



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



Reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros aplicados a uma petroquímica

Autor: Guilherme Silveira Pamplona

Orientador: Rafael de Pelegrini Soares

Porto Alegre, Novembro de 2018

Reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros aplicados a uma petroquímica

Guilherme Silveira Pamplona

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado como requisito parcial para a obtenção de título de Engenheiro Químico da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Orientador: Prof. Dr. Rafael de Pelegrini Soares

Porto Alegre, novembro de 2018

Sumário

Sumário	iii
Agradecimentos	iv
Resumo	v
Abstract	vi
Lista de Figuras	vii
Lista de Tabelas	viii
Lista de Símbolos	iv
Lista de Abreviaturas e Siglas	v
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	3
2.1 Medições	3
2.2 Classificação das Variáveis	6
2.3 Reconciliação de dados	7
2.4 Detecção de Erros Grosseiros	8
2.5 Otimização	10
3 Aspectos Computacionais e Problema Estudado	13
3.1 Descrição da Planta Industrial	13
3.2 Avaliação das medições	14
3.3 iiSE	18
3.4 Coleta de Dados	19
4 Resultados	21
4.1 Avaliação das Redundâncias	21
4.2 Reconciliação de Dados	22
4.3 Detecção de Erros Grosseiros	30
5 Conclusões	31
6 Referências	32

Agradecimentos

À minha mãe, Mara Silveira Pamplona, pela educação, amor e compaixão, e por sempre se mostrar uma mulher forte e presente na minha vida.

À minha irmã, Roberta Silveira Pamplona, por todos os conselhos, auxílios e momentos de felicidade.

À minha namorada, Teresa Arteché Escosteguy, pelo apoio constante e por todos os momentos de alegria e de amor vividos juntos.

À minha família, por sempre se mostrarem presente.

Aos meus amigos, por sempre me apoiarem e estarem ao meu lado, mesmo nos momentos mais difíceis.

Ao meu orientador, Prof. Rafael de Pelegrini Soares, pelos ensinamentos e pela disponibilidade, possibilitando a realização desse trabalho.

Ao Luciano Barros Zini, pela sua dedicação e sua participação em minha formação acadêmica e profissional.

Ao Leonardo de Alencastro Vignol, por todos os ensinamentos, conselhos, ética e auxílio na elaboração do presente trabalho, contribuindo de forma impar na minha formação.

Especialmente, ao meu amado pai, Otávio Roberto Pamplona, por todo carinho, amor e dedicação empenhados na minha formação. Apesar da ausência física, o seu legado é eterno.

Resumo

Devido ao desenvolvimento tecnológico, as empresas que desejam manter sua competitividade no mercado atual necessitam se atualizar constantemente, buscando sempre melhores equipamentos e instrumentos. Para a indústria, por exemplo, um dos grandes inconvenientes é a confiabilidade de determinados medidores, pois sabe-se que sua precisão é finita e eles estão sujeitos a diversos distúrbios. A técnica de reconciliação de dados surge, então, como uma importante ferramenta para a obtenção de dados mais fidedignos e confiáveis, dando uma maior segurança para quem utiliza as informações obtidas por medidores. O presente trabalho consiste na aplicação desse método em um processo industrial, onde são comparados três métodos de otimização diferentes. O método de otimização *Method of Moving Asymptotes* (MMA) apresentou a melhor performance quando comparado aos métodos Nelder-Mead e *Interior Point Optimizer* (Ipopt), pois obteve uma boa minimização da função objetivo com um número de simulações reduzido. Como o trabalho proposto implementou distúrbios considerados erros aleatórios, não houve a detecção de erros grosseiros pelo teste global, resultado coerente e esperado pela análise.

Palavras-chave: Reconciliação de dados. Detecção de erros grosseiros. Medidores de vazão. Petroquímica.

Abstract

Due to technological development, companies that wish to remain competitive in the current market need to constantly update themselves, always seeking better equipment and instruments. For industry, for example, one of the major drawbacks is the reliability of certain meters, as it is known that their accuracy is finite, and that they are subject to various disturbances. Hence, the data reconciliation technique emerges as an important tool for obtaining more reliable and trustworthy data, providing greater security to those who use the information obtained by meters. The present work consists in the application of this method in an industrial process, where three different optimization methods are compared. The Method of Moving Asymptotes (MMA) optimization method presented the best performance when compared to the Nelder-Mead and Interior Point Optimizer (Ipopt) methods, as it obtained a good minimization of the objective function with a reduced amount of simulations. As the proposed paper implemented disturbances considered random errors, there was no detection of gross errors by the global test, which is a consistent and expected outcome by the analysis.

Keywords: Data reconciliation. Gross error detection. Flow meters. Petrochemical.

Lista de Figuras

Figura 3.1: Esquema da planta industrial.	13
Figura 3.2: Representação da planta no liSE.	19
Figura 4.1: Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método Nelder-Mead.	23
Figura 4.2: Simulações realizadas pelo método Nelder-Mead.	24
Figura 4.3: Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método Ipopt.	25
Figura 4.4: Simulações realizadas pelo método Ipopt.	26
Figura 4.5: Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método MMA.	27
Figura 4.6: Simulações realizadas pelo método MMA.	28
Figura 4.7: Comparação dos ajustes dos métodos.	29

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Identificação de medidores.	15
Tabela 4.1: Análise de redundâncias criadas.	21
Tabela 4.2: Valores obtidos pelo método Nelder-Mead.	22
Tabela 4.3: Valores obtidos pelo método Ipopt.	25
Tabela 4.4: Valores obtidos pelo método MMA.	27
Tabela 4.5: Resultados detecção de erros grosseiros.	30

Lista de Símbolos

e	erro total
x	valor medido
m	valor real
ε	erro aleatório
δ	erro grosseiro
y_i	valor reconciliado
x_i	valor medido
H_0	hipótese nula
H_1	hipótese alternativa
α	grau de confiança
v	grau de liberdade
r	vetor dos resíduos
A	matriz de incidência
V	variância
W	matriz diagonal
γ	parâmetro para detecção de erro grosseiro
F_i	vazão mássica da corrente i
N_i	rotação da bomba
V_i	volume por rotação
ρ	densidade
η	eficiência

Lista de Abreviaturas e Siglas

BIPM *Bureau International des Poids et Mesures*

iiSE *Industrial Integrated Simulation Environment*

Ipopt *Interior Point Optimizer*

MMA *Method of Moving Asymptotes*

1 Introdução

Em um mercado globalizado, que se torna cada dia mais dinâmico e exigente, é imprescindível para uma empresa que deseja competir ter um rápido, fácil e amplo acesso à informação. Nesse sentido, todas as decisões que forem tomadas devem estar interligadas a diferentes fontes de dados, que disponibilizam informações essenciais, em tempo real, para as pessoas envolvidas nesse processo de decisão, onde a confiabilidade e a precisão desses dados são características fundamentais. (Prata, 2009)

Em refinarias, processos petroquímicos e plantas químicas modernas, uma grande quantidade de variáveis (como pressão, temperatura e vazão) são medidas constantemente, e esses dados são gravados a fim de serem utilizados para controle de processo, otimização online ou avaliações econômicas de processo. Para isso, sistemas de coleta de dados e computadores modernos colaboram para que essa volumosa quantidade de dados possa ser armazenada e processada, tendo frequências de coleta na ordem de minutos ou até mesmo de segundos. Esse uso de computadores elimina os erros presentes em coletas manuais, e isso contribui imensamente para a acurácia e a validação desses dados de processo. Justamente essa maior quantidade e confiabilidade de dados que permite um estudo mais aprofundado, buscando a melhoria da consistência e da acurácia dos mesmos. (Narasimhan e Jordache, 2000)

Para se conhecer o real e exato estado em que um processo se encontra num determinado momento, é necessário corrigir os valores de medições observados, pois é sabido que todas essas medições sempre possuem algum tipo de erro. Há dois tipos de erros que podem ser encontrados em uma planta: randômico e sistemático. Os erros randômicos são de pequena magnitude, podendo ser causado tanto por flutuações normais do processo como por variações inerentes à operação de um instrumentos. Em contrapartida, os erros sistemáticos são erros de maior magnitude, e são causados por calibração incorreta ou mal funcionamento do instrumento, vazamentos de processo, entre outros. (Romagnoli e Sanchez, 2000)

O presente trabalho tem como objetivo aplicar a técnica de reconciliação de dados e de detecção de erros grosseiros em uma planta industrial de polímero, comparando diferentes métodos de otimização existentes. Para essa análise, utilizou-se balanços de massa globais, desconsiderando as composições. O trabalho está dividido em seis capítulos diferentes.

O Capítulo 1 é a introdução do trabalho, apresentando a motivação e qual tema que é abordado. O Capítulo 2 é destinado à revisão bibliográfica, onde é exposto diversos conceitos relevantes para a compreensão do trabalho em questão, através de fundamentos teóricos buscados em referência reconhecidas. O Capítulo 3 apresenta todos os métodos aplicados, como foi realizada a coleta de dados, quais hipóteses foram assumidas, quais fatores foram levados em consideração e como que os métodos de reconciliação de dados e de detecção de erros grosseiros foram implementados. O Capítulo 4 é responsável por mostrar todos os resultados que foram obtidos nos métodos empregados, bem como uma análise crítica dos mesmos. O Capítulo 5 é encarregado de mostrar todas as conclusões que puderem ser realizadas a partir do estudo, e o Capítulo 6 mostra todas as referências que foram utilizadas como base para a realização do trabalho.

2 Revisão Bibliográfica

O presente capítulo tem o intuito de apresentar alguns conceitos necessários para que se compreenda os métodos de reconciliação de dados e de detecção de erros grosseiros, abordando os medidores e os erros existentes nas medições, a classificação das variáveis de processo, o procedimento para realização de cada um dos métodos em estudo, o conceito de otimização e alguns de seus métodos.

2.1 Medições

2.1.1 Medidores de vazão

Ao longo dos últimos 60 anos, a utilização de medidores de vazão vem crescendo cada vez mais, mas não apenas pelo aumento de sua necessidade para fins contábeis (como por exemplo, quando uma empresa fornece alguma matéria prima para outra), mas também pela sua aplicação direta em processos de manufatura. Nesse período, com o aumento das exigências do mercado, os medidores trazem cada vez mais confiabilidade, acuracidade, linearidade, repetibilidade e rangeabilidade. (Crabtree, 2009)

Para a realização de balanços materiais e de cálculos financeiros, a utilização de medidores de vazão mássica é preferível quando comparado com medidores de vazão volumétrica, haja visto que a massa independe de qualquer outra propriedade do fluido (como pressão, densidade ou temperatura). (Frenzel *et al.*, 2011)

Dentre todos os tipos de medidores existentes, há, no presente trabalho, a necessidade de se destacar dois tipos de medidores específicos: Coriólis e Placa de Orifício. O do tipo Coriólis é um medidor de vazão mássica e, portanto, conforme descrito anteriormente, independe de outras propriedades do fluido. Ele possui a vantagem de não ter partes móveis e de possuir uma excelente acurácia (tipicamente $\pm 0,15\%$ da vazão), porém possui um custo elevado e tem limitações quanto ao tipo de fluido que está sendo medido. (Frenzel *et al.*, 2011)

O medidor do tipo placa de orifício é o mais simples e o mais utilizado de todos, onde o seu princípio de medição é a diferença de pressão através da placa, tendo, portanto, um funcionamento diferente do outro medidor citado anteriormente. Esse medidor é o mais difundido industrialmente e consiste em uma placa metálica que possui um orifício (na maior parte das vezes, no centro), por onde o fluido escoar. Utilizando duas tomadas de pressão, sendo uma delas antes e a outra depois da placa, é possível calcular a vazão através de algumas equações de conservação. A

maioria dos medidores desse tipo apresentam uma acurácia que varia de 2 a 3%. (Crabtree, 2009)

2.1.2 Tipos de erros de medições

O uso de computadores permite não apenas que os dados sejam coletados com uma frequência maior, mas também resulta na eliminação dos erros presentes nas coletas manuais, o que culminou numa melhora na acurácia dos dados de processo. O aumento na quantidade de informações coletadas pode ser explorado para melhorar a consistência dos dados através de uma checagem sistemática. (Narasimhan e Jordache, 2000)

Haja visto que as medições de variáveis de processo, como vazões, temperaturas e concentrações estão sujeitas não apenas a erros de medição, mas também à variabilidade do processo, não é possível esperar que qualquer conjunto de medições respeite as leis de conservação. Espera-se que, normalmente, tais erros sejam randômicos, tendo um valor esperado igual a zero, mas ocasionalmente pode-se encontrar erros com valores esperados diferentes de zero, o que pode ser causado por diferentes razões. (Crowe, 1996)

Para que se tenha um pleno entendimento do método de reconciliação de dados, é indispensável compreender esses possíveis erros que podem estar envolvidos nas medições. Em geral, uma medida possui imperfeições, dando origem a um erro no valor aferido. Os erros podem ser separados em duas grande categorias: os erros aleatórios e os erros sistemáticos (também chamados de erros grosseiros). (*Bureau International Des Poids et Mesures* - BIPM, 2008)

Matematicamente, o erro da medição pode ser definido como a diferença entre o valor medido e o valor verdadeiro de uma variável, e esta diferença também pode ser vista como a soma de suas duas contribuições, uma dos erros aleatórios e outra dos erros grosseiros, conforme a Equação 2.1. (Farias, 2009)

$$e = x - m = \epsilon + \delta \quad (2.1)$$

Onde:

e: erro total

x: valor medido

m: valor real

ϵ : erro aleatório

δ : erro grosseiro

Os erros aleatórios apresentam duas características interessantes, que são o fato de não se conhecer a sua magnitude (ou seja, sua ordem de grandeza), e o fato de não saber o seu sinal (implicando o desconhecimento se a medição está sendo subestimada ou superestimada). Essas características fazem com que duas medidas, realizadas com o mesmo instrumento e sob condições de medições idênticas, possam apresentar valores diferentes. Os erros aleatórios podem ter diferentes causas, como flutuações no fornecimento de energia, distúrbios na transmissão do sinal, ruído na conversão do sinal, entre outros. (Farias, 2009)

Dado o fato que os erros aleatórios podem ter diferentes fontes, algumas das quais estão além do controle de qualquer engenheiro, eles não podem ser totalmente eliminados e estarão presentes em qualquer medição. Eles normalmente são correspondentes às componentes de alta frequência da medição, sendo geralmente pequenos em magnitude, exceto por alguns picos eventuais. (Narasimhan e Jordache, 2000)

O segundo tipo de erro, definido como erros grosseiros, ao contrário dos erros aleatórios, não são causados por eventos randômicos. Ele é um erro sistemático, tendo apenas uma fonte como causa e apresentando sempre a mesma magnitude e o mesmo sinal, porém desconhecidos. Dessa forma, se medições forem realizadas pelo mesmo instrumento sob condições idênticas, a contribuição do erro sistemático para a medição será sempre a mesma. Há diferentes razões que podem causar esse tipo de erro, como uma instalação incorreta, uma calibração mal feita, depósito de sólidos, corrosões, entre outros. (Narasimhan e Jordache, 2000)

Uma das hipóteses assumidas para a realização da reconciliação de dados é que os erros seguem uma distribuição normal, por ser assumido apenas a existência de erros aleatórios. No entanto, um erro grosseiro viola essa hipótese, e caso alguma medida que contenha um erro grosseiro seja introduzida na reconciliação, as estimativas resultantes conterão erros significativos, com esse erro influenciando algumas ou, quiçá, todas as variáveis envolvidas. Esse fenômeno é chamado de *smearing*. (Liebman *et al.*, 1992)

Esses erros de medidas podem levar a diferentes complicações. Pode-se pensar, por exemplo, em um sistema de controle, onde a vazão de um determinado composto é definida pelo valor da vazão de outro composto, buscando uma razão

constante entre elas. Assim, se há erro na medição de qualquer uma das duas vazões, poderá haver um desequilíbrio entre elas, e isso, dependendo do processo, pode não só causar uma perturbação no processo, mas também levar a situações de extremo perigo.

2.2 Classificação das variáveis

Em processos industriais, centenas (ou até milhares) de variáveis são envolvidas, e por questões técnicas e econômicas, nem todas as variáveis de processo possuem medição. Muitas vezes abre-se mão de medir uma variável, pois ela pode ser estimada a partir de outras variáveis medidas. (Farias, 2009)

Para a aplicação da técnica de reconciliação de dados, é importante, portanto, classificar as variáveis, e uma das classificações é proposta por Romagnoli e Sanchez (2000):

Para uma variável não medida:

- Variável observável: a variável é classificada observável se for possível estimar seu valor a partir das medições das outras variáveis utilizando as equações de modelos;
- Variável não observável: a variável é classificada como não observável quando não se pode estimar o seu valor utilizando as medições de outras variáveis utilizando as equações de modelos;

Para uma variável medida:

- Variável redundante: a variável é denominada redundante quando ela segue sendo observável mesmo após a retirada de sua medição;
- Variável não redundante: a variável é não redundante quando após a retirada de sua medição, ela se torna uma variável não observável;

Essa classificação é realizada para que se diminua o conjunto das restrições através da eliminação das variáveis não medidas e não redundantes, indicando a melhor maneira de como proceder com a reconciliação de dados. O principal objetivo do método aplicado é melhorar a precisão dos dados medidos através do uso da propriedade da redundância. (Farias, 2009)

A finalidade do processo de reconciliação de dados é o aumento da precisão do conjunto de dados medidos, utilizando apenas a propriedade de redundância. Ademais, para realizar a análise da presença de erros grosseiros, é indispensável que

haja redundância nas medidas, pois uma medida não redundante é eliminada e, portanto, não participa do processo (Farias, 2009).

Em relação às redundâncias, Farias (2009) divide elas em redundância temporal e em redundância espacial, definindo-as da seguinte maneira:

- Redundância temporal: Nesse caso, as medidas do processo são realizadas com uma taxa alta de frequência, produzindo muitos dados, que seriam além do necessário para determinar o estado estacionário desse processo. Dessa forma, caso o processo esteja em estado estacionário, é possível, então, explorar esse excesso de dados, para que se obtenha uma reconciliação mais precisa. Essa redundância pode ser usada como pré-tratamento dos dados, fazendo com que se tenha uma redução prévia na variabilidade da variável, diminuindo, então, a presença de *outliers* (picos ocasionais de curta duração);
- Redundância espacial: As variáveis do processo guardam relações entre si, e essas relações são pautadas pelas restrições físicas impostas ao sistema, como as leis de conservação de massa e de energia. Assim, diante de certas restrições, é preciso que se tenha um número mínimo de medidas para estimar todas as variáveis envolvidas no processo. Se eventualmente existir um número de medidas superior ao mínimo, há a ocorrência de redundância espacial (Narasimhan e Jordache, 2000 *apud* Farias, 2009), e o sistema é considerado redundante. A redundância espacial é um pré-requisito para a realização da reconciliação de dados, pois se não houver uma medida além do mínimo, o sistema é classificado como não determinado e não é possível realizar nenhuma correção dos dados.

2.3 Reconciliação de dados

2.3.1 Reconciliação de dados clássica

Conforme mencionado anteriormente, a reconciliação de dados é uma técnica que melhora a acurácia dos dados de processo ajustando seus valores para que satisfaçam as restrições do processo. As magnitudes dos ajustes realizados para as medições são minimizadas, uma vez que os erros presentes nas medições são presumidamente pequenos. As variáveis não medidas também são obtidas no processo de reconciliação de dados. (Narasimhan e Jordache, 2000)

Em geral, o método pode ser matematicamente definido como o seguinte problema de otimização:

$$\min \sum_{i=1}^m \frac{(y_i - x_i)^2}{\sigma_i^2} \quad (2.2)$$

Sujeito a:

$$g_k(y_i) = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n \quad (2.3)$$

A equação 2.2 representa a função objetivo, que é a minimização da soma total ponderada dos quadrados dos ajustes realizados nas medições, onde o y_i representa o valor reconciliado, o x_i representa o valor da medição, e o termo σ_i^2 representa a variância de cada valor medido. A equação 2.3 representa todas as n restrições às quais o sistema que está sendo estudado deve obedecer.

Em sua formulação geral, o modelo é definido por algumas equações algébrico-diferenciais, podendo tanto representar algumas leis de conservação (massa, energia, etc...) ou quaisquer outras funções que possuam relações entre as variáveis. As restrições mais comuns são os balanços de massa e de energia, pois tais equações são conhecidas, e a chance de haver algum tipo de erro em sua estrutura é baixa. (Crowe, 1996 *apud* Farias, 2009)

2.4 Detecção de erros grosseiros

Uma das premissas básicas para a reconciliação de dados é a inexistência de erros grosseiros. Ou seja, quando se realiza a técnica, considera-se que há apenas erros aleatórios nas medições e que os erros grosseiros não estão presentes. Caso esse pressuposto não seja válido, todos os resultados obtidos a partir da reconciliação podem ser bem inacurados ou, até mesmo, impossíveis. Frente a isso, é primordial que se realize uma análise a respeito da possibilidade da existência de erros grosseiros, a fim de validar os dados e garantir que todos os números obtidos possuem uma alta confiabilidade. (Narasinham e Jordache, 2000)

Assim, Narasinham e Jordache (2000) classificam os erros grosseiros em dois tipos principais. O primeiro tipo de erro grosseiro está intimamente ligado à performance do instrumento, onde estão incluídos nessa categoria os fenômenos de *drifting*, *bias* na medida, descalibração e falha total de medição. Já o segundo tipo de erro grosseiro está ligado às restrições de modelos e incluem, por exemplo, perdas

de material ou de energia através de vazamentos dos equipamentos, bem como possíveis parâmetros de modelos que são inaccurados.

Segundo Romagnoli e Sanchez (2000), existem diferentes maneiras de se identificar erros grosseiros, como, por exemplo, através de uma análise teórica de todos os efeitos que estão levando a um erro grosseiro, ou através da realização de medições de uma determinada variável de processo, utilizando dois métodos diferentes com precisões diferentes, ou também checando se todas as equações de balanço estão sendo respeitadas.

Geralmente, o método de detecção de erros grosseiros se baseia na realização de testes de hipóteses sobre uma determinada quantidade de dados ou, até mesmo, sobre transformações lineares deles (Farias, 2009).

2.4.1 Teste Global

O teste global, segundo Farias (2009), avalia todo o conjunto de dados, e se baseia no valor da função objetivo de mínimos quadrados ponderados que foi obtido durante a etapa de otimização, sendo o teste mais utilizado na literatura. Ainda segundo Farias (2009), esse teste possui uma vantagem, que seria a sua enorme simplicidade de realização (justificando sua presença em praticamente qualquer estratégia de detecção), mas também possui uma desvantagem, que seria o fato de ele não fornecer a informação a respeito do motivo da existência desse erro grosseiro, tampouco sua localização, exigindo que mais testes sejam realizados para que tais informações sejam obtidas.

Os testes de hipóteses, conforme explicam Ramagnoli e Sanchez (2000), é baseado, então, na ideia de testar os dados em relação a duas hipóteses alternativas, onde a primeira delas é chamada de hipótese nula (H_0), que corresponde à inexistência de erros grosseiros, e a segunda é chamada de hipótese alternativa (H_1), que, se verdadeira, assume a existência de erros grosseiros.

O teste global utiliza como base o vetor dos resíduos dos balanços r , que pode ser matematicamente definido como:

$$r = Ay \tag{2.4}$$

onde y representa o vetor das medições e A representa o conjunto reduzido de equações redundantes.

Definindo V como a matriz covariância dos resíduos e W a matriz diagonal das variâncias das medições, pode-se definir que:

$$V = AWA^T \quad (2.5)$$

Caso haja a existência de erros grosseiros, o vetor r indicará qual é o grau de violação das restrições do processo, tendo a variável utilizada pelo teste estatístico a seguinte forma:

$$\gamma = r^T V^{-1} r \quad (2.6)$$

Essa variável de teste coincide com o valor da função objetivo obtida na reconciliação de dados clássica. Sob a hipótese nula H_0 , γ obedece uma distribuição χ^2 , que tenha um grau de confiança α , v graus de liberdade, de tal forma que v é o número de linhas da matriz A . Sob o grau de confiança α , caso o valor de γ seja superior ao valor do χ^2 , a hipótese nula é rejeitada, a hipótese alternativa aceita, e então depreende-se que há a existência de erros grosseiros.

2.5 Otimização

A otimização é uma ferramenta muito importante para a análise de sistemas físicos e para a tomada de decisões. O primeiro passo para que se possa realizá-la é identificar o objetivo, que será uma medida quantitativa que represente o sistema que está sendo estudado, e que pode retratar diferentes grandezas, como lucro, tempo, energia potencial, ou qualquer quantidade ou combinação de quantidades que possa ser representada por um único número. Esse objetivo quantitativo dependerá de diferentes características do sistema, que são chamadas de variáveis. A principal função da otimização é achar os valores das variáveis para os quais se terá um valor objetivo ótimo. Muitas vezes essas variáveis devem obedecer determinadas condições (ou restrições) do sistema em estudo, pois é sabido que há valores que são fisicamente incoerentes para algumas grandezas, como um valor de tempo ou de vazão ser negativo. (Nocedal e Wright, 1999)

Uma etapa fundamental para o processo de otimização é a seleção do método que será utilizado. Existem diferentes métodos que podem ser utilizados, de tal modo que cada um possui suas vantagens e desvantagens, ou seja, para cada situação, há de se analisar qual método é mais adequado. Essa decisão é relevante pois ela

determina se o problema será resolvido de maneira mais rápida ou mais lenta, ou, até mesmo, se ele conseguirá ser resolvido. O que distingue um método do outro é como que se dará as iterações, pois todos começam com uma estimativa inicial, mas eles diferem em como prosseguir para a próxima estimativa, até que se chegue na solução final (Lunelli, 2015). Algumas características importantes são apresentadas por Baudin e Steer (2009), segundo Lunelli (2015):

- Robustez: capacidade do método em resolver diversos problemas diferentes tendo diferentes pontos de partida;
- Eficiência: não deve demandar tempo ou um alto armazenamento;
- Precisão: deve levar a uma solução com alta precisão, não sendo demasiadamente sensível a possíveis erros de arredondamento ou erros nos dados, existentes nos métodos numéricos.

2.5.1 Métodos de otimização

O método de otimização Nelder-Mead é um dos métodos mais utilizados para otimização, servindo para localizar um ponto ótimo (tanto máximos como mínimos), e utiliza o conceito de um simplex. Um simplex é uma figura geométrica com n dimensões e que possui $n+1$ vértices, tendo como exemplos um triângulo em um plano, ou um tetraedro em um espaço tridimensional. O algoritmo forma um simplex, e tenta melhorar esse simplex substituindo o pior vértice por um vértice melhor onde a função objetivo tenha um valor melhor que o anterior, e para obter o novo valor, há três operações possíveis: reflexão, expansão e contração do simplex. Caso nenhuma das três operações alcancem um valor melhor, é realizado um encolhimento, onde n novos vértices formam um novo simplex com o melhor vértice do simplex anterior. Para quebrar esse ciclo de iteração, é necessário estabelecer um nível de tolerância ou número máximo de iterações, onde após atingido, o algoritmo considera que o ponto ótimo foi localizado (Han e Neumann, 2006).

O método Ipopt (da sigla *Interior Point Optimizer*) é um pacote de software de código aberto, servindo para otimizar sistemas não-lineares em larga escala. É importante ressaltar que essa metodologia foi desenvolvida para localizar pontos ótimos locais, de tal forma que se a função objetivo estudada possuir mais de um mínimo ou máximo local, a resposta final obtida não será única e dependerá dos valores iniciais definidos. (Wachter, 2009)

O método de otimização MMA (sigla para *Method of Moving Asymptotes*) funciona da seguinte forma: em cada iteração, o ponto atual é dado, um subproblema aproximado é gerado, onde determinadas funções são substituídas por funções convexas, e a escolha dessas funções aproximadas é baseado no gradiente da função no ponto de iteração e também em alguns parâmetros de assíntotas móveis que são atualizadas em cada iteração baseada na iteração anterior, e assim sucessivamente. (Svanberg, 2007)

3 Aspectos Computacionais e Problema Estudado

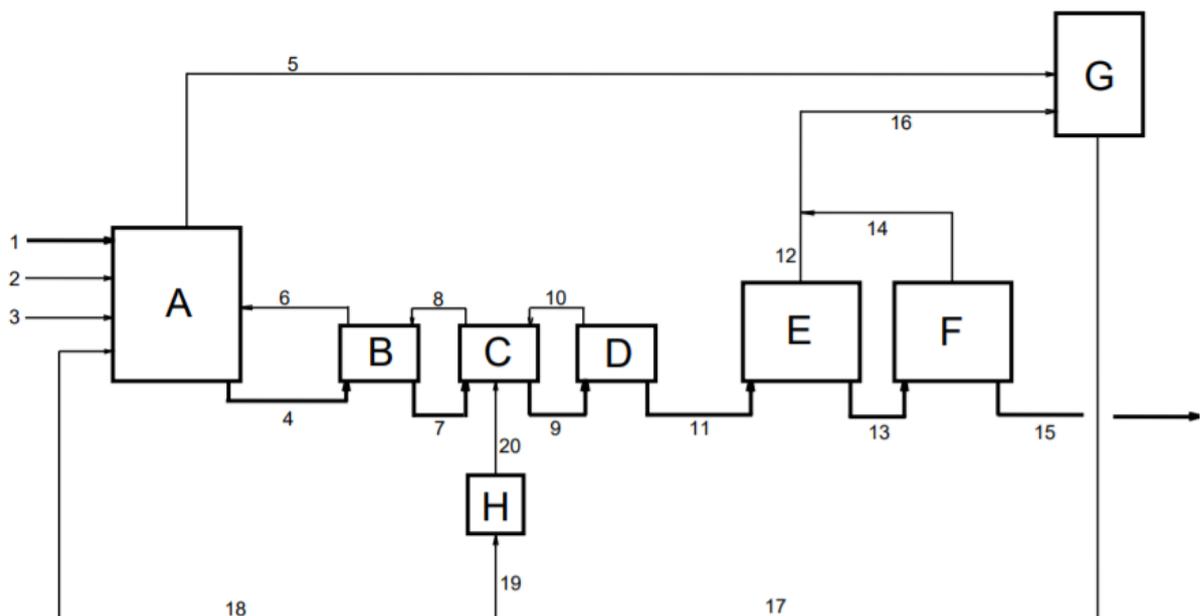
Esse capítulo tem o intuito de apresentar e detalhar todos os procedimentos realizados, quais foram as considerações feitas, os programas utilizados, e como que se conseguiu chegar nos resultados obtidos e apresentados no capítulo subsequente.

3.1 Descrição da Planta Industrial

O presente trabalho utilizará os dados de processo de uma unidade industrial de produção de polímero. A planta estudada fica localizada no Pólo Petroquímico da cidade de Triunfo, no estado no Rio Grande do Sul. Ela faz parte de uma indústria petroquímica, que possui três processos diferentes e sequenciais: um referente ao precursor do monômero, um para a produção do monômero, e um de produção de polímero.

A planta de polímero, portanto, é a responsável por formar o produto principal. Para que se possa obter um pleno entendimento do funcionamento de todo o processo, é preciso avaliar todo o fluxograma, identificando as correntes envolvidas, os sentidos das corrente e as propriedades físicas e química de cada fluido. A Figura 3.1 representa o diagrama de processo da planta estudada, com as correntes devidamente numeradas.

Figura 3.1 – Esquema da planta industrial



Nesse diagrama, podemos observar a existência de oito equipamentos diferentes. Pode-se dizer que há duas grandes seções nessa planta: a seção de reação e a seção de devolatilização. A seção de reação é composta pelos equipamentos A, B, C e D, onde o equipamento A comporta-se como um reator CSTR, e os equipamentos B, C e D comportam-se como reatores do tipo PFR. Já a seção de devolatilização é composta pelos equipamentos E e F, que são parecidos (algumas variáveis de processo são diferentes, porém, por questões de sigilo, não serão explicadas). O equipamento G faz parte de um sistema auxiliar de reciclo de correntes, onde recebe todos os vapores dos equipamentos A, E e F. O equipamento H recebe parte da corrente que sai do equipamento G, e utiliza esse material para realizar a adição de um aditivo.

As matérias-primas estão identificadas pelas correntes 1, 2 e 3, onde a corrente 1 é a corrente de monômero, que será polimerizado para formar o produto desejado, e as correntes 2 e 3 são correntes de aditivos, que auxiliam no processo de polimerização e nas propriedades do produto final. Primeiramente, eles adentram um reator do tipo CSTR, que é responsável por definir a morfologia do produto, e onde há a primeira etapa de conversão do monômero no polímero.

Após saírem do reator CSTR, o produto segue para uma sequência de 3 reatores, do tipo PFR, que são responsáveis por converter mais o monômero. Entre todos esses 3 reatores, há correntes de reciclo. Assim, o produto sai do terceiro reator PFR com sua reação finalizada e é, então, enviado à seção de devolatilização. Os devolatilizadores são responsáveis por retirar todo o material que não corresponde ao polímero desejado, sendo essas correntes retiradas compostas majoritariamente por monômero não reagido. Essas correntes são enviadas ao sistema de reciclo, que é responsável por enviar todo esse material de volta à etapa de reação.

3.2 Avaliação das medições

A primeira etapa para uma reconciliação de dados é avaliar quais variáveis de processo possuem medição e quais não possuem. A Tabela 3.1 (feita no Microsoft Excel®) resume quais correntes possuem algum tipo de medidor e, com essas devidas medições identificadas, é possível, então, realizar a classificação de variáveis. Com a realização dessa classificação, pode-se avaliar a existência ou a ausência de redundâncias, que é um requisito necessário para a realização do método em questão.

Tabela 3.1 – Identificação de medidores

Corrente	Tipo de Medidor
1	Coriólis
2	Coriólis
3	Coriólis
18	Placa de Orifício
20	Coriólis

Uma das etapas crucias da reconciliação de dados é reconhecer a precisão de cada tipo de medidor. As correntes 1, 2, 3 e 20 são correntes líquidas e possuem medidores do tipo Coriólis e, conforme descrito no Capítulo 2, esses medidores possuem um alta grau de confiabilidade. A corrente de número 18, que corresponde a uma corrente de reciclo, possui o medidor do tipo placa de orifício, que apresenta uma acurácia não tão boa quando comparado ao do tipo Coriólis.

As correntes de saída de cada um dos reatores (4, 7, 9, 11) e a corrente de saída de produto (15) são todas equipadas com bombas de deslocamento positivo. Esse tipo de bomba possui eixos internos onde, conforme eles rotacionam, uma certa quantidade volumétrica é deslocada e enviada para frente. Assim, existe uma relação entre a velocidade de rotação da bomba e a vazão mássica. Para que se possa converter essa informação de rotação em vazão mássica, portanto, é preciso saber a massa específica do fluido em questão, o volume que é transportado em cada rotação e a eficiência da bomba. A equação 3.1 apresenta a realação entre tais variáveis.

$$F_i = N_i \times V_i \times \rho \times \eta \times 60 \frac{\text{min}}{\text{h}} \quad (3.1)$$

Onde F_i é a vazão mássica da corrente i em kg/h, N_i corresponde ao valor da velocidade da bomba em rpm, V_i é o volume transportado em cada rotação da bomba em m^3 , ρ é a massa específica em kg/m^3 , η é a eficiência da bomba e a multiplicação por 60 é o fator de conversão de minutos para hora.

Nesse momento, vale ressaltar que o volume de cada rotação possui uma precisão finita, a bomba possui uma certa eficiência, e a densidade do fluido varia em função do teor de sólidos (conversão), da temperatura, e também da pressão, pois o polímero é um fluido compressível. A temperatura das correntes nem sempre é a mesma, pois a planta pode produzir diferentes produtos, que podem exigir temperaturas diferentes. No mesmo sentido, o teor de sólidos depende da conversão

dos reatores, o que também pode ter flutuações, pois varia com o tempo de residência do material em cada um dos reatores. Apesar dessas diferentes temperaturas, pressões, e teores de sólidos não terem magnitudes tão distantes quando observado num período de estabilidade (gerando pouca variação na densidade), é importante ter em mente que é introduzido mais fatores para o cálculo de obtenção da vazão mássica correspondente, podendo comprometer os resultados caso essa situação não seja avaliada.

Para a definição dos valores dos desvios-padrões, foi feita uma análise qualitativa dos medidores e das bombas de deslocamento positivo. Para todos os medidores Coriolis, foi atribuído o valor de 0,15% sobre o valor medido, conforme explicado que esse é o valor típico de acurácia para esse medidor. Ao medidor do tipo placa de orifício, o valor típico de acurácia varia de 2 a 3%, mas a sua medição é volumétrica, e no presente estudo, é necessário converter vazão volumétrica para vazão mássica multiplicando pela massa específica (que pode ter leves flutuações), então se atribuiu o valor superior de 3%. As bombas de deslocamento positivo, por terem tantos fatores que afetam na obtenção de seu valor, teve seu desvio padrão qualitativamente definido como duas vezes o da placa de orifício, ou seja, 6% sobre o valor medido.

Continuando a análise de quais correntes possuem medidores e quais não possuem (possibilitando a classificação das variáveis), foi observado que as correntes de número 12, 13 e 14 não possuem qualquer medição, e não podem ser obtidas por um balanço de massa global (sem considerar composições). Nesse caso, elas são classificadas como variáveis não observáveis. Assim, optou-se por não incluir essas variáveis na otimização, pois seria necessário arbitrar valores para essas variáveis, e elas não agregariam nenhum tipo de informação para a realização do método de reconciliação.

As outras correntes (5, 6, 8, 10, 16, 17 e 19) são todas observáveis, ou seja, é possível obter os seus valores analisando o balanço de massa, porém elas não possuem nenhuma redundância e não poderiam ser reconciliadas. As equações apresentadas a seguir mostram como cada uma das correntes observáveis pode ser obtida, onde F_i é a vazão mássica da corrente i :

$$F_5 = F_1 + F_2 + F_3 + F_{18} + F_{20} - F_{11} \quad (3.2)$$

$$F_6 = F_4 + F_{20} - F_{11} \quad (3.3)$$

$$F_8 = F_7 + F_{20} - F_{11} \quad (3.4)$$

$$F_{10} = F_9 - F_{11} \quad (3.5)$$

$$F_{16} = F_{11} - F_{15} \quad (3.6)$$

$$F_{17} = F_{18} + F_{20} \quad (3.7)$$

$$F_{19} = F_{20} \quad (3.8)$$

Vale ressaltar que todas essas equações são válidas apenas para os momentos em que os níveis dos equipamentos estejam constantes e a planta em um estado estacionário. Em momentos onde haja acúmulo ou esvaziamento de equipamentos, a planta encontra-se num estado dinâmico e essas relações não são mais válidas.

Continuando essa classificação de variáveis, percebe-se que as únicas correntes que poderiam ser reconciliadas são as correntes 1, 2, 3 e 15, por serem redundantes, e obedecerem o seguinte balanço de massa:

$$F_1 + F_2 + F_3 = F_{15} \quad (3.9)$$

Com o objetivo de possibilitar um estudo mais profundo a respeito do método de reconciliação de dados, foram introduzidos novos valores de medição artificialmente. Dessa forma, mais dados participarão da otimização e mais correntes terão suas vazões reconciliadas. Para isso, é necessário estipular um valor teórico de medição, bem como um valor teórico de desvio padrão. O valor teórico de medição pode ser obtido pelas equações de balanço de massa listadas anteriormente, utilizando os valores medidos, e perturbando esses valores com um erro aleatório através da função “=*randbetween*” existente no programa Microsoft Excel®, que retorna um número inteiro aleatório entre um limite superior e um inferior especificados, onde os limites para esse número está um desvio padrão para mais e para menos do medido, e o valor do desvio-padrão utilizado será de 3% sobre o valor medido (equivalente a um medidor do tipo placa de orifício). A corrente de número 15, apesar de possuir uma bomba de deslocamento positivo, também será considerada como um medidor teórico, assim, todas as redundâncias presentes são advindas de medidores fictícios, e os valores medidos são perturbados apenas por erros aleatórios, indicando que o resultado da reconciliação não apresente erros grosseiros.

Para se obter o maior número de redundâncias com o menor esforço, há de se analisar quantas redundâncias são geradas ao colocar um medidor teórico sobre determinada corrente. Essas informações podem ser retiradas das equações de balanço evidenciadas anteriormente, e os resultados estão no próximo capítulo.

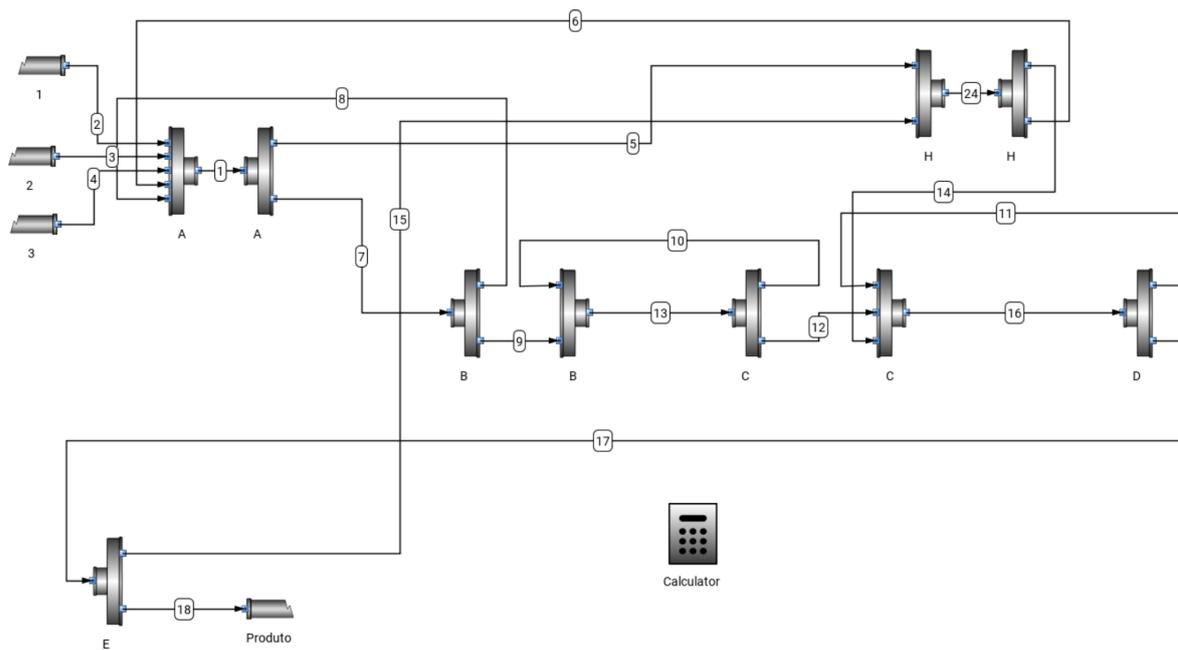
3.3 iiSE

O software utilizado para realizar o procedimento de otimização foi o iiSE, que é um acrônimo para *Industrial Integrated Simulation Environment* (Ambiente Integrado de Simulação Industrial), sendo um simulador comercial elaborado e mantida pela empresa VRTech Tecnologias Industriais Ltda. Esse simulador possui uma interface extremamente simples, oferecendo uma lista dos equipamentos mais comuns da indústria, onde para rodar a simulação basta dispor esses equipamentos conforme desejado e informar a quantidade de variáveis exigidas pro sistema (no caso, isso é definido pelo número de graus de liberdade). Uma característica relevante é que ele considera o sistema todo como um estado estacionário, não abrangendo os sistemas dinâmicos. Uma das vantagens do simulador é que ele se baseia em equações, possuindo em seu sistema as mais diversas operações que podem ser encontradas nas indústrias, além de também oferecer para o usuário diferentes opções para a representação de misturas e modelos termodinâmicos. (Lunelli, 2015)

A maioria dos simuladores comercialmente disponíveis fazem uso da tecnologia sequencial modular, o que confere ao simulador iiSE um diferencial. Esse diferencial é justificado pelo fato de que a outra tecnologia demanda um sistema de cálculos separados para cada um dos equipamentos, e podem apresentar algumas dificuldades para o usuário. No iiSE, não há tanta rigidez. Por essa plataforma ser um sistema baseado em equações, o sistema é avaliado globalmente e simultaneamente, e isso permite uma maior combinação de possíveis variáveis a serem especificadas (apenas precisando obedecer o grau de liberdade global). (iiSE – User Guide 2015 *apud* Lunelli, 2015)

Para a representação do processo no software em questão, foi considerado que está se avaliando apenas vazões mássicas, independente dos componentes. Dessa forma, os equipamentos, portanto, foram representados somente por uma sequência de separadores e misturadores. A Figura 3.2 representa toda a esquematização.

Figura 3.2 – Representação da planta no iiSE



Ao se montar esse esquema no programa (sem a calculadora), foi observado que o programa apontava a existência de 18 graus de liberdade, ou seja, para que ele pudesse funcionar, seria necessário especificar 18 condições do processo. Assim, seguindo a lógica da representação da planta da Figura 3.1, foram especificadas as vazões das correntes 1, 2, 3, 4, 7, 9, 11, 18, 20, além das condições de pressão, temperatura e composição para as 3 correntes de entrada, correspondendo a 1 atm, 25 °C, e foi considerado um componente puro. As correntes de número 19 e 20 foram consideradas como a mesma corrente, não possuindo qualquer distinção. A função de calculadora serve para colocar quaisquer outros cálculos que o usuário do software deseje implementar. No presente cenário, é na calculadora que se implementa os valores medidos de cada uma das correntes que estão sendo reconciliadas, os valores de seus desvios-padrões e a equação da função objetivo.

3.4 Coleta de Dados

Realizada a etapa de classificação de variáveis, há a etapa de coleta de dados. Para que os dados estejam coerentes e, principalmente, estejam de acordo com as equações de balanço de massa, há a necessidade de coletar os dados em um momento de estabilidade da planta. Coletar dados em períodos onde haja altas variações de vazões ou altas variações de níveis de tanques/reatores seria inadequado, uma vez que a planta estaria em um estado transiente, onde as equações

de balanço material aplicadas seriam diferenciais, e não seria possível representar isso no iiSE.

No caso do processo produtivo do polímero em questão, há também um outro fator que demonstra a estabilidade da planta: o valor do MFI do produto. MFI é o índice de fluidez do polímero, e nesse caso, os valores desse índice estarem constantes e dentro da faixa de especificação demonstra uma estabilidade da planta, pois não há motivo algum para se alterar as condições de operação da planta, uma vez que o produto está dentro da especificação.

Assim, para a realização dessa identificação de um estado estacionário pleno, foi utilizado o programa disponibilizado na empresa, que registra todos os valores das variáveis em estudo ao longo do tempo, bem como o sistema interno para checar os valores das análises dos testes de MFI das amostras coletadas. O devido reconhecimento de um estado estacionário foi realizado para um período de aproximadamente 4 horas, e assim os dados referentes a cada uma das vazões foram coletados. No estado estacionário definido, o valor da vazão da corrente de número 3 estava zerado, portanto será uma corrente que não participará da reconciliação.

4 Resultados e Discussão

Neste capítulo, são apresentados todos os resultados obtidos na análise de redundância, na simulação, bem como uma discussão e uma análise a respeito desses resultados.

4.1 Avaliação de Redundâncias

Conforme explicado no capítulo anterior, para que se tenha um número maior de dados sendo reconciliados, foi considerado medidores fictícios. A localização desse medidor deve ser definida através do número de redundâncias que é gerado. A primeira opção de medidor seria na corrente de número 5. Colocando um medidor nessa corrente, é possível verificar que será gerado redundâncias com os outros medidores das correntes 1, 2, 3, 11, 18, 20. Como as correntes 1, 2, e 3 já possuem redundâncias com a corrente 15, há a geração de um total de 4 novas redundâncias, que estão evidenciadas na equação 3.2. Para as outras opções de colocação de medidores, a análise feita foi no mesmo sentido, e a Tabela 4.1 (feita no Microsoft Excel®) apresenta os resultados obtidos.

Tabela 4.1 – Análise de redundâncias criadas

Corrente especificada	Numero de novas redundâncias	Correntes que ficaram redundantes
5	4	5, 11, 18, 20
6	4	4, 6, 11, 20
8	4	8, 7, 11, 20
10	3	9, 10, 11
16	2	11, 16
17	3	17, 18, 20
19	2	19, 20

Analisando a Tabela 4.1, rapidamente percebemos que o número de redundâncias criadas dependerá de onde o medidor for colocado. As melhores opções são aquelas que geram um maior número de redundâncias novas. Rapidamente, opta-se por colocar medidores nas correntes de número 5, 6 e 8. Porém, como todas elas possuem duas redundâncias em comum (correntes 11 e 20), após a implementação de um medidor em qualquer uma dessas três, as outras duas agregariam apenas duas novas redundâncias, e isso equivale a colocar o medidor na corrente de número 10. Dessa forma, é considerado mais eficiente colocar medidores nas correntes 5, 6, 8 e

10, desconsiderando as correntes 16, 17 e 19, porque agregariam apenas uma nova redundância.

4.2 Reconciliação de Dados

Utilizando o esquema apresentado na Figura 3.2, e considerando os valores iniciais colocados no programa, a reconciliação de dados é realizada pela “*optimization tool*” disponível no iiSE, onde essa ferramenta minimiza o valor da função alterando os valores de vazão das correntes. Nessa ferramenta, é possível escolher o método de otimização que se deseja utilizar, e no presente trabalho, utilizou-se os métodos Nelder-Mead, Ipopt e MMA, a fim de comparar os valores obtidos e analisar qual método se mostra mais eficaz.

Para essa comparação ser coerente e justa, todas as simulações devem partir exatamente dos mesmos valores de vazão para cada uma das correntes.

4.1.1 Método Nelder-Mead

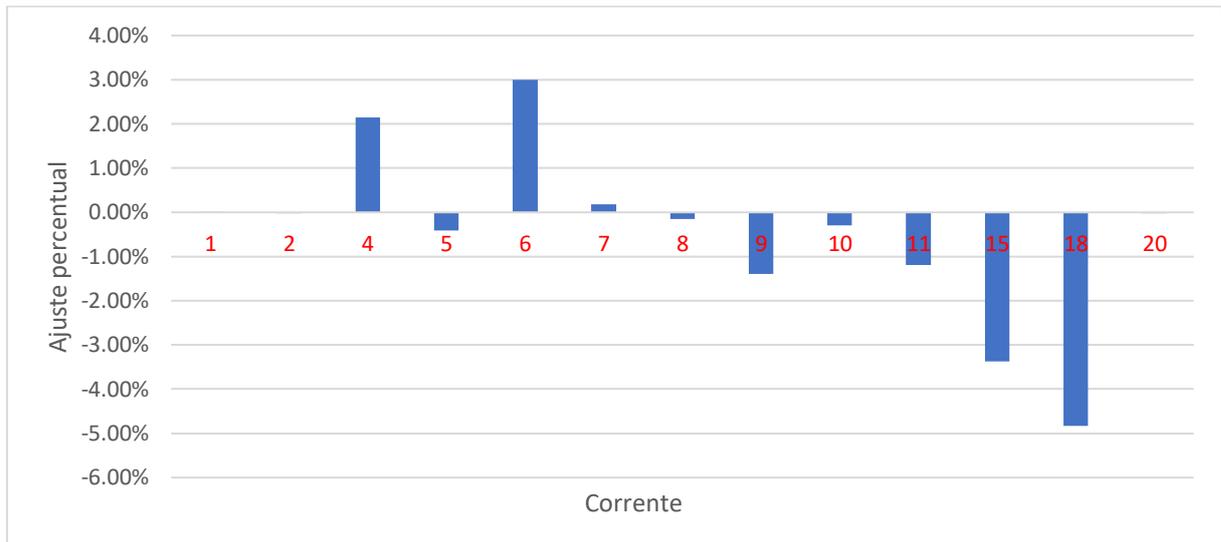
O primeiro método utilizado foi o método Nelder-Mead. Para esse método, os parâmetros utilizados foram uma tolerância de 0,0001 e um máximo de 1000 simulações. A Tabela 4.2 (feita no Microsoft Excel®) apresenta os valores iniciais utilizados, o valor medido, o desvio padrão e qual foi o valor reconciliado após o processo de otimização.

Tabela 4.2 – Valores obtidos pelo método Nelder-Mead

Corrente	Valor Inicial	Valor Medido	Desvio Padrão	Valor Reconciliado
1	4500	4344,492	6,517	4344,1588
2	0,7	0,638	0,001	0,6381
4	23700	24441,528	1466,492	23916,1925
5	290,7	393,000	11,628	394,598
6	17990	18883,000	567,305	18316,1907
7	8400	8631,909	517,915	8616,4384
8	2690	3012,000	93,016	3016,4366
9	7500	7293,763	437,626	7395,4888
10	1600	1583,000	46,640	1587,729
11	5900	5739,113	344,347	5807,7597
15	4500,7	4203,000	260,708	4344,7969
18	1500	1573,851	47,216	1649,8029
20	190	207,748	0,312	207,7579
Objetivo	7745,8912	-	-	4,1473

Para auxiliar na visualização desses resultados, plotou-se um gráfico de barras que mostra a diferença entre o valor medido e o valor reconciliado, em termos de um desvio percentual, utilizando o Microsoft Excel®, mostrado na Figura 4.1.

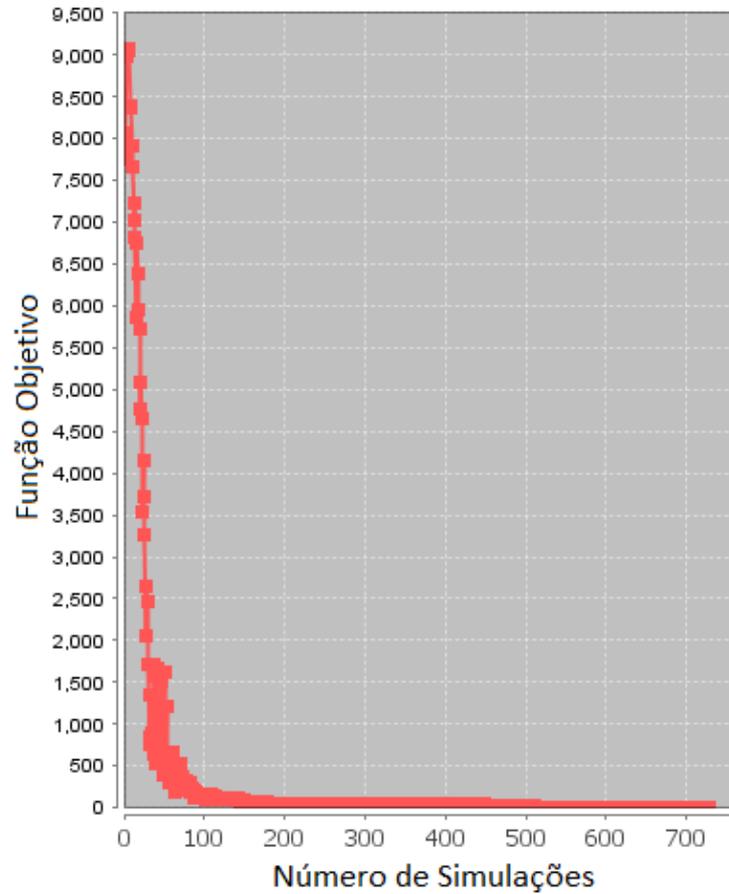
Figura 4.1 – Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método Nelder-Mead



Esses ajustes realizados pela otimização levaram a função objetivo ao valor de 4,1473. Conforme esperado, as correntes com o desvio padrão pequeno (1, 2 e 20) apresentaram desvio praticamente nulo, enquanto as outras tiveram ajustes maiores. A corrente de número 18, que apresentou o maior ajuste percentual, obteve um resultado não muito esperado, uma vez que seu desvio padrão foi de 3% sobre o valor medido, enquanto as correntes de número 4, 7, 9, 11 e 15 possuíam desvio padrão de 6% sobre o valor medido, sendo razoável que haja um ajuste percentual elevado. O ajuste da corrente número 6 também não era esperado, uma vez que, assim como a corrente 18, seu desvio padrão era de 3% sobre o valor medido.

A fim de comparar a robustez de cada método, observou-se a quantidade de simulações que o método Nelder-Mead realizou para chegar nesse valor mínimo da função objetivo. A Figura 4.2, retirada do próprio software iiSE, apresenta esses dados, onde o eixo das abscissas representa o número de simulações e o eixo das ordenadas o valor da função objetivo.

Figura 4.2 – Simulações realizadas pelo método Nelder-Mead



Percebe-se que para atingir o valor mínimo da função objetivo, o método Nelder-Mead realizou em torno de 750 simulações.

4.1.2 Método Ipopt

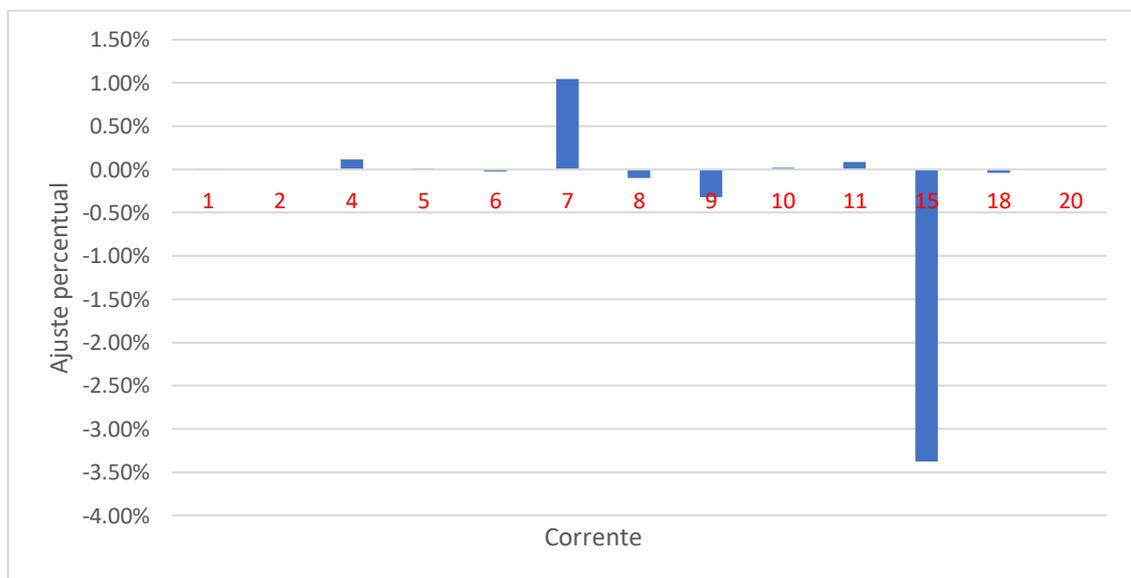
O segundo método a ser avaliado é o método Ipopt. Para esse método, a tolerância utilizada também foi de 0,0001 e o número de simulações máximo de 3000. A Tabela 4.3 apresenta os valores iniciais (que são iguais aos valores iniciais do método Nelder-Mead), os valores medidos, os desvios padrões e os valores reconciliados.

Tabela 4.3 – Valores obtidos pelo método Ipopt

Corrente	Valor Inicial	Valor Medido	Desvio Padrão	Valor Reconciliado
1	4500	4344,492	6,517	4344,4148
2	0,7	0,638	0,001	0,638
4	23700	24441,528	1466,492	24413,7366
5	290,7	393,000	11,628	392,9623
6	17990	18883,000	567,305	18887,1695
7	8400	8631,909	517,915	8541,4702
8	2690	3012,000	93,016	3014,9031
9	7500	7293,763	437,626	7317,0498
10	1600	1583,000	46,640	1582,7347
11	5900	5739,113	344,347	5734,3151
15	4500,7	4203,000	260,708	4345,0528
18	1500	1573,851	47,216	1574,4766
20	190	207,748	0,312	207,748
Objetivo	7745,8912	-	-	0,3322

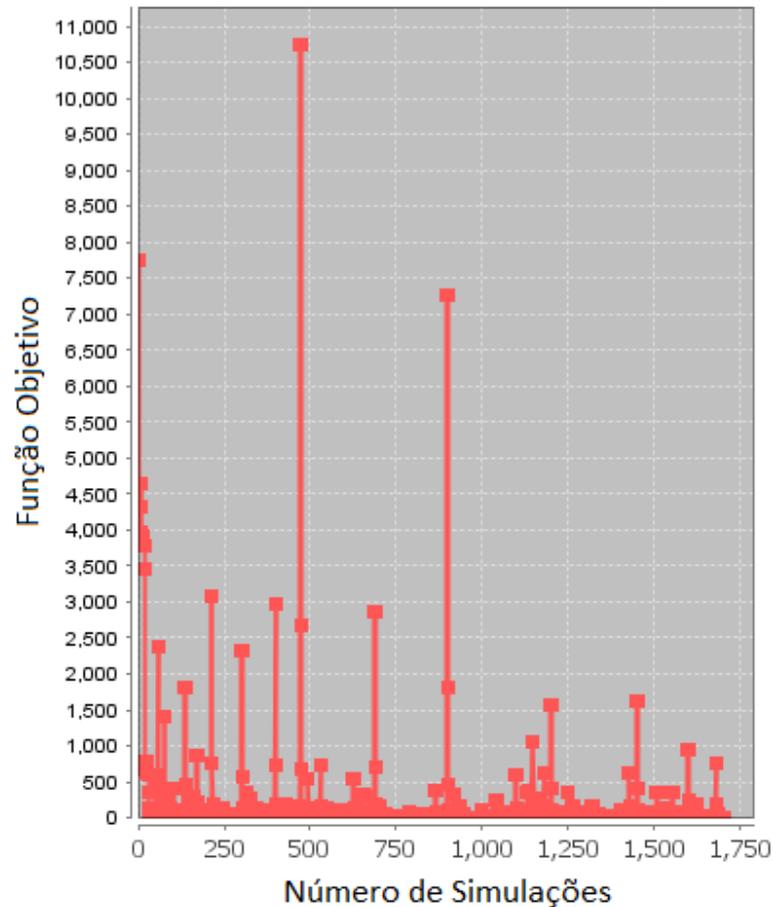
Para auxiliar na visualização desses resultados, plotou-se um gráfico de barras que mostra a diferença entre o valor medido e o valor reconciliado, em termos de um desvio percentual, sendo esse a Figura 4.3.

Figura 4.3 – Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método Ipopt



Esses ajustes realizados pela otimização levaram a função objetivo ao valor de 0,3322. A fim de comparar a robustez de cada método, observou-se a quantidade de simulações que o método Ipopt realizou para chegar nesse valor mínimo da função objetivo. A Figura 4.4, retirado do próprio software, mostra esses dados.

Figura 4.4 – Simulações realizadas pelo método Ipopt



Conforme se pode perceber, o método Ipopt apresentou um mínimo para a função objetivo muito inferior àquele apresentado pelo método Nelder-Mead, mas foi necessário realizar mais simulações, em torno de 1700. Além disso, conforme esperado, as correntes com menor desvio padrão apresentaram ajuste quase nulo, e dessa vez as correntes que tiveram os maiores ajustes são as que tinham maior desvio padrão, apresentando um resultado mais coerente.

4.1.3 Método MMA

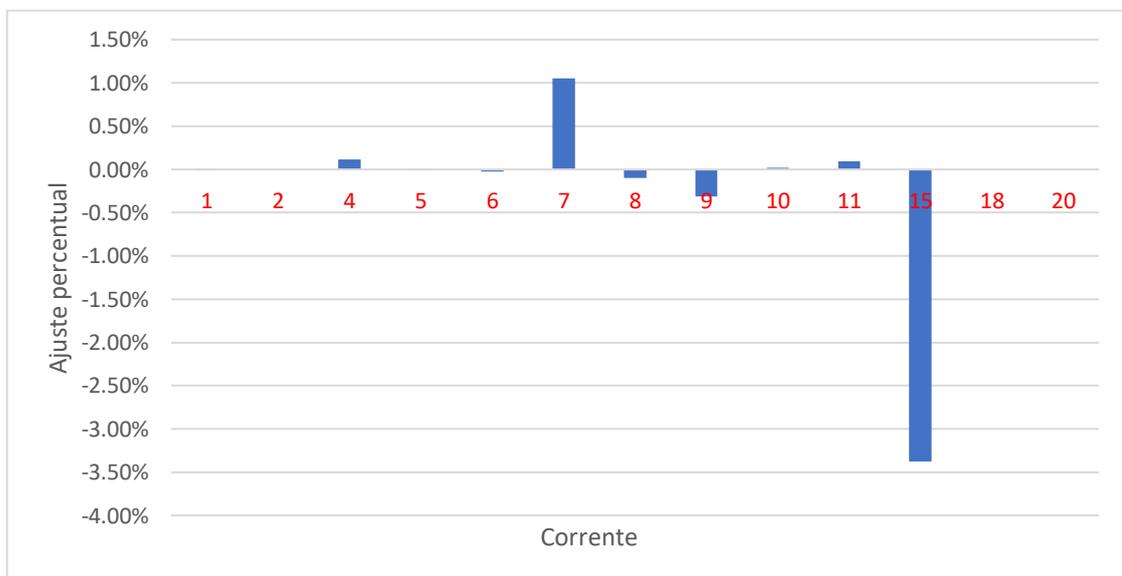
O terceiro método a ser avaliado é o método MMA. Os parâmetros utilizados nesse método foram uma tolerância de 0,00001 e um máximo de 1000 simulações. A Tabela 4.4 apresenta os valores iniciais (que são iguais aos valores iniciais dos métodos Nelder-Mead e Ipopt), os valores medidos e os valores reconciliados.

Tabela 4.4 – Valores obtidos pelo método MMA

Corrente	Valor Inicial	Valor Medido	Desvio Padrão	Valor Reconciliado
1	4500	4344,492	6,517	4344,3997
2	0,7	0,638	0,001	0,638
4	23700	24441,528	1466,492	24413,2619
5	290,7	393,000	11,628	392,9974
6	17990	18883,000	567,305	18887,193
7	8400	8631,909	517,915	8540,9923
8	2690	3012,000	93,016	3014,9234
9	7500	7293,763	437,626	7316,5501
10	1600	1583,000	46,640	1582,7332
11	5900	5739,113	344,347	5733,8169
15	4500,7	4203,000	260,708	4345,0377
18	1500	1573,851	47,216	1574,0286
20	190	207,748	0,312	207,748
Objetivo	7745,8912	-	-	0,3322

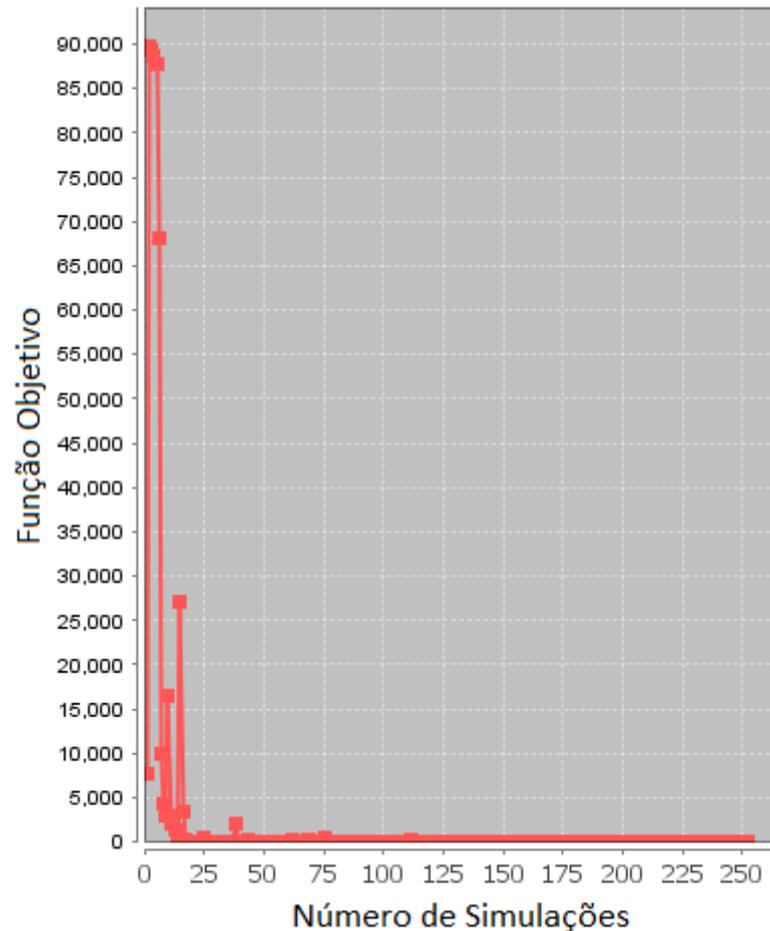
Para auxiliar na visualização desses resultados, plotou-se um gráfico de barras que mostra a diferença entre o valor medido e o valor reconciliado, em termos de um desvio percentual, sendo esse a Figura 4.5.

Figura 4.5 – Ajuste percentual dos valores das correntes pelo método MMA



Esses ajustes realizados pela otimização levaram a função objetivo ao valor de 0,3322. A fim de comparar a robustez de cada método, observou-se a quantidade de simulações que o método MMA realizou para chegar nesse valor mínimo da função objetivo. A Figura 4.6, retirada do próprio software iiSE, mostra esses dados.

Figura 4.6 – Simulações realizadas pelo método MMA



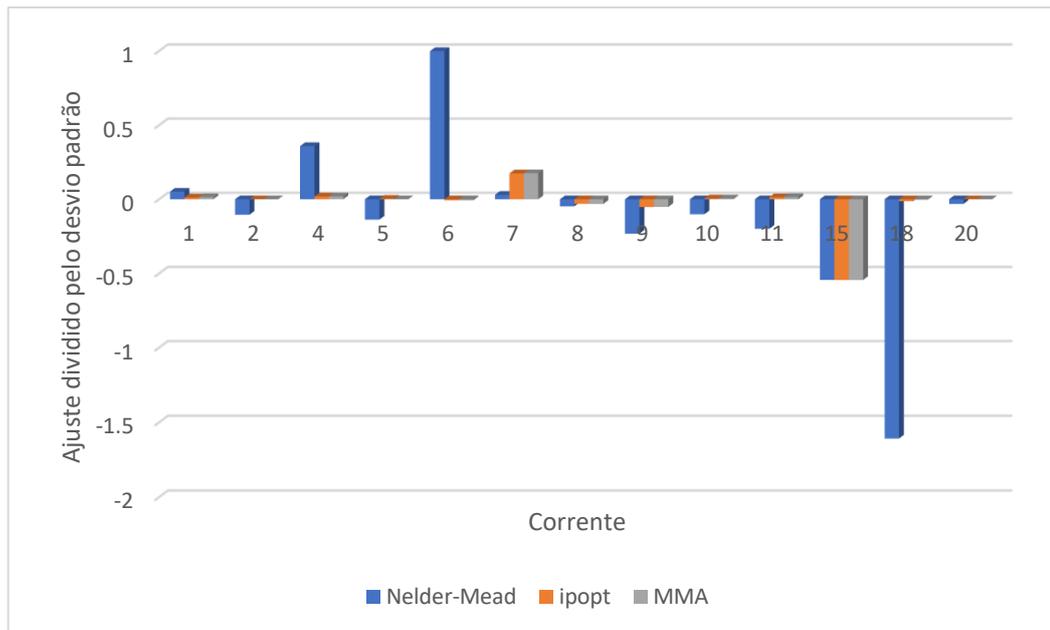
Ao se comparar a função objetivo, o valor obtido pelo método MMA é idêntico ao valor obtido pelo método Ipopt, e ambos são valores menores que o obtido pelo método Nelder-Mead, demonstrando que o primeiro método utilizado é o que teve pior desempenho. Apesar de os métodos Ipopt e MMA apresentarem o mesmo resultado para a função, o método MMA obteve esse resultado com muito menos simulações. Foram pouco menos de 300 simulações para o MMA, enquanto para o Ipopt foram em torno de 1700, mais do que 5 vezes. Outro ponto interessante a observar é que as simulações do método MMA oscilam muito menos, convergindo mais suavemente, ao passo que as simulações do método Ipopt apresentam picos.

É importante ressaltar que avaliar o número de simulações é uma comparação possível, porém o tempo computacional também é relevante. O tempo que uma simulação demora para ser computada pode demorar mais ou menos dependendo do método empregado, e isso fará com que o esforço computacional seja maior ou menor.

4.1.4 Comparação de ajustes

Uma maneira de enxergar os ajustes é fazer com que o ajuste seja dividido pelo desvio padrão. Dessa forma, pode-se comparar os três métodos de maneira justa, e é possível ver qual dos termos da função objetivo contribuiu mais para o seu valor.

Figura 4.7 – Comparação dos ajustes dos métodos



Conforme explicado anteriormente, o ajuste feito pelo método Nelder-Mead para as correntes 6 e 18 não pareceram coerentes, pois não eram correntes com um elevado desvio padrão. Olhando para a Figura 4.7, percebe-se que de fato esse ajuste não se justifica, sendo ele o principal responsável por uma função objetivo não tão minimizada como poderia. Além disso, os outros ajustes realizados pelo método Nelder-Mead não se parecem com os dos outros métodos.

Os métodos Ipopt e MMA apresentaram ajustes bem similares, e isso justifica o fato deles obterem um valor igual para a função objetivo. Dessa forma, fica claro que o método Nelder-Mead não apresentou uma performance satisfatória, enquanto os métodos Ipopt e MMA apresentaram. No entanto, há uma diferença crucial entre o Ipopt e o MMA, que é a quantidade de simulações realizadas, pois o método MMA conseguiu atingir o mesmo resultado com um número de simulações reduzido. Observa-se também que o ajuste para a corrente 15 foi similar para todos, pelo fato

de que a redundância dessa corrente é com as duas correntes de entrada, que possuem baixíssimo desvio padrão.

4.3 Detecção de erros grosseiros

Conforme descrito no Capítulo 2, para que a reconciliação de dados seja confiável, é primordial que não haja erros grosseiros. Assim, após obter três resultados de reconciliação diferentes através de três métodos de otimização diferentes, a etapa de detecção de erros grosseiros é importante. Haja visto que a introdução das redundâncias se deu por medidores fictícios, que foram perturbados apenas por erros aleatórios, é esperado que o valor da função objetivo passe pelo teste, e não haja a detecção de erros grosseiros.

Como o teste global de erro grosseiro utiliza o valor da função objetivo obtida, cada um dos métodos utilizados poderá ter um valor diferente. Para o teste global, será utilizado um nível de confiança $(1-\alpha)$ de 95%, tendo 5 graus de liberdade, e se fará uso da função “=CHISQ.INV” presente no programa Microsoft Excel®. A Tabela 4.5 apresentar os parâmetros envolvidos e seus valores.

Tabela 4.5 – Resultados detecção de erros grosseiros

	Nelder-Mead	ipopt	MMA
γ	4.1473	0.3322	0.3322
v	5	5	5
$1-\alpha$	0.95	0.95	0.95
χ^2	11.0705	11.0705	11.0705

Analisando os resultados para a função objetivo, pode-se dizer que, como ele é inferior ao valor de 11,0705 da distribuição χ^2 , a hipótese nula H_0 pode ser aceita e, portanto, não há a detecção de erros grosseiros. Esse resultado é coerente e esperado, pois as perturbações que foram realizadas no sistema são advindas de erros aleatórios.

5 Conclusões

A técnica de reconciliação de dados é uma ferramenta inteligente para corrigir possíveis erros existentes nos medidores. O estudo realizou primeiramente uma avaliação de locais estratégico para a colocação de futuros medidores, onde se terá uma maior quantidade de redundâncias possíveis, obtendo um maior número de informação e de dados com um menor investimento. Foi mostrado que o máximo de redundâncias que se pode obter com um único medidor no caso estudado é 4, e para isso há três diferentes correntes possíveis. Outras três correntes criariam poucas redundâncias, não sendo indicado um investimento para colocar medidores nelas quando o objetivo é realizar reconciliação.

O trabalho realizado teve o intuito de estudar essa ferramenta de reconciliação, e implementá-la em um sistema com medidores teóricos, estrategicamente colocados. Os resultados obtidos tiveram coerências, pois os valores de vazões foram efetivamente reconciliados, comprovando a existência de redundâncias. Como o método de reconciliação de dados se vale do processo de otimização, foi também realizada a comparação entre três métodos distintos de otimização: Nelder-Mead, Ipopt e MMA. Dado o fato que as perturbações realizadas no sistema são consideradas erros aleatórios, as respostas obtidas foram coerentes. O método Nelder-Mead não se mostrou muito eficaz, pois o valor da função objetivo não foi minimizada como deveria, e percebeu-se que alguns ajustes eram incompatíveis e incoerentes com o sistema estudado. Os métodos Ipopt e MMA obtiveram resultados praticamente iguais, porém o método MMA precisou de menos simulações para atingir tal resultado. O teste de erro grosseiro também apresentou um resultado esperado, pois as perturbações não justificariam uma identificação de erro grosseiro, o que foi confirmado.

6 Referências

BAUDIN, M., STEER, S. **Optimization with scilab, present and future**, IEEE International Workshop on Open Source Software for Scientific Computation, pp.99-106, 18-20 Sept. 2009

BUREAU INTERNATIONAL DES POIDS ET MESURES - BIPM. **Guide to the expression of uncertainty in measurements**. Disponível em <<https://www.bipm.org/en/publications/guides/gum.html>>. Acesso em: 11 de nov. de 2018.

CRABTREE, M. A. **Industrial Flow Measurement**. M.Sc. Thesis. University of Huddersfield, 2009

CROWE, C. M. **Data Reconciliation – progress and challenges**. Journal of Process Control, v. 6 pp. 89-98, 1996

FARIAS, A. C. **Avaliação de estratégias para reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química). Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.

Frenzel, F., Grothey, H., Habersetzer, C., Hiatt, M., Hogrefe, W., Kirchner, M., Lütkepohl, G., Marchewka, W., Mecke, U., Ohm, M., Otto, F., Rackebrandt, K.-H., Sievert, D., Thöne, A., Wegener, H.-J., Buhl, F., Koch, C., Deppe, L., Horlebein, E., Schüssler, A., Pohl, U., Jung, B., Lawrence, H., Lohrengel, F., Rasche, G., Pagano, S., Kaiser, A. and Mutongo, T.. **Industrial Flow Measurement Basics and Practice**. ABB Automation Products GmbH, 2011.

HAN, L., NEUMANN, M. **Effect of dimensionality on the Nelder-Mead simplex method**. Optim. Methods Softw. 21(1), 1–16, 2006.

iiSE. User Guide. VRTech, 2015.

LIEBMAN, M.J., EDGAR, T. F., LASDON, L.S. **Efficient Data Reconciliation and Estimation for Dynamic Processes Using Nonlinear Programming Techniques**. Comput. Chem. Eng. v. 16, pp. 963-986, 1992.

LUNELLI, L. M. **Reconciliação de dados em processos de separação**. Trabalho de Diplomação em Engenharia Química. Porto Alegre: Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.

NARASIMHAN, S., JORDACHE, C. **Data reconciliation and gross error detection: an intelligent use of process data**. Houston: Gulf Publishing Company, 2000.

NOCEDAL, J., WRIGHT, S. J. **Numerical Optimization**, Springer, New York, 1999.

PRATA, D. M., **Reconciliação Robusta de Dados para Monitoramento em Tempo Real**, Tese Doutorado em Engenharia Química, UFRJ/COPPE, Rio de Janeiro, 2009.

ROMAGNOLI, J. A., SANCHEZ, M.C. **Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations**. Volume 2, Academic Press, San Diego, 2000.

SVANBERG, K. **MMA and GCMMA - Two Methods for Nonlinear Optimization**. Technical report, 2007.

WACHTER, A. **Short tutorial: getting started with ipopt in 90 minutes**. Technical Report, IBM Research Report, 2009.