



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM
ENGENHARIA QUÍMICA



Reconciliação de Dados em Colunas de Destilação Aplicada à Estimação da Composição da Alimentação

Autor: Joanna Bassotto Zani

Orientador: Prof. Dr. Pedro Rafael Bolognese Fernandes

Porto Alegre, dezembro de 16

Agradecimentos

À minha família: minha mãe por me ajudar com todo apoio, ajuda nas marmitas e giros incessantes no meu quarto enquanto eu “rodava” as simulações; meu pai por sempre me servir de inspiração e exemplo e por sempre cobrar mais de mim; e a meu irmão, meu maior companheiro, amigo, sempre preocupado e fazendo de tudo por mim.

Ao meu namorado, pelo auxílio e parceria durante esse período complicado, tentando me convencer que eu conseguiria e me dando apoio.

Ao meu orientador, Pedro Fernandes, “the best” orientador, exemplo de profissional, por aceitar uma orientanda ansiosa e, com todo seu bom-humor, dedicação, conhecimento e paciência, fazer a execução desse trabalho possível.

A todos meus amigos, de todas as datas e origens, que desde pequenos seguem ao meu lado, aceitando meus momentos de ausência e torcendo por mim.

A todos que, de qualquer forma, enviaram-me pensamentos positivos e torceram pelo meu sucesso durante toda essa trajetória.

Resumo

Técnicas de tratamento de dados fazem-se cada vez mais necessárias na conjuntura onde os processos industriais adquirem mais medições e complexidade constantemente. Através da minimização dos erros das medidas, qualquer alteração proposta visando melhorias no processo acarretará resultados mais satisfatórios. Isso, aliado ao fato da maior automatização das plantas, gera a necessidade de uma técnica de filtragem de dados *on-line*. Nesse cenário, surge a ideia de implementar a técnica de reconciliação de dados utilizando um modelo termodinâmico aproximado que permita cálculos mais rápidos dos equilíbrios termodinâmicos em uma coluna de destilação. O presente trabalho trata da utilização de Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados (MTLS) na técnica de reconciliação de dados clássica para este equipamento. O método foi implementado para uma coluna de destilação binária e para uma coluna BTX, variando-se o número de estágios e a variância das medidas. Modelos oriundos de dois diferentes *softwares* (MATLAB e Aspen Plus) foram testados. O resultado indica que o método de reconciliação segmentada proposto no trabalho funciona para a maioria das situações, com resultados significativos, enfrentando limitações quando se trata de valores de composição muito pequenos. Para a análise feita, através dos dados reconciliados pode-se inferir a composição da carga de uma coluna BTX, evidenciando um benefício da técnica para melhor controle das colunas de destilação.

Lista de Figuras

Figura 2.1: Representação de erros aleatórios em uma amostra.	4
Figura 2.2: Relação entre RD, simulação, otimização e SDCD (adaptado de ROMAGNOLI e SANCHEZ, 1999).....	6
Figura 2.3: Esquema da classificação de variáveis, adaptado de Farias (2009)	7
Figura 2.4: Representação Esquemática da técnica de RD	7
Figura 3.1: Esquema representativo da estrutura da coluna de destilação.	10
Figura 3.2: Representação esquemática dos pratos de uma coluna, suas correntes e respectivas composições (prato da alimentação e demais pratos, respectivamente).....	12

Lista de Tabelas

Tabela 4.1: Parâmetros da coluna para os diferentes casos em análise.....	19
Tabela 4.2: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1.	20
Tabela 4.3: Resultados da reconciliação para o caso da destilação binária – volatilidade relativa constante para o Caso 1	20
Tabela 4.4: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação com relação aos valores reais para todos os casos estudados	21
Tabela 4.5: Comparação do efeito de α na reconciliação segmentada para o Caso 2	21
Tabela 4.6: Valores dos parâmetros " θ " para MTLs da mistura BTX.	22
Tabela 4.7: Valores dos parâmetros " Q " para MTLs da mistura BTX.	22
Tabela 4.8: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1, para reconciliação de dois componentes	23
Tabela 4.9: Resultados da reconciliação pelos dois métodos em estudo para o Caso 1	23
Tabela 4.10: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação.....	24
Tabela 4.11: Pesos atribuídos a cada variável, para cada solução.....	25
Tabela 4.12: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1	25
Tabela 4.13: Erros fornecidos pela reconciliação dos três componentes, através dos dois métodos em estudo.....	26
Tabela 4.14: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação.....	26
Tabela 5.1: Valores nominais, medidas, variância e percentual de erro das medidas frente aos valores nominais	28
Tabela 5.2: Percentuais de erro das medidas e das reconciliações pelos dois métodos em relação aos valores nominais	28
Tabela 5.3: Valores nominais, reconciliados e erro das medidas e da reconciliação	29
Tabela 5.4: Valores nominais, medidas e erros para os problemas com e sem o termo de temperatura	30
Tabela 5.5: Comparação entre erros das medidas e dos resultados das reconciliações para o caso com e sem temperatura	31
Tabela 5.6: Valores reconciliados para o caso sem erro de modelo – estimacão da composicão de carga	32
Tabela 5.7: Valores reconciliados para o caso com erro de modelo – estimacão da composicão de carga	32
Tabela 5.8: Resultados estimados para composicão de carga dos dois modelos de coluna.	33

Lista de Abreviaturas e Siglas

BTX – Benzeno-Tolueno-Xileno

MTLS – Métodos Termodinâmicos Locais Simplificados

RD – Reconciliação de dados

MW- Mega Watts

SDCD – Sistema digital de controle distribuído

MIMT – *Modified Iterative Measurement Test*

BMG – Balanço de Massa Global

Lista de Símbolos

e = erro total das medidas

y = valor medido

x = valor real

ε = parcela aleatório

δ = parcela sistemática desconhecida

V = vazão molar de refervimento

L = vazão molar de refluxo

F = vazão molar de alimentação

D = vazão molar de destilado

B = vazão molar do refeedor

N = número de estágios

C = número de componentes

$x_N \equiv x_B$ = fração molar no produto de fundo

$x_1 \equiv x_D$ = fração molar no produto de topo

z_i = fração molar da corrente de alimentação

$y_{i,j}$ = composição da fase vapor para o componente i no estágio j

$x_{i,j}$ = composição da fase líquida para o componente i no estágio j

α = volatilidade relativa

K = K-valores: razão de equilíbrio de vaporização

P_{coluna} = pressão de operação da coluna de destilação

$\theta_{i,l}$ = parâmetro l ajustado do MTLs para componente i

$Q_{l,i}$ = parâmetro l ajustado do MTLs para componente i

$T_{i,1}$ = temperatura de equilíbrio da mistura

vm_i = variável medida

vr_i = variável reconciliada

σ_i^2 = variância das medidas

Sumário

Agradecimentos	ii
Resumo	iii
Lista de Figuras	iv
Lista de Tabelas	v
Lista de Abreviaturas e Siglas	vi
Lista de Símbolos	vii
Sumário	viii
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	4
2.1 Erros aleatórios e erros grosseiros	4
2.2 Classificação de variáveis	6
2.3 Reconciliação de dados	7
2.4 Aplicação e uso em colunas	8
3 Metodologia	10
3.1 Descrição do Modelo da Coluna de Destilação	10
3.2 Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados	13
3.3 Implementação do Problema de Reconciliação de Dados	15
3.3.1 Obtenção dos Dados	16
3.3.2 Reconciliação de Dados Segmentada (RDS)	17
3.3.3 Resolução do Problema de Reconciliação	18
4 Resultados e Discussões	19
4.1 Coluna de Destilação Binária – Volatilidade Relativa Constante	19
4.2 Coluna Multicomponente – Modelos Termodinâmicos Simplificados	22
4.2.1 Reconciliação envolvendo as Frações Molares de dois Componentes	22
4.2.2 Reconciliação Envolvendo todos os Componentes	25
5 Reconciliação com Erro de Modelo	27
5.1 Reconciliação Empregando Vazões, Composições e Temperatura	27
5.2 Efeito da Inclusão do termo da Temperatura	30
5.3 Estimação da composição da alimentação	31
6 Conclusões e Trabalhos Futuros	34
7 Referências	36

1 Introdução

Na atual conjuntura, na qual os processos industriais vêm sendo aprimorados e a tecnologia evolui e se difunde, as rotinas industriais adquirem maior complexidade. Uma crescente quantidade de dados vem sendo gerada e sua utilização é essencial para manter os processos dentro dos padrões de normalidade, segurança e lucratividade.

Sensores de vazão, temperatura, pressão, entre outros, geram medidas dispersas em torno de um determinado valor, ou seja, com ruído aleatório, e também, eventualmente, com erro sistemático. Assim sendo, o verdadeiro estado do processo pode ser mascarado por essas discrepâncias, dificultando melhorias na performance do mesmo. O fato de serem essenciais para a tomada de decisão ao longo do processo faz com que esses dados devam passar por tratamento que aumente sua confiabilidade, antes de serem utilizados (BHAT e SARAF, 2004).

Dados reais de planta ou análises de laboratório, por exemplo, podem passar pela técnica da reconciliação de dados para se transformarem em medidas confiáveis do processo (MARTINEZ PRATA, SCHWAAB, LUIS LIMA e CARLOS PINTO, 2010 apud PRATA *et al.*, 2006, 2008a, 2009). Outras técnicas podem estar associadas à reconciliação, tais como a classificação das variáveis e a detecção de erros grosseiros nas medidas. Assim, a reconciliação é capaz de ajustar os valores das medidas de forma a respeitar as restrições do processo ou de seu modelo. As aplicações deste método incluem a área de monitoramento, controle e otimização de processos, segurança e eficiência operacional da planta, entre outros.

A importância de técnicas que envolvem uma combinação de modelos e medidas na área industrial é cada vez mais significativa devido à modernização das mesmas. Por exemplo, a reconciliação estacionária de dados associados aos balanços materiais dos processos é bem estabelecida na indústria. Contudo, a implementação de técnicas de tratamento de dados em outros tipos de aplicações encontra barreiras computacionais para a implementação *on-line*, especialmente quando envolve modelos dinâmicos de processo, o que faz com que ainda não seja uma prática bem consolidada. Dificuldades quanto à grande quantidade de dados a serem tratados em um curto espaço de tempo, ou dificuldades de convergência dos métodos de cálculo exemplificam as razões para a não aplicação do método.

Colunas de destilação representam um caso que carrega potencial para ser beneficiado pelo tratamento eficaz das suas medidas. Trata-se de uma das operações de maior gasto energético na indústria, tendo sido causador de cerca de 11% da energia gasta em indústrias no EUA no ano de 1991, segundo Humphrey e Siebert (apud STAUDT, 2007). Existem diversos métodos para a avaliação operacional de colunas de destilação, normalmente em termos da eficiência energética (MÜLLER, 2012). Para a aplicação destes índices a colunas de destilação em funcionamento, é necessário um conjunto de medidas confiáveis, que permitam avaliar a real situação da operação.

Em particular, a composição da carga de colunas de destilação não é normalmente conhecida em operação, ou é amostrada com intervalos muito grandes (de horas), o que torna os índices de eficiência calculados bastante incertos, especialmente se baseados em composições de projeto. Este fato é agravado pelo fato de que a corrente de carga de colunas de destilação usualmente se origina de outras etapas do processo, por isso pode apresentar bastante variação. Mesmo no caso de alguns processos que contam com análises da composição de carga feitas com base na cromatografia, esta técnica demanda cerca de quinze minutos para gerar o resultado, não podendo ser aplicadas para técnicas de tratamento de dados *on-line*.

Este estudo propõe a aplicação da técnica de reconciliação de dados estacionária para colunas de destilação multicomponente, utilizando modelos reduzidos da coluna e o método dos Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados (MTLS) para o cálculo do equilíbrio termodinâmico de fases, objetivando a redução de erros nas variáveis para o cálculo de índices de eficiência com baixa demanda computacional. Como segundo objetivo, está a estimação da composição da carga de colunas com uma precisão adequada, através dos balanços materiais do modelo da mesma, permitindo a aplicação desta técnica de tratamento de dados de forma *on-line*. De posse do valor da composição da carga é possível planejar e melhorar as condições de operação da coluna, visando melhorias na eficiência do processo e benefícios energéticos e financeiros para a indústria. Como objetivo final, pretende-se verificar se é possível a aplicação da reconciliação de dados numa situação em que há desvio sistemático entre o modelo empregado na técnica e o sistema real. Esta questão é especialmente importante para processos de separação, no qual o comportamento termodinâmico da mistura é uma das incertezas que afetam os resultados da reconciliação.

A estrutura do texto será dividida em cinco capítulos: O Capítulo 1 introduz a ideia a ser tratada na sequência do estudo. O Capítulo 2 traz uma revisão bibliográfica sobre o assunto, com noções mais teóricas que despertaram o interesse em trabalhar com essas técnicas. O Capítulo 3 abrange a metodologia utilizada durante a execução do estudo. São apresentados o modelo da coluna utilizado, a descrição da técnica de reconciliação de dados clássica envolvida e mais informações e equacionamento do MTLs para a coluna. O Capítulo 4 apresenta os resultados da implementação para os primeiros casos testados e as discussões que eles permitem em torno do objetivo do trabalho. O capítulo 5 envolve o caso da reconciliação para um problema com desvio do modelo ideal da coluna de destilação. Por fim, o Capítulo 6 envolve as conclusões que podem ser tomadas com o estudo e as ideias que surgiram para trabalho ainda a serem realizadas.

2 Revisão Bibliográfica

Este capítulo será dividido em quatro seções para melhor abordar os assuntos tratados no trabalho. A primeira parte trata de erros de medição, a segunda seção explica brevemente a classificação de variáveis, a terceira versa sobre a técnica de reconciliação de dados, e a quarta mostra estudos que aplicam a técnica.

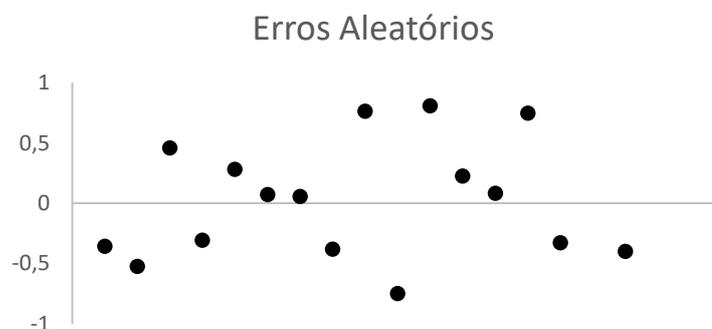
2.1 Erros aleatórios e erros grosseiros

Os erros inerentes às medidas devem ser levados em consideração na utilização das mesmas. De maneira geral, classificam-se esses erros em erros aleatórios e erros grosseiros. Considerando estas duas parcelas, tem-se o erro total das medidas (e), que é a diferença entre o valor medido (y) e o valor real (x). Esse erro também pode ser considerado como o somatório da parcela aleatória (ε) e de uma parcela sistemática desconhecida (δ) (BIPM – *Bureau International des Poids et Mesures* apud (ZANETTI, 2012)).

$$e = y - x = \varepsilon + \delta \quad (2.1)$$

Erros aleatórios, como o nome já indica, não são previstos. Podem ser oriundos de distúrbios e flutuações nas correntes, transmissões, sinais e também ser influenciados pelas condições externas. Em outras palavras, uma medida pode ser exatamente reproduzida, nas mesmas condições, fazendo uso dos mesmos equipamentos e pelos mesmos operadores e técnicas, porém originará resultados diferentes da medida precedente. Essa classe de erros está sempre presente em qualquer forma de medida, nunca sendo eliminada completamente. Normalmente são erros de pequena magnitude, exceto por alguns “picos” (NARASIMHAN e JORDACHE, 2000).

Figura 2.1: Representação de erros aleatórios em uma amostra.



A outra categoria contempla os erros denominados grosseiros. Ao contrário dos anteriores, os erros grosseiros são originados a partir de eventos não aleatórios, não

pontuais e que podem ser corrigidos depois de observados. Como exemplo, têm-se erros em sensores devido à falta de calibração, erosão, deposição em sua superfície; erros em instrumentos devido à falta de manutenção, instalação de maneira equivocada; e ainda, desvios de processo como vazamentos, perdas desconhecidas. As medidas que carregam erros grosseiros normalmente têm sua diferença mais facilmente detectada, devido a maior magnitude da variação. Por outro lado, os mesmos ocorrem com menor frequência que os aleatórios (NARASIMHAN e JORDACHE, 2000).

Comparando-se esses dois tipos de erros no âmbito da gestão de um processo, encontram-se maiores obstáculos em lidar com erros aleatórios. Apesar de menor magnitude, esses erros não possuem causa raiz facilmente definida, o que dificulta a busca pela solução do mesmo. Já a correção de erros grosseiros, por ser mais facilmente detectada e ter origem em situações conhecidas, podendo ser tratada diretamente por operadores experientes.

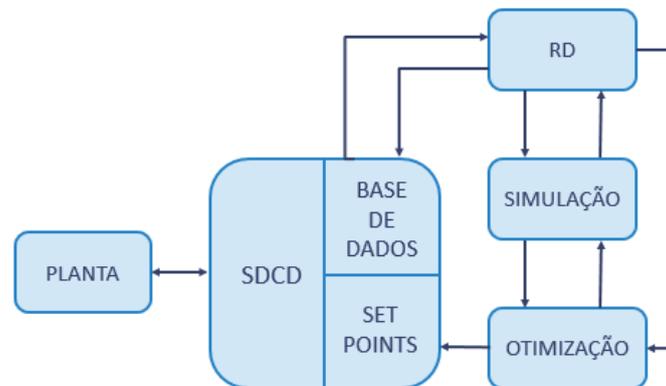
Ao se tratar de ruídos nas medidas, é natural pensar-se em técnicas de filtragem, que se referem na busca do valor real da variável medida, baseando-se em alguma informação adicional, como por exemplo, o próprio modelo do processo (BENQLILOU, 2004). Os filtros analógicos ou digitais são usualmente incorporados no SDCD (Sistema Digital de Controle Distribuído) e utilizados como procedimento de pré-processamento dos dados.

Durante a operação das plantas industriais, guardam-se muitas medidas de dados de processo, como vazões, pressões, temperaturas e composições. A reconciliação de dados é uma técnica de redução dos erros nas medidas baseada em modelos que têm o diferencial de respeitar as restrições impostas pelas leis de conservação e de considerar a precisão das medidas. A técnica de pré-processamento antecipa a RD, auxiliando na busca pelas medidas mais fiéis à realidade.

A utilização de técnicas de retificação e reconciliação de dados de planta permite um melhor ajuste das variáveis medidas, chegando em valores mais corretos e consistentes com as equações de balanço dos modelos. Assim, as simulações e ações de otimização e controle das plantas pode ser realizada de forma mais eficaz, baseada em informações mais confiáveis. O modelo integrado dessas ações, conforme ilustrado pela Figura 2.2 consegue fornecer melhor controle da planta com o SDCD, através das medidas tratadas pela técnica de RD que montam a base de dados, e também permite ações corretivas e de melhorias de

set-point mais relevantes, por se basear em dados mais precisos (ROMAGNOLI e SANCHEZ, 1999).

Figura 2.2: Relação entre RD, simulação, otimização e SDCD (adaptado de ROMAGNOLI e SANCHEZ, 1999)

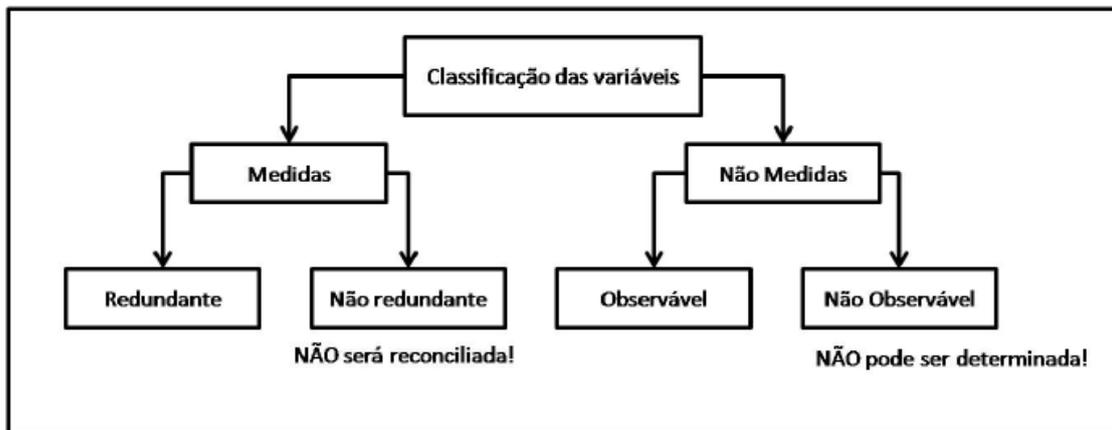


2.2 Classificação de variáveis

Em um processo complexo, milhares de variáveis estão envolvidas, tornando-se técnica e economicamente inviável realizar a medição de todas. Em termos de processo, é interessante saber quais medidas podem ser estimadas a partir de outras variáveis. A classificação das variáveis é dada por Farias (2009):

- Variável observável: é a variável não medida que pode ser estimada a partir das variáveis medidas, fazendo uso das equações do modelo.
- Variável não observável: é a variável não medida que não pode ser estimada a partir das variáveis medidas, fazendo uso das equações do modelo.
- Variável redundante: é a variável medida que continua sendo observável após sua medida ter sido removida.
- Variável não redundante: é a variável medida que é não-observável após sua medida ter sido removida.

Figura 2.3: Esquema da classificação de variáveis, adaptado de Farias (2009)

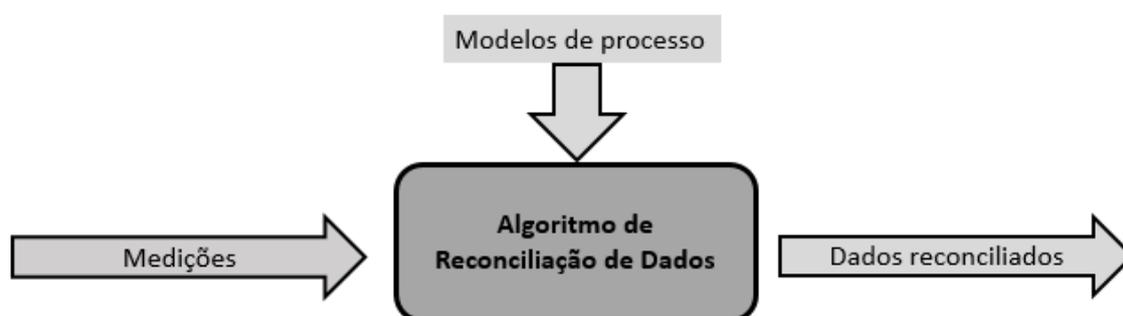


Ainda segundo Farias (2009), a precisão da reconciliação de dados está vinculada à redundância das variáveis. Quanto maior a redundância, mais precisa é a técnica de RD. Para a técnica de reconciliação de dados, as variáveis que podem ser utilizadas são classificadas como redundantes.

2.3 Reconciliação de dados

A Reconciliação de Dados consiste em uma técnica aplicada para ajustes de dados de processo para que se obtenha a melhor estimativa das variáveis medidas, respeitando restrições de processo e leis da física como conservação de massa e energia (VU, 2014). Com isso, a reconciliação de dados torna-se mais importante para garantir a confiabilidade das medidas.

Figura 2.4: Representação Esquemática da técnica de RD



A utilização dessa técnica surgiu no início dos anos de 1960, introduzida por Kuehn and Davidson (apud SINGHMANEESKULCHAI, ANGSUTORN, e SIEMANOND, 2013), principalmente buscando validar balanços materiais em processos de produção. Posteriormente, essa técnica foi sendo aprimorada, considerando sistemas de equações não lineares advindos de modelos termodinâmicos até chegar a sistemas dinâmicos.

Mesmo com o aumento das aplicações dessa técnica, uma das primeiras experiências de implantação da reconciliação no Brasil é do ano de 2002, na Refinaria Alberto Pasqualini – REFAP S/A. (CORDÃO, 2005)

Atualmente, a proliferação do uso do computador contribuiu para a utilização de ferramentas de engenharia nas tecnologias industriais. Aumentando a complexidade e automatização dos processos, mais medidas são necessárias para garantir o bom funcionamento dos mesmos. Computadores e softwares permitem esse acompanhamento mais detalhado, armazenando medidas de variáveis em tempo integral. Tendo acesso a um maior número de valores representativos do processo, os engenheiros compreenderem melhor como o mesmo funciona, seus erros, anomalias e distúrbios (FARSANG, NÉMETH, e ABONYI, 2013). Além disso, permite que novos caminhos sejam estudados, visando melhorar a qualidade do produto e beneficiar o rendimento das reações, evitando desperdícios e otimizando o processo.

Os instrumentos de medição mais modernos permitem alta frequência de obtenção de dados, com uma maior precisão, se comparados com leituras manuais, em campo, das mesmas. Contudo, os instrumentos seguem tendo um limite de exatidão, que reflete na acuracidade das medidas. Os motivos estão relacionados à manutenção e calibração de sensores, assim como à variabilidade natural do processo. Devido a estes fatos, a situação mais comum é que os grupos de dados não respondam às leis de conservação de massa e energia.

2.4 Aplicação e uso em colunas

Um estudo recente na área de Energia (SYED, DOOLEY, MADRON, E KNOFF, 2016) aplicou a RD para ajuste de medidas da cogeração de energia em um sistema de turbina a gás. A conclusão foi que, juntamente com um modelo preditivo eficiente de geração de compostos, a RD permite um melhor monitoramento e detecção de problemas nas turbinas, evitando inclusive violações nas emissões de gases. Outro estudo que exemplifica a gama de áreas na qual a RD pode ser utilizada trata de uma planta de geração de energia nuclear (LANGENSTEIN, JANSKY, LAIPPLE, 2004). Com os dados reconciliados, obtém-se um grau de incerteza de apenas $\pm 0,5\%$ na medida de potência térmica do reator, sem a necessidade de instalação de medidores de vazão mais precisos, por exemplo, para a vazão de água de alimentação do reator. A menor incerteza fez com que fosse possível obter um ganho de 30MW de energia gerados.

Em Kang, Kim, e Park (1996), um sistema de flash foi simulado, com o intuito de obter a eficiência de Murphree e a eficiência de vaporização. Utilizaram-se relações termodinâmicas propostas por Holland (1981) para as entalpias e os K-valores, considerados independentes das composições. Foram aplicados e comparados métodos de reconciliação que utilizam técnica de linearização e de programação não-linear (*NLP*). O estudo analisa a diferença de resposta desses dois métodos, frente ao aumento do número de erros grosseiros no sistema. Foi observado que o método MIMT/*NLP* (*Modified Iterative Measurement Test*) fornece valores mais realistas, de acordo com as restrições de processo, independente do número de erros grosseiros entre as medidas.

Em Romagnoli e Sanchez, (1999) encontram-se exemplos de estudos de caso da aplicação da reconciliação de dados, sendo que consta uma coluna de destilação de 23 cm, em escala piloto, que contava com um sistema de controle que monitorava variáveis de processo, como temperatura de alguns pratos e correntes, pressão do fundo da coluna, níveis de fundo e no condensador e vazões. A composição das correntes de alimentação, fundo e topo foi feita por análises em um densímetro instalado ao lado da coluna. O tempo necessário para todo o processamento e retorno da informação da composição das correntes demorava em torno de seis minutos.

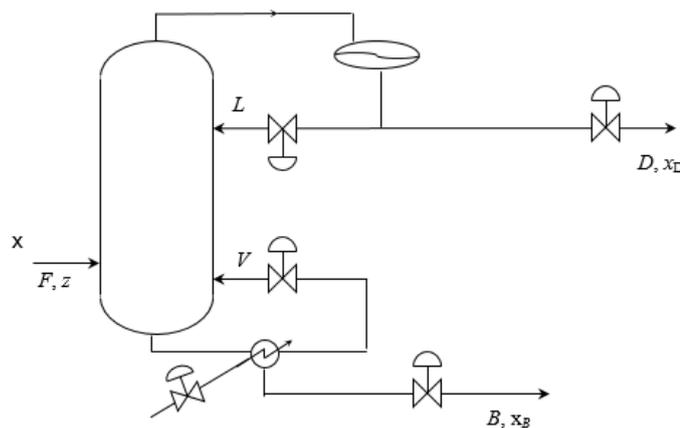
Para aplicar a reconciliação de dados, as restrições impostas nesse estudo foram os balanços de massa, de energia – globais e por componente – e cálculo do ponto de bolha. Os dados medidos nessa coluna, foram utilizados para rodar a simulação no *software* PROCESS. Caso gerassem valores significativamente diferentes dos valores de planta sem tratamento, indicava-se a presença de erros grosseiros. Após o tratamento com a RD, valores mais próximos dos dados reais foram encontrados. Foi também implementada a reconciliação não linear, pelo fato de ser um método rápido e que permite a implementação on-line. O estudo demonstrou que a simulação no *software* PROCESS realizada depois da reconciliação de dados ser implementada, levou a resultados mais próximos dos dados de planta. O fato de não terem sido utilizados todos os dados de temperatura nos pratos na RD confirma a ideia de que, depois de um tratamento de dados, é possível ter uma melhor percepção da situação real da planta através das posteriores simulações.

3 Metodologia

3.1 Descrição do Modelo da Coluna de Destilação

A abordagem empregada neste trabalho envolve a aplicação de um modelo simplificado da coluna de destilação, multicomponente e multiestágios, como base para a reconciliação de dados. Além de equações simplificadas de balanço, o método envolve um modelo termodinâmico aproximado (MTLS) que oferece baixo custo computacional. A coluna considerada apresenta uma alimentação e dois produtos, sendo o condensador total, embora a técnica possa considerar outros tipos de configuração. A Figura 3.1 mostra um esquema desse modelo, indicando as principais variáveis utilizadas no equacionamento.

Figura 3.1: Esquema representativo da estrutura da coluna de destilação.



Visando facilitar a solução do problema de reconciliação e a utilização do método sem reduzir consideravelmente a precisão, algumas hipóteses simplificativas foram determinadas:

- Condensador total e reboiler em equilíbrio termodinâmico;
- Alimentação de líquido saturado;
- Estágios 100% eficientes e em equilíbrio termodinâmico;
- Vazões constantes ao longo dos estágios: a vazão de vapor V se mantém constante em todos os estágios, ou seja:

$$V_j = V_{j-1} = V \quad (3.2)$$

A vazão interna de líquido, L , tem valores diferentes nas seções de retificação e esgotamento:

-Para $j = 1, \dots, s-1$, sendo s o estágio da alimentação:

$$L_1 = L_2 = \dots = L_{s-1} = L \quad (3.3)$$

- Para $j = s$:

$$L_s = L + F \quad (3.4)$$

- Para $j = s+1, \dots, N$:

$$L_j = L_{j+1} = \dots = L + F \quad (3.5)$$

Os balanços de massa globais da coluna podem ser escritos como:

$$F = D + B \quad (3.6)$$

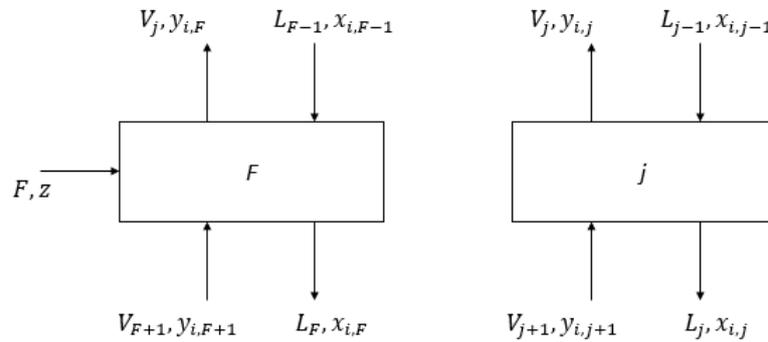
$$V = L + D \quad (3.7)$$

onde a taxa de produto destilado deixando o condensador é representada por D , a taxa de produto de fundo deixando o refeedor por B , e a corrente de refeedimento é dada por V , que é alimentada no condensador, sai sob as formas da corrente de refluxo, que retorna a coluna, e corrente de produto destilado.

Os balanços materiais por componente são divididos conforme as seções da coluna: condensador; retificação; alimentação; esgotamento; refeedor. A numeração dos pratos é feita da parte superior para a inferior da coluna (indicados por $j = 1, \dots, N$) e os componentes são indicados pela letra $i = 1, \dots, C$.

A Figura 3.2 apresenta as correntes e composições em cada prato, dando suporte às equações que descrevem os balanços da coluna.

Figura 3.2: Representação esquemática dos pratos de uma coluna, suas correntes e respectivas composições (prato da alimentação e demais pratos, respectivamente)



- Balanço de massa por componente no condensador:

$$Vy_{i,2} - (L + D)x_{i,1} = 0 \quad (3.8)$$

- Balanço de massa por componente para a seção de retificação, estágios $j = 2, \dots, s$:

$$L(x_{i,j-1} - x_{i,j}) + V(y_{i,j+1} - y_{i,j}) = 0 \quad (3.9)$$

- Balanço de massa por componente para o prato de alimentação ($j = s$):

$$Fz_i + L(x_{i,s-1} - x_{i,s}) + V(y_{i,s+1} - y_{i,s}) = 0 \quad (3.10)$$

- Balanço de massa por componente para a seção de esgotamento, estágios $j = s+1, \dots, N$:

$$(L + F)(x_{i,j-1} - x_{i,j}) + V(y_{i,j+1} - y_{i,j}) = 0 \quad (3.11)$$

- Balanço de massa por componente para o refeedor:

$$(L + F)x_{N-1} - (L + F - V)x_N - Vy_N = 0 \quad (3.12)$$

Variáveis:

F: vazão molar de alimentação;

V: vazão molar de refervimento

z: fração molar do do componente leve na alimentação;

$x_N \equiv x_B$: fração molar no produto de fundo;

D: vazão molar de destilado;

$x_1 \equiv x_D$: fração molar no produto de topo;

L: vazão molar de refluxo;

Neste trabalho, foram empregadas duas formas de cálculo da composição da fase vapor (y) em equilíbrio com a fase líquida (x), através da relação de equilíbrio para sistemas binários com volatilidade relativa constante:

Utilizou-se a volatilidade constante como teste preliminar da técnica de RD, para uma destilação binária, calculando-se o valor de y através da Equação (3.13), onde α é a volatilidade relativa.

$$y_{1,j} = \frac{\alpha x_{1,j}}{1 + (\alpha - 1)x_{1,j}} \quad (3.13)$$

A técnica de Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados (MTLS) (FERNANDES, 2001), que será explicada adiante, foi utilizada nos demais testes.

3.2 Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados

Os MTLS são funções simplificadas que resultam em uma aproximação do valor de certas propriedades termodinâmicas em determinada região do espaço termodinâmico. Na década de 70, eles surgiram como uma alternativa ao cálculo dessas propriedades, que exigisse menor demanda computacional para a simulação de processos. Além disso, esses modelos permitem que seja realizado o cálculo do ponto de bolha de forma não-iterativa, sendo possível assim sua utilização para cálculo de equilíbrio de fases em estudos de otimização (FERNANDES, 2001).

A aproximação do modelo tem sua região de aplicação adequada e qualidade definidas conforme a natureza da propriedade e o sistema que está sendo estudado. Os modelos mais usuais estão relacionados ao cálculo de equilíbrio de fases, incluindo a razão de equilíbrio de vaporização (K-valores), objeto do interesse desse trabalho, conforme ilustrado pela equação 3.14 (FERNANDES, 2001).

$$K \equiv \frac{y}{x} \quad (3.14)$$

O MTLS utilizado no trabalho se baseia no cálculo dos K-valores como função da pressão e composição de líquido e no ajuste de parâmetros estimados da mistura estudada.

Com estes parâmetros e os valores das frações molares de líquido x , do número de estágios e da pressão de operação da coluna (P_{coluna}), pode-se determinar os valores de y e a temperatura de equilíbrio da mistura através do seguinte procedimento:

1) Cálculo de R 's:

$$R_{i,1} = x_{i,1} \exp(\theta_{1,1} + \theta_{4,1} \cdot x_{i,2}^2 + \theta_{5,1} \cdot x_{i,3}^2) \quad (3.15)$$

$$R_{i,2} = x_{i,2} \exp(\theta_{1,2} + \theta_{4,2} \cdot x_{i,1}^2 + \theta_{5,2} \cdot x_{i,3}^2) \quad (3.16)$$

$$R_{i,3} = x_{i,3} \exp(\theta_{1,3} + \theta_{4,3} \cdot x_{i,1}^2 + \theta_{5,3} \cdot x_{i,2}^2) \quad (3.17)$$

2) Cálculo da temperatura de equilíbrio:

$$C_1 = Q_{1,1} \cdot R_1 + Q_{2,1} \cdot R_2 + Q_{3,1} \cdot R_3 \quad (3.18)$$

$$C_2 = Q_{1,2} \cdot R_1 + Q_{2,2} \cdot R_2 + Q_{3,2} \cdot R_3 \quad (3.19)$$

$$C_3 = -P_{coluna} + Q_{1,3} \cdot R_1 + Q_{2,3} \cdot R_2 + Q_{3,3} \cdot R_3 \quad (3.20)$$

3) Cálculo de T 's:

$$T_{i,1} = \frac{-C_2 + \sqrt{(C_2^2 - 4C_1C_3)}}{2C_1} \quad (3.21)$$

4) Cálculo de K 's:

$$K_{i,1} = \frac{1}{P_{col}} \exp\left(\theta_{1,1} + \frac{\theta_{2,1}}{T_{i,1} + \theta_{3,1}} + \theta_{4,1} x_{i,2}^2 + \theta_{5,1} x_{i,3}^2\right) \quad (3.22)$$

$$K_{i,2} = \frac{1}{P_{col}} \exp\left(\theta_{1,2} + \frac{\theta_{2,2}}{T_{i,1} + \theta_{3,2}} + \theta_{4,2} x_{i,1}^2 + \theta_{5,2} x_{i,3}^2\right) \quad (3.23)$$

$$K_{i,3} = \frac{1}{P_{col}} \exp\left(\theta_{1,3} + \frac{\theta_{2,3}}{T_{i,1} + \theta_{3,3}} + \theta_{4,3} x_{i,1}^2 + \theta_{5,3} x_{i,2}^2\right) \quad (3.24)$$

3.3 Implementação do Problema de Reconciliação de Dados

A reconciliação de dados consiste em um problema de otimização, com uma função objetivo definida, limitada pelas restrições correspondentes ao modelo do processo, que pode estar agregada a uma etapa de detecção de erros grosseiros nas medidas, conhecida como reconciliação robusta. Neste trabalho, considerou-se que as medidas não contêm erros grosseiros, somente de erros aleatórios com média zero em torno do valor correto, assim, será utilizado método de Reconciliação de Dados Clássica, também conhecida por Mínimos Quadrados Ponderados, técnica que não considera a presença de erros grosseiros. Deste modo, busca-se a minimização do erro quadrático entre as variáveis medidas e as variáveis reconciliadas pelo modelo, respeitando balanços materiais, energéticos e outras restrições essenciais para a validade do modelo (MAGALHÃES, 2013).

Deste modo, o problema da reconciliação de dados pode ser expresso de forma geral pela seguinte formulação:

$$\min_{var} \sum_{i=1}^w \frac{(vm_i - vr_i)^2}{\sigma_i^2} \quad (3.25)$$

Sujeito a:

$$h(var) = 0 \quad (3.26)$$

$$B(var) \geq 0 \quad (3.27)$$

Onde, na equação 3.25, vm_i representa o valor da variável medida, vr_i o valor da variável reconciliada, que é um subconjunto do vetor de variáveis de decisão var , e a diferença quadrática entre elas é ponderada pelo inverso da variância das medidas (σ_i^2). A essa função objetivo, estão impostas as restrições de igualdade, representadas por $h(var)$, e de desigualdade, representadas por $B(var)$.

A função objetivo empregada no trabalho é composta pela soma das parcelas referentes às seguintes medidas consideradas comuns em processos industriais e relevantes para a aplicação em coluna de destilação:

$$\min \left[\frac{(F_{vm} - F_{vr})}{\sigma_F^2} + \frac{(D_{vm} - D_{vr})}{\sigma_D^2} + \frac{(L_{vm} - L_{vr})}{\sigma_L^2} + \frac{(B_{vm} - B_{vr})}{\sigma_B^2} \right. \\ \left. + \frac{(z_{i,vm} - z_{i,vr})}{\sigma_{z_i}^2} + \frac{(xD_{i,vm} - xD_{i,vr})}{\sigma_{xD_i}^2} + \frac{(xB_{i,vm} - xB_{i,vr})}{\sigma_{xB_i}^2} \right] \quad (3.28)$$

Onde:

Variáveis medidas/reconciliadas:	B = vazão do refeedor;
F = vazão de alimentação;	z = composição da carga;
D = vazão de destilado;	xD = composição do destilado;
L = vazão de refluxo;	xB = composição do refeedor;

3.3.1 Obtenção dos Dados

As variáveis correspondentes a medidas típicas de variáveis operacionais de colunas de destilação, importantes para o cálculo de índices de desempenho, foram obtidas através de duas maneiras:

- 1) Para o caso estudado em que o modelo usado na reconciliação é idêntico ao sistema real, empregou-se a implementação da coluna no software MATLAB - versão R2015a. Depois de simulada no estado estacionário a partir de especificações de F, z, L e D, a elas foram somados vetores com valores aleatórios (correspondendo a 50 amostras para as variáveis de vazão e 10 para as de composição, buscando aproximar-se de uma situação real de indústria), criados com o comando *randn* no MATLAB com um desvio-padrão pré-definido, proporcional ao valor da medição. Desta forma, foi assegurada a hipótese de medidas com erros randômicos pequenos e de distribuição normal. A partir destes vetores, foram obtidos os valores médios para as medições e as variâncias das mesmas, utilizados na função objetivo.
- 2) Para o caso estudado em que o modelo usado na reconciliação apresenta desvio sistemático em relação ao sistema real, os dados correspondentes às medidas de planta foram obtidos através de simulação estacionário do modelo da coluna no

software Aspen Plus V8.8. Depois disto, foram exportados e tratados no Matlab como no caso anterior.

Com os valores médios das variáveis medidas e de suas variâncias, a técnica de reconciliação foi implementada utilizando também o programa MATLAB. A função objetivo continha as variáveis anteriormente descritas como variáveis medidas, e o problema contava com as restrições de balanço de massa global da coluna e do condensador, (equações 3.6 e 3.7, respectivamente) e dos balanços materiais por componente por prato da coluna (equações 3.8 a 3.12).

3.3.2 Reconciliação de Dados Segmentada (RDS)

Uma vez que a variância da medida é o peso que é dado para a variável na função objetivo, investigou-se o resultado da solução do problema de reconciliação dividindo-o em duas etapas:

- 1) Etapa 1: a função objetivo de reconciliação emprega somente as variáveis de vazão;
- 2) Etapa 2: a função objetivo de reconciliação engloba somente as variáveis de composição;

O vetor de resposta, correspondente aos dados reconciliados, é construído combinando-se as respostas das reconciliações em separado: os valores oriundos da etapa 1 são atribuídos para as variáveis F , D , L e B , e as demais variáveis de composição são obtidas pelo resultado da etapa 2. A ideia em dividir a reconciliação em duas etapas originou-se do fato de que as medidas de vazão podem apresentar valores bem mais elevados se comparados às de composição, que tem limite superior de 1. Assim, cada função objetivo trabalha com valores de ordem de grandeza comparável.

Esse método segmentado acarreta em uma maior flexibilidade dos resultados quanto ao fato de satisfazer os balanços de massa. Como são resolvidas separadamente, não se garante que os valores das vazões gerados pela etapa 1, se utilizados juntamente com os valores de composição oriundos da etapa 2 para os cálculos dos balanços de massa, resultem em uma solução sem desvios nos balanços de massa.

3.3.3 Resolução do Problema de Reconciliação

Diferentes técnicas para a solução do problema de RD são utilizadas, tais como: Multiplicadores de Lagrange, Programação Quadrática, Métodos Estocásticos e Algoritmos Algébricos.

O *solver* empregado para a resolução do problema no MATLAB foi o *fmincon*, *solver* de otimização do programa para problemas multivariáveis, com restrições lineares e não lineares, tanto de igualdade quanto de desigualdade. Encontra o mínimo local de uma função escalar, a partir de um chute inicial. A utilização do mesmo permite a escolha de um algoritmo de resolução do problema entre os seguintes: *interior-point*, *trust-region reflective*, *SQP*, ou *active-set*.

O algoritmo escolhido foi o SQP (*Sequential Quadratic Programming*), por permitir a reconciliação em estado estacionário para problemas com e sem restrição, sendo elas lineares ou não lineares. Esse método contém três etapas principais (Colemann, Branch e Grace, 1999 *apud* Paranhos, 2014) : a cada iteração realiza-se uma aproximação da Hessiana da função de Lagrange. Em seguida, gera-se um subproblema QP (*Quadratic Programming*) e sua solução é empregada no cálculo da busca em linha e da função objetivo. As opções do algoritmo utilizadas foram mantidas *default* para número máximo de avaliações (*MaxFunEvals*) e número máximo de iterações (*MaxIter*). A tolerância para as variáveis reconciliadas for substituída por $xtol = 1e^{-8}$.

4 Resultados e Discussões

Neste capítulo, serão apresentadas as respostas geradas pelas rotinas de otimização para o problema exposto no capítulo anterior, visando validar a utilização da técnica de reconciliação de dados para o tratamento de medidas. A análise foi feita para uma coluna de destilação binária com método de volatilidade relativa constante para o equilíbrio termodinâmico, e uma coluna para a mistura BTX, fazendo uso dos Modelos Termodinâmicos Locais Simplificados. Foram testados dois métodos de reconciliação (clássica e segmentada), para casos de diferentes números de estágios, com 3 níveis de variância (a, b e c), buscando valores reconciliados que fossem mais próximos dos reais, obedecendo às restrições dos balanços de massa.

4.1 Coluna de Destilação Binária – Volatilidade Relativa Constante

Foi empregado um modelo de coluna de destilação binária que utiliza o método da volatilidade relativa constante para cálculo da composição da fase vapor do componente, conforme a Equação (3.13). As implementações foram feitas para cinco cenários de coluna diferentes, sendo que, para cada caso, ainda foi averiguado o efeito do aumento da variância das medidas no resultado reconciliado.

Tabela 4.1: Parâmetros da coluna para os diferentes casos em análise.

Caso	Número de estágios	Estágio da Alimentação
1	8	5
2	10	5
3	12	7
4	15	10
5	20	10

Para a coluna de destilação de dois componentes, considerou-se alimentação equimolar, sendo que somente a fração molar do componente leve nas correntes foi reconciliada. Com isto, a restrição do somatório das frações molares do componente não é necessária na formulação do problema.

A Tabela 4.2 apresenta os valores nominais das variáveis reconciliadas, a média e variância das suas medidas. Pode-se observar a diferença na ordem de grandeza das variâncias das vazões em relação à variância das composições.

Tabela 4.2: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1.

	Unidade	Valores Nominais	Medidas – Caso a)		Erro	Medidas – Caso b)		Erro	Medidas – Caso c)		Erro
			Média	Variância		Média	Variância		Média	Variância	
F	kmol/min	1	1,0852	0,1435	-8,52%	0,9693	0,3214	3,07%	0,9862	0,3119	1,38%
D	kmol/min	0,5	0,4943	0,0244	1,14%	0,479	0,0638	4,20%	0,5558	0,0767	-11,16%
L	kmol/min	2,706	2,581	0,7826	4,62%	2,556	1,447	5,54%	2,4523	2,5156	9,38%
B	kmol/min	0,5	0,5013	0,0189	-0,26%	0,513	0,055	-2,60%	0,4924	0,0859	1,52%
z	molar	0,5	0,5002	0,0017	-0,04%	0,4982	0,0014	0,36%	0,38	0,015	24,00%
x _D	molar	0,8803	0,8736	0,0026	0,76%	0,9002	0,0028	-2,26%	0,8502	0,0175	3,42%
x _B	molar	0,1197	0,1197	1,93E-05	-0,03%	0,1164	0,0002	2,73%	0,1144	0,0004	4,40%
Erro médio:					2,20%				2,97%	7,89%	

Para verificar a eficácia do método proposto de reconciliação segmentada, esta foi comparada com o método tradicional da reconciliação de dados, envolvendo todas as variáveis simultaneamente.

Tabela 4.3: Resultados da reconciliação para o caso da destilação binária – volatilidade relativa constante para o Caso 1

	Unidade	Erro	Reconciliação	Erro	Reconciliação	Erro
		Medidas	segmentada	única		
F	kmol/min	-8,52%	1,0164	-1,64%	1,0181	-1,81%
D	kmol/min	1,14%	0,5060	-1,20%	0,5115	-2,30%
L	kmol/min	4,62%	2,5810	4,62%	2,5733	4,90%
B	kmol/min	-0,26%	0,5104	-2,08%	0,5066	-1,32%
z	molar	-0,04%	0,5002	-0,04%	0,4993	0,14%
x _D	molar	0,76%	0,8736	0,76%	0,8751	0,59%
x _B	molar	-0,03%	0,1197	-0,03%	0,1197	-0,03%
Erro médio:		2,20%		1,48%		1,58%

Tratando-se do Caso 1, com menor número de estágios, e sendo o caso com menores valores de variância, o erro das medidas não era elevado (média de 2,20%). Mesmo assim, as duas formas de reconciliação trouxeram melhoras em relação ao erro médio das medidas, sendo que o método segmentado gerou em uma redução um pouco maior nesse percentual.

A Tabela 4.4 apresenta o percentual de erro médio dos valores reconciliados frente aos valores corretos, comparando a resposta dos dois métodos em estudo, para os cinco casos propostos e três cenários de variância, sendo estes diferentes em magnitude.

Tabela 4.4: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação com relação aos valores reais para todos os casos estudados

Cenário a)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Medidas	2,20%	3,18%	2,26%	1,33%	3,98%
Rec. Segmentada	1,48%	1,92%	2,22%	1,27%	2,99%
Rec. Única	1,58%	2,60%	15,15%	1,13%	3,16%
Cenário b)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Medidas	2,97%	4,55%	3,18%	2,72%	1,55%
Rec. Segmentada	3,00%	3,54%	2,10%	2,11%	1,45%
Rec. Única	3,18%	3,77%	2,71%	2,16%	1,15%
Cenário c)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4	Caso 5
Medidas	7,89%	7,87%	6,56%	4,30%	7,05%
Rec. Segmentada	8,03%	7,36%	5,91%	2,78%	6,95%
Rec. Única	10,03%	11,61%	5,90%	4,22%	6,74%

Ao se comparar o erro médio das medidas com o das variáveis reconciliadas pelas duas técnicas, pode-se perceber que o método segmentado apresenta melhor desempenho na maioria dos casos, mas não em todos. Dentre as 15 análises feitas, este método trouxe um maior benefício às medidas em 11 delas. Isso faz com que não se possa defini-lo como superior incontestável, mas ainda assim é uma alternativa que não deve ser descartada.

Buscando-se averiguar o efeito do aumento do valor de α no resultado das reconciliações, foi feito o teste para o Caso 2, de 10 estágios, com α iguais a 2, 5 e 10. Assim, consegue-se variar a pureza dos componentes, sem alterar o número de estágios.

Tabela 4.5: Comparação do efeito de α na reconciliação segmentada para o Caso 2

		$\alpha = 2$		$\alpha = 5$		$\alpha = 10$	
		Erro	Erro	Erro	Erro	Erro	Erro
	Unidade	Medidas	Reconcil.	Medidas	Reconcil.	Medidas	Reconcil.
F	kmol/min	-6,05%	-0,54%	-1,79%	0,28%	-1,60%	0,14%
D	kmol/min	3,38%	0,38%	2,34%	0,99%	4,09%	3,33%
L	kmol/min	-5,42%	-5,42%	-0,09%	-0,09%	-10,83%	-10,83%
B	kmol/min	1,78%	-1,46%	0,69%	-0,42%	-2,40%	-3,05%
z	molar	2,42%	2,42%	2,34%	2,34%	1,39%	1,39%
xD	molar	-0,51%	-0,51%	3,34%	3,34%	1,23%	1,23%
xB	molar	-2,70%	-2,70%	-1,99%	-1,99%	3,67%	3,67%
		3,18%	1,92%	1,80%	1,35%	3,60%	3,38%

Percebe-se que, para todos os valores de α testados, a reconciliação de dados trouxe uma melhora ao erro das medidas. Conforme o valor de α aumenta, o resultado da reconciliação passa a ter um percentual de erro médio cada vez mais próximo ao das medidas. Isso indica que, conforme aumenta-se a pureza dos componentes, aproximando-

se de valores extremos como 1 e 0, a reconciliação encontra mais dificuldades de encontrar uma solução satisfatória, para um mesmo número de estágios, ou seja, para o mesmo número de equações no modelo.

4.2 Coluna Multicomponente – Modelos Termodinâmicos Simplificados

Os dois métodos de reconciliação propostos até então, por terem se mostrado promissores em um cenário mais simples, foram aplicados em um modelo de coluna com maior grau de detalhamento. Além do aumento no número de componentes, o método de cálculo do equilíbrio termodinâmico entre as fases evoluiu de um método de volatilidade relativa constante para um modelo termodinâmico local simplificado, específico para uma coluna de separação entre benzeno, tolueno e xileno (BTX), conforme explicado na seção 3.2. A rede foi construída a partir de 1369 cálculos de ponto de bolha da mistura BTX na pressão de 0,85 kgf/cm², utilizando o software VRTherm empregando modelo ideal para a fase vapor e o modelo UNIFAC para a fase líquida, com um grid de composições com uniforme para a composição da fase líquida. O MTLs BTX usado tem erro médio de 1,6498% (benzeno), 1,4053% (tolueno) e 4,9678% (xileno) e erro máximo de 3,8639% (benzeno), 4,5050% (tolueno), 17,5260% (xileno). As Tabela 4.6 e Tabela 4.7 mostram os valores dos parâmetros " θ " e " Q " para esse método.

Tabela 4.6: Valores dos parâmetros " θ " para MTLs da mistura BTX.

	<i>Benzeno</i> ₁	<i>Tolueno</i> ₂	<i>Xileno</i> ₃
θ_1	7,6527	8,7251	15,0137
θ_2	-1970,01	-2672,49	-8096,46
θ_3	-95,9356	-77,3406	127,403
θ_4	0,0117	-0,0026	-0,0455
θ_5	0,0210	-0,0045	-0,2119

Tabela 4.7: Valores dos parâmetros " Q " para MTLs da mistura BTX.

	<i>Benzeno</i> ₁	<i>Tolueno</i> ₂	<i>Xileno</i> ₃
Q_1	2,00E-07	-0,00013	0,02068
Q_2	4,60E-08	-3,06E-05	0,00513
Q_3	4,83E-11	-3,28E-08	5,62E-06

4.2.1 Reconciliação envolvendo as Frações Molares de dois Componentes

Nesta análise, segue-se a mesma abordagem utilizada para a coluna de destilação binária quanto às composições. Ou seja, tratando-se de três componentes, apenas dois deles – neste caso, benzeno e tolueno – tiveram suas composições reconciliadas, enquanto que o valor da fração molar de xileno pode ser obtido por diferença.

A composição da alimentação considerada da coluna BTX foi benzeno: 0,5; tolueno: 0,3; xileno: 0,2 (em fração molar). Utilizou-se um valor de pressão constante em toda coluna (P_{col}) de 1 kgf/cm². As Tabelas 4.8 e 4.9 mostram os valores utilizados para o teste da reconciliação pelos dois métodos para o Caso 1.a) e seus resultados. A Tabela 4.8 apresenta os valores de erros médios percentuais para cada caso, para análise da eficácia do método.

Tabela 4.8: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1, para reconciliação de dois componentes

	Unidade	Valores Nominais	Medidas - caso a)		Erro
			Média	Variância	
F	kmol/min	1	1,03852	0,10149	-3,85%
D	kmol/min	0,5	0,46551	0,01676	6,90%
L	kmol/min	2,706	2,48033	0,75100	8,34%
B	kmol/min	0,5	0,50078	0,01870	-0,16%
z1	molar	0,5	0,50374	0,00109	-0,75%
xD1	molar	0,9502	0,9558	0,0015	-0,59%
xB1	molar	0,0498	0,0509	0,0000	-2,25%
z2	molar	0,3	0,30503	0,00038	-1,68%
xD2	molar	0,0438	0,04385	0,00001	-0,12%
xB2	molar	0,5562	0,57508	0,00159	-3,39%

Erro médio: 2,80%

Tabela 4.9: Resultados da reconciliação pelos dois métodos em estudo para o Caso 1

	Unidade	Erro Medidas	Erro Rec. Única	Erro Rec. Segmentada
F	kmol/min	-3,85%	8,60%	1,50%
D	kmol/min	6,90%	9,30%	5,13%
L	kmol/min	8,34%	-13,67%	8,34%
B	kmol/min	-0,16%	7,91%	-2,13%
z1	molar	-0,75%	-0,49%	-1,38%
xD1	molar	-0,59%	-1,01%	-1,13%
xB1	molar	-2,25%	-4,43%	-2,21%
z2	molar	-1,68%	-1,83%	-2,30%
xD2	molar	-0,12%	-2,96%	-0,20%
xB2	molar	-3,39%	-1,03%	-2,68%

Erro médio: 2,80% 5,12% 2,70%

Tabela 4.10: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação

Erro a)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	2,80%	1,84%	1,42%	2,66%
Rec. Segmentada	2,70%	1,65%	18,26%	61,46%
Rec. Única	5,12%	4,52%	5,79%	43,45%
Erro b)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	4,36%	3,36%	8,12%	2,10%
Rec. Segmentada	3,96%	3,00%	3,81%	10,95%
Rec. Única	6,93%	6,83%	61,93%	11,56%
Erro c)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	9,73%	5,60%	4,51%	5,07%
Rec. Segmentada	7,80%	5,09%	4,63%	12,90%
Rec. Única	9,12%	4,82%	6,21%	13,19%

Percebe-se que, somente nos Casos 1 e 2 (8 e 10 estágios, respectivamente) foi possível obter alguma consistência na resposta e benefício no tratamento dos dados com a técnica de RD. Para estas duas colunas, observa-se uma redução no erro médio de todas as reconciliações feitas através do método segmentado. As respostas fornecidas pelo método de reconciliação única acarretaram um erro médio maior do que o erro das medidas para os casos 1 e 2 – exceto por uma única avaliação, Caso 2.c. Isso faz com que a superioridade do método segmentado seja ainda mais clara.

Já se tratando dos Casos 3 e 4, os erros médios reconciliados por ambos os métodos foram todos superiores aos erros das próprias medidas. O Caso (20 estágios) foi excluído da análise, pois alguns valores das variáveis reconciliadas foram zerados pelo método, gerando um erro médio muito elevado, não representativo para a mesma. Portanto, a partir do caso 3 o método não pode ser mais considerado eficaz nas condições em que está implementado.

A mudança de um caso para outro, que pode ser o motivo pelo qual a técnica deixa de funcionar, é o aumento do número de estágios. Uma coluna com mais estágios consegue atingir melhor separação dos componentes da mistura, gerando valores cada vez mais extremos de composição. Para a coluna BTX utilizada, isso se reflete em valores cada vez mais próximos de 1 para a composição do benzeno no topo, e valores aproximadamente iguais a zero para os demais componentes nessa corrente. Tendo valores muito pequenos para as medidas das composições e, por consequência, para suas variâncias, o método deixa de apresentar bons resultados.

4.2.2 Reconciliação Envolvendo todos os Componentes

Visando encontrar uma alternativa para o caso de valores pequenos das variáveis de composição a serem reconciliadas, foi realizada a reconciliação geral de todos os componentes da coluna BTX. Com isto, pode-se desconsiderar na função objetivo os termos que envolvem valores de composição pequenos, já que as demais composições nas correntes de produto estarão representadas no problema e terão valores próximo de um. Isso foi feito atribuindo-se peso 0 à estas composições, ou seja, multiplicando o termo de cada uma dessas composições (x_{D3} e x_{B1}) na função objetivo por zero. Assim, os valores pequenos não afetam na reconciliação e não prejudicam a aplicação do método nas demais parcelas.

As condições de operação e alimentação são as mesmas do caso discutido na seção 4.2.1. A fim de implementar esta solução, foram empregados pesos para cada termo da função objetivo, conforme indicados na Tabela 4.11. A solução convencional do problema de RD tem os termos da função objetivo multiplicados pelos pesos indicados (p_0). Já a reconciliação segmentada é formada pela combinação de duas soluções: uma que leva os pesos indicados por p_1 e que gera os resultados das vazões; e outra na qual a função objetivo é multiplicada pelos valores indicados por p_2 e que fornece os valores reconciliados das composições.

Tabela 4.11: Pesos atribuídos a cada variável, para cada solução.

variáveis	F	D	L	B	z1	z2	z3	x _{D1}	x _{D2}	x _{D3}	x _{B1}	x _{B2}	x _{B3}
p_0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
p_1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0
p_2	0	0	0	0	1	1	1	1	1	0	0	1	1

Tabela 4.12: Exemplo de dados utilizados na reconciliação para o Caso 1

	Unidade	Valores Nominais	Medidas – caso a)		Erro
			Média	Variância	
F	kmol/min	1	1,0309	0,0666	-3,09%
D	kmol/min	0,5	0,4356	0,0231	12,89%
L	kmol/min	2,706	2,7549	0,8490	-1,81%
B	kmol/min	0,5	0,5123	0,0247	-2,46%
Z ₁	molar	0,5	0,5094	0,0005	-1,88%
x _{D1}	molar	0,9500	0,9705	0,0040	-2,16%
x _{B1}	molar	0,0500	0,0493	0,0000	1,35%
Z ₂	molar	0,3	0,0000	0,0006	0,50%
x _{D2}	molar	0,0437	0,0452	0,0000	-3,46%
x _{B2}	molar	0,5563	0,5550	0,0010	0,24%
Z ₃	molar	0,2	0,1992	0,0001	0,40%
x _{D3}	molar	0,0002	0,0002	0,0000	1,29%
x _{B3}	molar	0,3998	0,3953	0,0005	1,11%

Erro médio: 2,51%

Tabela 4.13: Erros fornecidos pela reconciliação dos três componentes, através dos dois métodos em estudo

		Erro	Erro	Erro
	Unidade	Medidas	Rec. Única	Rec. Segmentada
F	kmol/min	-3,09%	5,22%	1,74%
D	kmol/min	12,89%	5,15%	9,54%
L	kmol/min	-1,81%	-13,38%	-1,81%
B	kmol/min	-2,46%	5,29%	-6,05%
Z ₁	molar	-1,88%	-0,88%	-1,08%
x _{D1}	molar	-2,16%	-0,80%	-0,80%
x _{B1}	molar	1,35%	-1,01%	-0,74%
Z ₂	molar	0,50%	1,77%	1,86%
x _{D2}	molar	-3,46%	-5,28%	-5,32%
x _{B2}	molar	0,24%	2,26%	2,14%
Z ₃	molar	0,40%	0,29%	0,26%
x _{D3}	molar	1,29%	2,52%	2,88%
x _{B3}	molar	1,11%	0,21%	-0,06%
Erro médio:		2,51%	3,39%	2,64%

Tabela 4.14: Comparativo dos erros pelos dois métodos de reconciliação.

Cenário a)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	2,51%	2,00%	1,67%	2,69%
Rec. Segmentada	2,64%	2,26%	2,88%	1448,81%
Rec. Única	3,39%	3,48%	70,59%	200,61%
Cenário b)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	3,35%	2,56%	3,26%	3,99%
Rec. Segmentada	3,23%	2,86%	4,26%	1041,05%
Rec. Única	3,17%	4,26%	6,02%	1086,26%
Cenário c)	Caso1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Medidas	5,14%	6,36%	4,86%	4,89%
Rec. Segmentada	2,83%	6,45%	4,59%	1147,26%
Rec. Única	4,21%	6,08%	4,61%	1169,35%

O resultado da análise dos erros médios das reconciliações para o cenário estudado na seção 4.2.2 não foi satisfatório nem conclusivo. O método segmentado não se mostrou superior ao único, pois na maior parte dos casos, os valores reconciliados apresentaram maior erro que as medidas em si. Em apenas quatro casos houve melhoria no valor das medidas, sendo que em dois deles o melhor método foi o segmentado, e nos outros dois, o método único foi superior.

Um possível motivo para tal comportamento é que, mesmo tendo sido atribuídos peso zero, algumas variáveis de valores muito pequenos ainda influenciam nos valores finais reconciliados através dos balanços de massa que são restrições do problema de otimização em estudo.

5 Reconciliação com Erro de Modelo

Para os casos descritos nos capítulos anteriores, o mesmo modelo implementado em MATLAB era utilizado para a geração dos dados - que eram posteriormente tratados para simular as medidas - e para a resolução do problema de reconciliação. Neste capítulo, será discutido o caso em que os dados são gerados através de um modelo diferente, no caso, um modelo da coluna BTX no Aspen Plus v8.8, caracterizando um problema de desvio sistemático, ou *bias*, de modelo. Esta situação também se refere ao caso em que as medidas correspondem a dados reais de processo, nos quais, além de erros de medição, existe incerteza sobre o modelo do sistema.

O modelo da coluna de destilação BTX Aspen Plus é o mesmo empregado no trabalho de Müller (2012) e conta com 34 estágios, sendo a alimentação no 16º estágio (*above-plate*). A composição da alimentação é dada por Benzeno (componente 1) = 0,61; Tolueno (componente 2) = 0,25; Xileno (componente 3) = 0,14. Foram definidos os valores de vazão de destilado ($D = 5 \text{ kmol min}^{-1}$) e a vazão de refluxo ($L = 12 \text{ kmol min}^{-1}$); o valor de pressão no topo ($P_{\text{topo}} = 1,1 \text{ kgf cm}^{-2}$), pressão no fundo da coluna ($P_{\text{fundo}} = 1,7 \text{ kgf cm}^{-2}$) e vazão mássica de alimentação total ($F = 41000 \text{ kg hr}^{-1}$). Para o cálculo do equilíbrio de fases, este modelo emprega o modelo ideal para a fase vapor e o modelo NRTL para a fase líquida, com parâmetros do banco de dados do próprio programa, portanto diferentes do MTLS construído para a simulação do sistema BTX.

5.1 Reconciliação Empregando Vazões, Composições e Temperatura

A reconciliação de dados para esse caso é acrescida dos termos de temperatura no topo (T_{topo}) e no fundo da coluna (T_{fundo}). Segue-se a mesma metodologia trabalhada na seção 4.2.2, com a reconciliação de todos os componentes da mistura e aplicando os pesos anteriormente indicados às variáveis. Trabalha-se com o caso de maior variância (caso "c"). Os termos de temperatura receberam pesos iguais a zero, por serem valores muito superiores às demais medidas, sendo reconciliados pelo fato de estarem presentes nas restrições do modelo termodinâmico.

Tabela 5.1: Valores nominais, medidas, variância e percentual de erro das medidas frente aos valores nominais

	Unidade	Valores	Medidas - caso c)		Erro
		Nominais	Média	Variância	"Dados Reais"
T topo	K	355,92	347,83	5038,26	2,27%
T fundo	K	411,25	401,34	6452,40	2,41%
F	kmol/min	7,98	9,34	36,580	-17,04%
D	kmol/min	5,00	4,89	9,7476	2,27%
L	kmol/min	12,00	10,89	61,560	9,24%
B	kmol/min	2,98	3,00	2,6925	-0,52%
z1	molar	0,6083	0,5829	0,0154	4,17%
xD1	molar	0,9714	0,9465	0,0350	2,56%
xB1	molar	1,46E-06	1,46E-06	3,20E-14	-0,24%
z2	molar	0,2506	0,2331	0,0027	7,00%
xD2	molar	0,0286	0,0254	4,12E-05	11,21%
xB2	molar	0,6225	0,6212	0,0140	0,21%
z3	molar	0,1411	0,1513	0,0004	-7,26%
xD3	molar	1,10E-08	1,14E-08	8,06E-18	-3,47%
xB3	molar	0,3775	0,3810	0,0045	-0,93%

Erro médio: **4,72%**

Tabela 5.2: Percentuais de erro das medidas e das reconciliações pelos dois métodos em relação aos valores nominais

	Unidade	Erro	Erro	Erro
		Medidas	Rec. Única	Rec. Segmentada
T topo	K	2,27%	-4,12%	-2,71%
T fundo	K	2,41%	-4,53%	1,69%
F	kmol/min	-17,04%	100,00%	-3,41%
D	kmol/min	2,27%	100,00%	-3,53%
L	kmol/min	9,24%	100,00%	9,24%
B	kmol/min	-0,52%	100,00%	-3,20%
z1	molar	4,17%	16,21%	0,25%
xD1	molar	2,56%	15,96%	-0,73%
xB1	molar	-0,24%	-67470%	-1744301%
z2	molar	7,00%	100,00%	3,65%
xD2	molar	11,21%	100,00%	6,11%
xB2	molar	0,21%	100,00%	7,30%
z3	molar	-7,26%	-244,24%	-7,11%
xD3	molar	-3,47%	-1710281037%	-1018%
xB3	molar	-0,93%	-163,34%	-2,65%

Erro médio: **4,72%** **114023310,35%** **116358,06%**

Erro médio sem xB1 e xD3: **88,34%** **3,97%**

Os resultados apresentados pelo tratamento das medidas indicam que, como a diferença na ordem de grandeza das medidas e variâncias entre as vazões e as composições é significativa, o método de reconciliação numa etapa única não se mostrou eficaz. Alguns valores reconciliados foram zerados, originando erros de 100%. Já o método de reconciliação segmentada apresentou um resultado satisfatório, quando se despreza o erro das variáveis de valores muito pequenos, como a composição de Benzeno no fundo (xB1) e a composição de Xileno no topo (xD3). Mesmo estas variáveis tendo peso nulo na função objetivo de reconciliação, elas têm seu valor alterado pela rotina indiretamente a fim de satisfazer os balanços de massa. Entre as prováveis causas desta discrepância dos valores pequenos de composição estão a precisão do algoritmo de otimização e as diferenças de ordem de grandeza entre as variáveis. Além disso, o MTLs é um modelo simplificado que apresenta erro médio de 1,6498% para benzeno, 1,4053% para tolueno, e 4,9678% para xileno em relação ao modelo do sistema e não inclui explicitamente a restrição do somatório das frações molares, a qual é usada para geração dos parâmetros do modelo.

Como tentativa de minimizar os erros percentuais das variáveis “xB1” e “xD3”, além da variável não ser reconciliada, foram adicionadas duas restrições na rotina que fixavam o valor dessas duas variáveis como sendo iguais às suas respectivas medidas.

Tabela 5.3: Valores nominais, reconciliados e erro das medidas e da reconciliação

	Unidade	Valores Nominais	Erro Medidas	Reconciliação Segmentada	Erro Rec. Segmentada
T topo	K	355,92	2,27%	366,25	-2,90%
T fundo	K	411,25	2,41%	404,79	1,57%
F	kmol/min	7,98	-17,04%	8,26	-3,41%
D	kmol/min	5,00	2,27%	5,18	-3,53%
L	kmol/min	12,00	9,24%	10,89	9,24%
B	kmol/min	2,98	-0,52%	3,08	-3,20%
z1	molar	0,6083	4,17%	0,5935	2,44%
xD1	molar	0,9714	2,56%	1,0033	-3,28%
xB1	molar	1,46E-06	-0,24%	1,46E-06	0%
z2	molar	0,2506	7,00%	0,2628	-4,88%
xD2	molar	0,0286	11,21%	0,0024	91,49%
xB2	molar	0,6225	0,21%	0,6150	1,21%
z3	molar	0,1411	-7,26%	0,1509	-6,95%
xD3	molar	1,10E-08	-3,47%	1,10E-08	0%
xB3	molar	0,3775	-0,93%	0,3950	-4,65%

Erro médio: **4,72%**

9,27%

Erro médio sem xD2

3,40%

Com base nessa implementação com valores muito pequenos fixados, o maior percentual de erro passou a se encontrar na variável de composição de Tolueno no topo, que também apresenta um valor pequeno de medição ($x_{D_2} = 0,0286$) e de variância ($var\ x_{D_2} = 4,12e^{-05}$). Foi possível, então, verificar que é possível melhorar os valores das medidas, se os valores de forem fixados.

5.2 Efeito da Inclusão do termo da Temperatura

O modelo da coluna no Aspen Plus fornece valores de temperatura no topo e no fundo da coluna. A fim de estudar o efeito da inclusão das variáveis de temperatura no problema de reconciliação, dentro do vetor das variáveis reconciliadas, comparou-se um caso de reconciliação com estas variáveis e sem as mesmas. Manteve-se o mesmo modelo e estrutura de coluna utilizada até então.

Tabela 5.4: Valores nominais, medidas e erros para os problemas com e sem o termo de temperatura

		Valores Nominais	Medidas (com T)	Erro (com T)	Valores Nominais	Medidas (sem T)	Erro (sem T)
	Unidade						
T topo	K	355,92	376,13	-5,68%			
T fundo	K	411,25	402,73	2,07%			
F	kmol/min	7,98	8,60	-7,70%	7,9852	9,35	-17,04%
D	kmol/min	5,00	4,31	13,80%	4,9983	4,88	2,27%
L	kmol/min	12,00	10,00	16,68%	12,0000	10,89	9,24%
B	kmol/min	2,98	2,99	-0,31%	2,9868	3,00	-0,52%
z1	molar	0,6083	0,6020	1,04%	0,6234	0,5957	4,44%
x _{D1}	molar	0,9714	0,9907	-1,99%	1,0056	0,9799	2,56%
x _{B1}	molar	1,46E-06	1,57E-06	-7,35%	0,0026	0,0026	-0,14%
z2	molar	0,2506	0,2714	-8,28%	0,2499	0,2330	6,77%
x _{D2}	molar	0,0286	0,0287	-0,34%	0,0001	9,60E-05	11,22%
x _{B2}	molar	0,6225	0,6930	-11,32%	0,6683	0,6669	0,21%
z3	molar	0,1411	0,1302	7,68%	0,1400	0,1513	-8,09%
x _{D3}	molar	1,10E-08	1,06E-08	3,46%	0,0000	9,38E-06	-3,23%
x _{B3}	molar	0,3775	0,3927	-4,04%	0,3744	0,3778	-0,93%

Erro médio:		6,1%		Erro médio:		4,4%
--------------------	--	-------------	--	--------------------	--	-------------

Tabela 5.5: Comparação entre erros das medidas e dos resultados das reconciliações para o caso com e sem temperatura

	Unidade	Com Temperatura		Sem Temperatura	
		Erro Medidas	Erro Rec. Segmentada	Erro Medidas	Erro Rec. Segmentada
T topo	K	-5,68%	-2,71%		
T fundo	K	2,07%	1,69%		
F	kmol/min	-7,70%	4,21%	-17,04%	2,07%
D	kmol/min	13,80%	8,87%	2,27%	-5,82%
L	kmol/min	16,68%	16,68%	9,24%	3,80%
B	kmol/min	-0,31%	-3,59%	-0,52%	15,28%
z1	molar	1,04%	0,06%	4,44%	-2,75%
xD1	molar	-1,99%	3,86%	2,56%	6,79%
xB1	molar	-7,35%	-1960450,47%	-0,14%	-0,64%
z2	molar	-8,28%	-6,81%	6,77%	3,24%
xD2	molar	-0,34%	-147,41%	11,22%	-62161,23%
xB2	molar	-11,32%	0,80%	0,21%	7,71%
z3	molar	7,68%	7,14%	-8,09%	12,24%
xD3	molar	3,46%	-28413,95%	-3,23%	4,28%
xB3	molar	-4,04%	3,60%	-0,93%	-3,35%
Erro Médio:		6,1%	16,0%	4,4%	11,9%

Através da Tabela 5.5, pode-se verificar que a presença ou não das variáveis de temperatura não pode ser vinculada com o desempenho do método. O fator preponderante quanto ao efeito da reconciliação ainda é encontrado nos valores pequenos das composições, suas medidas e variâncias.

5.3 Estimação da composição da alimentação

Uma das razões que motivaram esse estudo foi, através do método de reconciliação de dados, verificar a possibilidade de estimar de forma *on-line* e com precisão adequada a composição da carga de uma coluna de destilação para cálculo de índices de desempenho. Para tanto, algumas modificações foram realizadas nas rotinas, por exemplo, a retirada desta variável da função objetivo de reconciliação. Como esses valores ainda estão presentes nas restrições – no balanço material por componente no prato de alimentação, elas permanecem no vetor de variáveis.

Foram reconciliados valores para o problema descrito na seção 4.2.1, sem erro de modelo e sem uso das temperaturas na reconciliação de dados, e conforme aquele descrito

nas seções 5.1 e 5.2, empregando o valor da temperatura na reconciliação e com erro de modelo (geração de dados a partir do Aspen Plus).

Tabela 5.6: Valores reconciliados para o caso sem erro de modelo – estimação da composição de carga

	Unidade	Valores Nominais	Medidas		Erro	Reconciliação	Erro
			Média	Variância	Medidas	Segmentada	Rec. Segmentada
F	kmol/min	1,00	1,13	0,3240	-12,96%	1,0173	-1,73%
D	kmol/min	0,50	0,49	0,0763	2,20%	0,5155	-3,09%
L	kmol/min	2,71	2,89	2,7857	-6,79%	2,8898	-6,79%
B	kmol/min	0,50	0,47	0,0835	5,43%	0,5018	-0,36%
x _{D1}	molar	0,9816	0,9131	0,0664	6,97%	0,9816	0,00%
x _{B1}	molar	0,0184	0,0189	0,0000	-2,88%	0,0188	-2,19%
x _{D2}	molar	0,0058	0,0059	0,0000	-0,73%	0,0058	0,04%
x _{B2}	molar	0,5942	0,6436	0,0177	-8,31%	0,6476	-8,98%

Erro médio:

5,78%

2,90%

Tabela 5.7: Valores reconciliados para o caso com erro de modelo – estimação da composição de carga

	Unidade	Valores Nominais	Medidas		Erro	Rec. Segmentada	
			Média	Variância	Medidas		Erro
T topo	K	355,92	350,31	5189,9054	1,58%	365,6926	-2,75%
T fundo	K	411,25	401,14	6836,0742	2,46%	405,4140	1,42%
F	kmol/min	7,98	9,34	36,5797	-17,04%	8,2562	-3,41%
D	kmol/min	5,00	4,89	9,7476	2,27%	5,1765	-3,53%
L	kmol/min	12,00	10,89	61,5599	9,24%	10,8914	9,24%
B	kmol/min	2,98	3,00	2,6925	-0,52%	3,0797	-3,20%
x _{D1}	molar	0,9714	0,9465	0,0350	2,56%	0,9587	1,30%
x _{B1}	molar	1,46E-06	1,46E-06	3,20E-14	-0,24%	1,46E-06	-0,24%
x _{D2}	molar	0,0286	0,0254	4,12E-05	11,21%	0,0464	-61,97%
x _{B2}	molar	0,6225	0,6212	0,0140	0,21%	0,6141	1,35%
x _{D3}	molar	1,10E-08	1,14E-08	8,06E-18	-3,47%	1,14E-08	-3,47%
x _{B3}	molar	0,3775	0,3810	0,0045	-0,93%	0,3959	-4,88%

Erro médio:

4,31%

8,06%

Erro médio sem x_{D2}:

3,16%

O cálculo da composição da alimentação pode ser feito através do balanço de massa global (BMG) por componente da coluna, utilizando os valores de vazões reconciliadas, indicados na Tabela 5.6 e Tabela 5.7. Assim, temos que:

$$z_i = \frac{D \cdot x_{Di} + B \cdot x_{Bi}}{F}, i = 1, 2, 3 \quad (5.1)$$

Tabela 5.8: Resultados estimados para composição de carga dos dois modelos de coluna.

	Rec. Sem Temperatura			Rec. Com Temperatura		
	Correto	Por BMG	Erro	Correto	Por BMG	Erro
z1	0,5000	0,5067	-1,3%	0,6083	0,6011	1,2%
z2	0,3000	0,3224	-7,5%	0,2506	0,2582	-3,0%
z3	0,2000	0,1710	14,5%	0,1411	0,1477	-4,7%

Com base nos valores fornecidos para a composição da carga através do cálculo via Equação (5.1) e dados contidos nas Tabela 5.6 e Tabela 5.7, percebe-se que é possível fazer a estimativa da composição de carga da coluna, utilizando o método de reconciliação segmentada, onde os valores pequenos de composições foram fixados. Os desvios encontrados nos valores de z e observados na Tabela 5.8 não são significativos nesse caso, mantendo o mérito da resposta.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

Medidas podem ser tratadas por diversas técnicas, visando aumentar a eficiência das análises às quais são submetidas. A aplicação da técnica de reconciliação de dados foi testada para um modelo de coluna de destilação, visando encontrar medidas mais precisas e de acordo com os balanços materiais da mesma. Foi proposta uma abordagem que usa um modelo termodinâmico simplificado (MTLS), a fim de se obter um ganho em velocidade computacional e facilitar a resolução do problema.

As implementações foram realizadas para uma coluna de destilação binária genérica, baseada na volatilidade relativa entre os componentes, e para uma coluna da mistura Benzeno-Tolueno-Xileno (BTX). Para a coluna com três componentes, foi estudada a reconciliação de apenas dois deles e dos três componentes. Também foram estudadas as situações nas quais o modelo usado na reconciliação não é mesmo usado na geração dos dados, simulando a situação real. Por fim, estudou-se o efeito da variável de temperatura na reconciliação.

Foi proposta uma alternativa para a técnica de reconciliação, aqui chamada de reconciliação segmentada. Com base nos resultados obtidos, pode-se concluir que a mesma se mostra promissora para casos onde as variáveis a serem reconciliadas possuam ordens de grandeza diferentes, como no caso de vazões e composições. A técnica retornou as variáveis reconciliadas com os menores valores de erro percentual médio para a maioria dos casos estudados em relação à abordagem da reconciliação numa etapa única. A desvantagem da reconciliação segmentada é que os balanços materiais não são necessariamente satisfeitos com os dois subconjuntos de variáveis reconciliadas.

Foram encontrados problemas ao se tratar dos casos que representavam colunas de destilação com um número elevado de estágios, com valores de composições muito pequenos para alguns componentes nas correntes de produto. Esses valores pequenos estão naturalmente associados a valores pequenos de variância, o que faz com que estes termos sejam preponderantes na solução do problema de reconciliação. Além deste efeito numérico, pode-se atribuir os erros elevados para frações molares pequenas, o fato do MTLS, por se tratar de uma aproximação, com precisão limitada.

A comparação feita para uma coluna de mesmos parâmetros através do modelo do MATLAB (sem termo de temperatura) e outra através do Aspen Plus (com o termo de

temperatura) no capítulo 4.2.3, indicou que o acréscimo do termo de temperatura não desencadeou uma perda na qualidade do método. Os resultados obtidos foram comparáveis, de forma que ainda se vincula a perda de eficácia do método aos valores pequenos de composição envolvidos na análise.

Através do capítulo 5.3, foi possível inferir que a estimação da composição de carga da coluna é viável. A reconciliação de dados excluindo esta variável foi reproduzida para dois casos de coluna BTX, com diferente número de estágios e de acordo com dois casos estudados (com e sem erro de modelo). Para os dois casos, pode-se encontrar valores significativamente próximos dos nominais, validando a utilização da técnica com esse objetivo.

Em suma, a nova alternativa da técnica de RD apresentou resultados satisfatórios, tendo sido testada para diferentes cenários. Para os valores de vazões da coluna, a eficácia do método é mais evidente. Já se tratando das composições, os valores muito pequenos podem prejudicar a análise e um método para evitar os problemas decorrentes disto devem ser melhor estudados.

Ainda permanece, para trabalhos futuros, a ideia de se trabalhar com vazões molares por componente, ao invés das composições, buscando minimizar o efeito negativo das variáveis com baixos valores. Também podem ser analisados o efeito de outro tipo de função objetivo no problema – por exemplo, *quasi-weighted least square estimator*, onde a função leva em conta as diferenças elevadas nos erros das medidas (ZHANG, SHAO, CHEN, WANG, E QIAN, 2010)- e da adição de restrições mais rígidas quanto às composições. Não foi explorado o efeito da estimação/correção dos parâmetros do MTLs utilizados durante a reconciliação, alternativa que poderia reduzir a discrepância antes os modelos. Pode-se também complementar o estudo com a análise da reconciliação de dados dinâmicos, não apenas estacionários.

7 Referências

- BENQLILOU, C. **Data reconciliation as a framework for chemical processes optimization and control**. Catalunya: Universitat Politecnica de Catalunya, 2004.
- BHAT, S. A.; SARAF, D. N. Steady-state identification, gross error detection, and data reconciliation for industrial process units. **Industrial & engineering chemistry research**, 2004. v. 43, n. 15, p. 4323–4336.
- CORDÃO, I. J. G. **Implantação de sistema de reconciliação de dados em uma refinaria de petróleo**. Salvador: Universidade Federal da Bahia, 2005. Disponível em: <<http://www.repositorio.ufba.br/ri/handle/ri/9962>>.
- FARIAS, A. C. **Avaliação de estratégias para reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009. Disponível em: <<http://www.lume.ufrgs.br/bitstream/handle/10183/23935/000742919.pdf?sequence=1> \npapers3://publication/uuid/B8100131-4CDB-48E9-B315-F67C3FDE162E>.
- FARSANG, B.; NÉMETH, S.; ABONYI, J. Role of steady state data reconciliation. **Hungarian journal of industry and chemistry**, 2013. v. 41, n. 1, p. 65–75.
- FERNANDES, P. R. **Rede de modelos termodinâmicos locais**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2001.
- KANG, M. S.; KIM, I.-W.; PARK, S. Stage efficiency estimation by modified mimt using nlp. **Korean journal of chemical engineering**, 1996. v. 13, n. 2, p. 159–164.
- LANGENSTEIN, M.; JANSKY, J.; BERND LAIPPLE. Finding megawatts in nuclear power plants. **12th international conference on nuclear engineering**, 2004. p. 1–10.
- MAGALHÃES, A. **Reconciliação de dados para estimar a vazão de água de alimentação de uma usina nuclear tipo pwr utilizando um algoritmo de otimização com inspiração quântica**. Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.
- MARTINEZ PRATA, D. *et al.* Simultaneous robust data reconciliation and gross error detection through particle swarm optimization for an industrial polypropylene reactor. **Chemical engineering science**, 2010. v. 65, n. 17, p. 4943–4954.
- MÜLLER, G. H. **Energia requerida para a separação como ferramenta de otimização operacional e controle de colunas de destilação**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012.
- NARASIMHAN, S.; JORDACHE, C. **Data reconciliation and gross error detection** -. Houston: Gulf Publishing Company, 2000.
- PARANHOS, J. F. **Método dos modelos termodinâmicos simplificados (mmts): uma abordagem eficiente para descrever o equilíbrio líquido - vapor**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.
- ROMAGNOLI, J.; SANCHEZ, M. Case studies. **Data processing and reconciliation for chemical process operations**. 1st. ed. San Diego: Academic Press, 1999, V. 77, p. 227–251.

SINGHMANEESKULCHAI, P.; ANGSUTORN, N.; SIEMANOND, K. Dynamic data reconciliation in a hot-oil heat exchanger for validating energy consumption. **Chemical engineering transactions**, 2013. v. 35, n. 1992, p. 493–498.

STAUDT, P. B. **Modelagem e simulação dinâmica de colunas de destilação**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2007.

SYED, M. S. *et al.* Enhanced turbine monitoring using emissions measurements and data reconciliation. **Applied energy**, 2016. v. 173, p. 355–365.

VU, H. D. Iterative algorithms for data reconciliation estimator using generalized t - distribution noise model. **Industrial & engineering chemistry research**, 2014. v. 53, n. 4, p. 1478–1488. Disponível em: <<http://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/ie401787z>>.

ZANETTI, JOÃO PEDRO CHAGAS, A. **Detecção de erros grosseiros e reconciliação de dados numa central petroquímica**. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2012.

ZHANG, Z. *et al.* Quasi-weighted least squares estimator for data reconciliation. **Computers and chemical engineering**, 2010. v. 34, p. 154–162.