LINA MARCELA PALACIO GARCÍA

**METODOLOGIAS DE ANÁLISE DE DADOS PARA UM SISTEMA
DE OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL.**

**São Paulo
2013**

LINA MARCELA PALACIO GARCÍA

METODOLOGIAS DE ANÁLISE DE DADOS PARA UM SISTEMA
DE OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL.

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Engenharia

Área de concentração:
Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Galo A. Carrillo Le Roux

São Paulo
2013

LINA MARCELA PALACIO GARCÍA

METODOLOGIAS DE ANÁLISE DE DADOS PARA UM SISTEMA
DE OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL.

Dissertação apresentada à Escola Politécnica
da Universidade de São Paulo para obtenção
do título de Mestre em Engenharia

São Paulo
2013

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, 5 de abril de 2013.

Assinatura do autor _____

Assinatura do orientador _____

FICHA CATALOGRÁFICA

Palácio Garcia, Lina Marcela

**Metodologias de análise de dados para um sistema de otimização em tempo real / L.M. Palácio Garcia. -- versão corr. -- São Paulo, 2013.
100 p.**

Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Química.

**1. Tempo-real (Otimização) 2. Análise de dados (Metodologia)
3. Análise de dados (Modelagem; Otimização) 4. Reconciliação de dados I. Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II. t.**

DEDICATÓRIA

Ao meu Pai o motor da minha vida.

AGRADECIMENTO

Ao Prof. Dr. Galo Antonio Carrillo Le Roux, pela oportunidade, orientação e apoio no desenvolvimento do trabalho. Ao Diego Mendoza, pelas sugestões e valiosa colaboração. Ao grupo de trabalho do projeto RTO pelas contínuas ajudas e acompanhamento nas discussões do trabalho.

A meus bons amigos no Brasil, pelos muitos momentos de fôlego, alegrias e risadas, fizeram da minha estadia no Brasil momentos inesquecíveis na minha vida. Aos colegas do LSCP, pela companhia, amizade e apoio.

A minha família e incondicionais amigos na Colômbia, pelas intermináveis forças e ânimo no transcurso do tempo e por me lembrar sempre que: para vencer é preciso lutar, o maior erro é não tentar e que sempre vale a pena sonhar.

RESUMO

A otimização em tempo real (RTO: *Real Time Optimization*) permite fazer correções, com o menor atraso possível, nas condições de operação de um processo, buscando manter um desempenho ótimo. A RTO, na abordagem clássica, requer um ciclo constante de análise e correção do estado do processo que inclui múltiplas etapas: i) identificação do estado estacionário, ii) identificação e correção dos erros grosseiros, iii) reconciliação dos dados, iv) ajuste dos parâmetros do modelo, v) estimação das condições operacionais ótimas e, vi) implementação das condições no sistema de controle.

Um sistema de análise de dados é necessário na aquisição das variáveis medidas da planta que classifique o estado da operação como válido para atualizar um modelo em estado estacionário. O sistema deve fornecer um modelo atualizado que seja representativo do comportamento real da operação para que seja otimizado em um passo posterior.

Este trabalho é focado na análise de metodologias de detecção de estado estacionário, reconciliação de dados e estimação de parâmetros com as características necessárias que um sistema de RTO requer. Como caso de estudo considera-se uma coluna depropanizadora da PETROBRAS, em que foi feita uma análise da variabilidade associada à instrumentação para melhorar o conhecimento da operação. Além disso, a análise e validação do modelo do processo, permitiu estabelecer faixas de convergência nas especificações do processo e parâmetros. Finalmente, sugere-se que a composição da corrente de alimentação e a queda de pressão na coluna sejam classificadas como parâmetros importantes no ajuste de modelo.

ABSTRACT

Real-time optimization (RTO) allows making corrections in process operation conditions, with the smallest possible delay, in order to provide an optimal performance. RTO, in the classical approach, requires a constant cycle of analysis and correction of process conditions, that includes multiple steps: i) steady state identification, ii) gross errors detection and correction, iii) data reconciliation, iv) parameter estimation, v) economical optimization and vi) implementation of the optimal conditions in the control system.

A data analysis system is required in the plant to classify the operating conditions as valid in order to update a steady state model. The system shall provide an updated model that can represent the real behavior of the operation that will be optimized in a next step.

This work is focused on the analysis of methodologies for steady-state detection, data reconciliation and parameter estimation with the required characteristics that an RTO system requires. As a case-study, a depropanizer column, owned by Petrobras is considered. An analysis of the variability of the instrumentation was performed to allow a better understanding of the process. Moreover, the analysis and validation of the process model enabled drawing convergence boundaries on process specifications and parameters. Finally, it is suggested that the feed composition and the column pressure drop should be considered as important parameters in model fitting.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Estrutura da RTO incluindo a análise de dados.	18
Figura 2- Hierarquia da automação (ZANIN, 2011).	23
Figura 3- Representação do ciclo da RTO na abordagem clássica.	24
Figura 4- Estrutura clássica da RTO em três camadas.	25
Figura 5- Comparação dos M-estimadores.	32
Figura 6- Definição de duas otimização precisas na abordagem clássica da RTO.	33
Figura 7- Parâmetros de validação do Teste F modificado.	37
Figura 8- Esquema de informação contida nos coeficientes da transformada.	40
Figura 9- Representação esquemática de uma decomposição em resolução múltipla	40
Figura 10- Definição Função $g(t) = e^{- t }$ e sua projeção no espaço de <i>Haar</i> (V_0)	41
Figura 11- Representação dos pontos de inflexão na derivada da <i>wavelet</i>	43
Figura 12- Indicadores disponíveis na Refinaria.	51
Figura 13-Fluxograma adotado para a construção do modelo.	55
Figura 14- Perfil de temperatura na coluna com a mudança das eficiências.	58
Figura 15- Mudança da eficiência adiabática do compressor.	59
Figura 16- Perfil de temperatura na coluna mudança da composição da carga.	60
Figura 17- Mudança do produto de fundo.	62
Figura 18- Mudança da Razão de Refluxo.	63
Figura 19- Mudança na temperatura de saída dos trocadores de calor.	64
Figura 20- Efeito das temperaturas de saída dos trocadores no calor global.	64
Figura 21- Balanço de Energia.	65
Figura 22- Mudança da temperatura de saída do refeedor.	66
Figura 23-Comparação das vazões nos <i>refervedores</i> para o modelo de EMSO e ASPEN. ...	68
Figura 24- Dados Simulados para inclinações de retas.	70
Figura 25- Dados Simulados para funções exponenciais.	71
Figura 26-Validação Teste de variância de janela de tempo.	71
Figura 27-Validação do Teste F modificado.	72

Figura 28- Validação Método de Wavelet.	73
Figura 29- Perfil de Temperatura na coluna ao longo do tempo.	74
Figura 30- Resposta de estado estacionário para o método de wavelet.	76
Figura 31- Perfil de temperatura obtido com o modelo e os dados de planta.	80
Figura 32- Perfil de temperatura obtido ajustando as eficiências de Murphree e a pressão. ..	82
Figura 33- Ajuste da composição da carga.	85
Figura 34- Análise de sensibilidade da eficiência adiabática do compressor.	85
Figura 35- Ajuste do modelo na estimação de parâmetros.	89

LISTA DE TABELAS

Tabela 1- Parâmetros de ajuste do teste F modificado.	36
Tabela 2- Composição nominal da carga adotada no projeto da coluna.....	50
Tabela 3- Parâmetros estabelecidos no Modelo.	56
Tabela 4- Faixas de convergência para as especificações.....	57
Tabela 5- Comparação dos resultados do modelo em EMSO com ASPEN PLUS	67
Tabela 6- Resultados erros obtidos para o Teste de variância de janela de tempo.	72
Tabela 7- Resultados erros obtidos para o Teste F modificado.	73
Tabela 8- Desvio padrão das medições de temperatura na coluna durante dois meses	75
Tabela 9- Valores de estado estacionário para análise de sensibilidade	78
Tabela 10- Média das medições das temperaturas da coluna reportadas na planta	79
Tabela 11- Variação da composição da Carga.....	84
Tabela 12- Soma dos erros na temperatura ao quadrado.	84
Tabela 13- Resultados da Otimização do modelo	87
Tabela 14- Parâmetros de Ajuste das funções objetivo.	88
Tabela 15- Comparações das predições do modelo ajustado.	89
Tabela 16- Estimativas da composição da carga	90

LISTA DE SIGLAS

D-RTO	<i>Dynamic Real Time Optimization</i>
DRPE	<i>Data Reconciliation and Parameter Estimation</i>
EMSO	<i>Environment for Modeling, Simulation and Optimization</i>
LS	<i>Least Squares</i>
MPC	<i>Model Predictive Control</i>
NSS	<i>Non Steady State</i>
RTO	<i>Real time optimization</i>
SS	<i>Steady State</i>
VRD	<i>Vapor recompression assisted distillation</i>
WLS	<i>Weighted Least Squares</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Parâmetro de determinação de estado estacionário do teste <i>Reverse Arrangements</i> .
σ^2	Variância.
x_i	Medidas das variáveis na planta.
∂^2	Diferença quadrática média.
R	Parâmetro de correlação de variáveis.
$x_{f,i}$	Medida com filtro.
λ_1, λ_2 e λ_3	Parâmetros do filtro do teste F modificado.
$\phi_{j,k}(\xi)$	Função diádica de escala discretizada.
$\psi_{j,k}(\xi)$	Função diádica <i>wavelet</i> discretizada.
$\phi(t)$	Função de escala no espaço de <i>Haar</i> .
$d'_{j,k}$	Parâmetro do filtro <i>wavelet</i> .
σ_{W_f}	Variância da transformada <i>wavelet</i> .
W_f	Primeira transformada <i>wavelet</i> .
WW_f	Segunda transformada <i>wavelet</i> .
A_j	Aproximações do sinal em cada nível j.
D_j	Detalhes do sinal em cada nível j.
σ_{W_f}	Desvio padrão da primeira transformada <i>wavelet</i>
σ_{WW_f}	Desvio padrão da segunda transformada <i>wavelet</i>
$\mathcal{L}$	Função de máxima verossimilhança.
p_{CN}	Parâmetro da função normal contaminada.
c_C	Parâmetro da função de <i>Cauchy</i> .
c_{Lo}	Parâmetro da função de <i>Logística</i>
c_L	Parâmetro da função de <i>Lorentziana</i>
c_F	Parâmetro da função de <i>Fair</i>
a_H, b_H, c_H	Parâmetro do estimador redescendente de <i>Hampel</i>
$\Phi(\theta)$	Função objetivo na estimação de parâmetros.

θ_i	Parâmetros definidos em um modelo.
$\hat{\theta}_i$	Estimativa do Parâmetro θ_i
η_c	Eficiência adiabática do Compressor
E_R^{MV}	Eficiência de Murphree na zona de retificação.
E_S^{MV}	Eficiência de Murphree na zona de esgotamento
Q_{Bl}	Perdas de Calor no Refervedor
Q_{C1l}	Perdas de Calor no Resfriador 1
Q_{C2l}	Perdas de Calor no Resfriador 2
dP_r	Queda de pressão na zona de retificação
dP_s	Queda de pressão na zona de esgotamento

SUMÁRIO

FICHA CATALOGRÁFICA	4
DEDICATÓRIA	5
1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA	17
2 OBJETIVOS	21
2.1 OBJETIVO GERAL	21
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS	21
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	22
3.1 OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL- RTO.....	22
3.2 DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO.	26
3.3 DETECÇÃO DE ERROS GROSSEIROS.	29
3.4 RECONCILIAÇÃO DE DADOS.....	30
3.5 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.....	30
4 MATERIAIS E MÉTODOS.....	34
4.1 DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO	34
4.1.1 Teste de variância baseado em janela de tempo.	34
4.1.2 Teste F modificado	35
4.1.3 Método de <i>Wavelet</i>	38
4.2 RECONCILIAÇÃO DE DADOS E ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS	44
4.2.1 Enfoque acoplado de Reconciliação de dados e Estimação de Parâmetros	46
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	49
5.1 ANÁLISE DA VARIABILIDADE ASSOCIADA À INSTRUMENTAÇÃO DE CAMPO	49
5.1.1 Descrição do Processo.....	49
5.1.2 Informação da Operação.....	50
5.1.3 Redundância nas medições	52
5.1.4 Conclusões Parciais	54
5.2 MODELAGEM DA OPERAÇÃO	54
5.2.1 Descrição do Modelo	54
5.2.2 Análise de Sensibilidade do Modelo	56
5.2.3 Comparação das respostas fornecidas pelo modelo com uma simulação em ASPEN PLUS	66
5.2.4 Conclusões Parciais	69
5.3 ESTUDO DE MÉTODOS DE DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO	70

5.3.1	Dados Simulados.....	70
5.3.2	Estudo de caso com dados reais.....	74
5.3.3	Conclusões Parciais.....	76
5.4	ANÁLISE DO MODELO JUNTO AOS DADOS DE PLANTA.....	78
5.4.1	Eficiências de Vapor de Murphree.....	78
5.4.2	Queda de pressão na coluna.....	80
5.4.3	Composição da carga.....	83
5.4.4	Eficiência Adiabática do Compressor.....	85
5.4.5	Conclusões Parciais.....	86
5.5	ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.....	87
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	92
6.1	ANÁLISE DA VARIABILIDADE ASSOCIADA À INSTRUMENTAÇÃO	92
6.2	ANÁLISE DO MODELO.....	92
6.3	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO MODELO.....	93
6.4	DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO	93
6.5	ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.....	94
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	95
	APÊNDICE A	98
	PROGRAMAS UTILIZADOS NA VALIDAÇÃO DOS MÉTODOS DE ESTADO ESTACIONÁRIO	98

1 INTRODUÇÃO E JUSTIFICATIVA

A alta competitividade dos processos de refino de petróleo, os quais estão caracterizados pela alta variabilidade no mercado, exigentes restrições dos produtos e elevados custos operacionais, impõe a constante necessidade de implantar estratégias mais sofisticadas de controle e otimização. A Otimização em Tempo Real (RTO: *Real Time Optimization*) é uma importante ferramenta no incremento da rentabilidade, pois, pequenas melhorias nas condições de operação podem resultar em grandes benefícios econômicos (CAMOLESI *et al.*, 2008)

O principal objetivo da RTO é poder operar a planta, em cada instante de tempo, o mais próximo possível das condições ótimas operacionais (SEQUEIRA *et al.*, 2002). O ciclo constante de análise e correção do ponto operacional do processo inclui múltiplas etapas entre as quais estão a detecção do estado estacionário, a identificação e correção dos erros grosseiros, reconciliação dos dados, ajuste dos parâmetros do modelo, estimação das condições operacionais ótimas e implementação dos pontos ótimos no sistema de controle.

O primeiro estágio no desenvolvimento de um otimizador em tempo real é a interface entre a operação e o modelo matemático, como mostrado na Figura 1. Os dados fornecidos pela planta (medidas das variáveis do processo) chegam ao sistema de análise de dados como informação de entrada da RTO. Essas informações recebidas, podem conter diferentes tipos de erros, os quais, se não forem identificados e manipulados, irão se propagar em desajustes do modelo a cada iteração de um ciclo de otimização, afastando o valor ótimo calculado do ponto ótimo real da planta.

Figura 1- Estrutura da RTO incluindo a análise de dados.

O sistema de análise de dados, recebe as entradas do processo e deve começar por identificar janelas em que o processo está em estado estacionário nas quais há dados disponíveis. A RTO usa modelos fenomenológicos de representação do processo em estado estacionário, então é necessário garantir, com o maior grau de precisão possível, que os dados representem o comportamento do sistema nesse estado. Portanto, é preciso um método de identificação de estados estacionários que permita obter resultados claros do comportamento da operação, mas que também seja de rápida execução e de baixo custo computacional, para ser utilizado *online*.

Depois de estabelecer o estado da operação, o sistema tem que tratar os dados, pois, os dados armazenados podem apresentar deficiências, tais como distúrbios de alta frequência; *outliers*; falta ou registros de dados não contínuos; que devem ser corrigidos.

Também é preciso verificar que os dados da operação satisfaçam as restrições dos balanços de massa e energia do processo. Frequentemente, essas medições das variáveis na planta não cumprem estas restrições, devido a erros randômicos ou possíveis falhas na instrumentação, sendo necessário fazer uma reconciliação de dados. Este procedimento de ajuste das medições consiste na resolução de uma minimização de uma função objetivo (normalmente a função dos mínimos quadrados) (ROMAGNOLI,1999), restrita pelas equações de balanço de massa e energia.

Uma etapa subsequente, no desenvolvimento do sistema RTO, é a estimação de parâmetros que ajusta modelo paramétrico aos cenários operacionais reais na

planta. Incertezas nas estimativas dos parâmetros, podem deixar o modelo incapaz de prever com precisão o ponto ótimo de operação do processo, deixando o sistema a uma distância considerável do ótimo (RUCH; FLEET, 2009). Para ajustar o modelo, é usado um procedimento de otimização com uma função de verossimilhança que minimiza a diferença entre as respostas do modelo e os dados experimentais.

Nesses dois passos subsequentes, reconciliação de dados e estimação de parâmetros, é preciso fazer duas otimizações, que podem gerar propagação de erros ao serem feitas separadamente. Para evitar essa propagação de erros, é possível usar estratégias conjuntas (MACDONALD; HOWAT, 1988), resolvendo uma otimização que ajusta tanto os dados medidos quanto os parâmetros do modelo. Uma boa alternativa é formular uma função de verossimilhança com estatísticas robustas (ARORA; BIEGLER, 2001), na qual estejam inclusas as três etapas do processo, possibilitando a diminuição da influência de erros grosseiros, reconciliando os dados com as restrições e ajustando os parâmetros do modelo.

Na implementação da RTO em um processo industrial, é importante ter um conhecimento detalhado da operação, identificar a disponibilidade das medições e avaliar as condições e cenários operacionais, antes de se fazer o ajuste do modelo. Portanto, deve ser feita uma análise da variabilidade e operabilidade da planta, estabelecendo a configuração do processo, a confiabilidade e a consistência nas medições disponíveis das variáveis e possíveis falhas da instrumentação.

As unidades de propano são potenciais candidatas para a aplicação da RTO pois são muito bem instrumentadas e muito similares nas diferentes refinarias da PETROBRAS facilitando a disseminação da tecnologia. Também são atraentes para a RTO pois envolvem o processo da recompressão de vapor VRD (Vapor Recompression assisted Distillation) como técnica de integração energética (MAUHAR *et al.*, 2004) (FINCO; LUYBEN, 1989), misturas com pontos de ebulição próximos, altas vazões de refluxo e colunas significativamente grandes (com mais de 100 pratos).

Este trabalho é uma contribuição ao projeto “Desenvolvimento de Solução em Tempo Real Utilizando Abordagem Orientada a Equações com Implantação em Unidade Industrial” que visa ao desenvolvimento, como projeto de pesquisa, de tecnologia básica de otimização em tempo real. O principal objetivo é estudar

metodologias para o tratamento de dados nas primeiras etapas de desenvolvimento da ferramenta de RTO. Por outro lado, o estudo detalhado do processo permitirá validar e caracterizar um modelo com especificações adequadas, na descrição do processo em escala industrial da coluna depropanizadora (Refinaria de Capuava, Mauá, São Paulo) de propriedade da PETROBRAS S.A.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

O objetivo geral do trabalho é analisar as metodologias que permitirão implementar uma ferramenta para avaliação e análise de dados, isto é, para identificação de estados e estimação de parâmetros capazes de definir um modelo representativo da operação para ser usado na otimização em tempo real de uma unidade de processamento em escala industrial.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar e definir métodos de detecção de estado estacionário com as características necessárias na aplicação da otimização em tempo real.
- Analisar a variabilidade associada à instrumentação de campo e os dados históricos de operação no caso de aplicação industrial.
- Validar e caracterizar um modelo paramétrico representativo da operação com as características necessárias para a implementação da otimização em tempo real.
- Definição de uma função de máxima verossimilhança na especificação do problema de reconciliação de dados e estimação de parâmetros.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL- RTO

A RTO se interessa com decisões econômicas em curtos períodos de tempo. As atualizações são realimentadas continuamente ao processo, baseadas na otimização de modelos detalhados não lineares em estado estacionário (DARBY *et al.*,2011). Ganha importância quando existem mudanças frequentes nas condições de operação, flutuações nas características das matérias-primas ou mudanças econômicas que deixam a operação longe do ponto ótimo. Existem mais de 300 aplicações da RTO no mundo (DARBY *et al.*,2011) abrangendo uma ampla variedade de processos químicos e petroquímicos.

A implementação do otimizador depende da habilidade do sistema em acompanhar as mudanças nas informações da planta. As informações disponíveis a partir das medidas das variáveis de operação tem que ser suficientes para atualizar os parâmetros de ajuste do modelo e assim obter uma representação detalhada do comportamento da operação a cada período de tempo.

Na caracterização das condições operacionais de uma planta de processo, existem diferentes níveis de decisão e ação (DARBY *et al.*,2011), como mostrado na Figura 2, que representam a operação da planta nas condições de operação desejadas para o esquema de produção.

O primeiro nível de planejamento está preocupado por “o Que e o Como” baseado em dados econômicos e previsões de matérias-primas para atingir a demanda dos produtos específicos na produção; o *Scheduling* preocupa-se pelo “Quando”, o tempo preciso de ações e eventos para que sejam factíveis os tempos de entrega dos produtos de entrada, saída e mudanças na operação dos processos; a RTO fornece pontos econômicos ótimos para curtos horizontes de tempo baseadas em modelos detalhados do estado estacionário; o MPC (MPC: *Model Predictive Control*) é responsável pelo controle dinâmico da planta em curtos horizontes de tempo (da ordem de minutos) e preocupa-se pela otimização nas variáveis de controle; e o nível mais baixo é responsável pela regulação do controle em escala de tempo de segundos.

Figura 2- Hierarquia da automação (ZANIN, 2011).

Normalmente, a RTO é aplicada a unidades inteiras das plantas (DARBY *et al.*,2011). Tipicamente, nas refinarias de petróleo, pode se aplicar a unidades de pré-tratamento, unidades de separação ou purificação, incluindo colunas, reatores, separadores e outros equipamentos. Todos os equipamentos devem ser representados no modelo com detalhamento e rigor para atingir o benefício estipulado. Boas considerações no modelo do processo permitem obter restrições econômicas e operacionais com resultados ótimos e economicamente válidos (DARBY *et al.*,2011).

É importante que o modelo represente o estado atual da planta dentro do contexto econômico da operação, ou seja, a otimização deve fornecer pontos para as variáveis que sejam válidos nas condições tanto operacionais quanto de mercado, que a demanda econômica estabeleça para a produção.

Em processos contínuos, o objetivo econômico é otimizado baseado em modelos rigorosos da planta em estado estacionário (SOUZA *et al.*, 2009). O ponto de operação ótimo econômico fornecido caracteriza um conjunto de variáveis controladas e manipuladas. Estes valores são passados a outro nível, onde os controladores MPC mantêm as variáveis de processo escolhidas dentro de uma faixa de *set-points* de modo que seja possível manipular os graus de liberdade do processo dentro de certos limites.

Na RTO clássica, o modelo é desenvolvido em subsistemas em que são feitas a validação das medidas, identificação do regime permanente do processo, atualização da modelagem, estimação de parâmetros, otimização e condicionamento das respostas da otimização econômica ao processo no sistema de controle, como mostrado na Figura 3.

Figura 3- Representação do ciclo da RTO na abordagem clássica.

Classicamente, a implantação da estratégia da RTO é feita em três camadas (ROTAVA;ZANIN, 2005), como mostrado na Figura 4. A camada superior corresponde à camada do otimizador baseado em modelo rigoroso não-linear e tem como resultado valores ótimos fornecidos pelo modelo para as entradas e saídas do processo. Esses valores são enviados para a camada intermediária onde um algoritmo de otimização baseado em um modelo linear ou não linear, produz pontos ótimos econômicos de operação viáveis. Esta camada serve para compatibilizar o modelo da planta utilizado na otimização com o modelo de controle utilizado pelo controlador avançado. Esses pontos ótimos obtidos são utilizados na camada inferior pelo controlador avançado em que um algoritmo de controle multivariável para a manutenção dos valores de operação das variáveis controladas e manipuladas é utilizado.

Figura 4- Estrutura clássica da RTO em três camadas.

A camada de ajuste do modelo é executada numa frequência relativamente baixa dependendo da complexidade e da dinâmica do processo. O intervalo entre uma execução e outra pode chegar a horas, enquanto que a otimização linear e o controlador são resolvidos sequencialmente e na mesma frequência com tempo de processamento da ordem de minutos. A estrutura básica da RTO em cascata com o MPC é adotada como a abordagem padrão (SOUZA *et al.*,2009).

Uma outra abordagem foi apresentada por Roberts e Williams (1981), que formularam o ISOP (*Integrated system optimization and parameter estimation method*), um problema modificado levando em consideração as condições de otimalidade para a formulação do problema de otimização (ROBERTS; WILLIAMS, 1981).

Outra estratégia proposta é a otimização em tempo real dinâmica (D-RTO: *Dynamic Real Time Optimization*) (HUANG, RUI, 2010), na qual a função econômica é diretamente otimizada num horizonte de predição que calcula as ações de controle. Esta formulação resolve um problema não-linear de controle preditivo multivariável com uma função objetivo econômica baseada em modelos dinâmicos. O objetivo econômico é estabelecido dentro dos objetivos de controle do processo. Como resultado se obtém uma estrutura em duas camadas: uma de análise de dados e outra otimização econômica junto com o MPC.

As principais dificuldades na convergência do sistema na implementação da otimização em tempo real são a incompatibilidade na representação da estrutura do modelo rigoroso da planta, o ajuste de parâmetros e a incerteza nas medições. Na prática, raramente o modelo do processo pode ser ajustado com precisão elevada (CHACHUAT *et al.*,2009), resultam incertezas ao tentar descrever um processo complexo através de um modelo de complexidade limitada.

As dificuldades no processo de implementação da otimização em tempo real em uma unidade são descritas como sendo as etapas mais críticas por DARBY *et al.*, 2011:

- A determinação dos preços das correntes intermediárias no processo.
- A estimação das composições das correntes de alimentação.
- A coordenação entre a otimização em tempo real e o sistema de controle multivariável preditivo.
- As mudanças e atualizações nos modelos para a estimação de parâmetros na planta.
- Capacitação dos operadores para manter o sistema operando com os valores dados pela RTO.

3.2 DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO.

Os métodos aplicáveis na análise *online* tem que ter características de rápida execução, alta qualidade nas resposta e baixos custos computacionais. Podem ser utilizados também métodos de detecção de estado estacionário para detecção de falhas, reconciliação de dados.

Para garantir a obtenção de modelos satisfatórios, que representem a operação em condições invariantes com o tempo, é preciso identificar que o processo opera em estado estacionário e assim, ajustar um modelo representativo do comportamento da operação em estado estacionário.

O estado estacionário pode ser determinado quando as medições nas variáveis do processo permanecem estáveis ao longo do tempo, sem correlação de umas com as outras, portanto, medições com baixa correlação em um intervalo de tempo permitem estabelecer um critério de detecção de estado estacionário.

Uma etapa sempre presente na detecção de estados estacionários é estabelecer uma janela de tempo na qual é feita a análise dos dados. É preciso definir um intervalo de tempo que não seja muito grande que precise de um elevado custo em armazenamento de dados e também não muito curto já que o ruído pode afetar as determinações dos parâmetros estatísticos levando a uma identificação errada do estado. O tempo de estabilização de um processo pode dar um indício do

tamanho da janela, no caso de estudo, a coluna depopenizadora tem um tempo de estabilização maior a 13,5 horas¹, um indicativo do tamanho da janela de análise.

Os métodos estatísticos estão classificados em dois grupos, levam em consideração as hipóteses que são feitas *a priori* na distribuição dos erros das variáveis. Nos métodos paramétricos considera-se que as variáveis aleatórias têm uma distribuição específica como, por exemplo, distribuição normal e média zero. Nos métodos não paramétricos não se faz a hipótese de uma distribuição *a priori*.

As técnicas mais simples usadas partem da análise do comportamento das variáveis, em janelas de tempo onde se calculam parâmetros estatísticos, como a média entre valores sucessivos, variância ou o desvio padrão.

Por outro lado, existem métodos mais rigorosos reportados na literatura como o teste *Reverse Arrangements*, que é um método não paramétrico no qual as observações são comparadas ponto a ponto para determinar se o ponto sucessivo é maior (BENDAT; PIERSOL, 2000).

Sejam N observações de uma variável dada, comparam-se quantos valores são maiores do que o primeiro, sendo esse resultado chamado A_1 . Em seguida, compara-se o segundo valor com os subseqüentes e o número de observações maiores do que a segunda é armazenado em A_2 . Repete-se o processo até a penúltima observação, determinando assim A_{n-1} . A soma de todos os A_i , $i = 1, 2, 3, \dots, n-1$, é chamada A.

$$h_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{se } x_i > x_j \\ 0 & \text{caso contrario} \end{cases} \text{ onde } i < j \quad (1)$$

$$A = \sum_{i=1}^{n-1} A_i \quad \text{onde } A_i = \sum_{j=i+1}^n h_{ij} \quad (2)$$

O valor de A, é um parâmetro estatístico estabelecido em faixas para a determinação de correlação entre as medidas. O critério de estado estacionário é definido baseado em que não haja tendência entre as sequencias. De acordo com um limite de confiança estabelecido.

Uma outra alternativa é usar uma interpolação polinomial de grau p, numa janela de tempo curta e fixa, onde $p < N$ (número de pontos contidos na janela).

¹ Informação interna do projeto: dado obtido da simulação dinâmica da coluna.

Estima-se a derivada temporal do polinômio no ponto central da janela como um critério de estado (SAVITZKY; GOLAY, 1964) (LE ROUX, *et al.*, 2008).

Em termos rigorosos, um processo é dito estacionário se e somente se as derivadas temporais de todas as variáveis que participam dele são iguais a 0, para medições aleatórias, escolhe-se um limite ε , com ε pequeno em relação à ordem de grandeza de cada variável, abaixo do qual a variação temporal é considerada desprezível e o sistema estacionário.

Um parâmetro chave no método é a escolha da janela de tempo, já que tem que permitir um número de pontos no qual o polinômio consiga ajustar os valores, e preferivelmente tão pequena quanto seja possível para não ter muitas inflexões e evitar o sobre-ajuste do polinômio.

Jiang *et al.* (2003) analisaram as tendências dos processos a partir dos dados medidos nas variáveis de operação, usando a análise de *wavelets* multiescala (*wavelet multi-scale*) para a detecção de estado estacionário em processos contínuos (JIANG *et al.*, 2003).

Cao e Rhinehart (1995), propuseram um método eficiente para identificação de estado estacionário *online*, através de uma modificação do Teste estatístico F. Esse teste compara a relação das variâncias medidas num mesmo conjunto de dados de duas formas diferentes: primeiro é calculada como o desvio quadrático médio em relação à média dos dados, e depois, é calculada uma outra variância como a diferença quadrática sucessiva. Se a série de tempo estiver no estado estacionário, idealmente, a razão das duas variâncias seria igual a 1.

Numa modificação do teste F (CAO; RHINEHART, 1995) propõe fazer uma filtragem nas medidas das variáveis através de uma ponderação para depois estimar a variância por dois métodos diferentes: um utilizando a diferença entre dois pontos sucessivos e o valor filtrado e outro a cada ponto sucessivo sem filtro.

O método da transformada *wavelet* e o teste F modificado estão explicados com mais detalhes na seção de materiais e métodos.

3.3 DETECÇÃO DE ERROS GROSSEIROS.

Estatisticamente, um erro grosseiro é um erro cuja ocorrência como fruto de uma variável aleatória é altamente improvável (VEVERKA; MADRON, 1997). Os dados fornecidos pelos instrumentos na planta podem conter erros determinísticos ou aleatórios. Os erros aleatórios são pequenos erros advindos das flutuações normais do processo ou da variação aleatória inerente à instrumentação. Os erros sistemáticos são chamados de erros grosseiros e ocorrem ocasionalmente.

Os erros grosseiros podem ser classificados como *outliers* ou *bias*. Os *outliers* são pontos com comportamentos anormais, distúrbios do processo ou falhas na instrumentação. Um outro tipo de erro grosseiro é chamado de *bias*, estes representam situações nas quais são obtidos valores nas medições sistematicamente elevados ou baixos, fora do comportamento regular durante um período de tempo, que normalmente são causados por equipamentos descalibrados ou quebrados.

A presença de erros grosseiros contamina a distribuição de probabilidade dos erros e invalida as hipóteses de distribuição, quando eles não são eliminados previamente. Portanto, é importante detectar e quantificar sua magnitude e, se necessário, eliminá-los do conjunto de dados.

Usualmente, o procedimento de eliminação de erros grosseiros é um passo prévio da reconciliação de dados, através de suposições de parâmetros estatísticos comuns (média, desvio padrão), estabelecendo um certo limite para os erros e eliminando os valores fora destas faixas (ÖZYURT; PIKE, 2004).

Outras abordagens usam funções de distribuição que contemplam a existência dos erros grosseiros. Assim, é definida uma função baseada na máxima verossimilhança, combinando funções de distribuição (Função normal contaminada), para levar em conta as contribuições dos erros randômicos e sistemáticos (TJOA; BIEGLER, 1991).

3.4 RECONCILIAÇÃO DE DADOS.

Frequentemente, os dados da planta não satisfazem às restrições dos balanços de massa e energia devido a inconsistências nos valores reportados. A reconciliação de dados ajusta as medições de processo que contêm erros aleatórios, de maneira que as medições satisfaçam as restrições de balanços de massa e energia, por meio de uma otimização de um sistema, linear ou não linear, dependendo das características do processo. Estratégias simultâneas de reconciliação de dados e eliminação de erros grosseiros são um fator chave na RTO (ÖZYURT; PIKE, 2004).

Historicamente, reconciliação de dados e ajuste do modelo têm sido desenvolvidos individualmente por engenheiros com experiência e conhecimento da planta. Em 1961, foi definido pela primeira vez o problema de reconciliação de dados em estado estacionário (ÖZYURT; PIKE, 2004). Depois, tem-se concentrado em aplicações lineares e não lineares na resolução de uma otimização, minimizando uma função de mínimos quadrados (LS) ou mínimos quadrados ponderados (WLS), entre os valores medidos e os valores calculados que respeitam os balanços de massa e energia. Essas metodologias são apresentadas por autores como Crowe et. al, 1983. Uma outra função objetivo (TJOA; BIEGLER, 1991), utiliza um método baseado na função de probabilidade normal (Gaussiana) contaminada, onde os erros grosseiros presentes nas medições são substituídos por valores reconciliados.

3.5 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.

Muitos dos problemas na aplicação da otimização de processo em tempo real surgem da inabilidade para construir e adaptar modelos físico-químicos adequados para sistemas complexos de processamentos (CHACHUAT *et al.*, 2009). Os modelos de ajuste podem sofrer complicações devido a fatores próprios do processo, erros nas medições, condições que levem a falsos estados estacionários ou possíveis distúrbios que se apresentem na operação. Os esquemas de otimização em tempo real melhoram a execução do processo ajustando o modelo em curtos intervalos de tempo, recalculando assim, parâmetros do sistema selecionados com as medidas disponíveis das condições do processo.

O objetivo é de ter um ciclo fechado de adaptações que dirige os estados de operação aos verdadeiros ótimos do processo através de modelos estruturados.

Este ótimo precisa ser gerado através de métodos de adaptação de modelos, nos quais são usados mecanismos de atualização dos parâmetros de ajuste. Estes parâmetros precisam ser identificáveis, representar mudanças atuais e contribuir com os objetivos da operação no ponto ótimo do processo.

Os parâmetros são quantidades desconhecidas, usualmente consideradas constantes mas com a capacidade de ser variáveis, que são estimados com conhecimento a priori e dados de medições disponíveis (WALTER; PRONZATO, 2010). Um algoritmo de otimização usa a informação disponível das medições nas variáveis para avaliar os melhores valores dos parâmetros que ajustem o modelo para fazê-lo representar a operação.

O procedimento desacoplado da reconciliação e estimação é computacionalmente mais rápido e mais fácil de adaptar com as metodologias existentes de reconciliação, mas não é estatisticamente rigoroso (MACDONALD; HOWAT, 1988). Um segundo enfoque é um procedimento simultâneo estatisticamente rigoroso, em um problema geral onde as equações dos parâmetros estão contidas no sistema das restrições. Macdonald *et al.* 1988, apresentam o desenvolvimento das duas metodologias na reconciliação de dados e estimação de parâmetros. Uma destas metodologias resolve sequencialmente procedimentos separados para reconciliação e estimação, onde se resolve primeiro a minimização da diferença dos valores com as restrições do processos com estatísticas não robustas e depois é feita a estimação dos parâmetros do processo usando a estimação de máxima verossimilhança. O estudo apresentou resultados equivalentes para os dois enfoques na predição das eficiências de Murphree em uma coluna de destilação, ou seja, os procedimentos acoplado e desacoplado são essencialmente equivalentes na precisão dos valores das eficiências estimadas, para o caso de estudado.

O procedimento mais geralmente usado na formulação simultânea do DRPE (*Data Reconciliation and Parameter Estimation*) é a minimização do mínimo erro quadrado das medições (ARORA; BIEGLER, 2001), baseada na presença de erros aleatórios normalmente distribuídos, caso no qual a função dos mínimos quadrados é o estimador de máxima verossimilhança. O problema é que quando os dados contêm erros grosseiros essas hipóteses não são válidas deixando estimações erradas.

Özyurt e Pike (2004)), apresentam funções de verossimilhança robustas no desenvolvimento do problema conjunto, entre as quais estão os estimadores robustos que reduzem significativamente o efeito de pontos fora de tendência.

O estimador de Huber (função Fair, 1981) conhecido como M-estimador é mais robusto comparado com a função dos mínimos quadrados ponderados já que possui menores influências para valores grandes dos resíduos, ou seja, são desconsideradas os pontos afastados do comportamento, *outliers*, que geram maiores erros.

Similarmente, o estimador redescendente proposto por Hampel (1974) tem influência nula para grandes valores de resíduos o que faz deste um estimador robusto (ARORA; BIEGLER, 2001). Na Figura 5 estão plotados os comportamentos das funções dos M-estimadores em função da magnitude do resíduo. É importante observar que a função de Fair incrementa linearmente com elevados valores de residuais, que dá uma maior robustez do que a função dos mínimos quadrados. No entanto, o estimador redescendente, tem um comportamento constante com o aumento do resíduo, ou seja, a presença de erros grosseiros não tem influência nenhuma na estimação de parâmetros.

Figura 5- Comparação dos M-estimadores.
(ARORA; BIEGLER, LORENZ T., 2001).

Estes estimadores são bons candidatos para fazer a reconciliação e a estimação de parâmetros em uma etapa conjunta, pois eles suavizam o efeito da presença de erros grosseiros. Portanto, são os mais atrativos na aplicação da RTO para cumprir com as três etapas simultaneamente, requerendo somente duas otimizações definidas como se mostra na Figura 6.

Figura 6- Definição de duas otimização precisas na abordagem clássica da RTO.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO

Os métodos estatísticos para análise do comportamento das variáveis são desenvolvidos na identificação de estados estacionários em intervalos fixos de tempo. A medida da correlação dá um indício na definição do estado, e, portanto as medições não correlacionadas permitem detectar o estado estacionário.

Nesse estudo foram validados os métodos reportados na literatura, com as características requeridas para a aplicação da RTO.

4.1.1 Teste de variância baseado em janela de tempo.

A determinação do comportamento da planta para detectar estados estacionários pode ser feito usando o teste estatístico F de variância, que testa a razão entre duas formas de cálculo da variância. Uma estimativa da variância é dada por:

$$\sigma^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (3)$$

Onde x_i corresponde a uma medida da variável, $\bar{x}$ é a média das medidas avaliada em uma janela de tempo de tamanho N .

Outra estimativa da variância é dada pela diferença média quadrática sucessiva é:

$$\partial^2 = \frac{1}{(N-1)} \sum_{i=1}^{N-1} (x_{i+1} - x_i)^2 \quad (4)$$

A razão entre os dois parâmetros determina o valor do parâmetro R que é usado como índice de estacionariedade da variável. Idealmente, os valores próximos ou superiores a 2 indicam que os dados não têm correlação e podem ser considerados como estando no estado estacionário.

$$R = \frac{\partial^2}{\sigma^2} \quad (5)$$

Como é um teste estatístico, o número de pontos usados na determinação deve ser considerado para o cálculo do nível de confiança. Assim, são utilizadas tabelas com a porcentagem do nível de confiança (geralmente fixado em 95%) e o número de dados usados. É comparado o valor estimado de R (valor de correlação) com o valor apropriado reportado na tabela para determinar se este valor representa uma condição de estado estacionário.

Para fazer a validação do método, com dados simulados, foi usada uma janela de 60 pontos, o que corresponde a um R crítico de 1,5814. Se R apresentar valores superiores a este, o processo é considerado em estado estacionário.

4.1.2 Teste F modificado

Cao e Rhinehart (1995), apresentam um método eficiente para a identificação de estado estacionário *online*, no qual é feita uma filtragem nas medições das variáveis através de uma ponderação linear com as constantes do filtro e depois é estimada a variância mediante dois métodos diferentes: uma entre cada ponto e o valor filtrado e outra a cada ponto sucessivo.

Seja $X_1, X_2, \dots, X_N$ a série temporal a ser analisada. Inicialmente realiza-se o cálculo de uma média móvel linear:

$$x_{f,i} = \lambda_1 x_i + (1 - \lambda_1) x_{i-1} \quad (6)$$

Com λ_1 entre 0 e 1. Esses valores filtrados poderiam substituir a média $\bar{x}$ no cálculo da variância v^2 de acordo com

$$v^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - x_{f,i})^2 \quad (7)$$

No entanto, este cálculo é custoso do ponto de vista computacional e é substituído por

$$v_{f,i}^2 = \lambda_2 (x_i - x_{f,i-1})^2 + (1 - \lambda_2) v_{f,i-1}^2 \quad (8)$$

A outra estimativa da variância é dada por

$$\delta_{f,i}^2 = \lambda_3(x_i - x_{i-1})^2 + (1 - \lambda_3)\delta_{f,i-1}^2 \quad (9)$$

A relação entre as variâncias é estimada, definindo-se a razão R da seguinte maneira,

$$R_i = \frac{(2-\lambda_1)v_{f,i}^2}{\delta_{f,i}^2} \quad (10)$$

Se o ruído for branco (não correlacionado no tempo) e gaussiano, espera-se que a razão entre as duas variâncias seja aproximadamente igual a 1. Na prática, este é apenas um caso limite e a razão R é geralmente maior que 1. Assim define-se um limite máximo aceitável para R, R_{crit} . Esse limite depende da forma com que a filtragem foi executada.

Os parâmetros do filtro são definidos preferencialmente com valores baixos para reduzir a influência do ruído nas estimativas das variâncias. O parâmetro λ_1 é determinado baseado em um critério de tolerância de erros tipo II (a variável é declarada em estado estacionário quando ela realmente não está). Valores maiores levam a atrasos na detecção do estado, portanto fixa-se o valor tão pequeno quanto erros tipo II sejam tolerados. Cao e Rhinehart (1995) sugerem que as constantes λ_2 e λ_3 que são usadas para a estimativa das duas variâncias no cálculo do R proposto que sejam selecionadas iguais, mas Bhat e Saraf (2004) afirmam que quando $\lambda_2 > \lambda_3$ é escolhido é observado uma redução dos erros tipo I e II e um atraso na detecção do estado não estacionário.

Na validação do método foram comparadas duas referências para estabelecer os valores dos parâmetros λ_1 , λ_2 e λ_3 . Os valores sugeridos (CAO; RHINEHART, 1995) apresentam maiores limitações na identificação do estado para níveis de ruído elevados. Bhat e Sarraf, (2004) sugeriram diminuir o valor de λ_1 , diminuindo assim a porcentagem de erros tipo I, mas aumentando a porcentagem de erros tipo II. Na Tabela 1 estão relacionados esses valores.

Tabela 1- Parâmetros de ajuste do teste F modificado.		
Parâmetro	(Cao e Rhinehart 1995)	(BHAT e SARAF, 2004)
λ_1	0,2	0,06
λ_2	0,1	0,25
λ_3	0,1	0,03

Na Figura 7 são apresentados os resultados obtidos pelo teste na análise dos diferentes valores dos parâmetros para medições com ruído. Foram testados os dois conjuntos de parâmetros para um nível de ruído de 1% com a mesma inclinação da reta, programando uma função de primeira ordem que começa com inclinação zero e aumenta a inclinação para simular uma mudança de estado. Como mostrado na figura A, quando os parâmetros λ_2 e λ_3 têm o mesmo valor o processo é considerado em estado estacionário o tempo todo, pois, as medições oscilam entre os limites inferiores e superiores do filtro, e portanto, não é encontrada nenhuma correlação entre elas. Segundo Cao e Rhinehart ,(1995) para efeitos práticos é recomendado usar um valor do R_{crit} elevado para a análise de medidas que flutuam entre certos limites, mas no caso de plantas de processos químicos esta situação raramente ocorre.

Quando λ_2 é escolhido maior que λ_3 , como mostrado na figura B, os valores dos parâmetros mudam o peso no cálculo do valor de R, resultando valores do R maiores do que os calculados com as constantes iguais. Deste modo o R_{crit} é menor do que o valor do R calculado nos períodos de estado não estacionário, continuando válido para a determinação. Obtém-se uma melhora na resposta em 70% nas faixas de transição do estado, período de tempo correspondente à inclinação da reta, usando valores diferentes para os parâmetros do filtro.

Figura 7- Parâmetros de validação do Teste F modificado.
A: (CAO e RHINEHART, 1995). B: (BHAT e SARAF, 2004). 1=SS, 0=NSS.

Embora os parâmetros sugeridos por Bhat e Saraf, (2004) aumentem a porcentagem de erros tipo II, para a detecção do estado estacionário é bem mais

importante não errar na indicação de um ponto como estacionário quando ele não é de verdade. O método foi avaliado com estes valores dos parâmetros.

4.1.3 Método de *Wavelet*

As transformadas *wavelet* são uma ferramenta de análise de sinais que fornecem uma decomposição em escalas de diferentes frequências as quais permitem interpretar o conteúdo das medições e caracterizar a localização de mudanças abruptas nos sinais. Jiang *et al*, (2003) analisam as tendências dos processos a partir dos dados medidos nas variáveis de operação, usando análise *wavelet multi-scale* para a detecção de estado estacionário em processos contínuos.

A decomposição em series de *wavelet*, ao contrário de outras técnicas convencionais, como as series de *Fourier*, produz famílias em níveis hierarquicamente organizados. Para cada nível j , é calculado um coeficiente de aproximação e um coeficiente de detalhe com os quais é composta a série.

É definida como a convolução em relação à dilatação da ponderação de alguma função ψ que é nomeada *wavelet* básica. Ela é obtida por duas operações simples: dilatação binária $a = 2^j$ e translação diádica $b = k2^{-j}$

Assim, os membros da família *wavelet* são formados por translações $b = k2^{-j}$ e contrações $a = 2^j$ definidas em função do tempo (ξ) por:

$$\psi^{a,b}(\xi) = |a|^{-1/2} \psi\left(\frac{\xi-b}{a}\right) \quad (11)$$

e sua transformada definida por:

$$W_\psi(f)(a,b) = \frac{1}{\sqrt{a}} \int_{-\infty}^{\infty} (\xi) \psi\left(\frac{\xi-b}{a}\right) d\xi \quad (12)$$

Logo, com $a = 2^j$ e $b = k2^{-j}$ as funções $\Psi_{j,k}(\xi)$ são definidas como bases ortonormais no espaço $L^2(R)$ segue:

$$\Psi_{j,k}(\xi) = 2^{j/2} \Psi(2^j \xi - k), \quad j, k \in \mathbb{Z} \quad (13)$$

As medições nas variáveis são representadas como uma função, que pode ser expressa com uma serie de aproximações e detalhes ou uma serie *wavelet* como a que segue:

$$F(\xi) = \sum_{i \in I_j} c_{j,i} \varphi_{j,i}(\xi) + \sum_{j=1}^J \sum_{k \in k_j} d_{j,k} \psi_{j,k}(\xi) \quad (14)$$

Onde $c_{j,i}$ são os coeficientes da função de escala, $\varphi_{j,i}$ é a função diádica de escala discretizada, $d_{j,k}$ são os coeficientes da função *wavelet* e $\psi_{j,k}$ é a função diádica *wavelet* discretizada. Os coeficientes são dados por:

$$\begin{aligned} c_{j,i} &= \int_0^1 f(\xi) \varphi_{j,i}(\xi) d\xi \\ d_{j,i} &= \int_0^1 f(\xi) \psi_{j,i}(\xi) d\xi \end{aligned} \quad (15)$$

4.1.3.1 Análise Multi-escala

A análise de resolução múltipla proporciona uma formulação para entender as bases de *wavelet* como uma ferramenta para descrever, matematicamente, o incremento na informação necessária para ir desde uma aproximação, pouco precisa, até uma aproximação, com melhor resolução (LIMA, 2003).

No método da decomposição multi-escala conceitualmente, aplicam-se diferentes filtros variando parâmetros para detectar condições específicas nas medições. A informação fica mais explícita na representação multiescala, do que nos dados originais (BAKSHI; STEPHANOPOULOS, 1994), portanto, é mais fácil extrair informação em várias escalas que tenham um mínimo de redundância. O objetivo desta análise é aproximar uma função arbitrária $f \in L^2(R)$ e representá-la em multi-escala, ou seja, em sucessivos níveis de detalhamento ou resoluções j .

O coeficiente de aproximação leva em conta as baixas frequências do sinal original ou sequencialmente, do coeficiente no nível anterior. Por outro lado, o coeficiente de detalhe corresponde à correção pelas altas frequências ou o ruído. As baixas frequências contém a informação mais importante para a identificação do sinal e as altas frequências contidas nos coeficientes de detalhe são usadas para fazer a detecção do ruído no sinal. Na Figura 8 está representada a informação que cada coeficiente leva em conta na reconstrução do sinal.

Figura 8- Esquema de informação contida nos coeficientes da transformada. *MATLAB Wavelet Toolbox*. 2009. A: Coeficientes de aproximação. B: coeficientes de detalhe.

Para ilustrar melhor o conceito da análise de resolução múltipla o seguinte esquema é apresentado:

Figura 9- Representação esquemática de uma decomposição em resolução múltipla (CARRANZA, 2007).

A_j : são as aproximações do sinal em cada nível j , e são obtidas a partir do primeiro termo da equação (14), considerando $j_0 = j$:

$$A_j = \sum_{k=0}^{2^{j_0}} c_{j_0,k} \varphi_{j_0,k}(\xi) \quad (16)$$

D_j : são os detalhes do sinal em cada nível j , obtidos do segundo termo da equação (14).

$$D_j = \sum_{j=j_0}^{\infty} \sum_{k=0} d_{j,k} \psi_{j,k}(\xi) \quad (17)$$

4.1.3.1 Função de escala.

A análise de *wavelet* parte de uma função de escala que permite reconstruir uma série de dados ou sinal, em uma função $f(t)$. A forma mais simples para gerar uma série discreta de *wavelet* unidimensional é gerando um espaço de *Haar*, V_0 , com a função de escala $\phi(t)=f(t)$, que é definida como a função característica no intervalo $[0,1)$, em que $\phi: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$:

$$\phi(t) = \begin{cases} 1, & 0 \leq t < 1 \\ 0, & \text{caso contrario} \end{cases} \quad (18)$$

Esta função tem propriedades desejáveis, é descontínua e as suas derivadas são zero em todo ponto. O fato de que a função de escala fornece um número apropriado de derivadas contínuas é importante para a aplicação já que a derivada da função vai ser proporcional à transformada *wavelet*.

Na Figura 10 mostra-se a projeção de uma função original com a função de escala:

Figura 10- Definição Função $g(t) = e^{-|t|}$ e sua projeção no espaço de *Haar* (V_0) (RUCH; FLEET, 2009).

Assim, a base *wavelet* de Haar permite gerar a seguinte *wavelet* de suporte compacto:

$$\psi_{j,k}(\xi) = 2^{\frac{j}{2}} \psi(2^j \xi - k), \quad j \in \mathbb{Z}, k \in \mathbb{Z} \quad (19)$$

Que são utilizadas dentro do contexto da análise de resolução múltipla. Associada a esta *wavelet* conta-se com sua respectiva função de escala definida por:

$$\phi_{j,k}(\xi) = 2^{\frac{j}{2}} \phi(2^j \xi - k) \quad (20)$$

Onde a $j=1$ caracteriza a função na primeira escala $f(t) = \phi(t - k)$ que é um elemento do espaço V_0 .

4.1.3.2 Método de filtragem para redução do Ruído

O procedimento de redução de ruído consiste em decompor o sinal s (dados da variável medida no tempo) com uma série de *wavelet* num nível N , para obter os coeficientes de detalhe e seus limiares para cada nível. O filtro é aplicado em cada coeficiente descartando os valores fora de limites estabelecidos. O ruído nas medidas tem frequências superiores do que as variações do processo, portanto, o ruído pode ser diminuído limitando o módulo do coeficiente da transformada *wavelet* como o seguinte:

$$d'_{j,k} = \begin{cases} 0 & \text{se } |d_{j,k}| \leq \delta_j \\ \text{sing}(d_{j,k})(|d_{j,k}| - \delta_j) & \text{se } |d_{j,k}| > \delta_j \end{cases} \quad (21)$$

Onde d_j é o valor do limiar na escala j . O primeiro valor ($j=1$), pode ser a média dos valores no primeiro nível

$$\partial_j = \partial_1 * 2^{-(j-1)/2} \quad (22)$$

Por último, o sinal é reconstruído usando os coeficientes de aproximação originais no nível N e os coeficientes de detalhe modificados a cada nível.

4.1.3.3 Critério de detecção de estado estacionário

A transformada *wavelet* de primeira ordem é proporcional à primeira derivada da função (MALLAT; HWANG, 1992). Portanto, as variações da transformada da função no ponto de corte com o eixo e sua amplitude fornecem informação da natureza das descontinuidades ou mudanças em termos da diferenciabilidade do sinal em um intervalo de tempo. Desta forma é possível estabelecer um índice para identificação de estado estacionário, que fornece a condição de estado de uma

variável em um intervalo de confiança estabelecido pelo valor absoluto da transformada $Wsf(t)$ (MALLAT; HWANG, 1992).

Na Figura 11, estão representados os comportamentos das transformadas *wavelet* com as mudanças da função $f(x)$ (sinal). Quando a função $f_{\theta_s}(x)$ (função reconstruída do sinal original) tem uma mudança importante no comportamento, o valor da primeira transformada ($W^1f(s,x)$) se afasta do zero, e a segunda transformada ($W^2f(s,x)$) tem uma inflexão em um ponto de corte com o eixo.

Figura 11- Representação dos pontos de inflexão na derivada da *wavelet*. (MALLAT; HWANG, 1992).

Definem-se limites para os valores absolutos estimados das transformadas de primeira ordem $Wsf(t)$, e para a transformada de segunda ordem $WWsf(t)$ proporcional à segunda derivada da função. Esta é usada como um critério de confirmação da existência de um ponto de inflexão na função da seguinte forma:

- Se $|Wsf(t)| > T_u$ então $SS=0$, não estado estacionário.
- Se $|Wsf(t)| < T_u$ e $|WWsf(t)| < T_w$ então $SS=1$ estado estacionário.

onde

$$T_s = \sigma_{Wf} \quad (23)$$

$$T_u = 3\sigma_{Wf} \quad (24)$$

$$T_w = \sigma_{WWf} \quad (25)$$

Os valores dos limites de confiança são determinados de acordo com o grau de flutuação das medições e a sensibilidade das variáveis de operação do processo. Esses são estimados com os dados históricos das medições nos quais se tem certeza que o processo está em estado estacionário. Deve ser calculado então o desvio padrão dos valores das transformadas de primeira e segunda ordem para este conjunto de pontos, estabelecendo assim os intervalos nos quais uma variável é considerada em estado estacionário.

4.2 RECONCILIAÇÃO DE DADOS E ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS

O processo de reconciliação de dados é usado para ajustar os dados reportados pela instrumentação, nas condições operacionais, com as restrições estabelecidas pelos balanços que se aplicam ao processo.

Os dados obtidos das medições das variáveis do processo são representados por:

$$x_i = [x_{i,1}, x_{i,2}, \dots, x_{i,l}] \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, n \quad (26)$$

Onde l é o número de conjuntos de medições durante um período de operação em estado estacionário na planta.

Em geral a função dos mínimos quadrados (LS) é o ponto de partida para estabelecer a função objetivo na otimização, definida como:

$$\min \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - y_i)^2}{\sigma^2} \quad (27)$$

Onde os valores de y_i obedecem às restrições dos balanços de massa e energia. Esta função corresponde à função de máxima verossimilhança se for assumido que as medições tem distribuição de erro normal e média zero, que deixa de ser válida quando os dados contém erros grosseiros sem tratamento prévio.

Alternativamente pode ser adotar parâmetros de peso nas variáveis. Tem-se então a matriz de covariância, considerada conhecida, como ponderação:

$$\min (x - y)^T Q^{-1} (x - y) \text{ onde } Q = \text{diag}[\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2] \quad (28)$$

Esta função é conhecida como a dos mínimos quadrados ponderados (WLS), e em ela assume-se implicitamente que a distribuição do erro tem média zero e variância conhecida.

Quando existem possíveis desvios destas hipóteses funções objetivo que não precisem de hipóteses de distribuição normal do erro, são melhores candidatas, especialmente no caso em que as medidas contém erros grosseiros.

Funções de máxima verossimilhança podem ser usadas para derivar funções objetivo que possam combinar distribuições levando em conta pesos de erros contidos nas medidas.

A função de máxima verossimilhança é formada a partir da função de distribuição de probabilidade da variável medida (x_i), maximizando o produto dos valores de probabilidade individual para cada variável medida (ÖZYURT; PIKE,2004). Neste caso a hipótese de independência está implícita.

$$\mathcal{L} = \max P = \max \prod_i P_i \quad (29)$$

Para a distribuição Normal se tem:

$$\max \prod_i P_i = \max \prod_i \left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma_i} \exp \left(-\frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \right\} \quad (30)$$

ou

$$\min - \sum_i \ln \left\{ \exp \left(-\frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \right\} + \sum_i \ln (\sqrt{2\pi} \sigma_i) \quad (31)$$

simplificando tem-se:

$$\min \sum_i \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \quad (32)$$

Que é equivalente à função dos mínimos quadrados ponderados. Similarmente há outras funções de distribuição mais robustas com as que é possível testar o comportamento na função objetivo na resolução do problema (ÖZYURT; PIKE,2004), estas funções estão descritas na secção de estimação de parâmetros.

4.2.1 Enfoque acoplado de Reconciliação de dados e Estimação de Parâmetros

A estimação de parâmetros visa ajustar um modelo capaz de representar a operação em determinadas condições especificadas pelas medidas da planta. Ajustar modelos consiste em minimizar uma determinada medida de distância entre pontos experimentais e um modelo. Na resolução de dito problema, usam-se os parâmetros como variáveis independentes de otimização.

O ajuste de um modelo genérico $y = f(x, \theta)$ obtém-se minimizando:

$$\Phi(\theta) = \sum_{i=1}^n (x_i - f(x_i, \theta))^2 \quad (33)$$

Onde x_i corresponde às variável medidas. Essas medições no problema de estimação podem ser dados reconciliados previamente avaliados em condições específicas para as quais o modelo foi desenvolvido, como por exemplo, o estado estacionário. Portanto, antes de fazer o ajuste do modelo, pode ser feita a reconciliação de dados, que faz com que as medidas obedeçam aos balanços estabelecidos pelo processo, para evitar que os erros contidos nas medições afetem a qualidade das estimativas.

A ineficiência dos dois enfoques separados DR e PE (*Data Reconciliation and Parameter Estimation*) tem sido ressaltada (JOE *et al.*, 2006). Uma solução é usar um enfoque acoplado dos dois procedimentos, em que a estimação de parâmetros esteja sujeita tanto às restrições do modelo e conseqüentemente às restrições de conservação do processo (o modelos obedece os balanços de massa e energia), deixando estimativas consistentes. Espera-se que essas estimativas sejam mais precisas, tal como o confirmaram MacDonald e Howat (1988), que examinaram os dois enfoques, sequencial e acoplado do DRPE e concluíram que o procedimento acoplado leva a estimativas válidas.

Matematicamente, as duas estratégias são similares em termos dos problemas que podem surgir ao obter estimativas consistentes. Estes aspectos têm sido discutidos na literatura. Alguns pesquisadores estudam estratégias com algoritmos gerais de solução (VALFO; VAJDA,1987), estratégias de otimização (TJOA; BIEGLER,1991) ou a robustez da estimação (ARORA *et al.*,2001).

Para formular o problema conjunto, usam-se dados sem tratamento prévio, definindo uma função objetivo que contenha as restrições do processo, contidas dentro do modelo, e os parâmetros de ajuste às condições reais. A formulação geral do problema simultâneo de DRPE é definida como:

$$\begin{aligned}
 & \min_{x_i, \theta} \mathcal{F}(x_i^M, x_i) \\
 & \text{s.a.} \\
 & \quad h(x_i, \theta) = 0 \\
 & \quad g(x_i, \theta) \leq 0 \\
 & \quad x^L \leq x_i \leq x^U \\
 & \quad \theta^L \leq \theta \leq \theta^U
 \end{aligned} \tag{34}$$

Onde $\mathcal{F}$ é uma das funções objetivo descritas abaixo, x_i^M é o conjunto de medidas correspondentes a cada variável x_i e θ é o conjunto de parâmetros, sujeito às restrições de igualdades e desigualdades do modelo.

São usadas funções baseadas em estatísticas robustas que são capazes de estimar os parâmetros desconsiderando o efeito de eventuais erros grosseiros nas medições. Dentre estas funções podemos citar:

- Normal Contaminada:

$$-\ln \left\{ (1 - p_{CN}) \exp \left(\frac{1}{2} \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) + \frac{p_{CN}}{b_{CN}} \exp \left(\frac{1}{2b_{CN}^2} \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \right\} \tag{35}$$

- *Cauchy*:

$$c_c^2 \ln \left(1 + \frac{1}{2c_c^2} \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \tag{36}$$

- *Logística*

$$2 \ln \left(1 + \exp \left(\frac{1}{c_{Lo}} \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \right) - \left(\frac{1}{c_{Lo}} \frac{(x_i - y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right) \tag{37}$$

- *Lorentziana*

$$-\frac{1}{1+\frac{1}{2c_L^2}\frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2}} \quad (38)$$

- *de Fair*

$$2c_F^2 \left[\frac{\left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right|}{c_F} - \ln \left(1 + \frac{\left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right|}{c_F} \right) \right] \quad (39)$$

- Estimador Redescendente de *Hampel* (M-estimador):

$$\begin{aligned} & \frac{1}{2} \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2}, \quad 0 \leq \left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right| \leq a_H \quad (40) \\ & a_H \left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right| - \frac{1}{2} a_H^2, \quad a_H \leq \left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right| \leq b_H \\ & a_H b_H - \frac{1}{2} a_H^2 + (c_H - b_H) \frac{a^2}{2} \left[1 - \left(\frac{c_H - \left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right|}{c_H - b_H} \right)^2 \right], \quad b_H \leq \left| \frac{(x_i-y_i)^2}{2\sigma_i^2} \right| \leq c_H \end{aligned}$$

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 ANÁLISE DA VARIABILIDADE ASSOCIADA À INSTRUMENTAÇÃO DE CAMPO

A análise dos dados de operação de uma planta é importante para se entender o seu comportamento para o desenvolvimento e ajuste de modelos. As mudanças feitas pelas pessoas encarregadas da operação, podem alterar fortemente o comportamento da operação afastando-a das condições de projeto inicialmente definidas.

No desenvolvimento do modelo do processo para a descrição rigorosa da operação é importante entender detalhadamente o comportamento das medidas das variáveis disponíveis na planta, cenários operacionais e faixas possíveis nos valores pontuais de cada variável medida.

5.1.1 Descrição do Processo

A unidade de produção de PROPENO² em uma refinaria de PETROBRAS foi projetada para produzir 145.000 t/ano de propeno grau polímero de alta pureza (99,5 % molar mínimo) e baixo teor de água (10 ppm máximo). A unidade consiste de três seções de destilação diferentes (Depropanizadora, De-etanizadora e Fracionadora de Propeno) e uma seção de tratamento cáustico.

O produto de fundo da torre de-etanizadora, que contém principalmente propano e propeno, mas pode conter mais alguns componentes como está descrito na Tabela 2, alimenta a torre depropanizadora que é operada com 9,0 kgf/cm² e é equipada com 157 pratos de válvulas fixas.

² Comunicação interna projeto. MANUAL TECNICO DE OPERAÇÃO DA UNIDADE DE PROPENO (U-1200) RECAP/PR/RE. 04/28/2011.

Tabela 2- Composição nominal da carga adotada no projeto da coluna.

	Fração Molar
Etano	0,0001
Propeno	0,6441
Propano	0,3477
iButeno	0,0034
1Buteno	0,0006
C2Buteno	0,0003
T2Buteno	0,0003
12BD	0,0001
iButano	0,0030
Butano	0,0003

O calor necessário para separar o propeno do propano é cedido à coluna pelo produto de topo através dos refeedores. Estes refeedores são divididos em duas unidades iguais em paralelo, e um terceiro que foi adicionado posteriormente com o objetivo de aumentar a área de troca disponível.

O produto de fundo, que contém principalmente propano, tem como especificação 8% molar máximo de propeno. O produto de topo é misturado com o propeno vaporizado do vaso de refluxo, no vaso de sucção do compressor, onde o líquido presente pode ser removido antes da sucção pelo compressor de propeno. Este aumenta a pressão até 16,2 kgf/cm² e a temperatura para aproximadamente 48 °C, para que ocorra a troca térmica nos refeedores. Depois da compressão, o vapor é dividido em duas correntes, uma que passa pelos resfriadores, outra que passa pelos refeedores. A condensação deste vapor é utilizada para controlar a pressão da coluna.

5.1.2 Informação da Operação

O primeiro passo na análise das variáveis da planta é a identificação das medições disponíveis, para estabelecer uma hierarquia e verificar a existência de alguma redundância nas medidas. Na Figura 12 é mostrado o diagrama simplificado com os indicadores disponíveis na planta, obtidos das informações dos diagramas de instrumentação. Reportam-se os indicadores das variáveis medidas, as válvulas de controle, os atuadores, os indicadores de *set point*.

Figura 12- Indicadores disponíveis na Refinaria.

Para analisar as medidas foram feitos balanços de massa nos equipamentos, com base em dados de operação da planta com média para cada hora do ano de 2008 até o de 2012.

Foram encontrados problemas de consistência nas medidas da vazão da corrente de fundo devido à presença de um indicador quebrado desde março de 2009, fazendo com que a informação importante do balanço global de massa não tivesse redundância que seria necessária para a reconciliação de dados.

Uma outra medição que apresenta desvios em relação aos dados de projeto é a vazão de vapor de recirculação (corrente 15) proveniente do tanque de distribuição. Essa vazão de vapor do tanque de distribuição reporta dados próximos da metade do valor reportado no projeto, o que levaria a uma diminuição da fração de vapor no tanque. Portanto as temperaturas de saída dos trocadores de calor teriam que ser inferiores, o que é impossível de confirmar já que esses equipamentos não têm indicadores disponíveis.

A vazão de vapor que entra no compressor apresenta valores superiores às correntes de saída, em quase 150 ton/h, pois, ao se fazer o balanço no compressor foi achada uma diferença entre a medição da vazão na entrada e a soma das correntes em que é dividida a corrente de saída do compressor (correntes que vão para o condensador e o refeedor). Existe então uma recirculação de vapor significativamente alta (na linha de *surge*) no compressor a qual gera uma perda importante de energia.

Do banco de dados disponibilizado, somente dois meses (de janeiro a março de 2009) possuem as informações completas das variáveis, com as quais poderia ser feita a análise de estado estacionário, a reconciliação de dados e o ajuste dos parâmetros do modelo. Estes dados apresentam um erro médio de 2,3 ton/h no balanço global na coluna, o qual representa 8% em relação à vazão da carga.

Esta porcentagem é significativamente elevada em comparação com uma outra coluna depropanizadora existente em outra refinaria da PETROBRAS que tem a mesma configuração. O erro encontrado no fechamento do balanço global é reportado em 0,5% (comunicação pessoal). Em um caso operacional típico, um erro grosseiro pode ser considerado como bias, quando a média do erro vai de 3,5 até 14% (TJOA; BIEGLER, 1991).

É importante resaltar que para este tipo de coluna, uma quantidade considerável de líquido está armazenada, no fundo, que corresponde a um acúmulo que não é levado em conta no balanço, e pode ser uma fonte de incerteza no fechamento do balanço global de massa.

5.1.3 Redundância nas medições

As medições disponíveis apresentam redundância nas vazões, possibilitando conferir os balanços de massa em alguns volumes de controle do processo. As medições das temperaturas também permitem conferir os estados das correntes e os balanços de energia.

Nas composições das correntes, para o balanço por componente, existe uma falta de informação no conhecimento da carga, que permitiria conhecer as composições dos produtos. Como o modelo está especificado com dez componentes, seria interessante obter informação suficiente nas caracterizações da

composição da corrente de alimentação e as distribuições dos produtos de topo e de fundo.

Atualmente a configuração de cromatografia em linha da planta reporta somente a caracterização das composições de três componentes da carga: o etano, o propano e o propeno e a composição das impurezas em cada corrente de saída: o propano no topo e o propeno no fundo.

O balanço por componente mostrado nas equações 41 à 46. Assumindo que todo o etano na alimentação é obtido na corrente de topo e os componentes C_4 e C_5 são obidos pelo fundo. Nestas equações os componentes sombreados são aqueles para os quais há medições disponíveis.

$$C_2.F = C_2.D \quad (41)$$

$$C_3^-.D = D - C_2.D - C_3.B \quad (42)$$

$$C_{4,5}.F = C_{4,5}.B \quad (43)$$

$$C_3.B = B - C_3^-.B - C_{4,5}.B \quad (44)$$

$$C_3.F = C_3.D + C_3.B \quad (45)$$

$$C_3^-.F = C_3^-.D + C_3^-.B \quad (46)$$

Em consequência pode-se concluir que a informação de composições para fazer um balanço por componente nas correntes é insuficiente, sendo necessário fazer hipóteses das frações dos componentes pesados na alimentação para fornecer informações de todas as outras correntes no balanço de massa.

5.1.4 Conclusões Parciais

- A presença de indicadores quebrados e a falta de informação dão baixa confiabilidade às medidas das variáveis reportadas na planta. É importante se fazer uma calibração e ajuste da instrumentação existente para obter informações confiáveis do comportamento da operação.
- É importante implementar uma melhor caracterização da composição das correntes. Os indicadores existentes não dão a informação necessária para estabelecer redundância nestas variáveis, impedindo assim a validação da informação reportada.

5.2 MODELAGEM DA OPERAÇÃO

No processo de desenvolvimento da ferramenta de otimização em tempo real é preciso um modelo matemático que seja capaz de representar a operação. O modelo deve ser flexível para ajustar o comportamento real dentro de uma ampla faixa nas condições de processo (CHACHUAT *et al.*, 2009). Abaixo se descreve e analisa o modelo do processo desenvolvido no grupo de trabalho do projeto.

5.2.1 Descrição do Modelo

Primeiro foi feita uma modelagem simplificada do processo, com os aspectos fundamentais como uma primeira aproximação, para depois realizar um detalhamento melhor das características intrínsecas dos equipamentos.

Como plataforma de modelagem foi escolhido o simulador EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*) (SOARES; SECCHI, 2003). O EMSO é um simulador orientado a equações, com características adequadas para a implementação da RTO: tem rotinas para solucionar problemas algébrico-diferenciais, calcula as derivadas por diferenciação automática, contém módulos de otimização e de estimação de parâmetros.

O modelo foi descrito com as seguintes características:

- Modelo termodinâmico de Peng-Robinson (VRTECH, 2008).
- Coluna com 157 pratos e com alimentação de 10 componentes no prato 124.

- Modelo de equilíbrio com eficiência em duas sessões para os componentes etano, propano e propeno e 1 para os outros componentes.
- Válvulas de expansão adiabáticas.
- Compressor.
- Trocadores de calor sem perda de carga.

Figura 13-Fluxograma adotado para a construção do modelo³.

A análise dos graus de liberdade estabeleceu que é necessário especificar 6 variáveis além da queda de pressão na coluna e a especificação da corrente de alimentação para que o modelo seja coerente. As variáveis especificadas foram estabelecidas de acordo com o sistema de controle adotado na refinaria. Posteriormente o conjunto de especificações foi modificado de modo a favorecer a convergência do modelo.

³ Comunicação interna do projeto. Trabalho feito por Diego Mendoza.

5.2.2 Análise de Sensibilidade do Modelo

O estudo das respostas do modelo para mudanças dos valores das especificações e dos parâmetros, um de cada vez, fornece informação importante no conhecimento do modelo tal como:

- Características de convergência e robustez.
- Capacidade de representar os dados reais do processo.
- Respostas dos valores de saída das variáveis chaves do processo.
- Faixas de convergência em função das especificações dos parâmetros.
- Uma primeira aproximação da estimação de parâmetros.

Definiram-se seis parâmetros no modelo, duas eficiências de vapor de Murphree, uma na zona de retificação e outra na zona de esgotamento, uma eficiência adiabática no compressor, e parâmetros de perdas de calor para os resfriadores e o refeedor. Na Tabela 3 estão relacionados os parâmetros estabelecidos no modelo.

Tabela 3- Parâmetros estabelecidos no Modelo.

Parâmetro	Descrição	
η_c	Eficiência adiabática do Compressor	
E_R^{MV}	Eficiência de Murphree na zona de retificação para o componente i	Variável para Etano Propano e Propeno, 1 para outros componentes
E_S^{MV}	Eficiência de Murphree na zona de esgotamento	
Q_{Bl}	Perdas de Calor no Reboiler	Magnitude Negativa (W)
Q_{C1l}	Perdas de Calor no Resfriador 1	
Q_{C2l}	Perdas de Calor no Resfriador 2	

As eficiências na coluna serão estimadas como parâmetros no modelo para ajustá-lo a fim de descrever fenômenos de transferência de massa que contrariam a hipótese de equilíbrio de fases. O caso base foi estabelecido com os dados de projeto como inicialização das variáveis.

Para avaliar a robustez do modelo foram avaliadas as faixas de convergência das diferentes variáveis, para simular possíveis distúrbios operacionais mostrados na Tabela 4:

Tabela 4- Faixas de convergência para as especificações.

Especificações	de Processo	Faixa de Convergência		
		inferior	superior	
Carga				
Composição de Propeno	(mol%)	0,02	0,2	
Composição de iso-Butano	(mol%)	0,02	0,2	
Vazão	(kmol/h)	300	2150	
Vazão de produto de fundo	(kmol/h)	225	650	
Vazão de Refluxo	(kmol/h)	2750	40000	
Temperatura de saída do <i>refervedor</i>	(K)	280,11	324,11	
Temperatura de saída do Hx2	(K)	264,4	331,4	
Temperatura de saída do Hx1	(K)	260	340	
Eficiência do compressor	(--)	0,3	1	
E_s^{MV}	(--)	0,1	1,5	
E_r^{MV}	(--)	0,1	1,5	
Queda de Pressão	(atm)	0	13,26	

5.2.2.1 Eficiência de vapor de Murphree na coluna.

Para avaliar a influência dos valores das eficiências no perfil de temperatura, foram estudados valores para cada eficiência em um intervalo entre 0,1 e 1,5. A Figura 14 mostra os resultados obtidos para os diferentes valores das eficiências.

Na zona de retificação a mudança nos valores do parâmetro não é tão importante quanto na zona de esgotamento, onde a sessão do topo fornece uma separação deficiente e os componentes pesados são arrastados para o topo, mudando o perfil para temperaturas maiores. Esses baixos valores nas eficiências deixam o produto de topo fora das especificações requeridas, a fração do propeno cai de 0,9995 com $E_s=1$ para 0,9635 com $E_s=0,4$.

Figura 14- Perfil de temperatura na coluna com a mudança das eficiências de vapor de Murphree. A: Eficiência na zona de retificação. B: Eficiência na zona de esgotamento. Os pratos estão numerados do topo para o fundo.

5.2.2.2 Eficiência adiabática no compressor.

O parâmetro da eficiência adiabática do compressor é definido como a razão entre o trabalho adiabático e o trabalho real do compressor (GREEN; PERRY, 2007). Em termos de temperaturas esta razão pode ser escrita como:

$$\eta_{ad} = \frac{T_{ad(out)} - T_{in}}{T_{out} - T_{in}} \quad (47)$$

Os valores para esse parâmetro foram testados entre 0,1 e 1 para verificação da convergência do modelo. A Figura 15 mostra como a temperatura da corrente de saída do compressor aumenta quando a eficiência diminui a fim de conseguir atingir a pressão de saída requerida.

Como a temperatura adiabática e a temperatura de entrada são valores constantes, a temperatura de saída do compressor tem que aumentar para compensar a diminuição da eficiência. Quando esta temperatura aumenta, as vazões requeridas nos trocadores diminuem e portanto, é gerada uma menor quantidade de vapor no tanque, o que faz diminuir a vazão que passa pelo compressor. O trabalho requerido no compressor aumenta em 20 MW quando a eficiência cai até 0,1.

Figura 15- Mudança da eficiência adiabática do compressor.
A: Efeito da mudança na vazão do compressor. B: Efeito da mudança na temperatura de saída do compressor. C: Efeito da mudança no trabalho do compressor.

O principal efeito do valor da eficiência do compressor está no vapor recirculado que vem do tanque. O efeito da temperatura de saída do compressor é regulado pela quantidade de vapor recirculado. As baixas quantidades de trabalho adicionado ao processo correspondem a baixos valores de temperaturas e portanto menor quantidade de vapor recirculado. O compressor gera um vapor em excesso de 12% com relação ao requerido na troca de calor nos refeedores, que sempre é recirculado na bomba de calor quando o compressor trabalha com uma eficiência de 75%. As especificações fazem que o vapor de topo não mude.

5.2.2.3 Composição da carga.

Para os valores das especificações no modelo, uma primeira análise foi feita com respeito à composição da carga, já que é importante estimar o efeito que tem os outros componentes diferentes dos produtos, nas condições de operação da coluna. A Figura 16 mostra as diferenças nos perfis de temperatura da coluna quando a carga muda sua composição.

O etano, componente em menor proporção em peso, mais leve do que o produto, tem uma influência muito pequena no perfil de temperaturas, ao aumentar sua composição, em até 5 vezes não há mudanças significativas. Entretanto, a composição do produto de topo sai das especificações requeridas de 99,5% de pureza quando a fração esta acima de 100 ppm.

Figura 16- Perfil de temperatura na coluna mudança da composição da carga. A: Aumento da fração do componente leve (Etano). B: Aumento da fração do componente pesado de maior proporção (iButano).

Para detectar a influência dos outros componentes na carga, foi aumentada a fração do componente mais pesado em maior proporção, o i-Butano, em até três vezes. Pode-se observar que o efeito desse componente no perfil de temperatura da coluna é importante, mudando os valores das temperaturas acima da alimentação, pois os componentes pesados são arrastados para pratos mais altos, deixando a coluna sem a capacidade de fornecer a purificação necessária.

O aumento na composição dos componentes em menor proporção gera um impacto importante no perfil de temperatura, já que na válvula de expansão da corrente de alimentação, estes são vaporizados. A composição na carga, tem um efeito significativo nas temperaturas da coluna acima da carga.

Devido a este fato é possível concluir que é muito importante ter conhecimento exato da composição da carga com todos os componentes no sistema RTO, para evitar assim a propagação de erros que podem ser gerados quando se tem informação da composição dos componentes em maior proporção apenas, tal

como a análise de cromatografia online da carga na planta está configurada atualmente.

5.2.2.4 Produto de fundo.

O produto de fundo é uma outra variável especificada no modelo em 261,605 kmol/h no caso de projeto. No modelo somente se pode diminuir este valor até 230 kmol/h, pois para valores menores o modelo não converge.

É possível aumentá-lo até o valor da vazão da carga, caso que acontece na operação real quando a concentração de etano sai das especificações (valores acima de 100 ppm) e a vazão do produto do destilado é fechada. Então a vazão de alimentação que entra é retirada pelo fundo para recirculação até estabilizar a coluna de-etanizadora que precede esta coluna.

Na Figura 17 mostra-se o efeito da mudança do produto de fundo. Para valores abaixo do ponto de operação, a concentração de propeno e a porcentagem de recuperação diminuem, ou seja, uma maior quantidade de contaminantes que vai para o topo. Ao aumentar este valor o vapor retirado pelo topo diminui, diminuindo também a quantidade de calor necessária no refeedor. Quando o trabalho requerido no compressor diminui também uma vazão menor passa por ele.

Figura 17- Mudança do produto de fundo.

A: Efeito na composição do propeno no destilado. B: Efeito na vazão do vapor de topo. C: Efeito no calor do refeedor. D: Efeito no trabalho do compressor. E: Porcentagem de recuperação de propeno.

5.2.2.5 Vazão de refluxo.

A vazão do refluxo é uma variável chave nas especificações da coluna. Ao diminuir esta variável é possível conseguir convergência na coluna, mas o produto não atinge as especificações. A Figura 18, mostra a mudança na razão de refluxo ($RR=1+F_R/F_D$) e seu efeito nos fluxos de energia e de composição do produto de topo.

A pureza do produto aumenta ao aumentar a razão de refluxo. Valores acima de 13 causam pequenas melhorias na pureza, mas a composição do produto se mantém quase constante para valores maiores. O valor do caso base está perto de 15. Quando este valor diminui, a vazão do vapor de topo também diminui, portanto diminui a vazão do vapor de aquecimento no refeedor e o vapor gerado no tanque, e, o trabalho necessário no compressor.

O refluxo mínimo é próximo a 5000 kmol/h ($RR=12,73$), no qual obedece-se a condição de pureza do produto do 99,5% e a porcentagem de gasto energético se encontra em um patamar constante. Esses comportamentos são mostrados na Figura 18

Figura 18- Mudança da Razão de Refluxo.

A: Efeito no trabalho do compressor. B: Efeito na composição de propeno no destilado. C: Efeito na porcentagem da razão de trabalho no compressor dividido pelo calor no refeededor.

5.2.2.6 Temperaturas de saída dos trocadores de calor.

Outras especificações no modelo são as temperaturas de saída dos trocadores de calor Hx_1 , que é o condensador do vapor que não vai para o *refervedor*, e Hx_2 , é o resfriador da corrente que sai do *refervedor*.

Quando esses valores especificados são alterados o principal efeito está na vazão do vapor recirculada do tanque: ao aumentar a temperatura, aumenta a quantidade de vapor e, portanto, aumenta também o trabalho no compressor pois a vazão de vapor será maior. Na Figura 19 mostram-se esses comportamentos.

Figura 19- Mudança na temperatura de saída dos trocadores de calor.

A: Efeito da temperatura de saída do condensador Hx1 no vapor do tanque. B: Efeito da temperatura de saída do resfriador Hx2 no vapor do tanque. C: Efeito da temperatura de saída do condensador Hx1 no trabalho do compressor. D: Efeito da temperatura de saída do resfriador Hx2 no trabalho do compressor.

Na Figura 20 mostra-se que a influência da variação da temperatura do resfriador Hx₂ é maior sobre o calor total retirado, já que a temperatura na entrada deste está praticamente especificada pelo valor na saída do refeedor, que é uma especificação no modelo, restrição que faz com que a mudança na saída do condensador seja insensível à quantidade de calor.

Ao diminuir a temperatura do Hx₂, é preciso retirar uma quantidade de calor maior no condensador para compensar.

Figura 20- Efeito das temperaturas de saída dos trocadores no calor global.

A: Mudança da temperatura de saída do condensador. B: mudança na temperatura de saída do resfriador.

O efeito consegue ser compensado somente com o condensador Hx₁, ou seja, na corrente que não passa pelo refeedor é possível retirar a quantidade de calor necessária para deixar o vapor nas condições da recirculação no ponto de mistura antes do tanque. No entanto, podem haver limitações físicas de área de troca e por este motivo é que o resfriador foi previsto para compensar estas limitações. O ponto ótimo operacional pode ser definido como o de consumo mínimo de calor, ou seja, temperaturas baixas nas saídas dos trocadores.

O fechamento no balanço de energia foi verificado, sendo o calor total retirado nos trocadores igual à quantidade de trabalho requerida no compressor. O sistema economiza de 79 a 88% da energia total requerida no processo, sendo esta fornecida pelo compressor. Esses valores estão de acordo com o esperado para sistemas da recompressão de vapor assistida, que é a técnica de integração de calor, usada industrialmente para separar economicamente misturas de pontos de ebulição próximos, e que foi aplicada no projeto deste equipamento (HARWARDT; MARQUARDT, 2012).

Na Figura 21 são apresentados os comportamentos nos valores das potências em função de mudanças nas temperaturas de saída dos trocadores de calor.

Figura 21- Balanço de Energia.
Caso 1: mudança na temperatura do condensador Hx₁. Caso 2: mudança na Temperatura do resfriador Hx₂.

O sistema de recompressão de vapor é energeticamente eficiente, já que atinge 80% de economia ao recircular o vapor de topo passando pelo compressor

para disponibilizar a quantidade de calor que é necessário adicionar nos refeedores.

5.2.2.7 Temperatura de saída do refeedor.

A temperatura na saída do refeedor é uma especificação que define a quantidade de vapor requerido para o aproveitamento da energia e a quantidade que vai para o condensador. O principal efeito ao mudar este valor é na quantidade de vapor que sai no tanque, se ele for superior ao valor nominal de 311,4K.

Figura 22- Mudança da temperatura de saída do refeedor.

A: Efeito na vazão do vapor de topo. B: Efeito na Vazão do vapor do tanque. C: Efeito na temperatura do vapor de topo. D: Efeito na temperatura do vapor do tanque.

5.2.3 Comparação das respostas fornecidas pelo modelo com uma simulação em ASPEN PLUS

O modelo do processo, com as mesmas especificações e modelo termodinâmico, foi implementado em um simulador de processo comumente utilizado, o ASPEN PLUS, para comparar as respostas obtidas nas variáveis do modelo em EMSO.

Na Tabela 5 são mostrados os valores das diferenças obtidas nas duas simulações. Pode-se notar que estas diferenças estão abaixo de 1%, a partir do quê pode-se afirmar que o modelo simulado em EMSO fornece uma representação equivalente ao Aspen Plus.

Tabela 5- Comparação dos resultados do modelo em EMSO com simulação em ASPEN PLUS

Descrição das correntes	Diferença Relativa do EMSO em comparação de ASPEN		
	Vazão	Temperatura	Fração de Propeno
Vapor de topo da coluna	0,00%	0,06%	-0,02%
Vapor de descarga do tanque	-0,95%	0,05%	-0,05%
Vazão de descarga do compressor	-0,13%	0,06%	-0,02%
Saída do condensador	-0,50%	0,00%	-0,02%
Saída da válvula de expansão do condensador	-0,50%	0,05%	-0,02%
Vapor de topo condensado nos refeedores	-0,08%	0,00%	-0,02%
Líquido para a válvula de expansão sem trocador	-0,08%	0,00%	-0,02%
Mistura líquido-vapor na saída da válvula sem trocador	-0,14%	0,05%	-0,02%
Líquido condensado no refeedor para o resfriador HX2	-0,08%	0,00%	-0,02%
Líquido na saída do resfriador HX2	-0,08%	0,00%	-0,02%
Mistura líquido-vapor na saída da válvula de expansão do resfriador HX2	-0,08%	0,05%	-0,02%
Corrente de entrada ao tanque de distribuição	-0,13%	0,05%	-0,02%
Produto de destilado	0,00%	0,08%	-0,02%
Refluxo	0,00%	0,08%	-0,02%

São comparadas as vazões das correntes de vapor gerado no refeedor e a vazão de vapor de descarga do compressor que transfere calor para o refeedor, ao mudar os valores nas eficiências na coluna. Na Figura 23 mostram-se as respostas obtidas com o EMSO e as fornecidas pelo ASPEN PLUS. Observa-se uma diferença nos valores pontuais com um erro absoluto menor do que 1% e as tendências das vazões são similares ao diminuir os valores das eficiências.

Essas diferenças acontecem devido às características das equações de estado usadas, já que o EMSO usa um modelo de *Peng Robinson* com regras de mistura clássica para estender a equação de estado de componentes puros para misturas (VRTECH, 2008) sem a possibilidade de ter parâmetros de interação binária que estão considerados no modelo de Peng Robinson do ASPEN PLUS.

Figura 23-Comparação das vazões nos *refervedores* para o modelo de EMSO e a simulação em ASPEN.

A: Líquido de entrada no *refervedor* ao mudar a eficiência na zona de retificação. B: Vapor de entrada no *refervedor* ao mudar a eficiência na zona de retificação. C: Líquido de entrada no *refervedor* ao mudar a eficiência na zona de esgotamento. D: Vapor de entrada no *refervedor* ao mudar a eficiência na zona de esgotamento.

5.2.4 Conclusões Parciais

- O EMSO consegue uma ampla região de convergência, tanto nas especificações quanto nos parâmetros, usando-se sempre uma mesma inicialização das variáveis, com um tempo computacional reduzido, de menos de 4 segundos. Estas características são importantes para um modelo adequado em um sistema de RTO.
- Os componentes em menor proporção têm um papel importante nas variáveis do processo e nos valores dos parâmetros. Assim para aumentar a precisão das predições seria importante ter uma análise mais precisa da composição da carga.
- A razão de refluxo é uma variável chave na otimização já que determina a pureza do produto. O refluxo mínimo é 12,72, que é um valor importante na definição de um ponto operacional ótimo.
- A eficiência isoentrópica do compressor é um parâmetro chave na produtividade do processo, pois é determinante na quantidade de energia requerida. Também é uma variável chave na especificação de uma função objetivo econômica para a RTO. Altos valores da eficiência resultam em melhores benefícios no consumo energético da planta .

5.3 ESTUDO DE MÉTODOS DE DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO

5.3.1 Dados Simulados

Para a validação dos métodos existentes é preciso gerar dados nos quais seja conhecido o comportamento *a priori* do processo. Portanto, foram simulados dados para validar três métodos escolhidos: o teste de variância de janela de tempo que é o utilizado atualmente em aplicações de RTO comerciais, o teste F modificado e o método de *wavelet*.

Na geração de dados fictícios foram simulados dois tipos de funções, representando diferentes níveis de estados estacionários, sendo uma delas retas com três inclinações diferentes 0,5, 1 e 2, e a outra uma curva exponencial. Para cada função foram adicionados três níveis de ruído aleatórios com diferentes amplitudes correspondendo a 1, 5 e 10% vezes o desvio padrão (função de MATLAB que gera valores pseudo-aleatórios extraídos da distribuição normal), como mostrado nas Figura 24 e 25. Os dados foram gerados 100 vezes para cada função, para garantir a distribuição aleatória do ruído.

Figura 24- Dados Simulados para inclinações de retas.
A: inclinação 0,5 nível de ruído 1%. B: inclinação 1, nível de ruído 5%. C: inclinação 2, nível de ruído 10%.

Figura 25- Dados Simulados para funções exponenciais.
A: nível de ruído 1%. B: nível de ruído 5%. C: nível de ruído 10%.

5.3.1.1 Teste de variância em janela de tempo.

O teste de variância em janela de tempo, é uma ferramenta que permite analisar ou checar em linha o comportamento do processo. Este procedimento apresentou resultados satisfatórios para níveis de ruído moderados. A Figura 26 mostra as respostas obtidas para os dados fictícios. Pode-se notar que é possível identificar com clareza o período não estacionário somente para os dois primeiros níveis de ruído. Quando esse nível aumenta, o teste apresenta uma quantidade de erros tipo I significativamente elevada identificando o período como se fosse estacionário em toda a faixa de tempo. Para as funções exponenciais ele fornece uma classificação correta em todos os intervalos de tempo, estacionário e não estacionário.

Figura 26-Validação Teste de variância de janela de tempo.
A: inclinação 0.5 nível de ruído 1%. B: inclinação 1, nível de ruído 5%. C: inclinação 2, nível de ruído 10%. 1=SS, 0=NSS.

Os tipos de erros estão definidos estatisticamente, como nos testes de hipótese. Os erros tipo I correspondem em rejeitar a hipótese nula quando a mesma é verdadeira, ou seja, não detectar uma medida como em estado estacionário sendo que o ponto é estacionário. Um erro tipo II consiste em não rejeitar a hipótese nula quando a mesma na realidade é falsa, identificar um ponto em estado estacionário quando ele não está.

Tabela 6- Resultados erros obtidos para o Teste de variância de janela de tempo.

Nível de ruído	1%	5%	10%
Erro Tipo I	2,33	6,33	79,33
Erro Tipo II	40,67	21,67	24,00

5.3.1.2 Teste F modificado

O teste F modificado, similarmente ao teste de variância em janela de tempo, tem um grau de precisão aceitável na detecção do estado estacionário para baixos níveis de ruído, mas é altamente sensível ao ruído, apresentando elevados valores de erros tipo I à medida que o nível de ruído aumenta. Ao aumentar o nível de ruído, não fornece resultados satisfatórios na detecção do estado não estacionário e classifica todas as medições como estando em estado estacionário. Na Figura 27, mostram-se os três casos de ruído testados. Quando o nível de ruído é baixo, é possível diferenciar claramente as faixas de estado não estacionário, embora classifique vários pontos nas zonas de estado estacionário de maneira errada, mas quando o nível de ruído aumenta, o método fica inútil na detecção.

Figura 27-Validação do Teste F modificado.

A: nível de ruído 1%. nível de ruído 5%. C: nível de ruído 10%. 1=SS, 0=NSS.

Tabela 7- Resultados erros obtidos para o Teste F modificado.

Nível de ruído	1%	5%	10%
Erro Tipo I	20	84,67	87
Erro Tipo II	16,67	13	12,67

5.3.1.3 Método de Wavelet

O método de Wavelet é uma ferramenta poderosa na eliminação de ruído e na detecção de estado estacionário. Na Figura 28 mostram-se os resultados obtidos, na figura A, a função suavizada obtida é apresentada, na qual pode-se observar como o efeito do ruído é minimizado pelo método, obtendo apenas uma representação do comportamento determinístico dos dados. A partir da primeira e a segunda transformada da função são estabelecidos os critérios de classificação de estados estacionários, permitindo obter respostas exatas dos estados e do tempo de duração das mudanças.

Figura 28- Validação Método de Wavelet.

A: Função reconstruída com alisamento $f_s(t)$. B: transformada de wavelet da função $Wsf(t)$. C: Transformada de wavelet da transformada $WWsf(t)$. Critério de estado estacionário 1=SS, 0=NSS.

5.3.2 Estudo de caso com dados reais

Para implementar o método com os dados da planta é importante estabelecer quais são as variáveis que representam o estado da operação na coluna, com pouca variabilidade mas com alta sensibilidade às mudanças.

No caso da coluna depreenizadora a corrente de alimentação é a principal perturbação distúrbio da operação, portanto a composição e a vazão na carga serão as possíveis fontes de mudança de estado estacionário. As temperaturas da coluna representam a estabilidade da operação, já que estas temperaturas caracterizam o comportamento da operação, a qualidade da separação, qualidade dos produtos e os distúrbios causados pela composição da carga. Deste modo, se essas medições forem estáveis, pode-se supor que a coluna opera em estado estacionário. De outra forma mudanças nas medições indicarão períodos de instabilidade.

Na Figura 29 são mostradas as médias das medições do perfil de temperatura na coluna em diferentes períodos de tempo. Pode-se observar como as medições são altamente sensíveis às mudanças operacionais no tempo, apresentando pequenos desvios, principalmente nas temperaturas abaixo da carga, as quais apresentam maior sensibilidade às mudanças da coluna como foi mostrado quando o modelo foi descrito. A ordem de magnitude da mudança é inferior a um Kelvin, mas é possível identificar uma mudança na operação através de pequenas mudanças nas medições.

Figura 29- Perfil de Temperatura na coluna ao longo do tempo.

A: Medições a cada hora durante um dia. B: Medições a cada 48 horas durante 10 dias. C: Medições a cada 6 dias durante um mês. D: Medições a cada 12 dias durante 2 meses.

Foi testado o método de Wavelet com os dados da planta, já que ele obteve uma resposta clara e rápida da identificação de estado (menos de um minuto para 300 medições com uma janela móvel de 64 pontos de amplitude) e sem precisar de um tratamento prévio de eliminação de ruído nem de identificação de *outliers*, cumprindo com as necessidades do método requerido na aplicação da RTO.

Foram utilizados os dados da Refinaria no período de disponibilidade de todas as medições. Especificamente no mês de Janeiro de 2009, foi feita a análise com as medições das temperaturas na coluna com uma média para cada hora. Os parâmetros estabelecidos como limites para a determinação de estado foram fixados como sendo o desvio padrão da primeira e da segunda derivada da transformada de *wavelet* para cada medição de temperatura das 10 disponíveis.

Os valores que estabelecem os limites da determinação são bem restritivos, encontrando apenas períodos curtos de operação em estacionário. Estes limites poderiam ser estabelecidos usando o conhecimento do pessoal de operação da planta, para se ter um pouco mais de flexibilidade na classificação, ou seja, uma faixa maior na qual o processo poderia ser considerado em estado estacionário.

Ao descer nos pratos da coluna o desvio padrão das medições aumenta (Tabela 8), mostrando que a sensibilidade das medições é mais importante nas duas medições disponíveis na zona de esgotamento.

Tabela 8- Desvio padrão das medições de temperatura na coluna durante dois meses

	T ₁	T ₁₇	T ₃₅	T ₅₁	T ₆₉	T ₈₅	T ₁₀₃	T ₁₁₉	T ₁₃₇	T ₁₅₇
Desvio Padrão	0,095	0,071	0,087	0,12	0,18	0,244	0,360	0,431	1,277	1,395

Os resultados da análise para os dois meses são apresentados na Figura 30 onde as temperaturas da carga ao topo são analisadas conjuntamente na figura A, obtendo intervalos de estados estacionário maiores do que os dados da figura B, que representam as medições na zona do fundo da coluna.

Figura 30- Resposta de estado estacionário com os dados de planta para o método de wavelet.

A: Resposta obtida com as medições do perfil de temperatura na zona de retificação.
B: Resposta obtida com as medições do perfil de temperatura na zona de esgotamento.

Fica claro que no período de uma semana de operação no final do intervalo apresentado acima, a operação pode ser considerada em estado estacionário. Este intervalo foi usado na validação do modelo com os dados de planta.

5.3.3 Conclusões Parciais

- O teste F modificado, fornece respostas satisfatórias do estado com baixos níveis de ruído, similar ao teste da variância em janela de tempo. Quando as medições contêm maior variabilidade, as respostas destes testes se tornam inválidas, precisando de um tratamento prévio dos dados para conseguir uma correta identificação do estado estacionário.
- O método de *wavelet* é uma ferramenta poderosa na detecção do estado estacionário, que consegue tanto eliminar as influências do ruído pelo método de filtragem quanto classificar corretamente os estados nas medições. Os erros apresentados pelo método de *wavelet* são mínimos, deixando respostas satisfatórias significativamente boas com um baixo custo computacional.
- Com a aplicação do método de *wavelet* na fase de análise de dados, pode se fazer a identificação do estado e a eliminação de alguns erros grosseiros.

- O perfil de temperatura na coluna, com 10 medições disponíveis é um bom indicador do comportamento do processo. É altamente sensível às mudanças na operação, especialmente as duas temperaturas medidas na zona de esgotamento da coluna.

5.4 ANÁLISE DO MODELO JUNTO AOS DADOS DE PLANTA

Foi realizada uma análise de sensibilidade do modelo e os resultados comparados com os dados da planta, validados no estado estacionário, para obter uma idéia inicial da sensibilidade aos valores das eficiências e a outros parâmetros.

Foi estabelecido um período de tempo em estado estacionário de uma semana. As especificações do modelo foram fixadas, com os dados reportados na planta em estado estacionário, reconciliando o balanço de massa.

Tabela 9- Valores de estado estacionário para análise de sensibilidade comparada aos dados de planta.

Carga			Destilado			Fundo		
F	t/h	kmol/h	F	t/h	kmol/h	F	t/h	kmol/h
	29,64895	691,1304		21,12066	501,8536		8,52829	198,2768
T	oC	K	T	oC	K	T	oC	K
	60,56094	333,7109		20,48915	293,6392		31,91607	305,0661
zpropy	% MOL	frac	zpropa	% MOL		zpropy	% MOL	
	71,9524	0,719524		0,308507	0,003085		6,540246	0,065402
zpropa	% MOL	frac	Refluxo			Saída refeedor		
	23,94209	0,239421	F	t/h	kmol/h	T	oC	K
				261,9241	6223,648		35,47146	308,6215
zetano	ppm							
	10,97509	0,00011						

5.4.1 Eficiências de Vapor de Murphree.

As eficiências definidas no modelo foram especificadas uma para cada componente: etano, propano e propeno, e fixadas em 1 para os outros componentes. Esses valores dependem dos regimes de fluxo das duas fases, configuração do prato e das propriedades físicas da mistura multicomponente (BOLLES, 1988). Assim as eficiências são definidas por:

$$E^{MV} = \left(\frac{Y_n - Y_{n-1}}{Y_n^* - Y_{n-1}} \right) \quad (48)$$

Onde Y_n^* corresponde à composição do vapor em equilíbrio com o líquido que deixa a etapa.

Na prática existe um gradiente de concentração entre a composição de equilíbrio e a do vapor. Até existem casos nos quais a fração de vapor do equilíbrio pode ser menor do que a composição do vapor real, para o qual a eficiência excede 100%. Os valores das eficiências variam de uma secção a outra, por isso é melhor ter separadamente uma para cada zona (KISTER, 1992).

O mais comum em práticas de RTO é adotar modelos de eficiência para colunas de destilação, onde os parâmetros são ajustáveis e atualizados com os dados de estado estacionário provenientes das medições de planta (LUO et al., 2012). A quantidade e qualidade desses dados limita o número de eficiências para estimar.

Na planta estão reportadas 10 medições de temperatura na coluna. Na Tabela 10 estão apresentadas a média dos dados reportados na terceira semana de Janeiro de 2009. Tem-se então a medição de 8 temperaturas para ajustar a eficiência na zona de retificação e somente duas na zona de esgotamento.

Tabela 10- Média das medições das temperaturas da coluna reportadas na planta

Prato	T (°C)
1	18,94
17	19,03
35	19,25
51	19,83
69	20,20
85	20,91
103	21,94
119	22,42
137	23,75
157	31,92

Para ajustar os valores reportados na planta com as eficiências na coluna, foram testados valores próximos de 100%. Para casos estudados na literatura para a separação propano-propeno, as colunas geralmente são muito altas (MUHRER *et al.*, 1990), com altas razões de refluxo.

Na Figura 31, é mostrado o ajuste de diferentes valores para as eficiências de Murphree e a queda de pressão na coluna. Foi ajustada a queda de pressão, pois os valores fornecidos pelo modelo não conseguiam atingir o perfil reportado pela planta. Para diminuir os valores do perfil de temperaturas tem que se diminuir a queda de pressão na coluna. À direita, na figura A mostra-se o perfil de temperatura obtido com valores de eficiência entre 0,7 e 1,5. Para todos os valores testados, o modelo não consegue representar os valores reportados na coluna, pois o perfil fornecido pelo modelo fica sempre acima dos valores reais. Os valores foram aumentados para valores acima de 100%, já que para misturas multicomponente é possível encontrar valores de eficiências de Murphree superiores a 1 (KRISHNA R, 1977)

devido a efeitos de difusão nas iterações dos n-componentes no sistema. No entanto, o modelo não consegue chegar nos valores do perfil de temperatura dos dados de planta até para um valor máximo de 1.5 para as duas eficiências.

Figura 31- Perfil de temperatura obtido com o modelo e os dados de planta.
A: Ajuste dos valores das eficiências na coluna. B: Ajuste da queda de pressão na coluna.

Para ajustar os dados é preciso então deslocar o perfil de temperatura para valores de temperaturas menores, o que é possível conseguir somente com o efeito da queda de pressão na coluna ou com a composição da alimentação.

5.4.2 Queda de pressão na coluna.

A instrumentação de planta somente fornece medidas da pressão no topo e no fundo da coluna, portanto se tem medição da queda total na coluna mas não da queda de pressão por prato, deixando uma incerteza do comportamento da pressão ao longo da coluna.

Foram testados então diferentes valores para as quedas de pressão distribuídas linearmente por prato. Como na planta são medidas somente a pressão no topo e no fundo, foi considerada uma incógnita que corresponde à queda de pressão nos pratos das duas das seções de modo a que a perda de carga total

corresponda à medida. Na parte B da Figura 31, mostra-se como, ao diminuir o valor de projeto na planta de 0,0075 atm (ao que correspondem os parâmetros) o perfil fornecido pelo modelo consegue atingir os valores menores requeridos.

Existem correlações complexas para o cálculo da queda de pressão em pratos de orifício (BENNETT *et al.*, 1983), nas quais seria preciso estimar parâmetros diferentes com as configurações dos pratos, vazões de líquido e vapor e as propriedades das fases, sendo necessário então um detalhamento mais rigoroso do modelo.

Contudo, o perfil de temperatura na coluna pode ser ajustado com apenas um valor, quando é assumida a queda de pressão igual para todos os pratos. Por zona, basta portanto definir um parâmetro para cada uma das zonas.

É fato que as vazões e as propriedades físicas são significativamente diferentes em cada prato, mas existe um comportamento similar para cada seção da coluna.

Na Figura 32 mostram-se os resultados obtidos ajustando os valores das eficiências para dois casos, à direita, a figura A mostra o a análise de sensibilidade das eficiências com somente um parâmetro de queda de pressão (onde não é respeitado a perda de carga total), e à esquerda está o ajuste com dois parâmetros de queda de pressão, um para cada zona.

Figura 32- Perfil de temperatura obtido ajustando valores das eficiências de Murphree e a queda de pressão.

A: Ajuste de um parâmetro da queda de pressão. B: Ajuste de dois parâmetros da queda de pressão.

Os resultados obtidos nos dois casos são bem próximos, no entanto, a maior diferença fica no ajuste da perda total de carga, que leva a uma melhora do ajuste, ao ter um parâmetro para cada zona, conseguindo ajustar melhor o valor de queda de pressão total na coluna.

A queda de pressão tem um maior efeito na zona de esgotamento. Ao ajustar os parâmetros ao perfil de temperatura, a coluna resulta com uma queda de pressão de 0,018 por prato, quase 4 vezes maior do que na zona de retificação, a qual obtém um valor de 0,0047 por prato.

Na zona de esgotamento somente estão disponíveis duas medições de temperatura. No entanto, a temperatura de fundo apresenta um valor muito mais elevado, que é impossível de atingir com as especificações estabelecidas nesta condição da operação.

A pressão afeta diretamente as eficiências de separação. Ao incrementá-la pode-se ter um aumento na eficiência de separação por causa da redução da viscosidade do líquido e da volatilidade relativa (KISTER, 1992), pelo qual na zona

com maior queda de pressão as eficiências obtidas são bem maiores do que na outra seção.

5.4.3 Composição da carga.

Para ilustrar a importância da precisão na caracterização da carga, a quantidade dos componentes mais pesados foi alterado. Ao se diminuir o valor da queda de pressão, o valor da temperatura de fundo se afasta do valor reportado, mesmo melhorando o ajuste na tendência geral do perfil. A única forma de fazer com que essa temperatura tenha um valor superior a 300K é aumentar a composição dos componentes pesados, que é uma incerteza que se tem nas composições reportadas.

Como somente se tem medição da composição dos três componentes mais leves na carga, tem que se considerar a vazão restante que entra proporcional aos outros oito componentes, segundo os valores de projeto. Aumenta-se então a composição dos componentes pesados de 0,8% reportado nos valores de projeto a 4% (valor da vazão restante do fechamento do balanço de massa com os dados reportados nas composições de etano propano e propeno na carga).

As diferenças nas temperaturas nos pratos acima da carga (medidas dos pratos 85 e 103), com os valores reportados e os fornecidos pelo modelo, é uma outra indicação da presença de componentes pesados na corrente de alimentação. Quando estes componentes entram vaporizados na coluna, o vapor é arrastado até pratos mais altos atingindo temperaturas maiores nesta zona. Possivelmente pela mesma razão é que o perfil de temperatura fornecido pelo modelo não consegue atingir os pontos acima da alimentação nos pratos 103 e 119.

Na Tabela 11 estão reportados 4 casos nos quais ao mudar o valor na composição dos outros componentes se tem uma melhoria no ajuste das temperaturas. O caso 1 representa as composições ajustando o valor restante na vazão proporcionalmente aos dados de projeto sem aumento dos componentes pesados, o caso 2 tem um aumento no componente em maior proporção para 5,5%, no caso 3 esse 5,5% foi dividido nos dois componentes em maior proporção e no caso 4 foi dividido proporcionalmente para todos os componentes restantes. Os

casos representam a sensibilidade ao ajuste de 1, 2 ou 7 parâmetros na composição da carga.

Tabela 11- Variação da composição da Carga

Fração Molar	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Etano	0,00011	0,00011	0,00011	0,00011
Propeno	0,7195	0,712	0,7125	0,712
Propano	0,2394	0,232	0,2324	0,232
iButeno	0,0081	0,055	0,0275	0,0094
1Buteno	0,0053	0	0	0,0066
C2Buteno	0,0050	0	0	0,0063
T2Buteno	0,0050	0	0	0,0063
12BD	0,0048	0	0	0,0061
iButano	0,0077	0	0,0275	0,0090
Butano	0,0050	0	0	0,0063

Na Tabela 12 estão apresentados os valores obtidos para a soma quadrática dos erros nas temperaturas para cada caso. É importante ressaltar que ao aumentar a quantidade na fração dos pesados o ajuste melhora 36% na zona de retificação e consegue atingir o valor da temperatura de fundo. Pode-se observar como pequenas mudanças nos algarismos significativos da composição afetam significativamente o ajuste justificando a importância de ter uma caracterização da composição na carga com maior precisão.

Tabela 12- Soma dos erros na temperatura ao quadrado.

	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Z. Retificação	1,8350	0,6633	0,6654	0,6629
Z. Esgotamento	1,3864	0,0322	0,0012	0,0007

A Figura 33 mostra como os valores das temperaturas aumentam na zona de retificação quando a composição de um componente pesado é maior, melhorando assim o ajuste.

Figura 33- Ajuste da composição da carga.

5.4.4 Eficiência Adiabática do Compressor.

Para analisar a sensibilidade em relação a eficiência adiabática do compressor, foi comparado o valor da medição na saída do vapor com os dados fornecidos pelo modelo na análise desta variável. Para um valor da temperatura de saída de 320,9 K a eficiência no compressor é de 89%. Na Figura 34 são mostrados os resultados obtidos.

Figura 34- Análise de sensibilidade da eficiência adiabática do compressor com a temperatura de saída do vapor.

5.4.5 Conclusões Parciais

- Os valores das eficiências de Murphree (E_R^{MV}, E_S^{MV}), foram estimados próximos de 1 na zona de esgotamento e perto de 0,3 na zona de retificação.
- A queda de pressão é um parâmetro sensível para a determinação do perfil de temperatura na coluna, portanto é um parâmetro importante a ser estimado. Podem ser estimados dois parâmetros, um para cada zona ($\Delta P_R, \Delta P_S$), sendo maior o valor da queda de pressão na zona de esgotamento do que na zona de retificação
- O modelo pode ser ajustado com os dados disponíveis de planta, conseguido uma representação próxima do perfil de temperatura da coluna, nas condições estabelecidas por um cenário operacional de estado estacionário.

5.5 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.

O problema de estimação de parâmetros foi resolvido usando uma função de otimização disponível no EMSO. O modelo da coluna foi ajustado utilizando diferentes funções objetivo, para avaliar o enfoque acoplado da DRPE no modelo em questão.

O modelo foi ajustado, deixando alguns parâmetros como variáveis de otimização, com restrições nos valores dos limites máximos e mínimos de acordo com os valores encontrados no ajuste do modelo descrito acima. A convergência do modelo com dados não reconciliados foi avaliada (sem pré-tratamento), obtida a convergência e analisadas as respostas com relação a sua coerência. As medidas de planta incluídas na função objetivo foram:

- Perfil de temperatura na coluna.
- Vazão e Temperatura de saída do compressor.
- Queda de pressão.
- Composição dos produtos (topo e fundo).
- Vazões de carga e de produtos.

Os resultados obtidos estão reportados na Tabela 13, onde pode se observar resultados equivalentes nas diferentes funções objetivo. Os tempos de convergência são próximos para todas as funções, com diferenças mínimas entre uma função e outra.

Tabela 13- Resultados da Otimização do modelo

Função Objetivo	Valor das estimativas dos Parâmetros							
	Valor da função objetivo	iterações	Tempo de convergência (seg)	η_c	E_R^{MV}	E_S^{MV}	dP_R	dP_S
LS	19,7848	20	25,7456	0,75330	0,95208	0,95439	0,004	0,02
WLS	1,72E-77	18	23,2935	0,75330	0,95250	0,9544	0,004	0,02
C. Normal	0,103198	18	20,5893	0,75330	0,95250	0,95440	0,004	0,02
Cauchy	0	18	20,8733	0,75330	0,95250	0,9544	0,004	0,02
Logística	0,60206	18	21,7294	0,75330	0,95250	0,95440	0,004	0,02
Lorentziana	-0,00255	18	23,1814	0,75330	0,95250	0,95440	0,004	0,02
de Fair	50,7581	25	31,275	0,75329	0,95	0,95438	0,004	0,02
M-estim.	-0,91125	18	23,2215	0,75330	0,95250	0,9544	0,004	0,02

Os pesos e parâmetros usados para cada função objetivo foram os reportados por Ozurt, *et al.* 2004, que reportaram uma sintonização das constantes para as diferentes funções de máxima verossimilhança na resolução do problema de reconciliação de dados. Os valores estão reportados na Tabela 14 mas é importante fazer uma análise com maior detalhamento destes parâmetros ao definir a função objetivo no problema específico.

Tabela 14- Parâmetros de Ajuste das funções objetivo.

Função	Parâmetro
Normal contaminada	$b_{CN} = 10, \quad p_{CN} = 0,235$
Cauchy	$c_C = 2,3849$
Logística	$c_{Lo} = 0,602$
Lorentziana	$c_L = 2,6$
de Fair	$c_F = 1,3998$
M-estim.	$a_H = 1,35 \quad b_H = 2,7$

Com os valores das estimativas obtidos, o modelo fornece o perfil de temperatura mostrado na Figura 35, onde pode-se observar que é possível atingir as temperaturas na zona de retificação, no entanto as temperaturas na zona da carga apresentam uma erro significativo, o que como foi dito acima é devido à falta de conhecimento da carga, pois, o modelo ainda não considera um parâmetro de composição dos componentes não reportados.

Figura 35- Ajuste do modelo na estimação de parâmetros.

Também foram comparadas as previsões do modelo com os dados de planta reportados, calculando o erro relativo com as previsões do modelo. A Tabela 15, mostra os valores reportados e os valores obtidos do modelo ajustado. O principal erro encontrado está na composição dos produtos, o modelo não atinge os valores dos contaminantes das duas correntes dos produtos (destilado e fundo) reportados pela planta, embora as temperaturas estejam ajustadas.

Tabela 15- Comparações das previsões do modelo ajustado.

Correntes	Variável medida				EMSO				Diferença relativa (%)			
	T	P	V	C ₃ =/C ₃	T	P	V	C ₃ =/C ₃	T	P	V	C ₃ =/C ₃
Vapor de cima	292,1	8,99			292,1	9,71			0,008	7,9		
Vapor de saída do reboiler	305,3				309,1				1,23			
saída do compressor	320,9				323,6				0,84			
Líquido condensado no refeedor para HX2	306,8		6948,1		308,6		6612,9		0,58		4,83	
Líquido para HX2			681,53				817,33				19,93	
Produto de Topo	293,6		501,85	0,0039	292,1		392,18	3.59E-06	0,54		21,85	8.6E+04
roduto de Fundo	3051		298,95	0,0654	304,2		298,95	0.351	0,29		3.E-05	8.4E+01

Para ajustar erros adequados pela falta de informação na composição da carga foram realizados estudos de caso onde são incluídas as frações dos componentes pesados como parâmetros na otimização. Os resultados estão reportados na Tabela 16. No caso 1 é ajustado um parâmetro para o componente

pesado em maior proporção do caso base, o caso 2 estão ajustados dois parâmetros e no caso 3 estão ajustados 7 parâmetros para todas as composições desconhecidas.

Tabela 16- Estimativas da composição da carga

Fração Molar	Caso Base	Caso 1	Caso 2	Caso 3
Etano	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
Propeno	0,7195	0,7195	0,7195	0,7195
Propano	0,2394	0,2394	0,2394	0,2394
Buteno	0,0081	0,0410	0,0408	0,0050
1Buteno	0,0053	0,0000	0,0000	0,0044
C2Buteno	0,0050	0,0000	0,0000	0,0090
T2Buteno	0,0050	0,0000	0,0000	0,0043
12BD	0,0048	0,0000	0,0000	0,0002
iButano	0,0077	0,0000	0,0002	0,0106
Butano	0,0050	0,0000	0,0000	0,0076

O melhor ajuste reportado foi no caso 3 no qual foi calculada a proporção de cada componente, no entanto a diminuição na função objetivo não é significativa, pelo qual pode se concluir, que somente com um parâmetro adicional no componente i-Buteno pode melhorar o ajuste da carga como foi mostrado na Figura 34. A comparação entre ajustar um ou dois parâmetros na carga encontrou que não é significativa a proporção de outro componente pesado, pois, a diferença nas composições estimadas é mínima e o ganho é irrelevante.

Para tentar ajustar o problema da predições das composições dos produtos, foi aumentado o peso destas medições na função objetivo visando melhorar o ajuste do modelo. O melhor ajuste obteve um erro relativo de 7,419% na medida da composição da impureza no destilado, mas as impurezas do produto de fundo somente melhora até 55%. Para obter estes resultados as estimativas das eficiências caíram para 50% o que mostraria um rendimento ineficiente da separação da coluna ou problemas de calibração nestas medidas.

O modelo apresenta inconsistências numéricas no cálculo da válvula de expansão da corrente de carga. Esses desajustes vão se propagando nas iterações da otimização, afastando o cálculo da resposta e impedindo a convergência. As especificações termodinâmicas do líquido e vapor que ingressam à coluna são valores chave altamente sensíveis na simulação da coluna, que influenciam significativamente a composição final dos produtos, mudando fortemente as

predições do modelo com pequenos desajustes numéricos. Isto deverá ser resolvido para a implementação industrial evidentemente.

No entanto, este primeiro estudo da estimativa de parâmetros no modelo da coluna depropenizadora deixa aberto o problema a estudos subsequentes mais rigorosos. É importante desenvolver a análise de identificabilidade do modelo, tanto estrutural, para definir se o modelo permite uma única determinação dos parâmetros, quanto prática, para avaliar se a qualidade e quantidade das medições disponíveis permite esta determinação. Em modelos mecânicos na Engenharia Química, pode existir um conjunto muito grande de parâmetros, e podem ser cometidos sérios erros se não se tiver um especial cuidado na estimativa de parâmetros (VAJDA *et al.*, 1989).

6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O foco principal desta dissertação foi identificar as principais metodologias na análise de dados para implementação de uma RTO assim como estabelecer as características importantes da operação para a modelagem do processo na aplicação industrial. As principais contribuições deste trabalho assim como as recomendações para trabalhos futuros são apresentadas a seguir.

6.1 ANÁLISE DA VARIABILIDADE ASSOCIADA À INSTRUMENTAÇÃO

No estudo da operação e instrumentação na planta, foram analisadas as medições disponíveis para os dados reportados desde o ano 2008 até 2012. Foram encontrados alguns indicadores fora de operação, falta de informação o que levou a períodos de tempo muito curtos em estado estacionário disponíveis para o ajuste do modelo.

Também foi sugerida a necessidade de implementar uma melhor caracterização da composição das correntes, pois, os indicadores existentes não dão a informação necessária para estabelecer redundância nestas variáveis, impedindo assim a validação da informação reportada. É importante se fazer uma calibragem e ajuste na instrumentação existente para obter informação confiável do comportamento da operação.

Como alternativa, o mesmo estudo foi realizado em outra unidade produtora de propeno, também de propriedade da PETROBRAS, que reporta dados com maior precisão com erros inferiores a 0,1% no fechamento dos balanços de massa. Sugere-se implementar o sistema RTO nesta planta, já que há disponibilidade de dados históricos da operação em uma ampla faixa de tempo. Como a configuração de outra refinaria com uma unidade produtora de propeno é similar à estudada, somente é preciso mudar as condições de operação no modelo para obter o ajuste necessário.

6.2 ANÁLISE DO MODELO

Na análise do modelo desenvolvido em EMSO encontrou-se que é possível mudar as especificações e os parâmetros em uma ampla faixa, sem mudar as condições iniciais, portanto, o modelo apresenta robustez na convergência. O

modelo consegue representar a operação em diferentes cenários operacionais com rápida convergência, características importantes para que um modelo em RTO.

A análise do processo é uma etapa chave no entendimento da operação. Ela permitiu melhorar a robustez do modelo e conhecer as características importantes do comportamento do processo, tais como, a importância dos componentes em menor proporção na carga, que mudam significativamente o perfil de temperaturas na coluna, o que enfatiza a importância de uma análise da carga com maior precisão. Por outro lado, tanto as temperaturas de saída dos trocadores de calor quanto a vazão de refluxo são variáveis importantes de decisão para a otimização, já que têm um efeito direto na composição do produto e na demanda energética do processo.

6.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO MODELO

Em uma primeira aproximação ao ajuste do modelo, conseguiu-se ajustar o perfil de temperaturas com os parâmetros de eficiências e queda de pressão na coluna. Os parâmetros estabelecidos no modelo foram ajustados aos dados disponíveis da planta usando um procedimento heurístico.

Para trabalhos futuros, é importante fazer estudos de identificabilidade prática e estrutural do modelo.

Na definição da função objetivo de máxima verossimilhança, sugere-se o uso das funções dos estimadores redescendentes como as melhores candidatas para fazer a estimação de parâmetros num enfoque conjunto de DREP.

6.4 DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONÁRIO

No estudo de métodos de determinação de estado estacionário, comparou-se diferentes testes reportados na literatura e foi encontrado que o método da transformada *wavelet* é um excelente candidato, que cumpre com as condições requeridas na aplicação em RTO. Ela permite identificar claramente períodos de estado estacionário com baixo custo computacional. Para trabalhos futuros sugere-se testar o comportamento da análise em linha, e ajustar os parâmetros de determinação do estado de acordo com as características dos históricos da operação, para ter uma maior flexibilidade na determinação. Sugerem-se as temperaturas da coluna como as boas candidatas para a determinação, principalmente as temperaturas no esgotamento.

6.5 ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS.

Os primeiros resultados da estimação de parâmetros mostraram que o modelo pode ser ajustado através da resolução do problema conjunto de reconciliação de dados e estimação de parâmetros, fornecendo ajustes satisfatórios do modelo com os dados de planta sem pré-tratamento. Conseguiu-se convergência, no entanto, encontram-se sérios problemas numéricos que devem ser ajustados para melhorar as respostas do ajuste do modelo, e que não permitem garantir a qualidade das estimativas de parâmetros obtidas. Trabalhos futuros com maior rigor devem ser desenvolvidos no projeto para aprimorar as técnicas de resolução do problema de estimação de parâmetros para problemas de identificabilidade quantitativa do modelo.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ZANIN, A.C. **Implementação de um controlador em tempo Real**. São Paulo: Universidade de São Paulo, 2011.

ARORA, N.; BIEGLER, L.T. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 25, n. 11–12, p. 1585–1599, 15 nov 2001.

BAKSHI, B. R.; STEPHANOPOULOS, G. Representation of process trends—III. Multiscale extraction of trends from process data. **Computers & Chemical Engineering**, v. 18, n. 4, p. 267–302, abr 1994.

BENDAT, J. S.; PIERSON, A. G. **Random Data: Analysis & Measurement Procedures**. 3. ed. Wiley-Interscience, 2000.

BENNETT, D. L.; AGRAWAL, R.; COOK, P. J. New pressure drop correlation for sieve tray distillation columns. **AIChE Journal**, v. 29, n. 3, p. 434–442, 1983.

BHAT, S. A.; SARAF, D. N. Steady-State Identification, Gross Error Detection, and Data Reconciliation for Industrial Process Units. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 43, n. 15, p. 4323–4336, 2004.

BOLLES, W. L. Distillation tray fundamentals, by M. J. Lockett, 1986, 226 pages, Cambridge University Press, Cambridge, England and New York, \$54.50 (U.S.). **The Canadian Journal of Chemical** v. 66, n. 1, p. 173–174, 1988.

CAMOLESI, V. J.; MORO, L. L. F.; ZANIN, A. C. Implantação de um otimizador em tempo real (RTO) no conversor de uma unidade de craqueamento catalítico. Sba: Controle & Automação Sociedade Brasileira de Automatica, v. 19, n. 2, jun 2008.

CAO, S.; RHINEHART, R. R. An efficient method for on-line identification of steady state. **Journal of Process Control**, v. 5, n. 6, p. 363–374, dez 1995.

CARRANZA, M. V. **Avaliação do método Wavelet-Galerkin multi-malha para caracterização das propriedades de petróleo e subprodutos**. Dissertação de Mestrado. Disponível em: <<http://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/3/3137/tde-02042008-175109/pt-br.php>>. Acesso em: 30 jan. 2013.

CHACHUAT, B.; SRINIVASAN, B.; BONVIN, D. Adaptation strategies for real-time optimization. **Computers & Chemical Engineering**, v. 33, n. 10, p. 1557, out 2009.

CHACHUAT, BENOÎT; SRINIVASAN, BALA; BONVIN, DOMINIQUE. Model parameterization tailored to real-time optimization. In: BERTRAND BRAUNSCHWEIG AND XAVIER JOULIA (Ed.). **Computer Aided Chemical Engineering**. [S.l.]: Elsevier, 2008. v. Volume 25p. 1–13.

CROWE, C. M. Reconciliation of process flow rates by matrix projection. Part II: The nonlinear case. **AIChE Journal**, v. 32, n. 4, p. 616–623, 1986.

CROWE, C. M.; CAMPOS, Y. A. G.; HRYMAK, A. Reconciliation of process flow rates by matrix projection. Part I: Linear case. **AIChE Journal**, v. 29, n. 6, p. 881–888, 1983.

DARBY, M. L.; NIKOLAOU, M.; JONES, J.; NICHOLSON, D. RTO: An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 6, p. 874–884, jul 2011.

FINCO, M. V.; LUYBEN, W. L.; POLLECK, R. E. Control of distillation columns with low relative volatilities. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 28, n. 1, p. 75–83, 1 jan 1989.

SOUZA, G.; ODLOAK, D.; ZANIN, A. C. Real Time Optimization (RTO) with Model Predictive Control (MPC). **Computer Aided Chemical Engineering**. [S.l.]: Elsevier, 2009. v. 27p. 1365–1370.

GREEN, D.; PERRY, R. **Perry's Chemical Engineers' Handbook, Eighth Edition**. [S.l.]: McGraw-Hill Companies, Incorporated, 2007.

HARWARDT, A.; MARQUARDT, W. Heat-integrated distillation columns: Vapor recompression or internal heat integration? **AIChE Journal**, p. n/a–n/a, 2012.

HUANG, RUI. **Nonlinear Model Predictive Control and Dynamic Real Time Optimization for Large-scale Processes**. Pittsburgh: Carnegie Mellon University, 2010.

JIANG, T.; CHEN, B.; HE, X.; STUART, P. Application of steady-state detection method based on wavelet transform. **Computers & Chemical Engineering**, v. 27, n. 4, p. 569–578, 15 abr 2003.

JOE Y., WANG D., ROMAGNOLI J. TAY A. Robust and Efficient Joint Data Reconciliation-Parameter Estimation Using Generalized Objective Function. v. The National University of Singapore, 10 Kent Ridge Cres., Singapore 119260, 2006.

JOHNSTON, L. P. M.; KRAMER, M. A. Maximum likelihood data rectification: Steady-state systems. **AIChE Journal**, v. 41, n. 11, p. 2415–2426, 1995.

ROMAGNOLI, J. A.; SÁNCHEZ, M. V. Steady-state data reconciliation. **Process Systems Engineering**. [S.l.]: Academic Press, 1999. v. Volume 2p. 75–92.

KISTER, H. **Distillation Design**. 1. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Professional, 1992.

KRISHNA R, M. H. F., SREEDHAR R, STANDART G.L. Murphree point efficiencies in multicomponent systems. **Trans IChemE**, v. 55, p. 178–186, 1977.

LIMA, P. C. **Wavelets: uma introdução**. [S.l. s.n.], 2003.

LOCKETT, M. J. **Distillation Tray Fundamentals**. 1. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, 2009.

LUO, N.; QIAN, F.; YE, Z.-C.; CHENG, H.; ZHONG, W.-M. Estimation of Mass-Transfer Efficiency for Industrial Distillation Columns. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 51, n. 7, p. 3023–3031, 22 fev 2012.

MACDONALD, R. J.; HOWAT, C. S. Data reconciliation and parameter estimation in plant performance analysis. **AIChE Journal**, v. 34, n. 1, p. 1–8, 1988.

MALLAT, S.; HWANG, W. L. Singularity detection and processing with wavelets. **IEEE Transactions on Information Theory**, v. 38, n. 2, p. 617–643, mar 1992.

MAUHAR S. M., BARJAKTAROVIĆ B. G., SOVILJ M. N. Optimization of Propylene—Propane Distillation Process. 2004.

MUHRER, C. A., C. M. A., LUYBEN, L. W. Control of vapor recompression distillation columns - Industrial & Engineering Chemistry Research (ACS Publications). **American Chemical Society**, v. 29, p. 59–71, 1990.

ÖZYURT, D. B.; PIKE, R. W. **Theory and practice of simultaneous data reconciliation and gross error detection for chemical processes**. [S.l: s.n.], 2004.

ROBERTS, P. D.; WILLIAMS, T. W. C. On an algorithm for combined system optimisation and parameter estimation. **Automatica**, v. 17, n. 1, p. 199–209, jan 1981.

ROTAVA, O, Z., A. C. Multivariable control and real-time optimization – an industrial practical view | Hydrocarbon Processing | June 2005. **Hydrocarbon Processing**, [S.d.].

LE ROUX, G. A. C.; SANTORO, B. F.; SOTELO, F. F.; TEISSIER, M.; JOULIA, X. Improving steady-state identification. **18th European Symposium on Computer Aided Process Engineering**. [S.l.]: Elsevier, 2008. v. Volume 25p. 459–464.

RUCH, D. K.; FLEET, P. J. V. **Wavelet Theory: An Elementary Approach With Applications**. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2009.

SAVITZKY, A.; GOLAY, M. J. E. Smoothing and Differentiation of Data by Simplified Least Squares Procedures. **Anal. Chem.**, v. 36, n. 8, p. 1627–1639, 1964.

SEQUEIRA, S. E.; GRAELLS, M.; PUIGJANER, L. Real-Time Evolution for On-line Optimization of Continuous Processes. **Ind. Eng. Chem. Res.**, v. 41, n. 7, p. 1815–1825, 2002.

SOARES, R. SECCHI, A.R. EMSO: A New Environment for Modelling, Simulation and Optimisation. 2003.

TJOA, I. B.; BIEGLER, L.T. Simultaneous strategies for data reconciliation and gross error detection of nonlinear systems. **Computers & Chemical Engineering**, v. 15, n. 10, p. 679–690, out 1991.

VAJDA, S.; RABITZ, H.; WALTER, E.; LECOURTIER, Y. Qualitative and Quantitative Identifiability Analysis of Nonlinear Chemical Kinetic Models. **Chemical Engineering Communications**, v. 83, n. 1, p. 191–219, 1989.

VALFO P., VAJDA S. An Extended Marquardt-Type Procedure for Fitting Error in Variables Models. **Computers & Chemical Engineering**, v. 11, n. 1, p. 37–43, 1987.

VEVERKA, V. V.; MADRON, F. **Material and Energy Balancing in the Process Industries: From Microscopic Balances to Large Plants**. [S.l.]: Elsevier, 1997.

VRTECH. **VRTherm manual do usuário**. [S.l.]: www.vrtech.com.br., 2008.

WALTER, E.; PRONZATO, L. **Identification of Parametric Models: from Experimental Data**. Softcover reprint of hardcover 1st ed. 1997 ed. [S.l.]: Springer, 2010.

APÊNDICE A

PROGRAMAS UTILIZADOS NA VALIDAÇÃO DOS MÉTODOS DE ESTADO ESTACIONÁRIO

```
%=====
%               ANÁLISE DE DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONARIO
%           METODO DO TESTE F IMPLEMENTADO NA APLICAÇÃO DA RTO DA
%               ASPEN TECH
%=====
%Este programa utiliza o teste estatístico F para a detecção do estado.
%Os parâmetros são estabelecidos com o tamanho da janela de análise.
%=====
%LEITURA DOS DADOS MEDIDÕES DAS VARIÁVEIS
%=====
clear all
close all
A=xlsread('aleat_pendi');
%A=xlsread('aleat_exp');
[f,c]=size(A);
%=====
%CRITERIO DE IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONARIO
%=====
n=60;%tamanho da janela de análise
cri=1.5814;
lim=f-(n-1);

for j=1:c
    for i=1:lim
        w = A(i:i+n-1,j);    %[n,1]
        [f2,c2] = size(w);
        media = mean(w);
        dm = [];
        for k = 1:n
            dm = [dm;media];
        end
        v1 = (w-dm).^2;    %[n,1]
        V1(i,j) = (1/(n-1))*sum(v1);    %[n,c]

        x2 = w(2:f2,1);
        x1 = w(1:f2-1,1);
        v2 = (x2-x1).^2;    %[n-1,1]
        V2(i,j) = (1/(size(v2,1)-1))*sum(v2);    %[n,c]
        ratio(i,j) = V2(i,j)/V1(i,j);    % [f-(n-1),c] dif
        quadrada/variancia
        if ratio(i,j) >= cri
            R(i,j) = 1;
        else
            R(i,j) = 0;
        end
    end
end
end
%=====
```

```

%=====
%               ANÁLISE DE DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONARIO
%               METODO DO TESTE F MODIFICADO
%=====
%Este programa utiliza o teste estatístico F com a modificação do
filtro no calculo das variâncias.
%=====
%LEITURA DOS DADAS MEDIÇÕES DAS VARIÁVEIS
%=====
clear all
A = xlsread('aleat_pendi');
%A=xlsread('aleat_exp');
N=1000;
J=1;
SSD=zeros(N,9);
%=====
%CRITERIO DE IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONARIO
%Constantes do Filtro segundo o artigo de Shrikan e Deoki
%=====
L1=0.06;
L2=0.25;
L3=0.3;
Xf=zeros(N,1);
vf2=zeros(N,1);
df2=zeros(N,1);
Rc=2;          %(Cao and Rhinehart)
p=9;
for l=1:p
w=A(:,l);
for i=2:N;
        vf2(1)=std(w(1));
        df2(1)=std(w(1));
        Xf(1)=w(1);
        Xf(i)=L1*w(i)+(1-L1)*Xf(i-1);
        vf2(i)=L2*(w(i)-Xf(i-1))^2+(1-L2)*vf2(i-1);
        df2(i)=L3*(w(i)-w(i-1))^2+(1-L3)*df2(i-1);
        R(i,l)=(2-L1)*vf2(i)/df2(i);
end

for j=1:N
        if R(j,l) > Rc
                ssd=0;
        else ssd=1;
        end
        SSD(j,l)=ssd;
end
%=====

```

```

%=====
%               ANÁLISE DE DETECÇÃO DE ESTADO ESTACIONARIO
%               METODO DA TRANSFORMADA DE WAVELET
%=====
%Este programa utiliza funções do toolbox wavelet na análise de
%identificação de estados estacionários, ingressando dados de
%medições.
%Tem-se que definir os parâmetros dos critérios de estado estacionário
%das primeira e segunda transformadas, para cada variável segundo o
%desvio padrão em condiciones de regime permanente.
%=====
%LEITURA DOS DADAS MEDIÇÕES DAS VARIÁVEIS
close all
clear all
A = xlsread('aleat_pendi');
n=256;% estudar tamanho min da janela
[a,b]=size(A);
%=====
%CONSTRUÇÃO DA TRASFORMADA DE WAVELET
%=====
J=6;%análise wavalet milti-escala de ordem 6
lim=a-(n-1);
Fs=[];
W1=[];
WW1=[];
tic;
for i=1:lim
    s=A(i:i+n-1);
    for j=1:J
        [swa,swd]=swt(s,6,'db1');
        [thr,sorh]=ddencmp('den','wv',s);
        dswd=wthresh(swd,sorh,thr);
        dns=iswt(swa,dswd,'db1');
    end
%=====
%METODO DE ELIMINAÇÃO DE RUÍDO
%=====
[c,l]=wavedec(dns,6,'db1');
w=cwt(dns,6,'db1');
%=====
%CRITERIO DE IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONARIO
%=====
Ts=0.7257;%limiais fixos com as variancias estandar de cada variavel
em condições estado estacionario
Tu=2.1772;
ww=cwt(w,6,'db1');
fs = waverec(c,l,'db1');
Tw=0.1592;

    if abs(w(240))<Ts && abs(ww(240))<Tw;
        ssd=1;
    else ssd=0;
    end
    SSD(i)=ssd;
    Fs=[Fs,fs(240)];
    W1=[W1,w(240)];
    WW1=[WW1,ww(240)];
end
%=====

```