

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

**Desenvolvimento de uma estratégia de
controle avançado para uma Unidade
Recuperadora de Propano**

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Lisandra Silveira da Silveira

Porto Alegre

2012

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

**Desenvolvimento de uma estratégia de
controle avançado para uma Unidade
Recuperadora de Propano**

Lisandra Silveira da Silveira

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

Área de concentração: Controle de Processos

Orientador:
Prof. Dr. Jorge Otávio Trierweiler

Porto Alegre

2012

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

A Comissão Examinadora, abaixo assinada, aprova a Dissertação "*Desenvolvimento de uma Estratégia de Controle Avançado para uma Unidade Recuperadora de Propano*", elaborada por Lisandra Silveira da Silveira, como requisito parcial para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia.

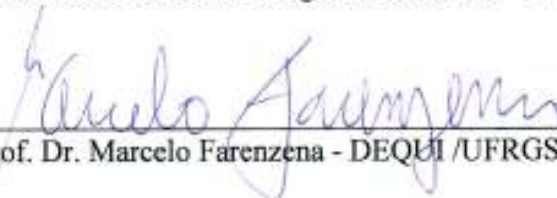
Comissão Examinadora:



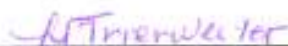
Prof. Dr. Luís C. Oliveira Lopes – FEQ/UFU



Prof. Dr. Pedro R. de Bolognese Fernandes - DEQUI / UFRGS



Prof. Dr. Marcelo Farenzena - DEQUI / UFRGS



Dra. Luciane Ferreira Trierweiler – DEQUI / UFRGS

Agradecimentos

Agradeço ao Departamento de Engenharia Química da UFRGS pela oportunidade de ingressar no programa de Pós-Graduação e ao meu orientador Jorge, pela condução desta dissertação.

Agradeço a Braskem pela oportunidade, em especial ao Marcelo Guarita pelo apoio, pela orientação e pela oportunidade de realizar o mestrado em tempo parcial.

Agradeço pela atenção dos Engenheiros de Automação da Braskem, especialmente a Isadora Moreira, Thiago Cangussu, Gustavo Neumann e Luciano Farina, que gentilmente permitiram e apoiaram na implementação do Analisador Virtual e do Controlador na planta industrial. Agradeço pela paciência, pelas explicações, pela amizade, enfim por toda a participação neste trabalho.

Enfim, agradeço a todos que de uma forma ou de outra contribuíram para a concretização deste estudo.

Resumo

Na busca pelo aumento da rentabilidade dos processos, muitas indústrias têm procurado a melhoria contínua de seus sistemas de controle. Esta dissertação trata da aplicação de técnicas de controle avançado em uma Unidade Recuperadora de Propano, sendo motivada por fatores vinculados a benefícios econômicos, tais como: aprimoramento do controle de qualidade, economia de energia, minimização do custo variável e maximização da produtividade.

O desenvolvimento da estrutura de controle associado ao desempenho ótimo dessa unidade e a utilização de soluções simples, com técnicas de controle avançado adequadas ao desempenho desejado para o processo em questão são objetos de estudo dessa dissertação. Inicialmente se fez uso das técnicas clássicas da literatura para re-avaliar a estrutura da camada de controle regulatória, neste caso a escolha do emparelhamento mais adequado entre as entradas e saídas. Após foram utilizadas as técnicas de identificação de modelos dinâmicos de processo para obter a inferência da composição do contaminante no propano recuperado da unidade. Realizou-se também um estudo comparativo entre os modelos obtidos pela técnica MLR (*Multiple Linear Regression*) adaptada para obtenção de modelos dinâmicos e o modelo construído a partir do *software* Pavilion8, baseado no método auto-regressivo ARX (*Autoregressive with eXogenous inputs*).

A viabilidade e ganhos potenciais são verificados através da implementação da nova estrutura de controle regulatório, do analisador virtual e do controlador na planta industrial. Baseado nesta implementação, estima-se poder reduzir as perdas de propano em cerca de 2% do custo variável total de propano da planta e o consumo energético por carga processada em 2,3 %. Este resultado ilustra em termos práticos o sucesso da estratégia proposta e implementada.

Abstract

In order to increase the profitability of processes, many industries have sought to continuously improve their control systems. This paper discusses the application of advanced control techniques in a Propane Recovery Unit, being motivated by factors linked to economic benefits such as improved quality control, energy saving, cost variable savings and maximizing productivity.

In this dissertation the development of the control structure associated with the optimal performance of this unit and the use of simple solutions, with advanced control techniques appropriate to the desired performance for the process are studied. Initially, classical techniques were used to re-evaluate the structure of the regulatory control layer, that is the most appropriate choice of the pairing between the inputs and outputs. After that, techniques were used to identify dynamic process models able to infer the contaminant in the Propane Recovered Unit. It was also compared the models obtained by the technique MLR (Multiple Linear Regression) adapted to obtain dynamic models and the model built from the Pavilion8 software based on the method autoregressive ARX (Autoregressive with Exogenous inputs).

The feasibility and potential gains are verified by implementing the new structure of regulatory control, the virtual analyzer and controller in the plant. Based on this implementation, it is estimated propane reduce losses of 2% of the variable cost of the plant of propane and steam consumption by 2.3% in processed production. This result illustrates in practical terms the success of the strategy proposed and implemented.

Simbologia e Nomenclatura

ARX	Autoregressivo com entradas externas
BJ	Modelo de Box-Jenkins
CV	Custo variável
EKF	Filtro de Kalman Estendido
FIR	Modelo resposta ao impulso finita
G	Função de transferência
ω	Frequência (rad/min)
J	Função custo
K	Ganho proporcional
KLV	Volatilidade
LF	Estrutura de controle da T01 do nível em cascata com a vazão de fundo
LV	Estrutura de controle da T01 do nível em cascata com o vapor
MIMO	Sistemas da multi-entrada-multi-saída
MLR	Regressão Linear Multivariável
MPC	Controle Preditivo Multivariável
NRR	Método de construção de modelos: Neural network
OE	Erro na saída
PCA	Análise dos componentes principais
PCR	Regressão dos Componentes Principais
PEAD	Polietileno de alta densidade
PEBDL	Polietileno linear de baixa densidade
PLS	Mínimos Quadrados Parciais
PPM	Partes por milhão
PR	Modelo termodinâmico Peng Robinson
PRBM	Modelo termodinâmico Peng Robinson com regras de mistura de Boston e Mathias
PRESS	Erro Predito da Soma dos Quadrados
QPLS	Quadrático Mínimos Quadrados Parciais
R^2	R-Quadrado
RFG	Reator fase gás
RGA	Matriz de Ganhos Relativos
RHP	Metade do plano direito
RKS	Modelo termodinâmico Soave- Redlich-Kwong
RKSBM	Modelo termodinâmico Soave- Redlich-Kwong com regras de mistura de Boston e Mathias
RMSEP	Raiz media do Erro Quadrado de Predição
RPN	Número de desempenho Robusto
SISO	Sistemas com uma única entrada e uma única saída
SVD	Decomposição em valores singulares
Tau	Constante de tempo

Teta	Tempo morto
UNIBRS	Unidade de Insumos Básicos do Rio Grande do Sul
\bar{y}	Média entre medições da saída
y_i	Medida da saída para a amostra i
\hat{y}_i	Predição do modelo para a amostra i
Y_p	Predição do modelo
Z	Sigma
A	Volatilidade relativa
Γ	Número de condicionamento mínimo
γ^*	Número condicional mínimo.
λ_{ij}	Ganhos estáticos
$\bar{\sigma}$	Maior Valor Singular
$\underline{\sigma}$	Menor Valor Singular
Γ	Função gamma. Seu valor máximo representa o número RPN
FLR	Função gamma com escalonamento constante.

Sumário

1. Introdução	1
1.1 Estrutura da Dissertação.....	2
2. Descrição da Unidade e Desenvolvimento da Solução	4
2.1 Descrição do Processo.....	4
2.1.1 Descrição da Planta	4
2.1.2 Descrição da Unidade de Recuperação de Propano	6
2.2 Estratégia de Controle Atual	8
2.3 Características de Operação	10
2.3.1 Restrições	10
2.3.2 Modos de Operação.....	10
2.3.3 Distúrbios	12
2.4 Objetivos de Operação	12
2.5 Metodologia para Avaliação da Estrutura de Controle	13
2.5.1 Metodologia Empregada	16
3. Desenvolvimento da Estratégia de Controle	18
3.1 Avaliação Estática da Unidade.....	18
3.2 Análise de Sensibilidade	23
3.2.1 Efeito da vazão de refluxo e fundo na T01	24
3.2.2 Efeito da composição de pesados e leves na T01	25
3.2.3 Efeito da vazão de vapor no E03 e E04	27
3.3 Estruturas de Controle Potenciais	28
3.3.1 Restrições de Processo	28
3.3.2 Definição do Controle de Inventário.....	29
3.3.3 Proposição de Estratégias de Controle.....	31
3.4 Avaliação da Dinâmica	35
3.4.1 Metodologia de Identificação.....	35
3.4.2 Modelos Obtidos	37
3.5 Índices de Desempenho.....	40
3.5.1 Arranjo dos Ganhos Relativos	41
3.5.2 Pólos e Zeros Positivos	43
3.5.3 Condicionamento Mínimo	45
3.5.4 Número de Desempenho Robusto.....	46

4. Desenvolvimento de Analisadores Virtuais.....	48
4.1 Conceitos Fundamentais	48
4.2 Metodologia de Desenvolvimento	50
4.2.1 Entendimento do Processo	51
4.2.2 Geração e Pré-tratamento dos Dados	53
4.2.3 Escolha do Modelo, Calibração e Validação	53
Regressão Linear Multivariável	56
Regressão dos Componentes Principais (PCR)	57
Mínimos Quadrados Parciais (PLS).....	57
Métodos Não Lineares	58
4.2.4 Técnica de Correção de Modelos.....	60
Correção de BIAS	60
Mínimos Quadrados Recursivos	61
Filtro de Kalman Estendido – EKF	61
4.3 Geração e Pré-tratamento dos Dados	62
4.4 Escolha do Modelo, Calibração e Validação	63
4.4.1 Desenvolvimento do analisador virtual.....	63
4.4.2 Desenvolvimento do analisador virtual usando Pavilion8.....	70
4.5 Correção do Modelo.....	72
5. Desenvolvimento do Controlador e Ganhos Potenciais	74
5.1 Controle Preditivo Baseado no Modelo	74
5.2 Metodologia para traduzir melhoria de controle em ganhos econômicos	78
5.2.1 Identificação das oportunidades de ganhos.....	78
5.2.2 Redução da variabilidade da especificação de buteno	79
5.2.3 Possibilidade de aumento de recuperação de propano.....	80
5.2.4 Redução de consumo de energia	81
5.2.5 Redução das perdas de produção	82
6. Conclusão e Sugestões para Trabalhos Futuros.....	83
Apêndice A - Índices de Desempenho	85
A.1 Arranjo dos Ganhos Relativos	85
A.2 Pólos e Zeros Positivos	88
A.3 Direcionalidade do Sistema.....	89
A.4 Número de Desempenho Robusto.....	90

Lista de figuras

Figura 2.1: Diagrama de Blocos do Processo Spherilene.....	4
Figura 2.2: Fluxograma simplificado da Unidade de Recuperação de Propano (URP).....	6
Figura 2.3: Fluxograma do processo com as malhas de controle atuais.....	9
Figura 3.1: Simulação Estática da Unidade.....	19
Figura 3.2: Procedimento de Escolha do Modelo Termodinâmico para Substâncias não polares, adaptado por CARNEIRO (2010).....	19
Figura 3.3: Número de pratos na T01 x especificação de Buteno/Butano no fundo da T02.....	22
Figura 3.4: Influência da vazão de refluxo e da retirada de fundo da T01 na concentração de buteno presente no fundo da T02.....	24
Figura 3.5: Influência de pesados da campanha de buteno na temperatura de fundo da T01 – dados de planta.....	25
Figura 3.6: Influência de pesados na temperatura de fundo da T01 – dados de planta...	26
Figura 3.7: Influência de leves na temperatura de fundo da T02 – dados de planta.....	26
Figura 3.8: Efeito do vapor da T01 na passagem de buteno para T02.....	27
Figura 3.9: Efeito do vapor da T02 na presença de eteno.....	27
Figura 3.10: Influência da variação de nível do E03 na pressão do sistema.....	30
Figura 3.11: Alternativa 1 de estrutura de controle L/V para a unidade URP.....	33
Figura 3.12: Alternativa 2 de estrutura de controle L/B para a unidade URP.....	33
Figura 3.13: Etapas da Metodologia aplicada aos dados.....	35
Figura 3.14: Sistema Multivariável.....	37
Figura 3.15: Impacto da perturbação no refluxo estrutura L/V.....	39
Figura 3.16: Impacto da perturbação no refluxo estrutura L/B.....	40
Figura 3.17: RGA dinâmico para estrutura L/V.....	42
Figura 3.18: RGA dinâmico para estrutura L/B.....	43
Figura 3.19: Mapa de pólos e zeros para estrutura L/V.....	44
Figura 3.20: Mapa de pólos e zeros para estrutura L/B.....	44
Figura 3.21: Condicionamento Mínimo estrutura L/V e L/B.....	45
Figura 3.22: RPN para as estruturas L/V.....	46
Figura 3.23: RPN para as estruturas L/B.....	47
Figura 4.1: Metodologia de desenvolvimento do Analisador Virtual.....	51
Figura 4.2: Representação do algoritmo de determinação do Modelo.....	64
Figura 4.3: Modelos 1 e 2 sem ajuste das características dinâmicas.....	66
Figura 4.4: Comparação dos melhores Modelos com o banco de dados de calibração.....	67
Figura 4.5: Comparação dos melhores Modelos aplicado aos dados de validação.....	67
Figura 4.6: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo I de operação – Alta concentração de pesados na carga.....	68
Figura 4.7: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo II de operação – Baixa concentração de pesados na carga.....	69
Figura 4.8: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo III de operação – Baixa concentração de Hidrogênio.....	69
Figura 4.9: Modelo Pavilion8 com o banco de dados de calibração.....	71

Figura 4.10: Modelo Pavilion8 aplicado aos dados de validação.....	71
Figura 4.11: Analisador Virtual antes e depois da correção de BIAS.....	73
Figura 4.12: Analisador Virtual após a redução do fator de confiança.	73
Figura 5.1: Estratégia de configuração do Controlador no Pavilion8.....	75
Figura 5.2: Interface de acompanhamento da predição de buteno, ações de controle passadas e preditas do controlador.....	77
Figura 5.3: Interface de acompanhamento da predição de buteno, ações de controle passadas e preditas do controlador.....	77
Figura 5.4: Teste industrial com implementação do analisador virtual e controlador.....	78
Figura 5.5: Redução de perdas de propano pelo topo da T01.....	80
Figura 5.6: Redução do consumo de vapor e especificação de buteno no fundo da T02.....	81
Figura A.1: Sistema multivariável.....	86
Figura A.2: Sistema multivariável representados por ganhos.	86

Lista de tabelas

Tabela 2.1: Controladores Presente na Unidade	8
Tabela 3.1: Comparação entre os dados de Projeto e Real.	20
Tabela 3.2: Volatilidade relativa em relação ao propano (80°C e 27,8barg).	22
Tabela 3.3: Variáveis manipuladas (MV), distúrbios (DV) e variáveis medidas (VM).....	23
Tabela 3.4: Intervalos definidos para perturbação.	36
Tabela 3.5: Sintonias ajustadas para o controle regulatório para cada estrutura de controle.....	36
Tabela 3.6: RPN para as estruturas L/V e L/B.....	46
Tabela 4.1: Intervalos definidos para construção dos modelos.	62
Tabela 4.2: Modelos obtidos a partir de dados de planta para calibração e validação. ...	65
Tabela 4.3: Tau e Teta ajustados nos modelos 3, 4 e 5.....	66
Tabela 4.4: Modelos obtidos a partir de dados de planta para calibração e validação. ...	72

Capítulo 1

Introdução

Esta dissertação trata da aplicação de técnicas de controle avançado em uma Unidade Recuperadora de Propano, sendo motivada por fatores vinculados a benefícios econômicos, tais como: aprimoramento do controle de qualidade, economia de energia, economia de custo variável e maximização da produtividade e da capacidade de processamento da unidade.

A Unidade Recuperadora de Propano tem como principal objetivo atender a vazão de propano requerida ao sistema da planta com concentrações mínimas de buteno e eteno. Trata-se na verdade de um sistema de reciclo e economia de propano da Planta de Polietileno de tecnologia Spherilene da Braskem, situada no Pólo-petroquímico de Triunfo-RS.

O desenvolvimento da estrutura de controle associado ao desempenho ótimo dessa unidade e a utilização de soluções simples, com técnicas de controle avançado adequadas ao desempenho desejado para o processo em questão são objetos de estudo dessa dissertação.

Atualmente existem inúmeras técnicas de controle avançado disponíveis na literatura, porém, assim como salientado por SEBORG (1999), antes de descrevê-las cabe refletir quanto ao termo “controle avançado de processo”, o qual pode se atribuir diferentes significados, dependendo do conhecimento, da experiência das pessoas, do estágio de automação e controle que encontra-se o processo industrial. SEBORG (1999) apresenta uma vasta revisão sobre controle de processo avançado, referenciando 252 trabalhos, estruturando as diferentes estratégias de controle de processo em cinco categorias conforme o seu grau de aplicação na indústria: I, II, III, IV e V.

A categoria I consiste na estratégia de controle convencional que está comercialmente disponível a mais de 60 anos, como o controle manual, o controle PID (Proporcional-Integral-Derivativo), o controle de razão (*ratio control*), o controle cascata e o controle *feedforward*.

A categoria II refere-se as técnicas clássicas, pois são utilizadas na indústria por mais de 30 anos e foram descritas em livros por engenheiros de controle nos anos 60. Podemos citar como exemplo a compensação de tempo morto, *gain scheduling*, controle por desacoplamento e controle seletivo ou por restrição (*override*).

As estratégias de controle da Categoria III têm sido amplamente utilizadas nas indústrias e são descritas em livros mais recentes, são elas: *Model Predictive Control* (MPC), controle de qualidade estatística, *Internal Model Control* (IMC) e controle adaptativo.

A categoria IV contém estratégias de controle antigas e novas com algumas recentes aplicações industriais: controle linear quadrático Gaussiano (LQG), controle não-linear, controle robusto, controle de rede neural, controle fuzzy e outros.

Por fim, a categoria V é uma categoria padrão que inclui publicações de estratégias de controle com poucas aplicações industriais. Porém, algumas dessas técnicas podem ter um significativo impacto em práticas industriais futuras (SEBORG, 1999).

Este trabalho se limitará ao uso das técnicas enquadradas na categoria II e III, a primeira fará uso de técnicas clássicas da literatura para estruturação da camada de controle regulatória, neste caso a escolha do emparelhamento mais adequado entre as entradas e saídas. A segunda fará uso de técnicas de inferência e identificação de modelos dinâmicos de processo, comparando as técnicas de desenvolvimento de analisadores virtuais adaptadas para obtenção de modelos dinâmicos (com base em regressões quadráticas) e para a configuração do controlador MPC em planta.

1.1 Estrutura da Dissertação

Esta dissertação não seguirá a estrutura clássica, tendo em vista a importância da necessidade de se explorar o processo e justificar as escolhas das técnicas de controle avançado.

O primeiro capítulo trata da introdução ao tema a ser abordado na dissertação. No Capítulo 2 é realizada uma breve descrição do processo da Unidade Recuperadora de Propano, apresentando as principais características dos equipamentos, a forma como atualmente o processo é controlado e os distúrbios existentes conhecidos. As metas de operação que devem ser atingidas, as restrições de processo que devem ser respeitadas, as metodologias clássicas para resolver os problemas da unidade e descrição da metodologia seguida também são apresentadas neste capítulo.

O Capítulo 3 trata da determinação da estratégia de controle mais promissora a unidade estudada, apresentando a formulação de simulações estacionárias e a avaliação das dinâmicas da unidade, que são usadas tanto no estudo do processo quanto no desenvolvimento dos analisadores. Ao final é apresentada a estrutura mais promissora, a qual possui os melhores valores para os índices que determinam o melhor emparelhamento, direcionalidade e controlabilidade do sistema de forma robusta.

O quarto capítulo trata das etapas de desenvolvimento do analisador virtual, apresentando inicialmente uma breve descrição das técnicas de regressão linear e não lineares. Será proposta uma metodologia de desenvolvimento e serão realizadas comparações entre modelos lineares e não lineares utilizando-se a técnica de Regressão Linear Multivariável (MLR). Ao final será determinada a acurácia do modelo estimado através da comparação dos dados preditos com os dados obtidos a partir dos dados reais de planta. Também será apresentado um estudo comparativo entre os modelos obtidos pela técnica MLR (*Multiple Linear Regression*) adaptada para obtenção de modelos dinâmicos e o modelo construído a partir do *software* Pavilion8, baseado no método auto-regressivo ARX (*Autoregressive with exogenous inputs*).

No Capítulo 5 aborda-se a validação industrial da proposta, com a implementação da nova estrutura de controle regulatório, do analisador virtual e controlador na planta industrial. Ao final deste capítulo é traduzida a melhoria de controle em ganhos econômicos potenciais.

Nas conclusões, Capítulo 6, tem-se um resumo dos principais contribuições do trabalho, bem como sugestões para trabalhos futuros na área.

Capítulo 2

Descrição da Unidade e Desenvolvimento da Solução

2.1 Descrição do Processo

2.1.1 Descrição da Planta

A planta de processo Spherilene foi concebida para produzir polietileno linear de baixa densidade (LLDPE) e polietileno de alta densidade (HDPE). A unidade é situada no site PE4 da Braskem, dentro do complexo petroquímico de Triunfo-RS. A Figura 2.1 apresenta um diagrama de blocos do Processo Spherilene para facilitar o entendimento.

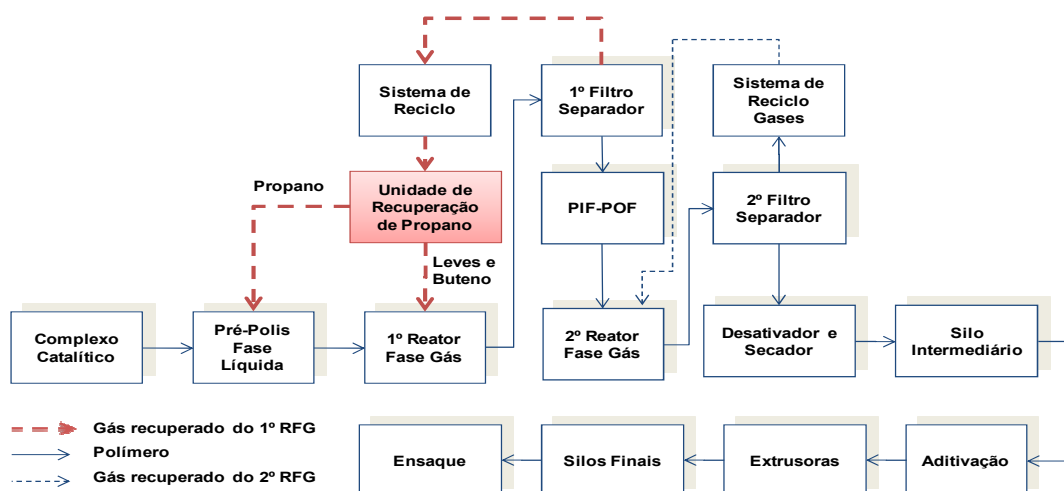


Figura 2.1: Diagrama de Blocos do Processo Spherilene.

Os monômeros necessários para a polimerização são fornecidos pela UNIBRS (Unidade de Insumos Básicos do Rio Grande do Sul) diretamente ao processo, no caso de eteno e hidrogênio, e para vasos pulmões internos, no caso do propano, propeno, buteno e hexeno.

Para a polimerização do eteno é utilizado um complexo catalítico formado por catalisadores tipo Ziegler-Natta de 4º geração, alquils de alumínio e doadores de elétrons (donors). A função dos alquils é ativar o catalisador e a do donor é controlar a estereoespecificidade do polímero em formação.

Primeiramente, o complexo catalítico é alimentado em reatores tipo *Loop* (reator do tipo PFR) em série a baixa temperatura com fase líquida em propano, pressão 27 barg a 50°C. Nestes reatores, os pré-polimerizadores, alimenta-se também propeno para o pré-encapsulamento das esferas de catalisador.

O catalisador pré-polimerizado chega então ao primeiro reator de polimerização em fase gás (1º RFG) onde, a pressão de 25 barg e temperatura de 70°C. Para controlar a qualidade final do produto, densidade e peso molecular, alimenta-se buteno, hexeno e hidrogênio ao reator.

No processo de polimerização em fase gás o polímero formado é mantido fluidizado através de um compressor de recirculação de gases. Um trocador de calor em série com o circuito é responsável pela retirada do calor produzido pela reação. O primeiro reator é responsável de 15 a 30% da reação total.

Através de um sistema de controle de nível, o polímero é descarregado para um filtro separador de gás e polímero operando a 2 barg. Os gases que saem pelo topo deste filtro são recomprimidos a 27 barg por 2 compressores alternativos de dois estágios e passam pela Unidade recuperadora de propano. O propano separado é realimentado aos reatores *Loop*'s, os monômeros restantes são retornados ao sistema do primeiro reator.

O polímero presente no filtro é então alimentado ao segundo reator através de um sistema constituído de dois vasos chamados PIF-POF. Neste sistema, enquanto um vaso esta recebendo polímero do filtro, 2 barg, o outro está descarregando este ao segundo reator fase gás (2º RFG), 27 barg. A vantagem deste sistema é possibilitar a operação com atmosferas diferentes nos dois reatores.

No segundo reator, operando a temperaturas, pressões e composições semelhantes ao primeiro, é produzido cerca de 80% do polietileno com controle de densidade e peso molecular.

A corrente de gás e polímero que deixa este reator pelo controle de nível é separada num segundo filtro separador operando a 2 barg. Enquanto o gás separado é recomprimido e retornado ao segundo reator por um compressor alternativo, o polímero segue para desativação do catalisador com vapor e posterior secagem com nitrogênio.

O polímero final em forma de esferas de 2 mm é colocado através de um transporte pneumático com nitrogênio nos silos intermediários. Dos silos intermediários o polímero segue para a aditivação, onde em dois misturadores contínuos, recebe agentes antioxidantes, antiestáticos e outros aditivos.

As esferas aditivadas são então alimentadas em duas extrusoras para homogeneização do produto com seus aditivos. A extrusora granula o polímero fundido, extrudando-o através de uma matriz, cujos filamentos originados são cortados e enviados aos silos finais, através do transporte pneumático em fase densa, para a mistura final e análise de controle de qualidade.

Dos silos finais o grânulo é ensacado por ensacadeiras automáticas e disposto para armazenamento.

2.1.2 Descrição da Unidade de Recuperação de Propano

O volume de hidrocarbonetos necessários ao processo é grande, e o custo desta matéria-prima é elevado, sendo necessário recuperá-los para os Reatores fase gás e Pré-polymerizadores. A separação desses hidrocarbonetos acontece na Unidade de Recuperação de Propano, unidade que será enfocada neste trabalho.

A Unidade de Recuperação de Propano (URP) é composta basicamente por duas colunas de recheios, interligadas por seus condensadores. Um fluxograma simplificado da Unidade está apresentado na Figura 2.2.

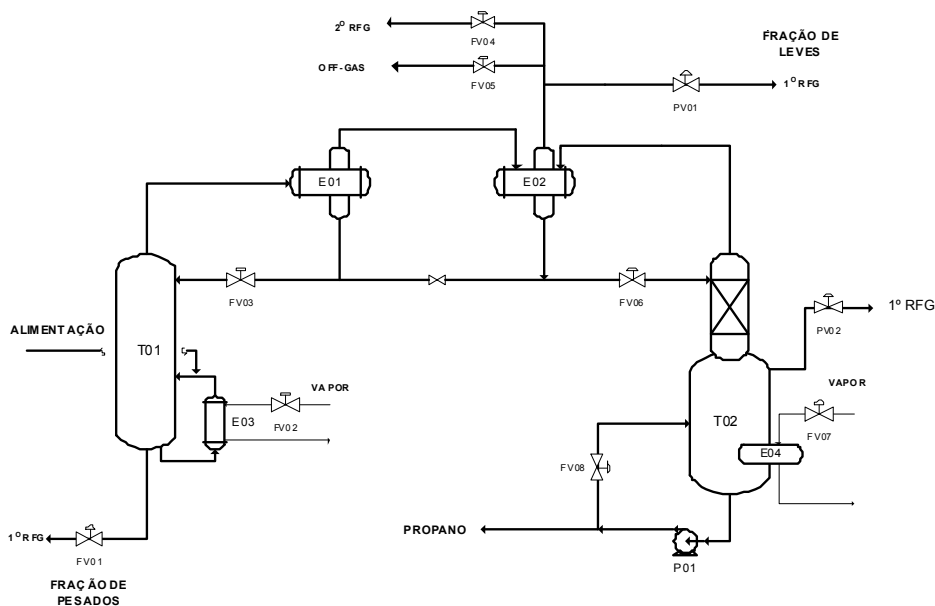


Figura 2.2: Fluxograma simplificado da Unidade de Recuperação de Propano (URP).

A alimentação da primeira coluna é a vazão equivalente a carga de dois compressores, proveniente do 1º RFG, cuja composição é muito próxima à composição do reator. Na primeira coluna ocorre a separação dos componentes pesados (componente chave buteno) da corrente de componentes leves (componente chave eteno). Para uma separação eficiente é desejável que a alimentação esteja no seu ponto de bolha, logo, as condições da corrente de alimentação determinam a quantidade de calor que deve ser fornecida pelo retervedor, cujo fluido de troca térmica é vapor.

A vazão de fundo da primeira coluna, corrente rica em componentes pesados (buteno, butano, hexeno e hexano), é enviada para o 1º RFG. A corrente de topo da T01 é enviada ao condensador E01, um trocador casco tubos com nível variável, cujo fluido de troca térmica é água de resfriamento. Para que o vapor que passa pelo E01 atinja o máximo de condensação, dependendo do modo de operação, a válvula de admissão de água de resfriamento fica totalmente aberta. Parte do que passa pelo E01 retorna como refluxo para primeira coluna e o restante segue para a segunda coluna de duas formas: como vapor, através do E02 (condensador da T02), e como líquido, diretamente pelo refluxo da T02, evitando dessa forma sobrecarregar o E02, através da redução de sua carga térmica.

A segunda coluna tem como objetivo separar os componentes leves (eteno, etano e hidrogênio) do propano. Calor é fornecido para a separação através do retervedor E04, que é alimentado com vapor de baixa pressão (4 barg e 152 °C).

O produto de topo da T02 (corte de eteno) é condensado no E02, um trocador semelhante ao E01, porém menor, cujo fluido de troca térmica é água refrigerada. O E02 recebe o topo da segunda coluna e o que não foi condensado no E01. Do topo do E02 é feita a purga de leves. A estabilidade da pressão na coluna depende da quantidade de substâncias incondensáveis presentes na alimentação, pois essas substâncias precisam ser removidas para não acumularem no sistema, cobrindo toda a superfície de condensação e causando problemas para a operação das colunas. O PIC01 tem a função de retirada de leves pelo envio para o 1ºRFG, através da PV01 ou PV02, porém nem sempre é possível enviar incondensáveis por essas válvulas, visto que o reator tem limitações de concentração de hidrogênio. Neste caso é possível modular a vazão de purga pelo FIC05, que envia a corrente de incondensáveis para off-gas. Existe um alinhamento para enviar essa vazão para o 2ºRFG, através da FV04, porém este alinhamento é pouco usado.

O propano separado no fundo da coluna é enviado diretamente aos Reatores de Pré-polymerização, sendo que uma pequena parte retorna para a coluna pela FV08 para manter um fluxo mínimo na bomba P01. Neste alinhamento existe um cromatógrafo que faz a leitura da qualidade da corrente de propano a cada 1 minuto (hexeno, butano, buteno, propano, propeno, etano e eteno).

2.2 Estratégia de Controle Atual

Os controladores presentes na Unidade com suas respectivas descrições estão apresentados na Tabela 2.1.

Tabela 2.1: Controladores Presente na Unidade

Controlador	Descrição
LIC01	Controle de nível da T01.
FIC01	Controle de vazão de fundo da T01.
FIC2	Controle de vazão de vapor para refeedor da T01 (E01).
FIC03	Controle de vazão de refluxo da T01.
FIC04	Controle da vazão de incondensáveis para 2° RFG.
FIC05	Controle de vazão de incondensáveis para off-gas (purga).
FIC06	Controle da vazão de refluxo da T02.
FIC07	Controle de vazão de vapor para refeedor da T02 (E04).
FIC08	Controle de vazão de recirculação da bomba.
LIC02	Controle de nível de fundo da T02.
LIC03	Controle de nível do condensador da T02 (E02).
PIC01	Controle de pressão das colunas.

Além desses controladores existem indicações no SDCD de temperatura de fundo, pressão das duas colunas e um cromatógrafo na corrente de fundo da T02 (leitura de etano, eteno, propano, propeno, butano, buteno e hexeno).

A Figura 2.3 apresenta um fluxograma do processo com suas malhas de controle correspondente a estratégia adotada atualmente para o controle dessa unidade.

A vazão de refluxo da T01 é controlada pelo FIC03, cujo objetivo é garantir a eficiência de separação da coluna. A vazão de refluxo é a variável manipulada que controla a qualidade do topo das colunas, assim como o vapor é outra variável disponível para manipular a qualidade do produto de fundo, porém não utilizada com essa finalidade no sistema existente.

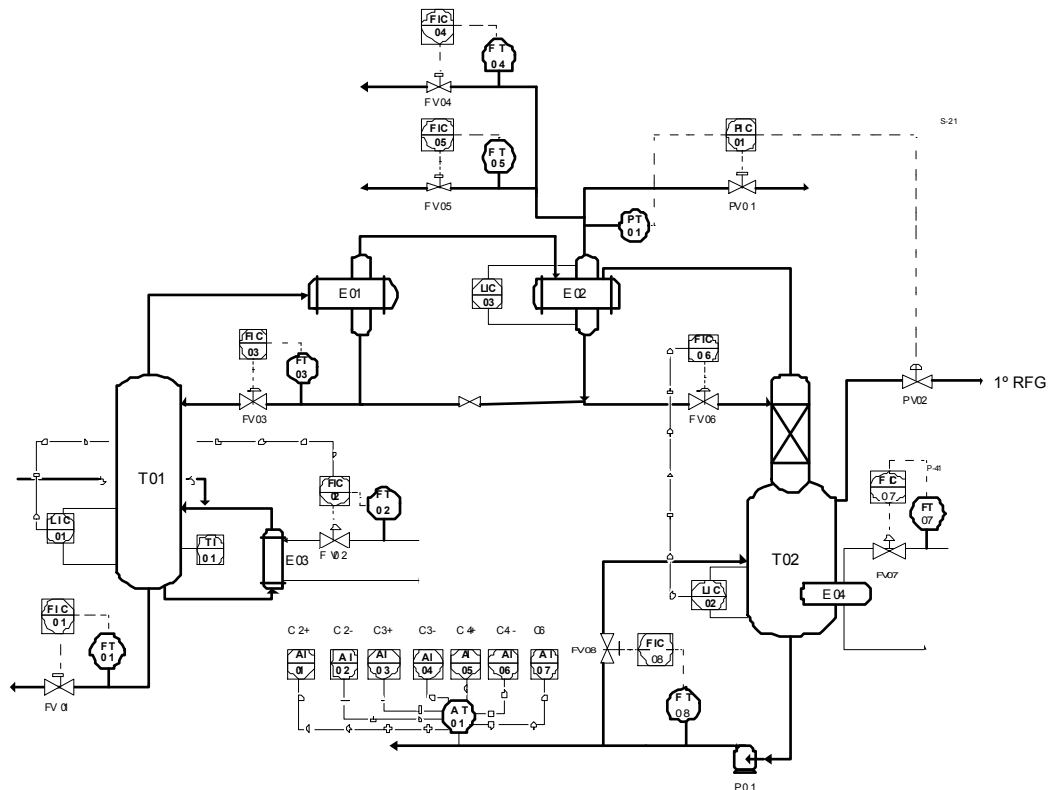


Figura 2.3: Fluxograma do processo com as malhas de controle atuais.

O controle de nível da T01 (LIC01) fica em cascata com a vazão de vapor para o refeedor E03 (FIC02). A temperatura é acompanhada pelo indicador de temperatura localizado no fundo da T01.

O nível da T01 é controlado pela injeção de vapor no refeedor. A composição é controlada pela retirada de fundo da T01 (FIC01) em malha aberta, cujo objetivo é aliviar o excesso de pesados do fundo da coluna para o 1ºRFG, caso contrário resultaria em passagem de pesados para a T02.

A vazão de fundo da T02 não está em controle com nenhuma outra variável, ficando a critério do operador a definição do valor de vazão. Isso se deve ao fato de que a T02 opera com objetivo de atender a vazão de propano para pré-polimerização minimizando a entrada de propano virgem no circuito. A retirada de fundo é o que controla a carga para pré-polimerização e o nível (LIC02) da T02 é o que regula a carga desta torre atualmente, controlado pelo FIC06. A vazão de vapor para o refeedor da T02 (E04) é ajustada pelo operador manualmente, pela válvula controladora FIC07.

As variações na carga do sistema podem provocar aumento do nível nos dois condensadores de topo, E01 e E02, reduzindo a condensação e aumentando automaticamente a retirada de gases que retornam para o 1ºRFG pelo controle de pressão.

Os níveis dos condensadores E01 e E02 não são controlados, sendo que existe indicação local do nível do primeiro e indicação no SDCD do nível do segundo. Do topo do E02 é feita a purga de leves. O PIC01 tem essa função de retirada de leves através de purga dessa corrente para o 1ºRFG, pela PV01 ou PV02. O que não pode ser enviado para o 1ºRFG através da PV01/PV02 é enviado para *off-gas*, através da FV05, o que não é interessante do ponto de vista econômico, devendo ser minimizado. Existem indicadores de pressão no fundo da primeira e na segunda coluna, mas todo o controle de pressão dessa unidade é feito pelo PIC01.

2.3 Características de Operação

2.3.1 Restrições

As principais restrições da Unidade de Recuperação de Propano são:

- a. No projeto da unidade foi considerada apenas a presença em mol de 11,6% de Buteno na alimentação, não sendo considerada a presença de Butano. Atualmente somando o Butano com Buteno chega-se a 20% (14,8% de Butano e 5,7% de Buteno);
- b. A corrente de fundo da T01 é função da composição do RFG;
- c. Os condensadores de topo são comunicantes, ou seja, possuem praticamente o mesmo nível de líquido condensado;
- d. O número de pratos teóricos das colunas reais é inferior ao de projeto, item a ser detalhado no capítulo 3.

2.3.2 Modos de Operação

Devido as condições operacionais da planta mudarem periodicamente para produzir diversos produtos, é necessário, para manter a estabilidade das colunas de destilação, adotar diferentes estratégias de controle. Desta forma, 3 modos de operação são identificados na planta Spherilene: Modo I, Modo II e Modo III.

Modo I – Alta concentração de pesados na carga

- Este modo de operação se caracteriza pela presença de mais hidrocarbonetos pesados na carga.
- Do topo do E02 onde é feita a purga de leves, o controle de pressão é realizado pelo PIC01 com a PV01.
- Purgas de Hidrogênio, etano, eteno e propeno são realizadas pela FIC05 para *flare* para ajuste da atmosfera do 1ºRFG.

Modo II – Baixa concentração de pesados na carga

- Neste modo de operação não há muitos pesados presentes na carga, assim a saída de fundo da T01 pode permanecer fixa.
- As condições da T02 mudam durante a campanha devido à desconcentração de propano e a concentração de etano.
- Assim como o Modo I de operação as purgas são realizadas pela FIC05 para *flare*.

Modo III – Baixa concentração de hidrogênio no 1º RFG

- Neste modo de operação é exigido um conteúdo muito baixo de hidrogênio no primeiro reator fase gás, sendo necessário alterar também a estratégia de controle de pressão do topo do E02 para retirada inferior da T02. Este alívio de pressão da T02 é feito através da PV02, pelo fundo da coluna, se o eteno não for removido, irá concentrar no fundo da coluna.
- O Modo III de operação, seleção de uma chave no SDCD, modula a abertura da PV02 quando o PIC01 se encontra com *output* de 0 a 50% e acima do *output* de 50%, abre a PV01. A abertura da PV01 deve ser evitada devido ao envio de hidrogênio e eteno para o 1ºRFG. Após estabilização da planta, deve ser bloqueado no campo a PV01, assim se evita que em caso de abertura envie uma grande quantidade de hidrogênio ao 1ºRFG.
- A interligação de líquido dos condensadores de topo (E01/E02) deve ser bloqueada neste modo de operação, pois o objetivo é minimizar a carga térmica do E02 para aumentar sua eficiência energética. O *by-pass* do E02 na alimentação de gás deve ser aberta para enviar um gás mais pobre em hidrogênio para 1ºRFG.
- Neste modo a recuperação de propano não pode ser direcionada para o vaso de estocagem, pois a volatilidade relativa do Propeno/Propano é muito baixa (difícil separação) podendo afetar a composição do segundo RFG.

2.3.3 Distúrbios

Os principais distúrbios desta unidade seguem descritos abaixo.

1. Redução da carga da unidade pela metade: decorrente da parada de 1 dos compressores na alimentação;
2. Aumento da presença de Hexano/Hexeno na carga da T01: decorrente da transição entre *grades* na planta, substituindo buteno por hexeno e causando uma elevação de temperatura no fundo da T01 na ordem de 25°C;
3. Aumento na composição de pesados na carga da T01, na ordem de 17%: decorrente do acúmulo de componentes hidrogenados (butano/hexano) ao longo das campanhas da planta;
4. Alterações bruscas do componente em maior proporção na carga: a composição de propano pode ser alterada significativamente no sentido positivo e negativo, para ajuste da atmosfera dos reatores na planta. Utiliza-se muitas vezes o sistema de purga (FV05) para reduzir o mesmo no circuito ou aumenta-se a recuperação para o vaso de estocagem pelo fundo da T02.

2.4 Objetivos de Operação

O Sistema de Recuperação de Propano tem como objetivo recuperar o propano buscando a menor concentração de buteno e eteno (impurezas). Para garantir a qualidade do propano recuperado, é fundamental acompanhar-se as seguintes variáveis:

1. Maximização da Recuperação de Propano: vazão de propano recuperado necessária para o sistema da planta, visando à máxima economia.
2. Teor de buteno e eteno: deve-se buscar a máxima pureza do propano evitando a passagem de buteno e eteno para o fundo da segunda torre, pois sua presença traz problemas à planta, além da possibilidade de contaminar o vaso de armazenagem de propano recuperado;
3. Pressão da unidade: o controle de pressão deve ser estável o suficiente para não afetar as demais variáveis.

2.5 Metodologia para Avaliação da Estrutura de Controle

A seleção da estratégia de controle mais adequada deve ser feita de modo sistemático, a fim de se obter a forma mais simples e eficaz para atingir os objetivos operacionais.

Muitas metodologias são propostas na literatura, este trabalho fará referência a metodologias aplicadas por LUYBEN *et al.* (1998) e TRIERWEILER (1997).

Segundo LUYBEN *et al.* (1998), os objetivos para um controle efetivo de processo global incluem:

- Operação do processo segura e suave;
- Controle robust de qualidade de produto frente a perturbações;
- Evitar condições de trabalho inseguras;
- Um sistema de controle operando em automático, não em manual, e requerendo o mínimo de atenção do operador;
- Rápida transição para uma mudança de taxa de produção e de qualidade de produto;
- Nenhuma descarga ambiental inesperada.

A necessidade por um Controle Global (*Plant Wide Control*) surge basicamente de três importantes ferramentas de integração de processo:

- Efeitos de reciclo de material;
- Inventário de componentes químicos;
- Integração energética.

O procedimento geral heurístico de “Controle Global” é composto por nove passos. O procedimento essencialmente decompõe o problema de controle global em vários níveis, focando unicamente nas ferramentas e resultados associados à estratégia de controle para a unidade industrial. O procedimento visa responder de forma geral os seguintes questionamentos: Como gerenciar a energia? Como a taxa de produção deve ser controlada? Como controlar a qualidade do produto?

O procedimento de dimensionamento do Controle Global satisfaz os dois princípios fundamentais da Engenharia Química: a conservação de massa e energia. Além disso, o procedimento considera entidades não conservativas no processo, como os componentes químicos produzidos e reagidos, e o balanço de entropia. De fato, cinco dos nove passos descritos a seguir lidam com questões do Controle Global que não são alcançadas pela simples combinação de sistemas de controle de cada uma das unidades operacionais.

1. Estabelecimento dos objetivos do controle;
2. Determinar os graus de liberdade do controle;
3. Estabelecer o sistema de gerenciamento de energia;
4. Definir taxa de produção;
5. Restrições de qualidade de produto, de segurança, do meio ambiente e operacionais;
6. Fixar um fluxo em cada reciclo e inventário de controle (pressão e nível);
7. Conferir balanço de componentes;
8. Controle das unidades operacionais individuais;
9. Otimização econômica e implementação da controlabilidade dinâmica.

A ordem dos passos foi estruturada primeiramente por escolhas que já haviam sido atribuídas devido a restrições de equipamentos ou de negócio e então seguidas pela hierarquia de prioridades.

Os passos 1 e 2 são os primeiros pontos a serem avaliados, pois constituem a determinação dos objetivos e dos graus de liberdade disponíveis. O passo 3 vem na sequência, pois certifica que qualquer produção de calor no processo é propriamente dissipada, e a propagação de perturbações térmicas é prevenida.

O passo 4 é uma decisão essencial e frequentemente é uma decisão de negócio, removendo outro grau de liberdade, que não pode ser usado. Tendo a liberdade para determinar as taxas de produção, os passos de 5 a 7 passam a ser prioritários. O passo 5 é o passo seguinte, pois a qualidade dos produtos está amarrada ao passo 1 e tem prioridade sobre o controle de inventários. O passo 6 envolve o controle de inventário, ou seja, o controle do balanço de massa total.

Após satisfazer o balanço de massa do processo pode-se checar o balanço de cada componente no passo 7. Fechado os principais pontos, no passo 8, completa-se o

sistema de controle para unidades operacionais individuais, e finalmente no passo 9 são usados os graus de liberdade para otimizar e implementar a controlabilidade dinâmica do processo, levando a níveis mais avançados de interesse, acima dos fundamentos da estratégia de controle regulatória.

Uma abordagem complementar à proposta de LUYBEN et al. (1998), aplicado em Volk *et al.* (2004), é a sistemática adotada por TRIERWEILER (1997), aplicado no trabalho de MARCON (2001) que uniu a metodologia de MAHENEY e FRUHAUF com objetivo de contribuir a análise os aspectos dinâmicos. Os principais pontos sugeridos que devem ser seguidos são:

1. Determinação dos graus de liberdade do sistema;
2. Objetivos de controle;
3. Análises de sensibilidade do processo;
4. Conhecimento do comportamento dinâmico;
5. Escolha do desempenho nominal desejado;
6. Cálculo dos índices de seleção de estrutura;
7. Implementação da Estrutura.

Este procedimento parte dos conhecimentos do processo e dos objetivos de controle, para a seleção das variáveis manipuladas, dos distúrbios e das variáveis controladas. Diferente da metodologia anterior, o passo três, sugere realizar as análises de sensibilidade do modelo estacionário que fornecem informações sobre a interação entre as entradas e saídas do sistema. Os resultados das análises permitem esboçar as primeiras estruturas de controle e identificar as limitações do processo. Desta forma, é possível excluir as estruturas impraticáveis do ponto de vista estático.

O próximo passo (4) é a caracterização da dinâmica, trata-se da análise da resposta do sistema em frequências intermediárias (frequência em que o controlador irá atuar) e efeitos de “*hold ups*” na atenuação dos distúrbios existentes.

Características dinâmicas como a localização de pólos e zeros das funções de transferência do modelo do processo, somados às informações sobre o processo, saturação de válvulas e ruídos, devem ser levadas em consideração na determinação do desempenho desejado para a unidade.

Muitas estruturas que eram viáveis são desconsideradas após estes passos. Restando por fim, a classificação por índices e validação com dados de planta. A estrutura promissora será aquela que apresentar os melhores valores para os índices que determinam o melhor emparelhamento, direcionalidade e controlabilidade do sistema de forma robusta.

O procedimento sugerido por LUYBEN et al. (1998), procedimento heurístico, irá gerar uma estratégia de controle global funcional, que não é necessariamente a melhor solução, pois o dimensionamento é um problema aberto, e o procedimento não produz uma única solução. Neste caso, a contribuição realizada por TRIERWEILER (1997) permite conduzir à estrutura de controle mais promissora.

É importante destacar que dependendo do caso, alguns passos de ambos os procedimentos de seleção de estrutura podem ser desconsiderados, da mesma forma que não há ordem rígida para sequência dos passos.

2.5.1 Metodologia Empregada

A metodologia empregada neste trabalho une a abordagem clássica de LUYBEN et al. (1998) e a sistemática adotada por TRIERWEILER (1997), aplicado no trabalho de MARCON (2001), com objetivo de contribuir a análise os aspectos dinâmicos.

Os principais passos que devem ser seguidos são: (1) estabelecimento dos objetivos do controle, (2) determinação dos graus de liberdade do controle, (3) verificação do balanço de componentes, (4) análise de sensibilidade do processo, (5) determinação das restrições de qualidade de produto, de segurança, do meio ambiente e operacionais, (6) definição das variáveis de controle de inventário (pressão e nível), (7) avaliação do comportamento dinâmico, (8) escolha do desempenho nominal desejado, (9) cálculo dos índices de seleção de estrutura, (10) implementação da estrutura de controle (controlabilidade dinâmica) e otimização econômica.

O procedimento parte do conhecimento do processo e dos objetivos de controle, já abordado item 2.4. Os objetivos de controle estão bem definidos, trata-se de suprir a demanda de vazão de propano para os reatores de pré-polimerização, com os teores de buteno e eteno especificados no fundo da T02.

A determinação dos graus de liberdade, passo 2, é importante para definição/seleção das variáveis manipuladas, dos distúrbios e das variáveis controladas. Pode-se considerar que existem 6 graus de liberdade neste processo: válvula de vazão de fundo da T01 (FV01); válvulas de vazão de vapor para os refeedores (FV02 e FV07); as válvulas de refluxo das duas colunas (FV03 e FV06) e a válvula de controle de pressão do sistema. As demais válvulas, como FV04 e FV05 não podem ser

consideradas graus de liberdade, pois elas apenas são utilizadas para ajuste da atmosfera dos reatores fase gás (item 2.3.2) e não podem contribuir para o controle das colunas. A vazão de fundo da T02 é fixada, pois define o tempo de residência dos reatores de Pré-polymerização, logo, não pode ser considerada um grau de liberdade.

A avaliação estática da unidade engloba os três passos seguintes (3, 4 e 5), item 3.1 e 3.2 do capítulo a seguir. Inicialmente confere-se o balanço de componentes pela simulação em Aspen Plus, a partir da simulação realiza-se a análise crítica quanto às limitações de projeto e as análises de sensibilidade do modelo estacionário que fornecem informações sobre a interação entre as entradas e saídas do sistema.

No passo 6 deve-se garantir o controle do balanço material, selecionando as melhores variáveis para controlar os inventários de gás e líquido, ou seja, controles de pressão e nível, respectivamente. Depois de realizada essas análises é possível se excluir as estruturas impraticáveis do ponto de vista estático e é o momento de escolher as melhores válvulas para controlar a qualidade dos produtos e manipular as restrições de segurança, operacionais e ambientais. No item 3.3 do Capítulo 3 serão apresentadas as estruturas de controle potenciais para a unidade com base nos passos seguidos até aqui, a estrutura de controle deverá primeiramente fixar as taxas de produção, assegurar a manutenção dos inventários de líquidos e gases, controlar a qualidade dos produtos e garantir a segurança do processo, respeitando as restrições impostas.

A caracterização da dinâmica, o passo 7, será abordada no item 3.4 (Capítulo 3). Neste passo será possível avaliar a resposta do sistema na frequência em que o controlador irá atuar e efeitos de “*hold ups*” na atenuação dos distúrbios existentes. Características dinâmicas somadas às informações sobre o processo, saturação de válvulas e ruídos, devem ser levadas em consideração na determinação do desempenho desejado para a unidade (passo 8).

Por fim, nos últimos passos a classificação por índices (passo 9) e validação com dados de planta (passo 10) define a melhor estrutura de controle para unidade. No item 3.5 será apresentada a estrutura mais promissora, a qual apresenta os melhores valores para os índices que determinam o melhor emparelhamento, direcionalidade e controlabilidade do sistema de forma robusta.

Capítulo 3

Desenvolvimento da Estratégia de Controle

3.1 Avaliação Estática da Unidade

Conforme MARCON (2001), para a construção do modelo é necessário um estudo prévio do processo que possibilita o conhecimento de suas características básicas e a seleção das principais variáveis de operação a serem utilizadas para análise de resultados. Para construção do modelo serão utilizados os valores do projeto original da planta e os valores reais médios de períodos estáveis na planta.

Abaixo seguem listados os passos empregados para a construção do modelo. Uma descrição mais detalhada das etapas de construção de modelos estáticos pode ser vista em LUSA (2000).

1. **Seleção dos componentes:** O conjunto de components utilizados é o mais completa possível devido ao pequeno número de componentes existentes na carga da unidade, não sendo necessário a aplicação do procedimento de redução do numero de espécies químicas.
2. **Desenvolvimento do fluxograma de processo:** Para as colunas de destilação de recheio foram utilizados os blocos *Radfrac* e foram configurados condensadores parciais. Para os condensadores foi necessário manipular a área superficial de troca térmica dos tubos e inserir vasos *flash* para separar as correntes de saída dos condensadores. O fluxograma de processo segue conforme Figura 3.1, proveniente do *workflow* do Aspen Plus.

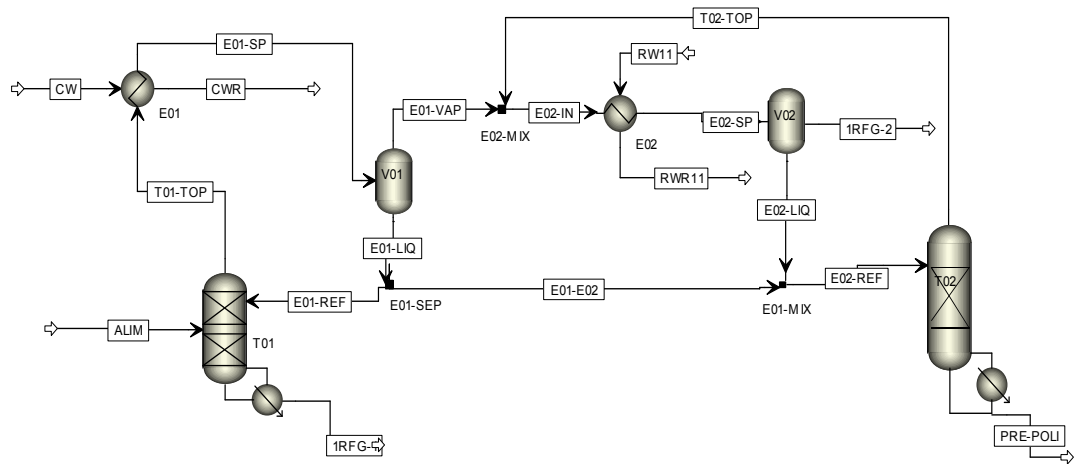


Figura 3.1: Simulação Estática da Unidade.

- 3. Modelagem termodinâmica:** O procedimento padrão adotado para se escolher o modelo termodinâmico para misturas não polares pode ser visto no fluxograma 3.2 adaptado de CARNEIRO (2010). Como já é de conhecimento os modelos termodinâmicos mais utilizados para a predição e simulação de processos petroquímicos em altas pressões são as equações de estado. Dentre elas, estão as tradicionais equações de Peng-Robinson (PR) e Soave-Redlich-Kwong (SRK), indicadas no manual do simulador comercial Aspen Plus.

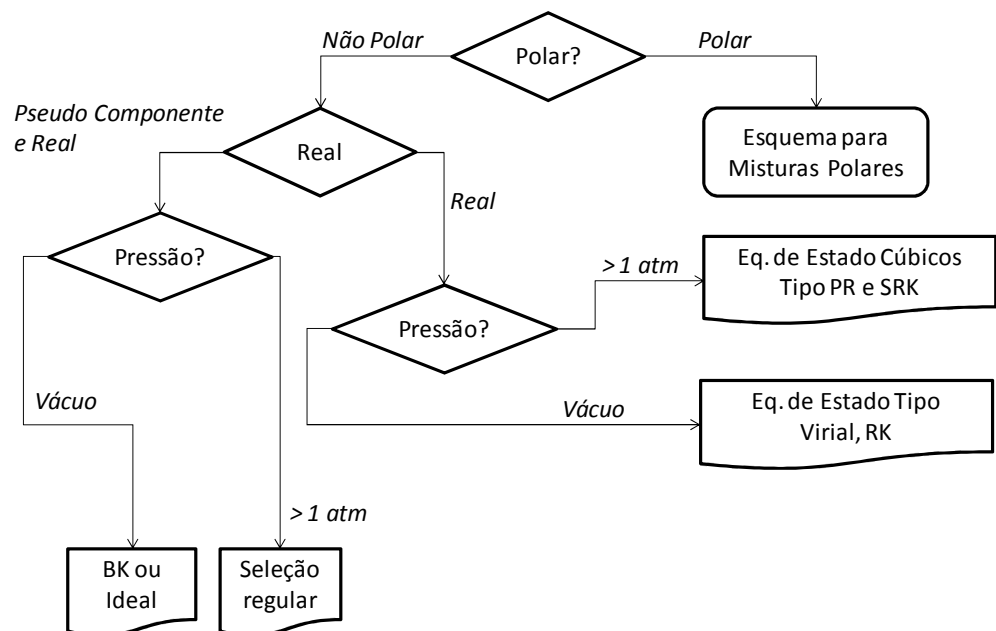


Figura 3.2: Procedimento de Escolha do Modelo Termodinâmico para Substâncias não polares, adaptado por CARNEIRO (2010).

O simulador Aspen Plus possui as equações de PR e SRK com diferentes regras de misturas. Nas simulações foram testadas as equações de estado de PR e SRK, com e sem as regras de mistura de Boston e Mathias, representadas no simulador como PRBM e RKSBM. Como não se obteve diferença significativa entre os modelos mencionados, o modelo usado para prever os parâmetros termodinâmicos neste trabalho foi o de Peng-Robinson. Sabe-se que dos modelos que o programa oferece a equação de estado Peng-Robinson suporta a maior variabilidade de condições operacionais do sistema. Esta equação de estado produz diretamente todo equilíbrio requerido e as propriedades termodinâmicas necessárias.

4. **Convergência da simulação:** Foram encontrados problemas de convergência ao se manipular hidrocarbonetos leves, porém ao se migrar a simulação da versão Aspen2004 para AspenV7 este problema desapareceu. A Aspen informou que um dos motivos poderia ser o novo banco de dados para hidrocarbonetos leves (APV72 Ethylene).
5. **Análise de resultados:** A Tabela 3.1 apresenta uma comparação entre os dados de projeto da Coluna Recuperadora fornecidos pela licenciadora do processo e os resultados obtidos pela simulação com dados reais da planta.

Tabela 3.1: Comparação entre os dados de Projeto e Real.

Dados de Alimentação	Projeto	Real
Vazão (kg/h)	9390	9800
Pressão (bar)	28	28
Temperatura (°C)	120	130
Concentração de Buteno Projeto	11%	
Concentração de Buteno + Butano Real		20%
Resultados Simulação	T01	T02
Análise do N° de Pratos Teóricos Projeto	24	20
Análise do N° de Pratos Teóricos Real	11	12
HETP Projeto	0,4 m	0,4 m
HETP Real	0,93 m	0,67 m
Diâmetro	1,2 m	0,8 m
Concentração de Buteno Projeto	-	1000 ppm
Concentração de Buteno + Butano Real	-	12000 ppm
Concentração de Eteno Projeto		2000 ppm
Concentração de Eteno Real		1000 ppm

No projeto da unidade foi considerada apenas a composição de 11,6% de Buteno na alimentação, não sendo considerada a presença de Butano. Hoje se somando o Butano com Buteno chega-se a 20% (14,8% de Butano e 5,7% de Buteno).

Para as colunas de recheio T01 e T02, a partir do diâmetro e altura do recheio nas colunas, estimou-se a altura de prato teórica com correlações disponíveis na literatura e de fabricantes de recheio. Os resultados exibidos como de HETP Real da Tabela 3.1 confirmam o valor aproximado de 11 (T01) e 12 (T02) pratos teóricos para as colunas, sendo a principal justificativa para a grande diferença no número de pratos o reduzido HETP de **projeto** 0,4 m/prato e o excessivo diâmetro da coluna que naturalmente aumenta o HETP.

Com os dados reais da planta a simulação mostrou-se eficiente exceto pela proporção de buteno/butano presente no propano (Tabela 3.1). As possíveis justificativas para essa discrepância poderiam ser a eficiência de prato, a pressão da coluna oscilante e erros de medição do cromatógrafo. Outra fator que poderia explicar a discrepância seria o modelo termodinâmico. Neste caso, para ajuste fino da simulação seria necessário verificar todos os parâmetros binários utilizados, na tentativa de aprimorar ao máximo a simulação com dados de projeto e facilitar a introdução de dados operacionais. Como não existe na literatura dados experimentais disponíveis e com qualidade para se obter os parâmetros binários na faixa de pressão e temperatura do processo em análise, sendo necessária a aquisição destas informações, será aceito neste trabalho a extrapolação do banco de dados do Aspen Plus V7.

Entende-se por número de pratos teóricos reais, o número de pratos teóricos ajustados na simulação com dados reais da planta e número de pratos teóricos de projeto, o número de pratos teóricos ajustados na simulação com dados de projeto. A simulação mostrou que ambas as torres apresentam limitação de projeto, a T01 apresenta uma limitação de 45% do número de pratos teóricos de projeto e a T02 de 60%.

Na Figura 3.3 demonstra-se que para aproximar e conciliar todas as condições de operação atuais, o número de pratos efetivos da T01 é da ordem de 11 pratos contra os 24 pratos de projeto.

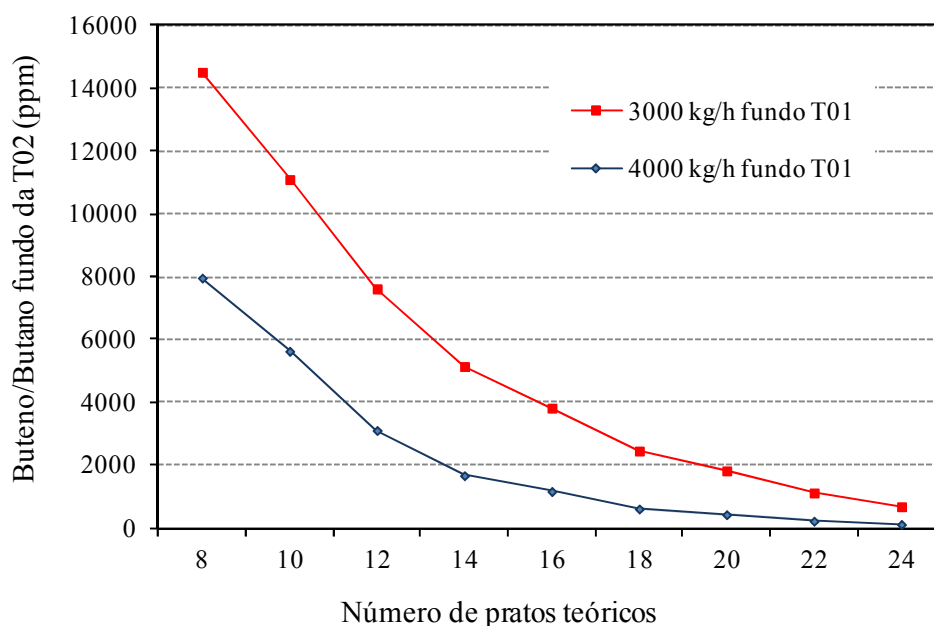


Figura 3.3: Número de pratos na T01 x especificação de Buteno/Butano no fundo da T02.

Acredita-se que essa diferença ocorra devido ao critério de projeto da unidade, o qual não considerou a hidrogenação do buteno nos reatores fase gás, considerando apenas a composição de 11% de buteno na alimentação, não sendo considerada a presença de butano.

Para avaliar a facilidade de separação dos componentes chaves em relação ao propano foram verificadas as volatilidades relativas na Tabela 3.3. As volatilidades relativas, uma comparação entre as tendências a vaporizar, do buteno e eteno em relação ao propano são 0,7 e 1,77. Para valores próximo de 1, o caso do buteno, a separação entre esses compostos é difícil, sendo necessário usar colunas com um número elevado de pratos.

Tabela 3.2: Volatilidade relativa em relação ao propano (80°C e 27,8barg).

Nome	Composição %molar	KVL	α em relação ao Propano
Hidrogênio	0,1%	5,39	5,08
Eteno	9,9%	1,88	1,77
Etano	7,7%	1,63	1,53
Propeno	0,2%	1,15	1,08
Propano	67,4%	1,06	1,00
Buteno	1,8%	0,75	0,70
Butano	11,1%	0,71	0,67
Hexeno	1,1%	0,33	0,31
Hexano	0,7%	0,30	0,29

3.2 Análise de Sensibilidade

Com o modelo descrevendo o comportamento das principais variáveis de forma satisfatória pode-se iniciar a análise de sensibilidade. A análise de sensibilidade servirá de base para o entendimento das limitações da unidade existente e para proposição das estratégias controle a ser abordada no item 3.4.

A Tabela 3.3 mostra as variáveis manipuladas, distúrbios e variáveis medidas.

Tabela 3.3: Variáveis manipuladas (MV), distúrbios (DV) e variáveis medidas (VM).

Parâmetro	Descrição
DV	Composição de alimentação
DV	Vazão de alimentação das torres
VM	Composição de Buteno no fundo da T02
VM	Composição de Eteno no fundo da T02
VM	Temperatura de fundo da T01
VM	Temperatura de fundo da T02
MV	Vazão de refluxo da T01
MV	Vazão de refluxo da T02
MV	Vazão de vapor para T01
MV	Vazão de vapor para T02
MV	Vazão de fundo na T01
MV	Vazão de fundo na T02

No procedimento de análise trata-se de coletar os valores das variáveis medidas (VM), frente a variações feitas nas variáveis manipuladas (MV) e distúrbios (DV).

As variáveis/efeitos mais relevantes na composição de buteno e eteno no fundo da T02 são:

- Efeito da vazão de refluxo/fundo na T01;
- Efeito da composição de pesados e leves na alimentação da T01;
- Efeito da vazão de vapor na E03 e E04.

Os resultados gerados a partir da simulação em Aspen Plus nesta seção devem ser encarados qualitativamente, servindo como indicativo a ser seguido para melhorar o processo.

Com referência ao distúrbio na vazão de alimentação da T01, parada emergencial de um dos dois compressores, verificou-se que devem ser reajustadas as vazões buscando o balanço de massa e energia para operar com a metade da carga na unidade. Neste caso, a capacidade de recuperação de propano deve ser reduzida para manter a especificação e equilíbrio da Unidade Recuperadora de Propano. Um vez parado um dos compressores metade da alimentação da URP não é succionada e precisa ser aliviada para o *flare* para não pressurizar o equipamento a montante dos compressores. Ou seja, a carga perdida para o *flare* não retorna para o RFG, faltando propano recuperado para reatores de prepolimerização.

3.2.1 Efeito da vazão de refluxo e fundo na T01

O efeito da vazão de refluxo e da retirada de fundo para T01 com 11 pratos teóricos pode ser observada no gráfico da Figura 3.4. A análise gráfica indica que quanto maior for o refluxo e retirada de fundo, menor será a passagem de buteno para T02.

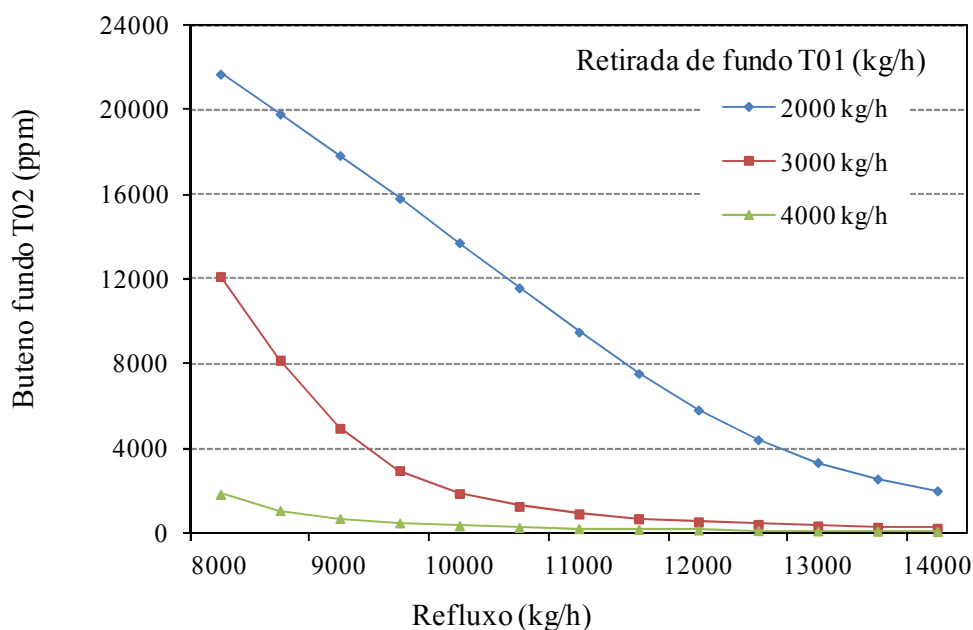


Figura 3.4: Influência da vazão de refluxo e da retirada de fundo da T01 na concentração de buteno presente no fundo da T02.

Por este motivo pequenas oscilações na vazão de refluxo e de vapor desta torre causam grandes oscilações na concentração de buteno no fundo da coluna T02.

3.2.2 Efeito da composição de pesados e leves na T01

Verifica-se nas campanhas de buteno que incrementos na ordem de 2% de pesados na carga (buteno e butano) impactam em aproximadamente 3°C na temperatura de fundo da T01 (Figura 3.5).

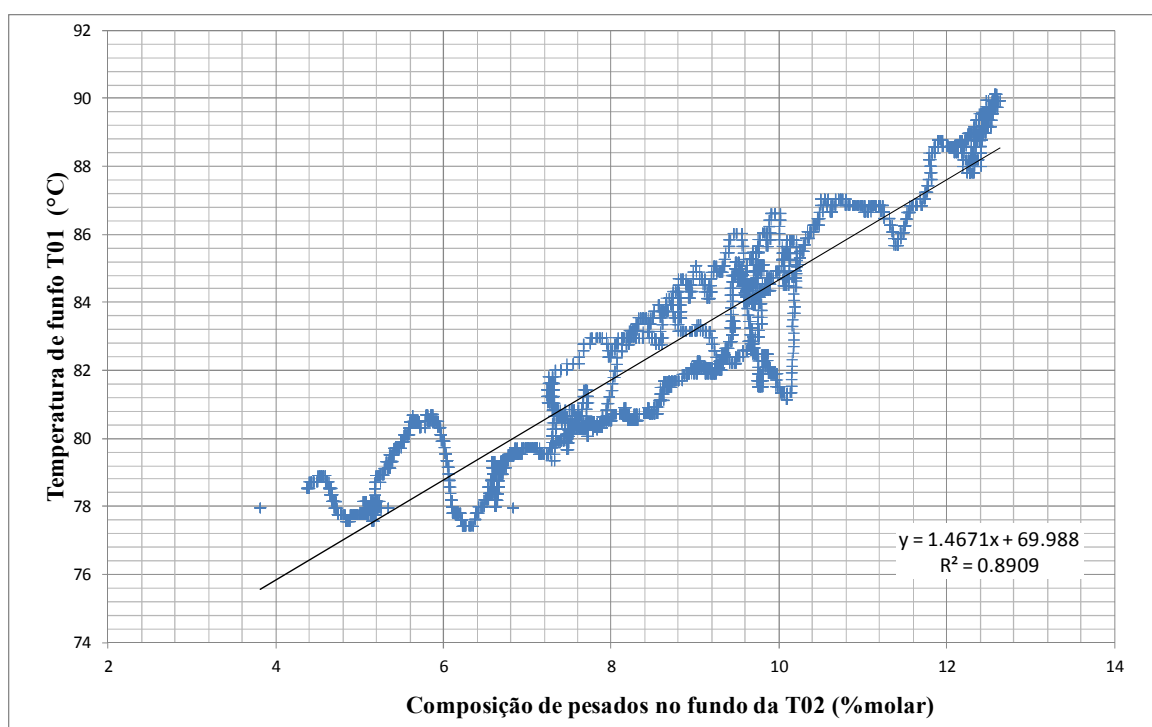


Figura 3.5: Influência de pesados da campanha de buteno na temperatura de fundo da T01 – dados de planta..

No caso das campanhas com hexeno a presença de pesados em adicional (buteno, butano, hexeno e hexano), eleva a temperatura da coluna em aproximadamente 15°C em relação às campanhas de buteno (Figura 3.6).

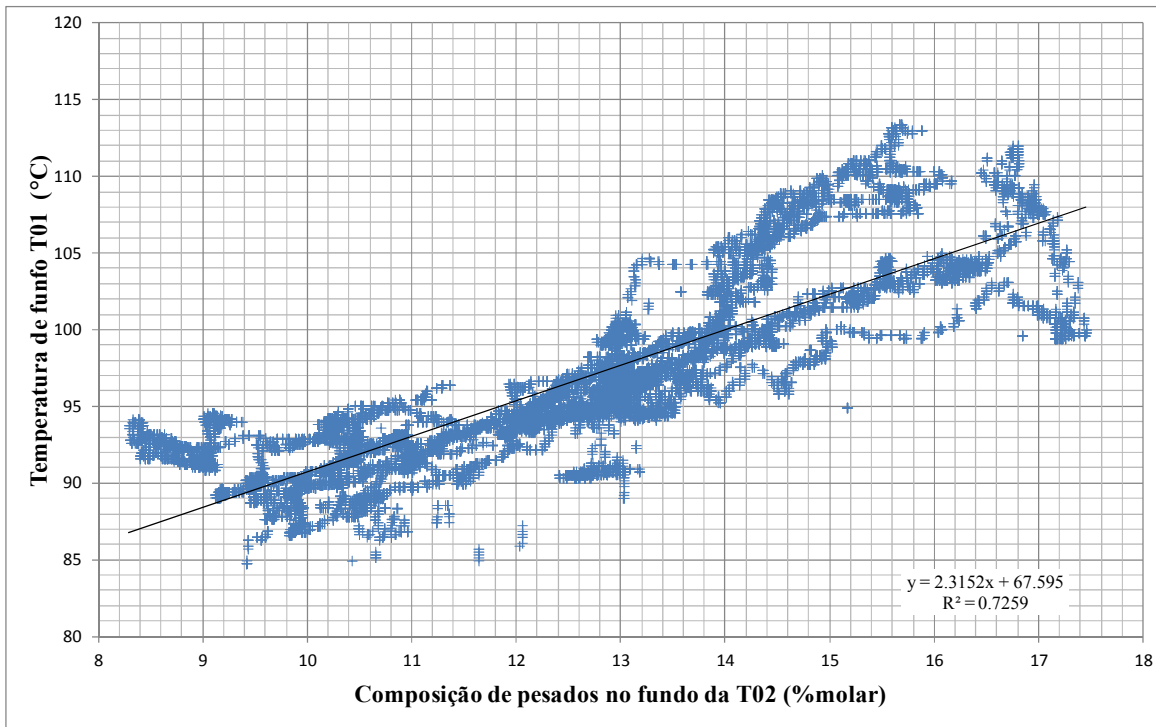


Figura 3.6: Influência de pesados na temperatura de fundo da T01 – dados de planta.

A presença dos contaminantes eteno e etano no fundo da T02 pode ser verificada na Figura 3.7. Verifica-se que a presença de eteno e etano na ordem 10.000 ppm resfria o fundo da T02 em 0,9°C.

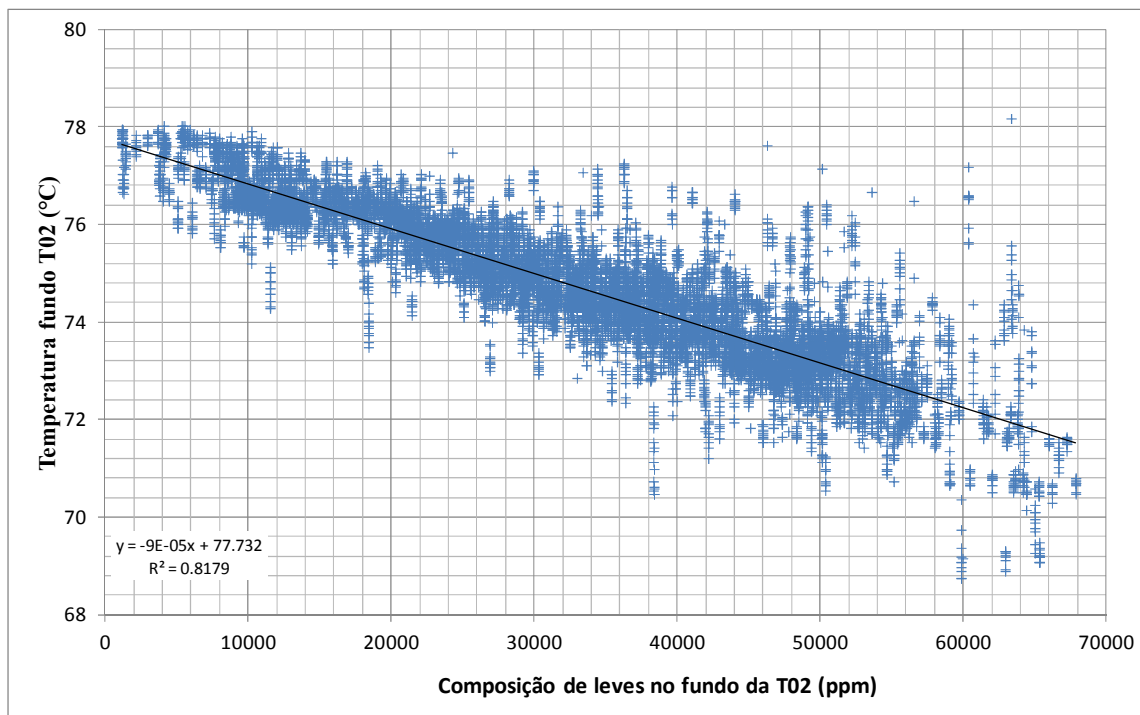


Figura 3.7: Influência de leves na temperatura de fundo da T02 – dados de planta.

3.2.3 Efeito da vazão de vapor no E03 e E04

A análise de sensibilidade de impacto do vapor para os *reboilers* E03 e E04, na presença de buteno/butano e eteno/etano no fundo das colunas (T01 e T02), podem ser visualizadas na Figura 3.8 e 3.9.

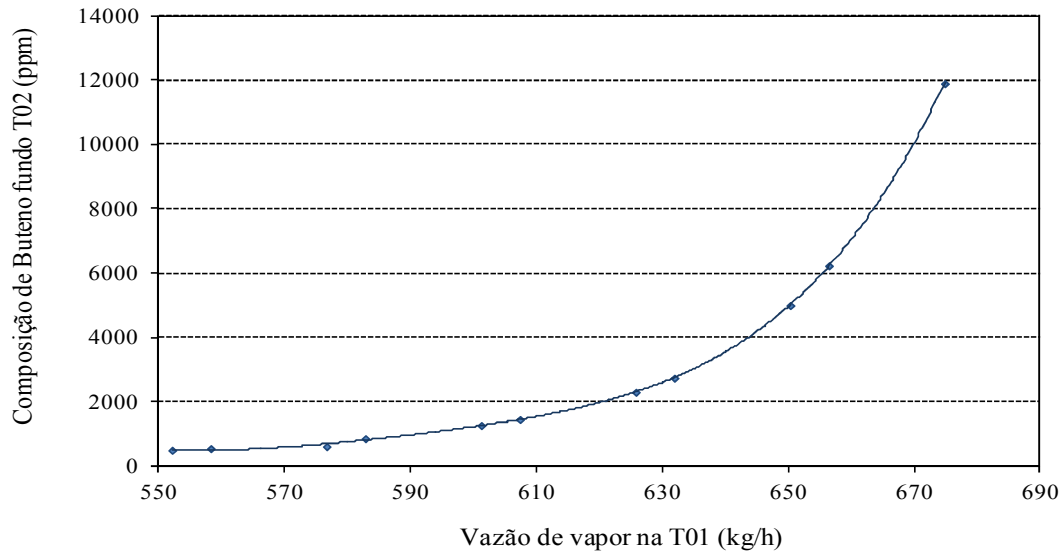


Figura 3.8: Efeito do vapor da T01 na passagem de buteno para T02.

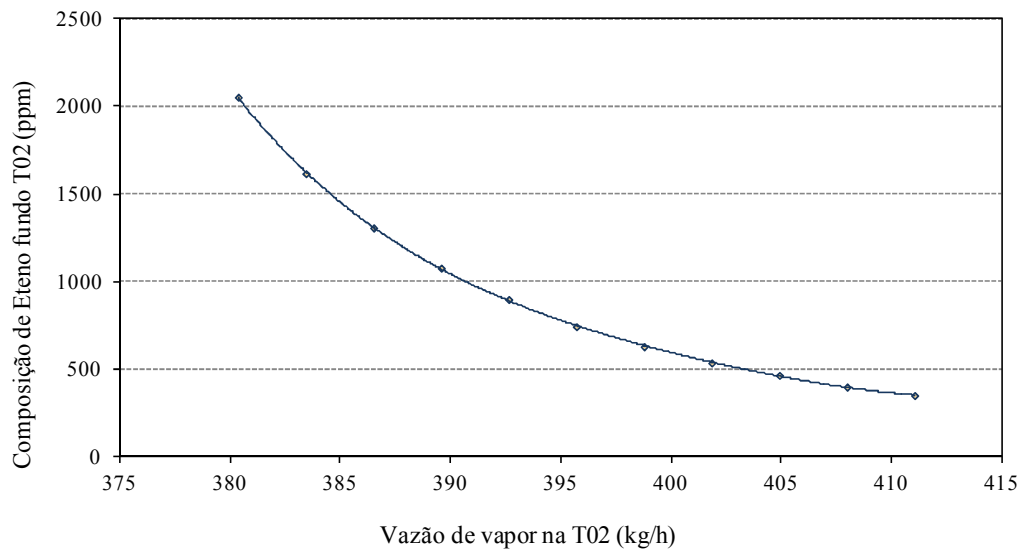


Figura 3.9: Efeito do vapor da T02 na presença de eteno.

Quanto maior for a vazão de vapor na T01, maior será a passagem de buteno para T02. Já quanto maior for a vazão de vapor na T02, menor será a presença de eteno no fundo da coluna, uma vez que as demais condições operacionais estão sendo mantidas constantes na simulação.

3.3 Estruturas de Controle Potenciais

Conforme LUYBEN (1998) o conhecimento de processo é fundamental e muitas vezes suficiente para escolha das variáveis de controle. Desta forma, com base no histórico da planta (conhecimento do processo) e nos passos 3 e 4, verificação do balanço de componentes e análise de sensibilidade do processo, serão determinadas as restrições de qualidade de produto e operacionais (passo 5).

Em um segundo momento, serão definidas as variáveis de controle de inventário do passo 6 (pressão e nível) e ao final serão apresentadas as estruturas de controles potenciais.

3.3.1 Restrições de Processo

Nesta unidade as variáveis estão sujeitas às restrições de processo que devem ser levadas em conta para definição da estrutura de controle. As variáveis são normalmente classificadas no que tange as suas restrições em “*Soft Constraints*” (restrições suaves) ou como “*Hard Constraints*” (GERHARD, 1995). A primeira classificação faz referência as variáveis que apresentam limites que podem ser ultrapassados e a segunda são restrições que não podem ser ultrapassadas em hipótese alguma.

Esta unidade fará referência apenas as ***Hard Constraints***, pois penalização crescente não é aceitável para maioria das variáveis.

A restrição da qualidade esta diretamente vinculada aos objetivos da unidade, devendo ser controlada as impurezas eteno e buteno no propano (fundo da T02), pois sua presença traz problemas que podem levar à parada de planta.

Os refluxos devem receber limites inferiores, superiores e de movimentos conforme segue abaixo.

- Limite inferior: deve-se garantir um refluxo mínimo para evitar a perda de eficiência de separação da coluna. A redução do refluxo na T01 afeta diretamente a composição de topo da coluna, aumentando a passagem de buteno para o fundo da T02.

- Limite superior: deve-se evitar a saturação das válvulas, operando sempre dentro do range disponível.

- Limite de movimentos: deve-se garantir que o controle de nível dos condensadores de topo tenha condições de compensar as mudanças no refluxo.

As vazões de vapor para os *reboilers* das colunas devem receber limites superiores e inferiores conforme segue a seguir.

- Limite inferior: deve-se garantir o coeficiente mínimo de transferência de calor, evaporação do refluxo, e evitar a formação *plugs* ou mudanças no regime do fluxo interno da torre.
- Limite superior: deve-se evitar a saturação da válvula, operação fora do range disponível.

A vazão de fundo da coluna T01 deve receber limite superior, pois no caso da T01 pode ocorrer a saturação da válvula e secar o fundo da coluna. Já no caso da vazão de fundo da T02 deve-se garantir o fluxo mínimo da bomba e manter a demanda mínima de propano para planta.

Um limite para o movimento da retirada de fundo da T02 deve ser previsto, velocidade de abertura da válvula, pois pode exceder a capacidade de recuperação da unidade (balanço de massa).

3.3.2 Definição do Controle de Inventário

Como já foi relatado anteriormente e abordado detalhadamente em PARANHOS (2009), o fechamento do balanço de material de uma unidade de processo é fundamental. Os inventários de líquido e gás devem ser controlados para o controle do balanço (passo 6). Controlar o nível de um equipamento significa controlar o acúmulo de líquido, de forma análoga, controlar a pressão significa controlar o acúmulo de gás de um equipamento, ou seja, mantendo a pressão constante pode-se garantir que a vazão mássica de gás na entrada será igual à vazão mássica de gás na saída.

A pressão tem uma influência direta na capacidade de separação dos produtos, pois a composição, temperatura e pressão de uma mistura de hidrocarbonetos são termodinamicamente relacionadas, sendo a pressão de uma coluna de destilação uma das variáveis mais difíceis de ser controlada, podendo levar a um consumo mais alto de utilidades devido às perturbações que esta variação de pressão provocará no processo. Existem cerca de 21 métodos de controle de pressão, cada qual com suas vantagens e desvantagens e casos de aplicação (CAMPOS e TEIXEIRA, 2006).

Como a vazão de gases no topo é considerável, o controle do inventário gasoso esta sendo muito bem realizado pela PV01 ou PV02, através do PIC01 com envio para o 1ºRFG e o auxílio da FV05 para *off-gas*, conforme modos de operação mencionados no item 2.3.2. Outra alternativa para controlar a pressão seria pelo nível dos condensadores, através da vazão de refluxo FV06 que também é a carga da coluna T02. Porém, nesta condição seria necessário controlar o inventário da T02 pela vazão de fundo, o que não é possível. A vazão de fundo da T02 é fixada, pois define o tempo de residência dos reatores de Pré-polimerização e não pode ser considerada como um grau de liberdade.

Os controles de nível dos vasos de topo e de fundo da coluna são, depois da pressão, os controles mais importantes para uma boa operação da coluna. Eles garantem que não existirá um acúmulo de massa no sistema, evitando problemas associados à inundação do vaso de topo ou de nível do fundo da coluna.

Os níveis dos condensadores E01 e E02 estão diretamente ligados ao controle de pressão da unidade. Não existe indicação *online* do nível do E01, mas como os condensadores se encontram no mesmo nível e estão conectados pelo fundo¹, pode-se aplicar o conceito de vasos comunicantes, logo, os níveis dos dois condensadores estão diretamente relacionados e podendo ser visualizados pela indicação de nível *online* do E02. A Figura 3.4 apresenta a relação do nível do E02 com o controle de pressão do sistema.

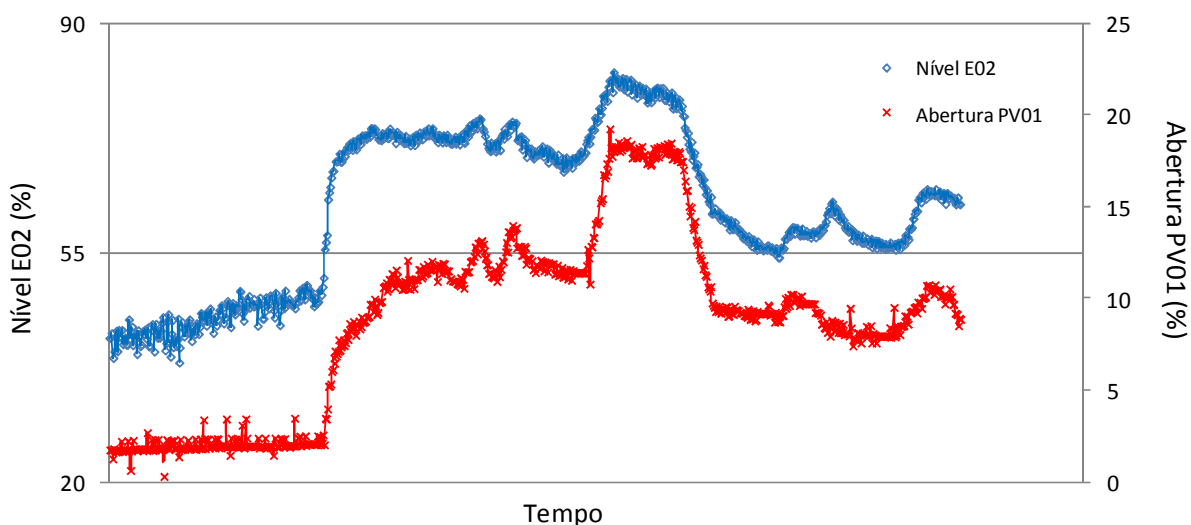


Figura 3.10: Influência da variação de nível do E03 na pressão do sistema.

¹ Exceto para o modo III de operação, onde se deseja uma baixa concentração de hidrogênio no 1º RFG.

Pode-se observar que a válvula de controle de pressão é modulada conforme o nível do condensador varia, com o objetivo de manter a pressão do sistema constante. Quando o nível sobe a válvula que controla a pressão do sistema (PV01) abre, quando o nível diminui, a válvula fecha, visando manter o valor definido de pressão. Essa variação na pressão do sistema afeta diretamente a separação nas colunas.

O fato dos condensadores serem vasos comunicantes faz com que a variação no nível de um condensador varie o nível do outro. Como os condensadores são vasos de nível variável, que possuem tubos por onde passa o fluido refrigerante, a área de troca térmica varia com o nível. Os níveis dos condensadores não são controlados, e portanto, variam muito. Logo, a quantidade de vapor condensado varia também. Quanto maior o nível, menor a área de troca térmica para o vapor, menos vapor será condensado, a pressão será maior e existe a possibilidade de perder propano pelo topo da coluna. De forma contrária, quanto menor o nível do condensador, maior a área de troca térmica, mais vapor será condensado, a pressão será reduzida e aumenta a possibilidade de passar eteno para o fundo da T02.

A implementação de um controle avançado que se permita o controle em faixa do inventário da T02 e do nível dos condensadores controlado pelo setpoint da pressão é uma alternativa, visto que o único recurso disponível para controle de nível dos condensadores é o refluxo da T01 (FV03), pois o inventário líquido da T02 deve ser controlado em cascata com a vazão de refluxo FV06.

Conforme foi visto na análise de sensibilidade, o refluxo da T01 (FV03) impacta diretamente na especificação de buteno no fundo da T02 e será melhor avaliada no item 3.3.3.

3.3.3 Proposição de Estratégias de Controle

Depois de realizada essas análises é possível excluir as estruturas impraticáveis do ponto de vista estático e é o momento de escolher as melhores válvulas para controlar a qualidade dos do propano recuperado.

Em alinhamento aos objetivos da unidade, o que se deseja controlar primordialmente é a qualidade do produto de topo da T01 evitando a passagem do contaminante buteno para T02. A qualidade do produto de fundo da T01 não é fundamental, uma vez que os pesados provenientes do reator fase gás na alimentação da coluna acabarão retornando pelo fundo da mesma, fechando o circuito. Entretanto deve-se evitar recirculações desnecessárias, o que implicaria em maiores gastos energéticos e aumento de carga desnecessário para a unidade.

Como recurso para o controle da contaminação de buteno na T01 existe o cromatógrafo na corrente de fundo da T02, este sinal pode ser usado como recurso para controlar os 3 graus de liberdade disponíveis de maior impacto na passagem de buteno para T02: a vazão de refluxo, a vazão de vapor e a vazão de fundo.

Para controle da composição de eteno no fundo da T02 o mesmo cromatógrafo é também um recurso disponível, porém não existem muitos graus de liberdades para o controle de composição de eteno, se limitando a uma única variável, a vazão de vapor, pois o controle de inventário da coluna esta em cascata com o refluxo (FV06).

Como a dinâmica do processo é lenta, o analisador apresenta um tempo morto associado ao processo da ordem de aproximadamente 20 minutos, deve ser previsto neste controlador um mecanismo de compensação de tempo morto, ou então a sintonia deve ser compatível (baixo ganho proporcional e alto tempo integral).

Outra opção é se usar o analisador em cascata com inferências para estimar a composição e qualidade da corrente de topo da T01 (buteno) e fundo da T02 (eteno). Uma das inferências mais simples é a inferência baseada na temperatura, pois se a pressão for mantida constante, a temperatura esta diretamente associada à composição conforme foi verificado na análise de sensibilidade, para uma certa composição de carga (c.f. Figuras 3.4 , 3.5 e 3.6).

Um problema para o uso de tais estratégias é que os únicos sensores disponíveis estão posicionados no fundo da coluna e não são confiáveis devido a problemas de comunicação. Outro problema, é que a temperatura da T02 varia muito pouco próximo da faixa de especificação (eteno), não tendo sensibilidade e qualidade para configuração de ações de controle (variações inferiores a 0,1°C). Neste caso, o controle por temperatura não é o mais indicado.

Avaliações e acompanhamento do processo indicam que a T02 alcança seus objetivos, uma vez que não é um problema frequente o aumento de eteno no propano, somente em casos que o operador manipula bruscamente a retirada de fundo da T02, excedendo o balanço de massa da unidade. Neste caso, será utilizado um algoritmo para evitar a contaminação com eteno (AIC02) acima dos limites pré-estabelecidos, atuando diretamente na vazão de vapor do refervedor (E04). Por outro lado o aumento da concentração de buteno acontece com mais frequência, indicando que a ineficiência está na T01, visto que a sua função é não deixar que as frações mais pesadas que o propano passem para a segunda coluna. Neste caso, sugere-se o uso de inferência de composição de buteno no topo da coluna T01.

A estrutura de controle da T02 já esta claramente definida, assim como o controle de pressão da unidade. Porém, para o controle efetivo da T01, são propostas duas alternativas e ambas requerem a configuração de um analisador virtual para composição de buteno no topo da T01 (AIC01), o qual será abordado detalhadamente no Capítulo 4. Para garantir a separação de propano do buteno, as alternativas propostas são diferentes das estruturas clássicas para controle de composição, sendo uma delas nomeada como estrutura L/V (Alternativa 1) e a segunda L/B (Alternativa 2), conforme as Figuras 3.11 e 3.12, respectivamente.

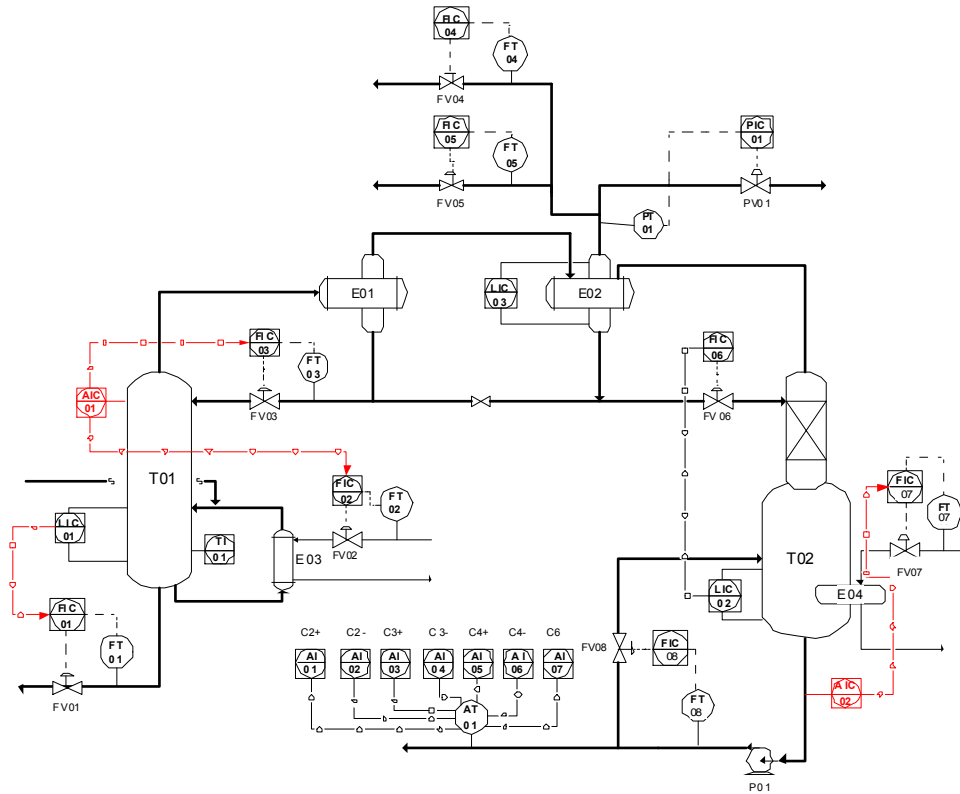


Figura 3.11: Alternativa 1 de estrutura de controle L/V para a unidade URP.

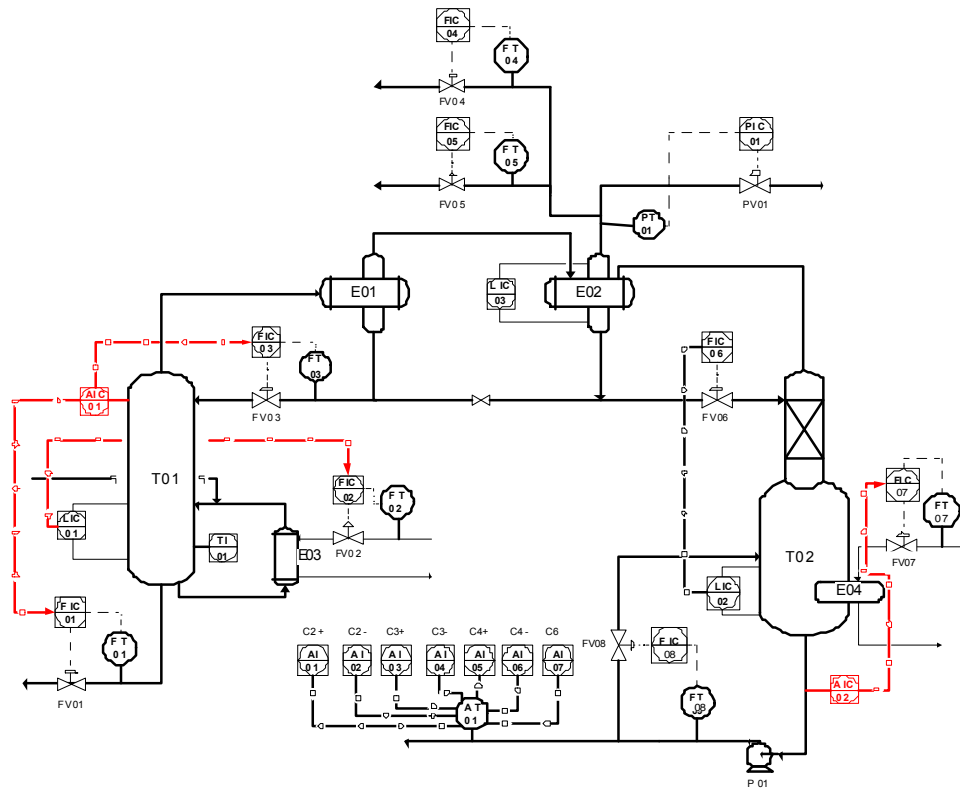


Figura 3.12: Alternativa 2 de estrutura de controle L/B para a unidade URP.

A alternativa 1 (Figura 3.11) sugere utilizar a estratégia clássica de controle de nível de fundo da T01, atuando na vazão de retirada de fundo. Como a vazão de refluxo é muito maior que a do destilado, pode-se manter o refluxo constante ou manipular lentamente o seu “setpoint” através de um controlador de composição no topo da coluna (inferência de composição de buteno, AIC01) que também manipula a vazão de vapor.

Segundo CAMPOS e TEIXEIRA (2006), este tipo de estrutura de controle funciona adequadamente desde que o refluxo interno da torre não seja muito elevado, e a vazão de retirada de fundo seja a variável de maior impacto no nível de fundo. Isto é, se ocorrer uma perturbação no refluxo ou no refeedor, que é encarregado de vaporizar todo refluxo e fazer com que ele volte em direção ao vaso de topo, o nível poderá sumir (abaixo da escala 0%) ou indicar 100% (sair da escala do instrumento).

Já a segunda alternativa (Figura 3.12) sugere que o controle de nível de fundo da T01 passe a manipular o refeedor, para vaporizar todo o refluxo interno da torre. A vazão de retirada do fundo passa a ser a vazão, que é manipulada para garantir a composição de buteno no topo da coluna (inferência de composição de buteno). Nesta alternativa, é interessante manter o refluxo constante para não instabilizar o controle de nível ou manipular lentamente o seu “setpoint” através do controlador de composição (inferência de composição de buteno, AIC01) no topo da coluna.

No caso da segunda alternativa, se o refluxo interno for alto o suficiente essa estratégia será a mais efetiva. O nível de fundo da coluna passa a manipular o refeedor, para vaporizar todo refluxo interno da coluna num instante e a retirada de fundo passa a ser a vazão manipulada para garantir a composição de topo. A proporção entre o refluxo e a retirada de fundo é muito pequena na URP se comparada com super fracionadoras de separação de propano do propeno, de unidades de insumos básicos (exemplo, UNIBRS da Braskem), as quais apresentam altas razões de refluxo.

Para entender o real impacto dessas estruturas de acoplamento e se escolher a melhor estratégia para este processo, é necessário avaliar a resposta do sistema na frequência em que o controlador irá atuar e efeitos de “*hold ups*” na atenuação dos distúrbios existentes (item 3.4 e 3.5).

3.4 Avaliação da Dinâmica

Visando a determinação das principais características que definem a viabilidade de controle da unidade (“controlabilidade”), nesta seção serão apresentados modelos simplificados para a análise das configurações de controle da coluna de destilação, acompanhando a tendência observada na literatura, são modelos lineares descritos na forma de funções de transferência. A partir das estruturas de controle apresentadas no item anterior foram realizadas identificações de modelos da planta em malha fechada a fim de obter modelos lineares para posteriores análises.

A identificação de sistemas lineares é uma área da ciência muito importante para uma vez que a maioria dos sistemas pode ser descrita de forma aproximada por modelos lineares. Existem diversos algoritmos de identificação encontrados na literatura e amplamente utilizados na indústria, os quais se encontram melhor detalhados em AGUIRRE(2004).

3.4.1 Metodologia de Identificação

AGUIRRE (2004) lista os conceitos fundamentais e técnicas que formam as bases do procedimento de identificação de modelos de processos. Nessa seção serão descritas as 5 etapas do procedimento de identificação a serem aplicados utilizando o *software* comercial Pavilion8, conforme descrito por AGUIRRE (2004) e aplicado em CARVALHO et al. (2007). A metodologia aplicada aos dados do processo para a modelagem é apresentada na Figura 3.13.

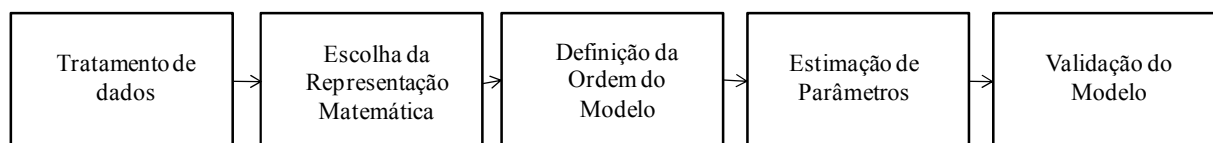


Figura 3.13: Etapas da Metodologia aplicada aos dados.

A seguir as principais etapas do problema de identificação serão descritas.

1º) Teste dinâmico e coleta de dados: Para gerar os dados foram realizadas perturbações degrau positivas e negativas de magnitude de 5% no refluxo, 10 - 20% no fundo da T01 e 15 - 50% na vazão do vapor para o refeedor da T01.

Tabela 3.4: Intervalos definidos para perturbação.

Descrição	Unidade	Perturbação
Vazão de refluxo	kg/h	500 - 1000
Vazão de fundo	kg/h	500 - 1000
Vazão e vapor	kg/h	100 - 300
Composição de pesados na carga	%	0,5 - 1

O impacto da composição de pesados na carga foi retirado do banco de dados histórico da planta, o qual apresenta variações na ordem de aproximadamente 0,5-1% no período de teste realizado.

O teste foi realizado em malha fechada, método direto, com objetivo de manter o processo em controle durante o experimento e aproveitar a características dos controladores para obter o modelo mais adequado para controle. A Tabela 3.5 apresenta as sintonias do controle regulatório ajustadas em planta.

Tabela 3.5: Sintonias ajustadas para o controle regulatório para cada estrutura de controle.

Alternativa 1		Alternativa 2	
Controlador LF da T01		Controlador LV da T01	
Ganho	1	Ganho	0,5
Constante tempo	0,01	Constante tempo	0,75

A partir dos degraus aplicados na planta foram coletados os dados do comportamento das variáveis controladas com um tempo de amostragem de 1min.

2°) Escolha da representação matemática a ser utilizada: Em AGUIRRE (2004) diversas representações de modelos lineares são detalhadamente abordadas, neste trabalho será utilizado o método ARX, pois é o único método disponível para Identificação disponibilizado pelo pacote do *software* comercial Pavilion8 licenciado na Braskem.

3º) Determinação da estrutura ou ordem do modelo: No caso de modelos lineares, a escolha da estrutura se restringe a escolha da ordem do modelo. Neste caso, serão usados modelos de primeira e segunda ordem.

4º) Estimação de parâmetros: Essa etapa começa com a escolha do algoritmo a ser utilizado. No caso do *Software* Pavillion8 é utilizado um algoritmo variante do método clássico de mínimos quadrados.

5º) Validação do modelo: Tendo obtido uma família de modelos, é necessário verificar se eles incorporam ou não as características de interesse do sistema original. A seguir segue a análise dos modelos obtidos.

3.4.2 Modelos Obtidos

Os modelos simplificados utilizados neste trabalho para a análise das configurações de controle da coluna de destilação são modelos lineares descritos na forma de funções de transferência de primeira e segunda ordem. Estes modelos simplificados foram identificados a partir de dados de planta e o ajuste foi realizado buscando o valor dos parâmetros dos modelos propostos que minimizassem o quadrado do erro entre as respostas do modelo e os dados amostrados.

Neste caso, a coluna T01 pode manipular a vazão de vapor e vazão de fundo para controle da composição de buteno (fundo da T02) e nível da T01. Obviamente, quando se manipula a vazão de fundo da T01 (FV01) se perturba o nível da T01 e altera presença de buteno no fundo da T02. O mesmo ocorre ao se manipular a vazão de vapor do refeedor (FV02). Este sistema é multivariável, descrito por uma matriz de ordem 2x2, pode ser representado pelo diagrama de blocos mostrado na Figura 3.14, cujas funções de transferências $G_{21}(s)$ e $G_{12}(s)$ representam as interações.

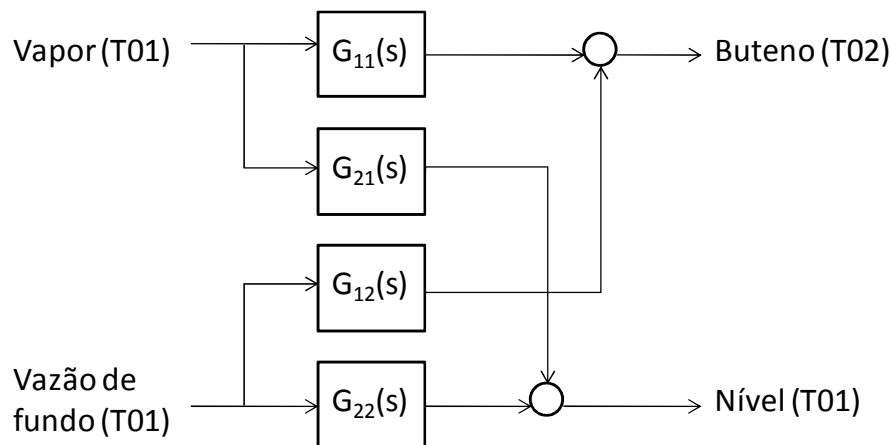


Figura 3.14: Sistema Multivariável.

Devido à diferença de ganho apresentada pelas diferentes estruturas de controle regulatório, os modelos $G_{L/V}$ e $G_{L/B}$ foram identificados utilizando os dados das perturbações positivas e negativas. As equações 3.1 e 3.2 representam os modelos obtidos para as Alternativas 1 e 2 respectivamente.

$$G_{L/V} = \begin{bmatrix} \frac{7,418}{51,95 s + 1} & \frac{0,458}{8,622 s + 1} \\ -0,01 & -0,01 \\ \hline 10,06 s^2 + 2,411 s + 1 & 14,09 s + 1 \end{bmatrix} \quad (3.1)$$

$$G_{L/B} = \begin{bmatrix} \frac{0,428}{1,22 s + 1} & \frac{-2,781}{100 s + 1} \\ -0,01 & -0,01 \\ \hline 10,06 s^2 + 2,411 s + 1 & 14,09 s + 1 \end{bmatrix} \quad (3.2)$$

Pela análise comparativa dos modelos $G_{L/V}$ e $G_{L/B}$ pode-se dizer que as ações de controle da estrutura L/V na T01, frente às perturbações realizadas, impactam em maior peso na concentração de buteno da T02.

Na Figura 3.15 observa-se que a estrutura L/V tende a aumentar a retirada de fundo frente a degraus positivos no refluxo, reduzindo a passagem de buteno para T02.

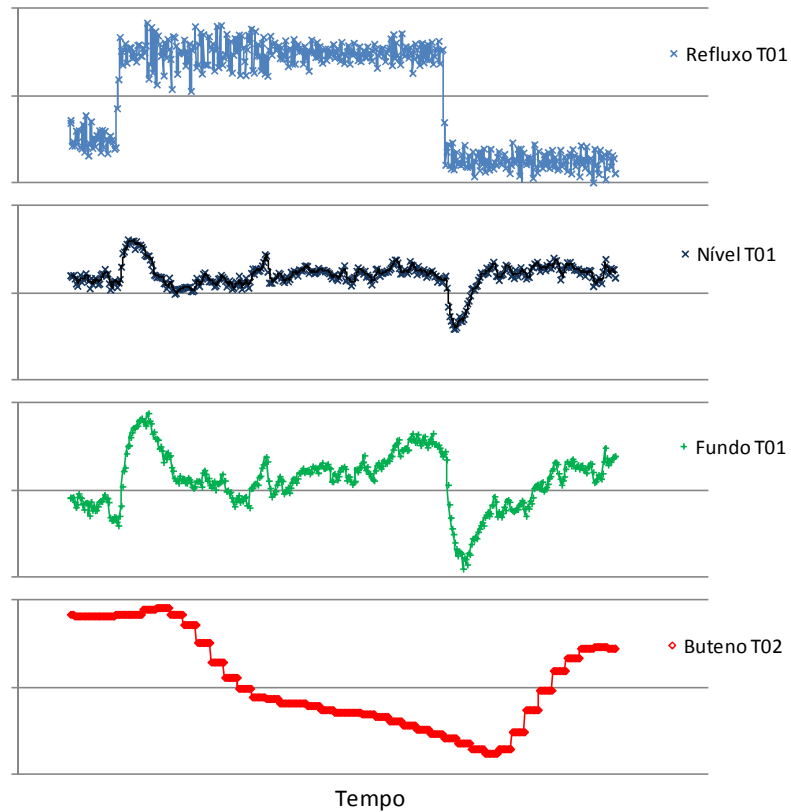


Figura 3.15: Impacto da perturbação no refluxo estrutura L/V.

Diferente da estratégia L/V, o aumento de vazão no refluxo na estrutura L/B, reflete no aumento de nível da coluna, levando ao aumento da vazão de vapor. Este aumento na vazão de vapor resulta na passagem de buteno para a T02, que é contrário ao desejado. A concentração de buteno no fundo da T02 só começa a diminuir e estabilizar quando se reduz novamente a vazão de refluxo, de forma a manter o nível no valor em que a vazão de vapor é adequada à separação desejada.

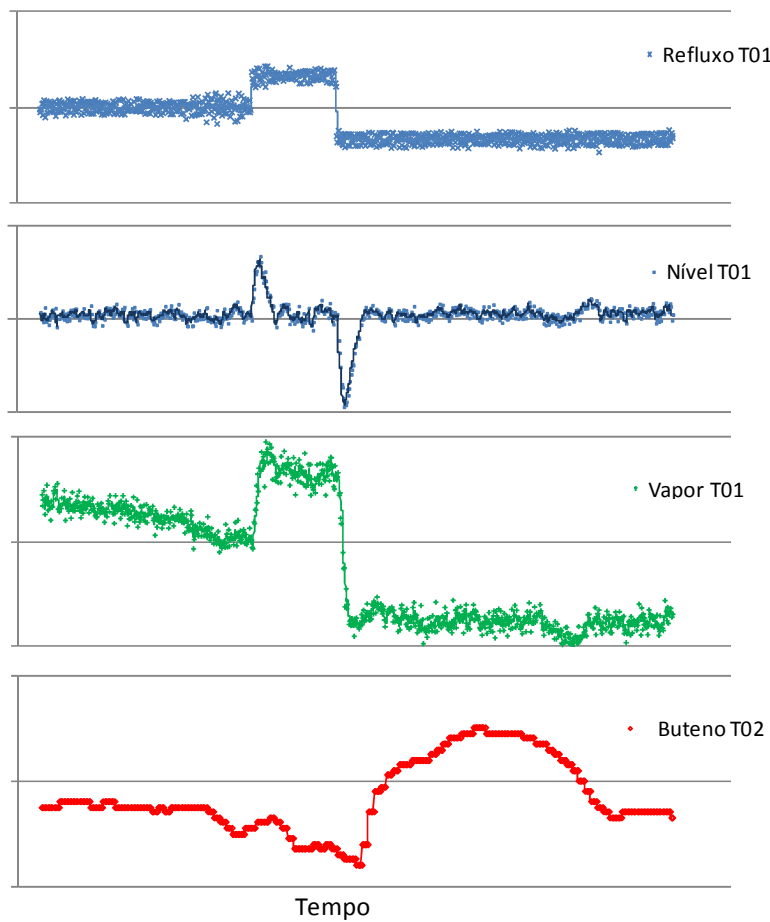


Figura 3.16: Impacto da perturbação no refluxo estrutura L/B.

Este mesmo comportamento repete-se nas duas estruturas frente a aumentos de pesados na carga.

3.5 Índices de Desempenho

Diversas ferramentas têm sido propostas para auxiliar na avaliação do desempenho de estruturas de controle. Dentre os vários índices de desempenho, foram escolhidos os índices considerados mais promissores: Arranjo de Ganhos Relativos (RGA), Pólos e Zeros de Transmissão, Número de Condicionamento Mínimo e Número de Desempenho Robusto (RPN). No Apêndice A serão introduzidos os conceitos que permitam o correto entendimento dos principais índices.

3.5.1 Arranjo dos Ganhos Relativos

BRISTOL (1996) desenvolveu esta ferramenta pensando na análise estacionária (RGA(0)), porém pode-se utilizá-la também para selecionar um emparelhamento dependente da frequência (RGA(j ω)). A análise na frequência é mais importante, pois o interesse é conhecer a interação entre as variáveis na região de atuação do controlador. O cálculo é idêntico ao descrito para o RGA estacionário, porém utiliza-se matrizes de ganho (K) que são dependentes da frequência do sistema.

As matrizes de transferência resultante da identificação do sistema para obter o RGA e condicionamento mínimo do sistema, foram alimentadas no toolbox RPN® desenvolvido pela Trisolutions em parceria com a UFRGS, no ambiente do MATLAB® versão 5.3, onde foi possível obter a matriz RGA estacionária e sua curva no domínio da frequência.

Neste caso, as matrizes de ganhos estáticos para as duas estruturas de controle L/V e L/B (Figura 3.14) é igual a:

$$\begin{aligned} K_{L/V} &= \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7,418 & 0,458 \\ -0,01 & -0,01 \end{bmatrix} \\ K_{L/B} &= \begin{bmatrix} K_{11} & K_{12} \\ K_{21} & K_{22} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0,428 & -2,781 \\ -0,01 & -0,01 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.3)$$

A RGA (0) associada é:

$$\begin{aligned} RGA_{L/V} &= \begin{bmatrix} 1,0658 & -0,0658 \\ -0,0658 & 1,0658 \end{bmatrix} \\ RGA_{L/B} &= \begin{bmatrix} 0,1334 & 0,8666 \\ 0,8666 & 0,1334 \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Pode-se observar pela análise do RGA estático que para estrutura L/V a única escolha possível é controlar a composição de buteno manipulando a vazão de vapor e o nível manipulando a vazão de fundo. As outras escolhas apresentam valores de acoplamento muito baixo, o que demonstra que o processo seria instável.

Já a estrutura L/B apresenta valores de lambda entre 0 e 1, indicando a existência de interação entre as malhas, pois o ganho em malha fechada é maior do que o ganho em malha aberta. Os valores de RGA estáticos para esta estrutura indicam que é melhor inverter o emparelhamento, visto que a diagonal principal é menos dominante apresentando valores baixos de RGA de 0,1334. Neste caso, o nível da T01 deveria ser controlado pela relação L/B e a composição pelo a vazão de vapor.

Nas Figuras 3.17 e 3.18 são apresentados os resultados do cálculo do RGA dinâmico ($RGA(i\omega)$), conforme Equação A.3 do Apêndice A. Pode-se observar o comportamento da diagonal principal da matriz RGA para uma faixa de frequências.

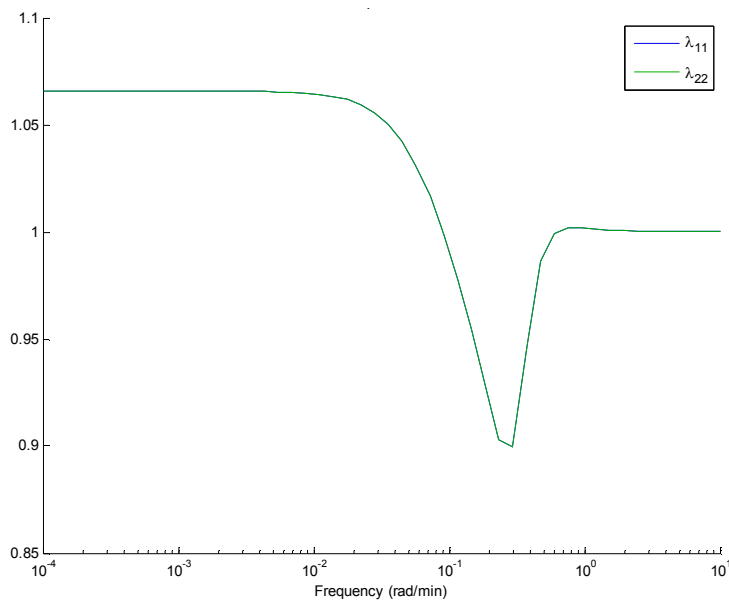


Figura 3.17: RGA dinâmico para estrutura L/V.

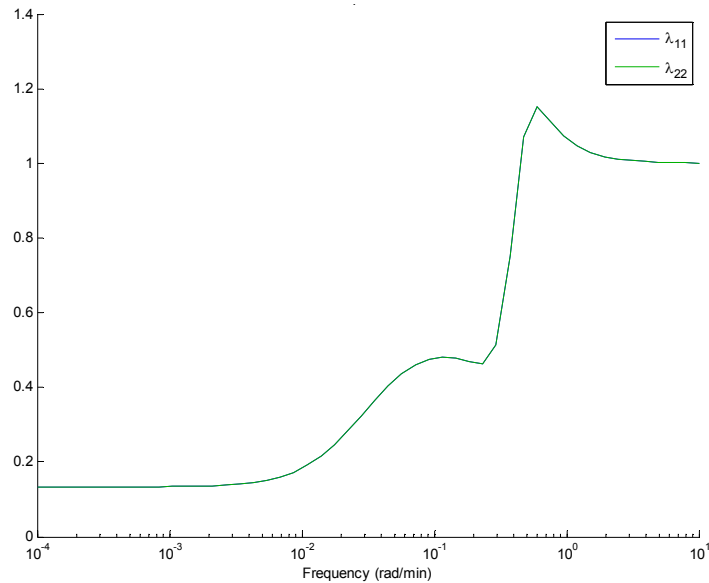


Figura 3.184: RGA dinâmico para estrutura L/B.

O resultado apresentado na Figura 3.17 corresponde a análise de interação das malhas (RGA em função da frequência), mostra que em frequências intermediárias, na ordem de 10^{-1} , a estrutura L/V apresenta valores de RGA que levam ao aumento da interação entre as malhas. Na Figura 3.18 verifica-se que a estrutura L/B apresenta interações em baixas frequências, valores inferiores a 10^0 .

Para altas frequências o RGA dinâmico para as duas estruturas é próximo de 1, neste caso menor é a interação entre as malhas e maior o sucesso de um controlador descentralizado.

3.5.2 Pólos e Zeros Positivos

Segundo TRIERWEILER (1997), a caracterização dos sistemas pode ser feita através dos pólos e zeros de transmissão. Ambos parâmetros podem possuir parcela complexa, uma maneira de representá-los é através de um diagrama relacionando a parte real na abcissa e na ordenada a parte imaginária das raízes conforme apresentado no trabalho de FARINA (2000). Uma abordagem simplificada é encontrada no Apêndice A referenciando os autores já mencionados.

A seguir serão demonstrados os mapas de pólos e zeros no semi-plano direito (*RHP – Right Half Plane*) para o sistema, tem-se o mapa de pólos e zeros apresentado na Figura 3.19 e 3.20, onde os círculos representam os zeros e os “x” representam os pólos do sistema.

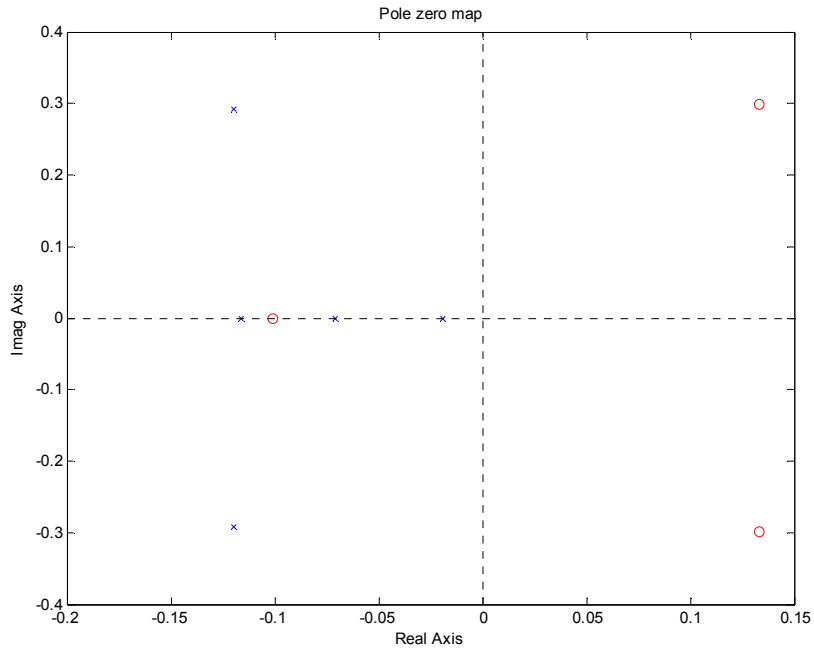


Figura 3.19: Mapa de pólos e zeros para estrutura L/V.

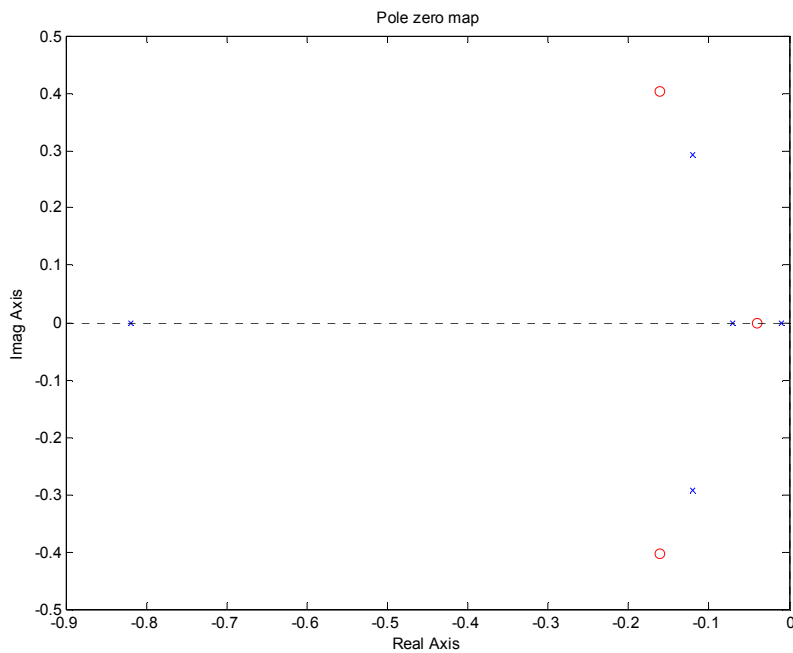


Figura 3.205: Mapa de pólos e zeros para estrutura L/B.

Nota-se que apenas a estrutura L/V possui a presença de zeros de transmissão positivo, porém os mesmos não são problemáticos por se encontrarem distante da origem.

O sistema pode ser considerado estável por ter pólos de transmissão negativos e distante da origem.

3.5.3 Condicionamento Mínimo

Assim como a abordagem adotada no trabalho de FARINA (2000), são ditos sistemas bem condicionados aqueles que apresentam ganhos equivalentes para todas as possíveis direções do sinal de entrada (condicionamento baixo). Desta forma, um sistema sem problemas de direcionalidade é aquele com um condicionamento mínimo baixo (inferior a 5), enquanto um sistema que apresenta condicionamento mínimo elevado (acima de 50) poderá apresentar problemas.

No sistema em estudo (Figura 3.21), ambas estruturas apresentam valores de condicionamento mínimo baixo, menores que 5, neste caso pode-se dizer que não são sensíveis às direções da entrada, indicando uma certa facilidade no projeto do controlador. As duas estruturas L/V e L/B apresentam maior dificuldade para controle em frequências intermediárias, enquanto que em baixas frequências, ou seja, nas proximidades do regime estacionário se apresentam melhor condicionadas, em especial a estrutura L/B com valores próximo de 1.

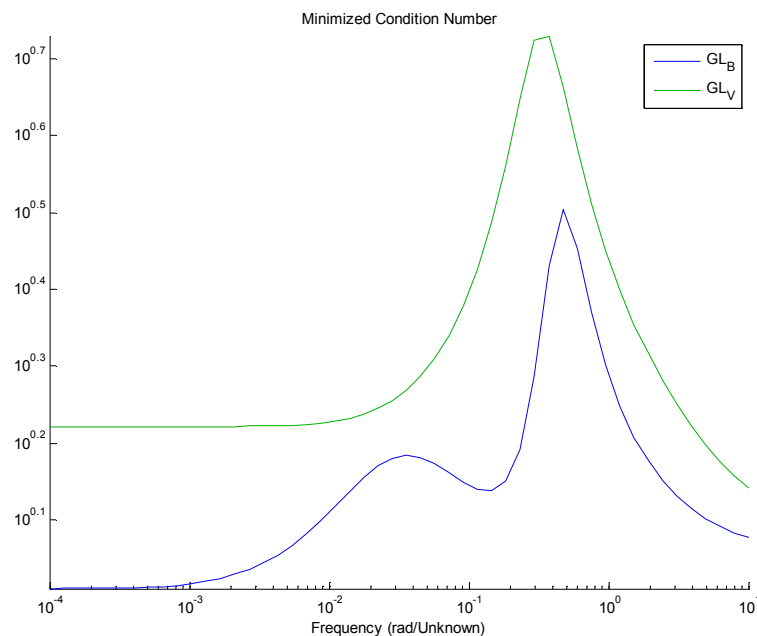


Figura 3.21: Condicionamento Mínimo estrutura L/V e L/B.

3.5.4 Número de Desempenho Robusto

Neste capítulo serão utilizados os índices de desempenho na análise dos modelos identificados para as estruturas de controle propostas L/V e L/B. As funções de transferência para as estrutura L/V e L/B foram submetidas a análise de desempenho robusto RPN, definida conforme a Equação A.8 do Apêndice A. Os desempenhos alcançáveis escolhidos, necessários para as análises de RPN, para as diferentes malhas foram representados por funções de transferência já apresentadas anteriormente.

O cálculo das funções Γ e Γ_{LR} para as diferentes estruturas indicou valores de máximo de Γ em regiões de frequência semelhantes, entre 10^0 e 10^{-2} rad/min. Dentre as estruturas analisadas a estrutura L/B apresentou menores valores de RPN comparada a estrutura L/V.

Tabela 3.6: RPN para as estruturas L/V e L/B.

	<i>Rise time</i> (min)	RPN L/V	RPN L/B
DP1	3	2,6220	1,2622
DP2	20	1,97492	1,0254
DP3	60	1,53294	1,04426

TRIERWEILER (2002) e FARINA (2000) sugerem que para os casos em que há pequenas diferenças entre as as curvas de Γ e Γ_{LR} indicam que compensadores de baixa ordem podem apresentar bons resultados no controle de uma unidade com uma dada estrutura.

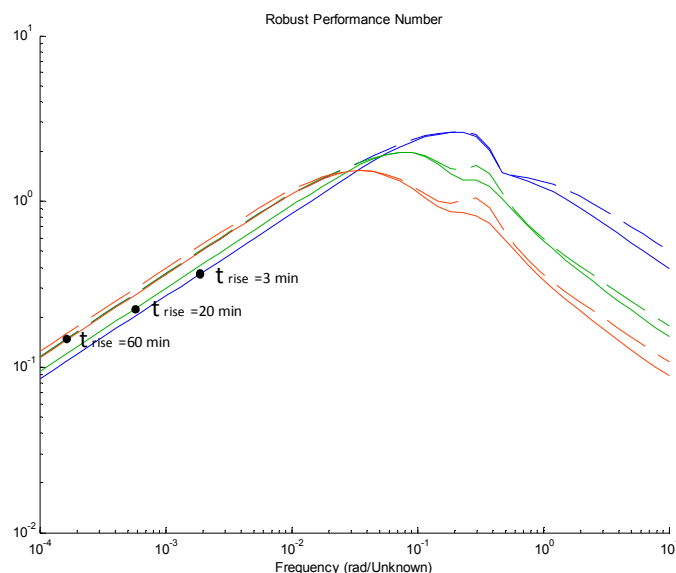


Figura 3.22: RPN para as estruturas L/V.

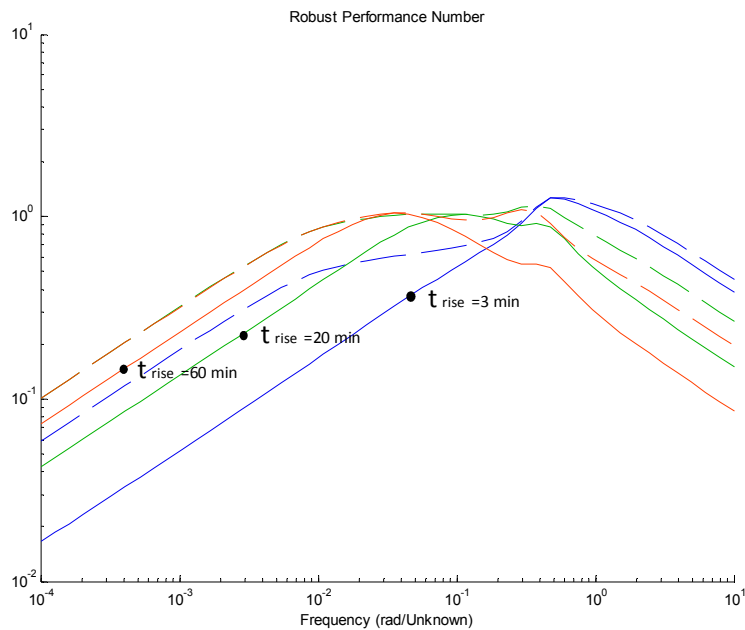


Figura 3.23: RPN para as estruturas L/B.

Pela análise da Figura 3.22 e 3.23 é possível verificar que para baixas frequências a estrutura L/V comparada com a L/B apresenta menor acréscimo de direcionalidade quando da utilização de controlador descentralizado de baixa ordem. Esta conclusão baseia-se diretamente no afastamento entre as curvas Γ e Γ_{LR} mais pronunciado para a estrutura L/B.

Para estrutura L/V, a medida que se aumenta o *rise time* do desempenho desejado a diferença entre as curvas reduz, indicando que controladores descentralizados de baixa ordem produziram bons desempenhos (Figura 3.22). Para baixos valores de *rise time*, a estrutura L/B apresenta a necessidade de controladores de maior ordem em baixas frequências (Figura 2.23), visto o comportamento do condicionamento mínimo na Figura 3.21, porém para altas frequências a diferença entre as curvas reduz indicando ser possível alcançar o desempenho desejado com controladores de baixa ordem.

Neste caso, buscando os resultados que mostrem um melhor comportamento com relação ao valor desejado, o índice de RPN, o Condicionamento Mínimo, os Pólos e Zeros de Transmissão e RGA apresentaram conclusões similares, que ambas estruturas são adequadas e podem operar com controladores descentralizados. Porém, a estrutura de controle mais promissora é a L/V (Alternativa 1), que apresenta melhores valores de RGA e menor diferença entre as curvas de Γ e Γ_{LR} .

Capítulo 4

Desenvolvimento de Analisadores Virtuais

4.1 Conceitos Fundamentais

As plantas industriais usualmente possuem um elevado número de sensores com o objetivo primário de monitorar e controlar os processos. Porém, há aproximadamente duas décadas pesquisas começaram a fazer uso do vasto banco de dados medidos e armazenados, para construir modelos de inferir grandezas de difícil medição. Atualmente esses modelos de predição são conhecidos como “*Soft Sensors*”, que é a combinação das palavras “*software*”, porque os modelos são usualmente programas de computação, e “*sensors*”, porque os modelos fornecem informação similar a medida pelo *hardware* do processo. Outros termos comuns apresentados na vasta revisão bibliográfica de KADLEC (2009) são: Sensores de Inferência (*Inferential Sensors*), Elemento Observador (*Observer-based*) e Analisadores Virtuais (*Virtual On-line Analyser*).

O desenvolvimento de Analisadores Virtuais é um bom exemplo de uso de informação útil de um banco de dados visando à otimização de um processo industrial, uma vez que utiliza dados do processo para encontrar um modelo matemático determinado de forma empírica ou fenomenológica, entre as variáveis medidas continuamente numa planta e as que devem ser determinadas. Tais modelos podem apresentar relações matemáticas entre as variáveis lineares e não lineares, dependendo das técnicas de geração de modelos empregadas. Há inúmeras vantagens em se utilizar um analisador virtual, FACCHIN (2005) referencia FORTUNA et al. (2005) e destaca as seguintes:

- É uma alternativa de baixo custo frente à instrumentação cara;
- Podem trabalhar em paralelo a instrumentação, identificando falhas neste;
- Podem ser facilmente implementadas nos sistemas atuais, sendo fácil o seu reajuste em função da mudança de parâmetros;
- Permitem a estimação em tempo real, eliminando os atrasos decorrentes de instrumentação, aumentando o desempenho dos sistemas de controle.

De forma generalizada os Analisadores Virtuais, ou “*Soft Sensors*” por KADLEC (2009), podem ser divididos em três classes, nomeados como “*Model-driven*”, “*Data-driven*” e “*Hybrid-model*”.

O modelo “*Model-driven*”, também chamado de caixa branca (*White-box*) e modelo fenomenológico, relaciona as variáveis secundárias e as primárias através de equações que descrevem o comportamento físico-químico do sistema, balanço de massa e energia, equações constitutivas, cinéticas de reação etc, ou seja, possuem um foco voltado ao fenômeno e usa leis e modelos teóricos para descrevê-lo.

Em contraste, o modelo “*Data-driven*”, mais conhecido como caixa preta (*Black-box*), ou modelo empírico, não possui qualquer base fenomenológica utilizando tipicamente técnicas de análise estatísticas mono ou multivariáveis e modelos de regressão para estabelecer uma relação entre dados de entrada e saída.

Entre esses dois extremos existem diversas combinações possíveis, constituindo os modelos híbridos, “*Hybrid-model*”. Também chamados caixa cinza (*Grey-box*) ou modelos semi-empíricos, os quais são baseados normalmente em simplificações de modelos fenomenológicos, que durante o processo de simplificação acabam gerando parâmetros que precisam ser ajustados através de métodos estatísticos para estimação de parâmetros.

Existem várias possibilidades de aplicações de modelos para colunas de destilação. Em geral as técnicas mais usadas atualmente são empíricas, mas podem ser utilizados também modelos fenomenológicos. Como o processo em avaliação apresenta uma grande quantidade de dados históricos armazenados, a utilização da estratégia caixa-preta é favorecida. As estratégias contidas na classificação caixa-preta é bastante ampla e será detalhada no item 4.2, indo desde de modelos simples de regressão multivariável, chegando a utilização de redes neurais e neuro-fuzzy.

4.2 Metodologia de Desenvolvimento

Existem diversas metodologias para desenvolvimento de analisadores virtuais, entre elas, a utilizada por WARNE *et al.* (2004) que apresenta uma metodologia constituída de 3 passos nomeadas como: (1) coleta de dados e condicionamento, (2) seleção de variáveis influentes e (3) construção da correlação.

Outro trabalho que consiste também em três etapas é o de PARK E HAN (2000), são elas: (1) entendimento do processo, (2) pré-processamento dos dados e (3) etapas de determinação do modelo.

HAN e LEE (2002) apresentaram uma metodologia para desenvolvimento de Analisadores Virtuais com base em uma metodologia de gerenciamento de processo Seis-Sigma.

Outra metodologia mais completa de desenvolvimento de analisadores virtuais que abrange todas as demais já mencionadas, é a proposta por KADLEC *et al.* (2009), que estrutura sua metodologia de forma similar a apresentada por FORTUNA (2007), que consiste em 5 etapas e pode ser aplicado em qualquer processo. A primeira etapa é a verificação preliminar dos dados, a segunda é seleção de dados em condições estacionárias do processo, seguida pelas etapas de pré-processamento dos dados e seleção do modelo, treino e validação. Por fim, a etapa final de manutenção do Analisador Virtual.

Outra metodologia bastante promissora é a proposta por CONZ (2005) e FACCHIN (2005), que além de simplificar algumas etapas propõem a inclusão da escolha de variáveis secundárias e de técnicas de correção de modelos. Esta metodologia é sustentada basicamente por três pilares: o modelo, as variáveis que integram o modelo e a estratégia de correção/atualização do modelo. Eles estruturaram o desenvolvimento em 4 passos: (1) geração e pré-tratamento dos dados, (2) escolha das variáveis secundárias, (3) escolha do modelo, treino e validação e (4) técnica de correção de modelos.

Com base na revisão bibliográfica das metodologias avaliadas e do estudo realizado no Capítulo 3, uma adaptação do método de CONZ (2005) e FACCHIN (2005) para a construção da inferência de buteno no fundo da T02 é proposto no esquema da Figura 4.1. Nos próximos itens: 4.2.1, 4.2.2, 4.2.3 e 4.2.4, serão apresentadas as alternativas existentes para cada uma destas etapas.

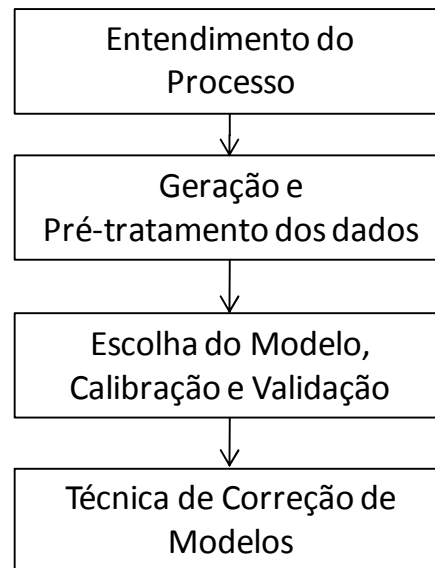


Figura 4.1: Metodologia de desenvolvimento do Analisador Virtual.

4.2.1 Entendimento do Processo

Primeiramente é necessário um estudo prévio do processo que possibilita o conhecimento de suas características básicas e seleção das principais variáveis de operação a serem utilizadas para inferência da variável de controle (analisador virtual), neste caso a especificação de buteno no fundo da T02. O entendimento teórico e a experiência dos operadores da planta ajudam a identificar as variáveis, as relações entre as elas, as correlações existentes, as características dinâmicas e tempo morto do sistema.

Baseando-se nas afirmações do Capítulo 3, é possível realizar a escolha das variáveis, ou variáveis secundárias conforme abordado na metodologia de CONZ (2005) e FACCHIN (2005), somente através de uma avaliação crítica das variáveis em uso. No Capítulo anterior esta avaliação foi realizada detalhadamente, através do conhecimento de processo, das análises de sensibilidade estática e dinâmica realizadas. A partir desta análise e dos objetivos de controle, foi possível pré-selecionar as variáveis que possuem maior relação com a contaminação de buteno no fundo da T02. Neste caso, as variáveis pré-selecionadas são: a temperatura, a pressão, a composição de pesados na alimentação, a vazão de vapor no E03, a vazão de refluxo na T01 e a vazão de fundo da T01.

Segundo LUYBEN (1990) os modelos para inferência de composição em colunas de destilação utilizam principalmente temperaturas e pressões, uma vez que estas variáveis são termodinamicamente relacionadas e apresentam grande relação com a composição. Como a pressão é constante, a inferência ficaria baseada apenas em temperaturas, sendo esta mais simples e mais efetiva. Porém, como os recursos de medição de temperaturas da unidade são pobres (apenas uma indicação de temperatura de fundo na T01), não confiável uma vez que não está instalado no recheio, mas sim próximo à alimentação, caracterizando uma situação mais distante do equilíbrio termodinâmico. Desta forma, se faz necessário que se utilize as vazões e os níveis.

Sabe-se que as vazões e os níveis não são recomendados, pois não são indicativos imediatos de mudança de composição. Na maior parte dos casos, uma mudança de vazão de carga ou retirada de fundo numa coluna implica em variação de composição, mas que só será sentida depois de um tempo maior e não imediatamente. Já as temperaturas apresentam dinâmica similar a da composição, o que faz com que apenas modelos estáticos sejam suficientes para traduzir os valores medidos em equivalentes de composição.

Além disso, sabe-se que as vazões não podem ser consideradas isoladamente, pois o aumento de uma vazão geralmente implica na mudança de outras, e assim sendo não se pode levá-las em conta isoladamente. Dessa forma, em sistemas cujas temperaturas corrigidas pelas variações de pressões não são suficientemente explicativas ou não podem ser utilizadas, pode-se fazer uso de algumas relações entre as vazões (refluxo/carga ou refluxo/destilado) ou utilizá-las através de uma regressão linear múltipla como proposto por este trabalho. Desta forma, as variáveis selecionados com base no conhecimento no processo são: a vazão de fundo da T01, a vazão vapor para o retervedor E03, a vazão de refluxo da T01 e a soma de pesados na alimentação da T01.

Para os casos em que o número de variáveis existentes é muito alto ou deseja-se avaliar quais apresentam maior influência, existem algumas técnicas que podem auxiliar na seleção. De uma forma geral, é conveniente aliar todas as técnicas para obter um melhor resultado e para o caso específico de colunas de destilação, é importante levar em conta o número de medições existentes. As técnicas que podem ser usadas são divididas em três grupos: Métodos de busca exaustiva, Métodos evolutivos e Métodos de busca aleatória.

Uma abordagem detalhada de todos esses métodos encontra-se descrita no trabalho de FACCHIN (2005).

4.2.2 Geração e Pré-tratamento dos Dados

Uma visão geral sobre pré-tratamento de dados de processo foi publicado em PEARSON (2001), PANI *et al* (2011) e KADLEC *et al* (2009), em seus trabalhos todos focam na discussão da estatística dos dados de processo e das informações que podem ser extraídas deles.

O objetivo deste passo é transformar os dados de tal forma, que eles que possam ser processados com maior efetividade pelo modelo. No caso dos bancos de dados dos processos indústrias existem várias etapas de pré-processamento que se fazem necessárias, que é indicado pelo bloco de "Geração e Pré-processamento de Dados" Figura4.1.

Algumas etapas usuais são detalhadas em KADLEC *et al* (2009) e PANI *et al* (2011). Entre elas a manipulação da ausência de dados, a detecção e substituição de *outliers*, a seleção de variáveis relevantes, tratamento da colinearidade dos dados, redução de ruídos dos dados, análise da colinearidade de dados e detecção de atrasos ou velocidade de amostragem de variáveis medidas.

PANI *et al* (2011) sugere que o pré-processamento de dados seja feito de forma iterativa, por exemplo, depois da normalização dos dados e tratamento dos valores ausentes, que normalmente são realizadas apenas uma vez, a remoção de *outliers* e manipulação das funcionalidades listadas anteriormente sejam repetidamente aplicadas até que o modelo esteja pronto e os resultados sejam satisfatórios.

A geração e pré-tratamento de dados realizados será detalhada no item 4.3.

4.2.3 Escolha do Modelo, Calibração e Validação

KADLEC *et al* (2009) destaca a importância do modelo fazendo analogia do mesmo como sendo o motor do Analisador Virtual. A etapa de seleção da estrutura ou tipo de modelo é crucial para o desempenho do analisador. Até o momento, não há uma abordagem teórica unificada para esta tarefa e, portanto, o tipo de modelo e seus parâmetros são frequentemente selecionados conforme objetivo e facilidades de implementação para cada Analisador Virtual.

A seleção do modelo é também muitas vezes sujeita a experiência passada do desenvolvedor e preferências pessoais. Isto pode ser observado no domínio das aplicações publicadas, onde muitos dos autores focam fortemente em um tipo de modelo (PLS, por exemplo) que está em seu campo de especialização.

No entanto, apesar da falta de uma abordagem comum, ou teoricamente definitiva para seleção de modelos, KADLEC *et al* (2009) sugere algumas técnicas que podem ser adotadas para esta tarefa. Uma abordagem possível é começar com um tipo de modelo simples ou estrutura (modelo de regressão linear, por exemplo) e aumentar gradualmente a complexidade do modelo, até que não se perceba mais a melhora significativa no desempenho do mesmo.

Em alguns processos industriais pode ser difícil obter uma quantidade suficiente de dados históricos para o desenvolvimento do modelo. Em tais casos, é possível recorrer à técnica estatística de estimação de erro, que usa os dados disponíveis através de um método de separação, de tal maneira que todas as amostras são utilizadas para a validação de desempenho do modelo. Outra possibilidade citada por KADLEC *et al* (2009) é a técnica estatística de re-amostragem, como por exemplo, um conjunto de dados de treinamento é gerado aleatoriamente pela retirada de amostras a partir dos dados disponíveis e treina um modelo para cada um dos conjuntos aleatórios. O modelo final é obtido pela média dos modelos particulares obtidos. No caso do erro progredir ou aumentar, a probabilidade de cada amostra ser retirada não é aleatória, mas relacionada com o erro de predição do modelo dado uma amostra de dados. Além disso, em caso de aumento do erro, os pesos das contribuições dos modelos particulares são calculados com base na qualidade preditiva dos modelos a qual é verificada através dos dados de validação.

De forma generalizada pode-se obter uma melhora de desempenho do Analisador Virtual desenvolvido pela aplicação de um conjunto de métodos. KADLEC *et al* (2009) lista em seu trabalho revisões abrangentes de técnicas de construção que foram publicados, como por exemplo: KUNCHEVA (2004), VALENTINI e MASULLI (2002), KROGH e VEDELSBY (1995), KITTLER, HATEF, DUIN e MATAS (1998), FREUND (1997), BAUER e KOHAVI (1999), RUTA e GABRYS (2000), etc.

Depois de encontrar a estrutura do modelo ideal e treinar o modelo (ou calibrar), o modelo treinado deve ser submetido à Validação para avaliação da sua capacidade preditiva. A regra geral a ser seguida nesta etapa é que o conjunto de dados seja diferente do utilizado para construção do modelo.

Existem várias ferramentas para a avaliação do desempenho do modelo detalhadas em FACCHIN (2005). A determinação do modelo que mais se ajusta aos dados é feita através da utilização de índices de ajuste, no caso da avaliação de desempenho numérico o mais popular é R-Quadrado (R^2). O R-Quadrado mede a proporção da variabilidade em y (saídas) que é explicada por x (entradas). É uma função direta da correlação entre as variáveis. Um valor de R-Quadrado muito próximo de um indica uma forte relação entre duas variáveis. O R-Quadrado é dado pela Equação 4.1.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (4.1)$$

Outros índices utilizados para este fim e mais citados na literatura são o PRESS e a RMPSE. PRESS é a abreviação de *Predictive Sum of Squares*, Equação 4.2, onde é utilizado um conjunto independente de amostras, isto é, um conjunto de dados diferente do empregado no ajuste, para determinar a capacidade preditiva do modelo.

$$PRESS = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (4.2)$$

Onde N é o número de observações contidas no conjunto de teste ou validação.

O índice RMPSE, *Root Mean Prediction Squared Error*, nada mais é que a raiz quadrada da PRESS dada pela equação a seguir.

$$RMSEP = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2} \quad (4.3)$$

FORTUNA (2007) sugere avaliar o desempenho, usando uma representação gráfica das predições (inspeção visual). Esta técnica é chamada de “*4-plot*”, é uma ferramenta útil desde que forneça informações úteis sobre a relação entre os valores preditos e corretos, juntamente com a análise dos resíduos da predição. Uma desvantagem dos métodos visuais é que o julgamento sobre a qualidade do modelo é subjetivo, depende da análise crítica do desenvolvedor do modelo.

A seguir serão descritas as mais populares técnicas de desenvolvimento de analisadores virtuais dando ênfase aos métodos de regressão linear multivariável aplicados neste trabalho. Ao final dessa seção alguns métodos não-lineares serão brevemente descritos.

Regressão Linear Multivariável

A técnica de Regressão Linear Multivariável (MLR) é uma regressão linear entre um conjunto de dados x e um vetor y , cujo parâmetro regressor é calculado através da técnica de mínimos quadrados. O problema de MLR pode ser estabelecido da seguinte forma (GELADI e KOWALSKI, 1986):

$$y = b_1x_1 + b_2x_2 + b_3x_3 + \dots + b_mx_m + e \quad (4.4)$$

$$y = \sum_{j=1}^m b_j x_j + e \quad (4.5)$$

$$y = x^T b + e$$

Onde y é o vetor de variáveis de resposta, composto por m linhas e 1 coluna, x_j é a matriz de variáveis explicativas, formada por n linhas e m colunas, b_j é o vetor de regressores e e é o vetor de resíduos (erro).

$$y = Xb + e \quad (4.6)$$

GELADI e KOWALSKI (1986) argumentam que em um problema MLR podem ocorrer três situações distintas:

- $m > n$: Existem mais variáveis do que amostras. Neste caso, existe um infinito número de soluções para o vetor b , sendo que todas satisfazem a equação. Essa situação deve ser evitada;

- $m = n$: O número de amostras é igual ao número de variáveis. Essa situação dificilmente é encontrada na prática. Todavia, ela fornece uma única solução para b , assumindo que a matriz X não é posto deficiente. Isso permite que se escreva a equação 4.7, onde e é um vetor residual de zeros.

$$e = y - Xb = 0 \quad (4.7)$$

- $m < n$: Existem mais amostras do que variáveis, impedindo de se obter uma solução exata para b . No entanto, pode-se obter uma solução através da minimização da norma do vetor residual e pela equação 4.8.

$$e = y - Xb \quad (4.8)$$

O método mais popular minimizar a norma do vetor residual é o método de mínimos quadrados, cuja solução pode ser obtida da seguinte forma:

$$b = (X^T X)^{-1} X^T y \quad (4.9)$$

A principal limitação da técnica MLR é que a inversa de $X^T X$ (equação 4.9) pode não existir. Ou seja, pode gerar matrizes de posto-deficientes, as quais invertidas geram soluções indefinidas. A este problema dá-se o nome de colinearidade, determinante nulo e singularidade. Uma forma de se resolver este problema é a utilização de um número menor de variáveis explicativas, de modo que $m > n$.

Regressão dos Componentes Principais (PCR)

A técnica PCR permite lidar com matrizes singulares através da aplicação da técnica PCA (*Principal Component Analysis*) na matriz de dados, eliminando a existência de dados correlacionados, se necessário reduzindo a dimensão do sistema para que o mesmo deixe de ser indeterminado.

A presença de dados altamente correlacionados é uma das principais limitações do método MLR. A realização de PCA nos dados de entrada gera um novo conjunto de dados ortogonais, o que garante uma inversa estável.

Mínimos Quadrados Parciais (PLS)

Como mencionado anteriormente o método PCR não é capaz de garantir que a matriz X decomposta em um novo sistema, possua a melhor covariância com a matriz de variáveis de resposta y . No entanto, o método PLS permite que ambos os conjuntos de dados X e de variáveis de resposta y sejam decompostos em um sistema tal que a covariância entre as projeções X e y seja máxima. Esta técnica pode ser aplicada tanto para sistema lineares como não lineares (GELADI e KOWALSKI, 1986).

O método de mínimos quadrados parciais – PLS – utiliza uma decomposição semelhante a do PCA, porém a faz simultaneamente nas matrizes X e y , gerando dois novos espaços, que possuem a máxima covariância possível. Este método basicamente realiza o procedimento PCA de redução da dimensão das variáveis de entrada (matriz X) e de resposta (matriz y) projetando-as para que maximizem a covariância entre as entradas e saídas.

Sabe-se que esta metodologia não garante a melhor covariância entre os blocos X e y, pois sua decomposição é realizada separadamente. Um modo de contornar este problema é permitir que os blocos troquem informação, aumentando dessa forma, a covariância. Em FACCHIN (2005) podem ser encontradas descrições mais detalhadas da estruturação dos algoritmos, o qual referencia o algoritmo de NIPALS modificado de BAFFI *et al.* (1999, apud FACCHIN, 2005) e contribuições no que se refere a verificação de convergência por GELADI e KOWALSKI (1986).

Métodos Não Lineares

Para sistemas em que o grau de não-linearidade é muito elevado, se faz necessário utilizar técnicas que contemplem este comportamento, pois para estes casos uma modelagem linear é insuficiente.

Nas seções anteriores, foi realizada uma revisão a respeito do modelo de regressão linear múltipla (MLR), o qual considera que uma dada variável de resposta se relaciona linearmente com todas as entradas. Em algumas aplicações industriais a relação existente entre as diferentes variáveis do sistema pode apresentar curvaturas consideráveis, que torna a utilização do modelo linear inapropriada. Com o intuito de considerar os efeitos de não linearidade na construção do modelo, algumas transformações nas variáveis explicativas podem ser realizadas. Trata-se de um procedimento simples que permite atuar de forma arbitrária na função que relaciona a resposta com as variáveis transformadas e na transformação realizada em cada entrada. Uma possível alternativa que permite considerar os efeitos da não linearidade na construção de modelos empíricos multivariáveis é a proposta por BOX e TIDEWELL(1962), citada em FINKLER (2003), que é uma extensão do modelo linear comentado anteriormente adicionando um expoente real em cada uma das variáveis de entrada. A inclusão destes parâmetros adicionais implica no uso de procedimentos iterativos do tipo Newton-Raphson para obtenção de uma solução analítica, melhor detalhados em FINKLER (2003).

Segundo KADLEC *et al* (2009) do algoritmo PLS surgiram versões para adaptação tornando o PLS aplicável aos problemas não lineares. O método QPLS foi abordado por WOLD, KETTANEH-WOLD e SKAGERBERG (1998) que propuseram a inserção de uma relação quadrática na relação interna do PLS. Outra técnica é o modelo proposto por LI, MARTIN e MORRIS em 2001, que utiliza a relação linear de BOX e TIDEWELL, BTPLS (1962), comentada anteriormente, tornando assim o sistema mais flexível que o QPLS.

O algoritmo PLS com a lógica Fuzzy é outra extensão da técnica PLS, que foi estruturada em 1965, por ZADEH (apud KADLEC, 2009), para tratar e representar incertezas. Outras alternativas de modelos PLS não lineares, são os modelos híbridos como Neuro Fuzzy-System (NFS) que combina a aprendizagem e habilidades das Redes Neurais Artificiais (RNAs), citada a seguir, com o Sistema de Inferência Fuzzy. O objetivo da fusão dos dois métodos é fornecer um sistema de aprendizagem que proporciona as vantagens de ambas às técnicas envolvidas e, ao mesmo tempo lidar com os seus inconvenientes.

KADLEC et al (2009) cita diversas versões variantes para tornar o PLS aplicável a sistemas não lineares, como PLS *Multi-way* (BRO, 1996), PLS Rede Neural (NNPLS) (QIN e MCAVOY, 1992), PLS Recursivo (SLPR) proposto em QIN (1998) e PLS baseado na técnica de janela móvel, o PLS exponencialmente ponderado (EWPLS) proposto por DAYAL e MACGREGOR (1997).

Outra aplicação bastante disseminada é a utilização de Redes neurais Artificiais (RNAs), ou *Artificial Neural Networks (ANNs)*, que se trata da construção de modelos computacionais inspirada na operação de neurônios biológicos que são as unidades de processamento de informações básicas no sistema nervoso. Inspirados nos neurônios biológicos e na estrutura paralela do cérebro, com capacidade de adquirir, armazenar e utilizar conhecimento experimental, a tarefa do neurônio biológico e artificial é coletar informações nas entradas, processar essas informações e reproduzir a resposta desse processamento de dados (saídas). Uma introdução geral à teoria das RNAs é encontrada em BISHOP (1995, apud KADLEC).

Há uma grande variedade de modelos de inteligência computacional, que são mais ou menos biologicamente plausíveis, entre eles KADLEC et al (2009) destaca as redes *feed-forward*, como a *Multi-Layer Perceptron* (BISHOP, 1995) e *Radial Basis Function Network* (POGGIO e GIROSI, 1990) que são modelos de função de padrão universal. A estrutura de Redes Neurais Recursivas (RNNs), semelhante à das redes *feed-forward*, a única diferença significativa é uma conexão de *feed-back* (MANDIC e CHAMBERS, 2001) que dá à rede a capacidade de extrair e aprender seqüências temporais a partir dos dados, que podem ser de vantagem no contexto dos dados de processo industrial, que frequentemente apresentam padrões de recorrência temporal. A *Self-Organizing Map* (SOM) ou *Kohonen Map* (KOHONEN, 1997) é outro tipo de RNA que é capaz de lidar com problemas sem supervisão e, portanto, aplicável a tarefas de monitoramento de processo. SOMs consistem usualmente de uma camada de entrada e saída (também chamada camada competitiva) geralmente com elevadas dimensões que são organizadas em uma rede bi ou tridimensional. Durante o aprendizado a rede é organizada de tal forma que a baixa representação dimensional dos dados preserva a alta dimensionalidade da arquitetura ou topologia da rede.

Segundo KADLEC et al (2009), a desvantagem das RNAs é que durante o seu aprendizado ela está propensa a ficar presa em mínimos locais, o que pode resultar em um desempenho abaixo do alcançável. Outro problema são as dificuldades com a estimativa da topologia ideal das redes, visto que é muito difícil definir a arquitetura ideal da rede de forma que ela seja tão grande quanto o necessário para conseguir obter as representações necessárias e ao mesmo tempo pequena o suficiente para se ter um treinamento/aprendizado mais rápido. Não existem regras claras para se definir quantas unidades devem existir nas camadas intermediárias, quantas camadas, ou como devem ser as conexões entre essas unidades

4.2.4 Técnica de Correção de Modelos

É muito comum que os modelos criados para predição do comportamento real de processos sofram alterações ao longo de tempo, podendo apresentar desvios relacionados a essas alterações no valor final de suas predições. Neste caso, é necessário que se utilize estratégias para que os modelos se adaptem a essas mudanças, mantendo a qualidade de suas respostas.

Para correção dos desvios de predição dos modelos existem atualmente métodos tanto para adaptação dos modelos quanto para a correção dos desvios existentes nos valores preditos. Todas as técnicas fazem uso de valores de referência, tais como de análises *off-line*, sendo que para cada novo dado disponível é realizada a etapa de correção/adaptação do modelo. Nesta seção serão descritas brevemente as principais estratégias existentes.

Correção de BIAS

A técnica mais tradicional e mais simples de se corrigir qualquer modelo é a substituição do valor da predição no momento em que uma análise laboratorial ou *off-line* for disponibilizada, pelo valor da predição acrescido da diferença (BIAS) entre o mesmo e a análise laboratorial.

Um modelo para aprimoramento de suas respostas é formulado tipicamente da seguinte forma:

$$\begin{aligned}\hat{y}(t) &= \hat{y}_p(t) + y_{BIAS} \\ y_{BIAS} &= \alpha(\hat{y}(k) - \hat{y}_{OL}(k))\end{aligned}\tag{4.10}$$

Onde $\hat{y}(t)$ é a resposta fornecida pelo modelo corrigido no instante t , $\hat{y}_p(t)$ é a predição do modelo no instante sem a correção e y_{BLAS} é a correção do modelo baseada na diferença entre o valor de e o valor determinado off-line, $\hat{y}_{OL}(k)$ no instante k , multiplicado por um fator de escala ou confiança α , o qual é uma função da confiança que se tem na medida laboratorial, sendo tipicamente um valor levemente menor que 1, podendo ser calculado por algum algoritmo mais sofisticado que leva em conta acertos passados.

A principal limitação dessa estratégia é que em alguns processos essa análise off-line ou laboratorial é realizadas em frequência reduzida, podendo variar de 1 a 3 vezes por dia. Como a correção é feita através da soma de um termo constante entre as análises, o erro será sempre carregado até a próxima análise.

Mínimos Quadrados Recursivos

Essa estratégia permite que o modelo se adapte às novas condições de processo, ao invés de simplesmente adicionar um valor de BIAS constante, ou seja, atualizar os valores preditos diretamente, o procedimento é realizado de forma que a cada novo dado disponível, os dados antigos são exponencialmente desconsiderados através de um fator de esquecimento λ_t ($0 < \lambda_t < 1$) e dados novos são adicionados.

$$\begin{aligned}(X^T X)_t &= \lambda_t (X^T X)_{t-1} + x_t^T x_t \\ (X^T Y)_t &= \lambda_t (X^T Y)_{t-1} + x_t^T y_t\end{aligned}\tag{4.11}$$

Onde x_t e y_t são vetores contendo os novos dados no tempo t , $(X^T X)_t$ e $(X^T Y)_t$ são as matrizes de variância das entradas e covariância entre as entradas e saídas no tempo t .

Algoritmos para a utilização desse procedimento em modelos do tipo MLR e PLS podem ser encontrados em QIN (1997), FACCHIN (2005), MacGREGOR e DAYAL (1996).

Filtro de Kalman Estendido – EKF

É uma das técnicas mais utilizadas para a estimação de estados no meio industrial, pois distingue erros tanto no modelo quanto na medição, permitindo a adaptação do modelo a cada nova análise disponível (BARATTI et al., 1995). Descrições detalhadas sobre a técnica podem ser encontradas em GONÇALVES (2009), PAIM (2008), TONEL (2008), BISHOP e WELCH, 2000, GELB (1974), BROWN e HWANG (1992) e OISIOVICI e CRUZ (2000).

4.3 Geração e Pré-tratamento dos Dados

Para gerar os dados foram realizadas perturbações degrau positivas e negativas na T01, de aproximadamente 500kg/h no refluxo, 1000kg/h no fundo e 100kg/h no vapor T01. O impacto na composição de pesados na carga foi retirado do banco de dados histórico da planta, o qual apresenta variações na ordem de aproximadamente 1% no período de teste realizado de 24 horas. O teste foi realizado em malha fechada, com objetivo de manter o processo em controle durante o experimento e aproveitar as características dos controladores para obter o modelo mais adequado para futuro controle.

Os conjuntos de dados abrangem os dados de entrada e de saída. Como entrada do modelo são utilizados os valores das vazões de refluxo, fundo e vapor no refeedor e a composição de pesados na carga da T01. Como saída do modelo, tem-se a composição de buteno no fundo da T02.

A Tabela 4.1 ilustra os intervalos definidos para cada variável perturbada da T01.

Tabela 4.1: Intervalos definidos para construção dos modelos.

Variável	Unidade	Perturbação
Vazão de refluxo	kg/h	500
Vazão de fundo	kg/h	1000
Vazão de vapor	kg/h	100
Composição de pesados na carga	%	1

Como o banco de dados de variáveis das plantas apresenta normalmente magnitudes diferentes, que dependem das unidades e da natureza do processo. Durante os processos de modelagem e/ou identificação dos modelos as variáveis de grande magnitude podem se tornar dominantes em relação às de menor magnitude. Um método bastante comum para resolver este problema é efetuar a normalização dos dados para reduzir erros numéricos e facilitar a convergência da otimização do modelo. Essa normalização é dada pela equação 4.12 aplicada para cada variável.

$$x' = \frac{x - média_x}{\sigma_x} \quad (4.12)$$

Onde a $média_x$ é a estimativa do valor médio da variável e σ_x é desvio padrão estimado da variável.

4.4 Escolha do Modelo, Calibração e Validação

4.4.1 Desenvolvimento do analisador virtual

Das técnicas abordadas anteriormente, a técnica MLR foi escolhida por apresentar uma boa capacidade preditiva no sistema em estudo e pela sua facilidade de implementação. A seguir será descrito o desenvolvimento do modelo e os resultados obtidos na predição da composição do Buteno no fundo da T02.

KANO et al. (2000), baseado nos resultados obtidos por MEJDELL e SKOGESTAD (1990, 1993), conclui que diferentemente da temperatura, a qual possui associação direta com a composição, a utilização de variáveis de processo, tais como vazão de refluxo e carga térmica no refeedor, necessitam da inserção de características dinâmicas aos modelos, pois como essas variáveis geralmente são as manipuladas em sistemas de controle, elas aumentam o erro de predição sem a inclusão da dinâmica.

Desta forma, a metodologia utilizada para obtenção do modelo estacionário incorpora os efeitos dinâmicos pelo ajuste da constante de tempo (Tau) e tempo morto ($Teta$) de cada uma das variáveis selecionadas para predição do modelo. A Figura 4.8 apresenta de forma esquemática o algoritmo utilizado para obtenção do modelo.

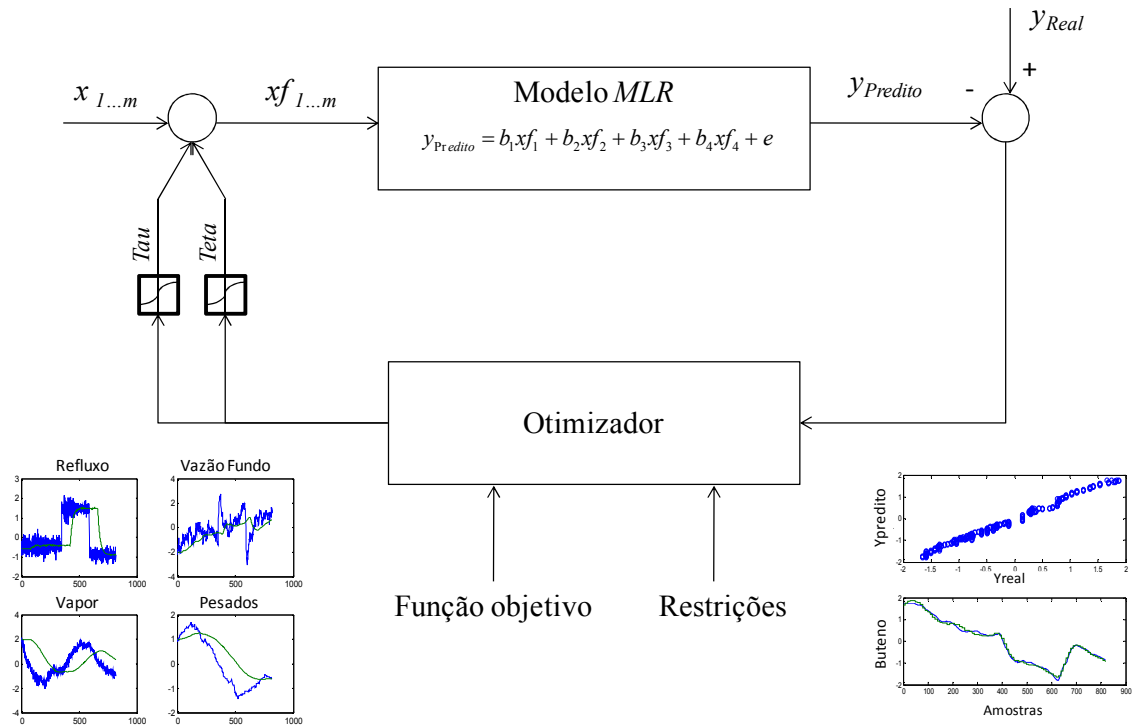


Figura 4.2: Representação do algoritmo de determinação do Modelo.

O algoritmo utiliza 3 rotinas de cálculo, o primeiro arquivo “*otimiza.m*” trata-se de um script básico que chama as função objetivo e faz as conversões necessárias, o segundo arquivo “*fobj.m*” é a função objetivo (ou custo) usada no problema de otimização. Neste caso, a função custo a ser minimizada é o coeficiente de correlação R-Quadrado, reajustada para intensificar a diferença da correlação conforme equação 4.13.

$$RR = -\log\left(\frac{1}{(1-R^2)}\right) \quad (4.13)$$

Por fim, o script “*Direct.m*” que é uma função usada para otimização global, uma das subrotinas usadas na otimização. Inicialmente foi utilizada a função *fminsearch*, porém se alcançou melhores resultados com a otimização global *Direct.m* pelo fato de o sistema apresentar mínimos locais.

O algoritmo de otimização utilizado neste trabalho foi desenvolvido por FINKEL (2003), onde é introduzido o algoritmo de otimização *DIRECT*, descrevendo os tipos de problemas que ele resolve, fornecendo a programação em MATLAB (arquivo *Direct.m*) e uma sinopse de como ele busca o mínimo global.

Os parâmetros de ajustes do algoritmo ou argumentos de entrada do *Direct.m* tiveram que ser customizados, pois os valores propostos no artigo de FINKEL (2003)

não refletiram em bons resultados. Os melhores resultados foram obtidos com os seguintes argumentos *opts* (de 1 a 5): 1e-4, 5000000, 5000, 1000000 e 1.

Onde o *opts* 1 refere-se ao fator de Jones, detalhado em FINKEL (2003), o *opts* 2 é o número máximo de avaliações da função, o *opts* 3 é o número de interações, *opts* 4 é o número máximo de divisão de retângulos, o *opts* 5 defini se o mínimo global é conhecido, caso não se conheça o valor digita-se 1. No caso do valor de mínimo global ser conhecido deve-se digitar 0 e no *opts* 6 inserir o valor correspondente ao mínimo global.

A aplicação dos modelos estacionários em um conjunto de dados de planta resulta nas predições mostradas na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Modelos obtidos a partir de dados de planta para calibração e validação.

Modelo	Descrição	Modelo	Calibração		Validação	
			R ²	PRESS	R ²	PRESS
1	Modelo Estático Linear	$y_p = 3,04598.10^{-5} - 0,00974 Xf1 + 0,11335 Xf2 + 0,20349 Xf3 + 1,10506 Xf5$	0,9382	0,1196	0,8127	0,4258
2	Modelo Estático Não-Linear	$y_p = 0,21405 - 0,00763 Xf1 + 0,16155 Xf2 + 0,2765 Xf3 + 1,16977 Xf4 + 0,05882 Xf1^2 - 0,16747 Xf4^2 - 0,11206 Xf1 Xf2 - 0,2482 Xf1 Xf3 - 0,15954 Xf1 Xf4$	0,9568	0,0844	0,7920	0,6623
3	Modelo Estático Linear com ajuste da parte dinâmica, com Teta e Tau variável.	$y_p = -0,46252 - 0,3853 Xf1 - 0,62656 Xf2 + 0,18608 Xf3 + 0,41125 Xf4$	0,9969	0,0063	0,9483	0,4258
4	Modelo Estático Linear com ajuste da parte dinâmica, com Teta fixo e Tau variável.	$y_p = -0,50916 - 0,52879 Xf1 - 0,46403 Xf2 + 0,21803 Xf3 + 0,59966 Xf4$	0,9962	0,0063	0,9283	0,4149
5	Modelo Não-Linear com ajuste da parte dinâmica, com Teta fixo e Tau variável.	$y_p = -0,59528 - 0,19831 Xf1 - 1,04217 Xf2 + 0,13215 Xf3 + 0,26166 Xf4 - 0,02665 Xf1^2 + 0,04485 Xf3^2 + 0,21084 Xf4^2 + 0,37 Xf1 Xf2 + 0,35817 Xf1 Xf4 + 0,45066 Xf2 Xf4$	0,9983	0,0033	0,8072	0,7707

Onde, *Xf1* é vazão refluxo da T01, *Xf2* é a vazão de fundo da T01, *Xf3* é a vazão de vapor para o retervedor E03 e *Xf4* é a soma dos pesados na alimentação da T01.

Os modelos 1 e 2 são modelos estáticos sem inserção das características dinâmicas, o primeiro é um ajuste linear e o segundo prevê a adição de termos não lineares afim aumentar o R² e reduzir o PRESS.

Os modelo 3, 4 e 5, são modelos estáticos com ajustes das características dinâmicas de tempo morto (*Teta*) e constante de tempo (*Tau*). O modelo 3 minimiza o erro da predição ajustando os valores de *Teta* e *Tau* para cada uma das variáveis de entradas. Já o modelo 4 e 5, ambos prevêem simplificações para facilitar a implementação na planta, ajustando um único valor de *Teta* para todas as variáveis de entrada e os valores de *Tau* para cada uma das variáveis de entrada. Similar ao modelo 2, o modelo 5 contempla a adição de termos não lineares a fim de aumentar o R² e reduzir o PRESS.

Os valores da constante de tempo (Tau) e tempo morto ($Teta$) ajustados nos modelos 3, 4 e 5 podem ser visualizados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Tau e Teta ajustados nos modelos 3, 4 e 5.

Modelo	Tau e Teta ajustados
1	Teta = [68,6868 38,6913 0,3245 29,5073] Tau = [25,4220 54,6564 195,4498 186,1031]
2	Teta = [46,4754] Tau = [46,3047 55,4137 62,9447 199,8665]
3	Teta = [44,6266] Tau = [50,3301 180,7846 34,2931 9,8468]

Observa-se pela Tabela 4.2 que existe uma melhora significativa nos modelos com a inserção das características dinâmicas e termos não lineares. Os Modelos estáticos 1 e 2, sem a inserção de características dinâmicas (Figura 4.3), não apresentaram bons resultados comparados aos modelos 3 e 4.

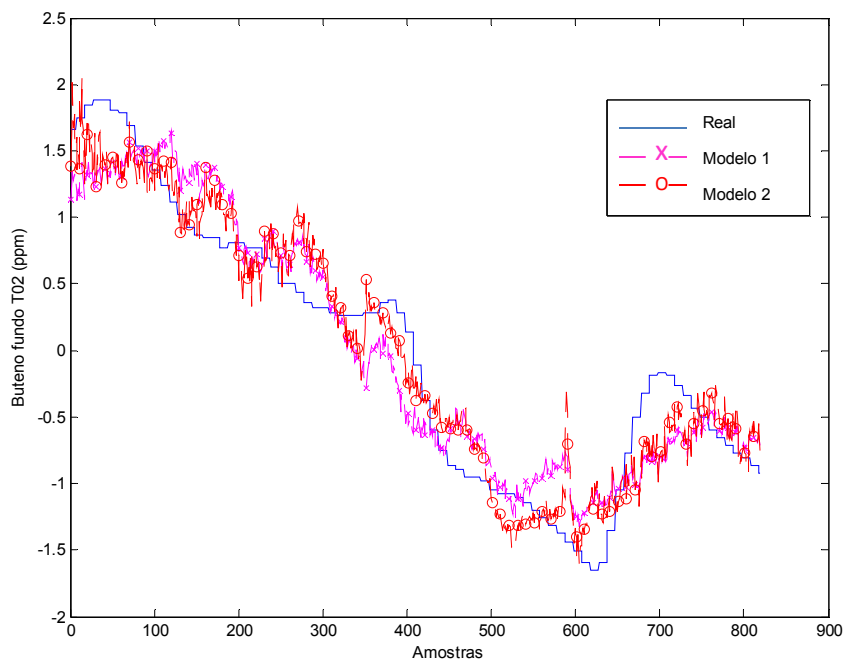


Figura 4.3: Modelos 1 e 2 sem ajuste das características dinâmicas.

Para se escolher o modelo mais adequado deve-se complementar a análise da Tabela 4.2 às análises gráficas a seguir. Observa-se que os modelos 3, 4 e 5 são os modelos mais promissores, visto o bom resultado da Tabela 4.2 e as características

apresentadas nos gráficos das Figuras 4.4 e 4.5, as quais são referente a ordem de tempo de 1 e 3 dias de operação, respectivamente.

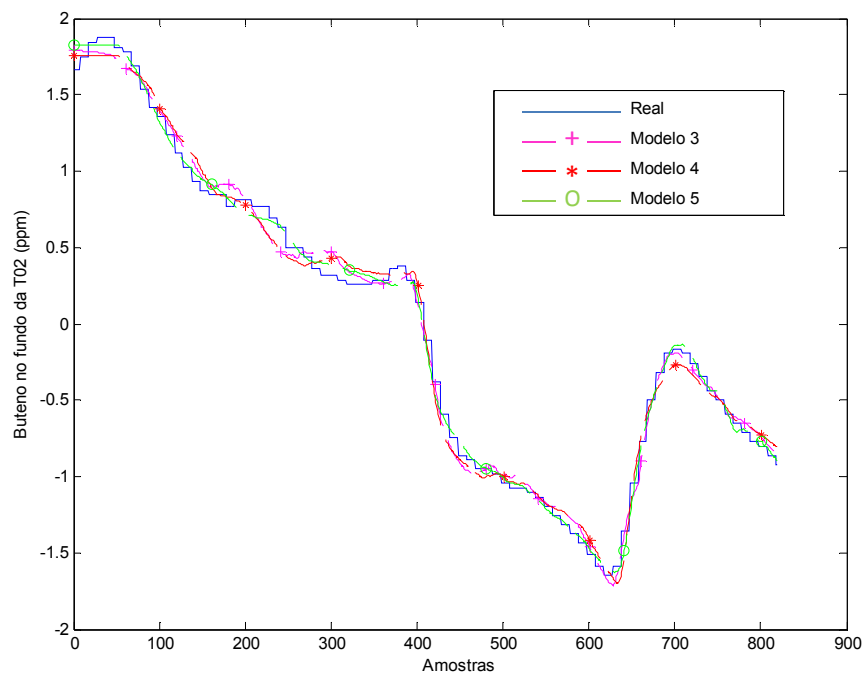


Figura 4.4: Comparação dos melhores Modelos com o banco de dados de calibração.

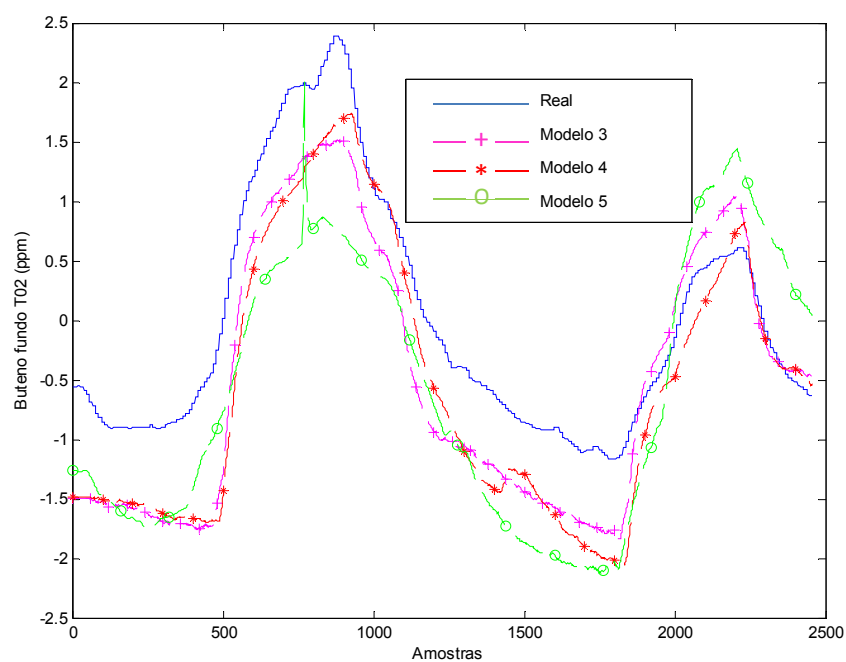


Figura 4.5: Comparação dos melhores Modelos aplicado aos dados de validação.

Os modelos 3 e 4 apresentam resultados similares, porém o modelo 3 apresenta melhores valores de R^2 e PRESS. Por outro lado, o modelo 4 apresenta além de bons valores de R^2 e PRESS, uma capacidade preditiva melhor visto a proximidade dos valores preditos com o reais na análise gráfica da Figura 4.5.

O Modelo 4 apresenta também a vantagem de simplificar a implementação na planta industrial por apresentar um único tempo morto para ajuste do modelo, sendo este passível de ajuste fino ao se configurar o controlador na planta industrial. Por fim, o modelo não linear 5 (azul claro) apresenta ganhos elevados, deslocando a predição para valores muito além da realidade no caso da Figura 4.5.

No caso dos modelos 2 e 5, observa-se que a adição de termos não lineares melhorou suavemente a qualidade do modelo.

Não foi incluso na análise o modelo com a inserção de termos não-lineares e características dinâmicas de $Teta$ e Tau variáveis, pois o modelo apresentou os mesmos resultados do modelo 5, que é mais simples ($Teta$ fixo e Tau variável).

Para validação com os dados de planta, nos 3 modos de operação mencionados no Capítulo 2, foi escolhido o modelo 4 por apresentar bons valores de R^2 e PRESS, pela análise gráfica comentada anteriormente e pela simplicidade da implementação. O modelo rodou na planta durante 6 meses, nas Figuras 4.6, 4.7 e 4.8 são apresentados os resultados que fazem referência aos modos de operação I, II e III.

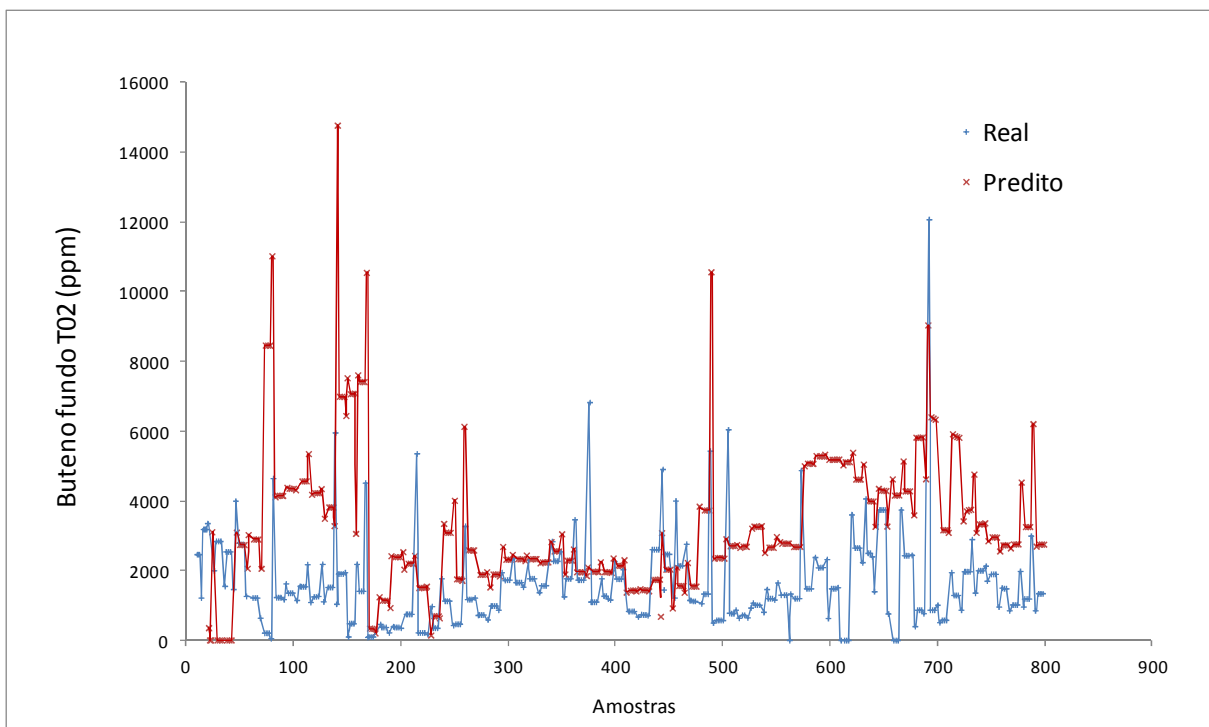


Figura 4.6: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo I de operação – Alta concentração de pesados na carga.

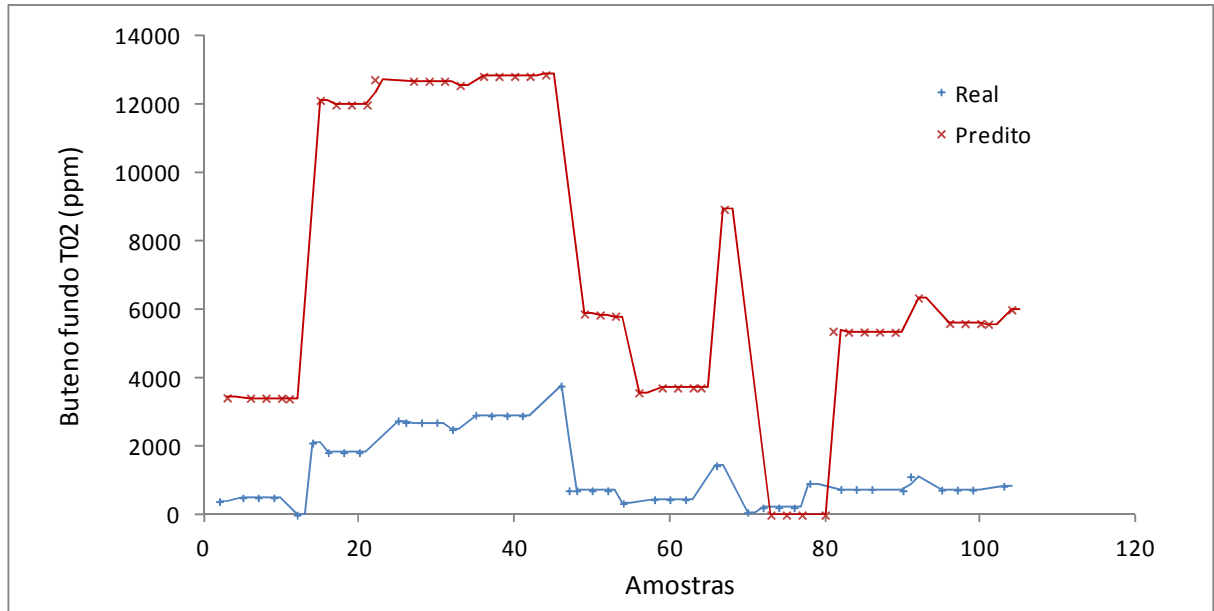


Figura 4.7: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo II de operação – Baixa concentração de pesados na carga.

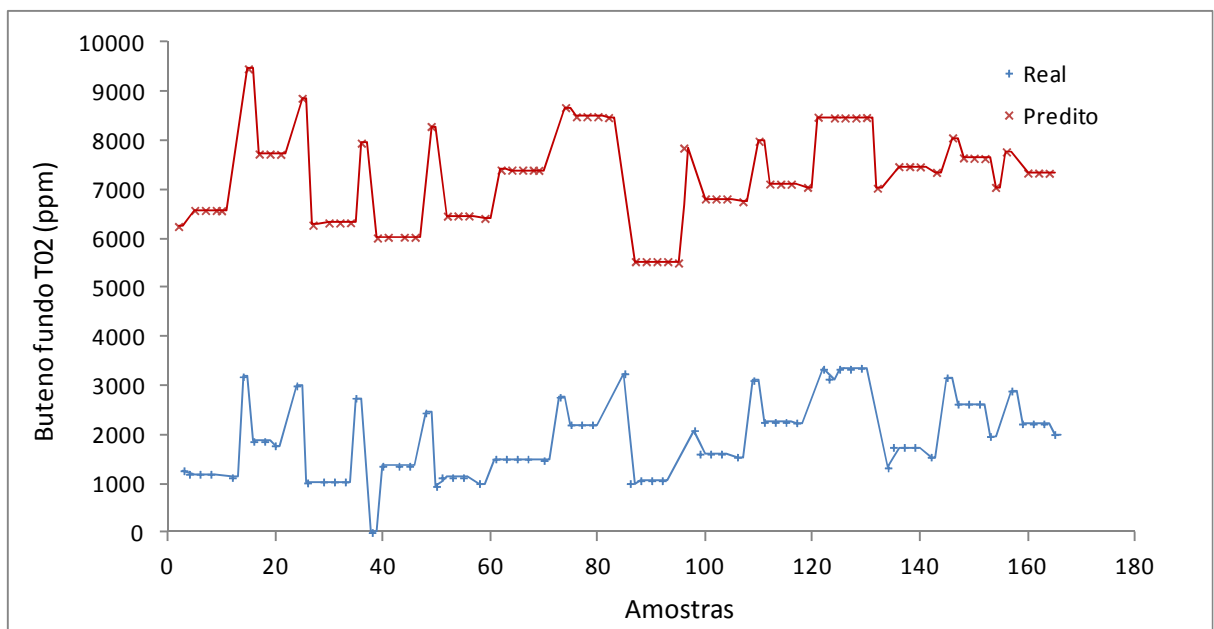


Figura 4.8: Modelo 4 aplicado aos dados de planta no Modo III de operação – Baixa concentração de Hidrogênio.

Observa-se o modelo 4 apresenta bons resultados nos 3 modos de operação para predição de buteno, apesar da presença de Bias que pode ser facilmente corrigida pela técnica de correção de Bias apresentada no item 4.5.

Na Figura 4.6 e 4.8 os momentos em que as predições apresentam discrepâncias significativas em relação a medição real estão vinculadas a ações indevidas da operação como o aumento da retirada de fundo da T02 de forma abrupta, como consequência a válvula de refluxo FV06 satura para repor o nível da T02 aumentando a passagem de buteno pelo interligação de fundo dos condensadores de topo (E01 e E02). Dependendo da magnitude dos movimentos na retirada de fundo da T02, a mesma pode secar o fundo da torre, sendo necessário utilizar um alinhamento de emergência de propano fresco para o fundo da coluna, diluindo a presença do contaminante.

Na Figura 4.7 o momento em que a predição zera é consequência de uma falha de comunicação entre o software Pavilion e o SDCD, assim que a comunicação é restabelecida o Analisador Virtual volta a receber as entradas no modelo para gerar as predições.

4.4.2 Desenvolvimento do analisador virtual usando Pavilion8

O *software* Pavilion8 é o programa que está disponível na planta e pode ser o meio fácil de implementação *on-line* da inferência. O Pavilion8 possui vários módulos sendo um deles destinado ao desenvolvimento de modelos dinâmicos e o restante destinado à configuração e implementação de analisadores/controladores.

Para desenvolvimento do modelo utiliza-se o módulo “*Model Builder*”, dentre os diversos tipos de modelo disponibilizados na literatura, o Pavilion8 utiliza o modelo do tipo ARX, modelo auto-regressivo com entradas externas (*Autoregressive with exogenous inputs*), com o conjunto de dados reais do histórico da planta. Segundo AGUIRRE (2004) algumas vantagens desse modelo é o fato de requerer poucos dados, ter poucos graus de liberdade e representar bem modelos no estado estacionários e dinâmico. A principal desvantagem desse modelo é a falta de liberdade para modelar as propriedades em termo de distúrbio. Este modelo é dado por:

$$y_p = -0,326 - 0,7443Xf_1 + 0,1696Xf_2 + 0,5581Xf_3 + 0,99Xf_4 \quad (4.14)$$

Para comparar com os modelos construídos na seção 4.1.1 (modelo 3, 4 e 5) que não foram desenvolvidos no Pavilion8 será utilizada a denominação “Modelo Pavilion8” conforme as figuras 4.9 e 4.10.

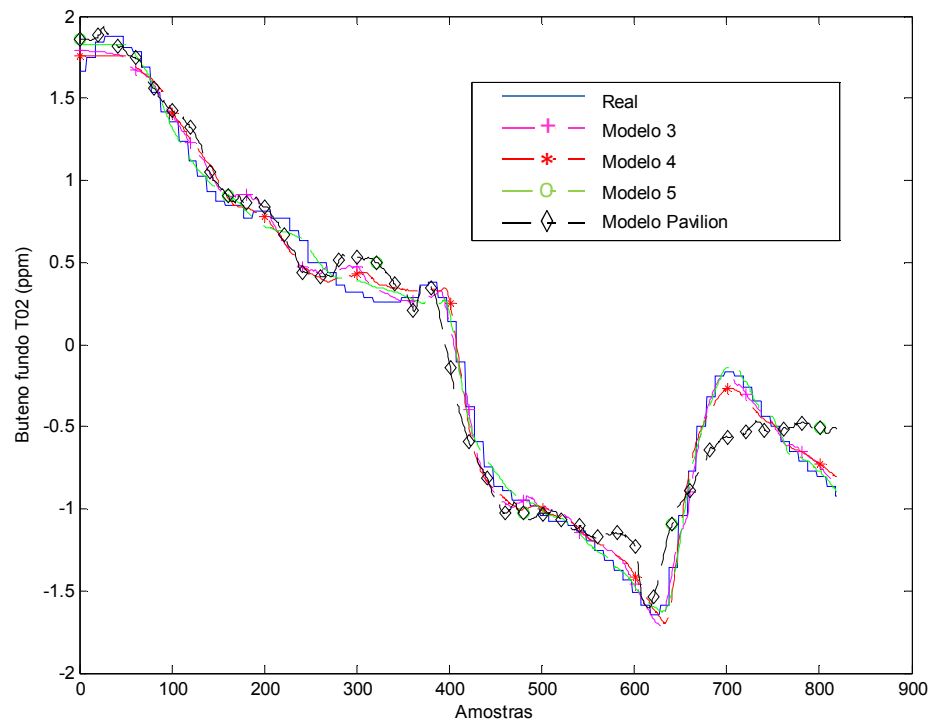


Figura 4.9: Modelo Pavilion8 com o banco de dados de calibração.

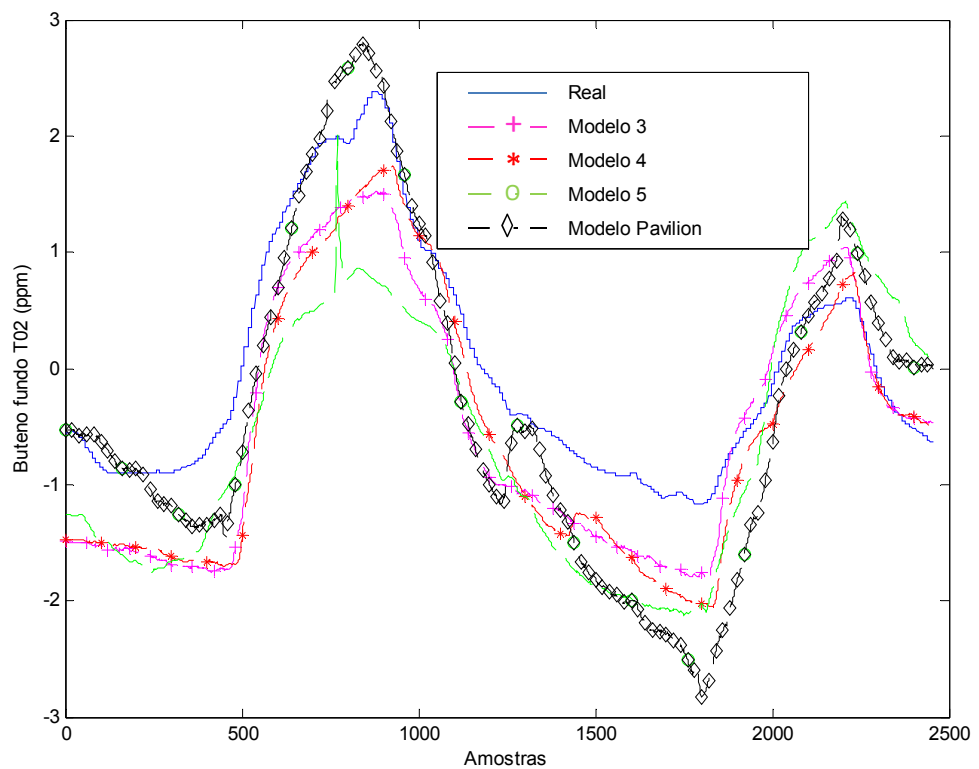


Figura 4.10: Modelo Pavilion8 aplicado aos dados de validação.

Similarmente aos modelos construídos na seção 4.1.1 para inferência de buteno, serão apresentados os resultados referentes aos conjuntos de dados de planta aplicados anteriormente através dos índices R^2 e PRESS descritos anteriormente (Tabela 4.3).

Tabela 4.4: Modelos obtidos a partir de dados de planta para calibração e validação.

Descrição	Calibração		Validação	
	R^2	PRESS	R^2	PRESS
Modelo Pavilion8	0,9700	0,4771	0,9309	0,4771

Observa-se pela análise gráfica e pelos índices de desempenhos, R^2 e PRESS, que o modelo do Pavilion8 mostrou pior desempenho frente ao modelo 4 construído na seção 4.1.1.

4.5 Correção do Modelo

Optou-se por realizar as predições on-line aplicando a técnica mais simples disponível, conhecida como correção de BIAS, técnica utilizada para corrigir o valor final da predição a cada atualização do cromatógrafo.

As análises do cromatógrafo são atualizadas a cada 20 minutos e as predições são calculadas de minuto em minuto, o que faz com que os valores das predições no momento em que a análise do cromatógrafo for disponibilizada sejam substituídos pelo valor da predição acrescido da diferença (BIAS) entre o mesmo e a análise.

Verificou-se após a implementação que a correção de BIAS no modelo 4 corrige muito bem as falhas na predição, para um fator de confiança de 1 (Figura 4.11).

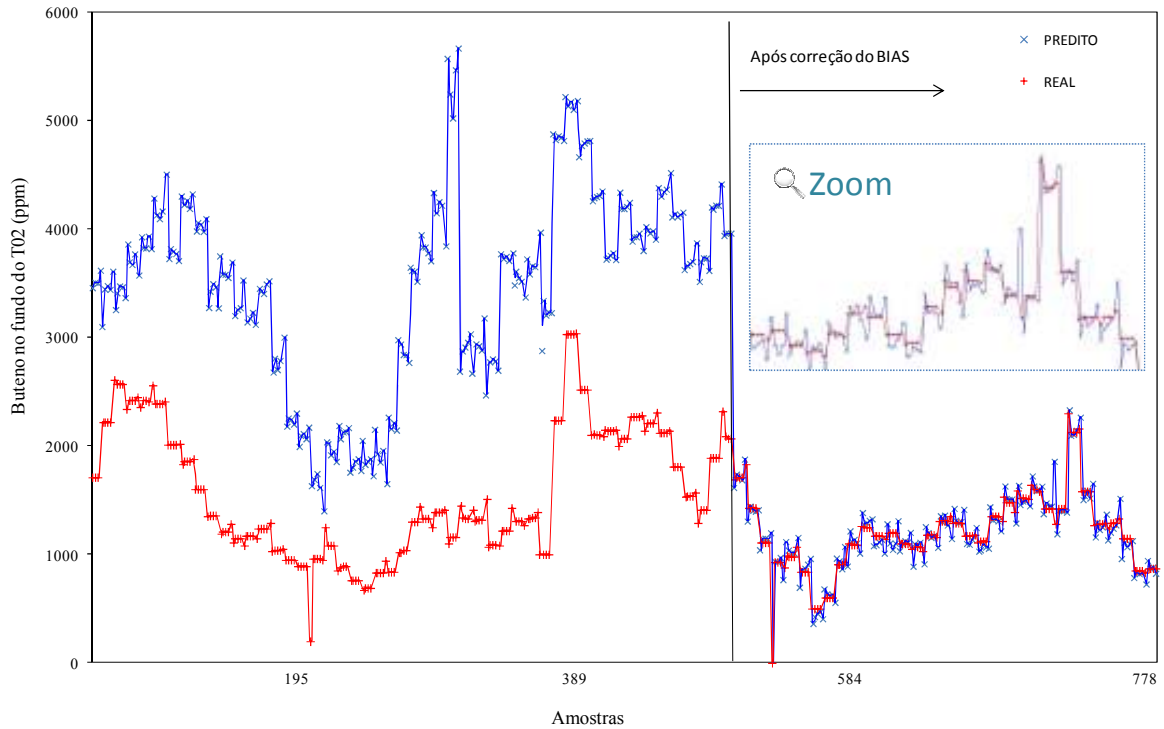


Figura 4.11: Analisador Virtual antes e depois da correção de BIAS.

Ao se reduzir a confiança que se tem na medida do cromatógrafo percebe-se o aumento das falhas na predição, redução do fator de confiança para 0,7 conforme apresentado na Figura 4.12.

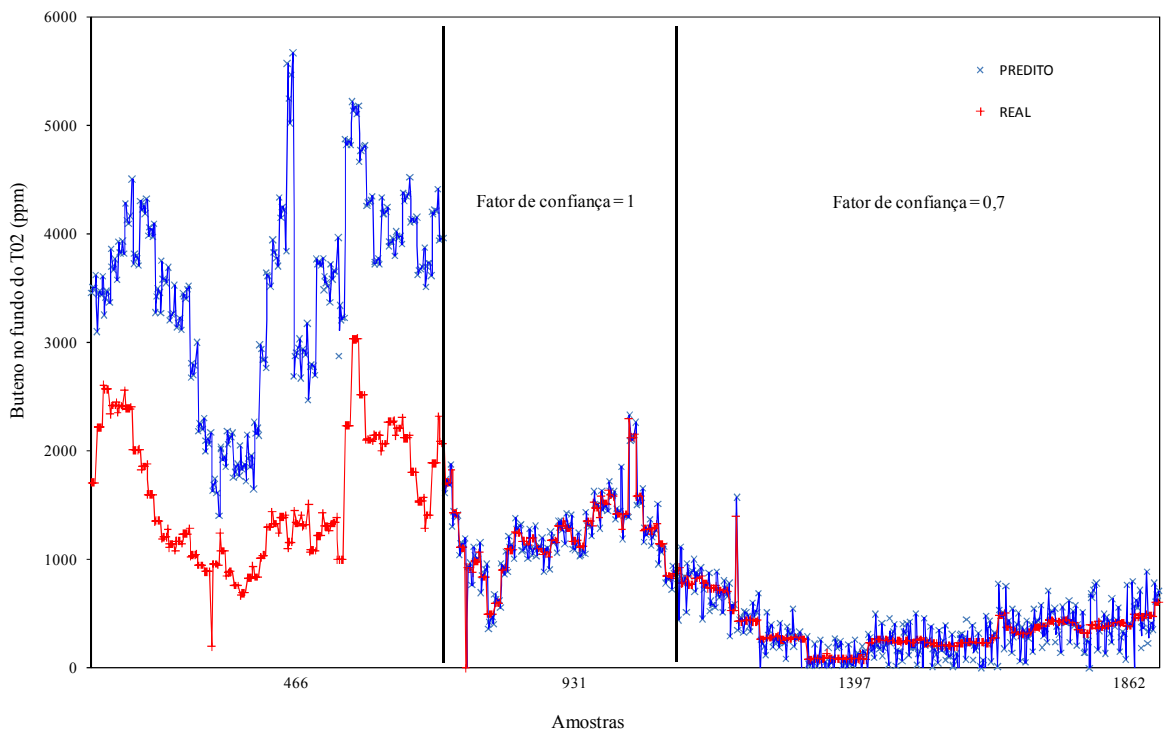


Figura 4.12: Analisador Virtual após a redução do fator de confiança.

Capítulo 5

Desenvolvimento do Controlador e Ganhos Potenciais

5.1 Controle Preditivo Baseado no Modelo

O MPC (Controle Preditivo Multivariável) é uma técnica consolidada na indústria para sistemas multivariáveis, com restrições, que conta com modelos dinâmicos de processo, mais frequentemente modelos empíricos obtidos na identificação de sistema. Neste caso, o modelo será representado pelo modelo linear 4 obtido no Capítulo 4. Este modelo será utilizado para prever o comportamento das variáveis dependentes (saídas) do sistema dinâmico no que diz respeito às mudanças nas variáveis independentes (entradas). As variáveis independentes são os *setpoints* de controladores de inventário que governam o movimento das válvulas de controle de vazão de refluxo e de vazão de vapor. Enquanto que a variável dependente é a restrição do processo (a impureza), ou seja, a inferência da concentração de buteno no propano desenvolvida como o modelo 4 do Capítulo 4 (AIC01 da Figura 3.11, Capítulo 3). O MPC usará o modelo e as medições feitas *online*, neste caso os distúrbios de pesados na carga e na vazão de fundo da T01, para calcular os movimentos nas variáveis independentes, deflagrando um conjunto de ações sobre as suas variáveis manipuladas na forma de *setpoint* para os controladores. Estas variáveis podem ser visualizadas na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Variáveis controladas (CVs), manipuladas (MVs), distúrbios existentes (DVs) e as variáveis medidas (VMs).

Pa râmetro	Descrição
D V	Composição de pesados na carga
D V	Vazão de fundo da T01
C V	Composição de buteno no fundo da T02
M V	Composição medida pelo cromatógrafo
M V	Vazão de refluxo da T01
M V	Vazão de vapor para T01

Para construção do controlador foi utilizado o *software* Pavilion8 licenciado na Braskem para configuração do controlador, onde a estratégia de controle pode ser visualizada na Figura 5.1.

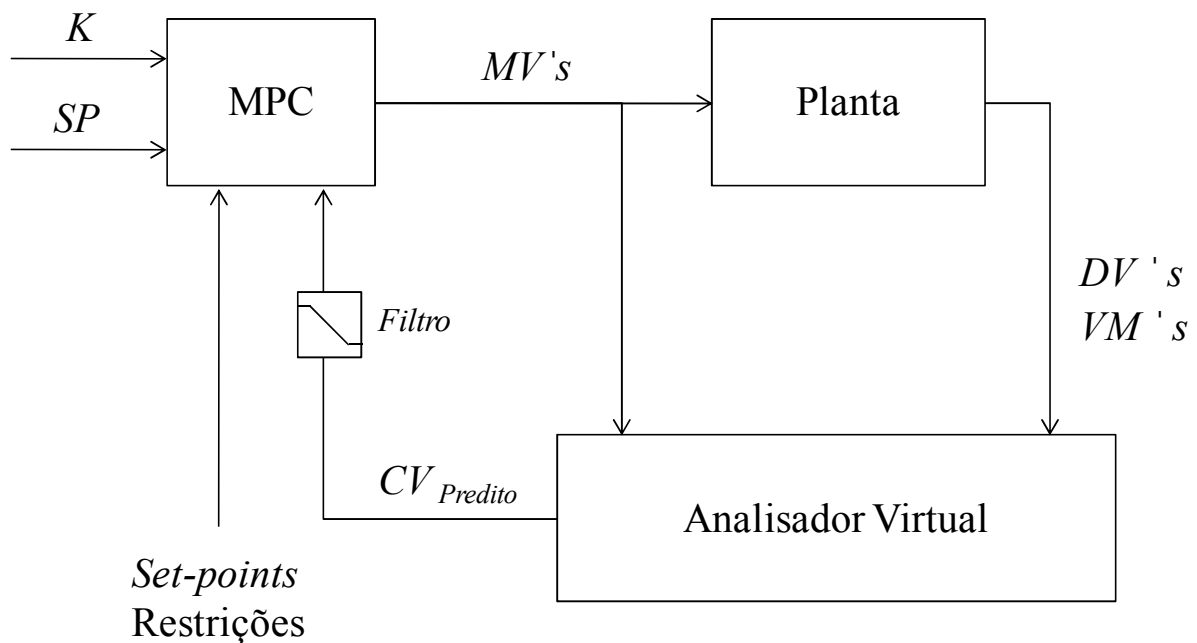


Figura 5.1: Estratégia de configuração do Controlador no Pavilion8.

O MPC, ou o algoritmo de controle da Pavilion8 resolve um problema de minimização da função objetivo a qual utiliza o modelo (analisador virtual) para prever

a resposta das ações de controle nas variáveis controladas em um dado número de horizontes de predição, dentro da função custo, na qual se minimiza o erro entre as trajetórias de referência e a variável controlada e os degraus nas ações de controle.

No *software* Pavilion8 existem diversas funções disponíveis para configuração do controlador, foram utilizadas 3 funções: a função custo “*CV-Desired*” (equação 5.1), a função “*MV Limits*” (equação 5.2) utilizada para definir limites de mínimo e máximo para as variáveis manipuladas, e a função “*MV Rate of Change*” (equação 5.3) utilizada para definir a taxa de incrementos ou decrementos dos movimentos das variáveis manipuladas.

$$J_{CV,D} = \sum_{m=1}^M \sum_{i=1}^T \left((0,1)_{m,(t+i)} \left(\frac{1-e^{-i/w_m}}{1-e^{-T/w_m}} \right) c_{m,(t+i)} \left(\frac{CV_{m,(t+i)} - D_{m,(t+i)}^{CV}}{R_m^{CV}} \right)^2 \right) \quad (5.1)$$

Onde M é o número de variáveis controladas, T é o horizonte de predição, w_m é o peso da trajetória, $CV_{m,(t+i)}$ é o valor da variável controlada, $D_{m,(t+i)}^{CV}$ é o valor desejado de CV , R_m^{CV} é o range da CV , $c_{m,(t+i)}$ é o coeficiente que define o grau de importância desejado em relação às demais funções custo e $(0,1)_{m,(t+i)}$ é o modo que habilita e desabilita o controle da função custo.

$$\begin{aligned} \max(C_{n,(t+i)}^{-,MV}, C_{n,(t+i)}^{-,DCS,MV}) &< MV_n(t+i) < \min(C_{n,(t+i)}^{+,MV}, C_{n,(t+i)}^{+,DCS,MV}) \\ i &= 1, \dots, T \\ n &= 1, \dots, N \end{aligned} \quad (5.2)$$

Onde n é o número de variáveis, $C_{n,(t+i)}^{-,MV}$ é uma *Hard Constraint* usada para especificar a restrição do limite inferior, $C_{n,(t+i)}^{-,DCS,MV}$ é a restrição do limite inferior impostas no SDCD, $MV_n(t+i)$ é a variável manipulada, $C_{n,(t+i)}^{+,MV}$ é uma *Hard Constraint* usada para especificar a restrição do limite superior e $C_{n,(t+i)}^{+,DCS,MV}$ é a restrição do limite superior impostas no SDCD.

$$\begin{aligned} \Delta_{n,(t+i)}^{-,MV} &< (MV_n(t+i) - MV_n(t+i-1)) < \Delta_{n,(t+i)}^{+,MV} \\ i &= 1, \dots, T \\ n &= 1, \dots, N \end{aligned} \quad (5.3)$$

Onde $\Delta_{n,(t+i)}^{-,MV}$ é o mínimo valor de decremento, $\Delta_{n,(t+i)}^{+,MV}$ é o máximo valor de incremento e $(MV_n(t+i) - MV_n(t+i-1))$ é o degrau da mudança das variáveis manipuladas.

Para acompanhamento do desempenho do analisador, o Pavilion8 disponibiliza uma interface que permite a visualização das previsões e ações de controle realizadas. Na Figura 5.2 observa-se as ações de controle visando alcançar a especificação desejada e na Figura 5.3 observa-se as ações de controle, uma vez alcançada a especificação. As Figuras 5.2 e 5.3 foram exportadas do Pavilion8 e representam o período de teste do controlador de 1 dia.

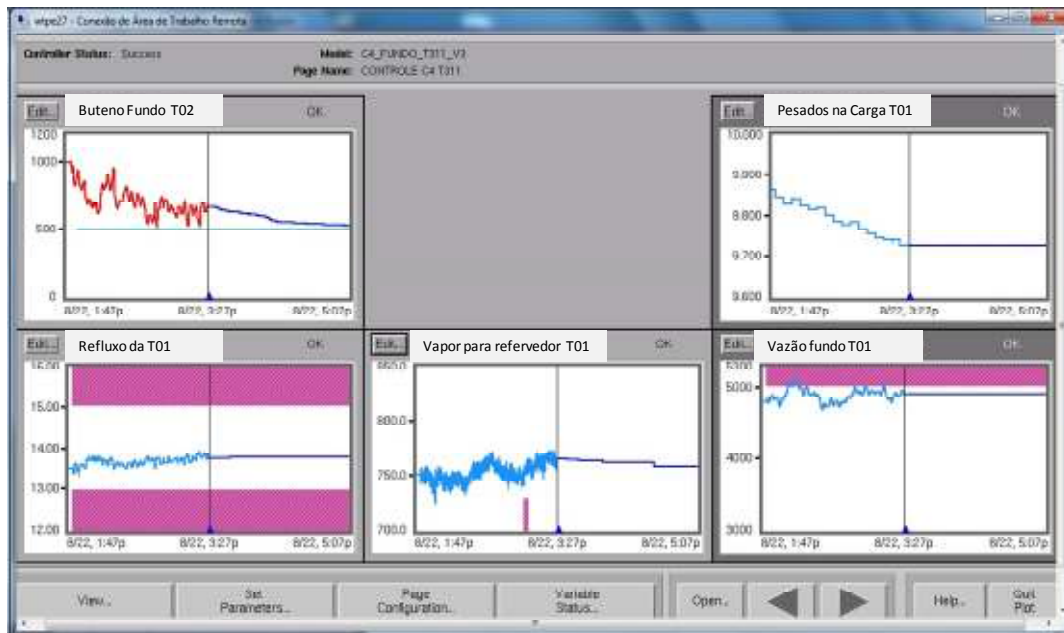


Figura 5.2: Interface de acompanhamento da previsão de buteno, ações de controle passadas e preditas do controlador.

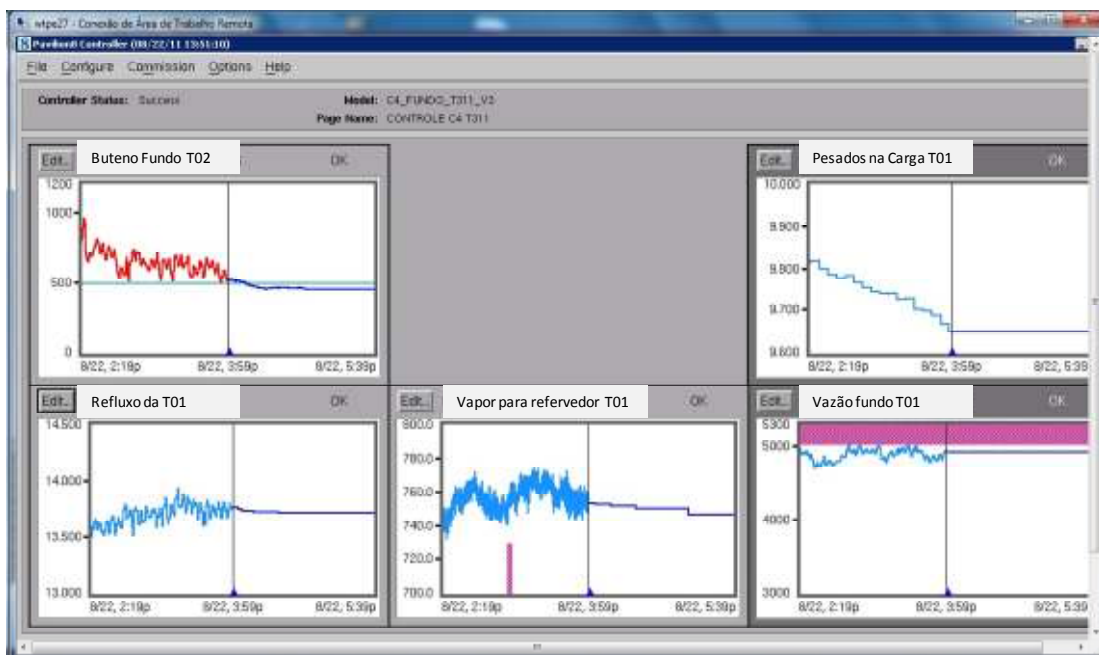


Figura 5.3: Interface de acompanhamento da previsão de buteno, ações de controle passadas e preditas do controlador.

Bons resultados foram obtidos na planta industrial objetivando a especificação de buteno no fundo da T02, na ordem de 500 ppm, e podem ser verificados na Figura 5.4.

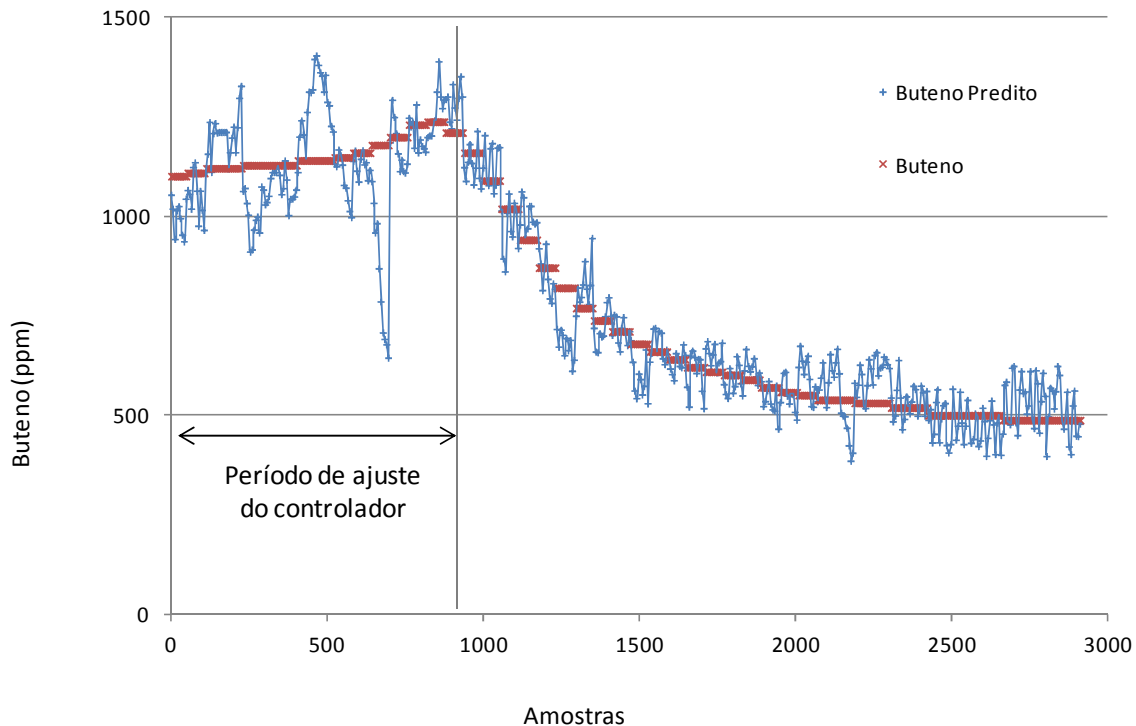


Figura 5.4: Teste industrial com implementação do analisador virtual e controlador.

5.2 Metodologia para traduzir melhoria de controle em ganhos econômicos

5.2.1 Identificação das oportunidades de ganhos

A identificação de oportunidades de ganhos neste estudo de caso deve estar relacionada às necessidades reais da empresa em melhorar o nível atual de seus processos.

Estas oportunidades de ganho são normalmente oriundas de desdobramento das métricas e objetivos das respectivas áreas, da análise do mapa da cadeia de valor dos processos ou avaliação do impacto de iniciativas sobre o resultado financeiro da companhia. Desta forma, as oportunidades de ganhos devem estar associadas à meta e às métricas da organização.

Neste caso, as áreas de oportunidades identificadas que oportunizaram a escolha desse trabalho são:

- Diminuição da recuperação de propano fora da especificação, pela **Redução da Variabilidade da Especificação** do propano que impacta diretamente na qualidade do produto final e operabilidade da planta;
- Diminuição do Custo Variável, pelo **Aumento da Recuperação de Propano e Redução do Consumo de Vapor** uma vez que é melhorado o controle de inventário da T01;
- Aumento da Receita, pela redução de **Perdas de Produção** de Polietileno decorrente de parada ou redução de carga da planta por obstrução de linhas e equipamentos.

A metodologia aplicada para o cálculo de ganhos será detalhada a seguir.

5.2.2 Redução da variabilidade da especificação de buteno

A metodologia aplicada será a mesma utilizada em projetos 6 Sigma (SETA, 2009), conhecendo o nível de sigma do processo da especificação de buteno na T02 e reduzindo o desvio padrão (ou sigma), medida padrão da amplitude do processo.

Considerando-se a hipótese de normalidade e os limites de 3-sigma, a probabilidade no gráfico de média de que pontos estejam aleatoriamente fora dos limites de controle é dada pela equação 5.4.

$$Z_{\mu \pm 3\sigma} = \frac{(\mu \pm 3\sigma) - \mu}{\sigma} \quad (5.4)$$

Onde μ é a média e σ é do desvio padrão.

Os ganhos devem ser estimados após um longo período de operação da nova estratégia de controle e implementação do controle avançado.

5.2.3 Possibilidade de aumento de recuperação de propano

Uma vez resolvido os problemas de controle de inventário da unidade, a oscilação de nível dos condensadores de topo das colunas é reduzida, reduzindo as perdas para flare pelo topo da unidade (Figura 5.5).

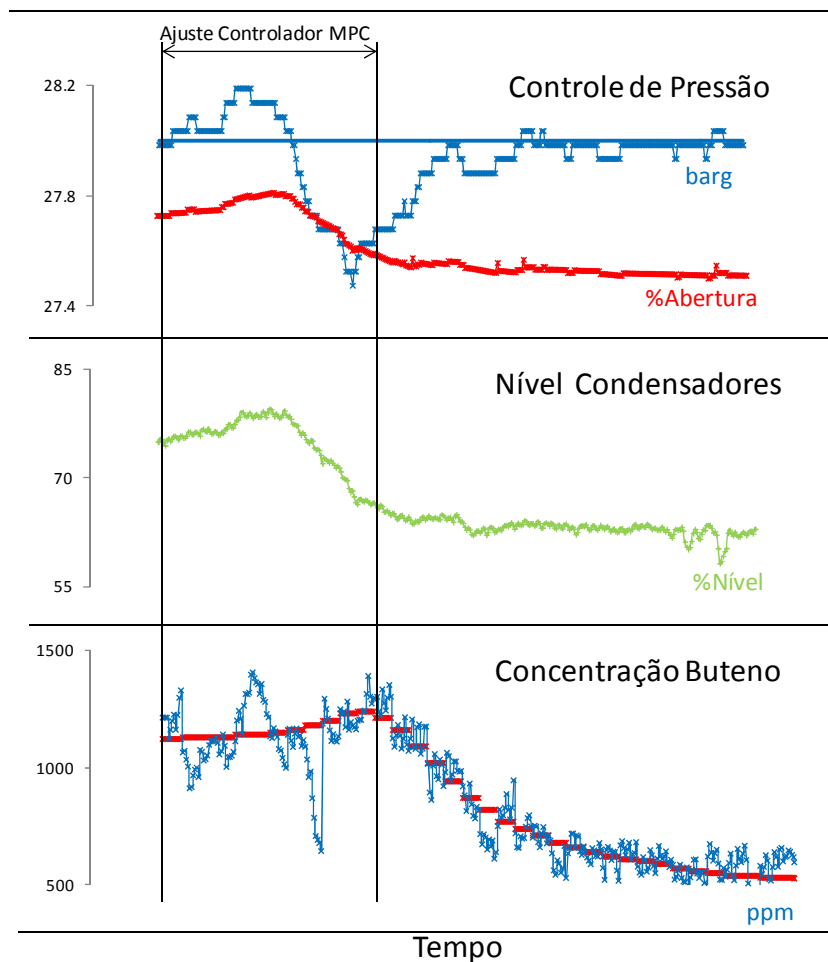


Figura 5.5: Redução de perdas de propano pelo topo da T01.

O ganho em custo variável de propano é mensurado pela equação a seguir.

$$CV_{\text{Propano}} \left[\frac{R\$}{t_{PE}} \right] = \text{Preço}_{\text{Propano}} \left[\frac{R\$}{kg_{\text{Propano}}} \right] * \text{Purga}_{\text{Propano}} \left[\frac{kg_{\text{Propano}}}{t_{PE}} \right] \quad (5.5)$$

Estima-se a oportunidade de ganho de aproximadamente 2% do custo variável total de propano da planta. A base de cálculo do propano perdido é definida pela

composição de propano na vazão de topo das colunas, calculada através da simulação ajustada para dados reais de planta em Aspen Plus.

5.2.4 Redução de consumo de energia

Uma vez ajustado o controlador de composição de buteno, a T01 passa a consumir a quantidade de vapor estritamente necessária para ajuste da composição. Observa-se na Figura 5.6 que após o período de troca do controle regulatório para estrutura L/V (nota 1) e ajuste do controlador (nota 2), o vapor estabiliza em um nível inferior de vazão de vapor e só volta a subir quando a composição de buteno alcança valores abaixo da especificação desejada.

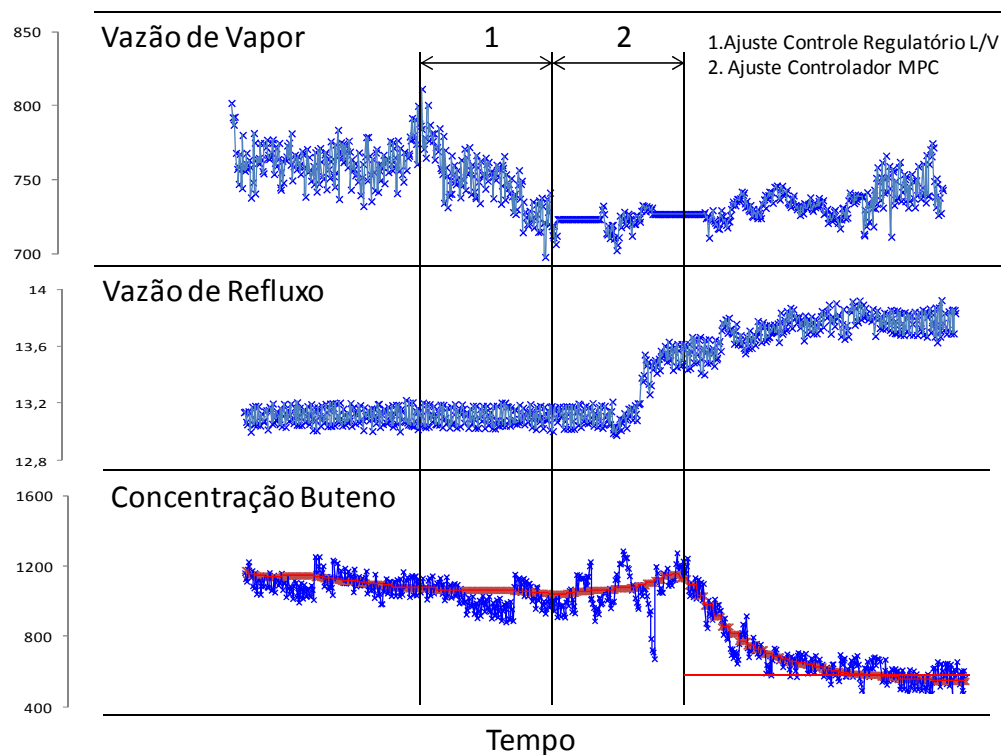


Figura 5.6: Redução do consumo de vapor e especificação de buteno no fundo da T02.

O ganho em custo variável de vapor é mensurado de forma similar a anterior.

$$CV_{\text{Vapor}} \left[\frac{R\$}{t_{PE}} \right] = \text{Preço}_{\text{Vapor}} \left[\frac{R\$}{t_{\text{vapor}}} \right] * \text{Consumo_Vapor} \left[\frac{t_{\text{Vapor}}}{t_{PE}} \right] \quad (5.6)$$

Estima-se a oportunidade de ganho de aproximadamente 2,3% do custo variável total de vapor da planta.

5.2.5 Redução das perdas de produção

Redução das perdas de produção históricas decorrente da contaminação do propano recuperado com buteno.

$$\text{Perda_Evitada} \left[\frac{R\$}{t_{PE}} \right] = \text{Perdas} \left[\frac{t}{ano} \right] * \text{Margem_PE} \left[\frac{R\$}{t_{PE}} \right] \quad (5.7)$$

Ganho por perdas evitadas de aproximadamente 0,06% da produção total da planta.

Capítulo 6

Conclusão e Sugestões para Trabalhos Futuros

Este trabalho concentrou-se inicialmente na utilização de ferramentas utilizadas em projetos de estrutura de controle que têm como objetivo auxiliar na tomada de decisão a respeito da melhor forma de realizar o controle de um determinado processo. Foram simuladas, utilizando o simulador comercial ASPEN, as condições de projeto e real de planta para entendimento das limitações existentes da Unidade Recuperadora de Propano.

A determinação de qual estrutura seria a mais adequada dentre um universo de possibilidades torna indispensável os esforços pela busca de índices ou metodologias confiáveis e claras que não dependam tão somente da experiência de engenheiros para sua efetivação. Portanto, focada nos objetivos de controle da Unidade Recuperadora de Propano e fundamentada em métodos que auxiliem na decisão estrutural de controle foi possível com as ferramentas de avaliação dos índices de desempenho escolher estrutura de controle mais adequada, neste caso a estrutura L/V, onde a composição é controlada através da inferência de buteno no topo da T01 manipulando as vazões de refluxo e vapor.

Com a definição da nova estratégia de controle regulatório, foi possível manter o controle de inventário da unidade estável, reduzindo as oscilações de nível nos condensadores de topo e por consequência o arraste ou perdas de propano pelo topo da unidade.

A metodologia proposta nesta dissertação consistiu na obtenção do modelo estacionário MLR incorporando os efeitos dinâmicos pelo ajuste da constante de tempo (*Tau*) e tempo morto (*Teta*) de cada uma das variáveis selecionadas para predição do modelo. Esta se mostrou muito eficiente frente aos resultados apresentados pelo Pavillion8.

O reajuste da função custo R-Quadrado para intensificar a diferença da correlação se mostrou eficaz para reduzir o erro do modelo predito em relação aos dados reais de planta.

A viabilidade e ganhos potenciais são verificados através da implementação da nova estrutura de controle regulatório L/V, do analisador virtual e do controlador na planta industrial. Baseado nesta implementação, estima-se poder reduzir as perdas de propano em cerca de 2% do custo variável total de propano da planta e o consumo energético por carga processada em 2,3 %. Este resultado ilustra em termos práticos o sucesso da estratégia proposta e implementada.

Portanto, as principais contribuições deste trabalho foram: a definição da estrutura de controle mais adequada para unidade, o desenvolvimento de um modelo que representasse adequadamente o processo e suas características dinâmicas para implementação do analisador virtual, a configuração de um controlador MPC na planta industrial e a metodologia empregada para traduzir melhorias em controle em ganhos econômicos.

Como sugestão para trabalhos futuros, para evitar que o modelo fique defasado na planta devido às mudanças das condições de síntese que podem ocorrer na operação, a inclusão de alternativas de correção e adaptação de modelos como Filtro de Kalman Estendido, o qual permitiria a atualização do modelo gerador da predição e solucionaria os problemas de correção de BIAS, evitando a obsolescência do modelo.

Outra sugestão seria aprimorar a otimização da função preço no Pavillion, para minimizar o consumo de vapor mesmo que a especificação no fundo da T02 seja alcançada. Para estabelecer a quantidade de vapor mínimo requerido para a T01, uma alternativa híbrida para o cálculo dos valores de referência para o consumo ótimo de energia e determinação de curvas de operação é proposto por MÜLLER (2012), o qual apresenta um método baseado na energia teórica para alcançar a especificação de produto em uma coluna de destilação. MÜLLER (2012) apresenta uma nova metodologia para a determinação de curvas de operação de colunas de destilação, onde as curvas são baseadas na energia requerida para alcançar determinado grau de separação em uma torre com número finito de pratos.

Apêndice A

Índices de Desempenho

A.1 Arranjo dos Ganhos Relativos

De acordo com SKOGESTAD E POSTLETHWAITE (1996, apud FARINA, 2000), a Matriz de Ganhos Relativos RGA (Relative Gain Array) foi proposta por BRISTOL (2006) com o objetivo de quantificar o grau de acoplamento entre as variáveis, medida da interação entre pares de saídas e entradas, informando qual acoplamento é mais adequado.

Neste caso da coluna T01 pode-se manipular a vazão de vapor e vazão de fundo para controle da composição de buteno (fundo da T02) e nível da T01. Obviamente, quando se manipula a vazão de fundo da T01 (FV01) se perturba o nível da T01 e altera presença de buteno no fundo da T02. O mesmo ocorre ao se manipular a vazão de vapor do refeedor (FV02). Este sistema é multivariável, descrito por uma matriz de ordem 2x2, pode ser representado pelo diagrama de blocos mostrado na figura A.1, cujas funções de transferências $G_{21}(s)$ e $G_{12}(s)$ representam as interações.

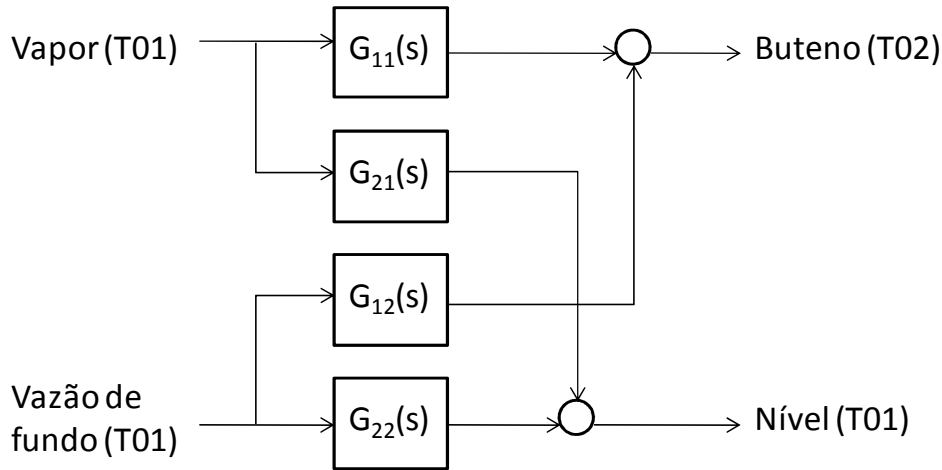


Figura A.1: Sistema multivariável.

Com o objetivo de determinar a eficiência de uma estratégia de controle descentralizada, BISTROL (1996, apud FARINA, 2000) sugeriu desconsiderar a parte dinâmica das funções de transferências (G_{ij}) e considerar apenas os ganhos (K_{ij}), como a figura A.2. A partir desta matriz de ganhos estáticos do processo, ele propôs uma análise simplificada da interação entre malhas de controle de um sistema multivariável. Cada configuração possível (controlada-manipulada) pode ser analisada e aquela que apresentar a menor interação pode ser escolhida para implementação.

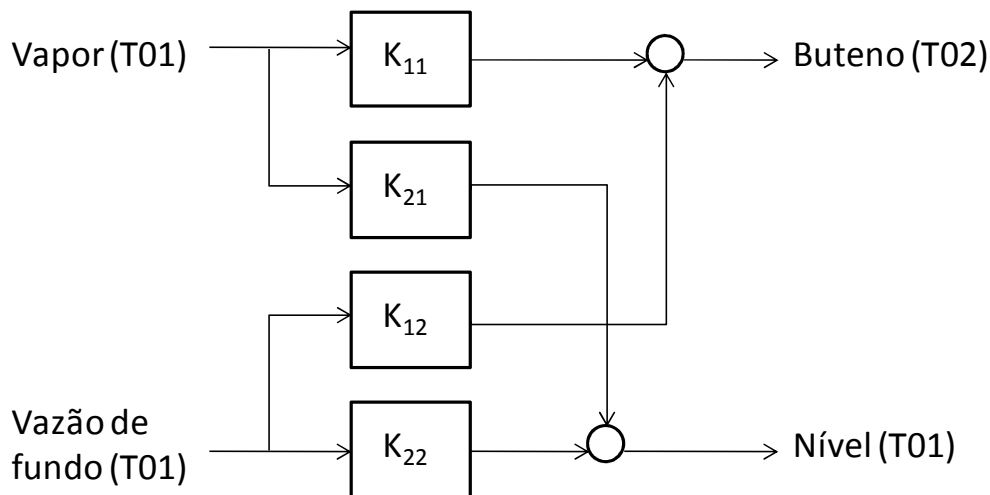


Figura A.2: Sistema multivariável representados por ganhos.

O RGA é obtido a partir da matriz de ganhos estáticos $G(0)$ multiplicando-se elemento a elemento a inversa da matriz dos ganhos pela sua transposta:

$$RGA = G(0) \times (G(0)^{-1})^T \quad (A.1)$$

Para sistemas 2x2 com matriz de funções de transferência $G(s)$ em que seus elementos são representados por g_{ij} , a matriz de ganhos relativos é dada por:

$$RGA(0) = \begin{bmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} \end{bmatrix} \quad (A.2)$$

As análises de interação entre as malhas de controle de um sistema usando informações do RGA são realizadas a partir da magnitude dos valores de λ_{ij} conforme apresentado abaixo:

- $\lambda_{ij} = 1$ - Nesta situação o ganho em malha aberta é igual ao ganho em malha fechada, então, abrir ou fechar uma malha não causa efeito na outra malha. Em outras palavras significa dizer que o sistema é desacoplado, isto é, somente a entrada j atua sobre a saída i , o que possibilita que o sistema multivariável seja tratado como um sistema de múltiplas malhas individuais monovariáveis, resultando no chamado controle descentralizado.
- $\lambda_{ij} = 0$ - O ganho é zero, ou seja, a variável manipulada não tem efeito sobre a controlada;
- $0 < \lambda_{ij} < 1$ - Existe interação entre as malhas, pois o ganho em malha fechada é maior do que o ganho em malha aberta;
- $\lambda_{ij} > 1$ - Significa que há interação, mas também que há menos opções de pareamento (nenhuma no caso 2×2), pois outros λ terão valores negativos, para que a soma resulte 1.
- $\lambda < 0$ - Significa a impossibilidade de controlar o sistema, pois ao fechar outra malha de controle muda o ganho do par ij inviabilizando a operação do controlador da variável de saída i . Ou seja, significa que o ganho visto pelo controlador inverte, devido a interação, quando outra malha é colocado em automático.

BRISTOL (1996, apud FARINA, 2000) desenvolveu esta ferramenta pensando na análise estacionária ($RGA(0)$), porém podemos utilizá-la também para selecionar um emparelhamento dependente da frequência ($RGA(i\omega)$). A análise na frequência é mais importante, pois o interesse é conhecer a interação entre as variáveis na região de atuação do controlador. O cálculo é idêntico ao descrito para o RGA estacionário, porém utilizamos matrizes de ganhos que são dependentes da frequência do sistema.

$$RGA(i\omega) = G(i\omega) \times (G(i\omega)^{-1})^T \quad (A.3)$$

A.1 Pólos e Zeros Positivos

Segundo TRIERWILER (1997), a presença de zeros positivos em determinadas funções de transferência de um sistema multivariável limitam o desempenho alcançável do sistema em malha fechada, constituindo-se de um fator limitante da velocidade de atuação do controlador. Esses zeros podem surgir quando existem efeitos competitivos, de forma que as saídas são nulas quando as entradas **não** são nulas.

Para sistemas multivariáveis, o conceito de zeros usualmente adotado é o de zero de transmissão, z é um zero de transmissão do sistema quando o posto de $G(z)$ é menor que o da matriz das funções de transferência $G(s)$. A presença de zeros positivos não implica na existência de zeros de transmissão. A matriz $G(s)$ pode ter um zero de transmissão mesmo que os canais não tenham zeros positivos. Se alguma variável de entrada atingir seu limite, os canais podem se instabilizar por si só.

Segundo MARCON (2001) os zeros de transmissão desses canais podem não ser problemáticos desde que o sistema não tenha restrições ou caso os zeros possuam valores elevados em relação a ordem de tempo do sistema.

A distância entre o zero e o eixo imaginário, em relação a escala de tempo do sistema, é o que determina a ordem da limitação do sistema em malha fechada. Ou seja, quanto menor o valor do zero maior será a limitação, ou maior será o tempo que o sistema em malha fechada levará para atenuar os distúrbios. Uma descrição mais detalhada sobre zeros positivos pode ser encontrada em TRIERWILER (1997).

Segundo FARINA (2000) os pólos do sistema multivariável são os principais responsáveis pela dinâmica do sistema, podendo ser descritos como os valores de $s = p$ tais que a matriz de ganho $G(p)$ apresenta uma singularidade para o sinal com direção de entrada igual a do pólo. A direção de saída do pólo corresponde à distribuição dos efeitos deste entre as variáveis de resposta do sistema. Neste caso, um sistema pode ser considerado assintoticamente estável se a parte dos pólos de transmissão é negativa e distante da origem.

A.3 Direcionalidade do Sistema

O grau de direcionalidade de um sistema multivariável é a medida de quanto o ganho entre um conjunto de saídas e um conjunto de entradas pode variar, pois diferentes conjuntos e direções de entradas podem afetar as saídas de várias formas. Segundo TRIERWEILER (1997), a direcionalidade de um sistema é calculada com base na decomposição em valores singulares (SVD). Esta análise permite estender o conceito de ganho em sistemas SISO, com uma entrada e saída, para sistemas MIMO (multivariáveis).

Como os valores singulares medem sensibilidade, muitas vezes são chamados de ganhos do sistema. Desta forma, a sensibilidade de um sistema multivariável nas diferentes direções é caracterizada pelos valores singulares (σ) da sua matriz de funções de transferência, que variam entre um valor máximo e um valor mínimo.

A caracterização do grau de dificuldade é realizada por meio de seu Número de Condicionamento, o qual é definido como o quociente entre o maior (σ) e o menor (σ) valores singulares da matriz de funções de transferência do sistema, que no domínio da frequência é dado por:

$$\gamma(G(i\omega)) = \frac{\overline{\sigma}(G(i\omega))}{\underline{\sigma}(G(i\omega))} \quad (\text{A.4})$$

Como o número de condicionamento γ sofre influência do sistema de unidades utilizado para medir as variáveis de entrada e saída, é mais adequado fazer uso do índice escalonando a matriz do processo. Este escalonamento é realizado multiplicando-se matrizes diagonais à direita (R) e à esquerda (L) da matriz do processo (G), que são determinadas a partir da solução do seguinte problema de otimização,

$$\gamma^*(G) = \min_{L,R} \gamma(LG(i\omega)R) \quad (\text{A.5})$$

Para sistemas 2x2 (GROSDIDIER et al., 1985 apud FARINA, 2000) o número de condicionamento mínimo é dado por

$$\begin{aligned} \gamma^*(G(j\omega)) &= \|RGA\|_1 + \sqrt{\|RGA\|_1^2 - 1} \\ \|RGA\|_1 &= \|RGA\|_\infty = |\lambda_{11}| + |1 - \lambda_{11}| \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Por fim, a equação pode ser reescrita da seguinte forma

$$\gamma^*(G(j\omega)) + \frac{1}{\gamma^*(G(j\omega))} = 2\|RGA\|_1 = 2\|RGA\|_\infty \quad (\text{A.7})$$

Em termos práticos, a qualidade de condicionamento está associada à maior ou menor facilidade do sistema ser controlado.

Um sistema bem condicionados apresenta valores de $\gamma^*(G(i\omega))$ baixos. Ou seja, apresenta valores singulares (ganhos) de magnitudes próximas para as diferentes direções, resultando em um valor baixo (próximo de 1) para o número de condicionamento. Estes sistemas são insensíveis a incertezas na entrada.

Já os sistemas mal condicionados apresentam valores de $\gamma^*(G(i\omega))$ altos, apresentando ganhos bem diferentes para diferentes direções. Estes altos valores de $\gamma^*(G(i\omega))$ podem ser devido a pequenos valores de $\underline{\sigma}(G(i\omega))$ ou a altos valores de $\overline{\sigma}(G(i\omega))$, o que segundo SKOGESTAD & POSTLETHWAITE (1996, apud FARINA, 2000) não implicaria obrigatoriamente em um problema. Neste caso, a menos que o sistema esteja muito bem instrumentado, o problema estará associado à redução de graus de liberdade para controle, que gera a necessidade de se definir o que poderá realmente ser controlado.

A.4 Número de Desempenho Robusto

TRERWIELER (1997) introduziu a metodologia RPN como uma maneira sistemática para determinação da controlabilidade de sistemas, uma vez definido os pareamentos entre variáveis de entrada e saída. Esta sistemática já foi aplicada em diversos trabalhos, entre eles dois em especial são referenciados como base para desenvolvimento desta dissertação, são eles: FARINA(2000) e RANGEL (2010).

O RPN é um índice quantitativo que auxilia a escolha de uma estrutura de controle apropriada para o sistema em análise. O RPN leva em consideração ao mesmo tempo, o grau de acoplamento entre as diversas malhas de controle do processo e a região de frequência de operação da malha. É determinado pelo valor máximo da função Γ , definida a seguir:

$$\Gamma(G, T, \omega) \stackrel{\Delta}{=} \sqrt{\overline{\sigma}([I - T(j\omega)]T(j\omega)) \left(\gamma^*(G(j\omega)) + \frac{1}{\gamma^*(G(j\omega))} \right)} \quad (\text{A.8})$$

$$RPN \stackrel{\Delta}{=} \Gamma_{\sup}(G, T, \omega) = \sup_{\omega \in R} \{\Gamma(G, T)\} \quad (\text{A.9})$$

Onde $G(j\omega)$ é o modelo nominal (linear) da planta, T é uma função complementar de sensibilidade desejada alcançável para a saída (em malha fechada), $\gamma^*(G(j\omega))$ é o

condicionamento mínimo do modelo da planta e $\sigma([I-T]T)$ é o máximo valor singular da função de transferência $[I-T]T$.

Equação A.8 é composta por dois termos, o primeiro $\bar{\sigma}([I-T(j\omega)]T(j\omega))$ é chamado de função peso RPN e tem seu máximo valor próximo à frequência de corte do sistema, região na qual as incertezas em sua proximidade são as mais importantes para a estabilidade robusta do projeto de controle.

O segundo termo, $(\gamma^*(G(j\omega))+1/\gamma^*(G(j\omega)))$ é responsável pela avaliação da direcionalidade do sistema.

Segundo a metodologia RPN, a frequência de maior importância para o controle do sistema corresponde à frequência relativa ao valor máximo da função gama, $\Gamma_{SUP}(\omega)$, sendo as matrizes de escalonamento escolhidas neste ponto. Para avaliar o acréscimo na direcionalidade do sistema pode-se utilizar o RPN_{LR} (Número de Desempenho Robusto com matrizes de escalonamento constante, L e R).

$$\Gamma_{LR}(G,T) \stackrel{\Delta}{=} \sqrt{\bar{\sigma}(L_S[I-T(j\omega)]T(j\omega)L_S) \left(\gamma^*(L_S G(j\omega) R_S) + \frac{1}{\gamma^*(L_S G(j\omega) R_S)} \right)} \quad (A.10)$$

$$RPN_{LR} \stackrel{\Delta}{=} \Gamma_{LR_{sup}}(G,T,\omega) = \sup_{\omega \in R} \{ \Gamma_{LR}(G,T) \} \quad (A.11)$$

O RPN indica o desempenho e a robustez para uma dada estrutura de controle, servindo como ferramenta para avaliar o projeto de controladores baseados em uma simples inversão da planta. Este número representa o potencial de dificuldade de se alcançar o desempenho desejado para o sistema com o modelo analisado. Uma boa estrutura de controle é aquela com RPN reduzido. Pelos gráficos das funções Γ e Γ_{LR} contra a frequência é possível concluir se uma determinada estrutura de controle pode ou não gerar sistemas de controle robustos em malha fechada.

A descrição mais detalhada deste índice e a revisão bibliográfica de diversos outros índices que auxiliam o projeto de controladores se encontram melhor detalhados no trabalho de FARINA(2000).

Revisões Bibliográficas

AGUIRRE, L.A. (2004), “Introdução à Identificação de Sistemas”, Belo Horizonte.

ASPEN TECH, (2010). Aspen Technology, consultar <http://www.aspentech.com>

BAUER, E., & KOHAVI, R. O. N. (1999), “An empirical comparison of voting classification algorithms: Bagging, boosting, and variants”. *Machine Learning*, 36, 105–139.

BISHOP, C. M. (1995), “Neural networks for pattern recognition”. USA: Oxford University Press.

BOX, GEP; TIDWELL, PW. (1962), “Transformation of the independent variables”. *Technometrics*, v.4, p. 531-550.

BRISTOL, E.H. (1996). “On a New Measure of Interactions for Multivariable Process Control”, *IEE Trans. Aut. Control*, AC-39, pp.1000-1002.

BRO, R. (1996). “Multiway calibration”. *Multilinear PLS. Journal of Chemometrics*, 10(1), 47–61.

CAMPOS, M.C.M.M; TEIXEIRA, H.C.G., (2008). “Controles Típicos de Equipamentos e Processos Industriais”, 1ª Ed. São Paulo. Ed. Blucher. 2006. 396 p.

CARNEIRO, W. L. (2010). “Destilação”, *Fabrica do Saber – Braskem*

CARVALHO, V.M. (2007), “Avaliação de Desempenho da Técnica de Controle Global no Processo Industrial de Obtenção de Metilaminas”, *Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Setor de Tecnologia, Universidade Federal do Paraná.*

CHOI, S. W., MARTIN, E. B., MORRIS, A. J., & LEE, I. B. (2006). “Adaptive multivariate statistical process control for monitoring time- time-varying processes”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45, 3108–3118.

CONZ, V. (2005). “Desenvolvimento de analisadores virtuais aplicados a colunas de destilação industriais”, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

DALE, E. and SEBORG, D.E. (1994), “A Perspective on Advanced Strategies for Strategies for Process Control”. *Modeling, Identification and Control*, vol. 15, no.3, 179-189.

DAYAL, B. S., MacGREGOR, J. F., (1997), “Recursive Exponentially Weighted PLS and its Applications to Adaptive Control and Prediction”, *Journal of Process Control*, V.7(3), 169-179.

FACCHIN, S. (2005). “Técnicas de análise multivariável aplicadas ao desenvolvimento de analisadores virtuais”, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

FARINA, L.A. (2000). “RPN-Toolbox: uma ferramenta para o desenvolvimento de estruturas de controle”, Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

FINKEL, D.E., (2003). “DIRECT Optimization Algorithm User Guide”, Center for Research in Scientific Computation”.

FINKLER, T. F., (2003) “Desenvolvimento de uma Ferramenta para Obtenção de Modelos Empíricos”, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

FORTUNA L. (2005). “Soft Sensors for Product Quality Monitoring in Debutanizer Distillation Columns”, *Control Engineering Practice*, V.13(4), 499-508.

FORTUNA L. (2007). “Soft sensors for monitoring and control of industrial processes”, Springer.

FREUND, Y., & SCHAPIRE, R. E. (1997), “A decision-theoretic generalization of on-line learning and an application to boosting”. *Journal of Computer and System Sciences*, 55(1), 119–139.

GELADI, P, KOWALSKI, B. R., “Partial Least-squares Regression: A Tutorial”, *Analytica Chimica Acta* V.185, 1986, 1-17.

GERHARD, M. (1995). “Técnicas Avançadas de Controle na Indústria de Processo”, Curso para Poliolefinas e PPH.

HAN, C., & LEE, Y. H. (2002). Intelligent integrated plant operation system for six sigma. *Annual Reviews in Control*, 26(1), 27–43.

KADLEC, P., GRBIC, R., GABRYS, B. (2011). “Review of Adaptation mechanisms for data-driven soft sensor”, *Computers and Engineering*, 35 1-24.

KANO, M., (2000). “Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression”, *Journal of Process Control*, 157-166.

KITTLER, J., HATEF, M., DUIN, R. P. W., & MATAS, J. (1998), "On combining classifiers". IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 20(3), 226–239.

KOHOENEN, T. (1997), "Self-organizing maps". Secaucus, NJ, USA: Springer-Verlag New York, Inc.

KROGH, A., & VEDELSBY, J. (1995), "Neural network ensembles, cross validation and active learning". Advances in Neural Information Processing Systems, 7, 231–238. Kuncheva, L. I. (2004). Combining pattern classifiers: Methods and algorithms. Wiley-IEEE.

KUNCHEVA, L. I. (2004). "Combining pattern classifiers: Methods and algorithms", Wiley-IEEE.

LI, BAIBING; MARTIN, ELAINE B.; MORRIS, A. JULIAN. (2001), Computers and Chemical Engineering, v. 25, p. 1219-1233, 2001.

LUSA, L.P. (2001). "Desenvolvimento de Estratégias de Controle de uma Unidade Desmetanizadora", Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

LUYBEN, W.L. (1990). "Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers", McGraw-Hill

LUYBEN, W.L., TYRÉUS, B.D. & LUYBEM, M.L. (1998) "Plantwide Control", McGrawHill.

MAHONEY D.P., FRUEHAUF P.S., (). "An Integrated Approach for Distillatin Column Control Desing using Steady State Dynamic Simulation".

MANDIC, D. P., & CHAMBERS, J. A. (2001), "Recurrent neural networks for prediction: Learning algorithms, architectures and stability". Wiley.

MARCON, S.M. (2001). "Controle Global de uma Unidade de Extração de Butadieno", Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

MULLER, G.H. (2012). "Determinação de Curvas de Operação de Colunas de Destilação Baseadas na Energia Requerida", Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

PANI, A.K., MOHANTA, H.M. (2011). "A Survey of Data Treatment Techniques for Soft Sensor Design", Chemical Product Process Modeling: Vol.6: Iss. 1, Article 2.

PARANHOS, J.F. (2009). "Desenvolvimento de uma Estratégia de Controle para uma Unidade de Recuperação de Propano", Trabalho de conclusão de graduação, Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

PAVILION, (2004). Process Perfector 7, Off-line User's Guide.

PEARSON, R. K. (2001). "Exploring process data. *Journal of Process Control*", 11(2), 179–194.

POGGIO, T., & GIROSI, F. (1990), "Regularization algorithms for learning that are equivalent to multilayer networks". *Science*, 247(4945), 978–982.

QIN, S. J., MCAVOY, T. J., (1992), "Nonlinear PLS Modeling Using Neural Networks", *Computers Chemical Engineering*, V.16(4), 379-391.

QIN, S. J. (1998), "Recursive PLS algorithms for adaptive datamodeling". *Computers and Chemical Engineering*, 22(4–5), 503–514.

RANGEL, F.B. (2010). "Avaliação do Desempenho de Configurações de Controle Dual em Colunas de Destilação", *Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro*.

RUTA, D., & GABRYS, B. (2000), "An overview of classifier fusion methods". *Computing and Information Systems*, 7(1), 1–10.

SETA (2009), "Treinamento SIX SIGMA Green Belt Operações", *Desenvolvimento Gerencial SETA*.

TRIERWEILER, J.O (1997). "A Systematic Approach to Control Structure Desing", *Ph.D. Thesis, University of Dortmund*.

VALENTINI, G., & MASULLI, F. (2002). "Ensembles of learning machines. In *Proceedings of the 13th Italianworkshop on neural nets*", Vol. 2486 of series lecture notes in computer sciences (pp. 3–22). Springer-Verlag.

VOLK, U. et. al. (1999). "Optimized multivariable predicitive control of an industrial distillation column considering hard and soft constraints", *Control Engineering Practice*, v.13, p.913-927, 3005.

ZADEH, L. A. (1996), "Fuzzy sets". *World Scientific Series In Advances In Fuzzy Systems*,19–34.

WARNE, K., PRASAD, G., REZVANI, S., &MAGUIRE, L. (2004). *Statistical and computational intelligence techniques for inferential model development: A comparative evaluation and a novel proposition for fusion. Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 17(8), 871–885.

WOLD, S., KETTANEH, N., FRIDN, H., & HOLMBERG, A. (1998), "Modelling and diagnostics of batch processes and analogous kinetic experiments". *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, 44(1–2), 331–340.