



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

ESCOLA DE ENGENHARIA

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA



ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**PROPOSIÇÃO DE UM MODELO DE INFERÊNCIA PARA COLUNA DE ETILBENZENO
BASEADO NA TÉCNICA *JUST IN TIME***

PÉRICLES ANTÔNIO PAVONI

Orientador: Marcelo Farenzena

Porto Alegre, Julho de 2011

Agradecimento

À Universidade Federal do Rio Grande do Sul e ao Departamento de Engenharia Química, pelo excelente ensino.

Ao Professor Marcelo Farenzena, pelo tempo, pela ajuda e pela paciência que muito contribuíram para a fluência do trabalho.

A meus pais e a minha irmã, pelo apoio e compreensão nos momentos difíceis.

E acima de tudo, a Deus, pela constante proteção e por me manter firme frente às adversidades do caminho.

Sumário

1	Introdução	1
2	Revisão Bibliográfica e Fundamentos Teóricos	3
2.1	Modelos	3
2.2	Modelos de inferência	4
2.3	Seleção de Variáveis.....	5
2.4	Geração de Modelos.....	6
2.5	<i>Just in Time Learning</i>	6
2.6	Exemplo Ilustrativo	9
3	Processo de Produção de Etilbenzeno	12
3.1	Produção de Etilbenzeno	12
3.2	Destilação.....	14
4	Metodologia Computacional.....	15
4.1	Simuladores de Processo	15
4.1.1	Simulador Comercial Aspen Plus	15
4.2	MatLab	16
5	Materiais e Métodos	17
5.1	Implementação da Simulação Estática	17
5.2	Implementação da Simulação Dinâmica.....	20
5.2.1	Implementação do controlador.....	20
5.3	Variação dos parâmetros de entrada	21
6	Discussão e Resultados.....	26
7	Conclusão e Trabalhos Futuros	29
	Referências Bibliográficas	30

Lista de Figuras

Figura 1 Estrutura básica de um Modelo de Inferência e de um Analisador Virtual	4
Figura 2 Comparação entre modelos tradicionais e o JIT	7
Figura 3 Distância entre as variáveis de processo do banco de dados e a variável atual (0,0,0).....	9
Figura 4 Variável de Entrada (u1).....	10
Figura 5 Variável de Processo medida (u2).....	10
Figura 6 Variável de Saída (y).....	11
Figura 7 Relação entre a variável de saída predita e a variável de saída real utilizando JIT.....	11
Figura 8 Fluxograma simplificado da produção de EB	13
Figura 9 Esquema da coluna de etilbenzeno.....	14
Figura 10 Implementação da torre no Aspen Plus	19
Figura 11 Esquema da implementação da coluna no Aspen Dynamics	20
Figura 12 Variação da temperatura de entrada.....	22
Figura 13 Temperatura no prato 30.....	22
Figura 14 Composição EB no topo da coluna.....	22
Figura 15 Variação da Pressão de entrada.....	23
Figura 16 Variação da Temperatura do prato 30	23
Figura 17 Composição de EB no topo.....	23
Figura 18 Variação da Vazão de Entrada.....	24
Figura 19 Variação da Razão de Refluxo	24
Figura 20 Variação da composição de EB no topo	25
Figura 21 Resultados do modelo quando variada a temperatura de entrada.....	26
Figura 22 Resultados do modelo quando variada a carga de entrada.....	27
Figura 23 Resultados do modelo quando variada a pressão de entrada.....	28
Figura 24 Resultados do modelo quando variados todos os distúrbios de entrada.....	28

Lista de Tabelas

Tabela 1 Média dos dados reais e desvio padrão percentual	18
Tabela 2 Comparação entre dados da implementação e os dados reais.....	19
Tabela 3 Comparação composição de topo real e a implementada.....	19

Lista de Símbolos

x_i = vetor contendo banco de dados de dados de processo;

y_i = vetor contendo banco de dados de dados de análise de pureza de etilbenzeno no topo da coluna;

x_q = vetor contendo os dados de processo atuais;

y_q = valor predito para pureza de etilbenzeno no topo da coluna;

w_i = valor do peso;

W = matriz diagonal de pesos;

h = largura da banda da função de Kernel

d = distância entre o ponto atual e o banco de dados;

P e v = vetores que relacionam os pesos atribuídos a cada ponto e os valores de entrada do modelo (dados de processo);

Resumo

Modelos de Inferência são ferramentas capazes de inferir variáveis de difícil medição, utilizando medidas que estão disponíveis na planta, que são de obtenção mais barata e fácil. Eles foram desenvolvidos devido à necessidade de conhecer os índices referentes à qualidade do produto com maior frequência do que as apresentadas pela maioria das empresas, através de análises laboratoriais

Foi realizado um estudo de caso referente a uma coluna de separação de etilbenzeno na empresa Innova SA – Petrobras, com a intenção de desenvolver um modelo de inferência para predição da composição de etilbenzeno da corrente de topo da mesma.

Para tanto, foi criada uma simulação em Aspen Plus, para representação da coluna e posteriormente, foi feita a implementação desta coluna no Aspen Dynamics, para avaliar distúrbios na corrente de entrada da coluna. Depois da coleta de dados, foi implementada a técnica *Just in Time* (JIT) no *software* Matlab para fins de avaliação. É bom ressaltar que o JIT é um modelo local, portanto, a cada simulação, um modelo novo é criado e uma nova saída é calculada. A técnica mostrou bons resultados para variações na temperatura e na vazão da corrente de entrada.

1 Introdução

O atual cenário econômico mundial fez com que o controle de qualidade dos produtos se tornasse imprescindível para o sucesso de qualquer negócio. Na indústria química em geral, existe um número relativamente grande de variáveis relativas à qualidade dos produtos que devem ser controlados, e para sua medição, normalmente se faz necessário a utilização de técnicas laboratoriais. Geralmente, as análises laboratoriais apresentam desvantagens, pois têm custo agregado e alto tempo de análise, o que propicia baixa frequência na realização destas, acarretando em um controle pobre da qualidade dos produtos. Como exemplo deste grupo de variáveis, tem-se a composição da corrente de topo e fundo de colunas e o índice de fluidez em reatores de polimerização.

A incapacidade da determinação desses parâmetros de forma contínua está associada a diversos fatores, tais como o alto custo envolvido na compra e manutenção dos equipamentos, como também, na inexistência de instrumentação adequada para realização das medidas.

A necessidade do conhecimento destas variáveis de difícil medição, incentivou a pesquisa por alternativas que pudessem fornecer uma inferência desses parâmetros. Portanto, foram desenvolvidos modelos de inferência, que são algoritmos capazes de realizar a inferência das variáveis de difícil medição, utilizando variáveis de fácil e contínua medição, tais como vazão, temperatura e pressão.

Dentre as principais vantagens de um modelo de inferência, tem-se a resposta instantânea para índices importantes do processo. Dessa forma, vê-se a possibilidade de identificação imediata de desvios dos pontos habituais de operação, tornando-se assim, uma vantagem significativa frente aos outros métodos de análise. A qualidade dos resultados obtidos pode levar a uma redução do número de análises laboratoriais.

Este trabalho busca apresentar o desenvolvimento de um modelo de inferência para a corrente de topo de uma coluna separadora de Etilbenzeno, visando a melhor operabilidade da mesma.

Foi estudado um caso real de uma coluna de separação de etilbenzeno, pertencente à empresa INNOVA SA – Petrobras e a possibilidade de inserção de um modelo de inferência para inferir a composição de etilbenzeno (EB) da corrente de topo desta coluna.

O etilbenzeno é o produto principal da planta. O EB produzido na Innova é todo convertido em matéria prima para a planta de Estireno, tendo vendas esporádicas. Isso

confere à Innova o *status* de ter o único sítio totalmente integrado de produção de Estireno e Poliestireno do Brasil.

A alta pureza do EB é necessária, pois, na presença de impurezas, a reação para formação de estireno é prejudicada com a formação de produtos indesejáveis através de reações paralelas.

Primeiramente, foi então, desenvolvido um modelo fenomenológico para o processo com a ajuda do software Aspen Plus e Aspen Plus Dynamic 7.1, validados através dos dados reais de planta. A partir deste modelo, foi desenvolvido um modelo empírico simplificado, utilizando a técnica JIT (Cheng, 2004), implementada com auxílio do software Matlab 5.1.

Os resultados obtidos mostraram que é viável a implementação de um modelo de inferência para a coluna de Etilbenzeno e, desta forma, inferir a composição da corrente de topo.

O presente trabalho está dividido em 7 capítulos: o capítulo 1 apresenta uma breve introdução e os objetivos deste trabalho. O capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica e a fundamentação teórica envolvida. O capítulo 3 apresenta uma breve descrição do processo de produção do etilbenzeno. O capítulo 4 descreve os recursos computacionais utilizados. O capítulo 5 aborda os materiais e métodos utilizados na geração dos dados e no processo de modelagem do modelo de inferência. Os resultados e discussões são abordados no capítulo 6 e as conclusões no capítulo 7.

2 Revisão Bibliográfica e Fundamentos Teóricos

2.1 Modelos

Do ponto de vista da Engenharia, define-se modelagem como: “A atividade de representação dos principais fenômenos que ocorrem no processo, por equações e correlações entre suas variáveis mais significativas e que tenha papel importante nos projetos de suas malhas de controle” (Crespo, 2000).

Existem várias possibilidades de aplicações de modelos para colunas de separação. Geralmente, utilizam-se técnicas empíricas, podendo também ser utilizadas técnicas semi-empíricas e fenomenológicas. Estas categorias encontram-se descritas abaixo:

- Modelos fenomenológicos: relacionam as variáveis secundárias e as variáveis primárias, através de equações que descrevem o comportamento físico-químico do sistema, balanços de massa e energia, equações constitutivas, etc., ou seja, possuem um foco voltado ao fenômeno e usa leis e modelos teóricos para descrevê-los.
- Modelos empíricos: são modelos sem qualquer base fenomenológica, utilizando tipicamente técnicas de análise estatística mono ou multivariável e modelos de regressão para estabelecer uma correlação entre os dados de entrada e os dados de saída;
- Modelos semi-empíricos: são modelos baseados normalmente em simplificações de modelos fenomenológicos, os quais durante o processo de simplificação, acabam gerando parâmetros que precisam ser ajustados através de métodos estatísticos para estimação de parâmetros.

Em geral, para colunas de destilação, métodos empíricos são usados na construção de modelos, tanto pela sua praticidade quanto pelos bons resultados. Os modelos empíricos se diferem dos fenomenológicos e dos semi-empíricos pelo fato de não utilizarem relações físico químicas entre as variáveis de entrada e saída, e sim, tratamentos estatísticos. Tais modelos são conhecidos na literatura como do tipo “*Black-box*” (Conz, 2003).

2.2 Modelos de inferência

Modelos de inferência são algoritmos capazes de estimar ou inferir variáveis de difícil aquisição de forma contínua, tais como composições em colunas e propriedades de polímeros, através da utilização de variáveis secundárias, também denominadas variáveis de processo auxiliares (temperatura, pressão e vazão).

A Figura 1 apresenta os constituintes básicos de um modelo de inferência. O bloco de predição (Resultado) contém o modelo matemático que relaciona as variáveis de processo com a propriedade que se queira estimar. Também é apresentado na Figura 1 (Tracejado) os constituintes básicos de um analisador virtual. A grande diferença entre um modelo de inferência e um analisador é o bloco da correção. Este bloco é composto por uma estratégia de adaptação do modelo, realizada através de medidas laboratoriais.

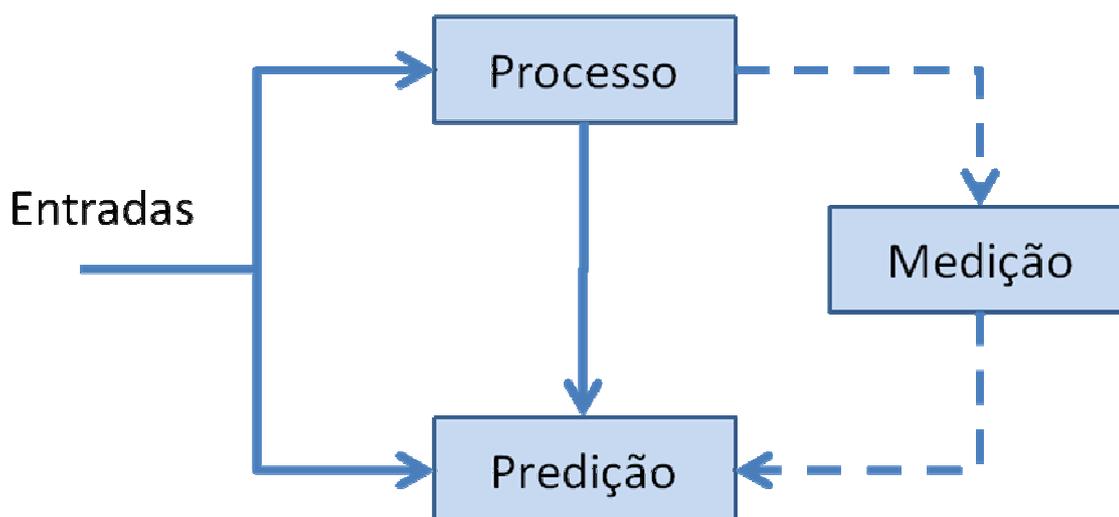


Figura 1 Estrutura básica de um Modelo de Inferência e de um Analisador Virtual

Para que seja possível a implementação de um modelo de inferência é indispensável um conhecimento preliminar do processo onde este será aplicado. Os procedimentos para a implementação partem da seleção de variáveis, escolha do modelo e das técnicas matemáticas utilizadas e criação de um banco de dados que contemple os pontos de operação da planta.

Os dados de entrada usados no desenvolvimento de um modelo de inferência podem ser obtidos por meio dos dados do processo, através de simulações estacionárias e dinâmicas. Estes dados devem compreender várias regiões de operação do processo, onde futuramente possa ser prevista qualquer condição onde o processo possa operar.

2.3 Seleção de Variáveis

A seleção de variáveis deve ser feita escolhendo-se as que mais se correlacionem com a variável predita. Dependendo do modelo escolhido e do processo envolvido, esse conjunto de variáveis pode mudar substancialmente em número e no tipo. O melhor conjunto de variáveis a ser utilizado para inferência dependerá da correlação dessas variáveis com a variável que se deseja inferir. Para modelos empíricos, aumentar o número de variáveis numa equação de regressão melhora o ajuste, porém, a inclusão de muitas variáveis, pode causar prejuízo à capacidade preditiva do modelo. É necessário, então, selecionar um conjunto de variáveis que produza o melhor modelo preditivo.

Geralmente, os modelos para inferência de composição em colunas utilizam temperaturas e pressões, uma vez que estas variáveis possuem uma grande relação com a composição, ao equilíbrio líquido-vapor. Em geral, a composição, a temperatura e pressão de uma mistura em ebulição são relacionadas conforme indicado na Equação 1 (Luyben, 1992):

$$Te = f(x_1, x_2, \dots, x_k, Pv) \quad (1)$$

onde:

Te = Temperatura de ebulição da mistura;

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

Pv = pressão de vapor da mistura em ebulição.

Caso a pressão seja constante, a inferência baseada somente na temperatura é mais simples e pode obter resultados mais efetivos.

Já, as vazões podem ser utilizadas também, mas estas não são indicadas, pois demoram a indicar uma variação na composição de saída da coluna. Uma mudança de vazão de carga, numa coluna, implica na variação de composição, porém o impacto sobre a composição se dará em um tempo maior. Já nos casos das temperaturas e pressões, a dinâmica é rápida, pois variações nas mesmas implicam em mudanças de composição quase instantâneas. Baseando-se nas afirmações acima, é possível se realizar a escolha das variáveis secundárias, através de uma avaliação crítica das variáveis em uso.

2.4 Geração de Modelos

Como dito anteriormente, para colunas de destilação, métodos empíricos multivariáveis são os mais usados para desenvolvimento de modelos de inferência por serem bastante eficientes.

O modelo “*Black-box*” mais simples é o MLR (*Multivariate Least Regression*), que justamente por ser uma regressão linear simples pelo método de mínimos quadrados, apresenta muitas limitações e desta forma é pouco empregado.

Outra técnica utilizada é a PCR (*Principal Component Regression*), que utiliza a regressão por mínimos quadrados, mas resolve os problemas numéricos da MLR, realizando um tratamento nos dados de entrada chamado PCA (*Principal Component Analysis*). Esse trata da redução de dimensionalidade num conjunto de dados multivariável, transformando as variáveis em projeções ortogonais, que eliminam a correlação entre as mesmas e concentram as informações importantes (Conz, 2003).

Uma técnica utilizada é a PLS (*Partial Least Squares*), que utiliza PCA nos dados de entrada e saída, de modo a maximizar a covariância entre os mesmos. O modelo resultante dessa técnica é a relação existente entre as variáveis latentes, que pode ser linear ou não linear.

Um método bastante aplicado na geração de modelos de inferência para colunas de destilação são as redes neurais. Neste método, os modelos obtidos provêm de mecanismos que imitam o funcionamento de uma rede de neurônios (Conz, 2003).

Estas técnicas, normalmente, são construídas através de um banco de dados. Após o desenvolvimento do modelo, este banco de dados é abordado e dali é retirado um modelo empírico, que terá funcionalidade durante algum tempo, tornando-se obsoleto assim que as condições de planta se tornarem diferentes das quais o modelo fora inferido.

Para evitar este problema, foram desenvolvidos modelos que avaliam o comportamento dos dados de forma local, ou seja, são utilizados os dados do momento anterior para gerar a inferência. Dentre os vários métodos que criam modelos locais para a inferência de variáveis de difícil medição, o escolhido para realização deste trabalho foi o *Just in Time (JIT)*.

2.5 *Just in Time Learning*

Para minimizar os problemas citados anteriormente, tais como alto tempo de demora para criação do modelo e também a desatualização deste, foi desenvolvido um método alternativo para modelagem de sistemas não lineares (Cheng et al., 2004). Ele é

baseado em modelos locais de peso. O método JIT observa todo o histórico do banco de dados e o modelo é construído dinamicamente sobre a consulta de dados de processo. Comparado com os métodos tradicionais, o JIT apresenta três características peculiares:

- A construção do modelo é adiada até que uma saída seja requisitada pela consulta de dados,
- A saída predita para aquela consulta de dados é calculada pela exploração dos dados no banco de dados e
- O modelo construído e qualquer resultado intermediário é descartado após obtido o resultado da predição (Atkeson et al., 1997; Bontempi *et al.*, 2001; Nelles, 2001)

A Figura 2 elucida a diferença básica entre os modelos convencionais e os métodos que utilizam modelos locais para inferência de variáveis.

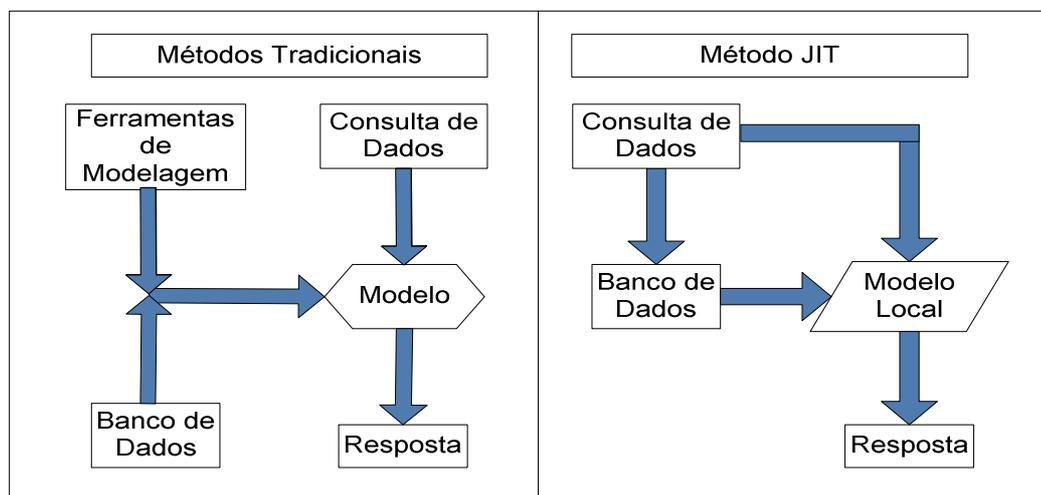


Figura 2 Comparação entre modelos tradicionais e o JIT

Fonte: Cheng Cheng, Min-Sem Chiu *A new data-based methodology for nonlinear process modeling*, 2004.

Os métodos tradicionais como redes neurais são, normalmente, treinados *offline*. Assim, é necessário uma quantidade grande de dados para o treinamento do modelo. Isso pode se tornar relativamente caro devido à alta capacidade computacional necessária para o treinamento do modelo ou até impossível. Para se tornar viável, os métodos tradicionais, muitas vezes, se valem de redução no número de variáveis, porém, prejudicando a capacidade preditiva do modelo. Outra desvantagem é a necessidade de atualização do modelo, quando da troca dos pontos de operação da unidade da qual foram colhidos os dados para o desenvolvimento do modelo. A atualização deve começar do zero, visto que será necessária uma nova coleta de dados e a criação de um novo modelo. Evidentemente, este é um processo demorado e pode interromper o uso do analisador durante a sua

atualização. O caso é mais grave quando estes métodos são utilizados em projeto de controladores.

Em contrapartida, o JIT não tem uma fase normal de aprendizagem. Ele limita-se a coleta dos dados e a armazenagem em um banco de dados e o cálculo não é realizado até a chegada de novos dados de processo (Bontempi *et al.*, 2001). O JIT é válido apenas localmente para a condição de operação característica da unidade. Outra vantagem dos modelos locais é a capacidade adaptativa, que é feita através da consulta do banco de dados atual. Modelos locais para predição de propriedades utilizam os dados de sua vizinhança passada para formar o valor predito, ou seja, ele analisa seu passado para formar o resultado futuro. A descrição do método JIT segue nos próximos parágrafos.

Existem três passos principais no JIT para predizer o resultado do modelo correspondente aos dados de processo:

- As amostras relevantes na base são procuradas para combinar com os dados de consulta através de um critério de vizinhança.
- O modelo local é construído baseado somente nos dados relevantes;
- A saída do modelo é calculada, baseada no modelo local e na consulta de dados atuais (Cheng *et al.*, 2004).

O modelo local é então descartado logo após a resposta ter sido obtida. Quando a próxima consulta de dados começa, um novo modelo local é construído, baseado no procedimento acima mencionado.

Supondo que um banco de dados, que consiste em N dados de processo $(x_i, y_i)_{i=1:N}$ é recolhido. Dada uma consulta de dados específicos (x_q) , cujos elementos são idênticos aos definidos para x_i , o objetivo do JIT é predizer o resultado do modelo $y_q = f(x_q)$, de acordo com o banco de dados conhecido. Cabe ressaltar, que x_i é um vetor formado pelos valores passados de dados de processo de modelagem de um sistema dinâmico (Cheng *et al.*, 2004).

Para avaliar a relevância dos dados do banco de dados, este método faz uso da Norma Euclidiana (Equação 2), que mede a distância entre os pontos do banco de dados (x_i) e o ponto chave (x_q) . Vide Figura 3.

$$d(x_q, x_i) = \|x_q - x_i\| \quad (2)$$

Quanto menor for a distância entre x_q e x_i , maior a similaridade entre estes valores. Fazendo isso, atribuí-se um peso w_i para cada x_i . Esse é calculado segundo a Equação 3:

$$w_i = \sqrt{(K(d(x_q, x_i)))/h} \quad (3)$$

Onde h é largura da banda da função de Kernel, que normalmente utiliza uma função gaussiana (Equação 4). Este parâmetro é utilizada para otimização do método, ou seja, um parâmetro a ser variado para aumentar a precisão do método.

$$K(d) = e^{-\frac{d^2}{h^2}} \quad (4)$$

A equação linear para o cálculo da variável predita é descrita na Equação 5 (Atkeson et al, 1997).

$$yq = x_i^T (P^T P)^{-1} P^T v \quad (5)$$

Onde, $P = W\Phi$, $v=Wy$, W é uma matriz diagonal com o peso dos elementos w_i , Φ é uma matriz com as linhas correspondentes a x_i^T , e $y = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$.

A Figura 3 mostra a técnica de cálculo utilizada para desenvolver o analisador. A técnica é baseada na distância entre o ponto de processo atual (0,0,0) e os pontos de processo do banco de dados. A relevância destes dados é dada através da matriz diagonal de pesos W . Esta, por sua vez, é fruto da distância entre o ponto atual e os pontos anteriores do banco de dados calculados pela Equação 3

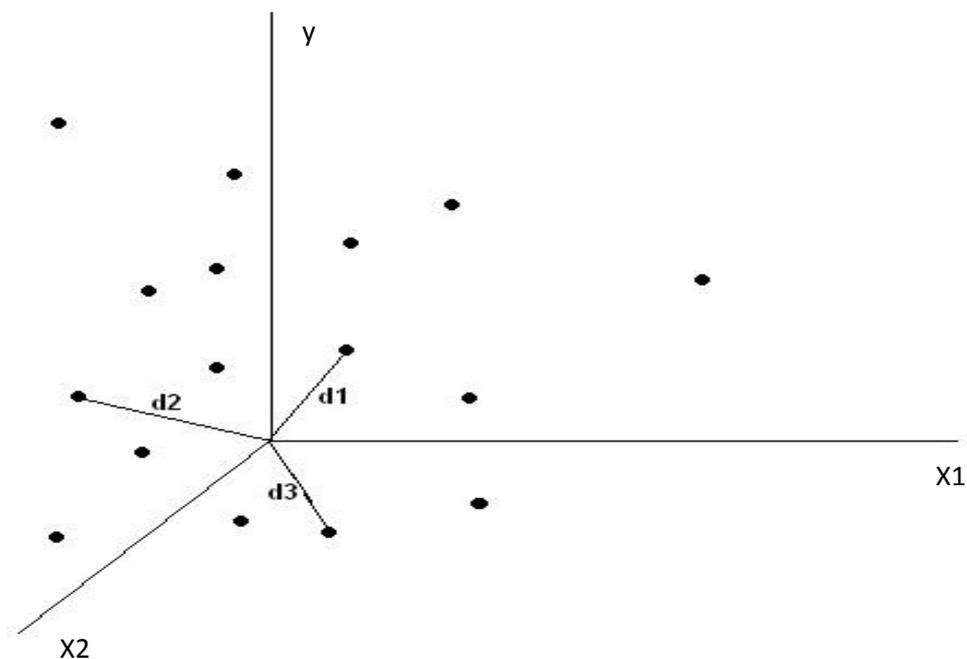


Figura 3 Distância entre as variáveis de processo do banco de dados e a variável atual (0,0,0)

2.6 Exemplo Ilustrativo

Para verificar se o método foi implementado corretamente, criou-se um exemplo ilustrativo, que utiliza duas variáveis correlacionadas, uma de entrada e uma de processo. Também, foi criada uma saída, feita através de uma função de transferência.

A Figura 4 apresenta uma variável de entrada (u_1), a Figura 5 apresenta a variação da variável de processo (u_2) dependente da variável de entrada (u_1) através da equação 6 que é uma função do matlab. A equação 7 é a função de transferência utilizada para obter a resposta y , apresentada na Figura 6.

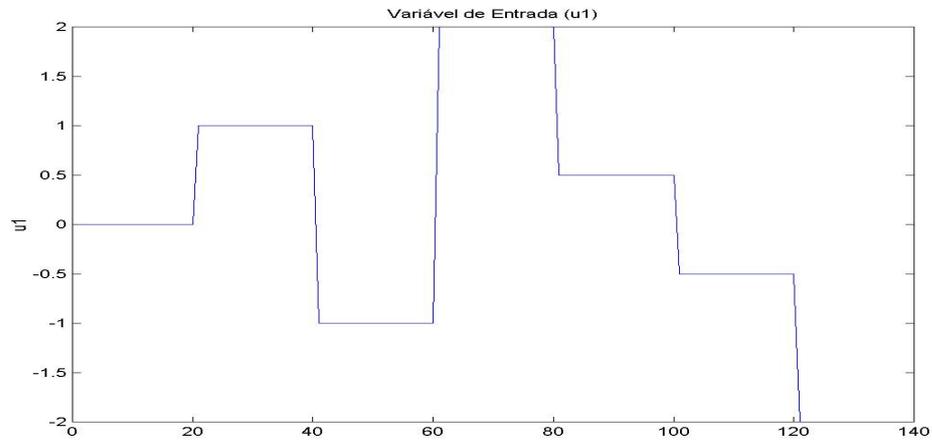


Figura 4 Variável de Entrada (u_1).

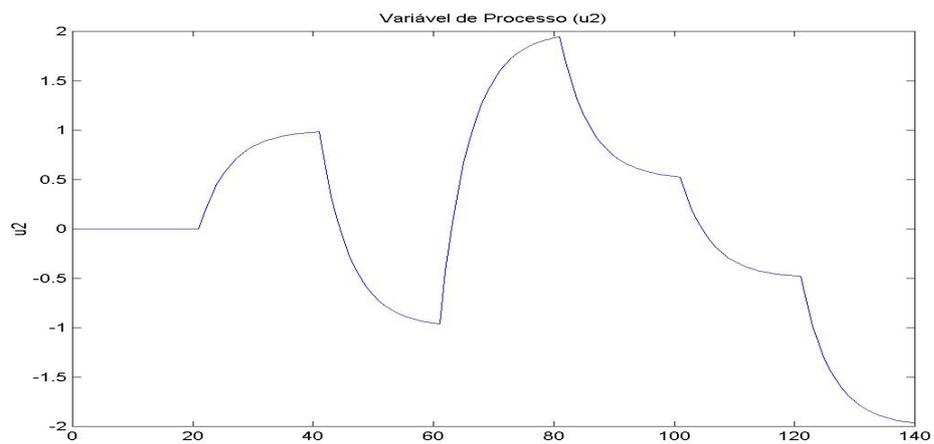


Figura 5 Variável de Processo medida (u_2).

$$u_2 = \text{lsim}(g,u_1,0:\text{length}(u_1)-1); \quad (6)$$

$$g = \frac{1}{5s + 1} \quad (7)$$

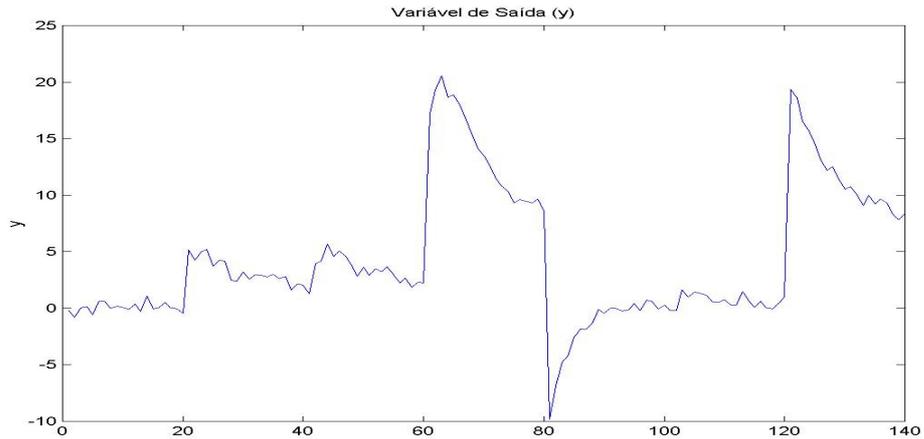


Figura 6 Variável de Saída (y).

Para avaliar o método, utilizou-se 80% dos dados relacionados nas Figuras 4, 5 e 6. Para validação do método, foram utilizados os outros 20%.

A Figura 7 mostra a relação entre os dados reais de saída (y_q) e os dados preditos pelo método JIT (y_p) para um $h=1$.

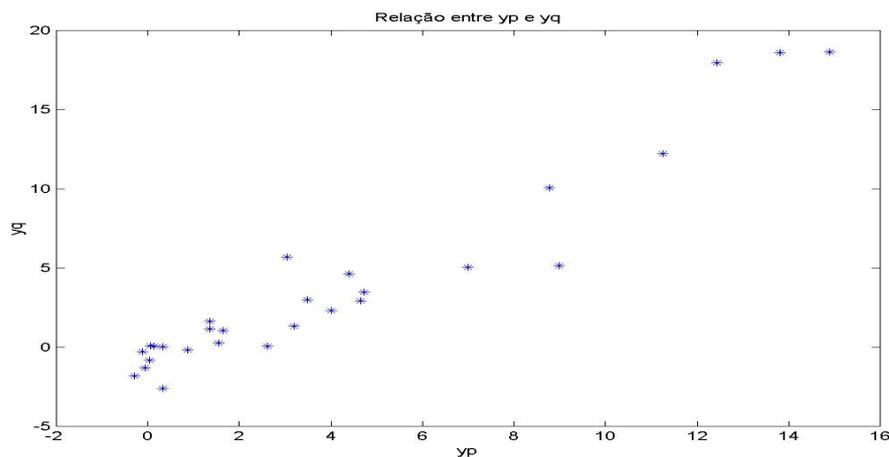


Figura 7 Relação entre a variável de saída predita e a variável de saída real utilizando JIT.

O coeficiente de correlação entre os dados de saída e os dados preditos foi de 0,96. Isso prova que a implementação do método foi feita com sucesso e que, os dados produzidos, quando aplicados ao caso de estudo, terão boa confiabilidade.

A fim de verificar a qualidade do método, uma implementação foi feita utilizando a técnica de regressão linear multivariável. Esta apresentou um coeficiente de correlação de 0,54.

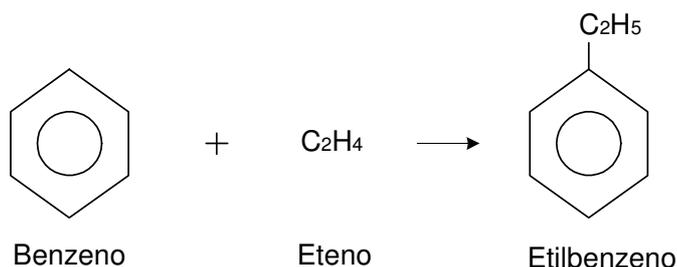
3 Processo de Produção de Etilbenzeno

O etilbenzeno é um líquido incolor altamente inflamável. É um hidrocarboneto aromático e possui a fórmula C_8H_{10} .

O Etilbenzeno é o início da cadeia petroquímica da Innova. Seu principal uso é na produção do monômero Estireno. A unidade de produção de Etilbenzeno utiliza tecnologia americana desenvolvida pela BADGER Licensing.

3.1 Produção de Etilbenzeno

O Etilbenzeno é produzido através da reação de alquilação em fase líquida de eteno grau polímero, ou seja, com pureza adequada para polimerização, com o benzeno refinado.



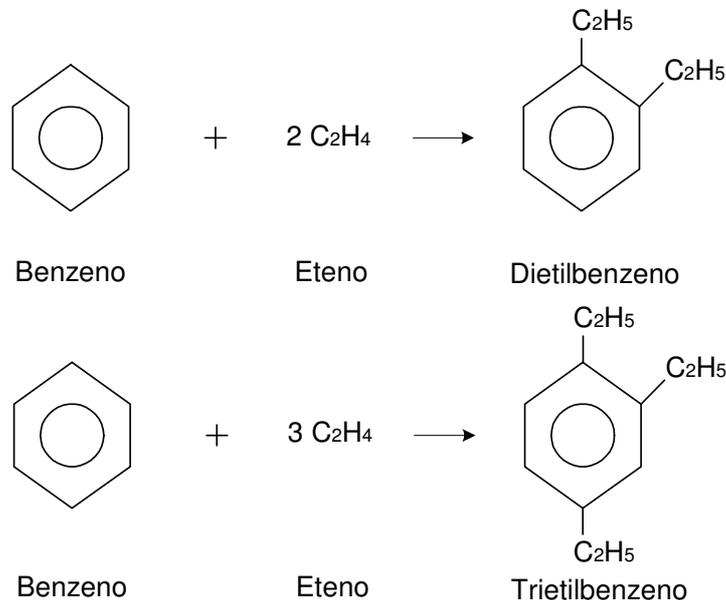
O sistema de alquilação é formado por dois reatores que operam em série, sendo que os mesmos são compostos por leitos fixos, constituídos por zeólitas catalíticas. O eteno consumido na reação é previamente filtrado e pré-aquecido antes de ser enviado para o sistema de alquilação. Para a corrente de eteno, que apresenta compostos básicos prejudiciais aos catalisadores, é utilizado um filtro de alumina ativada como meio de retenção de contaminantes.

O benzeno seco oriundo do fundo da coluna de secagem, passa através de filtros para remover compostos orgânicos nitrogenados, que também são prejudiciais ao catalisador da reação. Cada filtro contém um leito composto por zeólitas que funcionam como peneira molecular.

O benzeno enviado para os reatores de alquilação é pré-aquecido antes de entrar no primeiro reator.

Nos reatores de alquilação, ocorre a conversão completa do eteno através da reação exotérmica de alquilação do benzeno.

Uma pequena parcela do etilbenzeno formado irá sofrer alquilações adicionais, formando compostos denominados polietilbenzenos.



A mistura resultante dos reatores - que é composta basicamente por benzeno não reagido, etilbenzeno produto e compostos polialquilados - é separada em um sistema de destilação composto por 3 colunas. Tais colunas utilizam vapor de alta pressão como fluido de aquecimento nos respectivos refeedores. O sistema de destilação contém, ainda, uma quarta coluna, cuja função é secar o benzeno oriundo dos tanques e, também, segregar os subprodutos leves gerados nos sistemas reacionais, principalmente frações saturadas de eteno. A Figura 8 apresenta um fluxograma simplificado do processo de produção de EB,

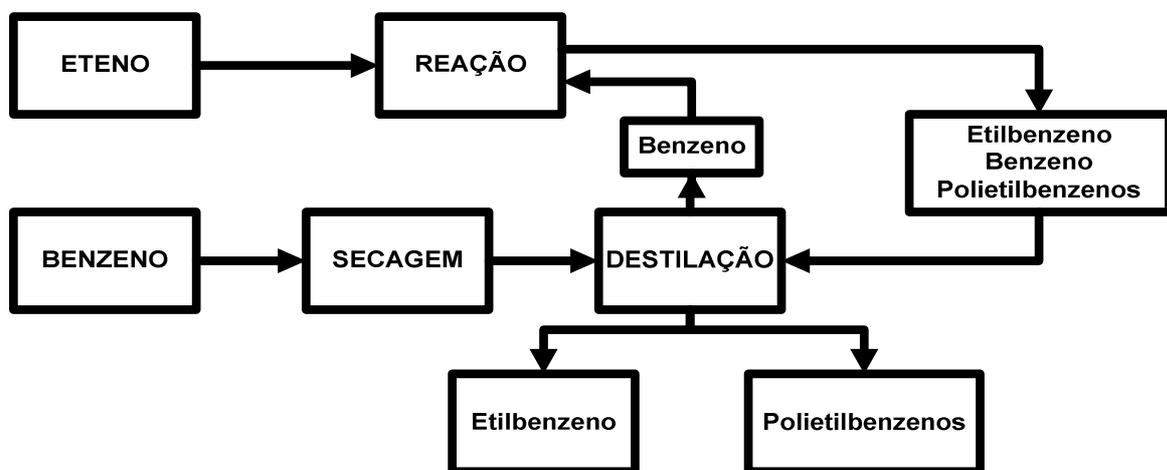


Figura 8 Fluxograma simplificado da produção de EB

3.2 Destilação

A área de destilação da planta de etilbenzeno é composta por 4 colunas: a primeira coluna separa o benzeno no topo e os produtos da reação que são o etilbenzeno e os polietilbenzenos. A segunda coluna retira a água do benzeno que volta para a reação.

A coluna de número 3 é a coluna que será analisada neste trabalho de conclusão. Esta coluna separa o etilbenzeno dos polietilbenzenos formados na reação. O etilbenzeno é o produto principal gerado no processo, e este, é a matéria prima para a planta de estireno. A composição de topo de etilbenzeno deve ser de, no mínimo, 0,996 de etilbenzeno em fração mássica. Este trabalho visa desenvolver um modelo de inferência para prever a composição de topo desta coluna.

Esta coluna apresenta sessenta pratos e a alimentação da coluna é feita no prato número doze. Um esquema da coluna é apresentado na Figura 9.

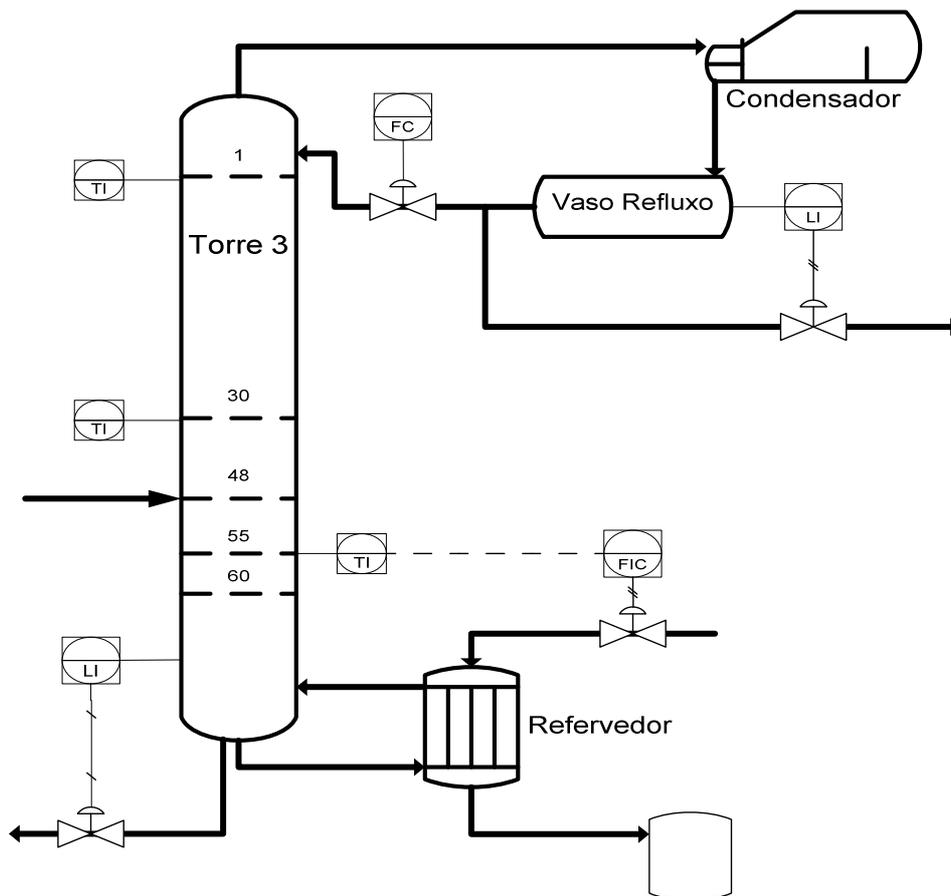


Figura 9 Esquema da coluna de etilbenzeno

Por fim, a coluna 4 separa o dietilbenzeno dos outros pesados formados na reação.

4 Metodologia Computacional

4.1 Simuladores de Processo

Simuladores de processo são softwares que permitem a predição do comportamento de um processo pelo uso de relações básicas de engenharia, como balanço de massa, energia e quantidade de movimento, equilíbrio químico e de fases, taxas de reação e curvas do comportamento de equipamentos específicos. Usando relações termodinâmicas adequadas, condições de operação e modelos (rigorosos ou simplificados) dos equipamentos, é possível prever o comportamento dos mesmos. Os simuladores são peças importantes para a otimização de processos da indústria química, entre outras potencialidades. O uso de simulações auxilia no projeto e, quando utilizados como meio de otimização, aumenta a rentabilidade de plantas já existentes. A simulação de processos, principalmente na indústria química, está em todas as etapas da sua construção, ou seja, desde a sua concepção, ajudando no projeto, até a sua operação, sendo utilizada como método de otimização dos processos já existentes.

4.1.1 Simulador Comercial Aspen Plus

Os simuladores podem ser classificados em estacionários e dinâmicos. Os simuladores estáticos, ou estacionários, são aqueles cujos modelos dos equipamentos usam as equações de balanço mássico e energético sem o termo de acúmulo, ou seja, em estado estacionário. Isto significa que, com estes simuladores, não é possível verificar a resposta transiente da planta ou unidade simulada frente a uma mudança no ponto de operação.

O Aspen Plus é um simulador estático e o ponto forte deste simulador, diz respeito ao conjunto de equipamentos em sua biblioteca. Existe também a possibilidade de adicionar modelos ao seu banco de dados. Além disso, o Aspen Plus oferece uma interface gráfica de fácil acesso e utilização, já que seus blocos recordam os equipamentos de um modo geral.

A grande desvantagem deste simulador é o alto custo para obtenção de uma licença. Isto dificulta a aquisição, sendo somente possível para grandes empresas. Outra desvantagem do software é que ele é fechado, impossibilitando a abertura dos trabalhos

desenvolvidos em outros programas, já que o mesmo utiliza uma linguagem de programação que outros simuladores não são capazes de importar.

Além disso, o simulador disponibiliza um pacote de simulação dinâmica (Aspen Plus Dynamics). Esta ferramenta possibilita a simulação do processo quando da mudança de pontos de operação, ou seja, observar como o processo se comporta frente a mudanças de *set point*, e também, frente à ocorrência de distúrbios. É uma ferramenta importante na implementação de controles no processo, bem como na observação de mudanças, visando à otimização do processo. Novamente, devido ao alto custo de obtenção das licenças, somente alguns engenheiros tem acesso a esta ferramenta importante para indústria química.

As implementações estática e dinâmica foram realizadas no laboratório de computação do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Os computadores são equipados com a versão 7.1 do Aspen Plus e, também, a versão 7.1 do Aspen Plus Dynamics.

4.2 MatLab

O MatLab é um software destinado a fazer cálculos com matrizes, podendo funcionar como uma calculadora ou como uma linguagem de programação científica. Entretanto, os comandos do MatLab são mais próximos da forma como escrevemos expressões algébricas, tornando mais simples o seu uso. Atualmente, o MatLab é definido como um sistema interativo e uma linguagem de programação para computação técnica e científica em geral, integrando a capacidade de fazer cálculos, visualização e programação (Tonini et al, 2002).

O MatLab permite a realização de aplicações ao nível de análise numérica, de análise de dados, cálculo matricial, processamento de sinais e construção de gráficos, entre outras, abordando uma banda larga de problemas científicos e de engenharia.

Uma ferramenta de grande ajuda no Matlab, para agilizar os testes com os dados reais, que são numerosos, é o editor. Esta ferramenta possibilita a criação de uma rotina que pode ser executada com um simples “clique”. Além da agilidade, esta ferramenta evita erros de implementação, já que ela será feita somente uma vez.

O MatLab é uma poderosa ferramenta para problemas de cunho matemático, tendo ferramentas gráficas avançadas para análise e visualização de dados.

Como sua principal desvantagem, o MatLab apresenta um custo altíssimo na aquisição das licenças, restringindo novamente seu uso a poucas empresas.

5 Materiais e Métodos

5.1 Implementação da Simulação Estática

Para construção de um modelo rigoroso da coluna de destilação, foram utilizados dados reais do processo. A coleta destes dados foi realizada com o auxílio do software Aspen Process Explorer, um software historiador, que permite o acesso aos valores das variáveis requeridas em momentos passados. Foi realizada a coleta de 5 dias de produção.

A aquisição dos dados foi realizada em intervalos de 1 minuto. Já os dados das análises laboratoriais foram coletados durante o mesmo período, só que a uma frequência menor, de seis análises por dia.

Para a construção de um modelo que representasse com precisão a coluna de destilação, foi utilizado o simulador Aspen Plus na forma estática, para fazer a representação da coluna em estado estacionário. Após a implementação em estado estacionário, foi utilizado o Aspen Plus Dynamics para avaliar o comportamento da coluna frente a distúrbios e novos pontos de operação. A Figura 10 mostra um esquema da implementação no Aspen Plus.

Para a escolha do modelo termodinâmico a ser utilizado, durante a simulação, utilizou-se o assistente de escolha do Aspen Plus. Para hidrocarbonetos, que não contém pseudo componentes, a sugestão de método foi o SRK.

Durante a implementação do modelo, foram encontrados alguns problemas que necessitaram de aproximações para que a implementação pudesse ser efetuada. Por não existir medição de temperatura e pressão na entrada da torre, somente da saída da torre anterior foram utilizados estes dados para implementação da coluna. Outro problema encontrado foi o de que esta torre está dimensionada para uma vazão maior do que a empregada atualmente. Para tanto, foram necessárias algumas mudanças na implementação da coluna. A principal delas foi o prato de alimentação da torre. Este, na torre real, está posicionado no prato 48, porém na torre implementada este foi colocado no prato 12. Quando implementada corretamente, a pureza da torre excedia os 99,99999%. Dessa forma, qualquer que fosse a alteração promovida durante a simulação dinâmica esta não iria afetar a composição de saída da torre. Após as correções, notou-se uma melhora significativa na aderência dos dados da coluna simulada, quando comparados à coluna operante.

Como última simplificação, não foram consideradas as composições de nenhum outro componente na torre, a não ser de Dietilbenzeno e de Etilbenzeno. Isso pode ser feito porque os outros dois produtos com quantidades mensuráveis (Trietilbenzeno e o Benzeno) são facilmente separáveis, ou seja, todo benzeno da alimentação vai para o topo e todo o trietilbenzeno vai para o fundo. A Figura 10 mostra a torre implementada no Aspen Plus.

A Tabela 1 apresenta uma média dos dados reais recolhidos da planta durante os cinco dias, bem como, o desvio padrão. Estes dados estão normalizados por um valor padrão (média dos cinco dias) por razões de privacidade da empresa.

Tabela 1 Média dos dados reais e desvio padrão percentual

Variável	Média Medição	Desvio %
Vazão Entrada	1	2%
Temp Entrada	1	0%
Temp Fundo	1	0%
Temp Prato 5	1	2%
Temp Prato 30	1	1%
Temp Topo	1	0%
Vazão Refluxo	1	1%
Vazão Fundo	1	5%
Pressão Topo	1	1%
Pressão Fundo	1	0%

Como visto na Tabela 1, devido ao baixo desvio padrão apresentado pelos valores de entrada na torre, puderam-se utilizar as médias dos valores como dados para implementar a coluna. A Equação 8 mostra como foi calculado o desvio percentual apresentado na Tabela 1.

Os dados da Tabela 2 apresenta indícios de que a implementação dos dados na simulação estática foi feita com sucesso. Isso pode ser visto pela pequena diferença entre os resultados obtidos na simulação quando comparados aos dados reais. Para melhor visualização, foi colocada uma coluna com o erro percentual, calculado segundo a Equação 9:

$$Desvio (\%) = \frac{Desvio\ Padrão}{Média\ dos\ Valores} \quad (8)$$

$$Erro = \frac{|Real - Implementação|}{Real} * 100 \quad (9)$$

Tabela 2 Comparação entre dados da implementação e os dados reais

Variável	Erro %
Vazão Entrada	0%
Temp Entrada	0%
Pressão Entrada	8%
Temp Fundo	16%
Temp Prato 55	2%
Temp Prato 30	1%
Temp Topo	6%
Vazão Refluxo	0%
Vazão Fundo	0%
Pressão Topo	0%
Pressão Fundo	0%

A Tabela 3 mostra uma comparação entre a composição de saída do modelo e a composição de saída real, obtida através de análises pelo laboratório de controle de qualidade da empresa.

Tabela 3 Comparação composição de topo real e a implementada

	Planta	Simulação	Erro %
Composição EB topo	99,71	99,68	0%

As Tabelas 2 e 3 comprovam a eficácia da implementação, já que os resultados encontrados se encontram bem próximos da situação real encontrada no dia a dia de processo. Obtidos os resultados satisfatórios, passou-se então para a simulação dinâmica do processo.

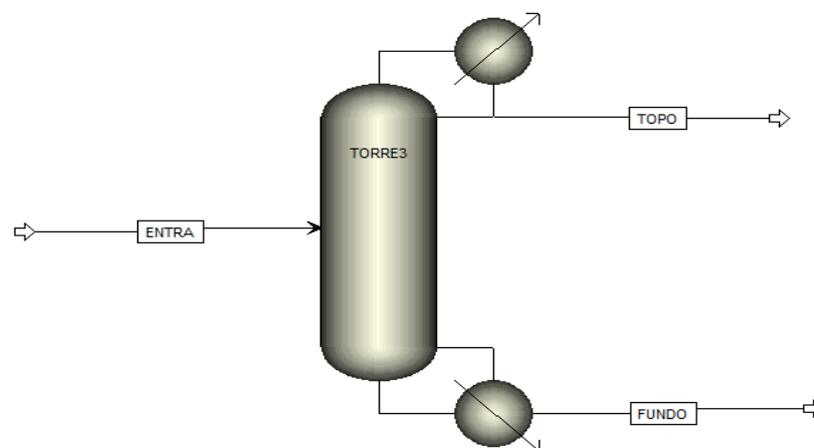


Figura 10 Implementação da torre no Aspen Plus

5.2 Implementação da Simulação Dinâmica

Esta parte do trabalho visa avaliar o comportamento da coluna quando da variação dos parâmetros operacionais, ou seja, pressão, temperatura e vazão.

Para tanto foi utilizado o software de simulação dinâmica Aspen Plus Dynamics. A Figura 11 mostra a tela do Aspen Plus Dynamics.

Como a simulação anterior foi feita em Aspen Plus, foi possível a exportação desta para avaliação da mesma em um processo dinâmico.

5.2.1 Implementação do controlador

O simulador dinâmico do Aspen Plus Dynamics implementa automaticamente o controle básico da coluna, ou seja, os controles de inventário da coluna nos vasos de topo e fundo e, também, um controle de pressão no topo da coluna. Cabe implementar e ajustar os demais controladores existentes na planta real (controle de temperatura no prato 55).

A coluna de etilbenzeno da Innova apresenta um controle relativamente simples. Além dos controles de inventário da coluna e de pressão, tem-se o controle de temperatura no prato de número 55, utilizando como variável manipulada a vazão de vapor para o refeedor da coluna. O esquema de controle é apresentado na Figura 11. Nesta coluna o bloco B1 representa o controlador de temperatura do prato 55, o bloco B2 insere as variações nas variáveis de carga e o bloco B3 insere um ruído nesta variável de entrada.

O controle implementado na coluna foi do tipo PI, o controle foi ajustado segundo o método de síntese direta. O valor encontrado para o ganho k foi de 10,1 e o coeficiente integral (τ_i) foi de 2,2 horas.

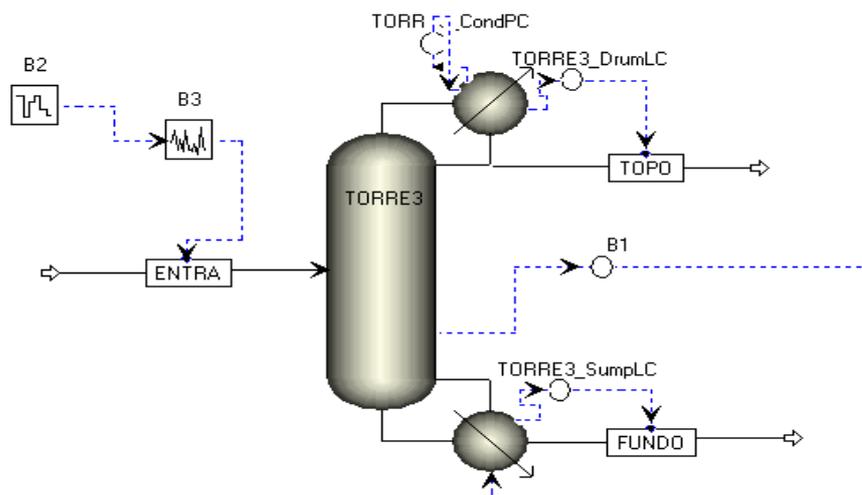


Figura 11 Esquema da implementação da coluna no Aspen Dynamics

5.3 Variação dos parâmetros de entrada

Depois de implementados os pontos pertinentes para o bom funcionamento da coluna de destilação simulada, os dados para o desenvolvimento do modelo de inferência devem ser gerados.

Aqui cabe dizer que, todos os dados retirados da simulação para utilização na geração do modelo são medidos na planta real.

Para tanto, foram variados os principais parâmetros de carga na coluna simulada: a vazão, a temperatura e a pressão de alimentação.

Para a variação dos parâmetros, os operadores da planta de etilbenzeno foram consultados para determinar as variações típicas de cada variável operacional.

Os ranges descritos foram relativamente pequenos, assim sendo, estes receberam um incremento para que o modelo prediga a composição de saída quando as condições indicadas forem ultrapassadas.

Para criação do modelo de inferência, é necessária a utilização de duas variáveis de entrada (uma variável de carga e uma de processo da coluna). Procurou-se utilizar variáveis relacionadas, ou seja, quando variada a temperatura de entrada, buscou-se como variável de processo uma outra temperatura medida na coluna. Também será mostrado o que aconteceu com a composição de etilbenzeno no topo da coluna. Por razões de privacidade, os dados são apresentados de forma normalizada por um valor padrão. Este valor padrão é a média dos dados implementados na simulação estática.

O primeiro parâmetro variado foi a temperatura de entrada da coluna. A Figura 12 mostra a variação da temperatura de entrada na coluna. A Figura 13 mostra a variação da temperatura no prato 30 e a Figura 14 mostra a variação da composição de etilbenzeno no topo frente às variações de temperatura de carga. Na temperatura de entrada, foi inserido ruído para que representasse melhor a realidade do processo. A magnitude do ruído foi avaliada através do *software* historiador Aspen Process Explorer com dados de processo.

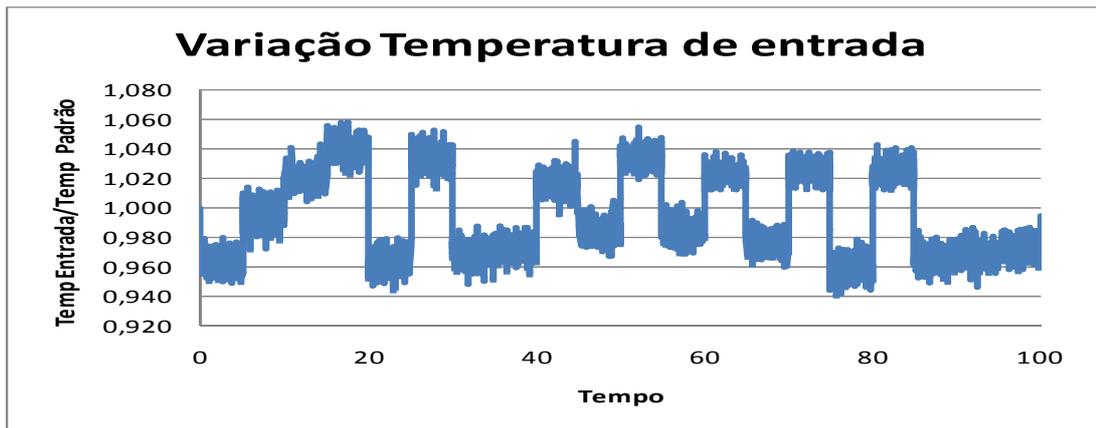


Figura 12 Variação da temperatura de entrada

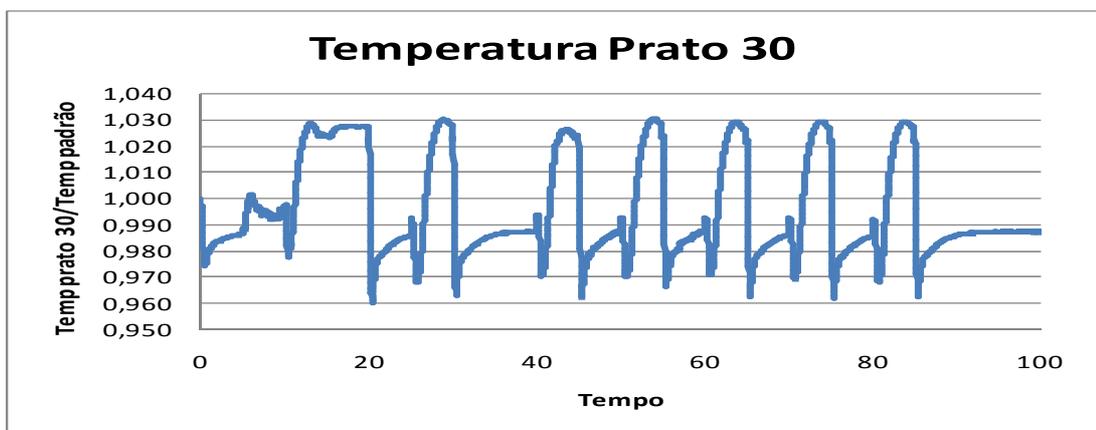


Figura 13 Temperatura no prato 30

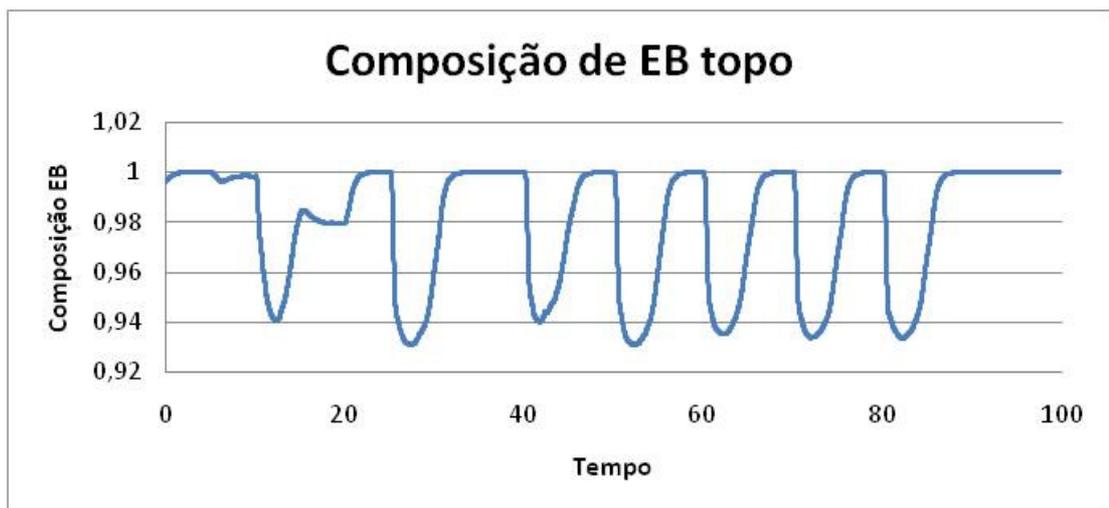


Figura 14 Composição EB no topo da coluna

O segundo parâmetro variado foi a pressão de entrada. A Figura 15 mostra a variação da pressão na entrada da coluna. A Figura 16 mostra a temperatura no prato 30, variável de processo escolhida e a Figura 17 mostra a variação da composição de EB no topo.

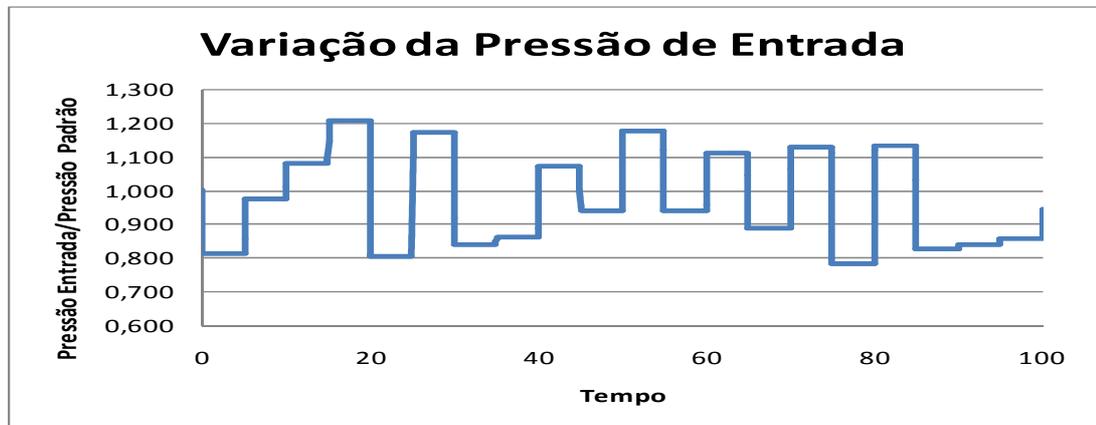


Figura 15 Variação da Pressão de entrada

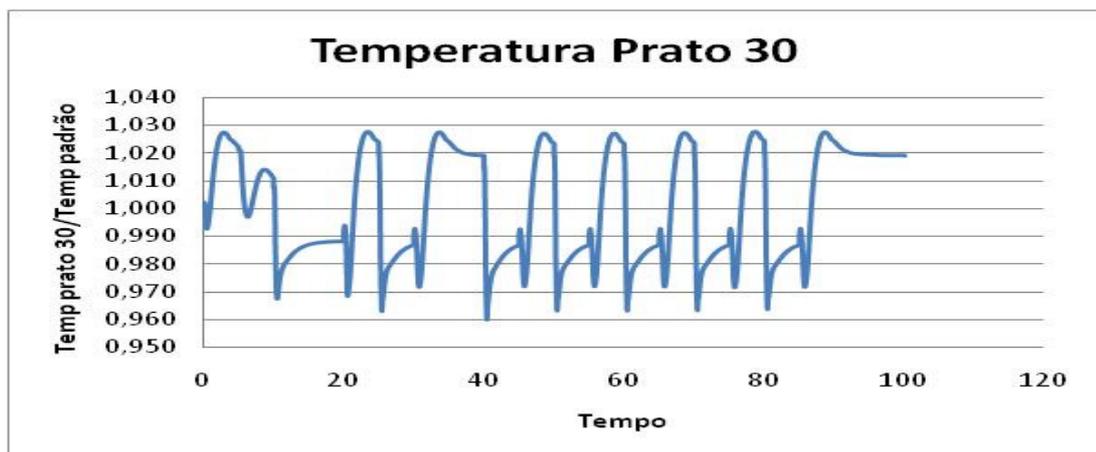


Figura 16 Variação da Temperatura do prato 30

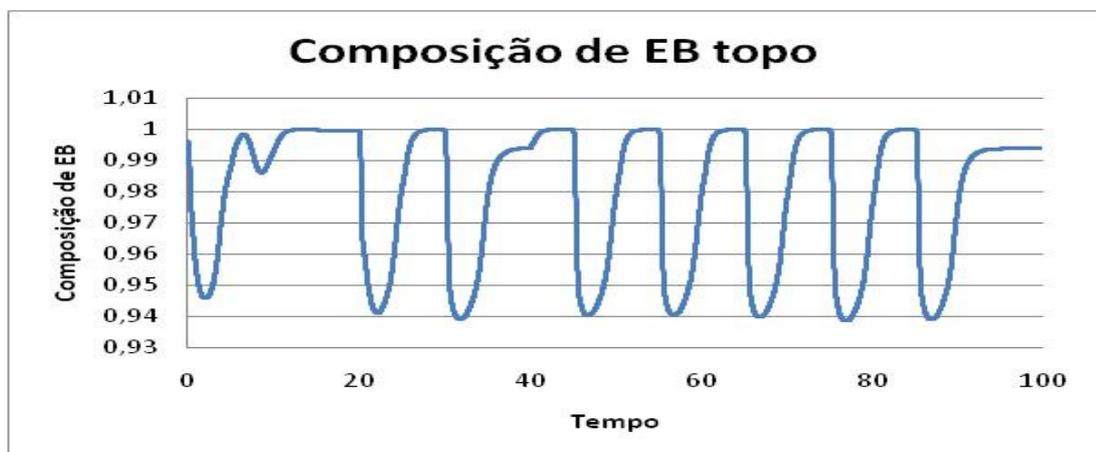


Figura 17 Composição de EB no topo

A temperatura no prato 30 foi escolhida pois, quando colocados dados de pressão (topo e fundo), os resultados apresentavam correlação abaixo de 0,5. Quando utilizado com a temperatura, conseguiu-se uma correlação de 0,73, sendo este o melhor resultado encontrado.

Por fim, foi variada a vazão de alimentação da coluna. A Figura 18 mostra a variação da vazão de entrada. Também foi inserido um ruído na vazão de entrada. A Figura 19 mostra a variação da variável de processo associada a vazão de entrada da torre. A Figura 20 mostra a composição de EB no topo da coluna frente às variações na carga da coluna.



Figura 18 Variação da Vazão de Entrada

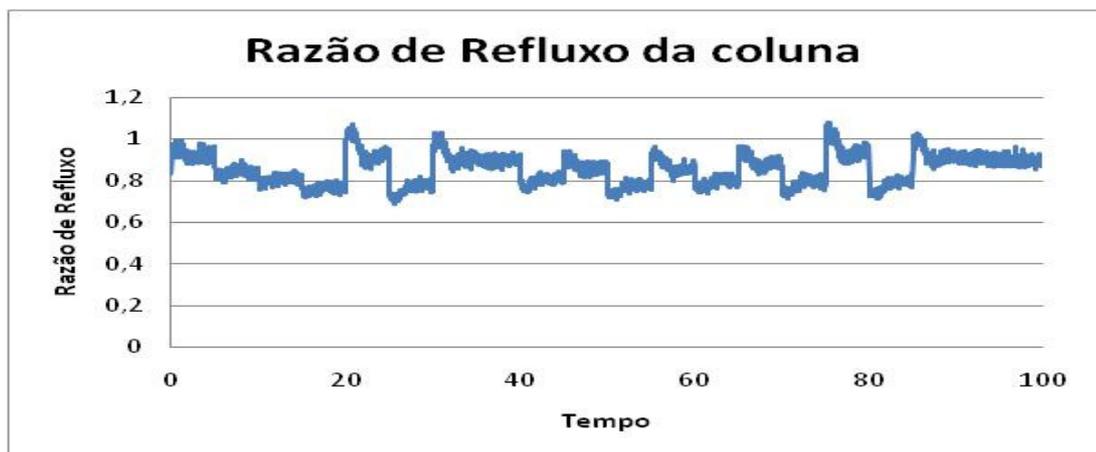


Figura 19 Variação da Razão de Refluxo

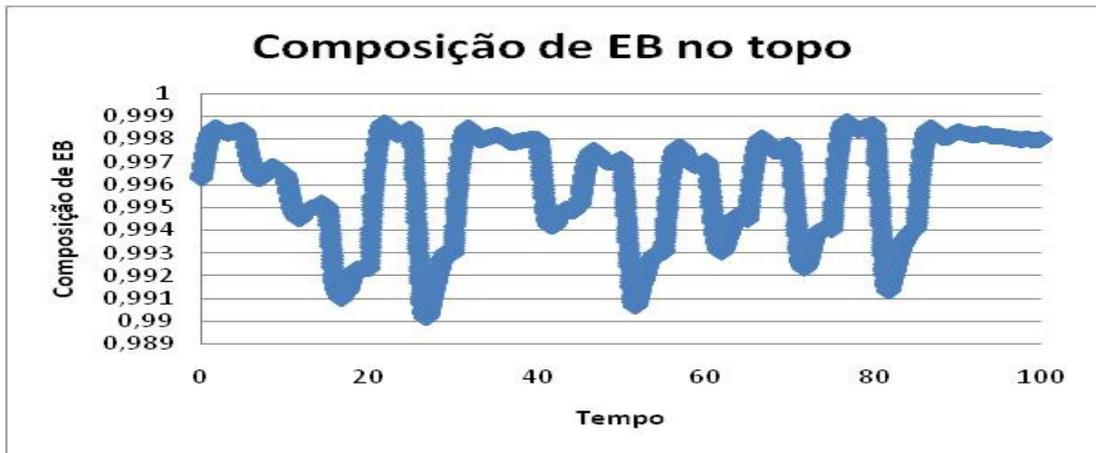


Figura 20 Variação da composição de EB no topo

6 Discussão e Resultados

Neste capítulo, serão apresentados os resultados obtidos pelo modelo de inferência, frente às variações acima mencionadas.

A metodologia de implementação está descrita no Capítulo 2.

Aqui cabe dizer que, de cada seção de dados, 80% destes foram utilizados para construção do modelo e os outros 20% foram utilizados para o teste do analisador.

Os resultados serão apresentados da seguinte forma: dados reais de composição de topo no eixo “y” e os dados preditos no eixo “x”. Dessa forma fica simples a verificação da qualidade dos dados preditos e a validação do modelo proposto. Caso o modelo fosse perfeito, o gráfico apresentado seria de uma reta e apresentaria coeficiente de correlação igual a 1.

Seguindo a sequência apresentada anteriormente, os primeiros resultados apresentados serão os do modelo quando variada a temperatura. A Figura 21 ilustra os resultados. A correlação entre os dados preditos e os reais foi de 0,94.

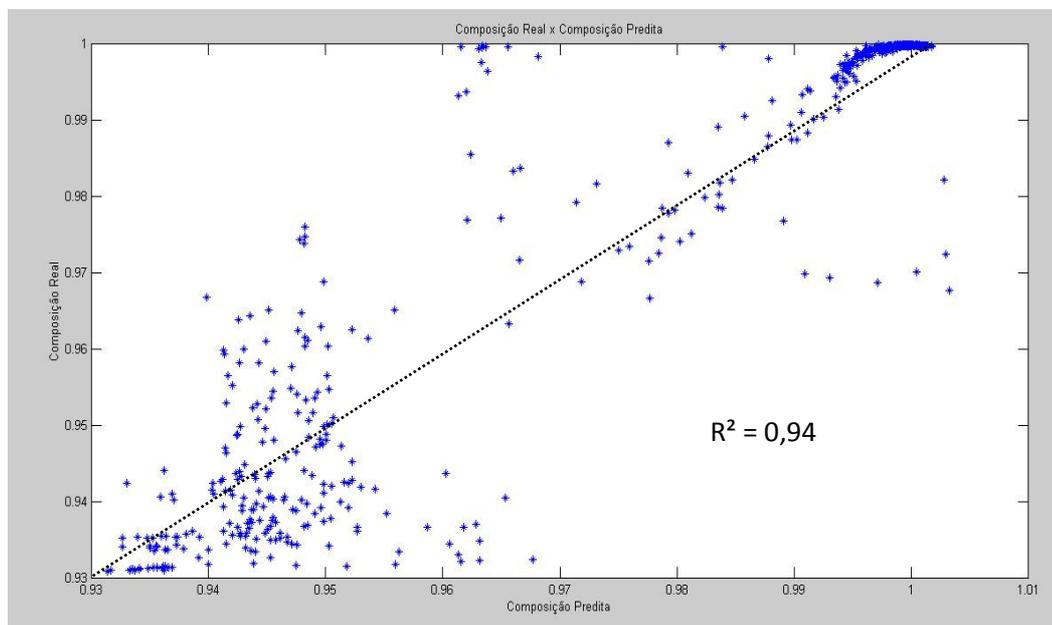


Figura 21 Resultados do modelo quando variada a temperatura de entrada

O próximo resultado apresentado na Figura 22 é o da variação da carga de entrada. A correlação entre os dados apresentado é de 0,87. O resultado obtido mostra que o modelo de inferência perdeu um pouco da capacidade preditiva, porém o resultado é bom, pois o mesmo consegue acompanhar a tendência dos valores da composição real.

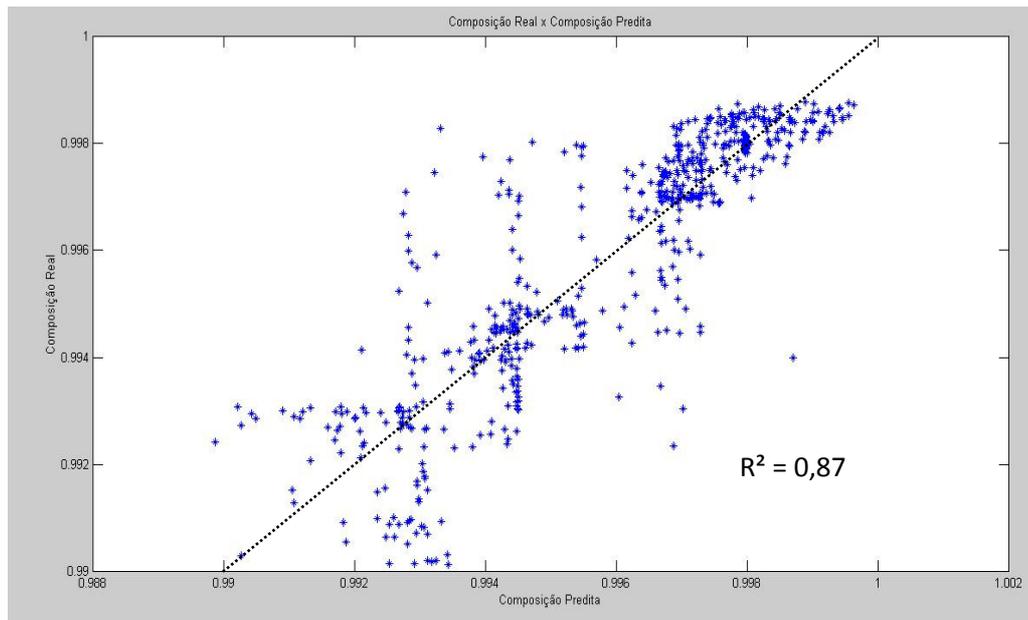


Figura 22 Resultados do modelo quando variada a carga de entrada

Por fim, será mostrado o resultado da variação da pressão de entrada da coluna na Figura 23. Este resultado apresentou a pior correlação, que foi de 0,73. Isso pode ser explicado, pois nenhuma das variáveis de processo apresentou bom resultado quando colocado junto à pressão de carga para implementação do modelo preditivo. Assim, foi utilizado como variável de processo a temperatura no prato número 30. Esta obteve o melhor resultado para o coeficiente de correlação que foi de 0,73.

A simulação produz dados de pressão em todos os pratos, porém não seria interessante utilizá-los, pois a coluna apresenta controle de pressão apenas no fundo e no topo. Os dados de processo relativos a pressão de entrada, quando implementados, apresentaram correlação entre os dados preditos e os dados reais abaixo de 0,5.

Após analisados os resultados das variáveis separadamente, partiu-se para um teste, onde todas as variáveis de entrada analisadas no trabalho foram variadas com o mesmo range das variáveis acima mencionadas. Para tanto, ajustou-se o modelo para o recebimento de 3 variáveis de carga (temperatura, vazão e pressão) mais uma variável de processo (temperatura prato 30).

Antes dos testes nos modelos, foi feita a implementação de todo o sistema em Aspen Dynamics, onde cada variável recebeu seu range de variação e também ruído.

Logo após a obtenção dos dados de composição de EB no topo da coluna, partiu-se para o teste do modelo de inferência. Nas primeiras simulações em MatLab houve problemas devido a magnitude da vazão em relação a pressão e a temperatura. Para dar

continuidade ao trabalho, os valores foram divididos pela sua ordem de grandeza para que todos se assemelhassem aos dados de menor valor (pressão).

Após estas variações, o modelo JIT apresentou um gráfico com coeficiente de correlação igual a 0,70. Como aconteceu com os dados de vazão, o modelo conseguiu acompanhar a tendência dos dados. A Figura 24 mostra a os dados.

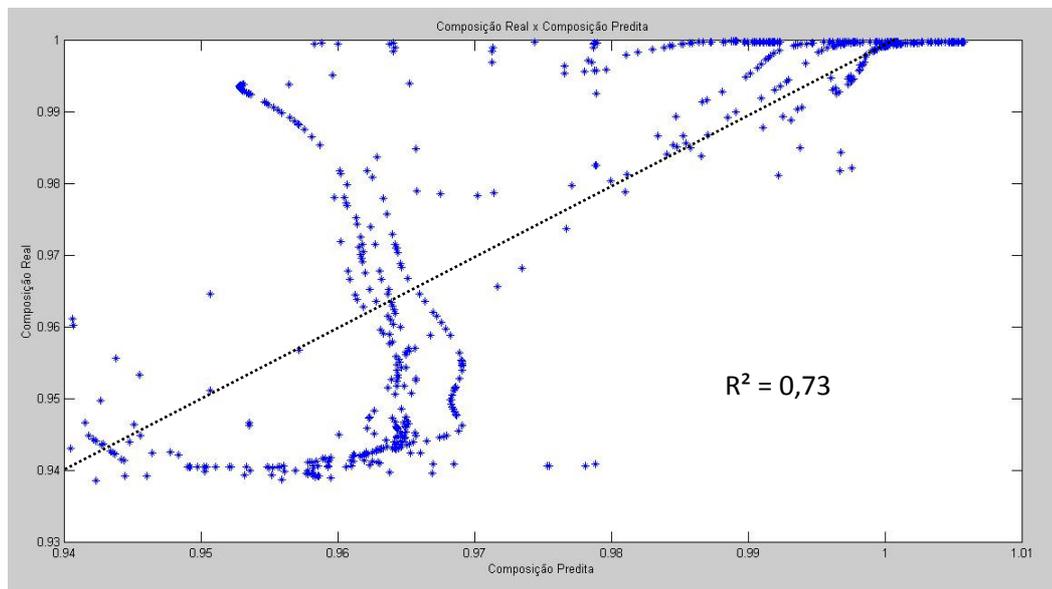


Figura 23 Resultados do modelo quando variada a pressão de entrada

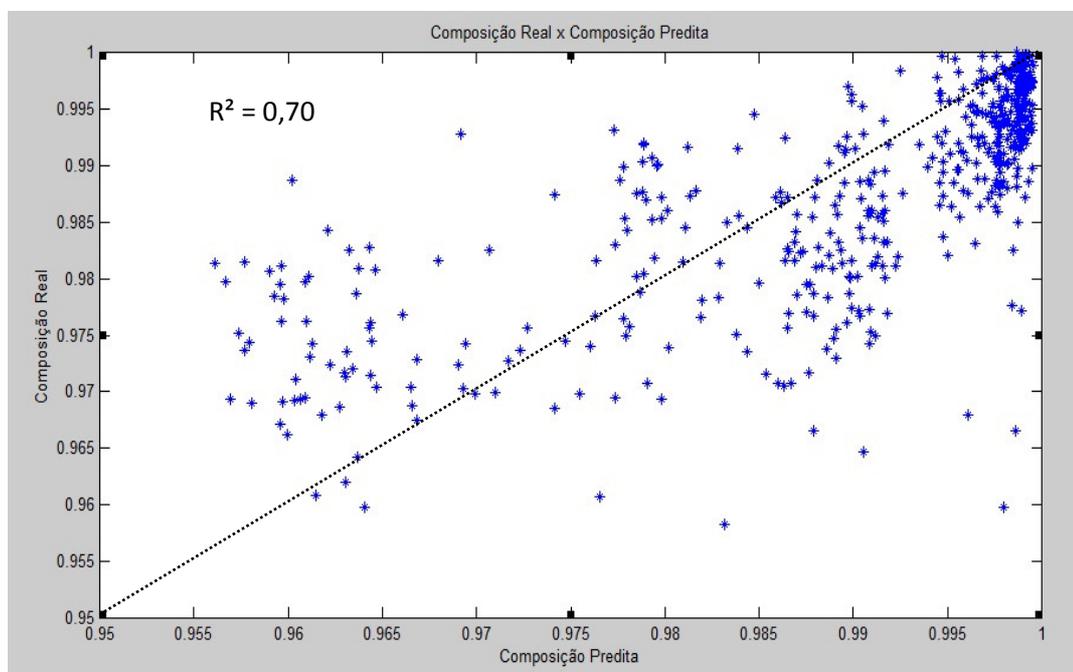


Figura 24 Resultados do modelo quando variados todos os distúrbios de entrada

7 Conclusão e Trabalhos Futuros

Este trabalho teve por objetivo o desenvolvimento de um modelo de inferência, baseado em *Just in Time*, uma técnica de geração de modelos locais para predição de propriedade.

O estudo do trabalho foi feito em uma coluna que separa, principalmente, EB de dietilbenzeno. Esta coluna, pertence à planta de Etilbenzeno da empresa Innova SA – Petrobras, localizada no Pólo Petroquímica de Triunfo. Como o objetivo desta planta é a produção de etilbenzeno com uma pureza elevada, pois o mesmo serve de alimentação para a planta de estireno, esta coluna é peça chave para garantia de qualidade do produto final da planta de EB, e também, para a boa operacionalidade da planta de estireno.

Para tanto, foi criada uma simulação estacionária para representar a coluna operante. E também, foi criada uma simulação dinâmica, para avaliar o comportamento da mesma frente à variações de pontos de operação, e também, quando do acontecimento de distúrbios. Após a geração de dados, foi utilizado o software MatLab para implementação da técnica.

A técnica utilizada para predição da composição de topo de uma coluna de EB, mostrou-se relativamente eficaz. Para variações, somente da temperatura, a técnica do JIT apresentou resultados muito bons, obtendo-se uma correlação entre os dados reais e os preditos de 0,94.

A variação da vazão de entrada produziu bons resultados. A correlação entre os dados preditos e reais foi de 0,87, mostrando que a técnica de geração de modelos locais conseguiu acompanhar a tendência do sistema.

Quando variados todos os parâmetros em conjunto, obteve-se uma correlação de 0,70, mostrando que o modelo pode não se adaptar bem a esse tipo de processo. O que pode ter acontecido é também existir uma grande influência do resultado da pressão. O que poderia ser feito é a uma nova simulação utilizando apenas a temperatura e a vazão.

Como trabalhos futuros, em vista de uma melhor capacidade do método, existem linhas de pesquisa que visam melhorar a capacidade preditiva deste modelo. É o caso da utilização do ângulo entre o ponto atual e o ponto do banco de dados. Este modelo consegue inferir com mais acuracidade os dados reais (Cheng, 2004).

Ainda, buscando melhorar o método *Just in Time*, foi desenvolvida a técnica Co-JIT. Esta é uma técnica baseada em JIT, que faz uso da ferramenta estatística PCA. Esta técnica melhora o modelo, deixando-o mais robusto (Fujiwara, 2009).

Referências Bibliográficas

Atkeson, C. G., Moore, A. W., Schaal, S., 1997. *Locally weighted learning. Artificial Intelligence Review 11.*

Bontempi, G., Bersini, H., Birattari, A., 2001. *The local modeling paradigm for modeling and control: from neuro-fuzzy to lazy learning. Fuzzy Sets and Systems 121.*

CAMPOS, M. C. M. M., TEIXEIRA, H. C. G., *Controles típicos de equipamentos e processos industriais.* 1. ed. São Paulo-SP: Blücher, 2006. 416 p.

Cheng Cheng, Min-Sem Chiu. *A new data-based methodology for nonlinear process modeling.* National University of Singapore, Singapore, 2004

CONZ, Vanessa. *Desenvolvimento de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação Industriais,* Dissertação (mestrado). UFRGS, Porto Alegre, 2003.

Crespo, L. S., *Montagem, verificação de comportamento dinâmico e teste de operacionalidade de uma torre de destilação piloto.* Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) – Vitória-ES – Universidade Federal do Espírito Santo – UFES, 2000.120p.

FACCIN, Samuel. *Técnica de análise multivariável aplicada ao desenvolvimento de analisadores virtuais.* Dissertação (mestrado). UFRGS, Porto Alegre, 2005.

Fujiwara, Koichi et al. *Soft-sensor Development Using Correlation-Based Just in Time Modeling.* Kyoto University, Japan, 2009

Luyben, Willian L. *Practical Distillation Control.* 1992

Nelles, O., 2001. *Nonlinear System Identification.* Springer, Berlin.

Tonini, A. M.; Schettino, D. N., *MATLAB para Engenharia.* 1 ed. Belo Horizonte, 2002. 49p

Winck, Rafael Espinosa. *Analisador Virtual Baseado em Redes Neurais – Aplicação em colunas de destilação.* Trabalho de Conclusão. UFRGS, Porto Alegre, 2005.

Wunsch, Diego. *Proposição de Analisador Virtual para Coluna de Etilbenzeno baseado em Redes Neurais.* Trabalho de Conclusão. UFRGS, Porto Alegre, 2008