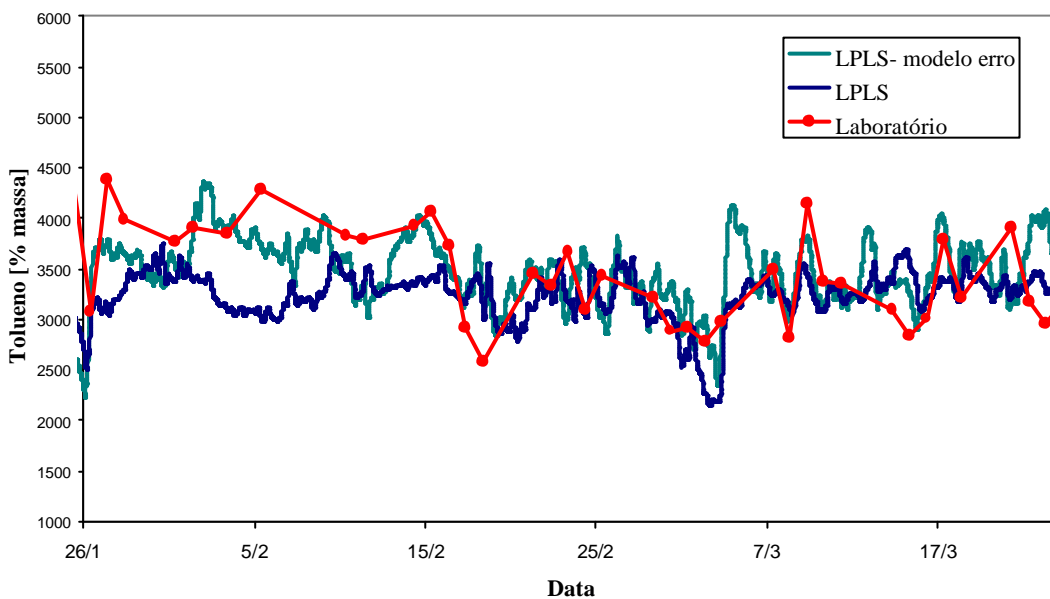


Figura 5.7: Modelo para inferência de não-ARO no topo da FT-2.

5.4 Implementação dos Modelos via Aspen IQ®

Os modelos finais obtidos para cada coluna foram implementados via Aspen IQ® para ficarem disponíveis *on-line* de tal forma que os operadores e engenheiros de operação tenham acesso às predições. Alternativamente a esta implementação foram construídos analisadores *off-line*, que possuem as equações descritas pelos modelos finais obtidos tornando possível a inferência manual das composições de topo das colunas através da inserção de valores das variáveis de entrada.

Modelos Finais para a coluna FT-1:

Os modelos finais para a coluna FT-1 com suas equações matemáticas são descritos nos itens a seguir. As temperaturas são representadas por TI#n (temperatura do estágio n) e são dadas em °C.

- **Inferência de tolueno:** para inferir a composição de tolueno no topo da FT-1 utilizou-se o modelo LPLS estacionário construído a partir de dados de planta apresentado na tabela 5.2 e na Figura 5.3 (seção 5.1.2). A equação que descreve este modelo linear é dada pela Equação tal abaixo:

$$\text{TOL2 [\%massa]} = 102.22 + (0.240718 * \text{TI\#60}) - (0.422471 * \text{TI\#55}) + (0.0384184 * \text{TI\#31}) + (0.0382865 * \text{TI\#29}) - (0.0277085 * \text{TI\#15}) - (0.0186289 * \text{TI\#20}) + (0.0982471 * \text{TI\#02}) + (0.0076574 * \text{TI\#01}) - (0.0902365 * \text{RD}) + (0.325521 * \text{RF}) + (1.299 * \text{VF}) - (0.0156101 * \text{TI\#59})$$

Sendo RD=refluxo/destilado, RF=refluxo/carga e VF=vapor/carga (todas as razões são razões entre vazões).

- **Inferência de Não-ARO:** para inferir a composição de Não-ARO no topo da FT-1 utilizou-se o modelo LPLS estacionário construído a partir de dados de planta apresentado na tabela 5.3 e na Figura 5.4 (seção 5.2.1). A equação que descreve este modelo linear é dada pela Equação tal abaixo:

$$\text{Não-ARO [ppm massa]} = 99729.1 - (394.884 * \text{TI\#60}) - (208.496 * \text{TI\#55}) - (22.6436 * \text{TI\#31}) - (13.8553 * \text{TI\#29}) - (41.4526 * \text{TI\#15}) + (4.22409 * \text{TI\#21}) + (57.1787 * \text{TI\#20}) - (116.493 * \text{TI\#02}) - (106.68 * \text{TI\#01}) - (512.164 * \text{RD}) - (549.574 * \text{RF}) - (2860.93 * \text{VF}) + (167.198 * \text{TI\#59})$$

Sendo RD=refluxo/destilado, RF=refluxo/carga e VF=vapor/carga (todas as razões são razões entre vazões).

Este modelo é corrigido pelo modelo LPLS estacionário construído a partir de dados de planta que prediz o erro do modelo de Não-ARO, apresentado na Figura 5.5 (seção 5.2.1) conforme a Equação tal abaixo:

$$\text{ERRO Não-ARO [ppm massa]} = -115176 - (376.648 * \text{TI\#60}) + (45.6663 * \text{TI\#55}) + (195.668 * \text{TI\#31}) + (542.404 * \text{TI\#29}) + (164.422 * \text{TI\#02}) + (173.9385 * \text{TI\#20}) + (101.591 * \text{TI\#01}) - (19.2172 * \text{TI\#59}) - (29.0116 * \text{Carga}) - (1559 * \text{Refluxo}) - (691.55 * \text{Destilado}) - (1307.5 * \text{Fundo}) + (6311.96 * \text{VA})$$

Sendo Carga, Refluxo, Destilado e Fundo vazões em tn/h e VA=vazão de vapor de alta pressão no refeedor da coluna em tn/h.

A predição de Não-ARO final é dada então pela soma das predições Não-ARO e ERRO Não-ARO conforme a Equação tal:

$$\text{Não-ARO final [ppm massa]} = \text{Não-ARO} + \text{ERRO Não-ARO}$$

Modelos finais para a coluna FT-2:

Os modelos finais para a coluna FT-2 com suas equações matemáticas são descritos abaixo:

- **Inferência de tolueno:** para inferir a composição de tolueno no topo da FT-2 utilizou-se o modelo LPLS estacionário construído a partir de dados de planta apresentado na tabela 5.4 e na Figura 5.6 (seção 5.3). A equação que descreve este modelo linear é dada pela Equação tal abaixo:

$$\text{TOL5 [\% massa]} = 87.022 + 0.33 + 1.27292 * \text{TI\#63} - 1.45289 * \text{TI\#58} + 0.293498 * \text{TI\#37} - 0.0987366 * \text{TI\#34} - 0.0696301 * \text{TI\#29} - 0.00197093 * \text{TI\#22} + 0.0979287 * \text{TI\#01} - 0.0337125 * \text{Destilado} - 0.096953 * \text{Fundo} - 0.0244032 * \text{Carga} + 0.398205 * \text{Refluxo}$$

Sendo Carga, Refluxo, Destilado e Fundo vazões em tn/h.

- **Inferência de Não-ARO:** para inferir a composição de Não-ARO no topo da FT-2 utilizou-se o modelo LPLS estacionário construído a partir de dados de planta apresentado na tabela 5.4 e na Figura 5.7 (seção 5.3). A equação que descreve este modelo linear é dada pela Equação tal abaixo:

$$\text{NARO1 [ppm massa]} = 43643.6 - (522.305 * \text{TI\#63}) + (103.954 * \text{TI\#58}) + (247.132 * \text{TI\#37}) + (106.656 * \text{TI\#34}) - (212.586 * \text{TI\#29}) + (18.7858 * \text{TI\#22}) - (69.7273 * \text{TI\#01}) - (334.694 * \text{RD}) + (552.167 * \text{RF}) - (4265.3 * \text{DF}) + (1085.7 * \text{DB})$$

Sendo RD=refluxo/destilado, RF=refluxo/carga, DF=destilado/carga e DB=destilado/fundo (todas as razões são razões entre vazões)

Este modelo é corrigido por um bias de 700 ppm.

$$\text{Não-ARO final [ppm massa]} = \text{Não-ARO1} + 700$$

5.4.1 Aplicação de Técnicas de Correção e Adaptação de Modelos

O software Aspen IQ® disponibiliza técnicas de correção de predições, entretanto não disponibiliza métodos de correção de modelos. Em outras palavras, existem técnicas para corrigir o valor final da predição a cada atualização das análises laboratoriais, mas não existem técnicas para realizar a correção das equações dos modelos. Desta forma, optou-se por realizar as predições *on-line* aplicando a técnica mais simples disponível, conhecida como correção de BIAS, e também sem fazer uso de nenhuma técnica de correção. Verificou-se após a implementação que a correção de BIAS corrige falhas na predição em alguns momentos, mas em outros impossibilita que o modelo alcance o desempenho desejado. O problema, que pode ser visualizado na Figura 5.8, consiste no fato de que quando uma determinada análise de laboratório se torna disponível, é realizada a correção do BIAS, mas se de alguma forma, neste momento, a predição ideal ainda não foi alcançada, o modelo será ajustado pelo BIAS, mas sofrerá um variação decorrente das mudanças das variáveis de entrada mais tarde, o que faz com que o modelo sofra duas modificações e leve os resultados para um patamar indesejado.

Optou-se dessa forma por implementar os modelos sem a correção de BIAS e acompanhar suas performances ao longo de sua aplicação.

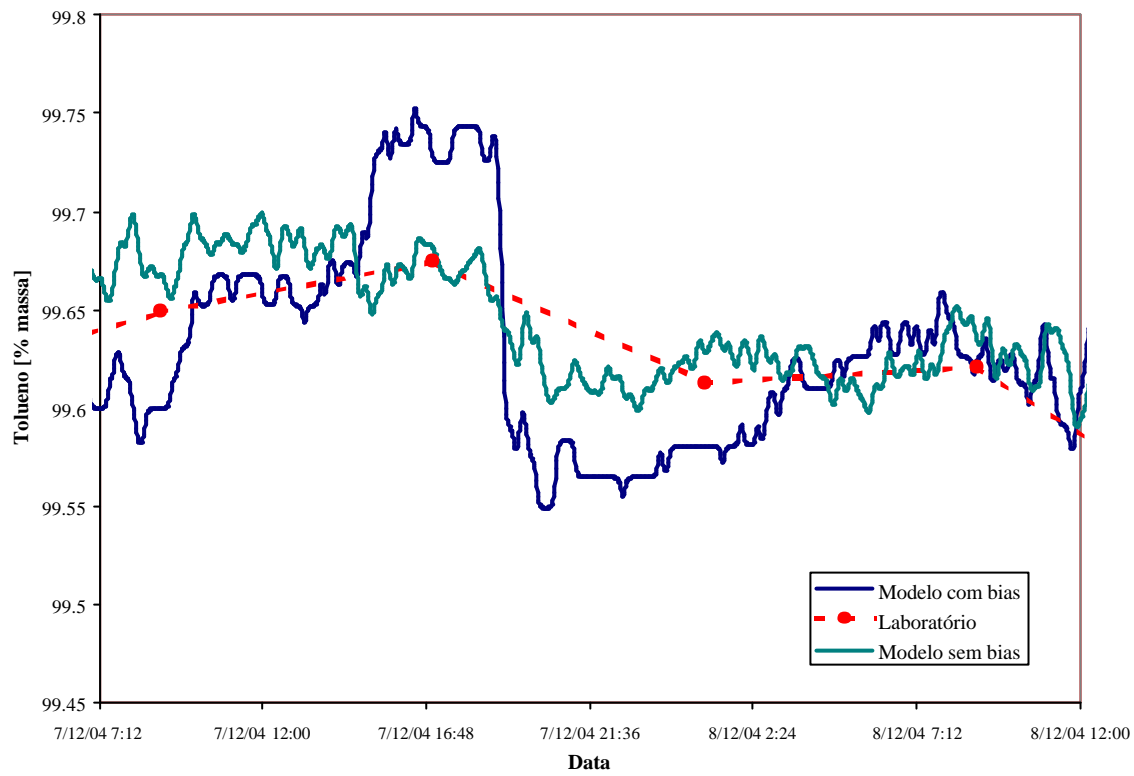


Figura 5.8: Aplicação do modelo linear para inferência de tolueno – influência da correção de BIAS.

5.5 Inferência *Off-Line*

Os analisadores virtuais das colunas FT-1 e FT-2 foram disponibilizados na forma off-line para que os operadores possam realizar estudos sobre as duas colunas de forma a otimizar suas operações.

O analisador off-line é uma interface simples que permite a visualização das previsões quando for desejado. A interface possui duas alternativas de uso:

- 1) Visualizar as previsões a partir de dados atuais de planta: o operador escolhe a alternativa que busca automaticamente os dados de processo e realiza o cálculo das previsões, mostrando a indicação na tela;
- 2) Visualizar as previsões realizadas com dados de planta atuais e dados inseridos pelo operador: esta opção admite o estudo das colunas, pois permite que sejam inseridos como entradas dados manuais de temperatura e vazões e dessa forma o modelo retorne previsões feitas com estas estimativas. As entradas podem ser todas manuais ou combinações entre entradas manuais e dados de planta atuais. No entanto, cabe salientar que este recurso necessita de cuidado, pois se for alterada uma variável de operação que tem influência

sobre as demais entradas, deve-se atentar para o fato de que os modelos não levam em conta a influência de umas variáveis sobre as outras, e sim estimam as composições de tolueno e não-ARO através dos dados de entrada. A Figura 5.9 mostra a interface construída para aplicação na coluna FT-2.

ANALISADOR VIRTUAL - 23T05 - OFF LINE

Entradas

23T1346 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23T1351 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1352 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23T1310 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1349 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23FIC32 (kg/h)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1355 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23FIC33 (kg/h)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1350 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23FIC34 (kg/h)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1353 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	23FIC35 (kg/h)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>
23T1354 (°C)	<input type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>			

Comandos

Saídas

Tolueno (% massa)	<input type="checkbox"/>	RD	<input type="checkbox"/>
Não-ARO (ppm massa)	<input type="checkbox"/>	RC	<input type="checkbox"/>
		VC	<input type="checkbox"/>

desenvolvido por:

GIMSCOP - Grupo de Integração, Modelagem, Simulação, Controle e Otimização de Processos da UFRGS

COPEL

GIMSCOP

Figura 5.9: Analisador virtual *off-line* da FT-2.

Capítulo 6

Conclusão

6.1 Considerações Finais

A utilização de analisadores virtuais em indústrias químicas vem sendo estudada e implementada ao longo dos últimos anos e dentre as aplicações na área de controle de processos pode ser considerada uma tecnologia recente. Em decorrência disso, existe um grande espaço para estudos nesta área de forma a aprimorar as técnicas já existentes e consolidar metodologias para diferentes processos.

O estudo realizado nas colunas de tolueno teve englobou a possibilidade de utilização de simulações estacionárias e dinâmicas na geração de modelos, a otimização da unidade (redução de refluxo e redução de consumo de vapor), a construção de modelos lineares e não-lineares, a utilização de diversas técnicas de seleção de variáveis e ainda a utilização de técnicas de correção das predições.

Além disso, estudou-se a construção de modelos para composições de topo com enfoque na determinação da pureza do produto final e na concentração de impurezas, o que possibilitou diferenciar o tratamento dado ao desenvolvimento de inferências para compostos de alta e de baixa concentração.

De uma maneira geral, as principais contribuições e conclusões do trabalho foram:

- Uso de simulações: o emprego de simulações foi utilizado inicialmente para geração de dados para construção de modelos lineares e não-lineares, no entanto elas foram importantes também para o estudo do processo bem como sua otimização, pois serviram como base para elaboração de testes de planta. Em tais testes comprovou-se a possibilidade das colunas operarem com vazões de refluxo menores e vazões de vapor na alimentação dos refeedores menores, mudanças estas que foram conduzidas na planta.

Baseado nos resultados apresentados no capítulo 3, podemos concluir que ao contrário do que era esperado inicialmente, os modelos dinâmicos desenvolvidos foram de pouca utilidade para a geração das inferências. Os modelos dinâmicos também apresentaram erros significativos, quando foram utilizados para prever valores estacionários, os quais não coincidiram com os estacionários através das simulações estacionárias. A Figura 6.1 mostra qualitativamente o que pôde ser observado durante a execução deste trabalho.

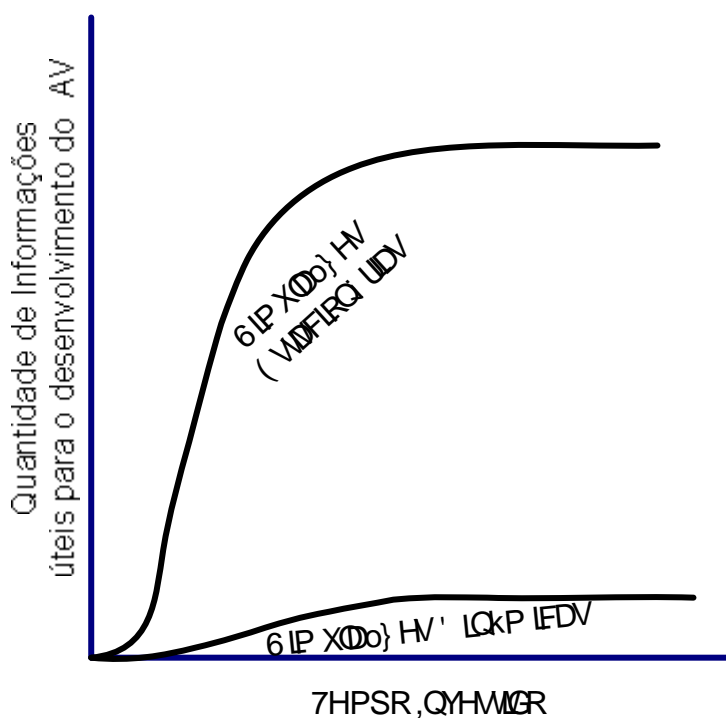


Figura 6.1: Gráfico esquemático do ganho de informação observado na realização deste trabalho baseado nos estudos realizados com simulações estacionárias (Aspen Plus) e com simulações dinâmicas (Aspen Dynamics).

- Uso de técnicas lineares e não-lineares para construção de modelos: foram testados os métodos de construção de modelos LPLS, QPLS e Fuzzy-PLS em dados de simulação e de planta. Verificou-se que em dados de validação os modelos não-lineares apresentaram melhores resultados em comparação aos modelos lineares, no entanto, no emprego em dados de planta os mesmos apresentaram ganhos muito altos, o que favoreceu os modelos lineares os quais foram implementados na indústria ao final do trabalho. Mas mesmo assim os modelos não lineares continuam sendo uma boa alternativa, particularmente os modelos QPLS demonstraram-se bastante promissores, devendo ser futuramente mais intensamente estudados.
- Uso de técnicas de seleção de variáveis: constatou-se que para o caso das colunas de tolueno, as variáveis que representam com maior correlação o comportamento das composições de topo são as temperaturas dos estágios, as vazões mássicas das colunas (carga, topo, fundo, refluxo, vazão de vapor), as razões entre vazões mássicas e as pressões de topo. Logo, o desenvolvimento dos modelos foi baseado nestas variáveis,

sendo que alguns métodos de seleção de variáveis foram testados. Atingiram-se bons resultados com as técnicas SRMP e AG; no entanto, observou-se que é possível construir modelos apenas com base em análises de sensibilidade e que para este caso específico, o emprego de todo o perfil disponível de temperatura e das razões RD (razão refluxo-destilado), RF (razão refluxo-carga) e VF (razão vapor-carga) gera os modelos com maior representatividade. Particularmente, baseado nos estudos realizados neste trabalho, recomenda-se, sempre que possível, utilizar as razões entre as vazões em lugar das vazões por si só, uma vez que as razões permitem uma maior extrapolação dos resultados obtidos e definem melhor os pontos de operação.

- Diferenças entre os modelos para tolueno e não-ARO: constataram-se diferenças na elaboração de modelos para compostos presentes no topo das colunas em baixas e altas quantidades. Para o caso dos modelos para inferência de não-ARO (presentes em ppm massa), a aplicação de dois modelos conjugados foi necessária para realizar as predições, enquanto que para o componente tolueno (% massa) bons modelos podem ser obtidos diretamente. A proposição da utilização da modelagem em duas etapas constituiu-se em uma inovação apresentada neste trabalho, sendo merecedora de estudos futuros visando o seu aprimoramento.
- Também foi estudado o efeito da composição logarítmica para melhor representar a composição de não-Aro. Os resultados não foram significativamente diferentes dos obtidos através da utilização direta da composição. Entretanto, os resultados apresentados neste trabalho não permitem que se tirem conclusões definitivas. Desta forma, sugere-se que esta alternativa não seja descartada quando se trabalha com a estimação de impurezas.
- Observou-se também que o desenvolvimento de analisadores virtuais possuem algumas restrições, tais como:
 - A necessidade de um conjunto de dados representativo da operação da unidade para a elaboração do analisador, em um sistema que não dispõe de analisadores em linha, requer o aumento do número de análises laboratoriais em um determinado período, caso as análises sejam espaçadas demais. Além disso, a escassez de dados pode também levar a realização de testes na planta, para percorrer disfrontes regiões de operação. Tanto a realização de análises extras, quanto à realização de testes encarecem o desenvolvimento dos analisadores;
 - Os instrumentos de medição utilizados no cálculo das variáveis primárias devem estar sempre confiáveis, ou seja, problemas de medição comprometem o resultado das predições;
 - Os modelos podem se tornar defasados com relação a planta devido as mudanças que podem ocorrer na operação e dessa forma devem ser revistos periodicamente.

6.2 Sugestões para Trabalhos Futuros

Como citado anteriormente, o estudo acerca das aplicações em analisadores virtuais possui um grande potencial de desenvolvimento tanto pela grande diversidade de processos em que eles podem ser aplicados quanto pela sua recente exploração.

No estudo das colunas de tolueno, optou-se pela aplicação de técnicas de seleção de variáveis e de construção de modelos que segundo os casos estudados, apresentaram melhores desempenhos, entretanto existe uma grande variedade de técnicas que ainda poderiam ser utilizadas.

Dessa forma, sugere-se que em trabalhos futuros, na etapa de seleção de variáveis, alternativamente aos métodos SRMP e AG, sejam testados os algoritmos mais recentes Enxame de Partículas (1995) e Colônia de Formigas (1997), que vêm apresentando excelentes resultados em suas aplicações em otimização heurística quando comparados a métodos como AG e Recozimento Simulado. Além disso, estão em desenvolvimento (FACCHIN, 2005) métodos de seleção de conjunto de treino e validação para aplicação em quaisquer técnicas de seleção de variáveis. Em geral, os algoritmos de seleção de variáveis escolhem aleatoriamente os conjuntos de treino e de teste dentre os dados de entrada fornecidos para realizar a escolha de variáveis. Estabelecendo um critério para selecionar os conjuntos mais representativos, serão obtidos modelos com maior reprodutibilidade e representatividade.

Na etapa de construção de modelos, sugere-se a inclusão de modelos conjugados que envolvam redes neurais com PLS, redes neurais com lógica Fuzzy entre outros.

Além disso, a inserção de um analisador em linha ou o aumento da periodicidade de análises de laboratório temporariamente auxiliaria na fase de coleta de dados para construção de modelos com um maior número de pontos representativos das saídas (composições de topo), possibilitando assim a construção de modelos dinâmicos e de modelos estacionários mais representativos.

Por fim, a inclusão de alternativas de correção e adaptação de modelos como Filtro de Kalman permitiria a atualização das equações geradoras da predição, e solucionaria os problemas gerados em função da correção de BIAS e da obsolescência do modelo com o passar do tempo.

Simbologia e Nomenclatura

AG	Algoritmo genérico
AR	Água de refrigeração
BE	Método de seleção de variáveis: <i>Backward elimination</i>
BENZ	Benzeno
BIAS	Diferença entre a predição do modelo e o valor do laboratório
BTPLS	Método de construção de modelos: <i>Box Tidwell Least Squares Regression</i>
C ₄ -C ₁₀	Hidrocarbonetos com cadeia carbônica variando de 4 a 10 elementos
C ₈ ARO	Compostos {m – p – o} –xileno e etil-benzeno
C ₉ ARO	Composto aromático de 9 carbonos
CM	Condensado de média pressão
dT	Diferencial de Temperatura
E	Vetor residual da decomposição das entradas no PLS
E _M	Eficiência de Murphree
E _T	Eficiência Total
E _v	Eficiência de vaporização
F	Vetor residual da decomposição das saídas no PLS
FB	Fracionadora de benzeno
FIC	Controlador e indicador de vazão
FT-1	Fracionadora de tolueno 1
FT-2	Fracionadora de tolueno 2
FS	Método de seleção de variáveis: <i>Forward selection</i>
G	Taxa de gás escoando no estágio <i>n</i>
HC	Hidrocarbonetos
L	Taxa de líquido escoando no estágio <i>n</i>
Lab.	Análise laboratorial
LIC	Controlador e indicador de nível
logP	Logaritmo da pressão de topo das colunas de destilação
LPLS	<i>Linear partial least squares</i>
LPLS	Método de construção de modelos do Aspen IQ: <i>Linear partial least squares</i> ⁰
MLR	Método de construção de modelos: <i>Multivariate least regression</i>
Não-ARO	Compostos naftênicos e parafínicos de C ₆ a C ₁₀
N	Número de amostras do conjunto de teste
N _{ideal}	Número de estágios ideal
NLPLS	Modelo PLS não-linear

NN	Método de construção de modelos: <i>Neural network</i>
NN Monotonic	Método de construção de modelos do Aspen IQ ^O : <i>Neural network Monotonic</i>
NNPLS	Método de construção de modelos: <i>Neural network / Partial least squares</i>
N _{real}	Número de estágios real
NRTL	Modelo termodinâmico <i>Non Random two-liquid</i>
p _h	<i>Loading vector</i> (entradas PLS)
P	Pressão
PCA	Tratamento estatístico: <i>Principal component analysis</i>
PCL	Principal Components Loadings
PCR	Método de construção de modelos <i>Principal component regression</i>
PI	Indicador de pressão
PLS	Método de construção de modelos: <i>Partial least squares</i>
ppm	Partes por milhão
PR	Modelo termodinâmico <i>Peng Robinson</i>
PRESS	Erro preditivo quadrático
P _{topo}	Pressão de topo das colunas de destilação
P _v	Pressão de vapor da mistura em ebulição
q _h	<i>Loading vector</i> (saídas PLS)
Q	Taxa de calor
QPLS	Método de construção de modelos: <i>Quadratic Partial Least Squares</i>
R	Vazão de refluxo
R ²	R-Quadrado : quadrado da correlação entre variáveis
RD	Razão entre as vazões de refluxo e destilado
RF	Razão entre as vazões de refluxo e carga
RWS	Modelo termodinâmico <i>Soave-Redlich-Kwong</i>
Sens.	Conjunto de dados baseado em análises de sensibilidade
sim.	Simulação
SR	<i>Método de seleção de variáveis: Stepwise regression</i>
SRMP	<i>Método de seleção de variáveis: Stepwise regression based on model predictions</i>
TDIC	Controlador e indicador de diferencial de temperatura
t _h	<i>Scores vector</i> (entradas PLS)
T	Temperatura ou conjunto de dados de perfil de temperatura
T _e	Temperatura da mistura em ebulição
TI	Indicador de temperatura
TP	Conjunto de dados de perfil de temperatura e pressão de topo
TRP	Conjunto de dados de perfil de temperatura, razões entre vazões e pressão de topo
TVP	Conjunto de dados de perfil de temperatura, vazões e pressão de topo
u _h	<i>Scores vector</i> (saídas PLS)
UNIF.	Modelo termodinâmico UNIFAC
UNIQ.	Modelo termodinâmico UNIQUAC
VA	Vapor de alta pressão (42 kgf cm ⁻²)
VF	Razão entre as vazões de vapor no refeedor e carga
VL	Variáveis latentes do método PLS
VM	Vapor de média pressão (15 kgf cm ⁻²)
X	Conjunto de dados de entrada
x _i	Fração molar do componente <i>i</i> no líquido
x _k	Composição do componente <i>i</i> numa mistura de <i>k</i> componentes
Y	Conjunto de dados de saída
y	Dado de saída
y _i	Medição da saída da amostra <i>i</i>

y_f	Predição do modelos com correção de BIAS
\hat{y}	Predição do modelo sem correção de BIAS
\bar{y}	Média entre medições da saída
y_i	Medida da saída para a amostra i
\hat{y}_i	Predição do modelo para a amostra i
y_n	Concentração de vapor no estágio n
y_{n-1}	Concentração de vapor no estágio $n-1$
y_n^*	Concentração de vapor em equilíbrio no estágio n
α_{ij}	Volatilidade relativa de componente i em relação ao componente j
θ	Tempo morto
τ	Tempo de assentamento

Referências Bibliográficas

ABDUL-WAHAB, Sabah A.; BAKHEIT, Charles S.; AL-ALAWI, Saleh M. Principal component and multiple regression analysis in modeling of ground-level ozone and factors affecting its concentrations. **Environmental Modeling & Software**, v. 20, p.1263-1271, 2005.

ASPENTECH. **Inferential property development and control with Aspen IQ™ and DMCplus™**. Training Manual. v1 e v.2, 2003.

BAFFI, Giuseppe; MARTIN, Elaine; MORRIS, Julian. Non-linear projection to latent structures revisited (the neural network PLS algorithm). **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, p. 1293-1307, 1999.

BANG, Yoon Ho; YOO, Chang Kyoo; LEE, In-Beum. Nonlinear PLS modeling with fuzzy inference system. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, v. 64, p. 137-155, 2003.

BISHOP, Gary; WELCH, Greg. An introduction to the Kalman filter. **Department of Computer Science: University of North Carolina at Chapel Hill**, 2000.

BOX, Gep; TIDWELL, Pw. Transformation of the independent variables. **Technometrics**, v.4, p. 531-550, 1962.

DAYAL, Bhumpinder S.; Mac GREGOR, John F. Multi-output process identification. **Journal of Process Control**, v. 7, p. 269-282, 1997.

FACCHIN, Samuel. **Técnicas de Análise Multivariável aplicadas ao Desenvolvimento de Analisadores Virtuais**. Porto Alegre: UFRGS, 2005. Dissertação (mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.

FINKLER, Tiago Fiorenzano. **Desenvolvimento de uma ferramenta para obtenção de modelos empíricos**. Porto Alegre: UFRGS, 2003. Dissertação (mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

GELADI, Paul; KOWALSKI, Bruce R. Partial least-squares regression: a tutorial. **Analytica Chimica Acta**, v. 185, p. 1-17, 1986.

GLEN, W. G.; DUN III, W. J.; SCOTT, D. R. Principal component analysis and partial least squares. **Tetrahedron Computer Methodology**, v. 2, p. 349-376, 1989.

GUPTA, Indra; GUPTA, H. O.; SINGH, Vijander. ANN based estimator for distillation-inferential control. **Chemical Engineering and Processing**, v. 44, cap.7, p. 785-795, Julho. 2005.

LEARDI, Riccardo; GONZÁLEZ, Amparo Lupiáñez. Genetic algorithm applied to feature selection in PLS regression: how and when to use them. **Chemometrics and Intelligent Systems**, v. 41, p. 195-207, 1998.

LI, Baibing; MARTIN, Elaine B.; MORRIS, A. Julian. **Computers and Chemical Engineering**, v. 25, p. 1219-1233, 2001.

LOCKETT, M. J. **Distillation Tray Fundamentals**. p. 118-127, 1986.

LUO, R. F.; SHAO, H.H.; ZHANG, Z.J. Fuzzy-neural-net-based inferential control for a high purity distillation column. **Control Eng. Practice**, v. 3, n. 1, p. 31-40, 1995.

LUYBEN, William L. Practical Distillation Control. P. 1-191, 1992.

MEJDELL, Thor; SKOGESTAD, Sigurd. Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures. **Industry Engineering Chemical Research**, v. 30, p. 2555-2564, 1991.

MEJDELL, Thor; SKOGESTAD, Sigurd. Output estimation using multiple secondary measurements: high-purity distillation. **Aiche**, v. 39, n. 10, p. 1641-1653, 1993.

MONTGOMERY, Douglas C.; PECK, Elizabeth A. **Introduction to Linear Regression Analysis**. p. 270-278, 1982.

MORINAGA, Koji et al. Quality inferential control of an industrial high density polyethylene process. **Journal of Process Control**, v. 9, p. 51-59, 1999.

PANNOCHIA, Gabriele; BRAMBILLA, Alessandro. Consistency of property estimators in multicomponent distillation control. **Industry Engineering Chemical Research**, v. 42, p. 4452-4460, 2003.

QIM, S. J.; Mc AVOY, T.J. Nonlinear PLS modeling using neural networks. **Computers and Chemical Engineering**, v. 16, p. 379-391, 1992.

SKOGESTAD, Sigurd; MORARI, Manfred. LV-Control of a high purity distillation column. **Chemical Engineering Science**, v. 43, p. 33-48, 1988.

SUDJIANTO, Agus; WASSERMAN, Gary S.; SUDARBO, Hinurimawan. Genetic subset regression. **Computers and Industrial Engineering**, v. 30, n. 4, p. 839-849, 1996.

SUTTER, Jon M.; KALIVAS, John H. Comparison of forward selection, backward elimination, and generalized simulated annealing for variable selection. **Microchemical Journal**, v. 47, p. 60-66, 1993.

TADÉ, Moses O.; TIAN, Yu-Chu. Conversion inference for ETBE reactive distillation. **Separation and Purification Technology**, v. 19, p. 85-91, 2000.

XU, Lu; ZHANG, Wen-Jun. Comparison of different methods for variable selection. **Analytica Chimica Acta**, v. 446, p. 477-483, 2001.

WOLD, Svante; KETTANEH-WOLD, Nouna; SKAGERBERG, Bert. Nonlinear PLS Modeling. **Chemometrics Intelligence Laboratory Systems**, v. 7, p. 53-65, 1989.

APÊNDICE A

Conjunto de dados de simulação estacionários da FT-1

Os conjuntos de dados de entrada e saída usados na construção dos modelos estacionários de simulação da coluna FT-1 para predição de TOL e não-ARO discutidos no Capítulo 4 são mostrados nas Tabelas A, B deste apêndice. O conjunto de dados de validação desses modelos é mostrado no Apêndice C (Tabelas C e D), onde são mostrados os dados de planta. O conjunto de validação é composto por dados de planta e é o mesmo utilizado para validar os modelos estacionários de planta.

Tanto os dados da Tabela A quanto da Tabela B são utilizados para gerar a equação matemática que relaciona as entradas e as saídas do modelo, sendo que as entradas são: as temperaturas, a pressão de topo, as razões entre vazões e as vazões (Tabelas A e B), e as saídas são as composições de topo de TOL e não-ARO (Tabela B).

Tabela A: Conjunto de dados de entrada para geração de modelos estacionários de simulação – temperaturas, pressão de topo e razões entre vazões.

	#60	#55	#31	#29	#15	#21	#20	#02	#01	P topo*	RD	RF	VF
Pontos	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(kg/cm ²)	-	-	-
1	112.67	118.69	133.04	134.31	135.80	139.07	140.50	160.01	160.58	0.058	1.93	1.06	0.30
2	113.03	121.76	134.01	134.84	136.27	139.23	140.50	160.12	160.69	0.058	1.62	0.91	0.30
3	113.42	123.76	134.16	134.92	136.34	139.25	140.50	160.24	160.82	0.058	1.45	0.84	0.30
4	113.45	123.89	134.23	135.03	137.01	141.75	143.60	160.28	160.85	0.058	1.44	0.84	0.30
5	113.48	124.02	134.29	135.14	137.62	143.54	145.60	160.30	160.87	0.058	1.44	0.84	0.30
6	113.55	124.35	134.45	135.41	139.03	146.55	148.60	160.33	160.89	0.058	1.44	0.84	0.30
7	112.67	118.66	132.70	134.08	135.33	137.61	138.60	159.97	160.55	0.058	1.99	1.10	0.30
8	113.22	122.89	134.06	134.84	136.01	137.85	138.60	160.10	160.70	0.058	1.53	0.87	0.30
9	114.04	125.63	134.35	134.98	136.14	137.90	138.60	160.29	160.92	0.058	1.20	0.72	0.30
10	113.03	121.78	133.98	134.79	135.97	137.84	138.60	160.04	160.64	0.058	1.61	0.91	0.30
11	112.81	120.13	133.89	134.78	136.22	139.21	140.50	160.05	160.62	0.058	1.72	0.96	0.27
12	112.71	119.07	133.71	134.68	136.13	139.18	140.50	160.02	160.59	0.058	1.79	0.99	0.28

13	112.68	118.76	133.38	134.50	135.97	139.13	140.50	160.01	160.58	0.058	1.86	1.03	0.29
14	112.67	118.66	132.67	134.09	135.61	139.01	140.50	160.01	160.58	0.058	2.01	1.11	0.31
15	112.67	118.64	132.32	133.88	135.41	138.94	140.50	160.01	160.58	0.058	2.09	1.15	0.32
16	112.30	117.45	130.75	132.00	133.81	138.58	140.50	156.55	157.08	0.030	1.93	1.06	0.30
17	112.98	118.13	131.37	132.59	134.27	138.68	140.50	157.12	157.65	0.030	1.93	1.06	0.30
18	114.31	119.47	132.58	133.77	135.22	138.90	140.50	158.24	158.77	0.090	1.93	1.06	0.30
19	115.28	120.45	133.48	134.63	135.94	139.09	140.50	159.06	159.59	0.120	1.93	1.06	0.30
20	111.30	116.44	129.84	131.12	133.14	138.47	140.50	155.71	156.24	0.000	1.93	1.06	0.30
21	113.31	118.69	129.80	132.04	133.72	138.38	140.50	160.03	160.63	0.060	3.03	1.67	0.47
22	113.27	119.11	133.04	133.95	135.47	138.99	140.50	158.69	159.24	0.057	1.77	0.98	0.28
23	113.54	121.41	133.26	134.07	135.57	139.02	140.50	158.78	159.33	0.057	1.63	0.92	0.26
24	113.22	118.52	131.95	133.16	134.75	138.76	140.50	158.67	159.22	0.057	1.87	1.06	0.30
25	113.17	118.49	132.57	133.84	135.38	138.96	140.50	158.67	159.22	0.057	1.97	1.06	0.30
26	113.21	118.51	132.40	133.64	135.19	138.91	140.50	158.67	159.22	0.057	1.94	1.06	0.30
27	112.69	118.77	132.96	134.29	135.89	139.15	140.50	159.90	160.50	0.058	1.95	1.08	0.30
28	113.17	121.53	134.22	135.01	136.26	138.23	139.00	158.87	159.42	0.010	1.76	0.90	0.30
29	112.69	118.35	132.52	133.55	135.42	140.09	142.00	159.55	160.12	0.040	1.74	1.01	0.30
30	112.67	119.69	134.12	135.61	136.84	139.05	140.00	160.86	161.39	0.090	2.15	1.10	0.30
31	112.65	118.35	131.90	133.80	134.79	135.76	136.00	146.71	149.81	0.050	2.45	1.05	0.30
32	112.83	119.53	133.81	134.78	137.01	142.14	144.00	159.35	159.90	0.030	1.81	0.97	0.30
33	112.89	119.53	132.61	133.45	135.30	139.71	141.50	158.85	159.37	0.020	1.67	0.95	0.30
34	113.22	123.28	134.41	135.22	136.83	140.47	142.00	160.53	161.10	0.070	1.53	0.88	0.30

* Pressão manométrica

Tabela B: Conjunto de dados de entrada para geração de modelos estacionários de simulação – vazões e composições de topo de TOL e não-ARO.

	Destilado	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
Pontos	(ton/h)	(ton/h)	(ton/h)	(ton/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2365
2	7.56	5.85	13.41	12.25	97.52	2922
3	7.75	5.65	13.41	11.25	95.11	3746
4	7.77	5.64	13.41	11.25	94.92	3908
5	7.78	5.62	13.41	11.25	94.74	4001
6	7.82	5.59	13.41	11.25	94.29	4179
7	7.39	6.02	13.41	14.70	99.76	2247
8	7.65	5.75	13.41	11.70	96.30	3193
9	8.05	5.35	13.41	9.70	91.49	4818
10	7.56	5.85	13.41	12.20	97.50	2792
11	8.28	6.61	14.89	14.25	98.85	2551
12	7.95	6.44	14.39	14.25	99.52	2396
13	7.66	6.23	13.89	14.25	99.69	2365
14	7.11	5.78	12.89	14.25	99.75	2373
15	6.83	5.56	12.39	14.25	99.75	2383
16	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2484
17	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2466
18	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2421
19	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2377
20	7.39	6.01	13.41	14.25	99.73	2507
21	4.70	3.82	8.52	14.25	99.75	2455
22	8.03	6.48	14.52	14.25	99.39	2480
23	8.73	6.77	15.50	14.25	97.67	2927

24	7.63	5.78	13.41	14.25	99.73	2291
25	7.22	6.19	13.41	14.25	99.58	3900
26	7.34	6.07	13.41	14.25	99.72	2447
27	7.43	5.97	13.41	14.50	98.28	16965
28	6.81	6.60	13.41	12.00	96.64	2874
29	7.75	5.66	13.41	13.50	99.59	2279
30	6.84	6.57	13.41	14.70	99.81	1875
31	5.76	7.64	13.41	14.10	99.79	1861
32	7.20	6.21	13.41	13.00	98.63	2897
33	7.64	5.77	13.41	12.75	98.26	4145
34	7.73	5.68	13.41	11.80	96.20	4189

APÊNDICE B

Conjunto de dados de simulação estacionários da FT-2

Os conjuntos de dados de entrada e saída usados na construção dos modelos estacionários de simulação da coluna FT-2 para predição de TOL e não-ARO discutidos no Capítulo 4 são mostrados nas Tabelas A, B deste apêndice. O conjunto de dados de validação desses modelos é mostrado no Apêndice D (Tabelas C e D), onde são mostrados os dados de planta. O conjunto de validação é composto por dados de planta e é o mesmo utilizado para validar os modelos estacionários de planta.

Tanto os dados da Tabela A quanto da Tabela B são utilizados para gerar a equação matemática que relaciona as entradas e as saídas do modelo, sendo que as entradas são: as temperaturas, a pressão de topo, as razões entre vazões e as vazões (Tabelas A e B), e as saídas são as composições de topo de TOL e não-ARO (Tabela B).

Tabela A: Conjunto de dados de entrada para geração de modelos estacionários de simulação – temperaturas, pressão de topo e razões entre vazões.

Pontos	#63 (°C)	#58 (°C)	#37 (°C)	#34 (°C)	#29 (°C)	#22 (°C)	#02 (°C)	#01 (°C)	#63 (°C)	P topo* (kg/cm2)	RD -	RF -
1	113.57	118.38	122.98	125.15	131.55	142.00	157.82	158.39	113.57	0.127	2.135	1.114
2	113.57	118.39	123.19	125.55	132.05	145.00	157.84	158.40	113.57	0.127	2.077	1.085
3	113.57	118.40	124.46	127.28	132.76	145.00	157.87	158.42	113.57	0.127	1.797	0.938
4	113.68	119.67	130.10	131.14	133.55	145.00	157.93	158.47	113.68	0.127	1.507	0.792
5	114.58	124.87	131.13	131.92	133.70	145.00	158.22	158.77	114.58	0.127	1.164	0.646
6	114.58	124.87	131.13	131.92	133.70	145.00	158.22	158.77	114.58	0.127	1.535	0.804
7	113.68	119.70	130.29	131.33	133.89	147.00	157.94	158.47	113.68	0.127	1.529	0.804
8	113.58	118.40	123.74	126.59	133.84	150.00	157.86	158.42	113.58	0.127	2.077	1.085
9	114.58	124.87	131.13	131.92	133.70	145.00	158.22	158.77	114.58	0.127	2.078	1.085
10	113.57	118.37	123.01	125.21	131.39	138.00	157.81	158.38	113.57	0.127	2.079	1.085
11	113.57	118.37	122.47	124.05	130.55	142.00	157.76	158.36	113.57	0.127	2.695	1.484
12	113.57	118.38	122.60	124.39	130.94	142.00	157.79	158.37	113.57	0.127	2.449	1.349

13	113.57	118.38	122.81	124.83	131.32	142.00	157.81	158.38	113.57	0.127	2.245	1.237
14	113.57	118.38	123.55	126.09	132.05	142.00	157.84	158.40	113.57	0.127	1.924	1.060
15	113.57	118.39	124.25	127.00	132.39	142.00	157.86	158.41	113.57	0.127	1.795	0.989
16	112.74	117.52	122.29	124.58	130.96	142.00	157.06	157.63	112.74	0.1	2.078	1.145
17	113.38	118.16	122.88	125.16	131.49	142.00	157.63	158.20	113.38	0.12	2.078	1.145
18	114.64	119.42	124.06	126.31	132.55	142.00	158.75	159.31	114.64	0.16	2.078	1.145
19	115.86	120.65	125.21	127.45	133.61	142.00	159.84	160.41	115.86	0.2	2.078	1.145
20	109.41	114.19	119.24	121.62	128.33	142.00	154.15	154.73	109.41	1E-07	2.077	1.145
21	113.57	118.38	123.09	125.36	131.68	142.00	157.83	158.39	113.57	0.127	2.078	1.145
22	113.57	118.38	123.09	125.36	131.68	142.00	157.83	158.39	113.57	0.127	2.078	1.145
23	113.57	118.39	124.25	127.00	132.39	142.00	157.86	158.41	113.57	0.127	1.795	0.989
24	113.57	118.38	123.09	125.28	131.32	142.00	157.82	158.39	113.57	0.127	2.014	1.145
25	113.52	118.37	123.07	125.40	131.94	142.00	157.83	158.39	113.52	0.127	2.128	1.145
26	113.57	118.38	123.09	125.38	131.76	142.00	157.83	158.39	113.57	0.127	2.093	1.145
27	113.59	118.61	123.61	125.78	132.11	142.00	157.52	158.16	113.59	0.127	2.184	1.204
28	113.57	117.51	122.24	124.82	132.42	144.00	157.21	157.70	113.57	0.1	2.352	1.157
29	113.57	117.19	122.33	124.70	130.40	141.50	156.78	157.35	113.57	0.09	1.873	1.080
30	113.57	118.79	123.99	126.77	133.42	143.00	159.02	159.58	113.57	0.14	1.965	1.003
31	113.56	120.65	124.93	127.03	133.93	145.00	159.84	160.40	113.56	0.2	2.356	1.250
32	113.56	119.73	125.89	128.83	134.05	138.00	159.06	159.60	113.56	0.17	1.803	0.957
33	113.55	115.84	120.40	122.38	128.64	136.00	155.78	156.35	113.55	0.05	2.187	1.227
34	113.55	114.49	120.07	122.72	128.71	140.00	154.44	155.00	113.55	0.01	1.914	1.065

* Pressão manométrica

Tabela B: Conjunto de dados de entrada para geração de modelos estacionários de simulação – vazões e composições de topo de TOL e não-ARO.

	Destilado	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
Pontos	(ton/h)	(ton/h)	(ton/h)	(ton/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	3.57	2.91	6.84	7.62	99.84	1573
2	3.57	2.91	6.84	7.42	99.81	1885
3	3.57	2.91	6.84	6.42	99.79	2032
4	3.60	2.89	6.84	5.42	99.15	2120
5	3.80	2.68	6.84	4.42	93.90	2081
6	3.58	2.90	6.84	5.50	93.90	2081
7	3.60	2.88	6.84	5.50	99.13	2240
8	3.57	2.91	6.84	7.42	99.77	2336
9	3.57	2.91	6.84	7.42	93.90	2081
10	3.57	2.91	6.84	7.42	99.87	1270
11	2.75	2.25	5.00	7.42	99.89	1145
12	3.03	2.47	5.50	7.42	99.87	1327
13	3.31	2.69	6.00	7.42	99.85	1489
14	3.86	3.14	7.00	7.42	99.83	1722
15	4.13	3.37	7.50	7.42	99.82	1800
16	3.57	2.91	6.48	7.42	99.83	1695
17	3.57	2.91	6.48	7.42	99.84	1637
18	3.57	2.91	6.48	7.42	99.85	1522
19	3.57	2.91	6.48	7.42	99.86	1413
20	3.57	2.91	6.48	7.42	99.80	2000
21	3.57	2.91	6.48	7.42	99.84	1616
22	3.57	2.91	6.48	7.42	99.84	1616
23	4.13	3.37	7.50	7.42	99.82	1800

24	3.68	2.80	6.48	7.42	99.84	1644
25	3.49	2.99	6.48	7.42	99.70	2968
26	3.54	2.94	6.48	7.42	99.84	1606
27	3.57	2.91	6.48	7.80	98.92	10813
28	3.19	3.29	6.48	7.50	99.87	1319
29	3.74	2.74	6.48	7.00	99.82	1762
30	3.31	3.17	6.48	6.50	99.84	1583
31	3.44	3.04	6.48	8.10	99.84	1394
32	3.44	3.04	6.48	6.20	99.84	1402
33	3.64	2.85	6.48	7.95	99.79	2049
34	3.60	2.88	6.48	6.90	99.72	2759

APÊNDICE C

Conjunto de dados de planta estacionários da FT-1

Os conjuntos de dados de entrada e saída de usados para construção e validação dos modelos de planta para predição de TOL e não-ARO da FT-1 vistos no capítulo 5 são mostrados nas Tabelas A, B, C e D deste apêndice:

Tabelas A e B: Conjunto de dados de planta estacionários usados na construção dos modelos para predição de tolueno e não-ARO.

Tabelas C e D: Conjunto de dados de planta usados na validação dos modelos construídos a partir dos dados das Tabelas A e B deste apêndice e também a partir dos dados das Tabelas A e B do Apêndice A.

Tanto os dados da Tabela A quanto da Tabela B são utilizados para gerar a equação matemática que relaciona as entradas e as saídas do modelo, sendo que as entradas são: as temperaturas, a pressão de topo, as razões entre vazões e as vazões (Tabelas A e B), e as saídas são as composições de topo de TOL e não-ARO (Tabela B).

Os dados de planta usados para construir modelos dinâmicos não são mostrados pois apresentam mais de 20000 linhas de dados.

Tabela A: Conjunto de dados de entrada para construção de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	#60	#55	#31	#29	#15	#21	#20	#02	#01	Refluxo	P topo*	RD	RF
Pontos	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(kg/cm2)	-	-
1	111.91	116.15	126.05	130.54	131.40	139.00	140.59	154.75	157.12	62.65	0.061	2.275	1.071
2	112.08	116.52	126.95	131.09	131.89	139.21	140.75	155.99	158.42	62.46	0.069	1.849	1.007
3	112.07	116.32	125.41	129.54	130.57	139.16	140.70	155.51	158.52	62.10	0.063	2.022	1.109

4	112.12	116.55	126.07	130.28	131.12	138.92	140.43	155.95	159.00	64.06	0.071	1.925	1.002
5	111.91	116.27	125.63	129.92	130.85	139.15	140.69	155.55	158.79	63.75	0.066	2.020	1.060
6	111.99	116.32	126.61	130.57	131.54	139.15	140.70	155.60	158.44	62.84	0.065	1.901	1.012
7	111.95	116.28	126.50	130.66	131.58	139.08	140.63	155.54	158.38	62.35	0.065	1.923	1.013
8	111.96	116.40	126.65	130.80	131.66	138.91	140.43	155.95	158.82	63.49	0.072	1.833	0.964
9	111.86	116.26	126.73	130.65	131.60	139.03	140.53	155.59	158.50	62.81	0.067	1.859	1.006
10	111.82	116.30	126.77	130.80	131.60	138.88	140.38	155.76	158.54	63.38	0.069	1.813	0.979
11	112.10	116.58	126.71	130.96	131.73	139.04	140.59	156.59	159.66	61.28	0.070	1.782	0.977
12	112.16	116.50	126.23	130.56	131.46	139.21	140.70	156.27	159.39	61.08	0.067	1.953	1.011
13	112.24	116.59	126.21	130.42	131.37	139.01	140.53	156.42	159.62	60.89	0.067	1.912	1.034
14	112.38	116.74	126.03	130.17	131.12	139.07	140.59	156.39	159.63	62.40	0.069	1.876	1.038
15	112.27	116.56	126.01	130.10	131.08	139.15	140.69	156.18	159.48	63.46	0.066	1.905	1.070
16	112.08	116.38	125.02	129.20	130.37	139.61	141.12	154.94	158.10	64.94	0.066	2.250	1.202
17	112.06	116.34	124.33	128.44	129.65	138.96	140.53	154.72	157.78	63.46	0.066	2.275	1.227
18	112.20	116.56	125.90	130.18	131.04	139.17	140.70	156.28	159.63	62.26	0.066	1.905	1.071
19	112.34	116.84	127.10	131.09	131.84	139.03	140.53	157.34	160.65	63.92	0.076	1.659	0.951
20	111.98	116.34	125.57	129.81	130.77	138.92	140.48	156.28	159.63	61.93	0.066	1.877	1.082
21	111.68	115.87	123.67	128.22	129.46	139.25	140.80	155.16	158.94	61.87	0.066	2.317	1.298
22	111.98	116.06	123.42	127.85	129.13	139.43	140.91	155.20	158.88	56.78	0.056	2.532	1.382
23	111.74	115.71	122.63	127.06	128.38	139.29	140.80	154.63	158.27	56.55	0.046	3.079	1.611
24	111.72	115.83	123.63	128.40	129.46	139.13	140.69	154.87	158.35	59.39	0.056	2.430	1.298
25	111.75	116.11	124.54	129.05	130.02	139.13	140.64	155.55	159.18	62.88	0.066	2.331	1.190
26	111.96	116.19	124.54	129.08	130.06	139.16	140.70	155.32	158.78	59.42	0.057	2.459	1.238
27	111.98	116.38	125.57	129.73	130.65	139.07	140.59	155.80	159.36	63.63	0.067	2.002	1.098
28	112.03	116.36	125.49	129.73	130.72	139.12	140.64	155.72	159.11	61.93	0.067	2.109	1.116
29	112.34	116.91	128.81	132.69	134.54	143.05	144.66	157.00	160.10	66.07	0.081	1.113	0.968
30	111.30	115.28	120.98	125.23	126.55	138.53	140.11	153.38	156.07	58.90	0.040	4.668	2.143
31	111.78	116.16	125.37	129.40	130.48	138.99	140.53	155.60	159.20	64.77	0.071	1.853	1.086
32	112.23	116.70	127.09	131.01	131.89	139.13	140.69	156.83	159.99	61.79	0.071	1.801	0.987
33	112.07	116.44	126.94	130.94	131.74	139.05	140.59	156.39	159.70	62.46	0.071	1.778	0.978
34	111.91	116.42	125.10	129.09	130.20	139.11	140.64	156.36	159.78	63.60	0.071	1.877	1.095
35	112.10	116.64	127.34	131.29	132.12	138.75	140.32	157.10	160.34	62.24	0.070	1.661	0.925
36	112.04	116.39	127.14	131.09	132.04	139.27	140.80	156.00	158.47	59.57	0.070	2.010	0.999
37	111.90	116.38	126.87	130.50	131.45	138.84	140.34	156.03	158.56	61.69	0.070	1.811	1.000
38	112.07	116.64	126.65	130.45	131.34	138.95	140.53	156.23	159.35	67.78	0.071	1.720	0.973
39	111.92	116.24	125.69	129.76	130.72	139.09	140.64	155.75	159.02	61.45	0.072	1.952	1.085
40	112.02	116.27	124.95	129.21	130.17	138.85	140.43	155.79	158.99	58.40	0.061	2.107	1.196
41	112.16	116.46	125.14	129.24	130.28	138.85	140.43	155.16	158.26	62.05	0.061	2.150	1.172
42	112.46	116.92	126.91	130.77	131.62	138.93	140.52	156.55	159.67	63.99	0.072	1.767	1.015
43	112.32	116.79	125.54	129.21	130.29	138.95	140.48	155.39	158.00	62.55	0.072	1.884	1.102
44	112.19	116.59	126.41	130.36	131.29	138.92	140.48	154.87	157.26	62.40	0.072	1.853	1.054
45	112.06	116.42	125.13	129.37	130.30	138.96	140.52	155.19	158.32	63.32	0.068	1.905	1.180
46	111.98	116.42	125.67	130.00	130.77	138.88	140.43	155.99	159.19	60.23	0.068	2.123	1.141
47	112.70	117.61	128.52	131.81	132.50	138.88	140.43	157.74	160.22	66.00	0.090	1.482	0.872
48	112.38	117.07	128.30	132.00	132.62	138.88	140.42	156.94	159.27	63.22	0.090	1.602	0.940
49	112.36	116.91	127.13	131.04	131.70	138.95	140.48	155.95	158.35	66.00	0.080	1.713	1.026
50	111.94	116.34	124.62	129.16	130.05	139.07	140.64	154.94	157.62	64.27	0.059	2.110	1.262
51	112.50	116.83	127.19	131.36	132.01	139.11	140.64	156.78	159.87	60.44	0.069	1.948	1.045
52	112.34	116.74	126.69	130.86	131.52	138.95	140.48	156.50	159.78	61.75	0.069	1.792	1.066
53	112.38	116.74	126.62	130.90	131.65	139.11	140.64	156.43	159.70	62.68	0.069	2.026	1.087
54	112.23	116.63	126.18	130.72	131.46	139.13	140.69	156.10	159.34	63.31	0.069	1.962	1.098
55	112.24	116.64	126.30	130.74	131.40	139.15	140.64	156.15	159.42	64.40	0.069	1.827	1.076

56	112.22	116.62	126.14	130.57	131.29	139.16	140.69	156.20	159.47	63.10	0.069	1.902	1.100
57	112.24	116.62	125.91	130.38	131.22	139.29	140.85	156.06	159.54	63.16	0.069	2.029	1.136
58	112.31	116.67	126.41	130.84	131.58	138.96	140.48	156.36	159.42	61.40	0.069	1.920	1.078
59	111.98	115.98	126.11	130.29	131.14	139.15	140.75	154.36	157.56	58.90	0.059	1.698	0.947
60	111.78	115.72	126.82	130.56	131.37	139.08	140.64	153.50	156.51	56.81	0.048	1.478	0.804
61	111.79	115.79	127.09	130.78	133.45	143.45	145.02	153.62	156.86	57.72	0.048	1.441	0.805
62	111.80	115.88	127.74	131.48	135.33	145.57	147.17	153.91	156.99	57.89	0.048	1.384	0.796
63	112.30	118.09	128.81	132.86	139.59	148.40	150.00	154.18	157.38	58.90	0.048	1.329	0.770
64	112.52	117.14	127.97	132.10	132.65	138.85	140.43	157.27	160.25	64.02	0.079	1.700	0.961
65	112.39	116.96	126.91	131.13	131.81	139.04	140.64	157.06	160.11	64.38	0.079	1.776	1.061
66	111.98	116.11	126.62	130.42	131.12	138.69	140.32	154.42	157.55	60.38	0.058	1.401	0.837
67	111.79	116.40	126.69	129.94	130.82	139.05	140.59	152.92	156.12	58.39	0.048	1.215	0.711
68	111.87	116.10	126.38	130.30	130.98	138.81	140.38	154.74	158.00	61.84	0.058	1.529	0.883
69	112.18	116.66	127.85	131.29	131.98	138.97	140.48	155.62	158.86	63.41	0.068	1.311	0.779
70	112.15	116.66	127.99	131.41	132.06	138.95	140.50	155.58	158.71	62.71	0.068	1.337	0.777
71	112.11	116.59	127.78	131.04	131.84	139.05	140.64	155.39	158.27	63.59	0.058	1.306	0.787
72	112.00	116.30	126.18	129.73	130.50	138.80	140.38	155.30	158.42	63.66	0.068	1.391	0.845
73	111.75	115.75	125.45	129.54	130.46	138.97	140.53	154.16	157.40	61.61	0.058	1.762	0.981
74	111.90	116.07	125.30	129.54	130.42	139.05	140.59	154.82	157.95	61.54	0.057	1.843	1.043
75	111.76	115.94	124.87	129.16	130.05	138.85	140.43	154.35	157.30	62.32	0.057	1.912	1.057
76	111.72	115.75	124.37	128.86	129.81	139.03	140.59	154.24	157.70	57.80	0.057	1.948	1.132
77	111.84	115.92	125.41	129.80	130.72	139.04	140.59	154.63	157.95	58.39	0.057	2.035	1.070
78	111.72	115.87	124.43	128.69	129.76	138.96	140.52	154.43	157.95	59.14	0.057	1.952	1.146
79	111.87	116.06	124.66	129.13	129.98	138.64	140.21	154.66	158.14	58.86	0.057	1.935	1.096
80	111.83	115.98	125.90	130.00	130.85	138.73	140.32	154.47	157.34	59.82	0.057	1.835	1.004
81	111.91	116.04	125.46	129.85	130.74	138.96	140.53	154.54	157.31	58.33	0.057	1.964	1.058
82	111.84	116.02	124.91	129.28	130.20	138.83	140.43	154.80	157.90	60.03	0.057	1.757	1.058
83	111.90	116.00	126.25	130.28	131.22	138.87	140.43	153.98	156.67	62.00	0.057	1.762	1.054
84	111.90	115.94	124.43	128.76	129.86	138.88	140.43	154.28	157.67	60.06	0.057	2.122	1.175
85	111.78	116.10	125.14	129.28	130.21	139.01	140.59	154.98	157.92	62.90	0.067	1.693	1.064
86	111.74	115.91	125.10	129.68	130.46	138.75	140.32	154.62	157.99	61.31	0.057	2.015	1.072
87	111.83	116.06	126.05	130.29	131.00	138.85	140.48	154.87	157.31	60.56	0.057	1.871	1.021
88	112.02	116.27	125.86	130.01	130.86	138.89	140.53	155.02	158.07	60.13	0.057	1.832	1.021
89	112.02	116.34	126.70	130.66	131.48	138.93	140.53	155.24	158.26	63.00	0.067	1.629	0.944
90	111.78	115.91	125.33	129.57	130.46	138.83	140.43	154.26	156.83	57.98	0.057	1.938	1.117
91	111.86	115.98	125.19	129.37	130.32	138.88	140.48	154.28	157.04	58.25	0.058	1.988	1.108
92	111.58	115.83	124.65	128.94	129.96	139.03	140.59	154.31	157.30	61.75	0.057	1.971	1.108
93	111.66	115.83	124.33	128.88	129.84	138.93	140.53	154.32	157.59	62.22	0.057	2.066	1.151
94	111.78	115.87	124.23	128.62	129.62	138.79	140.38	154.26	157.56	59.43	0.057	2.106	1.234
95	111.60	115.71	124.07	128.50	129.45	138.37	139.95	153.95	157.26	60.41	0.047	2.352	1.243
96	111.74	115.98	124.70	128.92	129.80	138.72	140.37	154.28	157.42	63.11	0.057	2.047	1.172
97	111.63	115.83	124.37	128.77	129.69	138.97	140.53	154.32	157.42	64.10	0.057	1.977	1.157
98	111.76	115.98	124.95	129.20	130.09	138.70	140.32	154.58	157.56	60.62	0.057	1.944	1.137
99	112.02	116.23	125.21	129.74	130.60	138.81	140.43	155.06	158.14	60.03	0.057	2.034	1.114
100	111.91	116.20	125.75	130.08	130.76	138.65	140.21	155.20	158.55	62.19	0.057	1.780	1.054
101	112.08	116.35	126.86	130.97	131.68	139.07	140.64	155.10	157.83	62.62	0.067	1.835	1.000
102	112.07	116.35	127.26	131.10	131.81	138.84	140.48	155.35	158.04	61.84	0.067	1.769	0.964
103	112.07	116.43	127.58	131.46	132.10	138.80	140.43	155.35	157.96	61.56	0.067	1.788	0.975
104	111.56	115.55	122.49	126.85	128.13	138.69	140.32	152.67	154.59	55.82	0.046	2.776	1.546
105	111.84	116.31	127.14	131.02	131.74	139.01	140.64	155.55	158.72	67.38	0.077	1.553	0.925
106	112.06	116.48	128.45	132.12	132.64	138.81	140.43	155.80	158.71	63.90	0.067	1.585	0.870
107	111.94	116.30	126.37	130.54	131.17	138.66	140.27	155.36	158.56	63.33	0.067	1.779	0.991

108	112.02	116.59	128.64	132.12	132.66	138.85	140.48	155.95	158.75	65.01	0.077	1.457	0.852
109	112.16	116.71	128.93	132.56	132.97	138.75	140.38	156.06	158.64	63.13	0.067	1.567	0.855
110	112.27	116.70	129.10	132.84	133.32	138.96	140.59	155.87	158.46	62.35	0.067	1.680	0.863
111	112.19	116.67	129.00	132.62	133.02	138.89	140.53	155.84	158.42	63.19	0.067	1.623	0.868
112	112.06	116.48	127.94	131.90	132.46	138.89	140.48	155.55	158.31	64.09	0.067	1.639	0.901
113	111.68	116.12	126.91	130.98	131.53	138.64	140.26	155.66	158.39	62.10	0.067	1.741	0.961
114	111.79	116.18	127.26	131.29	131.93	138.99	140.64	155.66	158.56	61.24	0.067	1.691	0.928
115	111.94	116.30	126.77	130.98	131.69	139.08	140.69	155.52	158.39	61.89	0.067	1.848	0.973
116	112.04	116.35	127.45	131.36	132.04	138.88	140.48	155.47	158.34	62.76	0.067	1.685	0.949
117	111.95	116.31	126.85	130.66	131.41	138.93	140.59	155.26	158.20	63.84	0.067	1.797	0.984
118	111.64	115.76	126.42	130.30	131.13	138.73	140.38	154.42	157.32	62.90	0.067	1.686	0.968
119	111.66	115.91	125.90	130.01	130.81	138.93	140.53	154.24	157.32	64.05	0.057	1.783	1.006
120	111.50	115.67	124.89	129.33	130.21	138.92	140.53	153.74	156.91	63.36	0.057	1.841	1.025
121	111.39	115.40	125.05	129.22	130.08	138.69	140.32	153.64	156.92	61.43	0.057	1.808	1.014
122	111.48	115.55	124.70	129.21	130.06	138.76	140.42	153.63	156.90	60.87	0.057	1.944	1.022
123	111.51	115.58	124.81	129.17	130.06	138.87	140.48	153.55	156.78	61.39	0.057	1.770	1.001
124	111.56	115.52	124.61	128.93	129.85	138.96	140.59	153.68	156.88	60.67	0.057	1.754	1.021
125	111.54	115.50	124.81	129.28	130.20	139.04	140.64	153.32	156.82	60.47	0.047	1.667	0.956
126	111.39	115.34	124.82	129.00	130.00	138.84	140.48	152.98	156.24	60.61	0.047	1.763	0.951
127	111.31	115.23	124.57	128.78	129.82	138.88	140.48	152.88	156.26	59.93	0.047	1.665	0.954
128	111.27	115.15	125.03	129.21	130.33	139.23	140.85	152.32	155.63	60.16	0.047	1.546	0.887
129	111.22	115.22	125.82	129.82	130.70	139.00	140.59	152.36	155.54	62.06	0.047	1.524	0.812
130	111.15	115.32	126.71	130.09	131.05	138.93	140.53	152.50	155.40	61.54	0.047	1.352	0.773
131	111.40	116.50	127.11	130.38	131.24	138.87	140.48	152.56	155.47	62.96	0.047	1.337	0.762
132	111.22	115.46	127.27	130.65	131.38	138.52	140.16	152.87	155.71	63.97	0.047	1.399	0.761
133	111.15	115.18	126.74	130.22	131.12	139.01	140.64	152.67	155.00	62.31	0.050	1.616	0.848
134	111.18	115.20	126.51	130.29	130.92	138.05	139.68	152.96	155.76	60.93	0.050	1.519	0.788
135	111.16	115.04	126.06	130.09	131.20	139.39	141.01	152.43	155.23	59.66	0.050	1.821	0.919
136	111.31	115.30	125.70	129.69	130.54	138.69	140.32	152.87	155.70	61.95	0.050	1.540	0.871
137	111.22	115.18	125.42	129.13	130.12	138.96	140.59	152.92	156.04	61.22	0.050	1.575	0.893
138	111.16	115.12	125.85	129.80	130.69	138.80	140.42	152.78	155.79	61.92	0.050	1.633	0.866
139	111.18	115.18	125.54	129.32	130.32	138.89	140.57	152.67	155.62	61.71	0.050	1.616	0.903
140	111.51	115.47	126.01	129.93	130.97	138.89	140.48	152.56	155.04	57.20	0.050	1.742	0.882
141	111.74	115.80	125.87	129.46	130.40	138.87	140.53	153.19	155.88	59.48	0.050	1.447	0.867
142	111.52	115.51	125.07	129.04	130.14	139.19	140.80	152.64	155.48	60.54	0.050	1.576	0.901
143	111.26	115.26	124.82	128.81	129.81	138.61	140.24	152.47	155.19	60.65	0.050	1.530	0.918
144	111.04	115.03	124.53	128.41	129.66	139.05	140.64	152.20	154.98	61.83	0.049	1.621	0.919
145	111.12	115.15	124.93	128.74	129.78	138.76	140.42	152.50	155.19	58.64	0.049	1.547	0.904
146	111.30	115.15	123.71	128.01	129.24	139.01	140.66	151.88	155.03	60.38	0.049	1.813	1.035
147	111.27	115.07	123.79	128.01	129.38	139.12	140.74	151.88	155.04	59.95	0.049	1.698	1.007
148	111.40	115.43	124.81	128.92	129.64	138.28	139.89	153.04	156.35	58.88	0.049	1.607	0.885
149	111.42	115.40	124.97	128.81	129.97	139.09	140.69	152.83	156.10	59.13	0.049	1.456	0.904
150	111.55	115.51	126.06	130.01	130.94	138.91	140.53	153.04	156.06	58.92	0.049	1.549	0.859
151	111.38	115.30	124.85	128.89	129.97	138.97	140.59	152.79	155.98	59.56	0.049	1.621	0.913
152	111.55	115.58	125.69	129.50	130.29	138.46	140.11	153.23	156.31	61.14	0.049	1.367	0.833
153	111.34	115.36	124.82	128.96	129.97	138.76	140.42	152.58	155.74	61.12	0.050	1.517	0.910
154	111.06	114.86	124.34	128.89	130.04	138.76	140.42	151.67	154.43	58.39	0.046	1.975	1.013
155	111.16	115.04	124.17	128.56	129.64	138.69	140.32	151.88	155.00	59.88	0.046	1.871	1.021
156	111.27	115.11	124.42	128.52	129.81	138.97	140.64	151.84	154.72	59.38	0.046	1.680	0.978
157	111.20	115.00	123.51	128.05	129.42	139.07	140.69	151.58	154.48	56.93	0.036	1.905	1.073
158	111.27	115.15	123.98	128.30	129.52	138.72	140.38	152.03	154.90	57.38	0.047	1.683	0.982
159	111.24	115.10	124.03	128.40	129.49	138.60	140.21	151.98	154.78	57.11	0.047	1.733	0.991

160	111.34	115.18	124.30	128.62	129.85	138.79	140.48	151.88	154.75	58.07	0.047	1.742	0.977
161	111.35	115.12	123.43	127.94	129.09	138.66	140.32	152.04	155.14	57.50	0.047	2.069	1.040
162	111.24	115.10	123.19	127.55	128.92	138.92	140.53	151.63	154.54	57.87	0.047	1.785	1.069
163	111.50	115.80	127.78	130.78	131.78	139.07	140.69	151.90	154.04	61.95	0.046	1.426	0.793
164	111.67	115.72	126.74	130.48	131.16	138.28	139.94	153.35	155.67	63.05	0.057	1.561	0.893
165	111.74	115.83	125.86	129.82	130.74	138.85	140.52	153.42	155.92	63.50	0.057	1.678	0.988
166	111.55	115.83	125.79	129.64	130.50	138.61	140.24	153.80	155.66	63.94	0.057	1.656	0.960
167	111.62	115.79	125.65	129.28	130.20	138.89	140.53	153.51	156.12	65.50	0.067	1.679	0.962
168	111.48	115.62	124.15	128.26	129.22	138.79	140.43	153.27	156.14	64.60	0.057	1.869	1.080
169	111.47	115.60	123.93	128.10	129.20	138.81	140.43	153.28	156.34	63.83	0.057	1.869	1.107
170	111.54	115.60	124.87	128.80	129.82	138.77	140.42	153.28	156.16	63.19	0.057	1.709	1.053
171	111.31	115.26	124.09	128.26	129.26	138.62	140.27	152.43	155.42	61.70	0.057	1.720	1.005
172	111.28	115.15	124.02	128.05	129.30	138.92	140.59	152.31	155.24	61.35	0.047	1.674	1.000
173	111.14	115.14	123.86	128.04	129.21	138.88	140.53	152.19	155.10	61.04	0.047	1.674	1.015
174	111.16	115.04	123.98	128.13	129.30	138.88	140.59	151.86	154.84	59.36	0.047	1.665	1.001
175	111.26	115.11	124.37	128.30	129.41	138.72	140.32	151.95	154.94	59.27	0.047	1.603	0.942
176	111.26	115.11	123.38	127.63	128.82	138.68	140.42	151.91	154.96	58.21	0.047	1.799	1.050
177	111.15	114.92	123.25	127.57	128.78	138.64	140.32	151.43	154.36	57.00	0.037	1.664	1.028
178	111.23	114.96	123.82	127.75	129.12	139.01	140.64	151.55	154.56	57.15	0.037	1.688	0.985
179	111.28	115.06	123.75	127.82	129.10	138.83	140.48	151.62	154.60	56.61	0.037	1.760	0.990
180	111.91	116.15	126.05	130.54	131.40	139.00	140.59	154.75	157.12	62.65	0.061	2.275	1.071
181	111.90	116.19	125.95	130.02	130.93	139.01	140.53	154.86	157.83	62.04	0.067	1.670	0.982
182	112.07	116.32	125.41	129.54	130.57	139.16	140.70	155.51	158.52	62.10	0.063	2.022	1.109
183	112.12	116.55	126.07	130.28	131.12	138.92	140.43	155.95	159.00	64.06	0.071	1.925	1.002
184	111.87	116.15	126.85	130.80	131.50	138.99	140.59	155.15	158.10	62.18	0.067	1.725	0.954
185	111.99	116.32	126.61	130.57	131.54	139.15	140.70	155.60	158.44	62.84	0.065	1.901	1.012
186	111.95	116.28	126.50	130.66	131.58	139.08	140.63	155.54	158.38	62.35	0.065	1.923	1.013
187	111.96	116.40	126.65	130.80	131.66	138.91	140.43	155.95	158.82	63.49	0.072	1.833	0.964
188	111.86	116.26	126.73	130.65	131.60	139.03	140.53	155.59	158.50	62.81	0.067	1.859	1.006
189	111.82	116.30	126.77	130.80	131.60	138.88	140.38	155.76	158.54	63.38	0.069	1.813	0.979
190	112.10	116.58	126.71	130.96	131.73	139.04	140.59	156.59	159.66	61.28	0.070	1.782	0.977
191	112.16	116.50	126.23	130.56	131.46	139.21	140.70	156.27	159.39	61.08	0.067	1.953	1.011
192	112.24	116.59	126.21	130.42	131.37	139.01	140.53	156.42	159.62	60.89	0.067	1.912	1.034
193	111.98	116.38	126.95	130.76	131.54	139.03	140.59	155.48	158.39	62.50	0.067	1.716	0.979
194	111.91	116.27	125.63	129.92	130.85	139.15	140.69	155.55	158.79	63.75	0.066	2.020	1.060
195	112.28	116.71	125.82	129.68	130.64	138.83	140.38	155.31	157.92	62.26	0.072	1.762	1.088
196	111.91	116.38	126.15	130.29	131.22	138.66	140.21	156.28	159.75	64.55	0.071	1.830	0.992
197	112.08	116.52	126.95	131.09	131.89	139.21	140.75	155.99	158.42	62.46	0.069	1.849	1.007
198	111.11	114.92	123.31	127.38	129.17	140.44	142.14	151.20	153.34	58.03	0.046	1.698	1.037
199	111.24	115.11	124.12	128.09	129.55	139.81	141.52	151.73	153.70	57.93	0.046	1.746	1.022
200	111.32	115.11	122.92	127.09	128.62	139.82	141.50	151.45	153.57	57.31	0.046	1.978	1.178
201	111.34	115.31	125.10	129.14	130.43	139.83	141.51	152.63	155.56	63.40	0.057	1.642	0.940
202	111.37	115.56	126.52	130.03	131.30	140.27	141.97	153.22	156.02	62.57	0.057	1.571	0.850
203	111.74	115.74	125.42	129.64	130.86	139.97	141.64	153.37	156.22	60.16	0.057	1.715	0.970
204	111.65	115.69	125.48	129.64	130.73	139.63	141.29	153.34	156.15	62.17	0.057	1.642	0.938
205	111.43	115.59	125.46	129.59	130.72	139.94	141.62	153.05	155.88	65.31	0.057	1.760	0.981
206	111.27	115.33	124.49	128.86	130.07	139.40	141.07	152.59	155.17	63.22	0.046	1.705	1.071
207	111.55	115.67	126.14	130.29	131.43	139.93	141.61	153.24	155.91	63.11	0.057	1.719	0.952
208	111.65	115.78	126.54	130.48	131.49	139.88	141.58	153.47	156.19	65.97	0.057	1.595	0.913
209	111.81	115.92	126.59	130.55	131.59	139.79	141.46	153.92	156.84	62.17	0.057	1.668	0.908
210	111.83	115.94	126.35	130.37	131.44	139.67	141.35	153.71	156.51	62.65	0.057	1.578	0.910
211	111.47	115.54	126.07	130.08	131.24	139.94	141.61	153.22	156.08	64.29	0.057	1.674	0.943

212	111.37	115.51	126.25	130.17	131.34	139.83	141.52	153.28	156.03	64.37	0.057	1.623	0.915
213	111.57	115.62	125.92	129.94	131.02	139.72	141.40	153.48	156.46	62.32	0.058	1.735	0.935
214	111.55	115.65	125.78	129.81	130.95	139.89	141.58	153.52	156.50	63.59	0.058	1.569	0.929
215	111.44	115.49	124.89	129.20	130.47	139.77	141.45	153.43	156.64	62.81	0.057	1.674	0.989
216	111.50	115.54	125.82	130.05	131.10	139.81	141.48	153.32	156.24	62.55	0.057	1.706	0.946
217	111.38	115.32	123.98	128.65	129.96	139.70	141.38	152.49	155.56	62.15	0.047	2.131	1.141
218	111.46	115.41	124.16	128.69	129.93	139.93	141.61	153.20	156.66	62.29	0.047	1.781	1.019
219	111.29	115.22	124.31	128.95	130.23	139.98	141.66	152.92	156.40	62.43	0.052	1.779	1.013
220	111.46	115.40	124.98	129.43	130.68	139.86	141.56	152.77	155.96	63.50	0.052	1.728	0.971
221	111.52	115.49	124.97	129.40	130.64	139.84	141.51	153.05	156.27	62.76	0.053	1.712	0.972
222	111.45	115.37	124.58	128.95	130.22	139.69	141.39	152.77	155.96	63.44	0.053	1.739	1.006
223	111.44	115.43	125.18	129.47	130.66	139.94	141.61	153.21	156.48	62.19	0.053	1.749	0.969
224	111.61	115.57	125.15	129.55	130.53	139.52	141.19	153.38	156.53	60.06	0.053	1.750	0.961
225	111.76	115.77	127.09	131.12	132.03	139.78	141.45	153.71	156.82	60.92	0.053	1.634	0.855
226	111.73	115.77	126.31	130.38	131.43	139.74	141.42	154.03	157.18	60.44	0.053	1.652	0.881
227	111.90	116.06	126.92	130.63	131.59	139.73	141.40	154.55	157.71	62.05	0.053	1.415	0.824
228	111.88	116.24	127.50	131.20	132.02	139.66	141.34	154.71	157.77	63.81	0.063	1.490	0.835
229	112.03	116.50	128.60	132.01	132.86	139.91	141.60	154.96	157.88	64.50	0.063	1.367	0.792
230	112.13	117.04	129.14	132.41	133.20	139.89	141.57	154.81	157.52	63.29	0.063	1.489	0.796
231	112.12	116.78	128.71	132.04	132.72	139.45	141.14	154.98	157.88	64.32	0.063	1.455	0.800
232	112.11	116.53	127.49	131.44	132.10	139.34	141.01	155.38	158.29	65.81	0.073	1.502	0.929
233	112.09	116.66	126.95	131.09	131.77	139.25	140.93	155.85	158.78	66.84	0.073	1.723	0.980
234	112.13	116.59	126.65	130.76	131.54	139.38	141.07	155.93	159.04	65.90	0.073	1.707	1.007
235	112.04	116.55	126.50	130.73	131.52	139.31	141.02	155.65	158.82	66.84	0.073	1.732	1.009
236	112.09	116.54	126.33	130.62	131.46	139.24	140.93	155.81	158.79	66.94	0.073	1.773	1.020
237	112.04	116.42	126.31	130.58	131.37	139.19	140.88	155.62	158.72	66.40	0.073	1.778	1.017
238	111.94	116.46	126.11	130.45	131.23	139.35	141.06	155.49	158.74	67.40	0.073	1.797	1.036
239	111.86	116.25	125.91	130.15	131.11	139.38	141.09	155.31	158.37	66.30	0.073	1.860	1.065
240	111.85	116.19	125.98	130.31	131.22	139.32	141.01	155.23	158.36	65.98	0.073	1.777	1.044
241	111.83	116.32	125.84	130.24	130.94	139.38	141.07	155.35	158.66	67.57	0.073	1.863	1.064
242	111.71	116.04	125.15	129.60	130.58	139.44	141.13	154.94	158.23	66.47	0.073	2.049	1.137
243	111.65	115.90	124.78	129.34	130.21	139.15	140.85	154.72	158.03	65.16	0.063	1.976	1.159
244	111.59	115.99	124.86	129.58	130.44	139.31	141.02	154.63	157.88	66.85	0.063	2.048	1.164
245	111.80	116.18	125.31	129.59	130.50	139.25	140.94	155.08	158.31	66.12	0.063	1.838	1.104
246	111.88	116.27	125.45	129.83	130.77	139.28	140.97	155.43	158.72	66.22	0.073	1.801	1.067
247	111.95	116.36	125.66	130.03	130.91	139.24	140.93	155.53	158.85	66.31	0.073	1.739	1.050
248	111.96	116.42	126.43	130.67	131.48	139.24	140.91	155.81	159.03	65.82	0.073	1.674	0.997
249	111.85	116.25	126.60	130.87	131.63	139.18	140.86	155.41	158.58	65.65	0.073	1.711	0.982
250	111.80	116.20	126.48	130.62	131.51	139.43	141.12	155.13	158.18	66.67	0.073	1.871	1.015
251	111.75	116.26	126.95	131.02	131.77	139.25	140.92	155.69	158.60	67.63	0.077	1.793	0.971
252	111.74	116.24	126.67	130.85	131.66	139.37	141.06	155.79	158.74	66.58	0.077	1.695	0.973
253	111.78	116.16	126.46	130.78	131.64	139.45	141.12	155.18	157.87	66.80	0.066	1.862	1.046
254	111.96	116.31	125.87	130.26	131.05	139.20	140.88	155.50	158.48	66.73	0.077	1.881	1.045
255	111.75	116.03	125.73	130.16	130.90	139.09	140.80	155.00	157.90	66.06	0.067	1.903	1.076
256	111.68	115.95	125.26	129.69	130.66	139.32	141.02	154.63	157.80	65.52	0.067	1.960	1.111
257	111.75	115.95	125.22	129.76	130.69	139.32	141.01	154.56	157.72	63.23	0.067	1.940	1.102
258	111.94	116.18	125.51	129.65	130.62	139.17	140.85	154.79	157.76	62.45	0.067	1.927	1.074
259	111.94	116.07	125.55	129.94	130.88	139.28	140.96	154.46	157.36	62.88	0.056	1.879	1.074
260	111.79	116.10	125.99	130.17	131.06	139.13	140.85	154.52	157.43	65.25	0.067	1.725	1.020
261	111.67	115.91	125.87	130.20	131.09	139.35	141.01	154.34	157.24	65.34	0.067	1.766	1.026
262	111.90	116.23	126.73	130.77	131.61	139.32	141.01	154.86	157.59	65.36	0.065	1.775	0.970
263	111.90	116.24	126.65	130.78	131.49	139.03	140.69	154.78	157.62	63.97	0.065	1.711	0.953

264	111.86	116.22	126.75	130.68	131.57	139.47	141.12	155.00	157.47	65.03	0.066	1.619	0.943
265	111.46	115.22	121.71	126.15	127.91	139.31	141.01	151.58	154.48	55.66	0.046	2.603	1.439
266	111.34	115.03	120.95	125.17	127.37	139.41	141.07	150.87	153.64	54.86	0.036	2.669	1.702
267	111.23	114.92	120.26	124.58	126.93	139.12	140.80	150.62	153.67	57.59	0.036	3.087	1.853
268	110.99	114.72	120.26	124.55	127.09	139.43	141.08	150.19	153.10	59.05	0.036	2.820	1.836
269	111.10	114.79	120.41	124.59	126.90	139.24	140.91	150.42	153.35	57.11	0.036	3.142	1.788
270	111.28	115.20	125.21	129.38	130.52	139.36	141.06	152.63	155.62	62.35	0.056	1.659	0.928
271	111.39	115.34	125.87	129.80	130.88	139.41	141.12	152.74	155.72	63.23	0.056	1.493	0.888
272	111.42	115.26	124.06	128.53	129.74	139.39	141.06	152.48	155.58	59.65	0.046	1.876	1.069
273	111.55	115.39	124.05	128.58	129.74	139.08	140.74	152.64	155.66	58.50	0.046	1.985	1.068

* Pressão manométrica

Tabela B: Conjunto de dados de entrada e saída (TOL e não-ARO) para construção de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

Pontos	VF	Destilado	VM	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
	-	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	0.325	6.147	4.249	6.003	13.059	13.982	99.83	1707
2	0.320	7.544	4.436	6.280	13.849	13.946	99.83	1637
3	0.343	6.927	4.328	5.161	12.623	14.004	99.74	2599
4	0.319	7.274	4.462	5.780	13.971	14.001	99.78	2213
5	0.325	6.953	4.305	5.373	13.258	14.048	99.77	2246
6	0.317	7.335	4.371	5.770	13.773	13.940	99.77	2292
7	0.318	7.271	4.396	5.911	13.808	13.983	99.78	2203
8	0.309	7.611	4.472	6.103	14.473	13.948	99.83	1710
9	0.318	7.505	4.405	5.901	13.874	13.952	99.76	2217
10	0.311	7.725	4.441	6.275	14.303	14.008	99.81	1873
11	0.317	7.955	4.591	6.319	14.503	14.172	99.80	2017
12	0.322	7.243	4.509	6.018	13.987	14.144	99.80	2010
13	0.326	7.421	4.476	5.859	13.720	14.185	99.78	2167
14	0.335	7.548	4.569	5.421	13.646	14.159	99.80	1971
15	0.332	7.476	4.421	5.507	13.314	14.241	99.83	1722
16	0.357	6.325	4.230	4.899	11.842	14.234	99.75	2434
17	0.375	6.241	4.335	4.149	11.569	14.200	99.83	1728
18	0.338	7.428	4.464	5.458	13.206	14.148	99.83	1711
19	0.315	8.506	4.665	6.078	14.834	14.113	99.72	2694
20	0.342	7.545	4.469	5.401	13.084	14.162	99.80	1973
21	0.389	6.135	4.257	4.380	10.953	14.215	99.81	1910
22	0.414	5.609	4.258	3.999	10.276	14.202	99.88	1218
23	0.456	4.619	4.027	3.436	8.827	14.220	99.92	836
24	0.392	5.835	4.281	4.662	10.919	14.176	99.89	1122
25	0.360	6.099	4.296	5.157	11.947	14.218	99.83	1674
26	0.372	5.783	4.272	4.677	11.487	14.221	99.84	1607
27	0.343	7.103	4.447	5.449	12.952	14.222	99.76	2425
28	0.347	6.754	4.428	5.469	12.759	14.243	99.76	2406
29	0.308	12.777	4.526	5.924	14.692	14.223	99.77	2312
30	0.595	3.038	3.937	3.359	6.617	14.179	99.89	1098
31	0.338	7.664	4.422	5.132	13.076	14.199	99.58	4172
32	0.313	7.922	4.524	5.970	14.460	14.270	99.77	2179
33	0.310	7.942	4.482	6.040	14.441	14.123	99.83	1680
34	0.347	7.581	4.510	4.647	12.994	14.228	99.74	2597
35	0.300	8.510	4.584	6.231	15.281	14.132	99.83	1580

36	0.302	7.135	4.334	6.300	14.355	14.338	99.83	1672
37	0.320	7.835	4.535	5.780	14.188	14.190	99.79	2053
38	0.314	8.282	4.596	5.762	14.641	14.245	99.79	1971
39	0.336	7.269	4.391	5.269	13.076	14.187	99.80	1959
40	0.369	6.719	4.361	4.903	11.836	14.156	99.87	1289
41	0.357	6.610	4.329	5.116	12.130	14.212	99.87	1301
42	0.330	8.010	4.599	5.669	13.939	14.150	99.81	1871
43	0.351	7.587	4.550	4.515	12.974	14.293	99.60	3950
44	0.336	7.654	4.518	5.454	13.451	14.181	99.74	2539
45	0.368	7.445	4.421	4.856	12.018	14.185	99.78	2201
46	0.371	6.735	4.646	5.477	12.539	14.301	99.81	1838
47	0.295	9.733	4.875	6.094	16.551	14.428	99.77	1177
48	0.320	8.942	4.866	6.405	15.233	14.321	99.85	1115
49	0.328	8.315	4.552	5.891	13.884	14.241	99.89	928
50	0.384	6.745	4.323	4.774	11.273	14.231	99.87	1263
51	0.333	7.371	4.574	6.023	13.746	14.360	99.78	2189
52	0.332	7.899	4.403	5.539	13.283	14.153	99.75	2515
53	0.332	7.096	4.387	5.777	13.231	14.378	99.73	2614
54	0.330	7.260	4.280	5.665	12.966	14.241	99.79	2093
55	0.329	7.797	4.348	5.706	13.235	14.243	99.75	2419
56	0.333	7.484	4.315	5.709	12.946	14.237	99.73	2641
57	0.340	7.087	4.301	5.472	12.662	14.377	99.72	2746
58	0.339	7.403	4.474	5.668	13.186	14.213	99.72	2787
59	0.304	7.316	3.979	6.132	13.108	12.419	99.72	2803
60	0.270	7.430	3.683	5.920	13.660	10.979	99.70	2737
61	0.271	7.621	3.700	5.819	13.637	10.979	99.68	2964
62	0.277	7.960	3.827	6.088	13.839	11.014	99.64	3127
63	0.269	8.264	3.844	6.228	14.272	10.983	98.56	3587
64	0.301	8.472	4.509	6.601	14.981	14.400	99.63	2795
65	0.323	8.239	4.458	5.818	13.793	14.636	99.74	2463
66	0.278	8.394	3.911	6.090	14.056	11.763	99.71	2729
67	0.253	7.990	3.452	5.564	13.646	9.709	99.21	3044
68	0.290	7.986	4.014	5.987	13.837	12.212	99.70	2780
69	0.270	9.259	4.203	6.462	15.578	12.139	99.53	2878
70	0.267	9.131	4.197	6.471	15.708	12.204	99.53	2749
71	0.269	9.361	4.177	6.356	15.534	12.227	99.57	2859
72	0.293	8.757	4.222	5.453	14.414	12.177	99.56	3868
73	0.310	7.025	3.911	5.169	12.620	12.375	99.66	3374
74	0.328	7.121	4.125	5.200	12.579	13.125	99.66	3408
75	0.331	6.834	4.087	5.404	12.361	13.068	99.66	3415
76	0.340	6.704	3.917	4.706	11.535	13.059	99.66	3372
77	0.325	6.519	4.023	5.340	12.399	13.267	99.70	3032
78	0.347	6.783	4.012	4.848	11.554	13.238	99.71	2932
79	0.361	6.798	4.340	5.209	12.009	13.157	99.73	2693
80	0.313	7.160	4.089	5.704	13.077	13.135	99.72	2760
81	0.323	6.665	3.998	5.626	12.372	13.092	99.72	2795
82	0.330	7.478	4.100	4.860	12.413	13.135	99.69	3052
83	0.316	7.412	3.912	5.547	12.396	13.063	99.60	3771
84	0.344	6.227	3.874	4.541	11.248	13.213	99.64	3634
85	0.325	7.779	4.019	5.047	12.382	13.168	99.48	5128
86	0.325	6.551	3.999	5.128	12.315	13.199	99.74	2551
87	0.312	7.050	4.031	6.021	12.915	13.189	99.75	2452

88	0.311	7.206	4.019	5.337	12.924	13.199	99.74	2572
89	0.291	8.091	4.064	6.207	13.951	13.176	99.61	3823
90	0.334	6.791	3.934	5.430	11.777	13.159	99.71	2906
91	0.335	6.613	3.977	5.087	11.868	13.148	99.68	3165
92	0.336	6.692	4.001	5.010	11.900	13.187	99.75	2470
93	0.339	6.374	3.880	4.831	11.442	13.167	99.75	2449
94	0.360	6.320	3.877	4.642	10.785	13.311	99.72	2777
95	0.364	5.712	3.929	5.297	10.807	13.435	99.76	2416
96	0.346	6.544	3.956	4.997	11.429	13.396	99.74	2628
97	0.342	6.845	4.006	4.785	11.701	13.534	99.73	2683
98	0.351	6.882	4.132	4.995	11.769	13.377	99.71	2853
99	0.338	6.638	4.098	5.338	12.118	13.501	99.68	3147
100	0.326	7.544	4.156	5.891	12.743	13.427	99.68	3137
101	0.306	7.376	4.138	6.154	13.545	13.538	99.72	2801
102	0.295	7.665	4.155	6.374	14.070	13.556	99.79	2656
103	0.299	7.552	4.138	6.659	13.850	13.499	99.76	2349
104	0.434	4.855	3.786	3.353	8.718	13.475	99.82	1772
105	0.288	8.678	4.201	6.237	14.576	13.479	99.74	2289
106	0.271	8.510	4.204	6.938	15.505	13.492	99.76	2225
107	0.303	7.585	4.123	6.005	13.610	13.492	99.80	1967
108	0.276	9.121	4.296	6.957	15.593	13.289	99.69	2715
109	0.270	8.582	4.253	7.192	15.729	13.447	99.66	3006
110	0.275	7.978	4.270	7.733	15.518	13.399	99.71	2536
111	0.272	8.311	4.233	7.220	15.539	13.486	99.75	2294
112	0.279	8.168	4.144	6.483	14.869	13.390	99.70	2894
113	0.299	7.785	4.213	6.308	14.106	13.554	99.68	3147
114	0.285	7.949	4.125	6.525	14.491	13.445	99.70	2928
115	0.290	7.357	4.049	6.103	13.973	13.596	99.65	3440
116	0.298	8.001	4.233	6.410	14.214	13.484	99.67	3247
117	0.298	7.526	4.097	6.066	13.747	13.522	99.64	3505
118	0.300	7.690	4.013	6.038	13.394	12.962	99.63	3626
119	0.303	7.164	3.851	5.531	12.698	12.773	99.54	4527
120	0.303	6.785	3.688	5.250	12.181	12.489	99.50	5018
121	0.312	6.773	3.772	5.583	12.081	12.244	99.70	3014
122	0.314	6.339	3.790	5.406	12.057	12.325	99.69	3051
123	0.307	6.809	3.689	5.431	12.034	12.049	99.73	2702
124	0.314	6.810	3.670	4.787	11.701	11.945	99.70	3011
125	0.295	6.898	3.546	4.743	12.026	11.500	99.71	2918
126	0.296	6.383	3.506	5.237	11.828	11.252	99.66	3348
127	0.298	6.761	3.512	5.315	11.802	11.256	99.68	3226
128	0.280	6.894	3.364	4.813	12.012	10.658	99.71	2836
129	0.262	6.823	3.353	6.097	12.809	10.401	99.69	2942
130	0.254	7.790	3.457	5.660	13.631	10.530	99.48	4016
131	0.256	7.896	3.550	6.084	13.864	10.557	99.04	3613
132	0.254	7.785	3.639	6.504	14.318	10.893	99.49	3935
133	0.269	6.976	3.572	6.161	13.287	11.271	99.53	4226
134	0.262	7.383	3.726	7.014	14.231	11.211	99.63	3491
135	0.283	6.141	3.442	6.434	12.167	11.184	99.67	3087
136	0.281	7.328	3.635	5.641	12.956	11.288	99.65	3449
137	0.283	7.101	3.546	5.451	12.523	11.185	99.60	3875
138	0.273	6.898	3.554	5.719	13.002	11.264	99.62	3734
139	0.283	6.970	3.528	5.154	12.465	11.260	99.60	3902

140	0.281	6.466	3.581	5.335	12.764	11.261	99.65	3463
141	0.282	7.782	3.661	5.102	12.989	11.262	99.56	4281
142	0.282	7.140	3.523	4.915	12.484	11.251	99.55	4416
143	0.291	7.326	3.547	5.158	12.202	11.205	99.58	4145
144	0.286	6.958	3.514	4.929	12.271	11.279	99.62	3720
145	0.292	7.278	3.634	5.257	12.460	11.262	99.66	3364
146	0.312	6.150	3.354	4.564	10.767	11.148	99.68	3136
147	0.305	6.561	3.378	4.304	11.067	11.140	99.66	3365
148	0.289	6.948	3.651	5.723	12.622	11.167	99.69	3108
149	0.287	7.591	3.512	4.759	12.223	11.050	99.67	3284
150	0.276	7.198	3.578	5.289	12.987	11.152	99.66	3392
151	0.289	6.824	3.508	4.937	12.123	11.063	99.62	3728
152	0.276	8.054	3.654	5.485	13.220	11.012	99.63	3615
153	0.287	7.246	3.469	4.715	12.084	10.992	99.66	3363
154	0.311	5.557	3.367	5.183	10.835	10.976	99.68	3172
155	0.312	5.902	3.376	5.222	10.817	11.043	99.66	3402
156	0.304	6.473	3.376	4.880	11.123	10.875	99.63	3700
157	0.323	5.747	3.295	4.010	10.205	10.947	99.68	3150
158	0.311	6.477	3.446	5.064	11.097	10.901	99.49	5042
159	0.314	6.302	3.462	5.064	11.018	10.923	99.58	4158
160	0.306	6.271	3.424	4.864	11.183	10.926	99.59	4047
161	0.328	5.297	3.450	4.688	10.532	10.958	99.61	3847
162	0.334	6.072	3.386	4.072	10.139	10.837	99.59	4089
163	0.260	7.606	3.551	6.073	13.668	10.843	99.28	5629
164	0.285	7.855	3.911	6.124	13.730	12.264	99.56	4264
165	0.310	7.445	3.918	5.543	12.648	12.493	99.61	3839
166	0.315	7.560	4.106	5.297	13.037	12.521	99.46	5285
167	0.303	7.473	3.954	5.310	13.040	12.550	99.47	5148
168	0.330	6.654	3.801	4.957	11.514	12.433	99.57	3478
169	0.338	6.716	3.836	4.647	11.337	12.554	99.61	3236
170	0.331	7.315	3.926	5.306	11.869	12.503	99.65	3277
171	0.319	6.680	3.651	4.728	11.430	11.491	99.67	3554
172	0.314	6.835	3.590	3.760	11.436	11.440	99.61	3843
173	0.321	6.815	3.603	4.054	11.240	11.407	99.62	3780
174	0.311	6.715	3.468	4.125	11.165	11.178	99.53	3865
175	0.300	6.860	3.505	4.913	11.670	10.994	99.53	4255
176	0.329	6.054	3.412	4.479	10.370	10.892	99.67	3278
177	0.326	6.335	3.343	4.383	10.252	10.538	99.67	3464
178	0.313	6.226	3.336	4.303	10.665	10.507	99.63	4665
179	0.317	5.984	3.374	4.412	10.637	10.529	99.64	4662
180	0.325	6.147	4.249	6.003	13.059	13.982	99.83	1707
181	0.305	7.881	4.084	5.464	13.399	13.159	99.57	4194
182	0.343	6.927	4.328	5.161	12.623	14.004	99.74	2599
183	0.319	7.274	4.462	5.780	13.971	14.001	99.78	2213
184	0.293	7.664	4.053	6.203	13.858	13.222	99.69	2994
185	0.317	7.335	4.371	5.770	13.773	13.940	99.77	2292
186	0.318	7.271	4.396	5.911	13.808	13.983	99.78	2203
187	0.309	7.611	4.472	6.103	14.473	13.948	99.83	1710
188	0.318	7.505	4.405	5.901	13.874	13.952	99.76	2217
189	0.311	7.725	4.441	6.275	14.303	14.008	99.81	1873
190	0.317	7.955	4.591	6.319	14.503	14.172	99.80	2017
191	0.322	7.243	4.509	6.018	13.987	14.144	99.80	2010

192	0.326	7.421	4.476	5.859	13.720	14.185	99.78	2167
193	0.302	7.821	4.139	5.802	13.707	13.419	99.70	2974
194	0.325	6.953	4.305	5.373	13.258	14.048	99.77	2246
195	0.345	7.986	4.468	4.841	12.937	14.074	99.68	3193
196	0.318	7.731	4.531	5.822	14.264	14.145	99.79	2100
197	0.320	7.544	4.436	6.280	13.849	13.946	99.83	1637
198	0.335	6.490	3.560	3.961	10.628	11.022	99.69	2721
199	0.327	6.573	3.669	4.514	11.235	11.477	99.74	2631
200	0.361	5.806	3.518	3.775	9.745	11.483	99.71	2855
201	0.298	7.004	3.643	5.280	12.238	11.503	99.66	3349
202	0.283	7.321	3.825	5.990	13.526	11.498	99.42	5100
203	0.308	6.977	3.798	5.214	12.341	11.965	99.48	4995
204	0.299	7.322	3.833	5.604	12.821	12.021	99.55	4505
205	0.304	6.916	3.776	5.508	12.410	12.171	99.42	5797
206	0.325	7.174	3.706	4.918	11.419	12.232	99.57	4289
207	0.294	7.111	3.773	5.637	12.843	12.227	99.57	4267
208	0.287	7.605	3.815	5.592	13.280	12.130	99.55	4488
209	0.292	7.313	3.928	6.016	13.440	12.197	99.56	4381
210	0.293	7.698	3.912	5.765	13.347	12.146	99.51	4862
211	0.293	7.312	3.808	5.718	12.975	12.238	99.52	4718
212	0.289	7.480	3.835	5.626	13.260	12.139	99.56	4363
213	0.297	7.010	3.867	5.967	13.006	12.159	99.55	4463
214	0.297	7.700	3.863	5.213	13.007	12.085	99.53	4638
215	0.313	7.193	3.810	5.004	12.172	12.038	99.58	4205
216	0.299	7.093	3.823	5.851	12.794	12.103	99.65	3421
217	0.340	5.668	3.602	5.216	10.589	12.078	99.70	2961
218	0.317	6.585	3.651	4.786	11.512	11.727	99.60	4004
219	0.310	6.579	3.584	4.839	11.550	11.705	99.61	3921
220	0.304	6.764	3.659	5.068	12.041	11.688	99.55	4493
221	0.306	6.824	3.676	5.137	12.020	11.680	99.62	3722
222	0.312	6.741	3.641	5.084	11.654	11.725	99.58	4199
223	0.305	6.763	3.728	5.524	12.213	11.831	99.62	3802
224	0.308	6.761	3.787	5.731	12.314	11.834	99.65	3424
225	0.277	7.255	3.841	6.710	13.858	11.855	99.63	3569
226	0.290	7.165	3.902	6.083	13.440	11.838	99.64	3502
227	0.279	8.336	4.001	6.343	14.320	11.797	99.62	3552
228	0.278	8.202	4.070	6.393	14.642	12.223	99.54	3950
229	0.267	9.043	4.175	6.825	15.611	12.359	99.46	4229
230	0.266	8.370	4.160	7.407	15.658	12.466	99.29	3718
231	0.266	8.557	4.148	7.077	15.571	12.453	99.60	3910
232	0.293	8.995	4.260	6.251	14.539	13.507	99.64	3314
233	0.310	8.102	4.411	6.186	14.242	13.959	99.62	3713
234	0.317	8.171	4.384	5.819	13.845	13.944	99.60	3957
235	0.315	8.019	4.335	5.648	13.764	13.891	99.53	4598
236	0.320	7.862	4.368	5.735	13.670	13.937	99.53	4612
237	0.318	7.828	4.352	5.824	13.686	13.921	99.54	4552
238	0.320	7.781	4.316	5.698	13.499	13.981	99.48	5102
239	0.327	7.519	4.293	5.550	13.127	13.985	99.55	4481
240	0.322	7.842	4.300	5.765	13.349	13.939	99.58	4177
241	0.326	7.486	4.271	5.697	13.113	13.950	99.58	4144
242	0.343	6.781	4.197	5.197	12.219	13.892	99.65	3513
243	0.349	7.032	4.183	5.169	11.989	13.893	99.69	3062

244	0.344	6.781	4.107	5.160	11.934	13.889	99.64	3540
245	0.340	7.539	4.266	5.360	12.548	13.855	99.56	4398
246	0.332	7.688	4.312	5.257	12.979	13.843	99.51	4828
247	0.327	7.917	4.296	5.255	13.118	13.771	99.52	4767
248	0.318	8.200	4.375	5.793	13.766	13.730	99.57	4201
249	0.309	8.025	4.318	6.072	13.978	13.731	99.63	3692
250	0.313	7.405	4.265	5.986	13.648	13.856	99.61	3817
251	0.306	7.804	4.406	6.291	14.402	13.991	99.64	3453
252	0.310	8.184	4.425	6.235	14.258	13.871	99.67	3154
253	0.314	7.530	4.208	6.173	13.403	14.018	99.65	3370
254	0.328	7.476	4.421	5.521	13.462	14.065	99.58	4155
255	0.333	7.290	4.293	5.714	12.899	13.875	99.65	3489
256	0.338	7.026	4.194	5.380	12.396	13.772	99.56	4340
257	0.338	6.928	4.117	5.444	12.195	13.442	99.63	3663
258	0.331	6.976	4.145	5.324	12.519	13.440	99.66	3338
259	0.327	7.090	4.056	5.106	12.400	13.319	99.63	3639
260	0.321	7.741	4.202	5.730	13.094	13.352	99.63	3622
261	0.312	7.595	4.083	5.938	13.068	13.409	99.62	3776
262	0.302	7.592	4.192	6.133	13.888	13.473	99.58	4146
263	0.311	7.671	4.285	5.932	13.773	13.125	99.55	4411
264	0.302	8.166	4.231	5.829	14.024	13.223	99.53	4554
265	0.437	4.590	3.628	3.395	8.304	11.948	99.70	2989
266	0.487	4.468	3.413	2.610	7.009	11.926	99.72	2747
267	0.533	3.836	3.409	2.860	6.391	11.842	99.77	2280
268	0.509	4.216	3.299	1.972	6.475	11.888	99.79	2124
269	0.511	3.785	3.396	2.695	6.652	11.894	99.78	2190
270	0.295	6.922	3.656	5.615	12.380	11.487	99.50	4955
271	0.287	7.703	3.722	4.929	12.951	11.498	99.52	4639
272	0.337	6.118	3.616	4.357	10.739	11.477	99.59	4063
273	0.340	5.813	3.671	5.050	10.807	11.540	99.61	3820

Tabela C: Conjunto de dados de entrada para validação de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	#60	#55	#31	#29	#15	#21	#20	#02	#01	Refluxo	P topo*	RD	RF
Pontos	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(kg/cm ²)	-	-
1	112.195	116.654	128.931	132.606	133.033	138.889	140.51	155.823	158.384	63.165	0.067	1.626	0.869
2	112.041	116.475	127.967	131.894	132.467	138.866	140.492	155.545	158.284	64.117	0.067	1.701	0.912
3	111.671	116.086	126.889	130.901	131.482	138.668	140.289	155.58	158.294	61.837	0.067	1.699	0.946
4	111.749	116.121	127.255	131.295	131.917	139.087	140.704	155.387	158.395	62.667	0.067	1.750	0.942
5	111.963	116.299	126.753	130.924	131.629	138.971	140.598	155.481	158.383	62.492	0.067	1.750	0.978
6	112.093	116.442	127.571	131.382	131.969	138.753	140.362	155.669	158.556	62.764	0.067	1.659	0.934
7	112.009	116.391	127.098	130.921	131.502	138.833	140.452	155.432	158.43	64.491	0.067	1.698	0.958
8	111.665	115.874	125.793	130.006	130.792	138.952	140.575	154.286	157.351	63.254	0.057	1.776	0.978
9	111.623	115.857	125.812	130.046	130.883	139.036	140.66	154.188	157.272	64.875	0.057	0.980	1.096
10	111.496	115.697	125.007	129.328	130.182	138.985	140.636	153.736	157.017	64.357	0.057	0.979	1.093
11	111.438	115.489	125.165	129.213	130.127	138.743	140.379	153.656	156.85	60.637	0.057	0.980	1.095
12	111.513	115.525	124.924	129.246	130.209	139.123	140.753	153.52	156.755	60.509	0.057	1.775	0.998
13	111.521	115.577	125.057	129.369	130.232	138.937	140.569	153.569	156.835	61.319	0.057	0.979	1.092
14	111.519	115.497	124.622	129.097	130.006	138.86	140.493	153.407	156.721	59.987	0.047	1.703	0.959
15	111.522	115.522	124.844	129.248	130.052	138.844	140.484	153.407	156.779	60.64	0.047	0.978	1.092
16	111.32	115.213	124.271	128.648	129.748	138.93	140.552	152.754	156.055	59.863	0.047	0.979	1.087

17	111.299	115.207	124.212	128.596	129.714	138.928	140.546	152.865	156.242	59.374	0.047	0.978	1.088
18	111.317	115.214	124.982	129.233	130.263	139.04	140.676	152.474	155.77	60.225	0.047	1.569	0.899
19	111.189	115.183	125.879	129.812	130.742	139.094	140.728	152.345	155.521	62.243	0.047	0.980	1.083
20	111.164	115.339	126.757	130.105	131.079	138.91	140.545	152.529	155.47	61.586	0.047	0.981	1.085
21	111.409	116.466	127.144	130.395	131.297	138.955	140.59	152.623	155.478	62.874	0.047	1.308	0.745
22	111.176	115.391	127.218	130.57	131.344	138.706	140.328	152.721	155.605	63.952	0.047	0.981	1.088
23	111.17	115.334	127.171	130.519	131.377	138.937	140.559	153.071	155.196	63.184	0.047	0.986	1.089
24	111.099	115.055	126.496	130.233	131.073	138.671	140.304	152.599	155.442	60.746	0.05	0.982	1.088
25	111.169	115.056	126.428	130.282	131.472	139.731	141.369	152.504	155.304	60.198	0.05	1.831	0.910
26	111.279	115.304	125.748	129.698	130.54	138.743	140.374	152.867	155.715	61.998	0.05	0.982	1.089
27	111.186	115.169	125.285	129.155	130.219	139.062	140.699	152.923	156.069	61.46	0.05	0.980	1.087
28	111.161	115.123	125.869	129.748	130.648	138.797	140.435	152.745	155.723	61.689	0.05	1.613	0.868
29	111.188	115.177	125.581	129.391	130.364	138.89	140.512	152.737	155.659	61.647	0.05	0.981	1.087
30	111.526	115.444	126.14	129.968	130.962	138.884	140.506	152.542	155.045	57.123	0.05	0.984	1.086
31	111.764	115.798	125.89	129.493	130.38	138.76	140.4	153.244	155.921	59.423	0.05	1.427	0.861
32	111.503	115.514	125.1	128.998	130.046	138.862	140.491	152.786	155.59	60.093	0.05	1.530	0.904
33	111.243	115.198	124.754	128.742	129.771	138.635	140.262	152.338	155.125	60.425	0.05	1.577	0.920
34	111.054	115.028	124.559	128.454	129.699	139.009	140.65	152.235	154.929	61.835	0.049	1.613	0.921
35	111.108	115.129	124.794	128.659	129.743	138.743	140.378	152.443	155.17	58.479	0.049	1.524	0.902
36	111.311	115.182	123.791	128.044	129.261	139.027	140.663	151.902	155.071	60.76	0.049	1.746	1.026
37	111.288	115.148	123.876	128.096	129.382	138.918	140.571	152.017	155.181	60.005	0.049	1.630	0.995
38	111.36	115.321	124.584	128.723	129.511	138.517	140.157	152.82	156.113	58.601	0.049	1.524	0.895
39	111.433	115.409	124.905	128.804	129.822	138.822	140.467	152.895	156.172	59.02	0.049	1.514	0.897
40	111.54	115.492	126.036	129.97	130.818	138.789	140.423	153.085	156.097	58.757	0.049	1.569	0.855
41	111.388	115.337	124.961	128.955	130.034	139.016	140.661	152.802	156.044	59.586	0.049	0.979	1.086
42	111.487	115.508	125.466	129.378	130.185	138.491	140.125	153.104	156.183	60.804	0.049	1.418	0.830
43	111.365	115.319	124.785	128.931	129.869	138.69	140.354	152.546	155.756	60.978	0.05	1.630	0.916
44	111.033	114.875	124.373	128.874	130.07	138.94	140.592	151.581	154.356	58.473	0.046	1.897	1.001
45	111.143	114.961	124.063	128.548	129.68	138.828	140.483	151.812	154.955	59.863	0.046	1.852	1.013
46	111.277	115.145	124.323	128.506	129.801	138.959	140.605	151.872	154.776	59.44	0.046	1.663	0.970
47	111.244	115.057	123.558	128.064	129.296	138.811	140.457	151.712	154.572	56.85	0.036	1.882	1.061
48	111.237	115.075	123.94	128.328	129.495	138.697	140.337	151.87	154.694	57.021	0.047	0.982	1.082
49	111.351	115.204	124.313	128.621	129.838	138.885	140.528	151.85	154.719	58.11	0.047	1.720	0.986
50	111.321	115.135	123.457	128.041	129.329	138.869	140.512	151.959	155.054	57.466	0.047	1.808	1.046
51	111.241	115.094	123.143	127.54	128.892	138.857	140.479	151.654	154.569	57.969	0.047	1.818	1.049
52	111.501	115.786	127.8	130.752	131.705	138.991	140.627	151.982	154.089	62.028	0.046	0.986	1.081
53	111.612	115.696	126.478	130.339	131.01	138.163	139.794	153.222	155.553	62.515	0.053	0.985	1.096
54	111.719	115.836	125.882	129.831	130.734	138.852	140.476	153.488	155.966	63.511	0.057	0.984	1.093
55	111.495	115.783	125.743	129.585	130.389	138.515	140.165	153.735	155.686	64.052	0.057	1.629	0.956
56	111.613	115.824	125.594	129.325	130.267	138.986	140.654	153.462	156.079	65.725	0.067	0.983	1.091
57	111.446	115.564	124.09	128.261	129.275	138.971	140.6	153.145	155.997	64.602	0.057	0.982	1.089
58	111.472	115.566	123.998	128.067	129.189	138.765	140.413	153.26	156.308	63.678	0.057	0.981	1.091
59	111.496	115.595	124.88	128.835	129.877	138.941	140.586	153.281	156.113	63.255	0.057	1.767	1.040
60	111.284	115.263	124.051	128.209	129.185	138.67	140.296	152.358	155.333	61.722	0.057	0.981	1.086
61	111.27	115.195	124.122	128.113	129.225	138.725	140.372	152.397	155.362	61.357	0.047	0.981	1.086
62	111.139	115.16	123.901	128.02	129.103	138.68	140.336	152.298	155.203	61.31	0.047	1.757	1.030
63	111.154	115.036	123.948	128.096	129.24	138.779	140.434	151.912	154.855	59.23	0.047	0.981	1.082
64	111.231	115.045	124.235	128.295	129.504	138.875	140.537	151.875	154.894	59.309	0.047	0.981	1.081
65	111.211	115.011	123.181	127.519	128.764	138.783	140.442	151.767	154.836	57.963	0.047	1.872	1.074
66	111.139	114.908	123.228	127.477	128.687	138.588	140.252	151.347	154.328	56.769	0.037	0.981	1.079
67	111.219	114.987	123.669	127.795	129.194	138.972	140.62	151.551	154.581	57.155	0.037	0.980	1.078
68	111.284	115.054	123.759	127.857	129.083	138.803	140.458	151.634	154.606	56.629	0.037	1.713	0.993

69	111.258	115.007	123.368	127.645	129.01	138.854	140.523	151.506	154.663	56.787	0.037	1.691	1.007
70	111.314	115.043	123.897	128.129	129.487	138.819	140.494	151.597	154.764	57.099	0.037	1.824	0.999
71	111.153	114.91	123.057	127.507	128.89	138.781	140.445	151.588	154.735	57.534	0.037	1.860	1.049
72	110.977	114.753	123.347	127.805	129.137	138.762	140.415	151.344	154.421	58.451	0.037	1.779	1.007
73	111.127	114.8	123.195	127.684	129.247	138.777	140.436	151.045	153.433	56.324	0.037	0.984	1.076
74	111.342	115.358	125.332	129.053	130.18	139.217	140.889	152.314	155.471	63.4	0.047	0.980	1.081
75	111.244	115.374	124.954	128.797	129.613	138.079	139.735	153.113	155.272	60.524	0.052	0.986	1.096
76	111.274	115.221	124.216	128.222	129.468	138.924	140.595	152.737	156.042	61.488	0.045	0.979	1.086
77	111.296	115.201	124.32	128.435	129.478	138.645	140.326	152.486	155.478	60.911	0.045	0.981	1.087
78	111.316	115.205	124.41	128.468	129.609	138.99	140.665	152.492	155.556	60.889	0.045	1.622	0.960
79	111.456	115.297	124.76	129.024	130.06	138.843	140.505	152.286	155.168	57.537	0.045	1.854	0.986
80	111.462	115.272	125.04	129.262	130.364	138.939	140.609	152.295	155.053	57.795	0.045	1.725	0.960
81	111.598	115.602	126.108	129.813	130.806	139.139	140.806	152.96	155.733	60.312	0.055	1.497	0.859
82	111.433	115.461	125.501	129.47	130.276	138.532	140.199	152.772	155.487	60.881	0.055	0.983	1.090
83	111.415	115.52	124.515	128.347	129.322	138.8	140.461	152.947	155.771	62.268	0.055	0.982	1.089
84	111.514	115.59	124.639	128.355	129.452	138.926	140.586	152.752	155.487	62.741	0.055	1.539	0.955
85	111.473	115.487	124.535	128.466	129.605	138.763	140.425	152.523	155.294	60.724	0.055	1.699	0.999
86	111.47	115.451	124.951	128.993	129.892	138.71	140.385	152.555	155.399	61.003	0.055	1.739	0.988
87	111.396	115.348	124.635	128.611	129.742	138.848	140.522	152.035	154.677	63.09	0.055	1.757	1.014
88	111.478	115.488	125.379	129.063	130.126	138.987	140.658	152.287	154.716	63.729	0.055	1.592	0.948
89	111.394	115.472	124.928	128.799	129.822	138.697	140.375	152.352	154.782	63.311	0.055	1.670	0.963
90	111.28	115.308	124.071	128.083	129.182	138.604	140.276	152.125	154.708	62.071	0.055	1.714	1.024
91	111.452	115.52	125.299	128.932	130.086	139.009	140.66	152.5	155.027	63.974	0.055	1.577	0.955
92	111.403	115.334	124.222	128.351	129.498	138.965	140.635	152.034	154.678	62.301	0.055	1.875	1.052
93	110.966	114.616	121.379	125.822	127.544	138.824	140.5	150.43	152.455	58.707	0.035	2.760	1.522
94	111.223	115.081	123.241	127.635	128.972	138.881	140.556	151.411	153.093	60.629	0.045	1.975	1.155
95	111.343	115.257	123.899	128.17	129.341	138.983	140.673	151.979	154.618	61.434	0.045	1.841	1.065
96	111.249	115.183	124.363	128.631	129.745	138.768	140.463	151.925	154.419	60.904	0.045	1.874	1.034
97	111.067	114.894	124.2	128.596	129.918	139.189	140.863	151.518	153.643	59.024	0.048	2.128	1.105
98	111.17	114.979	122.334	126.787	128.181	138.874	140.544	151.241	154.082	57.37	0.038	2.016	1.222
99	111.246	115.153	122.776	127.068	128.361	138.745	140.424	151.612	154.458	60.031	0.048	1.835	1.127
100	111.209	115.087	122.252	126.592	128.093	138.956	140.613	151.433	154.257	59.87	0.048	1.898	1.195
101	111.316	115.114	122.919	127.087	128.621	139.823	141.501	151.448	153.565	57.313	0.046	1.978	1.178
102	111.335	115.306	125.1	129.137	130.428	139.831	141.505	152.628	155.561	63.399	0.057	1.642	0.940
103	111.374	115.557	126.515	130.031	131.304	140.265	141.966	153.223	156.018	62.569	0.057	1.571	0.850
104	111.699	115.854	127.763	131.08	132.109	139.818	141.476	153.229	155.706	60.294	0.057	1.508	0.811
105	111.738	115.74	125.417	129.642	130.862	139.974	141.641	153.372	156.221	60.164	0.057	1.715	0.970
106	111.651	115.694	125.479	129.638	130.731	139.626	141.289	153.337	156.153	62.172	0.057	1.642	0.938
107	111.429	115.587	125.459	129.587	130.723	139.939	141.624	153.045	155.876	65.305	0.057	0.982	1.081
108	111.27	115.332	124.49	128.863	130.067	139.399	141.072	152.594	155.172	63.219	0.046	0.983	1.082
109	111.546	115.665	126.141	130.285	131.428	139.928	141.613	153.237	155.909	63.106	0.057	1.719	0.952
110	111.653	115.78	126.536	130.475	131.491	139.881	141.577	153.473	156.192	65.967	0.057	1.595	0.913
111	111.807	115.919	126.587	130.552	131.589	139.788	141.456	153.92	156.837	62.165	0.057	1.668	0.908
112	111.833	115.941	126.354	130.366	131.435	139.668	141.349	153.708	156.506	62.645	0.057	1.578	0.910
113	111.47	115.537	126.069	130.082	131.235	139.935	141.614	153.223	156.08	64.291	0.057	1.674	0.943
114	111.372	115.513	126.247	130.174	131.335	139.832	141.52	153.28	156.027	64.366	0.057	1.623	0.915
115	111.567	115.618	125.923	129.937	131.021	139.717	141.404	153.483	156.462	62.321	0.058	1.735	0.935
116	111.553	115.652	125.784	129.807	130.95	139.888	141.575	153.517	156.495	63.592	0.058	1.569	0.929
117	111.441	115.489	124.89	129.202	130.465	139.772	141.445	153.428	156.638	62.809	0.057	1.674	0.989
118	111.496	115.536	125.82	130.054	131.104	139.81	141.477	153.318	156.242	62.546	0.057	1.706	0.946
119	111.379	115.322	123.983	128.646	129.96	139.698	141.38	152.494	155.564	62.146	0.047	2.131	1.141
120	111.456	115.405	124.159	128.688	129.93	139.934	141.613	153.198	156.657	62.285	0.047	1.781	1.019

121	111.288	115.22	124.309	128.948	130.234	139.977	141.659	152.923	156.397	62.43	0.052	1.779	1.013
122	111.455	115.402	124.976	129.434	130.679	139.862	141.559	152.773	155.962	63.5	0.052	1.728	0.971
123	111.523	115.486	124.974	129.395	130.636	139.835	141.508	153.045	156.268	62.762	0.053	1.712	0.972
124	111.447	115.37	124.583	128.948	130.22	139.689	141.387	152.767	155.956	63.439	0.053	1.739	1.006
125	111.439	115.431	125.177	129.47	130.662	139.941	141.614	153.21	156.477	62.194	0.053	1.749	0.969
126	111.609	115.573	125.154	129.548	130.526	139.517	141.191	153.378	156.525	60.059	0.053	1.750	0.961
127	111.761	115.773	127.086	131.116	132.026	139.775	141.447	153.71	156.821	60.923	0.053	1.634	0.855
128	111.733	115.769	126.311	130.383	131.431	139.744	141.418	154.026	157.178	60.443	0.053	0.980	1.089
129	111.902	116.063	126.918	130.631	131.592	139.725	141.403	154.547	157.706	62.045	0.053	1.415	0.824
130	111.883	116.244	127.504	131.199	132.019	139.661	141.336	154.706	157.774	63.808	0.063	0.981	1.095
131	112.032	116.504	128.601	132.007	132.856	139.914	141.595	154.96	157.884	64.495	0.063	0.981	1.094
132	112.132	117.044	129.142	132.413	133.2	139.887	141.568	154.81	157.521	63.288	0.063	0.983	1.094
133	112.109	116.531	127.487	131.436	132.099	139.339	141.013	155.379	158.293	65.808	0.073	0.982	1.102
134	112.09	116.66	126.952	131.09	131.769	139.246	140.928	155.85	158.783	66.839	0.073	0.982	1.106
135	112.13	116.586	126.648	130.761	131.542	139.383	141.066	155.925	159.043	65.898	0.073	0.980	1.105
136	112.199	116.685	127.143	131.114	131.887	139.42	141.102	155.873	158.893	66.354	0.073	1.700	0.984
137	112.041	116.551	126.501	130.733	131.524	139.313	141.017	155.648	158.817	66.837	0.073	0.980	1.104
138	112.09	116.539	126.326	130.622	131.461	139.235	140.926	155.808	158.785	66.936	0.073	0.981	1.106
139	112.035	116.421	126.314	130.58	131.368	139.187	140.884	155.617	158.724	66.401	0.073	0.980	1.105
140	111.936	116.455	126.108	130.45	131.225	139.353	141.055	155.489	158.739	67.404	0.073	0.980	1.102
141	111.863	116.251	125.908	130.146	131.105	139.379	141.085	155.305	158.367	66.297	0.073	0.981	1.101
142	111.853	116.187	125.981	130.306	131.223	139.319	141.014	155.225	158.358	65.981	0.073	0.980	1.101
143	111.827	116.317	125.843	130.235	130.94	139.379	141.07	155.349	158.655	67.572	0.073	0.979	1.101
144	111.713	116.041	125.15	129.599	130.582	139.441	141.126	154.942	158.226	66.472	0.073	0.979	1.098
145	111.653	115.901	124.78	129.339	130.208	139.153	140.85	154.717	158.029	65.163	0.063	0.979	1.098
146	111.588	115.994	124.856	129.581	130.437	139.31	141.019	154.625	157.88	66.854	0.063	0.979	1.096
147	111.803	116.175	125.312	129.591	130.495	139.245	140.94	155.075	158.312	66.12	0.063	0.980	1.100
148	111.879	116.268	125.445	129.829	130.768	139.278	140.973	155.425	158.722	66.216	0.073	0.979	1.103
149	111.952	116.356	125.66	130.03	130.905	139.236	140.927	155.531	158.847	66.31	0.073	1.739	1.050
150	111.963	116.418	126.427	130.665	131.483	139.237	140.908	155.811	159.03	65.82	0.073	0.980	1.106
151	111.85	116.251	126.598	130.865	131.633	139.179	140.858	155.409	158.58	65.647	0.073	1.711	0.982
152	111.803	116.196	126.479	130.615	131.512	139.434	141.12	155.133	158.175	66.665	0.073	1.871	1.015
153	111.748	116.256	126.949	131.019	131.772	139.246	140.916	155.69	158.599	67.63	0.077	1.793	0.971
154	111.766	116.253	126.669	130.862	131.684	139.395	141.077	155.796	158.766	66.558	0.077	1.691	0.991
155	111.776	116.155	126.538	130.82	131.714	139.577	141.25	155.123	157.832	67.036	0.066	1.913	1.035
156	111.93	116.328	126.004	130.316	131.123	139.398	141.062	155.525	158.473	66.945	0.077	1.805	1.050
157	111.743	116.045	125.811	130.116	130.893	139.141	140.823	155.061	157.974	65.949	0.067	1.896	1.089
158	111.692	115.969	125.304	129.715	130.734	139.417	141.093	154.665	157.832	65.57	0.067	1.971	1.122
159	111.737	115.924	125.211	129.753	130.646	139.3	140.985	154.553	157.729	63.222	0.067	1.963	1.108
160	111.919	116.088	125.422	129.571	130.541	139.234	140.92	154.63	157.59	62.329	0.067	1.803	1.072
161	111.899	116.07	125.566	129.929	130.836	139.233	140.913	154.419	157.317	62.883	0.056	1.982	1.081
162	111.816	116.081	125.963	130.14	131.075	139.294	140.976	154.437	157.389	65.263	0.067	1.789	1.025
163	111.643	115.934	125.796	130.184	131.09	139.256	140.941	154.313	157.223	65.045	0.067	1.740	1.029
164	111.892	116.242	126.72	130.767	131.566	139.303	140.984	154.831	157.54	65.366	0.065	1.688	0.975
165	111.892	116.186	126.601	130.727	131.529	139.209	140.899	154.662	157.475	63.849	0.065	1.763	0.960
166	111.816	116.212	126.741	130.69	131.529	139.441	141.132	154.993	157.39	64.936	0.066	1.616	0.944
167	111.449	115.214	121.93	126.244	128.114	139.484	141.157	151.574	154.494	56.06	0.046	2.267	1.401
168	111.313	115.017	120.814	125.1	127.224	139.322	140.994	150.846	153.575	54.858	0.036	2.690	1.687
169	111.229	114.914	120.222	124.574	127.09	139.353	141.043	150.48	153.516	57.393	0.036	2.892	1.870
170	111.032	114.761	120.328	124.629	127.099	139.309	140.995	150.291	153.17	59.164	0.036	2.975	1.834
171	111.093	114.791	120.357	124.673	127.193	139.456	141.146	150.406	153.315	57.338	0.036	2.779	1.779
172	111.307	115.229	125.288	129.422	130.579	139.439	141.124	152.6	155.597	62.285	0.056	0.981	1.081

173	111.381	115.362	125.842	129.79	130.829	139.199	140.888	152.844	155.824	63.036	0.056	1.548	0.882
174	111.432	115.274	124.084	128.534	129.754	139.297	141.001	152.564	155.621	59.788	0.046	1.866	1.051
175	111.495	115.346	123.937	128.568	129.801	139.221	140.913	152.569	155.556	58.565	0.046	1.930	1.071
176	111.3	115.164	123.419	127.971	129.295	139.176	140.869	152.345	155.694	60.787	0.046	1.975	1.095
177	112.16	116.976	128.755	132.327	132.654	137.748	139.438	156.618	159.375	68.863	0.087	0.983	1.123

* Pressão manométrica

Tabela D: Conjunto de dados de entrada e saída (TOL e não-ARO) para validação de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	VF	Destilado	VM	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
Pontos	-	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	0.273	8.289	4.228	7.33	15.505	13.477	99.75	2294
2	0.283	7.93	4.183	6.965	14.792	13.485	99.70	2894
3	0.295	7.94	4.211	6.34	14.268	13.491	99.68	3147
4	0.288	7.7	4.117	6.416	14.295	13.472	99.70	2928
5	0.299	7.702	4.125	6.146	13.784	13.476	99.65	3440
6	0.291	8.103	4.194	6.397	14.401	13.445	99.67	3247
7	0.294	7.927	4.135	6.039	14.054	13.459	99.64	3505
8	0.298	7.165	3.882	5.673	13.012	12.725	99.63	3626
9	0.006	7.332	3.826	5.468	12.968	12.755	99.54	4527
10	0.006	6.86	3.762	4.904	12.044	12.524	99.50	5018
11	0.006	6.587	3.728	5.246	12.026	12.229	99.70	3014
12	0.305	6.766	3.667	5.087	12.026	12.007	99.69	3051
13	0.006	6.959	3.678	5.086	12.242	11.991	99.73	2702
14	0.300	6.728	3.583	5.269	11.955	11.461	99.70	3011
15	0.006	6.828	3.578	5.14	12.091	11.492	99.71	2918
16	0.006	6.322	3.48	4.881	11.436	11.256	99.66	3348
17	0.006	6.613	3.503	4.897	11.616	11.229	99.68	3226
18	0.282	6.858	3.375	5.008	11.974	10.763	99.71	2836
19	0.006	7.031	3.358	5.653	12.645	10.628	99.69	2942
20	0.006	7.766	3.459	5.921	13.651	10.475	99.48	4016
21	0.246	8.038	3.478	5.996	14.117	10.514	99.04	3613
22	0.006	7.601	3.582	6.638	14.251	11.034	99.49	3935
23	0.006	7.578	3.663	5.903	14.07	11.297	99.53	4226
24	0.006	6.666	3.58	6.601	13.512	11.262	99.63	3491
25	0.277	6.146	3.429	6.098	12.373	11.255	99.67	3087
26	0.006	7.277	3.577	5.515	12.946	11.244	99.65	3449
27	0.006	6.869	3.547	5.538	12.448	11.231	99.60	3875
28	0.274	6.97	3.552	6.092	12.95	11.246	99.62	3734
29	0.006	7.054	3.539	5.557	12.631	11.233	99.60	3902
30	0.006	6.642	3.556	5.898	12.466	11.243	99.65	3463
31	0.284	7.873	3.703	5.257	13.057	11.236	99.56	4281
32	0.289	7.366	3.602	5.2	12.471	11.268	99.55	4416
33	0.291	7.126	3.553	5.183	12.217	11.236	99.58	4145
34	0.290	6.969	3.541	5.068	12.203	11.242	99.62	3720
35	0.292	7.377	3.636	5.11	12.471	11.243	99.66	3364
36	0.311	6.36	3.372	4.379	10.826	11.104	99.68	3136
37	0.307	6.784	3.405	4.328	11.107	11.055	99.66	3365
38	0.289	7.304	3.6	5.009	12.44	11.133	99.69	3108
39	0.289	7.312	3.573	4.865	12.347	11.074	99.67	3284
40	0.276	7.074	3.585	5.867	12.977	11.099	99.66	3392

41	0.006	7.057	3.49	4.999	12.22	10.966	99.62	3728
42	0.273	7.765	3.62	5.505	13.27	11.008	99.63	3615
43	0.288	6.759	3.468	5.213	12.034	11.019	99.66	3363
44	0.301	5.777	3.29	4.887	10.946	10.958	99.68	3172
45	0.305	5.964	3.33	4.883	10.907	11.048	99.66	3402
46	0.301	6.54	3.37	4.492	11.206	10.875	99.63	3700
47	0.323	5.787	3.318	4.505	10.265	10.892	99.49	5042
48	0.006	6.343	3.415	4.585	11.011	10.893	99.58	4158
49	0.305	6.34	3.372	4.556	11.052	10.902	99.59	4047
50	0.324	6.04	3.38	4.271	10.442	10.92	99.61	3847
51	0.331	5.923	3.397	3.81	10.264	10.769	99.59	4089
52	0.006	7.83	3.572	5.958	13.775	10.864	99.28	5629
53	0.006	7.665	3.901	5.7	13.537	12.154	99.56	4264
54	0.006	7.169	3.904	5.438	12.657	12.49	99.61	3839
55	0.312	7.678	4.079	5.465	13.084	12.51	99.46	5285
56	0.006	7.814	3.945	5.059	12.904	12.495	99.47	5148
57	0.006	6.783	3.846	4.705	11.529	12.536	99.57	4255
58	0.006	6.998	3.865	4.566	11.348	12.528	99.61	3865
59	0.323	7.063	3.876	4.791	12.008	12.483	99.65	3478
60	0.006	6.864	3.635	4.791	11.429	11.539	99.67	3236
61	0.006	6.695	3.62	4.894	11.388	11.517	99.61	3843
62	0.324	6.533	3.615	4.64	11.147	11.48	99.62	3780
63	0.006	6.413	3.49	4.822	11.136	10.994	99.53	4665
64	0.006	6.609	3.502	4.66	11.474	10.976	99.53	4662
65	0.334	5.883	3.426	4.433	10.254	11.013	99.67	3277
66	0.006	6.092	3.314	4.028	10.238	10.467	99.67	3278
67	0.006	6.36	3.341	4.197	10.62	10.483	99.63	3464
68	0.319	6.161	3.387	4.574	10.627	10.554	99.64	3554
69	0.316	6.184	3.28	3.901	10.385	10.457	99.56	4417
70	0.315	5.786	3.328	4.661	10.561	10.554	99.61	3855
71	0.328	5.625	3.271	4.395	9.968	10.461	99.59	4138
72	0.318	5.902	3.317	4.353	10.432	10.501	99.56	4398
73	0.007	5.311	3.251	4.213	9.628	10.513	99.54	4643
74	0.006	6.89	3.533	4.927	12.47	10.985	99.29	6767
75	0.006	7.713	3.957	4.744	12.773	11.241	99.36	6263
76	0.006	7.537	3.689	4.439	12.016	11.287	99.48	5203
77	0.006	6.998	3.651	5.149	11.888	11.334	99.63	3638
78	0.305	6.932	3.574	4.666	11.708	11.243	99.72	2815
79	0.311	6.063	3.54	5.207	11.396	11.242	99.77	2321
80	0.304	6.479	3.54	5.209	11.637	11.176	99.77	2258
81	0.282	7.473	3.677	5.55	13.02	11.187	99.57	4114
82	0.006	7.653	3.681	5.179	12.709	11.156	99.55	4398
83	0.006	7.894	3.787	4.573	12.35	11.671	99.62	3758
84	0.306	7.634	3.762	4.785	12.302	11.748	99.58	4136
85	0.316	6.91	3.717	4.956	11.76	11.743	99.69	3057
86	0.311	6.725	3.68	5.256	11.835	11.697	99.73	2701
87	0.311	6.686	3.6	4.985	11.588	11.748	99.71	2878
88	0.293	7.396	3.647	5.139	12.429	11.778	99.66	3367
89	0.301	7.075	3.699	5.072	12.271	11.816	99.68	3164
90	0.317	6.897	3.659	4.727	11.548	11.821	99.63	3659
91	0.297	7.474	3.669	4.946	12.347	11.79	99.61	3854
92	0.320	6.269	3.573	4.727	11.171	11.757	99.66	3325

93	0.425	4.176	3.215	3.019	7.572	11.527	99.83	1709
94	0.343	5.832	3.424	4.113	9.977	11.521	99.75	2442
95	0.320	6.263	3.461	4.249	10.823	11.528	99.83	1700
96	0.311	6.153	3.473	4.85	11.154	11.528	99.82	1786
97	0.326	5.398	3.394	4.676	10.396	11.487	99.68	3192
98	0.360	5.693	3.384	3.468	9.392	11.477	99.76	2363
99	0.345	6.284	3.526	4.242	10.232	11.532	99.75	2528
100	0.357	6.038	3.428	3.367	9.589	11.459	99.79	2143
101	0.361	5.806	3.518	3.775	9.745	11.483	99.71	2855
102	0.298	7.004	3.643	5.28	12.238	11.503	99.66	3349
103	0.283	7.321	3.825	5.99	13.526	11.498	99.42	5100
104	0.269	7.63	3.811	6.5	14.19	11.508	99.45	3913
105	0.308	6.977	3.798	5.214	12.341	11.965	99.48	4995
106	0.299	7.322	3.833	5.604	12.821	12.021	99.55	4505
107	0.006	6.916	3.776	5.508	12.41	12.171	99.42	5797
108	0.006	7.174	3.706	4.918	11.419	12.232	99.57	4289
109	0.294	7.111	3.773	5.637	12.843	12.227	99.57	4267
110	0.287	7.605	3.815	5.592	13.28	12.13	99.55	4488
111	0.292	7.313	3.928	6.016	13.44	12.197	99.56	4381
112	0.293	7.698	3.912	5.765	13.347	12.146	99.51	4862
113	0.293	7.312	3.808	5.718	12.975	12.238	99.52	4718
114	0.289	7.48	3.835	5.626	13.26	12.139	99.56	4363
115	0.297	7.01	3.867	5.967	13.006	12.159	99.55	4463
116	0.297	7.7	3.863	5.213	13.007	12.085	99.53	4638
117	0.313	7.193	3.81	5.004	12.172	12.038	99.58	4205
118	0.299	7.093	3.823	5.851	12.794	12.103	99.65	3421
119	0.340	5.668	3.602	5.216	10.589	12.078	99.70	2961
120	0.317	6.585	3.651	4.786	11.512	11.727	99.60	4004
121	0.310	6.579	3.584	4.839	11.55	11.705	99.61	3921
122	0.304	6.764	3.659	5.068	12.041	11.688	99.55	4493
123	0.306	6.824	3.676	5.137	12.02	11.68	99.62	3722
124	0.312	6.741	3.641	5.084	11.654	11.725	99.58	4199
125	0.305	6.763	3.728	5.524	12.213	11.831	99.62	3802
126	0.308	6.761	3.787	5.731	12.314	11.834	99.65	3424
127	0.277	7.255	3.841	6.71	13.858	11.855	99.63	3569
128	0.006	7.165	3.902	6.083	13.44	11.838	99.64	3502
129	0.279	8.336	4.001	6.343	14.32	11.797	99.62	3552
130	0.006	8.202	4.07	6.393	14.642	12.223	99.54	3950
131	0.006	9.043	4.175	6.825	15.611	12.359	99.46	4229
132	0.006	8.37	4.16	7.407	15.658	12.466	99.29	3718
133	0.006	8.995	4.26	6.251	14.539	13.507	99.64	3314
134	0.006	8.102	4.411	6.186	14.242	13.959	99.62	3713
135	0.006	8.171	4.384	5.819	13.845	13.944	99.60	3957
136	0.308	8.214	4.376	6.142	14.188	13.966	99.60	3910
137	0.006	8.019	4.335	5.648	13.764	13.891	99.53	4598
138	0.006	7.862	4.368	5.735	13.67	13.937	99.53	4612
139	0.006	7.828	4.352	5.824	13.686	13.921	99.54	4552
140	0.006	7.781	4.316	5.698	13.499	13.981	99.48	5102
141	0.006	7.519	4.293	5.55	13.127	13.985	99.55	4481
142	0.006	7.842	4.3	5.765	13.349	13.939	99.58	4177
143	0.006	7.486	4.271	5.697	13.113	13.95	99.58	4144
144	0.006	6.781	4.197	5.197	12.219	13.892	99.65	3513

145	0.006	7.032	4.183	5.169	11.989	13.893	99.69	3062
146	0.006	6.781	4.107	5.16	11.934	13.889	99.64	3540
147	0.006	7.539	4.266	5.36	12.548	13.855	99.56	4398
148	0.006	7.688	4.312	5.257	12.979	13.843	99.51	4828
149	0.327	7.917	4.296	5.255	13.118	13.771	99.52	4767
150	0.006	8.2	4.375	5.793	13.766	13.73	99.57	4201
151	0.309	8.025	4.318	6.072	13.978	13.731	99.63	3692
152	0.313	7.405	4.265	5.986	13.648	13.856	99.61	3817
153	0.306	7.804	4.406	6.291	14.402	13.991	99.64	3453
154	0.310	8.271	4.382	6.081	14.114	13.985	99.67	3154
155	0.316	7.318	4.272	6.033	13.521	14	99.65	3370
156	0.323	7.763	4.316	5.545	13.349	14.014	99.58	4155
157	0.327	7.395	4.208	5.521	12.872	14.018	99.65	3489
158	0.338	6.978	4.138	5.251	12.258	13.754	99.56	4340
159	0.338	6.889	4.122	5.464	12.21	13.525	99.63	3663
160	0.336	7.421	4.193	5.276	12.483	13.381	99.66	3338
161	0.332	6.756	4.108	5.583	12.381	13.388	99.63	3639
162	0.319	7.492	4.171	5.7	13.085	13.406	99.63	3622
163	0.318	7.67	4.125	5.615	12.961	13.342	99.62	3776
164	0.308	7.963	4.254	5.965	13.79	13.445	99.58	4146
165	0.308	7.471	4.225	6.058	13.727	13.174	99.55	4411
166	0.308	8.172	4.313	6.023	13.991	13.204	99.53	4554
167	0.416	5.257	3.541	3.061	8.505	11.919	99.70	2989
168	0.491	4.42	3.458	2.657	7.046	11.888	99.72	2747
169	0.525	4.118	3.343	2.227	6.368	11.911	99.77	2280
170	0.509	3.998	3.303	2.518	6.487	11.894	99.79	2124
171	0.502	4.246	3.332	2.167	6.633	11.799	99.78	2190
172	0.006	7.011	3.653	5.348	12.301	11.475	99.50	4955
173	0.289	7.399	3.748	5.692	12.978	11.452	99.52	4639
174	0.330	6.172	3.616	4.793	10.958	11.519	99.59	4063
175	0.337	5.974	3.627	4.926	10.768	11.529	99.61	3820
176	0.341	5.832	3.591	4.345	10.522	11.518	99.57	4217
177	0.006	9.257	4.668	6.698	16.009	14.264	99.47	4293

APÊNDICE D

Conjunto de dados de planta estacionários da FT-2

Os conjuntos de dados de entrada e saída de usados para construção e validação dos modelos de planta para predição de TOL e não-ARO da FT-2 vistos no capítulo 5 são mostrados nas Tabelas A, B, C e D deste apêndice:

Tabelas A e B: Conjunto de dados de planta estacionários usados na construção dos modelos para predição de tolueno e não-ARO.

Tabelas C e D: Conjunto de dados de planta usados na validação dos modelos construídos a partir dos dados das Tabelas A e B deste apêndice e também a partir dos dados das Tabelas A e B do Apêndice B.

Tanto os dados da Tabela A quanto da Tabela B são utilizados para gerar a equação matemática que relaciona as entradas e as saídas do modelo, sendo que as entradas são: as temperaturas, a pressão de topo, as razões entre vazões e as vazões (Tabelas A e B), e as saídas são as composições de topo de TOL e não-ARO (Tabela B).

Tabela A: Conjunto de dados de entrada para construção de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	#63	#58	#37	#34	#29	#22	#02	#01	P topo *	RD	RF	DF	DB
Pontos	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(kg/cm ²)	-	-	-	-
1	114.31	113.42	122.95	125.91	129.74	142.36	103.01	156	0.122	1.799	1.157	0.643	1.541
2	114.43	113.6	123.22	126.03	129.32	141.9	103.09	155.76	0.132	1.785	1.105	0.619	1.476
3	114.42	113.52	123.1	126.18	129.89	141.83	103.96	157.1	0.122	1.852	1.1	0.594	1.34
4	114.39	113.63	123.18	126.18	129.78	141.9	104.21	157.46	0.122	1.77	1.073	0.606	1.387
5	114.31	113.48	123.03	126.25	129.74	141.67	104.15	157.35	0.122	1.78	1.075	0.604	1.339
6	114.2	113.31	123.03	126.29	129.72	141.67	104.08	157.47	0.122	1.716	1.074	0.626	1.403
7	114.34	113.43	123.55	126.62	129.93	142.28	103.95	157.26	0.122	1.703	1.051	0.617	1.424

8	114.2	113.27	123.62	126.86	130.52	142.41	103.81	157.14	0.122	1.697	1.05	0.619	1.353
9	114.23	113.4	123.46	126.61	130.14	141.75	104.04	157.52	0.132	1.731	1.044	0.603	1.321
10	114.44	113.6	123.61	126.89	130.32	141.9	103.79	157.06	0.132	1.812	1.042	0.575	1.24
11	114.31	113.44	123.69	126.9	130.1	142.06	103.52	157.1	0.132	1.749	1.03	0.589	1.333
12	114.44	113.6	123.75	126.89	130.17	141.98	103.75	156.98	0.132	1.842	1.026	0.557	1.225
13	113.18	112.31	125.77	128.9	132.58	144.8	102.48	155.82	0.088	1.163	0.944	0.812	2.463
14	113.95	113.06	122.13	125.34	129.42	141.9	102.92	155.51	0.12	2.06	1.212	0.588	1.209
15	113.88	112.96	121.91	125.02	128.78	141.8	102.75	156.46	0.12	1.894	1.218	0.643	1.481
16	114.31	113.42	122.63	125.66	129.41	142.14	103.23	156.88	0.121	1.86	1.171	0.63	1.426
17	114.08	113.24	122.47	125.69	129.37	141.97	103.07	156.8	0.121	2.248	1.182	0.526	1.128
18	113.99	113.08	122.41	125.38	128.91	141.67	102.76	156.63	0.121	1.92	1.178	0.614	1.37
19	114.18	113.42	122.23	125.02	128.11	141.44	103.16	157.11	0.131	1.931	1.167	0.604	1.51
20	114.19	113.38	122.75	125.98	129.43	141.9	103.37	156.91	0.121	1.887	1.119	0.593	1.3
21	114.22	113.36	123.01	126.26	130.01	141.74	103	155.72	0.121	1.856	1.117	0.602	1.258
22	114.16	113.31	122.91	125.99	129.51	141.74	102.99	155.75	0.131	1.91	1.124	0.589	1.304
23	114.22	113.36	123.7	126.59	129.47	141.67	102.71	156.31	0.131	1.68	1.05	0.625	1.458
24	114.5	113.68	123.23	126.62	129.8	141.52	103.51	157.14	0.139	1.931	1.053	0.545	1.201
25	114.58	113.86	123.73	126.77	130.18	142.01	103.85	157.51	0.139	1.802	1.055	0.585	1.286
26	114.64	113.75	123.1	126.18	129.53	141.67	103.03	156.34	0.129	2.016	1.134	0.563	1.245
27	114.75	113.94	123.11	126.18	129.61	142.21	103.6	157.14	0.129	1.804	1.136	0.63	1.437
28	113.68	112.72	120.98	123.87	127.91	143.05	155.07	155.56	0.107	2.337	1.426	0.61	1.434
29	113.72	112.83	120.98	123.69	127.55	143.43	155.26	156.18	0.107	2.085	1.42	0.681	1.833
30	113.83	112.91	122.05	125.11	129.08	143.13	155.26	156.22	0.117	2.179	1.232	0.565	1.265
31	114.08	113.31	122.66	125.94	131.01	142.82	155.76	156.47	0.116	1.936	1.179	0.609	1.413
32	114.02	113.2	122.82	126.1	131.17	142.97	155.36	155.96	0.116	1.913	1.169	0.611	1.415
33	114.12	113.38	123.46	126.9	131.34	143.29	155.91	157.03	0.125	1.819	1.086	0.597	1.369
34	114.12	113.34	123.61	127.07	131.58	143.37	155.64	156.68	0.125	1.88	1.085	0.577	2.586
35	114.12	113.34	123.31	126.58	130.73	142.82	155.66	156.8	0.125	1.751	1.099	0.628	1.451
36	114.2	113.42	123.41	126.65	130.66	142.83	155.72	156.78	0.125	1.835	1.097	0.597	1.323
37	113.99	113.08	123.61	127.01	131.45	143.37	155.07	155.68	0.115	1.909	1.094	0.573	1.272
38	114.04	113.35	123.38	126.61	130.72	142.98	155.47	156.11	0.125	1.798	1.099	0.611	1.372
39	114.1	113.27	124.13	127.55	132.18	143.97	155.28	155.9	0.115	1.8	1.091	0.606	1.466
40	114.14	113.27	123.26	126.37	130.41	142.82	155.55	156.46	0.125	1.757	1.094	0.623	1.434
41	114.04	113.2	124.01	127.41	131.78	143.06	154.79	155.16	0.115	1.846	1.097	0.594	1.246
42	114.03	113.24	123.37	126.77	130.89	143.21	155.7	156.84	0.125	1.869	1.095	0.586	1.275
43	114.2	113.39	123.43	126.9	131.06	143.13	155.84	156.55	0.125	1.985	1.091	0.55	1.174
44	114.39	113.6	123.66	126.83	130.81	143.06	155.91	156.74	0.125	1.794	1.095	0.611	1.373
45	114.24	113.42	123.62	126.83	130.81	142.98	155.47	156.34	0.125	1.732	1.095	0.632	1.4
46	114.14	113.39	123.69	127.13	131.46	143.22	155.66	155.87	0.125	1.854	1.095	0.591	1.269
47	114.2	113.34	123.58	126.9	131.09	143.13	155.44	155.9	0.125	1.804	1.099	0.609	1.324
48	114.06	113.34	122.51	125.45	127.95	135.43	155.66	156.08	0.123	1.602	1.107	0.691	1.575
49	113.95	113.16	121.91	124.79	127.93	141.6	155.43	156.48	0.113	2.114	1.248	0.59	1.306
50	114.03	113.18	121.94	125.09	128.16	141.9	155.36	156.31	0.113	2.151	1.254	0.583	1.309
51	113.83	112.94	121.94	125.01	128.1	141.83	155.03	155.94	0.113	2.224	1.252	0.563	1.198
52	113.99	113.06	122.1	125.02	128.05	141.83	155.11	155.83	0.123	2.014	1.243	0.617	1.392
53	113.8	113.02	122.01	124.9	127.93	142.21	155.11	155.86	0.12	2.266	1.254	0.553	1.247
54	114.16	113.35	122.23	125.13	128.29	141.6	155.43	156.4	0.12	2.215	1.259	0.569	1.23
55	113.91	113.1	121.95	124.91	127.97	141.53	155.48	156.48	0.12	2.233	1.251	0.56	1.237
56	113.99	113.16	122.15	125.09	128.18	142.13	155.18	156.04	0.11	2.247	1.248	0.556	1.221
57	113.92	113	122.1	125.1	128.24	141.92	154.83	155.44	0.11	2.309	1.253	0.543	1.165
58	113.99	113.1	122.17	125.21	128.45	142.14	155.04	155.7	0.11	2.189	1.254	0.573	1.226
59	114.03	113.18	122.25	125.38	128.7	141.98	155.23	155.66	0.11	2.122	1.25	0.589	1.233

60	113.2	112.24	120.49	123.22	126.39	141.98	154.28	155.23	0.105	2.557	1.481	0.579	1.324
61	113.42	112.54	120.77	123.69	126.97	141.45	154.43	155.15	0.105	2.699	1.484	0.55	1.149
62	113.75	112.82	121.54	124.45	127.54	142.29	155.02	155.92	0.105	2.334	1.321	0.566	1.279
63	113.5	112.54	121.39	124.41	127.62	142.51	154.35	155.02	0.105	2.128	1.335	0.627	1.392
64	113.71	112.9	121.98	125.14	128.42	142.51	154.9	155.31	0.105	2.163	1.257	0.581	1.247
65	114.04	113.18	123.22	126.63	129.66	142.51	155.27	155.63	0.116	1.917	1.114	0.581	1.191
66	114.19	113.32	123.54	126.78	129.77	141.98	155.46	155.78	0.116	2.014	1.075	0.534	1.081
67	114.46	113.64	124.34	127.59	131.34	145.11	103.24	157.2	0.126	1.746	1.023	0.586	1.274
68	114.46	113.67	124.17	127.41	131.28	145.03	103.28	157.32	0.126	1.7	1.026	0.604	1.291
69	114.27	113.48	124.34	127.7	131.53	145.2	103.01	156.95	0.126	1.691	1.024	0.606	1.311
70	114.34	113.55	124.35	127.58	131.58	145.57	103.2	157.08	0.126	1.738	1.028	0.591	1.332
71	114.38	113.6	124.03	127.33	131.12	144.8	103.24	157.08	0.126	1.749	1.021	0.584	1.243
72	114.4	113.59	124.3	127.51	131.26	145.03	103.24	157.27	0.126	1.764	1.023	0.58	1.285
73	114.5	113.67	124.34	127.7	131.53	145.03	103.16	157.07	0.126	1.794	1.028	0.573	1.239
74	114.1	113.16	122.3	125.7	130.4	145.19	103.16	156.19	0.115	2.13	1.239	0.581	1.354
75	113.51	112.43	122.82	126.43	130.92	144.89	103.16	155.14	0.095	1.878	1.072	0.571	1.424
76	112.92	111.82	125.26	128.35	132.25	145.19	153.22	153.96	0.075	1.323	0.829	0.627	1.317
77	115.16	118.87	127.74	130.16	133.65	145	152.36	153.4	0.054	1.169	0.737	0.63	1.569
78	112.91	111.88	126.37	129.18	132.76	144.96	153	153.44	0.064	1.634	0.902	0.552	1.123
79	114.84	118.99	130.49	133.34	137.3	146.95	153.51	154.07	0.075	1.641	0.936	0.571	1.298
80	114.39	113.6	124.13	127.38	131.06	145.04	156.12	157.03	0.126	1.739	1.029	0.592	1.326
81	114.96	115.74	133.74	136.88	141.51	150.08	156.99	158.23	0.136	1.524	1.031	0.677	1.704
82	114.42	113.6	124.01	127.19	130.46	143.89	156.1	156.95	0.126	1.631	1.027	0.63	1.396
83	114.3	113.44	123.59	126.74	130.2	143.43	156.04	157.19	0.126	1.816	1.06	0.584	1.315
84	113.54	112.58	119.09	121.14	127.26	143.51	154.78	155.99	0.096	2.972	1.632	0.549	1.313
85	113.54	112.55	119.09	121.26	127.22	142.51	154.67	155.67	0.096	2.804	1.525	0.544	1.225
86	114.27	113.42	123.77	127.01	130.54	142.29	103.49	156.66	0.128	1.666	1.023	0.614	1.366
87	114.92	114.07	124.85	127.81	130.9	142.14	104.16	157.56	0.135	1.555	0.965	0.621	1.413
88	114.3	113.42	123.45	126.57	130.3	142.44	104.11	157.34	0.122	1.847	1.046	0.566	1.263
89	114.24	113.46	123.5	126.69	130.88	142.98	155.66	156.63	0.125	1.823	1.096	0.601	1.371
90	114.06	113.31	123.47	126.9	131.17	143.37	155.62	156.4	0.125	1.928	1.1	0.571	1.268
91	113.8	113.03	121.94	124.66	127.53	141.98	155.11	156	0.123	2.061	1.25	0.607	1.415
92	113.04	111.98	118.49	120.41	125.65	144.04	152.68	152.31	0.089	3.568	1.984	0.556	1.231
93	114.14	113.35	123.22	126.33	130.16	143.05	155.7	156.46	0.135	1.814	1.094	0.603	1.463
94	114.27	113.42	124.23	127.74	131.38	142.06	103.03	155.46	0.124	1.798	1.026	0.571	1.123
95	114.42	113.63	123.75	127.01	130.73	141.98	103.52	156.15	0.129	1.781	1.033	0.58	1.215
96	114.56	113.71	123.82	126.97	130.36	142.14	103.53	156.64	0.129	1.735	1.032	0.595	1.319
97	114.48	113.63	123.83	126.97	130.33	142.29	103.49	156.66	0.131	1.685	1.033	0.613	1.369
98	114.3	113.44	123.82	126.93	130.49	141.9	103.16	156.22	0.127	1.725	1.027	0.595	1.248
99	114.11	113.27	124.14	127.43	131.12	142.67	102.95	155.84	0.12	1.723	1.025	0.595	1.279
100	114.23	113.39	123.82	127.05	130.72	142.44	103.09	156.26	0.128	1.753	1.032	0.589	1.254
101	114.12	113.34	123.98	127.15	130.9	142.67	102.91	156.04	0.128	1.786	1.026	0.575	1.231
102	114.08	113.27	123.69	127.11	130.98	142.9	102.88	156.07	0.127	1.991	1.029	0.517	1.115
103	114.48	113.74	124.66	127.83	131.29	142.82	103.93	157.27	0.133	1.643	0.96	0.584	1.309
104	114.66	113.92	124.79	127.94	131.29	142.52	104	157.34	0.135	1.613	0.958	0.594	1.284
105	114.78	114	124.73	127.91	131.16	142.14	104.25	157.56	0.136	1.55	0.963	0.621	1.358
106	114.75	113.96	124.93	127.89	131.09	142.51	104.15	157.62	0.135	1.587	0.963	0.607	1.407
107	114.59	113.82	124.06	126.79	129.28	141.67	155.71	156.26	0.135	1.661	1.025	0.617	1.412
108	114.3	113.52	124.02	126.75	129.2	142.21	155.42	155.92	0.135	1.628	1.026	0.63	1.5
109	114.08	113.34	123.87	126.61	129.01	141.83	155.16	155.67	0.135	1.723	1.035	0.601	1.338
110	113.94	113.23	123.74	126.46	128.84	141.83	155.2	155.82	0.133	1.649	1.027	0.623	1.44
111	113.98	113.38	123.73	126.5	129.02	142.29	155.38	155.78	0.133	1.678	1.03	0.614	1.43

112	114.19	113.46	123.7	126.53	129.05	141.59	155.23	156.11	0.133	1.724	1.056	0.612	1.373
113	114.11	113.35	123.55	126.31	128.84	142.28	155.2	155.96	0.133	1.669	1.057	0.633	1.507
114	114.15	113.44	123.41	126.17	128.9	141.82	155.75	156.76	0.133	1.806	1.056	0.585	1.361
115	114.15	113.52	123.34	126.17	128.84	141.84	155.79	156.72	0.133	1.844	1.058	0.574	1.344
116	114.23	113.38	123.62	126.71	129.34	141.67	155.67	156.32	0.125	1.877	1.053	0.561	1.212
117	114.11	113.34	123.41	126.31	128.9	141.44	155.6	156.28	0.128	1.852	1.054	0.569	1.293
118	114.08	113.2	123.41	126.43	129.02	142.44	155.42	156.26	0.129	1.793	1.06	0.591	1.368
119	113.79	113.06	123.63	126.9	129.72	142.05	154.84	155.31	0.124	1.889	1.059	0.561	1.159
120	113.87	113.06	123.55	126.65	129.38	142.21	154.95	155.71	0.124	1.798	1.057	0.588	1.281
121	114.15	113.35	123.66	126.53	129.21	142.14	155.02	155.67	0.125	1.736	1.061	0.611	1.381
122	114.11	113.3	123.42	126.49	129.33	141.9	155.16	155.62	0.125	1.767	1.075	0.608	1.31
123	114.19	113.38	123.55	126.5	129.28	141.9	155.08	155.59	0.125	1.868	1.079	0.578	1.263
124	114.22	113.36	123.47	126.45	129.22	142.21	155.52	156.31	0.125	1.745	1.075	0.616	1.378
125	114.24	113.46	123.43	126.25	128.98	142.36	155.22	155.75	0.125	1.587	1.072	0.675	1.579
126	114.26	113.59	123.43	126.27	128.76	139.7	155.48	155.23	0.136	2.151	1.045	0.486	1.026
127	114.22	113.44	123.73	126.38	128.73	141.67	155.08	155.4	0.135	1.823	1.049	0.575	1.363
128	114.24	113.39	123.66	126.3	128.7	141.9	155.23	155.83	0.135	1.593	1.036	0.65	1.583
129	114.18	113.36	123.54	126.19	128.64	142.12	155.26	155.95	0.135	1.585	1.043	0.658	1.629
130	114.18	113.36	123.65	126.49	128.94	142.21	155.11	155.66	0.135	1.651	1.041	0.63	1.477
131	113.99	113.28	123.89	126.59	128.89	141.75	154.94	155.51	0.125	1.443	0.998	0.692	1.587
132	113.92	113.18	123.73	126.41	128.76	141.75	154.95	155.44	0.125	1.604	1	0.624	1.456
133	113.86	113.11	123.69	126.42	128.8	141.76	154.83	155.4	0.125	1.617	1.002	0.62	1.424
134	113.74	113	123.9	126.67	129.01	142.36	154.6	155.18	0.125	1.508	0.976	0.647	1.487
135	113.83	112.98	123.91	126.57	128.88	141.93	154.62	155.04	0.125	1.57	0.967	0.616	1.419
136	113.92	113.04	123.87	126.63	128.9	142.14	154.8	155.46	0.125	1.585	0.974	0.615	1.42
137	113.96	113.08	123.87	126.61	128.94	141.75	154.66	155.22	0.125	1.631	0.976	0.598	1.35
138	114.04	113.16	123.95	126.67	128.98	142.14	154.8	155.42	0.125	1.518	0.976	0.643	1.514
139	114.04	113.23	123.98	126.63	128.94	141.76	154.83	155.38	0.125	1.634	0.975	0.597	1.365
140	114.15	113.3	123.41	126.61	129.53	141.53	155.44	155.96	0.116	2.097	1.073	0.512	1.054
141	113.9	113.18	123.5	126.7	129.45	142.44	155.63	156.39	0.128	1.736	1.025	0.591	1.31
142	114	113.26	123.59	126.78	129.58	142.06	155.86	156.5	0.124	1.875	1.036	0.552	1.158
143	114.22	113.51	123.79	126.89	129.66	142.14	156.03	156.68	0.124	1.786	1.032	0.578	1.278
144	114.22	113.39	123.99	127.1	129.84	142.51	155.82	156.39	0.124	1.628	1.024	0.629	1.37
145	114.26	113.48	123.95	127.01	129.6	142.06	155.84	156.58	0.124	1.779	1.027	0.577	1.274
146	113.86	113.06	123.78	126.82	129.42	141.75	155.24	155.74	0.134	1.918	1.032	0.538	1.156
147	113.67	112.9	123.69	126.74	129.49	142.14	154.96	155.59	0.124	1.795	1.025	0.571	1.188
148	113.88	113.15	123.79	126.78	129.52	141.83	155.52	156.06	0.124	1.824	1.02	0.559	1.169
149	114.59	113.82	124.06	126.79	129.28	141.67	155.71	156.26	0.135	1.661	1.025	0.617	1.412
150	114.4	113.76	124.29	126.77	128.55	141.98	154.94	155.34	0.127	1.583	0.976	0.616	1.503
151	114.62	113.94	124.57	126.81	128.51	142.06	154.86	155.15	0.137	1.464	0.974	0.665	1.739
152	114.62	113.9	124.54	126.81	128.34	142.21	154.9	155.43	0.137	1.404	0.972	0.692	1.875
153	114.26	113.62	124.37	126.63	128.21	141.75	154.51	154.79	0.137	1.472	0.974	0.661	1.596
154	114.43	113.72	124.27	126.59	128.23	142.44	154.72	155.19	0.136	1.531	0.972	0.635	1.576
155	113.96	113.14	123.66	126.62	128.82	142.54	154.94	155.44	0.126	1.724	1.023	0.593	1.3
156	114.11	113.4	123.74	126.59	128.85	142.51	155.16	155.76	0.126	1.794	1.024	0.571	1.238
157	114.11	113.34	123.91	126.89	129.05	142.51	154.83	155.56	0.126	1.739	1	0.575	1.237
158	113.9	113.15	123.65	126.49	128.54	142.75	154.94	155.84	0.116	1.74	1.001	0.575	1.273
159	113.34	112.42	122.47	124.91	127.25	145.49	153.78	154.56	0.094	1.24	1.258	1.014	2.656
160	113.82	112.96	122.35	125.35	127.94	142.97	154.47	154.42	0.114	1.963	1.162	0.592	1.305
161	113.31	112.31	120.1	122.95	126.06	143.13	153.44	153.32	0.094	3.307	1.599	0.483	1.055
162	113.63	112.67	123.19	126.38	129.03	142.97	151.27	152.67	0.104	1.947	1.03	0.529	0.946
163	113.7	112.84	122.71	125.78	128.15	143.37	153.62	152.92	0.113	2.211	1.163	0.526	1.129

164	113.67	112.82	122.57	125.65	128.13	143.05	153.92	153.28	0.113	1.995	1.161	0.582	1.239
165	113.9	113.08	122.13	125.1	127.81	142.36	155	155.4	0.113	2.009	1.167	0.581	1.18
166	112.72	111.64	124.14	126.47	127.86	142.82	152.75	153.14	0.069	1.277	0.838	0.657	1.451
167	112.83	111.83	124.5	126.81	128.38	147.86	152.98	153.47	0.079	1.339	0.841	0.628	1.353
168	112.79	111.79	124.87	127.21	129.14	152.75	152.98	153.43	0.079	1.168	0.832	0.712	1.503
169	112.68	111.75	125.42	127.71	130.3	155.88	152.86	153.39	0.079	1.409	0.839	0.595	1.303
170	112.75	111.82	125.19	127.53	130.01	155.96	153	153.54	0.079	1.398	0.838	0.599	1.315
171	112.68	111.72	125.19	127.53	130.13	156.34	152.83	153.36	0.079	1.38	0.823	0.596	1.348
172	113.16	112.56	126.47	128.3	130.36	155.58	153.42	153.88	0.079	1.251	0.755	0.604	1.32
173	113.46	113.76	126.61	128.34	130.17	155.73	153.9	154.54	0.089	1.239	0.755	0.61	1.35
174	113.38	113.11	126.33	127.9	128.97	147.78	153.31	153.58	0.089	1.629	0.799	0.49	1.056
175	113.86	112.96	123.29	126.3	128.57	142.75	153.71	154.71	0.11	1.79	1.028	0.575	1.181
176	113.9	113	122.53	125.54	128.03	142.29	149.4	152.5	0.11	2.386	1.135	0.476	0.902
177	113.9	113	122.41	125.43	127.81	143.82	154.79	155.23	0.109	1.859	1.114	0.599	1.354
178	114.11	113.36	123.26	126.19	128.49	143.97	155.08	155.7	0.119	1.729	1.041	0.602	1.374
179	114.31	113.5	123.98	126.98	129.19	143.97	154.82	155.68	0.119	1.647	0.987	0.599	1.29
180	114.18	113.35	124.23	127.02	129.21	144.65	154.63	155.24	0.119	1.703	0.986	0.579	1.234
181	113.95	113.1	123.45	126.47	128.74	144.65	154.87	155.11	0.119	1.828	1.032	0.564	1.189
182	114.07	113.2	123.37	126.37	128.19	144.65	154.96	155.7	0.119	1.708	1.03	0.603	1.37
183	114.04	113.17	123.84	126.89	128.66	144.51	154.39	154.99	0.119	1.772	1	0.565	1.199
184	114.09	113.29	123.62	126.58	128.4	144.5	154.94	155.55	0.119	1.702	1.017	0.598	1.334
185	113.56	112.65	123.44	126.21	127.87	147.32	153.91	154.39	0.099	1.569	0.987	0.629	1.402
186	113.85	113.06	123.26	126.27	128.55	140.64	154.58	155.07	0.119	1.761	1.058	0.6	1.375
187	113.86	113.17	123.49	126.42	128.72	140.68	154.59	155.11	0.109	1.797	1.059	0.589	1.302
188	113.71	112.97	123.18	126.15	128.35	140.63	154.52	155.08	0.109	1.807	1.059	0.586	1.305
189	114.2	113.51	123.34	125.89	126.86	140.64	154.29	154.34	0.119	1.58	1.058	0.67	1.704
190	113.81	113.06	122.6	125.3	126.56	140.76	153.73	153.81	0.109	1.839	1.125	0.612	1.508
191	113.56	112.75	122.57	125.35	126.63	141.09	153.47	153.71	0.109	1.787	1.129	0.631	1.51
192	113.91	113.18	122.69	125.3	126.5	140.88	153.9	153.97	0.12	1.778	1.126	0.633	1.561
193	113.73	112.97	122.57	125.07	126.18	140.85	153.57	153.18	0.12	1.705	1.129	0.662	1.711
194	113.74	113.04	122.61	125.25	126.32	140.87	153.53	153.03	0.119	1.748	1.126	0.645	1.659
195	113.73	113.04	122.86	125.6	126.86	141.16	153.33	152.63	0.119	1.836	1.127	0.614	1.478
196	113.82	113.2	123.15	125.64	126.67	140.88	153.98	153.92	0.12	1.616	1.061	0.657	1.682
197	113.83	113.2	123.09	125.53	126.29	140.64	153.98	154	0.129	1.675	1.059	0.633	1.686
198	113.94	113.31	123.06	125.34	126.09	141.12	154.12	154.18	0.129	1.463	1.059	0.724	2.043
199	114.14	113.54	123.03	125.73	127.03	140.75	154.67	154.67	0.129	1.885	1.119	0.594	1.437
200	113.94	113.4	126.74	130.54	134.23	149.28	154.98	154.98	0.134	3.715	1.567	0.422	0.762

*Pressão manométrica

Tabela B: Conjunto de dados de entrada e saída (TOL e não-ARO) para construção de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	Destilado	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
Pontos	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	4.01	2.602	6.234	7.215	99.74	2552
2	4.033	2.733	6.516	7.199	99.79	2044
3	3.881	2.896	6.531	7.187	99.81	1903
4	4.073	2.937	6.718	7.21	99.72	2766
5	4.05	3.025	6.706	7.21	99.78	2196
6	4.204	2.997	6.719	7.214	99.78	2209
7	4.258	2.991	6.902	7.253	99.85	1479
8	4.27	3.155	6.897	7.245	99.88	1150

9	4.169	3.157	6.91	7.216	99.82	1796
10	3.97	3.202	6.905	7.195	99.82	1790
11	4.13	3.098	7.014	7.225	99.74	2584
12	3.909	3.19	7.019	7.199	99.73	2619
13	6.299	2.557	7.758	7.324	99.75	2484
14	3.526	2.916	5.992	7.261	99.88	1207
15	3.859	2.605	5.998	7.308	99.56	4413
16	3.91	2.741	6.209	7.271	99.74	2350
17	3.249	2.88	6.177	7.304	99.82	1775
18	3.808	2.78	6.203	7.309	99.78	2192
19	3.756	2.488	6.214	7.252	99.73	2721
20	3.857	2.966	6.505	7.279	99.82	1740
21	3.922	3.118	6.513	7.277	99.82	1747
22	3.826	2.933	6.501	7.309	99.79	2117
23	4.332	2.972	6.929	7.277	99.79	2075
24	3.823	3.183	7.011	7.383	99.81	1884
25	4.09	3.181	6.989	7.372	99.85	1454
26	3.651	2.933	6.491	7.362	99.86	1362
27	4.102	2.854	6.512	7.398	99.81	1887
28	3.163	2.206	5.184	7.392	99.67	3324
29	3.549	1.936	5.213	7.401	99.64	3574
30	3.394	2.682	6.004	7.396	99.65	3445
31	3.826	2.708	6.283	7.407	99.64	3592
32	3.852	2.722	6.305	7.368	99.61	3896
33	4.043	2.953	6.776	7.356	99.6	3960
34	3.915	1.514	6.78	7.359	99.95	3474
35	4.247	2.926	6.767	7.437	99.65	3463
36	4.042	3.055	6.765	7.419	99.68	3171
37	3.864	3.038	6.741	7.375	99.72	2766
38	4.127	3.007	6.752	7.422	99.55	4500
39	4.102	2.798	6.765	7.383	99.68	3176
40	4.217	2.941	6.773	7.408	99.66	3403
41	4.024	3.229	6.769	7.427	99.58	4246
42	3.951	3.099	6.745	7.384	99.7	2968
43	3.723	3.17	6.773	7.391	99.72	2745
44	4.129	3.007	6.762	7.406	99.74	2543
45	4.272	3.051	6.759	7.398	99.6	3989
46	4.002	3.153	6.772	7.418	99.66	3377
47	4.128	3.118	6.778	7.446	99.63	3675
48	4.671	2.966	6.759	7.485	99.74	2589
49	3.537	2.708	5.993	7.478	99.76	2432
50	3.494	2.669	5.995	7.517	99.71	2862
51	3.371	2.813	5.988	7.497	99.75	2436
52	3.697	2.655	5.989	7.447	99.74	2602
53	3.318	2.66	5.997	7.519	99.72	2798
54	3.411	2.774	6	7.556	99.69	3078
55	3.367	2.722	6.011	7.52	99.66	3346
56	3.335	2.732	6.003	7.493	99.71	2884
57	3.254	2.793	5.995	7.512	99.73	2704
58	3.43	2.798	5.989	7.509	99.74	2574
59	3.535	2.866	6.002	7.5	99.77	2308
60	2.9	2.191	5.008	7.416	99.77	2321

61	2.745	2.388	4.992	7.41	99.79	2143
62	3.165	2.474	5.593	7.388	99.81	1927
63	3.492	2.508	5.567	7.431	99.77	2321
64	3.408	2.734	5.863	7.372	99.72	2836.2
65	3.88	3.257	6.677	7.437	99.73	2641
66	3.683	3.407	6.897	7.416	99.76	2400
67	4.246	3.333	7.244	7.414	99.7	2914
68	4.368	3.383	7.237	7.423	99.7	2981
69	4.385	3.346	7.239	7.413	99.72	2778
70	4.262	3.199	7.208	7.408	99.72	2734
71	4.221	3.395	7.227	7.382	99.69	3065
72	4.202	3.27	7.243	7.413	99.68	3172
73	4.138	3.339	7.219	7.422	99.68	3166
74	3.487	2.575	5.998	7.43	99.7	3034
75	3.415	2.398	5.984	6.413	99.64	3555
76	3.758	2.854	5.999	4.973	99.58	3868
77	3.777	2.408	5.991	4.415	90.39	3682
78	3.363	2.995	6.096	5.497	98.75	3466
79	3.651	2.813	6.397	5.99	93.9	4023
80	4.267	3.219	7.212	7.422	99.3	2868
81	4.853	2.848	7.173	7.394	99.18	4397
82	4.527	3.242	7.185	7.382	99.68	2789
83	4.08	3.103	6.989	7.409	99.71	2867
84	2.478	1.887	4.513	7.364	99.76	2420
85	2.638	2.154	4.852	7.397	99.76	2407
86	4.319	3.161	7.032	7.195	99.75	2397
87	4.706	3.33	7.578	7.316	99.79	2018
88	3.92	3.103	6.926	7.242	99.9	960
89	4.06	2.962	6.757	7.403	99.57	4257
90	3.856	3.041	6.757	7.436	99.67	3260
91	3.637	2.57	5.995	7.496	99.75	2517
92	2.113	1.716	3.8	7.539	99.79	2058
93	4.079	2.788	6.763	7.399	99.44	5568
94	3.998	3.559	7.005	7.188	99.78	2138
95	4.059	3.342	6.999	7.231	99.82	1819
96	4.156	3.15	6.99	7.211	99.82	1778
97	4.284	3.13	6.987	7.219	99.72	2723
98	4.164	3.337	6.996	7.182	99.76	2347.7
99	4.171	3.262	7.013	7.185	99.77	2298
100	4.113	3.28	6.987	7.209	99.75	2431
101	4.023	3.267	7.001	7.184	99.75	2428
102	3.624	3.249	7.015	7.215	99.76	2346
103	4.435	3.387	7.588	7.288	99.81	1841
104	4.499	3.503	7.575	7.257	99.76	2346
105	4.712	3.469	7.585	7.305	99.79	2006
106	4.597	3.268	7.576	7.294	99.78	2093
107	4.441	3.145	7.197	7.377	99.59	4083
108	4.545	3.031	7.215	7.401	99.57	4246
109	4.311	3.221	7.175	7.426	99.59	4020
110	4.485	3.114	7.202	7.398	99.63	3584
111	4.423	3.094	7.206	7.421	99.67	3246
112	4.286	3.122	6.999	7.39	99.69	3056

113	4.426	2.936	6.99	7.385	99.67	3245
114	4.094	3.009	7.002	7.393	99.7	3006
115	4.024	2.994	7.009	7.419	99.68	3169
116	3.934	3.246	7.012	7.385	99.67	3274
117	3.997	3.092	7.022	7.404	99.65	3440
118	4.136	3.024	6.996	7.415	99.67	3224
119	3.917	3.381	6.987	7.401	99.67	3301
120	4.115	3.212	6.996	7.398	99.67	3223
121	4.278	3.097	7	7.426	99.64	3584
122	4.197	3.203	6.9	7.418	99.69	3081
123	3.973	3.146	6.876	7.422	99.62	3795
124	4.243	3.08	6.883	7.402	99.62	3735
125	4.647	2.943	6.882	7.376	99.6	3968
126	3.447	3.36	7.095	7.416	99.49	5096
127	4.073	2.989	7.079	7.424	99.5	4950
128	4.628	2.923	7.116	7.371	99.56	4355
129	4.673	2.868	7.099	7.407	99.61	3838
130	4.467	3.025	7.085	7.375	99.65	3423
131	4.909	3.093	7.096	7.084	99.67	3192
132	4.427	3.04	7.1	7.1	99.61	3823.4
133	4.384	3.079	7.073	7.087	99.6	3857
134	4.579	3.08	7.08	6.907	99.53	4615
135	4.379	3.085	7.108	6.874	99.53	4560
136	4.369	3.076	7.108	6.925	99.65	3354
137	4.239	3.141	7.085	6.914	99.66	3341
138	4.551	3.005	7.08	6.91	99.64	3485
139	4.234	3.101	7.097	6.92	99.64	3518
140	3.522	3.342	6.881	7.385	99.72	2822
141	4.27	3.26	7.229	7.411	99.69	3084
142	3.95	3.412	7.151	7.408	99.7	2952
143	4.161	3.255	7.203	7.432	99.65	3426
144	4.544	3.317	7.222	7.396	99.67	3233.5
145	4.165	3.269	7.213	7.411	99.65	3467
146	3.87	3.348	7.196	7.424	99.66	3334
147	4.112	3.461	7.199	7.38	99.7	2984
148	4.031	3.447	7.206	7.351	99.64	3511
149	4.441	3.145	7.197	7.377	99.59	4083
150	4.63	3.08	7.512	7.33	99.69	2947
151	4.984	2.867	7.496	7.298	99.66	3198
152	5.191	2.768	7.499	7.29	99.73	2476.9
153	4.964	3.11	7.505	7.308	99.74	2301.9
154	4.776	3.031	7.52	7.309	99.76	2121
155	4.272	3.286	7.2	7.363	99.62	3677
156	4.111	3.321	7.203	7.374	99.64	3470
157	4.144	3.351	7.206	7.208	99.68	3166
158	4.14	3.252	7.2	7.206	99.63	3628
159	5.261	1.981	5.186	6.523	99.72	2733
160	3.679	2.819	6.216	7.221	99.66	3322
161	2.174	2.06	4.496	7.188	99.68	3160
162	3.704	3.916	7	7.211	99.68	3190
163	3.258	2.884	6.191	7.202	99.67	3257
164	3.609	2.913	6.198	7.199	99.64	3543

165	3.597	3.049	6.191	7.225	99.68	3146
166	4.067	2.804	6.194	5.192	99.52	4278
167	3.89	2.876	6.196	5.208	99.53	3977
168	4.423	2.944	6.211	5.165	99.52	3940
169	3.691	2.832	6.201	5.199	99.44	4362
170	3.714	2.824	6.197	5.192	99.45	4334
171	3.694	2.74	6.193	5.096	99.45	4354
172	4.225	3.2	6.998	5.284	99.11	4688
173	4.279	3.169	7.02	5.301	98.37	4102
174	3.434	3.252	7.001	5.593	98.45	3818
175	3.852	3.261	6.703	6.893	99.69	2808
176	3.184	3.531	6.693	7.597	99.73	2598
177	3.763	2.779	6.279	6.995	99.68	3155
178	4.039	2.941	6.709	6.984	99.69	3049
179	4.25	3.294	7.092	7.001	99.73	2651
180	4.105	3.326	7.094	6.993	99.67	3194
181	3.833	3.225	6.793	7.007	99.66	3310
182	4.094	2.987	6.787	6.993	99.66	3337
183	3.952	3.295	6.999	7.001	99.69	3082
184	4.117	3.086	6.888	7.006	99.72	2732
185	4.209	3.003	6.692	6.604	99.63	3562
186	4.034	2.934	6.718	7.105	99.51	4880
187	3.953	3.035	6.706	7.104	99.53	4698
188	3.932	3.013	6.711	7.106	99.61	3872
189	4.494	2.637	6.708	7.1	99.47	5234
190	3.859	2.559	6.31	7.097	99.64	3598
191	3.974	2.631	6.294	7.103	99.67	3297
192	3.992	2.558	6.304	7.099	99.66	3392
193	4.167	2.436	6.293	7.105	99.53	4662
194	4.061	2.448	6.301	7.098	99.66	3324
195	3.869	2.617	6.304	7.103	99.68	3155
196	4.405	2.619	6.705	7.117	99.59	3986
197	4.245	2.518	6.711	7.109	99.52	4687
198	4.852	2.375	6.7	7.097	99.47	5236
199	3.978	2.769	6.7	7.499	99.66	3354
200	2.698	3.54	6.396	10.024	99.5	3564

Tabela C: Conjunto de dados de entrada para validação de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	#63	#58	#37	#34	#29	#22	#02	#01	P topo *	RD	RF	DF	DB
Pontos	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(°C)	(kg/cm ²)	-	-	-	-
1	113.74	112.80	122.54	125.27	127.72	141.83	153.80	153.88	0.114	1.929	1.137	0.589	1.377
2	113.70	112.76	122.46	125.20	127.58	141.88	153.82	153.92	0.114	1.934	1.140	0.589	1.379
3	113.60	112.73	122.46	125.13	127.46	142.42	153.75	154.07	0.114	1.811	1.140	0.630	1.558
4	113.69	112.80	122.57	125.32	127.53	142.21	153.92	154.08	0.115	1.799	1.136	0.632	1.522
5	113.77	112.86	122.55	125.27	127.77	142.01	153.98	154.25	0.115	1.964	1.140	0.581	1.318
6	113.45	112.47	121.89	124.76	127.45	142.05	153.20	152.71	0.104	2.040	1.213	0.595	1.320
7	113.58	112.62	121.88	124.75	127.40	142.24	153.61	153.03	0.104	2.077	1.214	0.584	1.344
8	113.65	112.69	122.04	124.89	127.43	142.06	153.98	154.36	0.114	1.963	1.192	0.607	1.380
9	113.53	112.61	122.13	124.99	127.69	141.92	153.84	154.09	0.104	1.977	1.193	0.603	1.304
10	113.37	112.41	121.99	125.06	127.98	142.12	153.77	153.51	0.104	2.033	1.194	0.587	1.244

11	113.51	112.61	121.43	124.16	126.76	141.77	153.56	154.12	0.104	2.192	1.253	0.572	1.341
12	113.51	112.60	121.40	124.02	126.45	142.10	153.59	154.06	0.114	2.083	1.253	0.601	1.502
13	113.64	112.69	121.46	124.05	126.42	142.03	153.65	154.14	0.114	1.946	1.253	0.644	1.605
14	112.73	111.69	117.85	119.34	123.24	141.29	151.95	151.87	0.075	3.733	2.347	0.629	1.519
15	112.87	111.90	118.24	120.11	124.84	141.16	153.04	153.73	0.085	2.959	1.713	0.579	1.331
16	112.94	112.13	118.54	120.47	125.31	141.50	153.44	154.13	0.095	2.399	1.601	0.667	1.537
17	113.56	112.74	121.80	124.69	127.40	140.91	154.25	154.48	0.095	2.134	1.252	0.587	1.246
18	114.28	113.53	123.58	126.51	128.87	141.24	155.44	155.99	0.125	1.757	1.072	0.610	1.385
19	114.14	113.37	123.37	126.27	128.59	140.97	155.13	155.70	0.125	1.780	1.072	0.602	1.326
20	114.14	113.44	124.07	126.96	129.18	141.22	155.22	155.58	0.125	1.809	1.040	0.575	1.262
21	114.30	113.58	123.85	126.89	129.21	141.30	155.46	156.04	0.125	1.802	1.041	0.578	1.272
22	114.34	113.61	123.96	126.87	129.05	141.32	155.35	155.66	0.125	1.785	1.043	0.584	1.295
23	113.97	113.27	123.79	126.76	128.98	140.93	155.02	155.57	0.125	1.776	1.041	0.586	1.247
24	113.92	113.27	123.83	126.75	129.01	141.11	155.17	155.58	0.125	1.778	1.042	0.586	1.298
25	114.13	113.43	123.71	126.70	128.97	141.00	155.38	155.95	0.125	1.759	1.043	0.593	1.266
26	114.11	113.37	123.68	126.56	128.72	141.02	155.37	155.89	0.125	1.745	1.040	0.596	1.342
27	114.12	113.41	123.60	126.48	128.72	141.05	155.60	156.35	0.130	1.739	1.042	0.599	1.348
28	114.05	113.33	123.79	126.80	129.12	141.18	155.31	155.83	0.130	1.793	1.041	0.581	1.245
29	114.05	113.27	123.80	126.85	129.17	141.15	155.14	155.55	0.130	1.843	1.041	0.565	1.180
30	114.14	113.37	123.21	126.08	128.44	141.14	155.90	156.79	0.130	1.758	1.069	0.608	1.370
31	113.89	113.14	123.13	126.25	128.59	141.13	155.54	156.52	0.121	1.791	1.070	0.597	1.300
32	114.06	113.33	123.55	126.52	128.83	141.14	155.22	156.01	0.131	1.784	1.071	0.601	1.341
33	114.15	113.37	123.41	126.45	128.83	141.04	155.34	156.21	0.121	1.797	1.070	0.595	1.308
34	114.06	113.33	123.43	126.38	128.67	141.17	155.40	156.10	0.131	1.775	1.072	0.604	1.343
35	113.94	113.16	123.14	126.14	128.45	141.03	155.42	156.23	0.121	1.817	1.068	0.588	1.263
36	114.14	113.45	123.35	126.35	128.81	140.98	155.67	156.47	0.131	1.825	1.073	0.588	1.245
37	114.04	113.23	123.34	126.56	129.09	141.25	155.22	156.07	0.120	1.892	1.071	0.566	1.147
38	113.68	112.80	120.89	123.68	126.34	140.98	154.92	155.85	0.100	2.570	1.438	0.559	1.246
39	113.62	112.70	121.16	124.04	126.81	141.15	154.44	155.21	0.100	2.640	1.364	0.517	1.161
40	113.95	113.14	123.24	126.12	128.29	141.33	155.20	155.94	0.125	1.798	1.068	0.594	1.338
41	114.00	113.28	123.29	126.25	128.61	141.10	155.52	156.34	0.130	1.768	1.070	0.605	1.366
42	114.13	113.46	123.17	126.03	128.24	141.04	155.65	156.62	0.130	1.777	1.069	0.601	1.393
43	113.84	113.04	123.23	126.18	128.50	141.12	155.18	155.92	0.120	1.833	1.069	0.583	1.256
44	113.97	113.25	123.56	126.43	128.68	141.38	155.36	156.05	0.130	1.805	1.068	0.592	1.381
45	113.81	113.12	123.11	126.13	128.43	140.95	155.37	155.87	0.122	1.815	1.067	0.588	1.269
46	113.86	113.16	123.13	126.08	128.35	141.04	155.38	156.06	0.132	1.756	1.070	0.610	1.339
47	113.88	113.15	123.31	126.37	128.73	141.21	155.17	155.49	0.122	1.899	1.068	0.562	1.194
48	114.10	113.35	123.64	126.44	128.56	141.19	155.51	156.05	0.122	1.747	1.039	0.595	1.380
49	114.09	113.33	124.22	127.13	129.24	141.08	155.51	156.06	0.122	1.676	1.002	0.598	1.317
50	114.10	113.34	124.02	126.96	129.07	141.03	155.37	156.13	0.132	1.722	1.001	0.581	1.232
51	114.23	113.60	124.22	127.24	129.40	141.14	155.67	156.43	0.132	1.688	1.001	0.593	1.299
52	114.25	113.57	123.88	126.74	128.88	141.59	155.52	156.09	0.132	1.735	0.999	0.575	1.162
53	114.27	113.53	124.36	127.25	129.36	141.18	155.27	155.82	0.132	1.720	0.999	0.581	1.227
54	114.19	113.47	124.30	127.09	129.08	141.22	155.11	155.79	0.132	1.650	1.002	0.608	1.334
55	114.05	113.31	124.05	127.06	129.14	141.06	154.95	155.56	0.132	1.701	1.001	0.589	1.235
56	114.20	113.51	124.15	127.01	129.07	141.17	155.13	155.61	0.127	1.726	1.012	0.587	1.280
57	114.30	113.59	124.09	127.13	129.29	141.53	155.14	155.90	0.127	1.743	1.015	0.582	1.244
58	114.34	113.68	123.79	126.69	128.94	141.56	155.68	156.11	0.138	1.636	1.015	0.620	1.305

*Pressão manométrica

Tabela D: Conjunto de dados de entrada e saída (TOL e não-ARO) para validação de modelos estacionários de planta para predição de tolueno e não-ARO.

	Destilado	Fundo	Carga	Refluxo	TOL	não-ARO
Pontos	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(tn/h)	(% massa)	(ppm massa)
1	3.734	2.712	6.338	7.204	99.68	3131
2	3.73	2.705	6.329	7.213	99.70	2971
3	3.983	2.556	6.326	7.214	99.64	3538
4	4.006	2.632	6.342	7.205	99.64	3561
5	3.663	2.78	6.31	7.195	99.68	3119
6	3.533	2.676	5.942	7.208	99.81	1863
7	3.47	2.581	5.938	7.206	99.77	2267
8	3.673	2.662	6.047	7.209	99.84	1577
9	3.645	2.795	6.041	7.206	99.84	1624
10	3.548	2.852	6.04	7.214	99.70	2934
11	3.285	2.45	5.747	7.202	99.77	2279
12	3.458	2.302	5.749	7.203	99.76	2361
13	3.7	2.305	5.745	7.2	99.79	2022
14	1.929	1.27	3.068	7.2	99.77	2304
15	2.434	1.829	4.204	7.202	99.71	2908
16	3.004	1.955	4.501	7.206	99.56	4388
17	3.372	2.707	5.749	7.196	99.69	3078
18	4.271	3.084	7.003	7.505	99.56	4390
19	4.209	3.174	6.99	7.494	99.60	3992
20	4.143	3.283	7.207	7.496	99.62	3767
21	4.162	3.273	7.206	7.501	99.60	3903
22	4.2	3.242	7.191	7.499	99.61	3842
23	4.219	3.383	7.203	7.495	99.57	4281
24	4.216	3.249	7.193	7.498	99.61	3821.9
25	4.263	3.367	7.191	7.5	99.62	3780.1
26	4.295	3.201	7.204	7.493	99.60	3923.4
27	4.315	3.202	7.199	7.504	99.59	4065
28	4.18	3.358	7.2	7.493	99.62	3725
29	4.066	3.445	7.201	7.494	99.70	2921
30	4.265	3.114	7.014	7.5	99.73	2581
31	4.188	3.221	7.012	7.5	99.65	3450
32	4.206	3.137	7.003	7.502	99.66	3331
33	4.172	3.189	7.006	7.495	99.63	3675.5
34	4.228	3.148	7.001	7.506	99.69	3091.8
35	4.124	3.265	7.017	7.495	99.65	3427.6
36	4.11	3.301	6.992	7.501	99.67	3208
37	3.965	3.457	7.004	7.501	99.71	2885
38	2.918	2.342	5.217	7.5	99.71	2912
39	2.838	2.445	5.492	7.491	99.72	2776
40	4.173	3.118	7.023	7.501	99.70	2973
41	4.241	3.105	7.011	7.5	99.65	3489
42	4.218	3.028	7.013	7.494	99.71	2812
43	4.093	3.258	7.019	7.501	99.58	4147
44	4.159	3.011	7.024	7.505	99.66	3369
45	4.13	3.255	7.028	7.496	99.66	3350
46	4.276	3.193	7.015	7.507	99.68	3097
47	3.95	3.308	7.025	7.502	99.71	2844

48	4.293	3.111	7.219	7.499	99.69	3007
49	4.473	3.397	7.486	7.498	99.61	3795
50	4.359	3.539	7.503	7.507	99.67	3210
51	4.439	3.418	7.487	7.494	99.60	3909
52	4.315	3.714	7.498	7.487	99.67	3169
53	4.361	3.553	7.504	7.499	99.69	2948.8
54	4.548	3.409	7.485	7.503	99.67	3183
55	4.409	3.57	7.488	7.498	99.68	3084
56	4.342	3.392	7.402	7.493	99.67	3202
57	4.305	3.461	7.395	7.504	99.64	3521
58	4.578	3.508	7.381	7.49	99.62	3742