

DANILO RAMOS CORREA DE MENEZES

Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real  
em uma unidade de produção de propeno

São Paulo  
2016

DANILO RAMOS CORREA DE MENEZES

Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real  
em uma unidade de produção de propeno

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

São Paulo  
2016

DANILO RAMOS CORREA DE MENEZES

Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real  
em uma unidade de produção de propeno

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

Área de Concentração:  
Engenharia Química

Orientador: Prof. Dr. Galo Antonio  
Carrillo Le Roux

São Paulo  
2016

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, \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_ de \_\_\_\_\_

Assinatura do autor: \_\_\_\_\_

Assinatura do orientador: \_\_\_\_\_

### Catálogo-na-publicação

Menezes, Danilo Ramos Correa de

Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real em uma unidade de produção de propeno / D. R. C. Menezes -- versão corr. -- São Paulo, 2016.

78 p.

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

1.Tempo-Real (Otimização) 2.de Dados (Modelagem; Otimização)  
3.Aplicação Industrial de Otimização 4.Refínarias de Petróleo I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Química II.t.

## AGRADECIMENTOS

Ao professor Galo Antonio Carrillo Le Roux, pela orientação ao longo do trabalho e pela oportunidade de fazer parte deste projeto.

Aos meus pais Valmir Menezes e Tereza Menezes, por todo o carinho, incentivo e apoio às minhas escolhas.

À Andréa Zupo, pelo incentivo, apoio, paciência e companheirismo que me ajudaram no desenvolvimento do trabalho.

Aos colegas de trabalho e laboratório, pelos apoios e sugestões, bem como pelas risadas que foram fundamentais para a finalização deste trabalho.

## RESUMO

Com o objetivo de aumentar o lucro de plantas químicas, a Otimização em Tempo Real (RTO) é uma ferramenta que busca determinar as condições ótimas operacionais do processo em estado estacionário, respeitando as restrições operacionais estabelecidas. Neste trabalho foi realizada a implementação prática de um ciclo RTO em um processo de destilação por recompressão de vapor (VRD), propileno-propano, da Refinaria de Paulínia (Petrobras S.A.), a partir de dados históricos da planta. Foram consideradas as principais etapas de um ciclo clássico de RTO: identificação de estado estacionário, reconciliação de dados, estimação de parâmetros e otimização econômica. Essa unidade foi modelada, simulada e otimizada em EMSO (*Environment for Modeling, Simulation and Optimization*), um simulador de processos orientado a equações desenvolvido no Brasil. Foram analisados e comparados dois métodos de identificação de estado estacionário, um baseado no teste estatístico F e outro baseado em *wavelets*. Ambos os métodos tiveram resultados semelhantes e mostraram-se capazes de identificar os estados estacionários de forma satisfatória, embora seja necessário o ajuste de parâmetros na sua implementação. Foram identificados alguns pontos estacionários para serem submetidos ao ciclo RTO e foi possível verificar a importância de partir de um estado estacionário para a continuidade do ciclo, já que essa é uma premissa do método. A partir dos pontos analisados, os resultados deste estudo mostram que o RTO é capaz de aumentar o ganho econômico entre 2,5-24%, dependendo das condições iniciais consideradas, o que pode representar ganhos de até 18 milhões de dólares por ano. Além disso, para essa unidade, verificou-se que o compressor é um equipamento limitante no aumento de ganho econômico do processo.

Palavras-Chave: Otimização em tempo real. Identificação de Estado Estacionário. Unidade de Produção de Propeno. Destilação por Recompressão de Vapor.

## ABSTRACT

In order to increase the profits of chemical plants, the Real-Time Optimization (RTO) is a tool that seeks to determine the steady-state optimal process operating conditions to maximize its profit under the operational restrictions. In this work, a practical implementation of a RTO cycle was implemented in a vapor recompression distillation (VRD) process, propylene-propane, from Paulínia Refinery (Petrobras S.A.), from historical plant data. The main steps of a classical RTO cycle are considered: steady-state identification, data reconciliation, parameter estimation and economical optimization. This unit was modeled, simulated and optimized in EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization), which is an equation oriented simulator conceived and developed in Brazil. Two steady state identification methods were analyzed and compared, one based on a F-like test and other based on wavelets. Both methods had similar results and showed to be able to identify the stationary states satisfactorily, although parameter tuning is necessary in their implementation. Some stationary points were identified and submitted to the RTO cycle. It was possible to verify the importance of start from a steady-state to continue the cycle, since this is a premise of the method. From the points analyzed, the results of this study show that the RTO is able to increase the economic gain between 2.5-24%, depending on the initial conditions that is considered, which may represent gains of up to 18 million dollar per year. Furthermore, for this unit, it was found that the compressor is a limiting equipment in increasing economical gain.

Keywords: Real-Time Optimization. Steady-State Identification. Propene Production Unit. Vapor Recompression Distillation.

## LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 - Performance do RTO.....	15
Figura 2 - Níveis de Hierarquia de controle.....	18
Figura 3 - Etapas de um RTO clássico .....	23
Figura 4 - Diagrama de Blocos da Unidade de Produção de Propileno .....	32
Figura 5 - Fluxograma simplificado da Coluna Depropenizadora.....	33
Figura 6 - Equilíbrio Líquido-Vapor para o Binário Propileno-Propano (Modelo EMSO).....	40
Figura 7 - Equilíbrio Líquido-Vapor para o Binário Propileno-Propano (Modelo Caixa Preta).....	42
Figura 8 - Vazão e Composição de Propileno na Carga da Coluna .....	52
Figura 9 - Comparação dos Métodos de Detecção de Estado Estacionário .....	54
Figura 10 - Comparação das Temperaturas Internas da Coluna .....	56
Figura 11 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Carga.....	57
Figura 12 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Topo.....	57
Figura 13 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Fundo .....	58
Figura 14 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propileno na Carga. ....	58
Figura 15 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propano no Topo ....	59
Figura 16 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propileno no Fundo .....	59
Figura 17 - Estado Estacionário considerando todas as variáveis (Ponto #1) .....	60
Figura 18 - Identificação de Estado Estacionário (Ponto #2) .....	60
Figura 19 - Identificação de Estado Estacionário (Ponto #3) .....	61
Figura 20 - Histograma da Vazão de Carga.....	66
Figura 21 – Variação do Lucro pela Vazão de Carga.....	66
Figura 22 – Variação do Lucro Unitário pela Vazão de Carga.....	67



## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Consumo de Energia e Utilidades por tonelada de produção de Propileno .....	37
Tabela 2 - Constantes da Equação de Antoine .....	41
Tabela 3 - Parâmetros Ajustados para o Modelo de Equilíbrio.....	41
Tabela 4 - Parâmetros utilizados na Estimação e Reconciliação .....	49
Tabela 5 - Lista de Preços .....	50
Tabela 6 - Comparação de Resultados da Estimação de Parâmetros para os Pontos A e B55	
Tabela 7 - Resultados após Reconciliação e Otimização.....	61
Tabela 8 - Ganho Econômico.....	63
Tabela 9 - Variação dos Preços dos Produtos .....	64
Tabela 10 - Variação do Custo das Utilidades.....	65
Tabela 11 - Relação de Variáveis de Processo Medidas .....	74
Tabela 12 - Relação de Variáveis de Processo Medidas .....	75

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ARX	<i>AutoRegressive Exogenous</i>
DMC	<i>Dinamic Matrix Control</i>
DR	Discriminação Rotacional
EMSO	<i>Environment for Modeling, Simulation and Optimization</i>
FCC	<i>Fluid Catalytic Cracking</i>
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
IHMPC	<i>Infinite Horizon Model Predictive Control</i>
IISE	<i>Industrial Integrated Simulation Environment</i>
IMC	<i>Internal Model Control</i>
IRV	<i>Ideal Resting Value</i>
LP	<i>Linear Programming</i>
MPA	<i>Model Parameter Adaptation</i>
MPC	<i>Model Predictive Control</i>
PR	Peng-Robinson
RTO	<i>Real Time Optimization</i>
SDCD	Sistema Digital de Controle Distribuído
SOC	<i>Self-Optimizing Control</i>
SRK	Soave-Redlich-Kwong
VRD	<i>Vapor Recompression Distillation</i>

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A, B, C$	Constantes da Equação de Antoine
$B(t)$	Variável para identificar se a variável $i$ está em estado estacionário (Método <i>Wavelet</i> )
$ISS$	Variável binária para identificar se o processo está ou não em estado estacionário (Método Cao e Rhinehart)
$issteady_i$	Variável binária para identificar se a variável $i$ está ou não em estado estacionário (Método Cao e Rhinehart)
$P$	Pressão do sistema
$p^{vap}$	Pressão de Vapor
$R_i$	Razão entre as variâncias
$R_{crit}$	Valor crítico para $R_i$
$T$	Temperatura do Sistema
$T_s, T_u, T_w$	Limiares do método <i>Wavelet</i>
$X_i$	Série de dados temporais $i$
$X_{f,i-1}$	Média móvel ponderada da série de dados temporais $i$
$x$	Fração molar do líquido para o modelo de equilíbrio
$y$	Fração molar do vapor para o modelo de equilíbrio
$w_i$	Peso utilizado no cálculo de $B(t)$ (Método <i>Wavelet</i> )
$W_S f(t)$	Derivada de 1ª ordem da série temporal de dados
$WW_S f(t)$	Derivada de 2ª ordem da série temporal de dados
$\beta_i(t)$	Variável para identificar se o processo está em estado estacionário (Método <i>Wavelet</i> )
$\gamma(t)$	Coeficiente do Método <i>Wavelet</i>
$\theta_i$	Parâmetros de ajuste do modelo de equilíbrio de fases
$\theta(t)$	Função do Método <i>Wavelet</i>

$\kappa$	Parâmetro de ajuste do Método <i>Wavelet</i>
$\lambda_i$	Filtro $i$ utilizado na detecção de estado estacionário
$\xi(t)$	Função de transferência do Método <i>Wavelet</i>
$\sigma_{W_f}$	Desvio padrão de $W_S f(t)$
$\sigma_{WW_f}$	Mediana de $WW_S f(t)$
$\hat{v}^2$	Estimativa tradicional de variância
$v_{f,i}^2$	Estimativa da variância através de filtros
$\delta_{f,i}^2$	Estimativa da variância através de filtros

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>13</b>
1.1.	OBJETIVOS	16
1.2.	ESTRUTURA DO DOCUMENTO	16
<b>2</b>	<b>REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b>	<b>17</b>
2.1.	RTO NA HIERARQUIA DE CONTROLE	18
2.2.	INCERTEZAS NO RTO	20
2.3.	DESENVOLVIMENTO E CICLO DO RTO	21
2.4.	CASOS DE APLICAÇÃO DE RTO NA INDÚSTRIA	28
2.5.	APLICAÇÕES DE OTIMIZAÇÃO EM UNIDADES DE PROPILENO	30
<b>3</b>	<b>DESCRIÇÃO DO PROCESSO</b>	<b>32</b>
3.1.	APRESENTAÇÃO	32
3.2.	DESCRIÇÃO DO PROCESSO - COLUNA DEPROPENIZADORA	33
3.3.	CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO	35
3.4.	DESTILAÇÃO POR RECOMPRESSÃO DO VAPOR	37
<b>4</b>	<b>MÉTODOS</b>	<b>39</b>
4.1.	MODELO DO PROCESSO	39
4.1.1.	Equilíbrio de Fases	40
4.1.2.	Restrições do Modelo	42
4.2.	IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONÁRIO	43
4.2.1.	Método Baseado no Teste Estatístico F	44
4.2.2.	Método Baseado em <i>Wavelets</i> Multiescala	46
4.3.	APLICAÇÃO DO RTO NA SEPARAÇÃO DE PROPILENO-PROPANO	48
4.3.1.	Estimação de Parâmetros e Reconciliação de Dados	49
4.3.2.	Otimização Econômica	49
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>52</b>
5.1.	IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONÁRIO	52
5.1.1.	Escolha do Método	52
5.1.2.	Importância da Identificação do Ponto Estacionário	55
5.1.3.	Escolha de Pontos Estacionários	56
5.2.	APLICAÇÃO DO CICLO DO RTO	61
5.3.	ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	64

5.3.1. Custos e Preços de Venda .....	64
5.3.2. Vazão de Carga.....	65
<b>6 CONCLUSÕES .....</b>	<b>68</b>
<b>REFERÊNCIAS .....</b>	<b>70</b>
<b>APÊNDICE A: Relação de Variáveis de Processo Medidas.....</b>	<b>74</b>
<b>APÊNDICE B: Pontos Experimentais de ELV Propano-Propileno.....</b>	<b>75</b>
<b>APÊNDICE C: Código para o Método de Cao e Rhinehart .....</b>	<b>76</b>
<b>APÊNDICE D: Código para o Método <i>Wavelet</i> .....</b>	<b>77</b>

## 1 INTRODUÇÃO

A competitividade nas indústrias químicas e petroquímicas faz com que as empresas busquem soluções inovadoras para aumentar seus lucros e diminuir os custos de operação. Ren (2009) aponta dois itens principais para inovações nos processos: fatores econômicos, devido à concorrência, e fatores ambientais, devido às legislações. Além disso, a redução dos preços de produtos, diminuindo as margens de lucros das empresas, requer a minimização constante dos custos dos processos produtivos. Esta demanda incentiva a criação de novas técnicas e tecnologias que visam ao melhor uso das matérias-primas.

Nesse contexto, a Otimização em Tempo Real (RTO - *Real Time Optimization*) é uma importante ferramenta na indústria para aumentar a rentabilidade dos processos que estão sujeitos a constantes variações nas condições de operação e nos valores de mercado dos produtos químicos e utilidades da planta. A RTO consiste, basicamente, em alterar o ponto de operação da planta buscando aumentar o lucro da mesma, levando em conta as variações das condições de processo, como composição da carga, custo das matérias primas e preço dos produtos. Para a determinação dessas condições ótimas em tempo real são realizadas as seguintes etapas que constituem o ciclo da metodologia clássica da RTO: detecção do estado estacionário, reconciliação de dados e detecção de erros grosseiros, estimação de parâmetros do modelo, otimização econômica e implementação da solução com o controlador.

Embora já existam aplicações de RTO na indústria, elas ainda não são muito comuns. Isto se deve, em parte, ao fato de que a aplicação de RTO pode não ser apropriada para qualquer tipo de processo (White, 1998) e, além disso, esses sistemas não são totalmente aceitos na indústria, pois muitas aplicações reais acabaram por requerer intensivo uso de mão de obra e serem de difícil implementação (Friedman, 2000). De forma geral, o aumento do lucro da planta é possível através da implantação da RTO quando os critérios abaixo são satisfeitos (Marlin e Hrymak, 1997):

- Existem variáveis de otimização ajustáveis, levando em conta os fatores de segurança e qualidade dos produtos;

- O lucro muda significativamente conforme as variáveis de otimização são alteradas;
- Distúrbios ocorrem com suficiente frequência para a otimização em tempo real ser necessária;
- A determinação dos valores das variáveis de otimização é muito complexa para ser determinada através de procedimentos e/ou manuais de operação, já que, em geral, o modelo é não-linear e o ótimo pode não estar nas restrições.

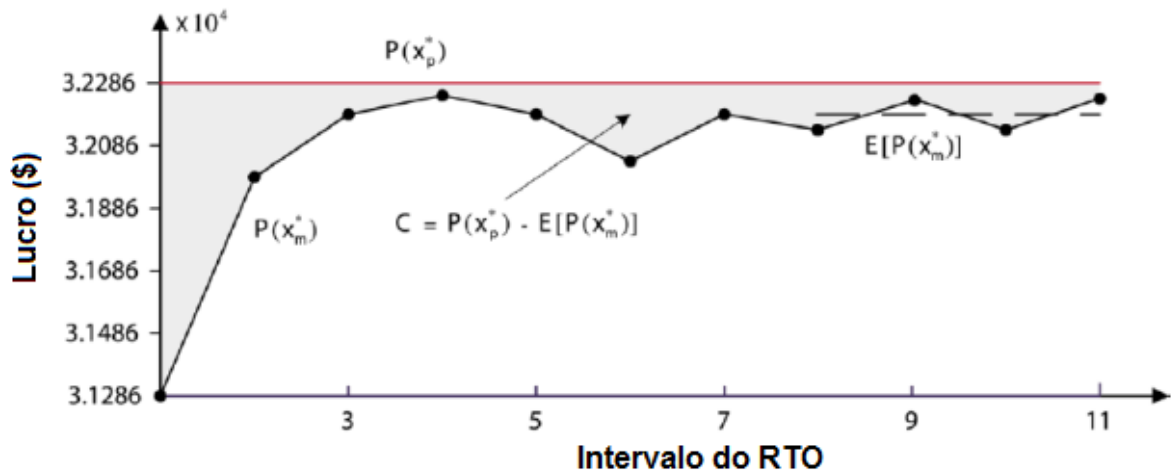
O maior benefício da implementação de um otimizador em tempo real é a melhoria do desempenho econômico, mas outros ganhos indiretos resultantes desta tecnologia são esperados (Jesus, 2011):

- Redução de emissão de poluentes;
- Melhor entendimento do processo;
- Identificação de erros nos instrumentos de medição;
- Avaliação de desempenho de equipamentos via estimação de parâmetros;
- Desenvolvimento de uma ferramenta para monitoramento do processo, manutenção, projeto, planejamento de produção e testes de controle avançado.

Como o objetivo da RTO é a otimização econômica, uma forma de avaliar o desempenho da aplicação é através da medida em termos de benefícios econômicos (Zhang e Forbes, 2008). A Figura 1 mostra um exemplo hipotético de um sistema de RTO, em que é assumido que existe apenas um grau de liberdade para a otimização e o ótimo da planta permanece constante. Na figura, o lucro obtido através do ponto ótimo da unidade é dado por  $P(x_p^*)$ , e o lucro do sistema do RTO é dado por  $P(x_m^*)$ . Assim, a área sombreada representa a diferença entre os lucros e representa também a perda de performance do RTO, que pode ser considerada uma medida de desempenho do sistema.



Figura 1 - Performance do RTO



Fonte: Adaptado de Zhang e Forbes (2008)

Com o objetivo de contribuir com o aprimoramento dessa tecnologia, o presente trabalho consiste na aplicação e avaliação de desempenho de uma ferramenta RTO em uma unidade industrial, buscando analisar e medir os ganhos econômicos gerados pela implementação dessa solução. Além disso, como a aplicação exige que o processo esteja em estado estacionário, é necessário identificar alguns pontos estacionários para esse estudo. Por isso, serão aplicadas e discutidas metodologias de detecção de estado estacionário nos dados de processo disponíveis.

Este trabalho é uma contribuição ao projeto "Desenvolvimento de solução de Otimização em Tempo Real utilizando abordagem orientada a equações com implantação piloto em unidade industrial", que visa ao desenvolvimento, como projeto de pesquisa, de uma tecnologia básica de RTO.

O otimizador foi desenvolvido para ser implementado na unidade de produção de propeno da Refinaria de Paulínia (REPLAN/Petrobras S.A.). Foi utilizado o software EMSO (Environment for Modeling, Simulation and Optimization) (Soares e Secchi, 2003), que é um simulador orientado a equações (EO). A escolha desse software justifica-se por ele ser vantajoso em aspectos como eficiência de cálculo, flexibilidade na especificação de graus de liberdade para a simulação e autonomia para criar e manipular o modelo (Mendoza et al., 2013).

## 1.1. OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo avaliar os benefícios econômicos possíveis de serem atingidos através da implementação de um sistema de RTO em uma unidade industrial. Com este fim, o trabalho foca-se nos seguintes objetivos específicos:

- Estudar metodologias de identificação de estado estacionário em processos contínuos;
- Identificar estados estacionários nos dados de processos disponíveis;
- Aplicar a metodologia de RTO em uma unidade industrial;
- Avaliar os resultados e benefícios gerados através dessas implementações.

## 1.2. ESTRUTURA DO DOCUMENTO

O Capítulo 2 apresenta uma revisão bibliográfica da RTO, mostrando sua relação com a estrutura de controle, suas etapas de funcionamento e os ganhos provenientes dessas aplicações em casos reais já implementados.

No capítulo 3 é detalhado o processo em que foi aplicado a RTO, que é uma coluna fracionadora de propileno-propano. Discutem-se os problemas de controle de colunas de destilação desse tipo de processo e algumas alternativas para otimização do mesmo.

O capítulo 4 apresenta a técnica de detecção de estado estacionário, estimação de parâmetros e otimização que foram utilizadas na implementação do ciclo de RTO.

No capítulo 5 são mostrados e discutidos os resultados obtidos na identificação do estado estacionário e na aplicação do ciclo de RTO a partir de pontos estacionários identificados.

O capítulo 6 resume as conclusões do trabalho além de propor sugestões para trabalhos futuros nessa área de pesquisa.

## 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O objetivo das indústrias químicas é o de maximizar o lucro enquanto mantém os preços dos produtos em um valor mínimo que compense as vendas e seja competitivo no mercado, além de satisfazer requerimentos de saúde, segurança e meio ambiente (Chaudhary, 2009). Devido às constantes mudanças no mercado com o crescimento da competitividade, restrições mais exigentes nas especificações dos produtos e preocupações ambientais, a indústria tem uma demanda por métodos e ferramentas que aumentem sua lucratividade pela redução dos custos operacionais.

A ideia de otimizar economicamente o processo surgiu através da utilização de um algoritmo no qual o modelo era constituído de uma matriz de ganhos do sistema (modelo estacionário) e o resultado da otimização eram *setpoints* para as variáveis controladas e *targets* para as variáveis manipuladas, os quais deveriam ser alcançados ao final do período de transição realizado pelo controlador, constituindo um objetivo para o ponto estacionário. A otimização era realizada através de um problema linear e esta técnica levava as variáveis sempre para as suas restrições de mínimo ou de máximo e não era capaz de otimizar processos com variações de ganho. Embora ainda fosse uma técnica simples, era eficiente em situações onde o ótimo operacional encontrava-se próximo às restrições operacionais (Duraiski, 2009).

Como a otimização linear não tem a capacidade de trabalhar com processos com inversão de ganho, onde os pontos de operação economicamente ótimos não ocorrem sobre as restrições do processo, tornou-se necessário desenvolver uma camada de otimização que não trabalhasse somente com modelos lineares, mas sim com modelos mais completos e não-lineares do processo, capazes de descrever com maior precisão o comportamento da unidade industrial. Surge, assim o conceito de Otimização em Tempo Real (RTO) que, segundo Quelhas (2013), apresenta um conceito vago e pode ser melhor definido como :

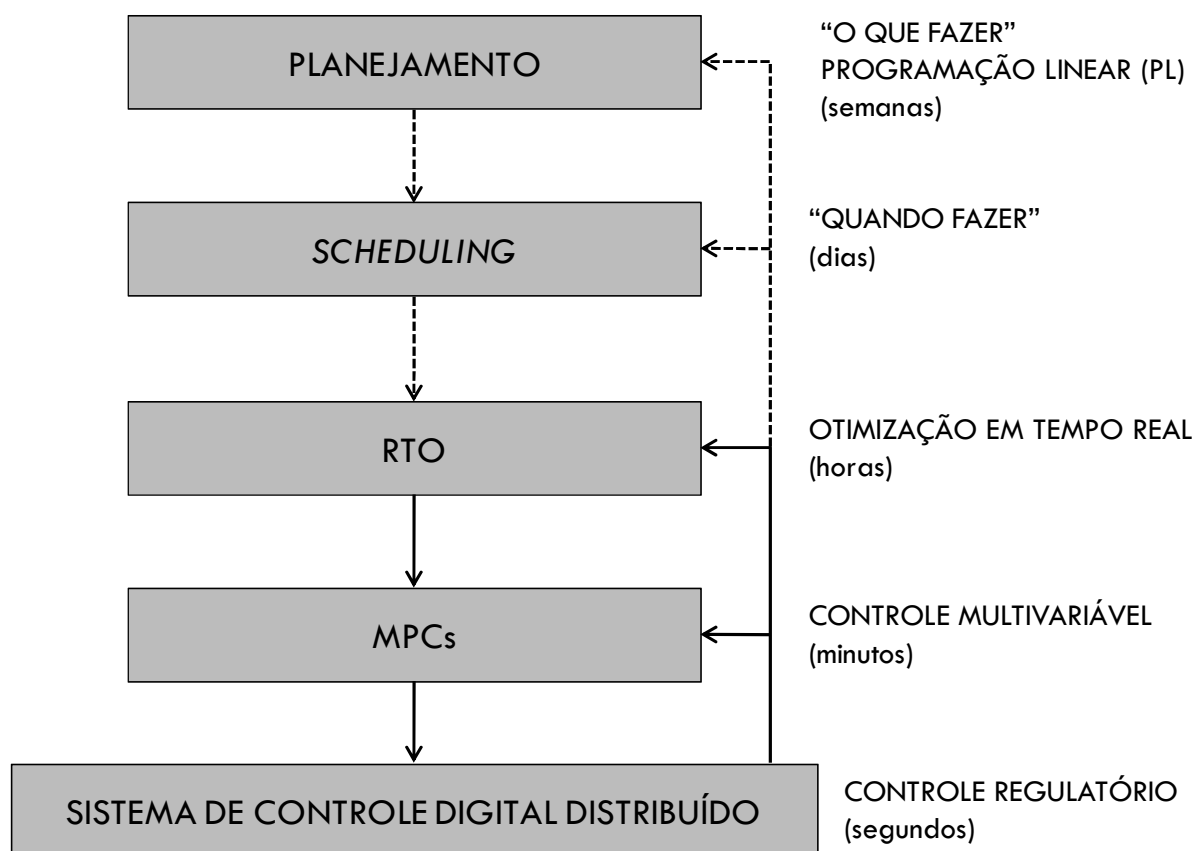
a aplicação automatizada de decisões orientadas ao lucro operacional, com base em modelos rigorosos de processos não-lineares, e que são implementadas com uma frequência maior, em média, do que a ocorrência de distúrbios que conduzem o processo para o desempenho abaixo do ideal.

Levando em conta essa definição, vale ressaltar que os processos químicos estão sempre sob ação de distúrbios, que podem ser internos (variações no processo como concentração, pressão, especificação de produtos, etc.) ou externos (vazamentos, alteração de preço de matéria prima ou produtos, flutuações na demanda de determinados produtos, etc.). Sempre que algum distúrbio interferir, de modo significativo, no processo, o próximo passo é o de levar o processo para um novo ponto ótimo de operação que incorpore o impacto desse distúrbio.

## 2.1. RTO NA HIERARQUIA DE CONTROLE

A Figura 2 mostra os cinco níveis da hierarquia de controle típico de uma planta. Nela é possível observar onde a camada de RTO se encontra no contexto geral de controle da planta.

Figura 2 - Níveis de Hierarquia de controle



Fonte: Adaptado de Darby et al. (2011)

O nível mais alto, o Planejamento (*Planning*), está preocupado com "o que fazer", baseando-se na economia e no mercado. Ele é responsável por responder quais

matérias-primas comprar, quais produtos fabricar e a quantidade deles. Devido à grande quantidade de variáveis envolvidas, os modelos nessa camada são simples e geralmente são resolvidos através de um algoritmo de programação linear (*Linear Programming* – LP). O horizonte de tempo considerado é de algumas semanas.

O próximo nível, o *Scheduling*, é responsável pelo "quando" e implementa o programa de produção num horizonte de alguns dias, considerando itens como: demanda do mercado, disponibilidade de matéria prima, inventário de produtos intermediários e a situação dos meios de transporte de matéria prima e produtos. Nessa camada os modelos são simplificados, mas já são mais complexos do que os da camada anterior, pois o tempo é incluído como variável uma vez que a produção de cada produto tem um período de duração definido.

A camada de Otimização, nesse caso a RTO, resolve simultaneamente uma grande quantidade de equações, nas quais estão incluídos o modelo rigoroso do processo, custos de matérias-primas e utilidades (vapor, água, energia elétrica, etc.) e os preços de mercado dos produtos, já que, em geral, a função objetivo é uma função econômica na qual se deseja maximizar o lucro do processo. A função objetivo pode ser escrita, de forma simplificada, como:

$$L = \sum_p F_p V_p - \sum_m F_m V_m - \sum_u F_u V_u \quad (1)$$

Onde,

$L$  = Lucro/unidade de tempo;

$\sum_p F_p V_p$  = Soma do produto das vazões dos produtos pelos respectivos preços de venda;

$\sum_m F_m V_m$  = Soma do produto das vazões das matérias-primas pelos respectivos custos;

$\sum_u F_u V_u$  = Soma do produto das utilidades pelo respectivo custo.

Para o cálculo do lucro não foram incluídos custos indiretos como os custos administrativos, pois podem ser considerados fixos e não alteram a determinação do ótimo do processo.

A função objetivo acima está sujeita a restrições relacionadas às condições de operação da planta, capacidades de produção dos equipamentos, projeções de mercado, capacidades de estocagem, especificações dos produtos, entre outras.

Essa camada determina os *setpoints* das variáveis controladas, em termos de temperatura, pressão, vazão, entre outros. Esses *setpoints* também podem ser chamados de *IRVs* (*“Ideal Resting Value”*) para diferenciar daqueles determinados pelo controle regulatório. Podem ser citados como exemplo de otimização em uma planta a minimização do consumo de vapor ou água de resfriamento, a otimização do refluxo em uma coluna de destilação, a proporção de mistura de produtos para alcançar propriedades químicas desejadas. Por ser um problema complexo, o período de execução geralmente é de algumas horas e o resultado da otimização é enviado para a camada inferior, o controlador da planta.

O Controle Avançado tem a função de não permitir que as variáveis de processo violem suas restrições. Em geral, o controlador é do tipo preditivo multivariável (MPC) e utiliza um modelo dinâmico linear do processo obtido através de testes em degrau efetuados na planta. As variáveis manipuladas são geralmente atualizadas uma vez por minuto.

O nível mais baixo, o Controle Regulatório do SDCD, é constituído, basicamente, por controladores PID e instrumentos de razão entre variáveis. Os controladores são sintonizados através de modelos de processo simples e são executados a cada segundo.

## 2.2. INCERTEZAS NO RTO

Um problema de RTO pode estar sujeito a quatro tipos de incertezas (Zhang; Nadler; Forbes, 2001):

- Incertezas de mercado: são aquelas relacionadas ao conhecimento impreciso das relações econômicas do processo, disponibilidade de matéria-prima, demanda de produtos, etc.;

- Incertezas do processo: referem-se ao conhecimento impreciso da operação devido a diferentes distúrbios como variações não-medidas nas condições ambientais, características da carga, etc.;
- Incertezas de medição: são aquelas relacionadas aos erros dos sensores da planta, como, por exemplo, ruídos aleatórios do processo, vazamentos, etc. Os ruídos dos instrumentos são, normalmente, considerados como tendo distribuição normal e média zero, e não têm correlação com o tempo;
- Incertezas do modelo: referem-se às imprecisões do modelo devido a erros estruturais ou de parâmetros mal ajustados.

Se essas incertezas não forem levadas em consideração na otimização, o cálculo pode levar a um ponto de sub-otimalidade. Sahinidis (2004) fez uma revisão de diversos modelos robustos que já foram propostos para lidar com esses problemas.

### 2.3. DESENVOLVIMENTO E CICLO DO RTO

Os diferentes tipos de otimizadores em tempo real propostos na literatura ao longo das últimas décadas foram classificados por Chachuat et al. (2009, 2008), conforme a seguinte divisão:

- algoritmos que adaptam o RTO à realidade da planta, os chamados *Model-Parameter Adaptation* (MPA), constituem a abordagem clássica do RTO e consistem em usar as medidas da planta para atualizar alguns parâmetros-chaves do modelo estacionário do processo, visando reduzir a incompatibilidade entre o modelo e a planta (Marlin e Hrymak, 1997). O modelo atualizado é usado para prever o ponto operacional que maximiza o lucro da planta. Esse método requer que o modelo tenha uma alta fidelidade com relação à planta e informações suficientes para atualizar os parâmetros. Esses algoritmos representam a otimização clássica em duas etapas (Chen e Joseph, 1987). A primeira etapa consiste na estimação de parâmetros e reconciliação de dados e a segunda na determinação da estratégia ótima de operação do processo.

- algoritmos que, apesar de fazerem uso de medidas oriundas da instrumentação, não as usam para alterar diretamente os parâmetros do modelo,

mas sim de modificadores aditivos à função objetivo e restrições do problema de otimização, visando garantir as condições de otimalidade. São chamados de *Modifiers-Adaptation Methods* e Gao; Wenzel e Engell (2015) fizeram uma comparação entre diferentes esquemas desse tipo de algoritmo, mostrando que esses métodos podem lidar bem com a incompatibilidade entre modelo e planta, pela aplicação de correções empíricas do gradiente e do erro sistemático (*bias*) na função objetivo e nas restrições.

- algoritmos que transformam o problema de otimização em um problema de controle por retro-alimentação, que manipula diretamente as variáveis de entrada, de forma que essa manipulação esteja correlacionada ao ponto de operação ótimo da planta. São chamados de *Direct-Input-Adaptation Methods* e nestes casos, embora não exista necessidade de sucessivas otimizações do modelo a cada iteração, o desafio é justamente encontrar funções das variáveis medidas que, quando mantidas constantes, ajustando as variáveis de entrada, vão estar no ponto ótimo da planta. Skogestad (2000) propõe uma estratégia de controle denominada *Self-Optimizing Control* (SOC) que se baseia em usar um modelo do processo para selecionar combinações lineares das variáveis de saída, que vão conseguir atingir a performance ótima da planta.

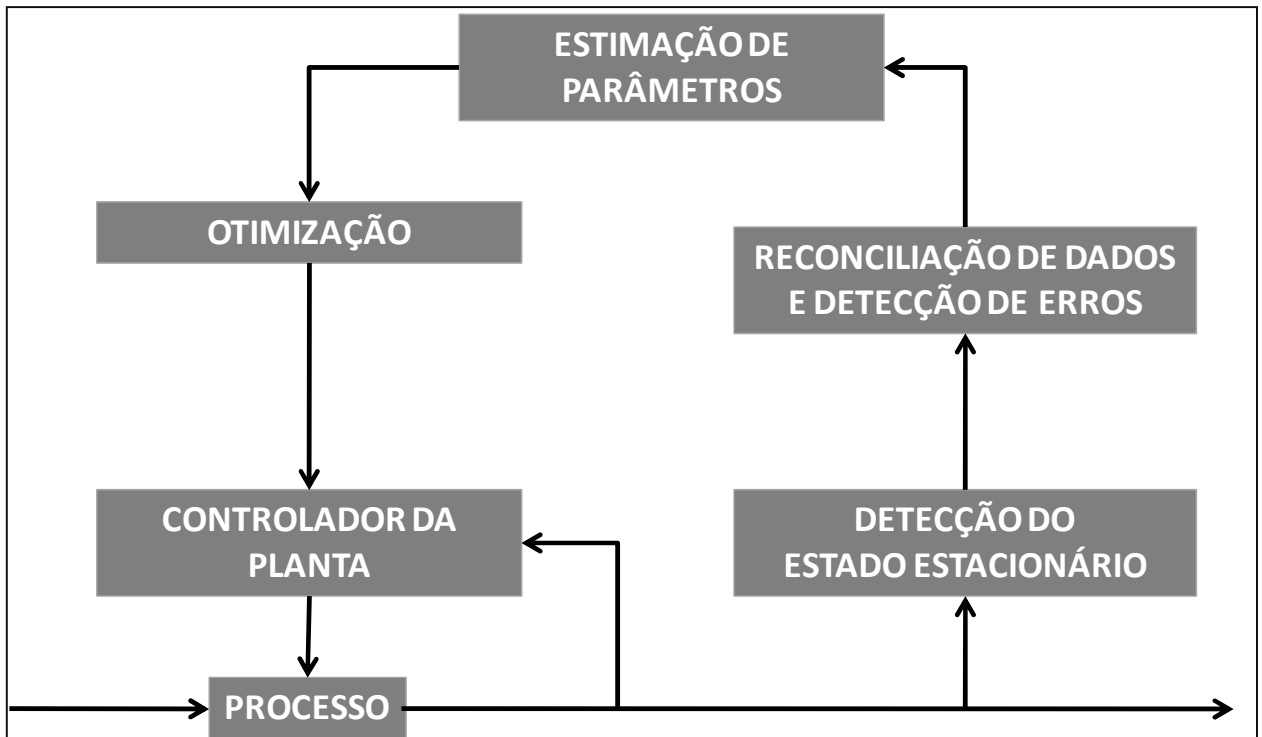
O esquema mais comum de RTO na indústria é o da abordagem em duas etapas (Chen e Joseph, 1987), usado nos principais *softwares* comerciais. Na primeira etapa de otimização, os dados obtidos nas medições da planta são usados para atualizar os parâmetros do modelo com base no melhor ajuste entre medidas e predições do modelo. Após isso, a segunda etapa gera um conjunto de valores das variáveis de decisão que são assumidas para conduzir o processo para o seu melhor desempenho econômico.

O primeiro passo no desenvolvimento do otimizador consiste na construção de um modelo matemático para o processo onde a RTO vai ser implementada. Essa etapa é muito importante, pois a capacidade de determinar o ótimo operacional depende da qualidade do modelo utilizado (Yip e Marlin, 2003).

O ciclo clássico de um RTO consiste em cinco etapas (Darby et al., 2011; Naysmith e Douglas, 1995), como é mostrado na Figura 3.



Figura 3 - Etapas de um RTO clássico



Fonte: Adaptado de Naysmith e Douglas (1995)

Cada uma das etapas tem, basicamente, a seguinte função:

a) *detecção do estado estacionário:*

Nessa etapa, dados em tempo real da planta são analisados para determinar, através de técnicas estatísticas, se o processo está em estado estacionário. Essa etapa é fundamental, pois as duas próximas etapas devem ser efetuadas com a unidade no estado estacionário. Além disso, é importante que essa etapa seja de rápida execução, tenha alta qualidade na resposta e baixo custo computacional.

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, mas a existência de ruído nos sinais dificulta essa determinação, pois se não fossem esses, essa determinação seria trivial.

Assim, a detecção rigorosa do estado estacionário é crítica para a avaliação de desempenho, otimização e controle de processos. Existem alguns métodos para essa detecção e Rhinehart (2013) fez uma revisão da literatura de diversos trabalhos nessa área.

A maioria dos métodos é executada durante períodos de tempo específicos com avaliações globais (janela de tempo), entretanto, existem alguns que testam o processo em um ponto arbitrário de tempo, o que se torna mais interessante para aplicações em tempo real.

Jiang et al. (2003) propuseram e aplicaram um método de detecção baseado em *wavelets* multiescala (*multi-scale wavelet*) em processos industriais contínuos. O método de transformada de *wavelet* mostrou-se uma poderosa ferramenta para análise do *status* de estacionariedade do processo. Uma das principais vantagens desse método é que ele detecta se determinado ponto é ou não um estado estacionário, sendo então, adequado para aplicações em tempo real sem a necessidade de determinar uma janela de tempo. O método consiste, basicamente, em quatro etapas: obtenção das derivadas dos dados; filtragem dos dados em estado estacionário; determinação de parâmetros do método; e identificação dos períodos em estado estacionário. A aplicação do método em uma unidade de destilação atmosférica e em uma unidade de caustificação de uma planta de celulose mostraram que o método é eficaz e confiável.

Além disso, um método muito empregado em aplicações de tempo real é o proposto por Cao e Rhinehart, (1995), que desenvolveram um método através de uma modificação do teste estatístico F, baseado na razão de variâncias calculadas de duas formas diferentes. Ele compara o desvio quadrático médio em relação à média dos dados e em relação a dados sucessivos. Idealmente, se o processo estiver em estado estacionário, a razão será igual a um. Além disso, o método propõe fazer uma filtragem nas medidas para atenuar o ruído dos dados. Esses dois métodos citados serão melhor explicados na seção 4.2.

Garcia (2013) empregou o teste proposto acima em uma coluna de separação propileno-propano, no qual foi possível identificar que se trata de um bom método para determinação de estado estacionário em sistemas com baixos níveis de ruído. Entretanto, quando as medições contêm maior variabilidade, as respostas dos testes foram invalidadas, precisando de um tratamento prévio dos dados para conseguir uma correta identificação do estado estacionário.

Bhat e Saraf (2004) modificaram a metodologia de Cao e Rhinehart (1995) através de uma otimização das constantes dos filtros com o objetivo de minimizar os erros

do tipo I e II e, simultaneamente, reduzir o atraso na detecção. O erro do tipo I equivale ao falso positivo, ou seja, rejeitar uma hipótese verdadeira, enquanto que o erro do tipo II, ou falso negativo, ocorre quando uma hipótese falsa não é rejeitada. Essa extensão do método foi aplicada em uma unidade de destilação atmosférica, mostrando-se eficiente na determinação do estado estacionário quando utilizadas leituras a cada cinco minutos dos dados, para suprimir a autocorrelação e identificar os reais estados estacionários e transientes do processo.

Rincón et al. (2015) propuseram um novo método baseado em um modelo auto-regressivo com entradas exógenas (ARX) e comparam esse método com outros métodos tradicionais aplicando em alguns estudos de caso, inclusive em uma Coluna Depropanizadora. Embora os métodos mais tradicionais como o Teste F e Polinomial sejam de simples implementação e o *Wavelet* necessite ainda de um pré-filtro dos dados, o novo método proposto mostrou-se mais preciso que os demais nos exemplos estudados.

#### b) detecção de erros grosseiros e reconciliação de dados

A detecção de erros se faz necessária, pois a medida dos dados de processo está sujeita a erros, tanto aleatórios como sistemáticos. Os erros aleatórios são assumidos como normalmente distribuídos e com média nula. Erros sistemáticos são causados por eventos não-aleatórios como mau funcionamento dos instrumentos, falta de calibração ou vazamentos no processo (Naysmith e Douglas, 1995). Se esses erros não forem tratados, irão se propagar fazendo com que o resultado da otimização possa estar longe do ótimo da planta.

Assim, a reconciliação dos dados atua na distribuição dos pequenos erros dos balanços, utilizando-se do modelo do processo, das incertezas estatísticas dos medidores e dos instrumentos de medição redundantes e na garantia de que os balanços de massa e energia sejam satisfeitos. A principal diferença da reconciliação de dados e de outras técnicas envolvendo filtros é que a reconciliação explicitamente faz uso do modelo simplificado do processo e obtém estimativas das variáveis pelo ajuste dos dados para satisfazer as restrições. A reconciliação trata-se

de um problema de minimização com restrições e Crowe (1996) fez uma revisão de diversos métodos e casos de aplicação.

Um grande desafio é tentar garantir que o algoritmo utilizado convirga a partir de qualquer ponto inicial viável. Plácido e Loureiro (1998) desenvolveram um programa para a detecção de erros grosseiros e reconciliação de dados de várias unidades de uma planta de amônia utilizando um método de projeção matricial, ressaltando a importância desses métodos a fim de planejar melhorias na instrumentação e evitar erros grosseiros ao usar conjuntos de dados reconciliados. Já Jiang et al. (2014) estudaram a aplicação em uma usina termoeletrica, mostrando a importância dessa aplicação na detecção e identificação de mau funcionamento de instrumentos e no provimento de uma base de dados mais confiável.

#### c) estimação de parâmetros do modelo

Devido a perturbações não medidas e mudanças no desempenho do processo provocadas por fatores como desativação de catalisadores, incrustação em trocadores de calor e redução de eficiência de fornos e colunas de destilação, alguns parâmetros do modelo são ajustados para que esse possa representar de forma mais precisa o processo real. Em geral, é feita com dados da unidade em estado estacionário.

Essa etapa pode ocorrer ou não em conjunto com a reconciliação de dados. Quando feita desacoplada, é computacionalmente mais rápida, mas não é estatisticamente rigorosa (Garcia, 2013). Uma das técnicas acopladas mais utilizada é a minimização do quadrado dos erros das medições (Arora e Biegler, 2001), que é baseada na hipótese de que as medidas têm erros aleatórios normalmente distribuídos, caso no qual a função dos mínimos quadrados é o estimador de máxima verossimilhança.

Graciano et al. (2014) compararam o desempenho de quatro técnicas de estimação de parâmetros. Foram avaliadas duas técnicas baseadas na sensibilidade dos estados medidos com relação aos parâmetros e análise de autovalores (Discriminação Rotacional e Seleção/Estimação Automática de Parâmetros), além das técnicas de reparametrização via geometria diferencial e o método clássico dos mínimos quadrados não linear. Nesse trabalho, o método de Discriminação

Rotacional (Fariss e Law, 1979) apresentou as melhores características entre os métodos avaliados, uma vez que limita a variação dos parâmetros e apresenta melhores previsões em um domínio de validação.

#### d) otimização econômica

A otimização econômica em um sistema RTO consiste em determinar o ponto operacional que melhor satisfaça o critério de desempenho econômico do processo em questão. A função objetivo a ser otimizada corresponde à máxima lucratividade da unidade, ou seja, a diferença entre receitas e despesas, dentro de uma região operacional limitada pelas restrições do processo. É utilizado um algoritmo de programação não-linear para o cálculo da solução ótima do problema de otimização. Alguns casos de aplicação serão apresentados no item 2.4.

Um problema relacionado com a otimização no ciclo de RTO é a presença de desvios entre as previsões do modelo e a planta real. Por esse motivo, apesar da etapa de estimação de parâmetros, o modelo não é capaz de encontrar o ponto ótimo operacional do processo real, resultando numa operação sub-ótima da planta.

#### e) integração da solução com o controlador da planta

O resultado da otimização é enviado para o controlador da planta, que tem a função de implementar via SDCD essa solução, mantendo a unidade dentro de seus limites operacionais. Em geral o controlador é do tipo multivariável preditivo (MPC) e a solução ótima é enviada ao controlador na forma de *setpoints* ideais para o estado estacionário de suas variáveis manipuladas.

Para que não seja transmitido para o controlador um novo ponto ótimo que não vai proporcionar ganhos significativos, uma análise dos resultados da otimização pode ser feita para interpretar esses resultados. A maioria das técnicas utilizadas são tipicamente heurísticas, mas Miletic e Marlin (1998) apresentaram um método estatístico baseado em testes de hipóteses para decidir quando as previsões do RTO representam estatisticamente mudanças significativas na operação da planta, e não são apenas um resultado próximo ao ponto de operação anterior gerado por

uma variabilidade aleatória dos dados. Zhang et al. (2001) apresentaram uma nova metodologia baseada no trabalho de Miletic e Marlin (1998), incluindo testes estatísticos que verificam se as restrições do modelo estão impedindo o RTO de fazer mudanças significativas nos *setpoints*.

#### 2.4. CASOS DE APLICAÇÃO DE RTO NA INDÚSTRIA

A otimização em tempo real é empregada na indústria desde a década de 1980 e existem estimativas de cerca de 300 aplicações de RTO em diversas áreas, utilizando softwares comerciais, o que não inclui as aplicações desenvolvidas internamente (Darby et al., 2011). O ganho em um processo com RTO implementado é, em geral, de cerca de 3-5% (Cutler; Perry, 1983), podendo corresponder a um ganho de 0-50% daquele obtido pelo MPC (Darby et al., 2011). Entretanto, segundo White (1997), os benefícios esperados da otimização dependem dos seguintes fatores: disponibilidade de mercado para aumento da capacidade da unidade; diferenças de preços entre os produtos; magnitude do consumo específico de energia; número de variáveis manipuladas e restrições; e precisão do modelo do processo.

Existem estudos e aplicações de RTO em diversas áreas como na indústria de Papel e Celulose, onde Vanbrugghe et al. (2004) desenvolveram uma aplicação baseada em controle por modelo interno (IMC), atingindo uma redução de 10,6% no custo da planta. Além disso, Mercangöz and Doyle (2008) estudaram a implementação de um RTO em um processo de fabricação de celulose, mostrando ser possível reduzir em 17% os custos de operação no caso estudado.

Devido à importância econômica deste processo nas refinarias, o RTO é muito empregado em sistemas de *blending* (mistura) de gasolina, buscando determinar a combinação ótima de produtos para atingir a especificação desejada. Singh et al. (2000) propuseram um modelo de programação linear para otimização em tempo real de *blending* de gasolina em linha que se baseia em previsões de algumas das propriedades das matérias-primas, já que nem sempre todas elas estão disponíveis. Zhang et al. (2002) utilizaram um estudo de caso de mistura de gasolina para comparar a performance de diferentes tipos de RTOs, para verificar como cada um

dos métodos lida com o problema de incertezas de mercado, processo, medição e/ou modelo.

Basak et al. (2002) e Shokri et al. (2009) apresentam casos de diversas indústrias do setor petroquímico que já implementaram RTO, mostrando os benefícios econômicos atingidos por elas, onde pode ser visto que o tempo para retorno sobre o investimento é curto, ficando abaixo de um ano e o aumento no lucro ficou entre US\$0.03 - 0.10/barril, para os casos apresentados. Já Zhijiang et al. (2008) implementaram um RTO em uma unidade industrial de acetaldeído em 2003, aumentando o rendimento da planta em 2,68%. O sistema foi desenvolvido e implementado na plataforma DeltaV.

Zhang et al. (1995) desenvolveram um sistema de RTO baseado em uma unidade de ácido sulfúrico da Monsanto. O sistema foi desenvolvido em AspenPlus e foi previsto um aumento de 17% no lucro da unidade, além de uma redução de 25% da emissão de gases pela chaminé, baseado nas condições de operação da planta.

Camolesi et al. (2008) relatam a implantação de um RTO em uma unidade de craqueamento catalítico em leito fluidizado (FCC) através do uso do software comercial de otimização FCCSIM (licenciado pela KBC), que resultou em um benefício econômico de US\$ 1,6 milhões por ano, obtidos através de aumento no rendimento de produtos mais valiosos e redução no consumo de energia. Além disso, Liporace et al. (2009) implementaram um RTO em uma outra unidade de FCC e estimaram um ganho médio de US\$0.12/barril de carga da unidade, comparando a performance da unidade com e sem RTO. Segundo Young (2006), otimizadores em tempo real são frequentemente utilizados em unidades de FCC devido à não-linearidade da temperatura nesse processo.

Embora existam diversos relatos de benefícios gerados pela aplicação de RTO na indústria, White (1997) ressalta a importância de saber distinguir os benefícios do controle avançado daqueles da otimização. Segundo o autor, processos em que a resposta a distúrbios na carga, por exemplo, não são complicadas ou diferentes em magnitude, podem nem precisar de um MPC, sendo o SDCD suficiente para controlar a planta. Assim, um RTO vai gerar benefícios quando existir um número suficiente de distúrbios na operação e de restrições para que o ponto de operação ótimo mude.

Além disso, processos em que os produtos têm preços de venda semelhantes vão ter poucos benefícios em maximizar a produção de um dos produtos. Já plantas que consomem muita energia vão ter, em geral, melhores oportunidades de economia através da otimização.

## 2.5. APLICAÇÕES DE OTIMIZAÇÃO EM UNIDADES DE PROPILENO

São relatadas na literatura algumas aplicações de diversas técnicas de otimização em unidades de produção de propileno. É importante ressaltar que em uma unidade industrial, a dinâmica da planta muda ao longo dos anos e por isso é necessário atualizar os parâmetros do processo para manter a performance esperada.

Devido à variação da composição da carga e de alguns parâmetros de uma coluna de destilação de propileno-propano, Mauhar et al. (2004) utilizaram os dados de uma planta real para simular e analisar o processo, com o objetivo de encontrar as melhores condições de operação considerando as novas condições da carga e parâmetros, além de visar diminuir o custo da planta.

Dang e Banjerdpongchai (2011) apresentaram duas estratégias de integração de MPC e RTO usando como base uma coluna separadora de propileno. A primeira delas é a abordagem clássica com duas camadas, onde o RTO envia as informações diretamente para o MPC e a segunda é uma alternativa com 3 camadas, na qual existe uma camada intermediária de programação quadrática, responsável por computar os *setpoints* para o MPC, o que gerou um melhor resultado com relação à estabilidade do sistema.

Hinojosa e Odloak (2013) estudaram a aplicação de controle avançado (IH MPC) e RTO em uma coluna separadora de Propileno/Propano da Refinaria de Capuava (RECAP/Petrobras S A.) utilizando o simulador dinâmico comercial DynSim<sup>®</sup> associado ao otimizador comercial ROMEo<sup>®</sup>. Foi possível concluir que os modelos propostos para o controlador e o otimizador são estáveis e são capazes de serem aplicados em casos reais. Para o ponto de operação estudado, foi possível obter um ganho econômico de 10,8% no processo.



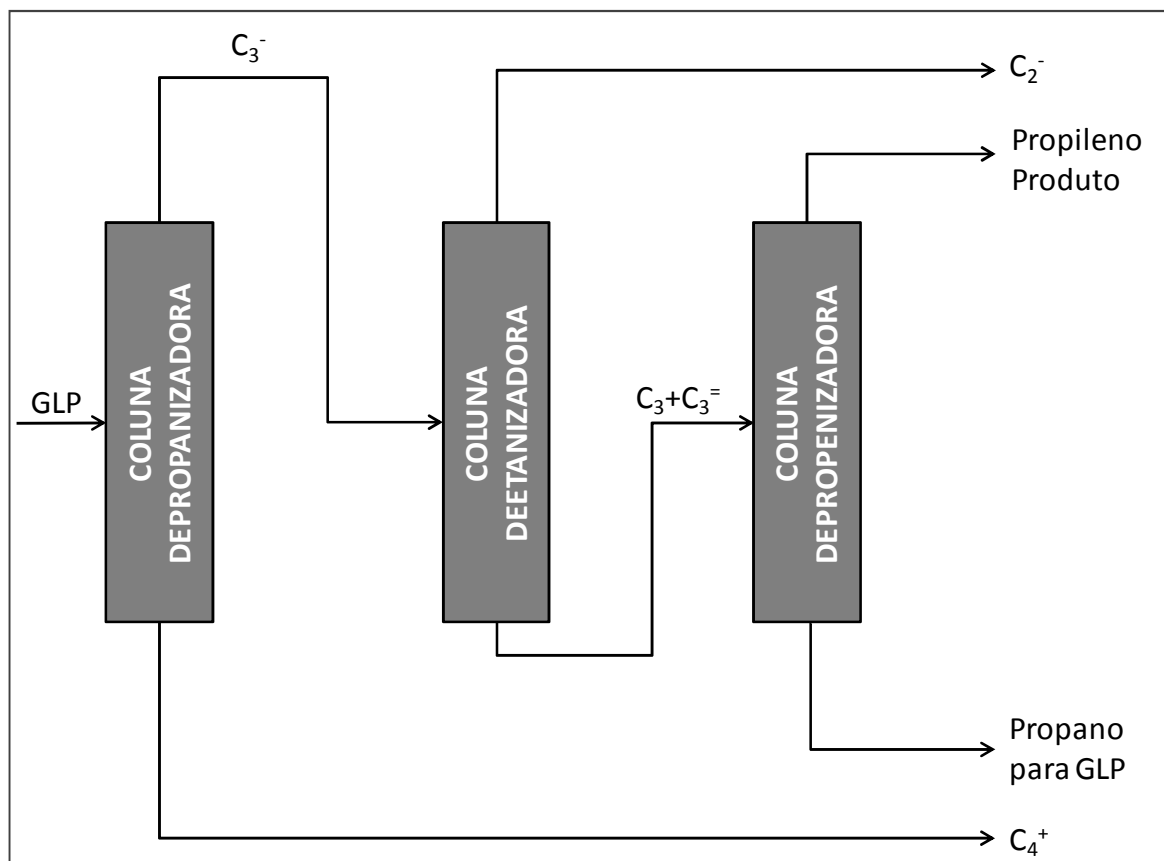
Larsson et al. (2015) propuseram um MPC que re-identifica os parâmetros do modelo baseando-se em dados experimentais de uma coluna depropanizadora, para melhorar a performance do processo.

### 3 DESCRIÇÃO DO PROCESSO

#### 3.1. APRESENTAÇÃO

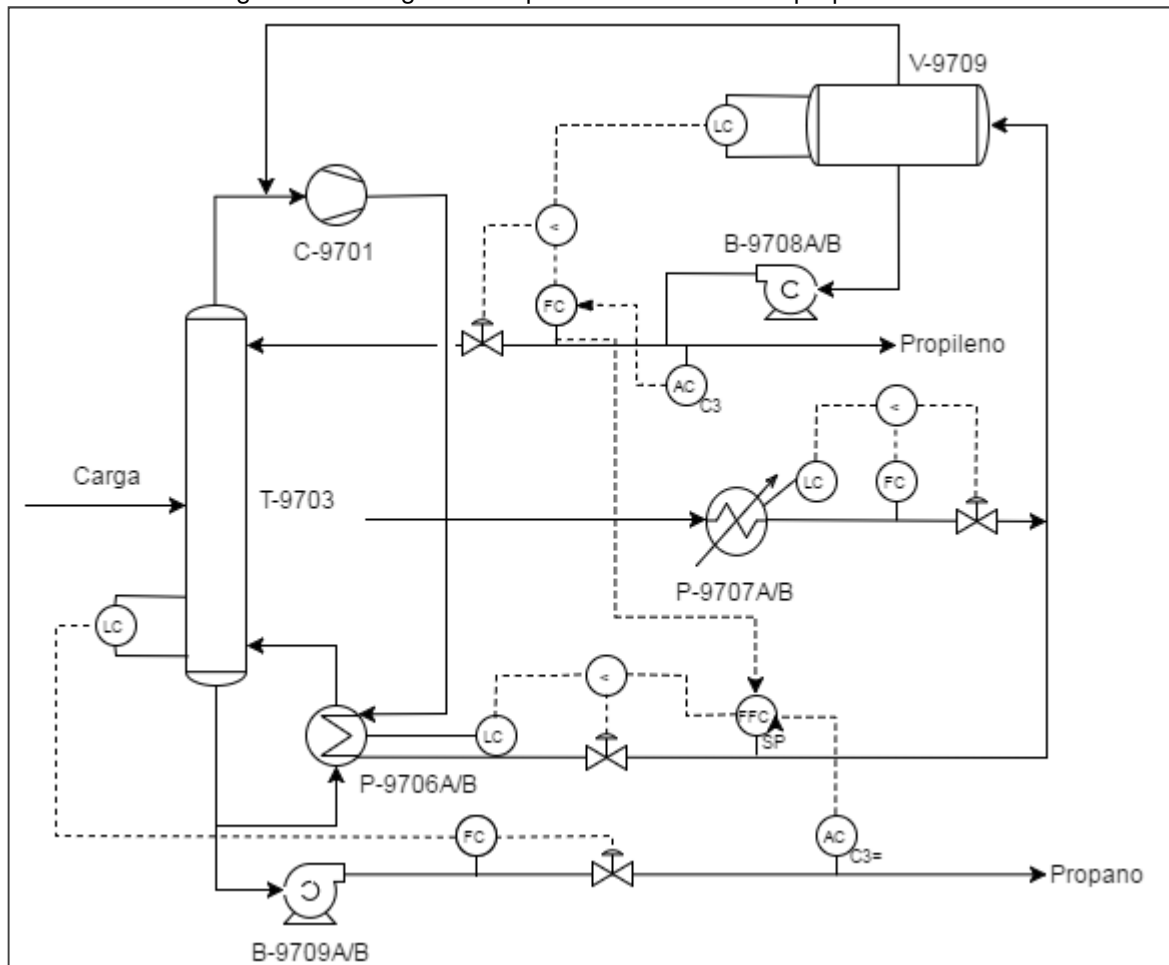
O processo em que será implementado o RTO neste trabalho faz parte da Unidade de Produção de Propileno da Refinaria de Paulínia (REPLAN/Petrobras S.A.). Essa unidade foi projetada para produzir 265.000 toneladas/ano de propileno grau polímero de alta pureza. A unidade é composta de uma seção de carga, três diferentes seções de destilação (Depropanizadora, Deetanizadora e fracionadora de propeno - Depropenizadora), além de um tratamento caústico para remoção de enxofre. GLP proveniente das unidades de FCC é utilizado como carga da unidade e gera dois produtos principais: Propileno e uma corrente rica em propano que é enviada para a estocagem de GLP. A Figura 4 representa a unidade através de um diagrama de blocos.

Figura 4 - Diagrama de Blocos da Unidade de Produção de Propileno



Nesse projeto, o RTO foi implementado na Seção da Fracionadora de Propileno (Coluna Depropenizadora). A Figura 5 representa um fluxograma simplificado dessa coluna.

Figura 5 - Fluxograma simplificado da Coluna Depropenizadora



### 3.2. DESCRIÇÃO DO PROCESSO - COLUNA DEPROPENIZADORA

O processo de separação propileno-propano utilizado nessa unidade emprega a chamada Destilação por Recompressão de Vapor (VRD), ou bomba de calor. Esse processo consiste, basicamente, em fornecer energia ao vapor de topo da coluna através de um compressor e utilizar parte desse fluido para aquecer o fundo da coluna.

O produto de fundo da coluna deetanizadora, uma corrente rica em propano e propileno, é alimentado no prato 157 da fracionadora (T-9703). Essa coluna opera com 9,0 kgf/cm<sup>2</sup>g e tem 197 pratos valvulados.

O calor necessário para realizar a separação do propileno do propano é fornecido para a coluna pelo produto de topo para os refeedores. Esses refeedores foram divididos em duas unidades idênticas em paralelo, devido às dimensões.

O produto de fundo contendo basicamente propano é bombeado para a estocagem de GLP.

O vapor de topo da coluna é misturado com o vapor do Vaso de Refluxo (V-9709) e enviado para o Compressor de Propileno (C-9701). O compressor aumenta a pressão do vapor para 14,8 kgf/cm<sup>2</sup>g, e assim a condensação nos refeedores é possível.

Depois da compressão o vapor é dividido em duas partes, uma maior que vai para os refeedores (P-9706A/B) e é condensada para até 35°C, e uma menor que é condensada e sub-resfriada para até 35°C no Condensador de Água (P-9707A/B). A condensação desse vapor mantém a pressão da coluna sob controle.

As correntes dos trocadores P-9706A/B e P-9707A/B depois de serem *flasheadas* são misturadas e coletadas no vaso V-9709. O vapor do V-9709 vai para a sucção do compressor.

O líquido bombeado pela bomba B-9708A/B é dividido em duas partes, uma maior retorna à coluna como refluxo e uma menor constitui o propileno produto.

A especificação do propileno produto grau polímero é de no mínimo 99,5% molar. Com o objetivo de manter essa especificação e minimizar a perda de propileno na corrente de propano, existem dois controles em cascata. O primeiro deles controla a concentração de contaminantes na corrente de propileno produto através da manipulação da vazão de refluxo para a torre, enquanto que o segundo controla a perda de propileno na corrente de fundo regulando a área de troca térmica no refeedor.

Devido ao baixo tempo de resposta da coluna, o controle dá prioridade ao balanço de massa, para manter a vazão dos dois produtos (propileno e propano) pelo menos igual à quantidade presente na alimentação da coluna. A análise de propano na corrente de propileno é utilizada para determinar o *setpoint* da vazão de refluxo, para atingir a especificação do propileno produto. Já a análise de propileno na corrente de propano é utilizada para determinar o *setpoint* de condensado do refeedor / razão de refluxo, regulando o calor do refeedor, para minimizar a perda de propileno na corrente de fundo.

### 3.3. CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

A destilação é uma das operações unitárias mais comuns na indústria química e a boa compreensão do seu comportamento é fundamental para o controle do processo, já que ele diretamente afeta a qualidade do produto, as taxas de produção e o consumo de utilidades.

Segundo Riggs (1998), o controle da destilação é um problema desafiador devido aos seguintes fatores:

- Não-linearidade do processo;
- Forte acoplamento das variáveis manipuladas;
- Dinâmicas complexas;
- Comportamento não-estacionário;
- Distúrbios severos.

As colunas de destilação de alta pureza apresentam forte comportamento não linear e o acoplamento das variáveis ocorre porque uma ação de controle tomada para a composição do produto de fundo vai impactar na composição do produto de topo e vice-versa.

Os principais distúrbios que afetam uma coluna de destilação são provenientes de variações na(o):

- composição da carga;
- vazão da carga;
- subresfriamento do refluxo;
- entalpia da carga;
- pressão da coluna;
- calor do refeedor.

Os distúrbios na composição representam um dos maiores transtornos com que o sistema de controle da coluna deve lidar, já que uma mudança na composição vai deslocar o perfil ao longo da coluna, resultando em alterações nos produtos. Outro distúrbio que pode gerar significativo transtorno para o controle é a variação da pressão, já que essa propriedade está diretamente relacionada com a volatilidade

dos componentes. Em geral, o sistema de controle mantém a pressão da coluna o mais próximo possível do ponto de ajuste, com poucas variações.

Devido à importância do controle de colunas de destilação, existem diversos trabalhos nessa área. Skogestad (1997) fez uma revisão bibliográfica sobre esse assunto e apresentou diversas questões como dinâmica, operação e controle de colunas. Riggs (1998) discorre sobre a importância do controle de colunas de destilação nos processos, apresentando e comparando alguns métodos de como realizar esse controle e também de sintonia de controladores. Uma questão importante relatada pelo autor é o desafio de utilizar um controle dual da composição, ou seja, controlar a composição dos produtos de fundo e topo da coluna. Um controle que envolva apenas uma das composições é muito mais fácil de ser implementado, sintonizado e operado com relação a um controle dual. Entretanto, o sucesso com um controle dual pode levar a uma menor perda de produto, dependendo do processo.

Além disso, por se tratar de um processo comum na indústria química, a separação de propileno/propano já foi alvo de estudo de diversos trabalhos. Jesus (2000) baseou-se em uma fracionadora industrial de propileno para avaliar e propor sistemas de controle mais adequados para a coluna, avaliando a performance de diversas estratégias, no qual foi possível resolver problemas de saturação de sinal, instabilidades e respostas lentas.

No trabalho de Fuchs (2010), foram comparadas diferentes estratégias de controle para colunas de destilação e analisado o sistema de controle de uma coluna separadora de propileno-propano industrial. Foi desenvolvida e implementada uma nova estratégia buscando aumentar a estabilidade do sistema, baseando-se na compensação da vazão de refluxo de acordo com o grau de subresfriamento dele e na minimização das perturbações da fonte quente do refeedor. Além disso foi implementado um controle regulatório do tipo DMC (controle avançado), responsável por atingir a especificação dos produtos.

Lopes (2011) estudou uma coluna depropanizadora industrial que utiliza a tecnologia de alta pressão, que consiste na separação convencional com condensador refrigerado com água e refeedor utilizando alguma fonte quente disponível. Nesse trabalho, foram analisados os distúrbios da planta que levavam a um baixo

rendimento na produção de propeno e verificou-se que a variação de pressão é a principal responsável pela falta de estabilidade operacional da coluna.

Olujić et al. (2006) propuseram um novo esquema energeticamente integrado internamente para a separação de propileno-propano, partindo do esquema típico da bomba de calor. Esse esquema propõe um novo arranjo interno da coluna, fazendo com que as seções de retificação e esgotamento tenham uma interface maior, diminuindo o tamanho da coluna. Segundo os autores, a solução proposta poderia reduzir em 20% o custo anual do sistema, levando em conta que o custo do compressor e os custos de operação são os que mais afetam o custo total.

### 3.4. DESTILAÇÃO POR RECOMPRESSÃO DO VAPOR

Dentre os processos de separação, a destilação é um dos que mais consomem energia em uma planta química. Uma alternativa para isso é utilizar um esquema que comprime o vapor de topo e o utiliza como fonte de calor no refeedor, que é conhecido operacionalmente como bomba de calor (*Heat Pump*) ou VRD (*Vapor Recompression Distillation*), como mostrado na Figura 5. Essa configuração é utilizada para otimizar energeticamente o processo, através da recuperação do calor da corrente do destilado e o seu subsequente aproveitamento, fazendo com que o gasto seja menor em relação a uma destilação convencional (Olujić et al., 2006). Além disso, esse esquema faz com que seja eliminada a necessidade de uso de vapor nos refeedores e diminui a quantidade de água de resfriamento para a condensação, conforme indicado na Tabela 1.

Tabela 1 - Consumo de Energia e Utilidades por tonelada de produção de Propileno

Variável	Unidade	Bomba de Calor	Coluna Convencional
Energia Elétrica	kWh	110	10
Água de Resfriamento	m <sup>3</sup>	26	105
Vapor	ton	-	2.4
Consumo específico de energia	Gcal	0.27	1.00

Fonte: Lopes (2011)

A destilação por recompressão do vapor (VRD) tem sido discutida na literatura desde a década de 1950, como descreve Robinson e Gilliland (1950), mas, conforme relatado por Ranade e Chao (1989), começou a ser industrialmente aceita e empregada nos anos 1980.

Esse tipo de configuração é muito empregado em sistemas que têm líquidos com pontos de ebulição próximos. Essas separações resultam em altas razões de refluxo, grande número de pratos e, além disso, um compressor é utilizado para facilitar a troca de calor num refeedor combinado com condensador (Jogwar e Daoutidis, 2009). Entretanto, um dos problemas dessa configuração é a diferença de ordem de magnitude entre diferentes correntes mássicas e energéticas, gerando rigidez ao processo. Todas estas características resultam em uma dinâmica lenta para o perfil de composição e uma dinâmica muito rápida para a pressão (Jesus, 2000).

A razão de refluxo é frequentemente utilizada para controlar colunas de destilação e, segundo Edgar et al. (2001), a otimização da razão de refluxo é particularmente atrativa para colunas que operam com:

- Alta razão de refluxo;
- Alta diferença de preço dos produtos (fundo e topo);
- Alto custo de utilidades;
- Baixa volatilidade relativa;
- Composição do componente chave leve distante de 50% na carga.



## 4 MÉTODOS

Esse capítulo descreve o modelo do processo e os métodos empregados nas seguintes etapas do ciclo do RTO que serão executados: identificação do estado estacionário, estimação de parâmetros, reconciliação de dados e otimização econômica.

### 4.1. MODELO DO PROCESSO

Conforme já discutido anteriormente, uma etapa muito importante no desenvolvimento da RTO é a elaboração de um modelo fenomenológico que possibilite simular a planta de forma mais real possível. No modelo utilizado, os equipamentos foram modelados considerando apenas aspectos termodinâmicos, usando as propriedades termodinâmicas calculadas pela equação de estado de Peng-Robinson (PR) e a regra de mistura SRK-preditiva, através do pacote termodinâmico IISE (Industrial Integrated Simulation Environment), da empresa VRtech. Para o equilíbrio de fases propileno-propano foi proposto um modelo tipo caixa preta que será apresentado adiante.

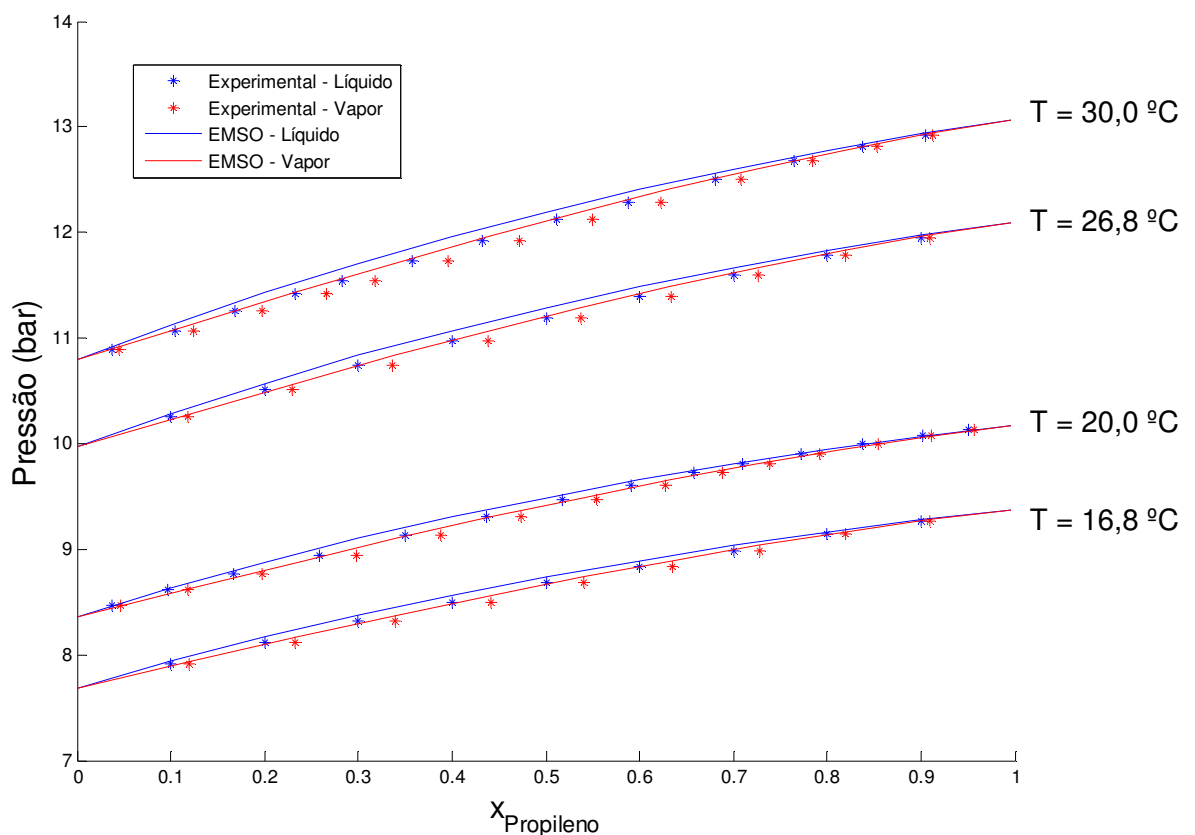
Devido à estrutura altamente integrada neste processo, somado às não-linearidades e ao grande número de equações (aproximadamente 3500), essa simulação é particularmente difícil de convergir em simuladores sequenciais-modulares. Portanto, foi utilizada uma abordagem orientada a equações para lidar com as dificuldades de convergência geradas pelo sistema de reciclo. Neste trabalho, o processo foi modelado em EMSO, que consiste em um simulador orientado a equações.

Foram modelados os principais equipamentos do processo: coluna de destilação, compressor, válvulas de controle e trocadores de calor. Este modelo foi validado e analisado em outro trabalho do grupo de pesquisa desse projeto e pode ser consultado em Mendoza et al. (2013).

#### 4.1.1. Equilíbrio de Fases

Foi necessária a elaboração de um modelo tipo caixa preta para representar o equilíbrio de fases propileno-propano. Esta necessidade se justifica pelo fato do modelo de equilíbrio do pacote IISE do EMSO não se ajustar muito bem a este binário no regime de operação do processo. A Figura 6 compara dados experimentais obtidos na literatura com os preditos pelo pacote IISE.

Figura 6 - Equilíbrio Líquido-Vapor para o Binário Propileno-Propano (Modelo EMSO)



A partir da figura acima, pode-se perceber que as curvas obtidas pelo pacote IISE não se ajustam aos pontos experimentais, principalmente para concentrações de propileno entre 20 a 70%. Por esse motivo, foi proposto o modelo tipo caixa preta representado a seguir, para representar o equilíbrio líquido-vapor.

$$x = y \cdot (\theta_1 + \theta_2 \cdot x^2 + \theta_3 \cdot y^2 + \theta_4 \cdot P/P^{vap}) \quad (2)$$

$$P^{vap} = 10 \left( A - \frac{B}{T+C} \right) \quad (3)$$

Onde,

- $x$  = Fração Molar da Fase Líquida
- $y$  = Fração Molar na fase Gasosa
- $P$  = Pressão do Sistema (bar)
- $P^{vap}$  = Pressão de Vapor (bar)
- $\theta_i$  = Parâmetros Ajustados no Modelo
- $T$  = Temperatura (K)
- $A, B$  e  $C$  = Constantes da Equação de Antoine

Para a Pressão de Vapor ( $P^{vap}$ ) de cada componente foram consideradas expressões da Equação de Antoine (eq. (9)). As constantes utilizadas encontram-se na Tabela 2.

Tabela 2 - Constantes da Equação de Antoine

	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>	<b>Referência</b>
Propileno	3,97488	795,819	-24,884	(Powell e Giauque, 1939)
Propano	4,53678	1149,36	24,906	(Helgeson e Sage, 1967)

Para estimar os parâmetros  $\theta_i$  foram utilizados 45 pontos experimentais obtidos na literatura (Base de Dados NIST). Os valores encontrados são apresentados na Tabela 3.

Tabela 3 - Parâmetros Ajustados para o Modelo de Equilíbrio

	$\theta_1$	$\theta_2$	$\theta_3$	$\theta_4$
Propileno	0,5296	-0,1027	0,1682	0,4048
Propano	0,5979	-0,1946	0,1475	0,4487

Dessa forma, para o Propileno, a relação de equilíbrio líquido-vapor pode ser escrita da seguinte forma:

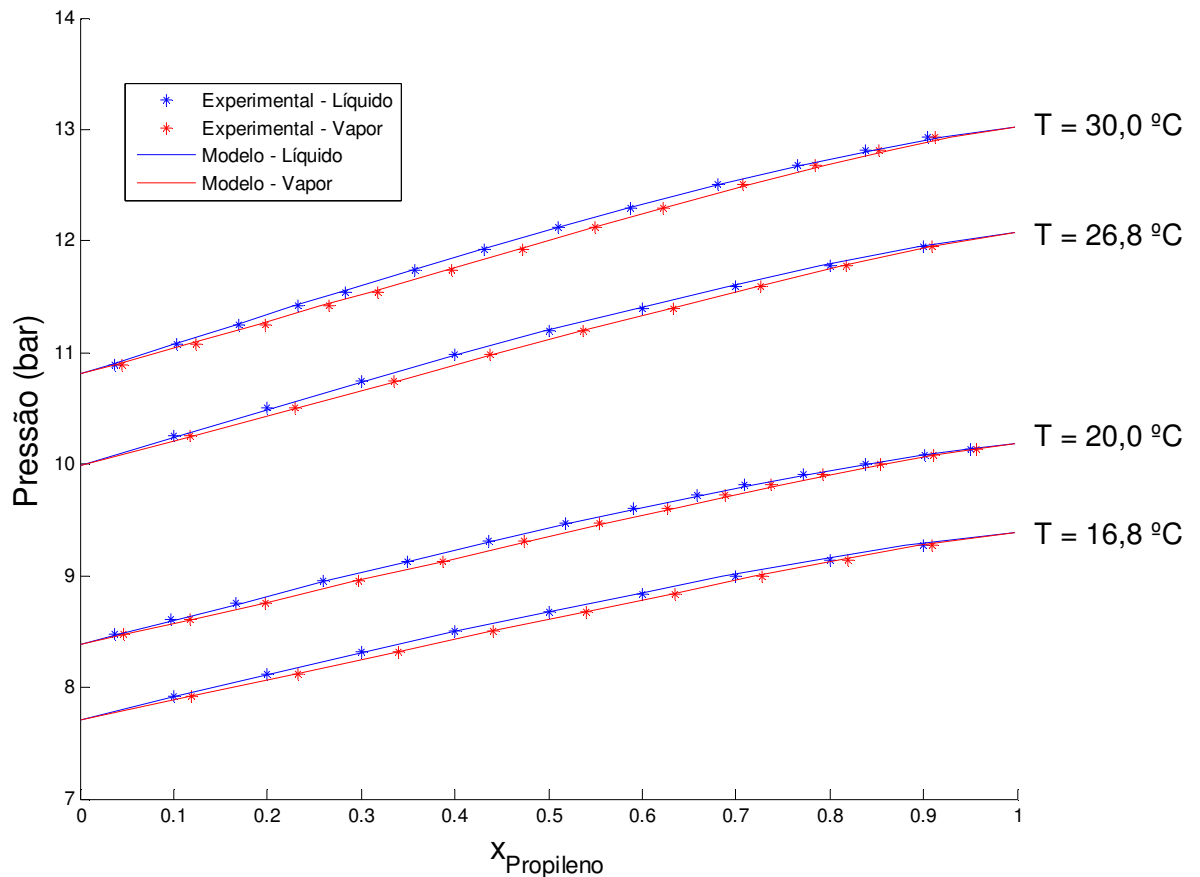
$$x_1 = y_1 \cdot \left( 0,5296 - 0,1027 \cdot x_1^2 + 0,1682 \cdot y_1^2 + 0,4048 \cdot \frac{P}{10^{\left(3,97488 - \frac{1149,36}{T-24,884}\right)}} \right) \quad (4)$$

Para o Propano, a relação fica:

$$x_2 = y_2 \cdot \left( 0,5979 - 0,1946 \cdot x_2^2 + 0,1475 \cdot y_2^2 + 0,4487 \cdot \frac{P}{10^{\left(4,53678 - \frac{795,819}{T+24,906}\right)}} \right) \quad (5)$$

A Figura 7 mostra os pontos experimentais e as curvas previstas pelo modelo tipo caixa preta proposto. É possível observar que o modelo se ajusta bem para esses dados experimentais, que estão na região de operação do processo estudado.

Figura 7 - Equilíbrio Líquido-Vapor para o Binário Propileno-Propano (Modelo Caixa Preta)



Portanto, como o modelo caixa preta proposto apresenta um melhor ajuste aos dados experimentais, foram consideradas essas relações de equilíbrio para o binário propileno-propano.

#### 4.1.2. Restrições do Modelo

Para a etapa de otimização econômica, algumas restrições físicas foram impostas baseadas nas capacidades dos equipamentos e na composição desejada dos produtos.

- *Concentração de propano no propileno produto*

A especificação do propileno grau polímero exige que ele tenha no máximo 5000 ppm de contaminantes. Por critério de segurança, conforme

documentação do projeto da unidade, foi considerado um fator de 10% e, portanto, a concentração de propano no propileno especificada no modelo é que ela seja no máximo 4500 ppm.

- *Concentração de propileno no produto de fundo*

Foi considerado que a concentração de propileno no produto de fundo deve ser no mínimo 0,5%. Essa restrição se justifica em casos de operação com baixa vazão de carga e será melhor abordada no Capítulo de Resultados e Discussão.

- *Vazão máxima do compressor*

Baseado nos dados de projeto, foi considerada a vazão máxima de 118 unidade de massa/tempo para o compressor C-9701.

- *Vazão máxima da bomba de refluxo*

A Bomba de Propileno (B-9707A/B) alimenta tanto a corrente de refluxo quanto a corrente de propileno produto. Baseado nos dados de projeto, foi considerada a vazão máxima de 120 unidade de massa/tempo para a soma dessas duas vazões.

#### 4.2. IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONÁRIO

Conforme discutido anteriormente, a tecnologia de RTO baseia-se em modelos fenomenológicos em estado estacionário, necessitando assim, que o processo esteja em estado estacionário para que as etapas do RTO sejam executadas. Em geral, são utilizados testes estatísticos para essa etapa.

Neste trabalho foram testados e comparados dois dos métodos mais empregados na literatura para determinar qual método de detecção de estado estacionário seria utilizado. Essa comparação encontra-se no Capítulo de Resultados e Discussão. Os métodos avaliados foram:

- Método baseado no teste estatístico F (Cao e Rhinehart, 1995)
- Método baseado em *wavelets* multiescala (Jiang et al., 2003)

#### 4.2.1. Método Baseado no Teste Estatístico F

Este é um método tradicional e já consolidado na literatura, que se baseia numa modificação do Teste F. Originalmente, o Teste F verifica, com um determinado nível de confiança, a hipótese de igualdade da variância de duas populações distintas. Já o teste proposto por Cao e Rhinehart consiste em comparar a variância calculada de duas formas diferentes. Este método tem como suas principais vantagens ter uma alta velocidade de processamento e baixo esforço computacional.

Primeiramente, para uma série de dados temporais  $X_i$ , é calculada uma média móvel ponderada ( $X_{f,i}$ ) através do filtro  $\lambda_1$  ( $0 < \lambda_1 < 1$ ).

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

Esses valores filtrados poderiam substituir a média no cálculo da estimativa da variância  $\hat{v}^2$  de acordo com a eq. (7):

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

Entretanto, como usar esse cálculo exigiria a definição de uma janela de tempo  $N$ , é utilizado um valor filtrado ( $0 < \lambda_2 < 1$ ) ao invés da média tradicional:

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

A outra estimativa de variância é calculada pela eq. (9), baseando-se no quadrado da diferença de dados sucessivos e levando em consideração as estimativas antecessoras ponderadas por um filtro  $\lambda_3$  ( $0 < \lambda_3 < 1$ ):

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

Com isso, a relação entre as variâncias é calculada definindo-se a razão  $R_i$ , de acordo com a eq. (10):

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

De acordo com Cao e Rhinehart (1995), existem três possíveis comportamentos que afetam o valor de  $R_i$ :

- Se o processo está em estado estacionário (média constante, ruído não correlacionado com o tempo e gaussiano), espera-se que o valor de  $R_i$  esteja próximo de um.
- Se a média variar ou o ruído for auto-correlacionado, então  $R_i$  vai ser maior do que um.
- Se os dados oscilarem entre os extremos inferiores e superiores dos seus valores, então o  $R_i$  será menor do que um. Entretanto, esse comportamento não é esperado em processos químicos.

Portanto, definindo um valor crítico para  $R$  ( $R_{crit}$ ), que representa um limite máximo aceitável para  $R_i$ , pode-se entender que esse método apenas testa se  $R_i > R_{crit}$  e o processo vai estar em estado estacionário para valores inferiores a  $R_{crit}$ .

Os parâmetros de filtro  $\lambda_1, \lambda_2$  e  $\lambda_3$  devem estar entre zero e um e são definidos para reduzir a influência do ruído nas estimativas das variâncias. O parâmetro  $\lambda_1$  é determinado baseado em um critério de tolerância de erros tipo II (a variável é declarada em estado estacionário quando ela não está), entretanto, valores altos desse filtro podem levar a atrasos na detecção. Cao e Rhinehart (1995) sugerem que as constantes  $\lambda_2$  e  $\lambda_3$  sejam iguais, mas Bhat e Saraf (2004) afirmam que quando  $\lambda_2 > \lambda_3$  é escolhido, é observada uma redução dos erros tipo I e II e do atraso na detecção do estado não estacionário.

Para sintonizar os parâmetros é necessário conhecer um intervalo de tempo em que o processo esteja em estado estacionário e, a partir disso, os valores de  $\lambda_i$  são ajustados para que nesse período pré-estabelecido os valores de  $R_i$  sejam inferiores a  $R_{crit}$  e superiores quando o processo não estiver estacionário. O valor de  $R_{crit}$  está associado ao nível de significância do método.

No caso da coluna separadora de propileno-propano, foram escolhidas seis variáveis medidas para detectar o estado estacionário: três vazões (carga, destilado e fundo) e três concentrações (composição de propileno na carga e no produto de fundo e

composição de propano no topo). Para ajustar os filtros foi assumido um intervalo de tempo em que o processo estava estacionário e esses foram fixados em  $\lambda_1 = 0,700$ ,  $\lambda_2 = 0,050$  e  $\lambda_3 = 0,006$ , enquanto o  $R_{crit}$  foi estabelecido igual a 2, conforme utilizado por Cao e Rhinehart (1995). Após essa determinação dos parâmetros, pode-se aplicar a metodologia para outros intervalos do processo para determinação de outros pontos estacionários.

Como foi observado o comportamento de diversas variáveis ao mesmo tempo, foi considerado que o processo está em estado estacionário quando todas elas estiverem. Assim, foi definida uma variável  $issteady_i$  para cada variável de processo que assume o valor unitário ( $issteady_i = 1$ ) quando  $R_i < R_{crit}$  e o valor nulo ( $issteady_i = 0$ ) em caso contrário. Dessa forma, para identificar que todas as  $N$  variáveis podiam ser consideradas em estado estacionário num mesmo instante, calculou-se a variável  $ISS$  da seguinte forma:

$$ISS = \prod_{i=1}^N issteady_i \quad (11)$$

Assim, quando  $ISS$  for igual a um, o processo está em estado estacionário naquele instante de tempo.

#### 4.2.2. Método Baseado em *Wavelets* Multiescala

Este método é baseado em transformadas *wavelets* e é uma ferramenta para análise de sinais estacionários, permitindo identificar de forma precisa no tempo alterações abruptas nos sinais. Jiang et al. (2003) utilizaram técnicas baseadas em *wavelet* multiescala para estimar o status do processo e identificar estados estacionários. O método consiste, basicamente, em avaliar a derivada dos dados ao longo do tempo para avaliar o comportamento do processo.

Como a transformada *wavelet* é proporcional à primeira derivada da função ( $W_S f(t)$ ), as variações da derivada da função no ponto de corte com o eixo e sua amplitude fornecem informação da natureza das discontinuidades 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 derivada  $W_S f(t)$ .

São definidos limiares para os valores absolutos estimados das derivadas de primeira e segunda ordem,  $W_S f(t)$  e  $WW_S f(t)$ , respectivamente. A derivada de segunda ordem ( $WW_S f(t)$ ) é utilizada como um critério de confirmação da existência de um ponto de inflexão na função.

A estimativa desses limiares se dá através de dados históricos das medições nos quais sabe-se que o processo encontra-se em estado estacionário. A partir disso são calculadas as derivadas de primeira e segunda ordem desses dados, e assim, calculados o desvio padrão da primeira derivada ( $\sigma_{W_f}$ ) e a mediana da segunda derivada ( $\sigma_{WW_f}$ ). Com isso, esses valores são calculados conforme indicado a seguir e  $\kappa$  é um parâmetro de ajuste com valor próximo a 1:

$$T_s = \sigma_{W_f}, T_u = 3\kappa\sigma_{W_f}, T_w = \sigma_{WW_f} \quad (12)$$

Nesse método, um índice  $\beta(t)$  ( $0 \leq \beta(t) \leq 1$ ) é utilizado para medir o grau de estacionariedade.  $\beta(t) = 0$  indica um estado não-estacionário,  $\beta(t) = 1$  indica que o estado estacionário foi atingido e  $0 < \beta(t) < 1$  indica um estado intermediário que, quanto mais próximo de 1, mais próximo da estacionariedade o processo se encontra.

Para a determinação de  $\beta(t)$ , deve-se antes calcular as funções  $\gamma(t)$  e  $\theta(t)$ .  $\gamma(t)$  é um coeficiente determinado em função de  $|WW_S f(t)|$  e  $\theta(t)$  é calculado pela combinação de  $|W_S f(t)|$  e  $|WW_S f(t)|$ . Assim, elas são calculadas da seguinte forma:

$$\gamma(t) = \begin{cases} 0, & |WW_S f(t)| \leq T_w \\ \frac{|WW_S f(t)| - T_w}{2T_w}, & |WW_S f(t)| \in (T_w, 3T_w) \\ 1, & |WW_S f(t)| \geq 3T_w \end{cases} \quad (13)$$

$$\theta(t) = |W_S f(t)| + \gamma(t) \cdot |WW_S f(t)| \quad (14)$$

Após determinados  $\gamma(t)$  e  $\theta(t)$ , o índice  $\beta(t)$  pode ser calculado através das equações abaixo:

$$\beta(t) = \begin{cases} 0, & \theta \geq T_u \\ \xi[\theta(t)], & T_s < \theta < T_u \\ 1, & \theta \leq T_s \end{cases} \quad (15)$$

Onde,  $\xi[\theta(t)]$  é uma função de transferência com módulo entre 0 e 1 e é definida através da eq. (16):

$$\xi[\theta(t)] = \frac{1}{2} \left[ \cos \left( \frac{\theta(t) - T_s}{T_u - T_s} \cdot \pi \right) + 1 \right] \quad (16)$$

De forma análoga ao método de Cao e Rhinehart (1995), para o caso de sistemas com várias variáveis, pode ser definido o índice  $B$  que leva em consideração o índice  $\beta_i$  de cada variável.  $B$  pode ser calculado através da eq. (17):

$$B = \prod_{i=1}^N [\beta_i(t)]^{w_i / \sum w_i} \quad (17)$$

Onde  $w_i$  é um peso associado a cada variável  $N$  e, geralmente, é assumido como 1. Dessa forma, a mesma análise de estacionariedade feita anteriormente para  $\beta_i(t)$  pode ser feita para  $B(t)$ .

Para este trabalho, foram consideradas as mesmas seis variáveis descritas no método anterior. Para todas elas foi mantido o mesmo parâmetro de ajuste  $\kappa = 1$  e foram consideradas que todas têm o mesmo peso na determinação de  $B(t)$ , ou seja,  $w_i = 1$ .

### 4.3. APLICAÇÃO DO RTO NA SEPARAÇÃO DE PROPILENO-PROPANO

Após a construção do modelo e a identificação de pontos em estado estacionário, conforme descrito nos itens anteriores, o ciclo de RTO pode ser implementado nesses pontos. Para isso, ao longo do projeto, foram analisadas técnicas de estimação de parâmetros, reconciliação de dados e otimização econômica, conforme descrito nos itens a seguir.

#### 4.3.1. Estimação de Parâmetros e Reconciliação de Dados

Para a estimação de parâmetros foi aplicada a metodologia de Discriminação Rotacional (DR), usando informações reais da Unidade de Produção de Propileno da Refinaria de Paulínia da Petrobras (REPLAN). A reconciliação de dados foi feita de forma acoplada com a estimação de parâmetros e os experimentos foram realizados no software EMSO, usando uma rotina de DR desenvolvida na linguagem C++.

A escolha pela técnica de DR se deu após comparação e análise de diferentes técnicas pelo grupo de pesquisa do projeto. Os resultados indicando que a DR é a mais favorável foram publicados em revista internacional e podem ser analisados com mais detalhes em Graciano et al. (2014).

Na etapa de estimação, seis parâmetros do modelo foram usados para adequar os dados de processo, e outras cinco variáveis foram consideradas como medidas a serem reconciliadas. Essas variáveis estão listadas na Tabela 4.

Tabela 4 - Parâmetros utilizados na Estimação e Reconciliação

<b>Tipo de Parâmetro</b>	<b>Descrição</b>
Parâmetros do modelo a serem estimados	Eficiência de Murphree - Seção 1 da Coluna
	Eficiência de Murphree - Seção 2 da Coluna
	Eficiência de Murphree - Seção 3 da Coluna
	Troca térmica da Coluna com o ambiente
	Coefficiente global de troca térmica do resfriador a água
	Fração de vapor da corrente de propano na saída do refeedor
Medidas do processo a serem reconciliadas	Composição de propileno na corrente de entrada da coluna
	Vazão mássica de entrada da coluna
	Vazão mássica de refluxo
	Vazão mássica do produto de fundo
	Pressão absoluta no topo da coluna

#### 4.3.2. Otimização Econômica

Após detectar o estado estacionário e atualizar o modelo, é necessário realizar a otimização econômica do modelo de acordo com a função objetivo econômica. Neste caso de estudo, o objetivo é o de maximizar o lucro da planta através da

produção de propileno de alta pureza pelo topo da coluna, que tem um valor de venda superior ao propano, que é enviado para o GLP. Dessa forma, a função objetivo econômica é composta, a princípio, pela receita da venda dos produtos (topo e fundo da coluna) menos o gasto com utilidades (energia elétrica do compressor e água de resfriamento dos resfriador) e matéria-prima.

Um problema em formular a função objetivo dessa forma é que a corrente de entrada da torre é uma corrente intermediária, já que ela vem de outra torre de destilação e, por isso, não tem um preço atribuído a ela. Portanto, deve-se atribuir um preço de mercado para essa corrente. Entretanto, se não houver preço de mercado para um produto intermediário, ele pode ser estimado com base nos custos do processo a partir de métodos envolvendo programação matemática (preços sombra). Segundo Li (2000), os preços sombra (*shadow prices*) e os preços de mercado são os dois principais recursos para estimar os preços de correntes intermediárias.

Uma das formas de obter os preços sombra para produtos intermediários é através da utilização de técnicas de decomposição, que se baseiam em algoritmos iterativos para que os problemas de otimização possam ser decompostos e resolvidos separadamente, realizando atualizações do multiplicador de Lagrange para as restrições das correntes intermediárias das divisões, sendo que, para fins econômicos, os multiplicadores de Lagrange representam os preços sombra desses produtos intermediários. A implementação de técnicas de decomposição nesse processo foi previamente estudada pelo nosso grupo de pesquisa e pode ser encontrada em Acevedo (2015). Baseado em informações fornecidas pela empresa proprietária da unidade e no trabalho acima mencionado, os preços considerados para a otimização estão apresentados na Tabela 5. Por questões de privacidade da empresa proprietária do processo, os valores foram parametrizados.

Tabela 5 - Lista de Preços

<b>Item</b>	<b>Unidade</b>	<b>Valor</b>
Corrente de Entrada	Unidade monetária/massa	397,25
Produto de Topo	Unidade monetária/massa	893,6
Produto de Fundo	Unidade monetária/massa	229,08
Energia Elétrica	Unidade monetária/MWh	19,92
Água de Resfriamento	Unidade monetária/massa	0,013

A partir dos dados da tabela acima, pode-se ver que o preço do produto de topo, rico em propileno, é cerca de quatro vezes o preço do fundo, rico em propano, fazendo com que a otimização maximize a produção do primeiro. Além disso, o custo das utilidades é muito inferior aos demais itens, fazendo com que o aumento dessas utilidades tenha pouco impacto no lucro.

Para a maximização do lucro foi utilizado o método de Nelder-Mead. Esse é um método de busca direta, baseado no algoritmo simplex, e caracteriza-se por possibilitar a otimização em problemas não-lineares e multidimensionais, requerendo apenas a avaliação da função objetivo e sem a necessidade de derivadas para encontrar a solução.

O processo tem dois graus de liberdade para serem usados na otimização e nesse caso foram escolhidas as vazões de refluxo e de fundo da coluna para realizar esse controle. Além disso, as restrições para as concentrações dos produtos e vazões máximas da bomba de refluxo e compressor, mostradas no item 4.1.2, são consideradas como funções de penalidade linear adicionadas à função objetivo. Dessa forma, a função objetivo Lucro a ser maximizada é descrita na eq. (18).

$$L = -C_{carga} + R_{destilado} + R_{fundo} - C_{EnergiaElétrica} - C_{água} - P_1 - P_2 - P_3 - P_4 \quad (18)$$

Onde,

$L$  = Lucro da unidade

$C_{carga}$  = Custo da Carga da unidade

$R_{destilado}$  = Receita relativa ao destilado (propileno)

$R_{fundo}$  = Receita relativa ao produto de fundo (propano)

$C_{EnergiaElétrica}$  = Custo relativo à energia elétrica do Compressor

$C_{água}$  = Custo relativo à água de resfriamento do Resfriador

$P_1$  = Penalidade associada à composição de propano no propileno produto

$P_2$  = Penalidade associada à composição de propileno no produto de fundo

$P_3$  = Penalidade associada à vazão máxima da bomba de propileno

$P_4$  = Penalidade associada à vazão máxima do compressor

## 5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

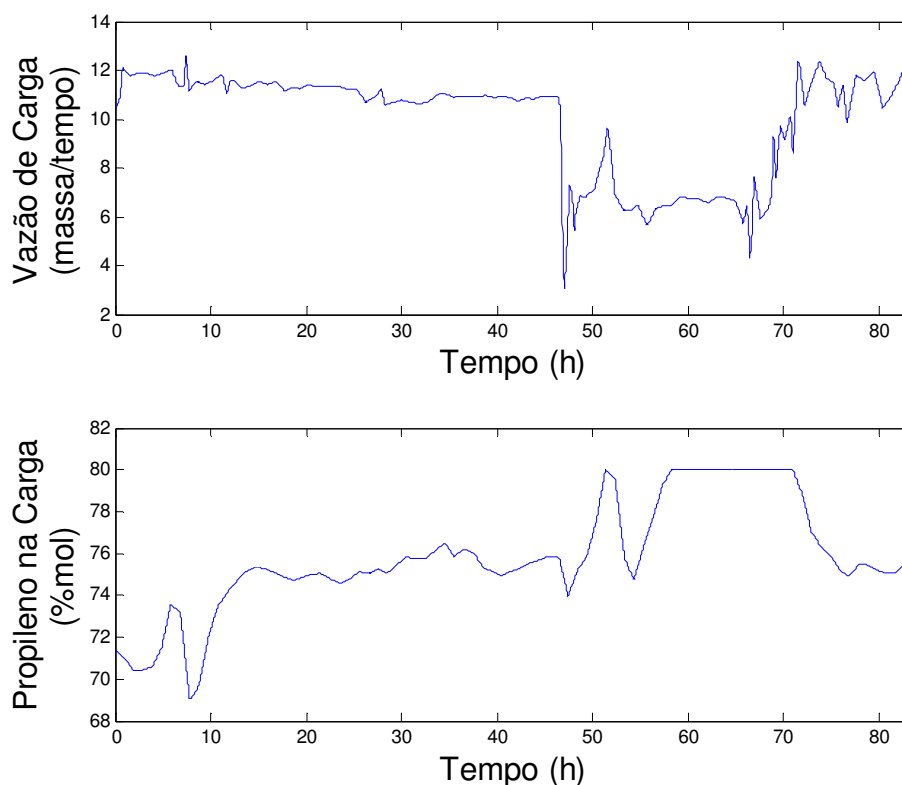
Neste capítulo será implementado o ciclo RTO a partir de dados históricos do processo. Para isso, foram comparados dois métodos de identificação de estado estacionário e, após a escolha, foram identificados alguns pontos para a execução do ciclo RTO. Além disso, foram feitas algumas análises de sensibilidade para verificar o comportamento do processo em diferentes situações.

### 5.1. IDENTIFICAÇÃO DO ESTADO ESTACIONÁRIO

#### 5.1.1. Escolha do Método

Os dados reais da planta apresentam fortes oscilações como pode ser visto na Figura 8, que mostra a Vazão de Carga e Composição de Propileno em um determinado intervalo de tempo. Devido a essas instabilidades da planta, torna-se difícil determinar, por simples inspeção visual, um período em que todas as variáveis consideradas estejam estacionárias, fazendo com que seja necessário um procedimento robusto para essa determinação.

Figura 8 - Vazão e Composição de Propileno na Carga da Coluna



Foram comparados os dois métodos de identificação de estado estacionário descritos na seção anterior para definir qual deles seria utilizado ao longo do trabalho.

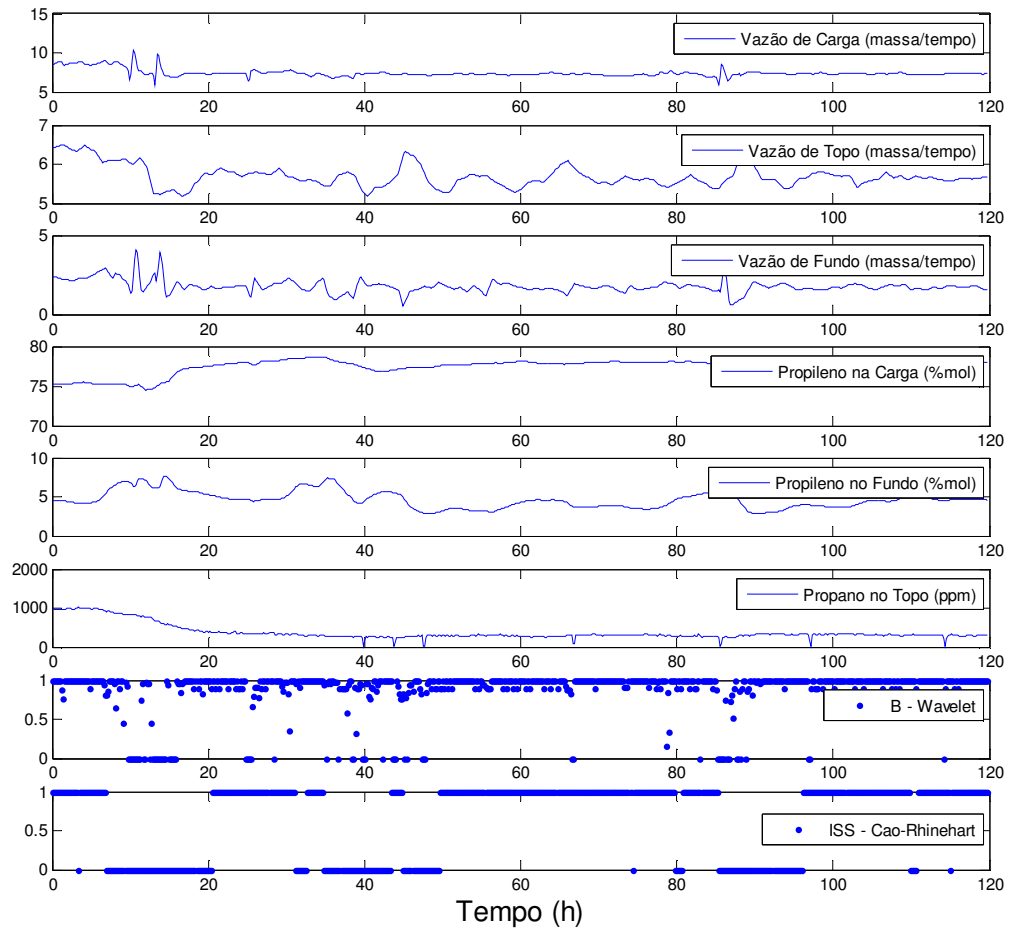
Primeiramente, o método proposto por Cao e Rhinehart (1995) foi implementado em MATLAB<sup>®</sup> e seu código encontra-se no Apêndice C. Os filtros foram mantidos constantes em  $\lambda_1 = 0,700$  ,  $\lambda_2 = 0,050$  e  $\lambda_3 = 0,006$  , enquanto o  $R_{crit}$  foi estabelecido igual a 2.

Conforme descrito anteriormente, para a determinação dos valores dos filtros, foi considerado um intervalo de tempo que estaria, *a priori*, em estado estacionário e os parâmetros  $\lambda_i$  foram ajustados até que se encontrassem valores de  $R$  que fossem menores que  $R_{crit} = 2$ .

De forma análoga, o método *Wavelet* também foi implementado em MATLAB<sup>®</sup> e seu código encontra-se no Apêndice D. O filtro  $\kappa$  foi mantido em  $\kappa = 1.0$ .

Após o ajuste dos filtros de ambos os métodos, foi selecionado um intervalo do processo com intervalos estacionários e não-estacionários e comparados os resultados obtidos pelos dois métodos descritos na seção anterior. A figura 9 mostra o resultado obtido.

Figura 9 - Comparação dos Métodos de Detecção de Estado Estacionário



A Figura 9 apresenta as seis variáveis utilizadas para a análise (indicadas na própria figura) e os dois últimos gráficos indicam o resultado de estacionariedade obtido por cada um dos métodos. Pode-se ver que os resultados são consistentes entre si e coerentes quando observados os comportamentos de cada uma das variáveis. O método de Cao e Rhinehart (1995) mostra-se ser mais conservador do que o método *Wavelet* em acusar os estados estacionários, principalmente pelo fato de considerar medidas em instantes anteriores das variáveis (eq. (6)).

Ambos os métodos necessitam de sintonia de parâmetros e como eles tiveram resultados semelhantes, optou-se por utilizar, devido à sua menor complexidade, o método proposto por Cao e Rhinehart (1995) no restante do trabalho.



### 5.1.2. Importância da Identificação do Ponto Estacionário

Com o objetivo de verificar a importância de o ponto escolhido estar em estado estacionário para dar início ao ciclo de RTO, foi escolhido um ponto estacionário (Ponto A) e um não estacionário (Ponto B), de acordo com o método de Cao e Rhinehart (1995).

Na estimação e reconciliação de parâmetros, etapa posterior à identificação de estado estacionário, são calculadas as médias e os desvios-padrão das variáveis. Nesta etapa, é possível ver que os valores dos desvios-padrão em relação às médias são maiores para o Ponto B, conforme indicado na Tabela 6, o que faz com que a etapa de estimação tenha dificuldade em convergir. Os maiores desvios-padrão encontram-se nas variáveis referentes às vazões.

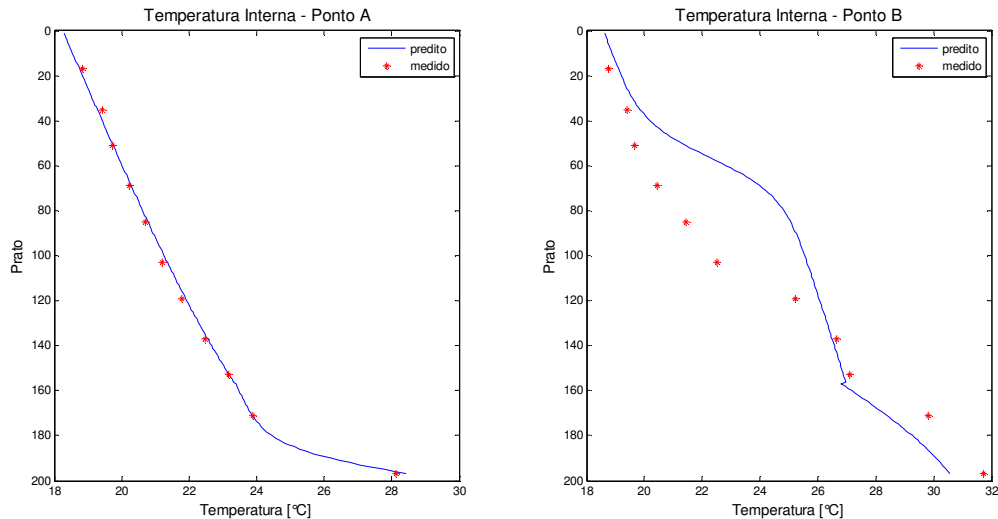
Tabela 6 - Comparação de Resultados da Estimação de Parâmetros para os Pontos A e B

	Descrição	Unidade	Média	Desvio Padrão	Resultados após estimação e reconciliação	Desvio %
PONTO A	Vazão de Entrada	massa/tempo	9,42	0,32	9,48	0,6%
	Propileno na Entrada	%-mol	76,08	2,91	75,12	-1,3%
	Temperatura do Produto de Topo	°C	27,94	0,88	28,04	0,4%
	Vazão do Produto de Topo	massa/tempo	5,94	1,04	6,14	3,3%
	Concentração de Propano no Topo	ppm	2862,77	0,19	2545,93	-11,1%
	Temperatura do Produto de Fundo	°C	28,57	0,92	28,61	0,1%
	Vazão do Produto de Fundo	massa/tempo	3,48	0,95	3,34	-3,9%
	Concentração de Propeno no Fundo	%-mol	28,81	9,31	28,32	-1,7%
	Vazão de Refluxo	massa/tempo	93,06	1,14	92,29	-0,8%
	Razão de Refluxo	-	15,66	1,10	15,04	-3,9%
	Vazão do Compressor	massa/tempo	100,58	6,53	98,75	-1,8%
	Potência do Compressor	MW	N/D	N/D	3,36	-
	Vazão de Propeno no Resfriador	massa/tempo	11,65	0,47	10,34	-11,2%
	Vazão de Propeno no Refervedor	massa/tempo	88,93	6,06	88,93	-0,6%
PONTO B	Vazão de Entrada	massa/tempo	4,89	1,65	6,75	38,1%
	Propileno na Entrada	%-mol	62,71	3,14	75,55	20,5%
	Temperatura do Produto de Topo	°C	30,93	0,42	30,14	-2,6%
	Vazão do Produto de Topo	massa/tempo	4,00	1,41	4,91	22,8%
	Concentração de Propano no Topo	ppm	1827,77	233,43	1834,86	0,4%
	Temperatura do Produto de Fundo	°C	31,32	1,78	30,57	-2,4%
	Vazão do Produto de Fundo	massa/tempo	2,48	2,50	1,84	-25,5%
	Concentração de Propeno no Fundo	%-mol	0,11	0,10	8,05	6915,9%
	Vazão de Refluxo	massa/tempo	88,20	2,56	92,18	4,5%
	Razão de Refluxo	-	22,05	1,81	18,77	-14,9%
	Vazão do Compressor	massa/tempo	93,78	2,03	97,09	3,5%
	Potência do Compressor	MW	3,23	0,03	3,28	1,5%
	Vazão de Propeno no Resfriador	massa/tempo	10,56	0,70	12,98	22,9%
	Vazão de Propeno no Refervedor	massa/tempo	83,22	1,33	84,11	1,1%

A partir dos dados acima, é possível ver que para o Ponto B (não estacionário) os desvios entre os valores medidos e os preditos pelo modelo após a estimação são maiores do que aqueles para o Ponto A.

Além disso, para mostrar a diferença dos resultados obtidos, a figura 10 compara o perfil de temperatura ao longo da coluna para cada um desses dois pontos.

Figura 10 - Comparação das Temperaturas Internas da Coluna



Para o ponto A, que se encontra em estado estacionário, é possível ver que o ajuste predito fica muito próximo dos dados medidos. Entretanto, para o Ponto B é possível ver que os dados preditos pela estimação têm um grande desvio dos dados medidos.

A partir dessas análises, pode-se notar que é essencial que o processo esteja em estado estacionário para essa etapa do ciclo RTO e, além disso, que o método de Cao e Rhinehart (1995) está identificando de forma satisfatória os estados estacionários.

### 5.1.3. Escolha de Pontos Estacionários

Para a escolha de pontos em estado estacionário, a identificação do estado estacionário foi aplicada para dados reais disponíveis do processo. Inicialmente foi analisado um intervalo de Julho a Agosto de 2012, em que as medições foram tomadas a cada minuto. Conforme explicado anteriormente, foi utilizado o método de Cao e Rhinehart para esta etapa.

As Figuras 11 a 16 mostram os valores filtrados, o valor de R e se cada ponto está ou não em estado estacionário para cada uma das variáveis consideradas.

Figura 11 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Carga

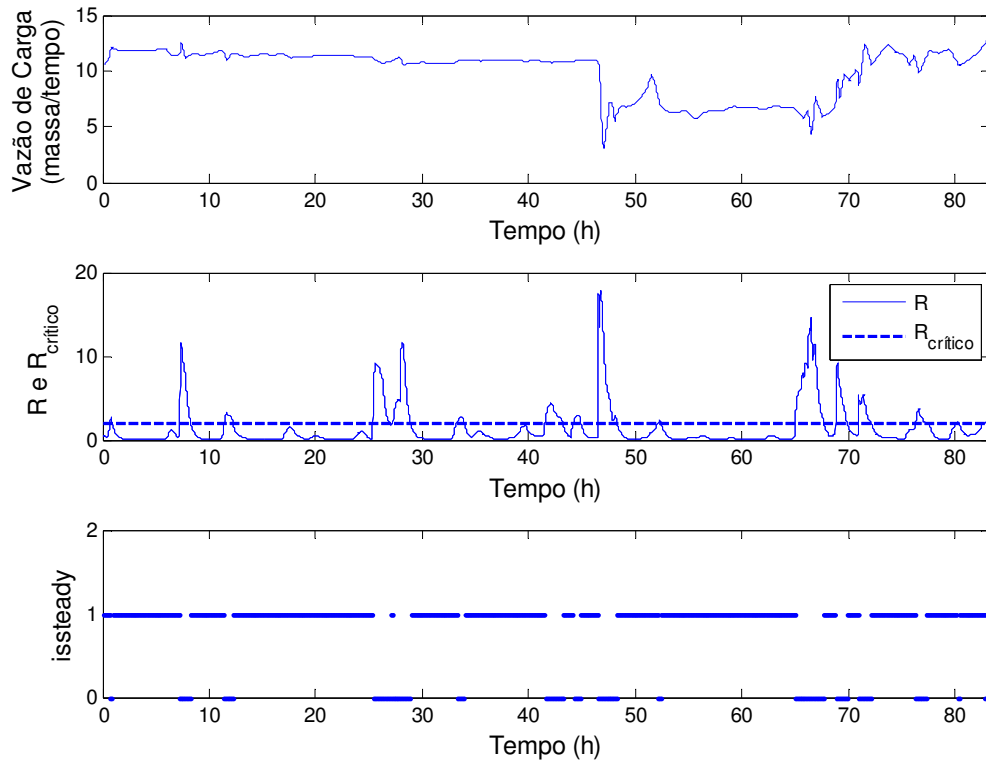


Figura 12 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Topo

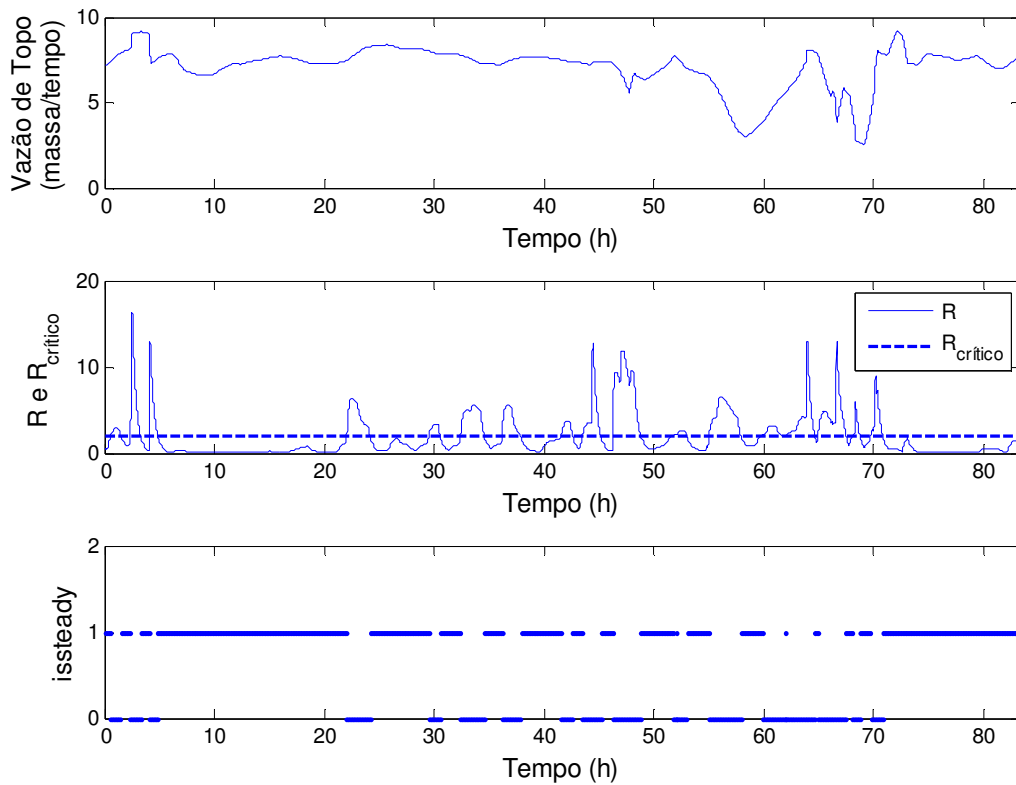


Figura 13 - Identificação do Estado Estacionário para Vazão de Fundo

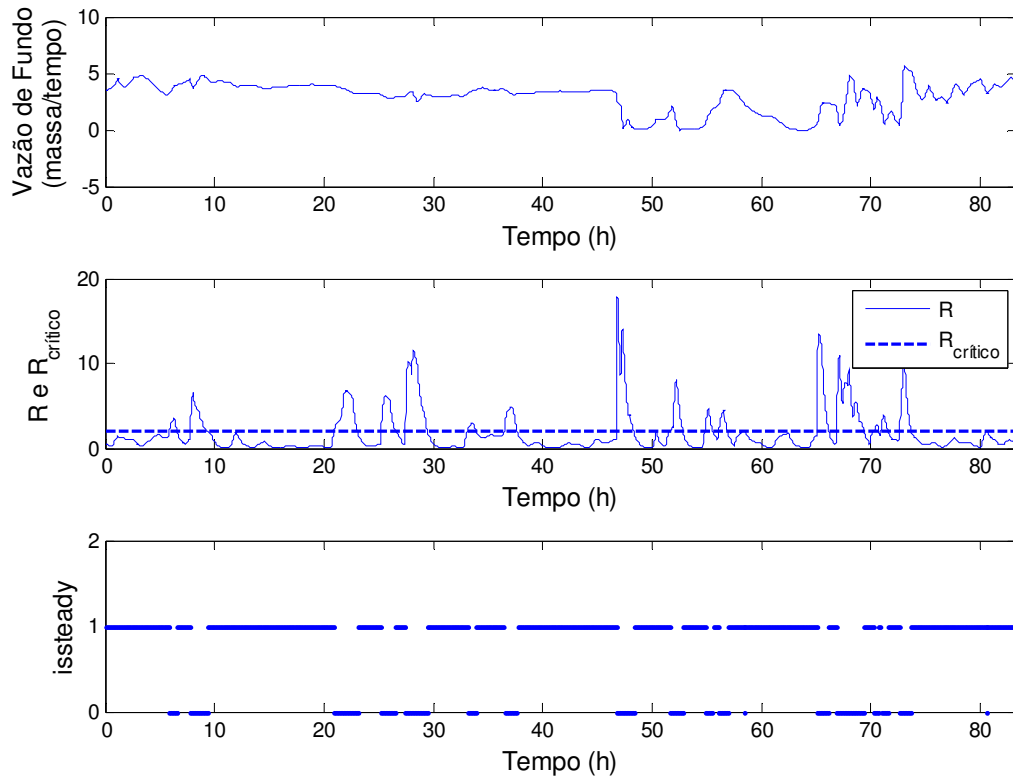


Figura 14 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propileno na Carga

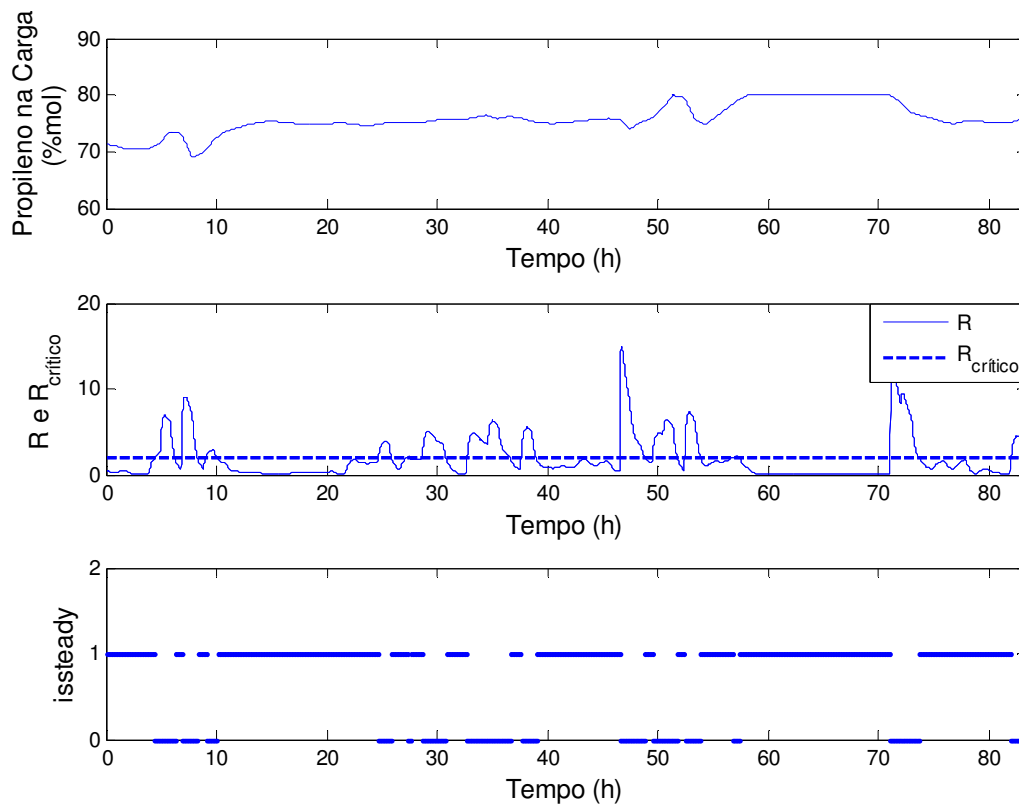


Figura 15 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propano no Topo

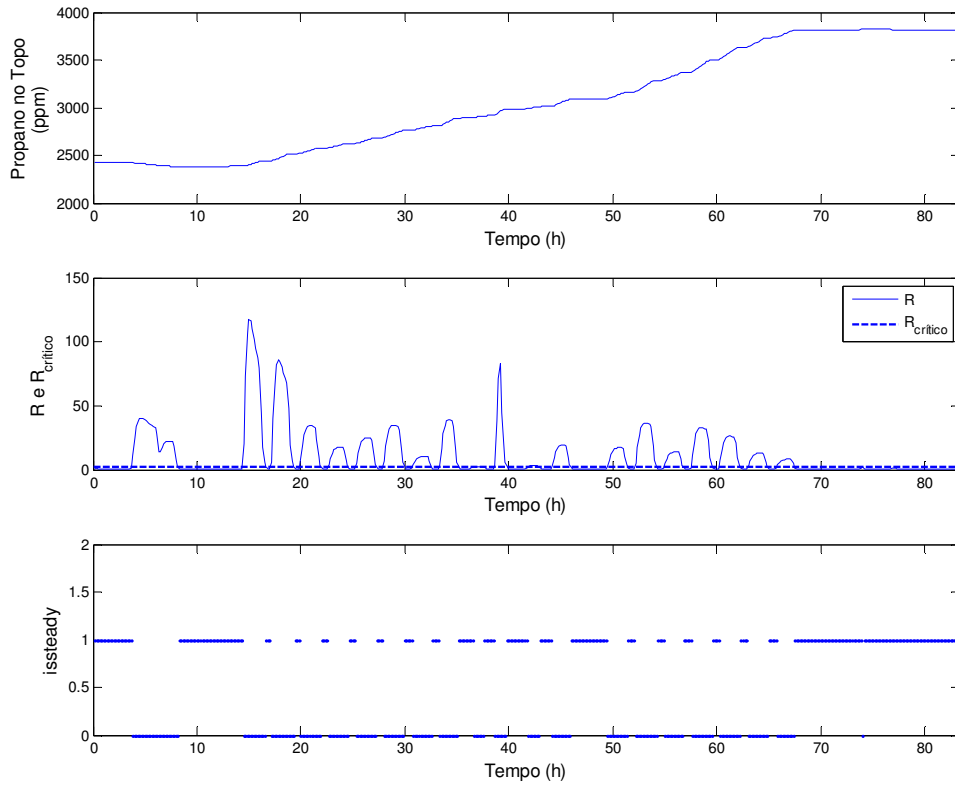
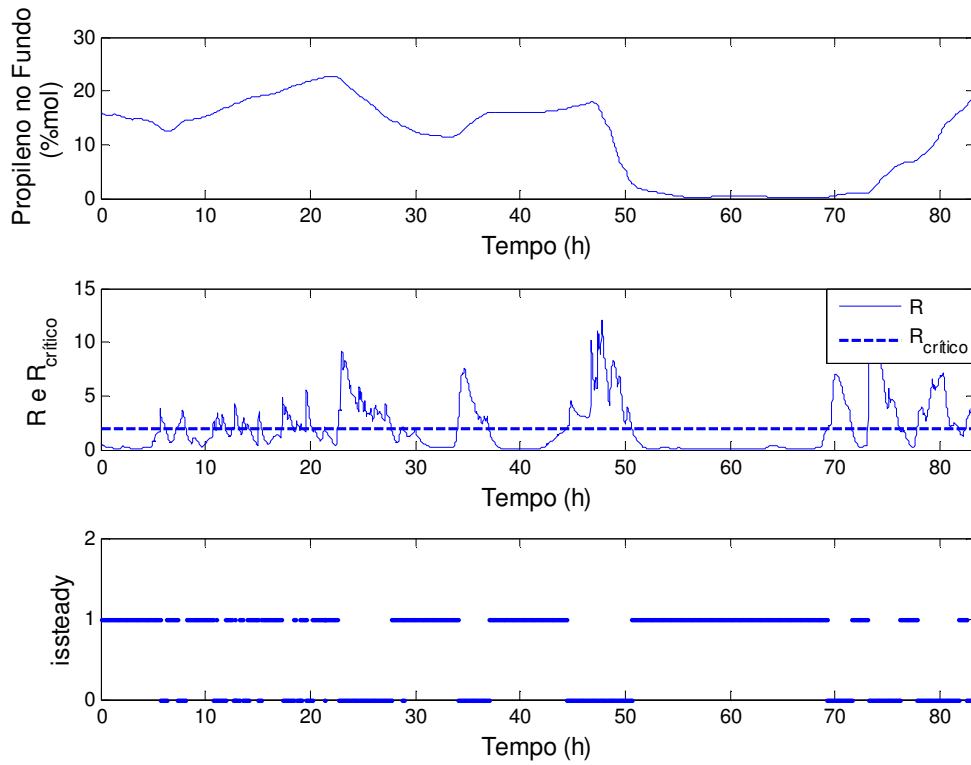
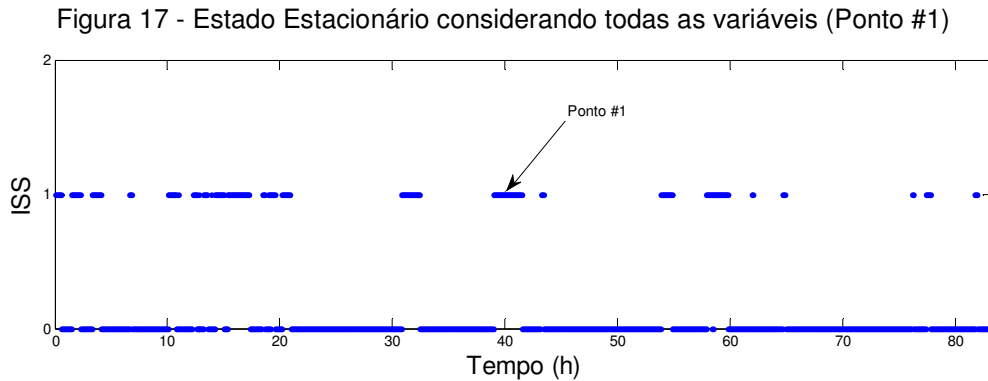


Figura 16 - Identificação do Estado Estacionário para Composição de Propileno no Fundo



Com base nos resultados mostrados acima, foi verificado em quais instantes de tempo todas as variáveis estavam em estado estacionário, baseado na eq. (11). O resultado é mostrado na Figura 17, onde é atribuído o valor  $ISS = 1$  quando processo é considerado em estado estacionário.



De acordo com os critérios considerados, é possível ver que o processo encontra-se em estado estacionário em poucos instantes, ou seja, levando a crer que o processo é muito instável e/ou os instrumentos apresentam muito ruído. A partir dos resultados mostrados na figura acima, foi escolhido o intervalo de tempo no qual o processo permaneceu mais tempo como estacionário, indicado pela seta na figura (Ponto #1).

Mantendo os parâmetros da metodologia, o mesmo procedimento foi aplicado para outros conjuntos de dados disponíveis e foram escolhidos mais dois pontos para ser implementado o ciclo de RTO, conforme indicado nas Figuras 18 e 19 e identificados como Ponto #2 e #3, respectivamente. Para a continuidade do ciclo, foram calculadas as médias dos dados em cada um desses intervalos de tempo e os resultados dessa aplicação serão apresentados a seguir.

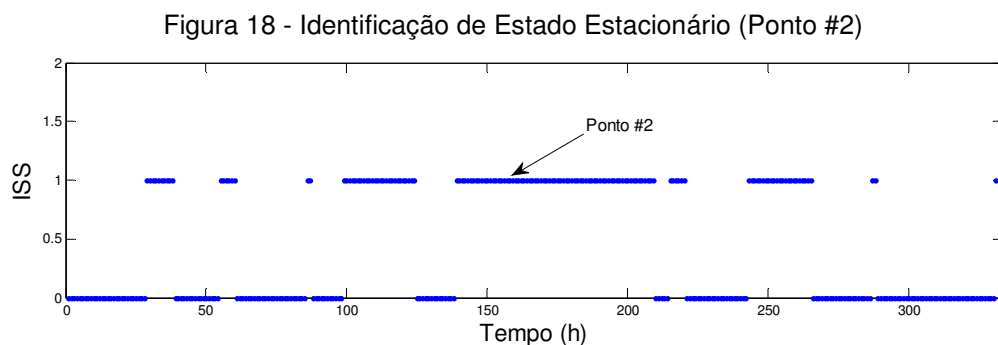
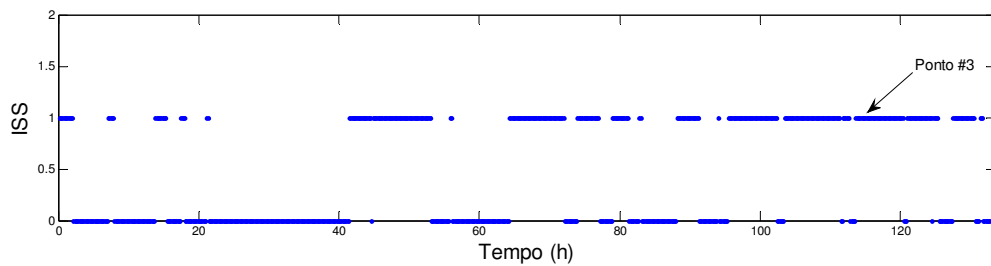


Figura 19 - Identificação de Estado Estacionário (Ponto #3)



## 5.2. APLICAÇÃO DO CICLO DO RTO

Os três pontos identificados no item anterior foram utilizados para a otimização econômica de acordo com as considerações feitas no Capítulo 4. A Tabela 7 resume os valores das variáveis após cada etapa do ciclo.

Tabela 7 - Resultados após Reconciliação e Otimização

	Descrição	Unidade	Média	Desvio Padrão	Resultados após estimação e reconciliação	Desvio %	Resultados após otimização	Desvio %
PONTO #1	Vazão de Entrada	massa/tempo	10,90	0,02	10,90	-0,06%	10,90	-
	Propileno na Entrada	%-mol	75,07	0,09	75,09	0,02%	75,09	-
	Temperatura do Produto de Topo	°C	29,51	0,02	28,63	-3,00%	28,63	0,02%
	Vazão do Produto de Topo	massa/tempo	7,63	0,06	7,64	0,08%	8,04	5,26%
	Concentração de Propano no Topo	ppm	2625,07	781,43	3101,29	18,14%	4500	45,10%
	Temperatura do Produto de Fundo	°C	30,29	0,01	29,79	-1,64%	30,92	3,79%
	Vazão do Produto de Fundo	massa/tempo	3,36	0,06	3,26	-2,88%	2,86	-12,33%
	Concentração de Propeno no Fundo	%-mol	16,01	0,02	15,07	-5,87%	3,03	-79,92%
	Vazão de Refluxo	massa/tempo	96,66	0,11	96,65	-0,01%	107,86	11,60%
	Razão de Refluxo	-	12,67	1,91	12,65	-0,09%	13,42	6,03%
	Vazão do Compressor	massa/tempo	105,90	0,10	105,01	-0,85%	117,95	12,33%
	Potência do Compressor	MW	N/D	N/D	3,33	-	3,43	2,99%
	Vazão de Propeno no Resfriador	massa/tempo	12,31	0,07	11,61	-5,72%	11,92	2,70%
	Vazão de Propeno no Refervedor	massa/tempo	93,59	0,03	93,39	-0,21%	106,02	13,52%
PONTO #2	Vazão de Entrada	massa/tempo	9,42	0,32	9,48	0,64%	9,48	-
	Propileno na Entrada	%-mol	76,08	2,91	75,12	-1,26%	75,12	-
	Temperatura do Produto de Topo	°C	27,94	0,88	28,04	0,36%	28,04	0,02%
	Vazão do Produto de Topo	massa/tempo	5,94	1,04	6,14	3,25%	7,04	14,70%
	Concentração de Propano no Topo	ppm	2862,77	0,19	2545,93	-11,07%	4500	76,75%
	Temperatura do Produto de Fundo	°C	28,57	0,92	28,61	0,14%	31,24	9,19%
	Vazão do Produto de Fundo	massa/tempo	3,48	0,95	3,34	-3,92%	2,44	-27,01%
	Concentração de Propeno no Fundo	%-mol	28,81	9,31	28,32	-1,67%	1,22	-95,68%
	Vazão de Refluxo	massa/tempo	93,06	1,14	92,29	-0,82%	107,95	16,96%
	Razão de Refluxo	-	15,66	1,10	15,04	-3,95%	15,33	1,97%
	Vazão do Compressor	massa/tempo	100,58	6,53	98,75	-1,82%	117,95	19,45%
	Potência do Compressor	MW	N/D	N/D	3,36	-	3,80	13,15%
	Vazão de Propeno no Resfriador	massa/tempo	11,65	0,47	10,34	-11,24%	11,48	11,00%
	Vazão de Propeno no Refervedor	massa/tempo	88,93	6,06	88,93	-0,59%	88,93	20,44%
PONTO #3	Vazão de Entrada	massa/tempo	7,25	0,12	7,12	-1,87%	7,12	-
	Propileno na Entrada	%-mol	77,89	0,13	77,76	-0,17%	77,76	-
	Temperatura do Produto de Topo	°C	30,36	0,06	30,71	1,14%	30,85	0,47%
	Vazão do Produto de Topo	massa/tempo	5,59	0,18	5,42	-3,22%	5,49	1,43%
	Concentração de Propano no Topo	ppm	298,21	29,48	182,59	-63,32%	4500	2364,50%
	Temperatura do Produto de Fundo	°C	30,81	0,22	30,99	0,58%	31,31	1,04%
	Vazão do Produto de Fundo	massa/tempo	1,71	0,19	1,70	-0,22%	1,62	-4,55%
	Concentração de Propeno no Fundo	%-mol	3,78	0,46	3,78	0,00%	0,50	-86,78%
	Vazão de Refluxo	massa/tempo	92,50	0,28	92,46	-0,05%	64,93	-29,78%
	Razão de Refluxo	-	16,55	1,60	17,07	3,08%	11,82	-30,77%
	Vazão do Compressor	massa/tempo	99,26	0,31	97,88	-1,41%	70,42	-28,05%
	Potência do Compressor	MW	N/D	N/D	3,31	-	2,99	-9,41%
	Vazão de Propeno no Resfriador	massa/tempo	10,75	0,18	9,80	-9,65%	8,83	-9,91%
	Vazão de Propeno no Refervedor	massa/tempo	88,52	0,12	88,08	-0,50%	61,59	-30,07%

A partir dos resultados mostrados acima, pode-se ver que após a etapa de reconciliação e estimação, os maiores desvios do modelo com relação aos valores medidos da planta foram nas composições de propano na corrente de topo. Embora esses desvios sejam altos em porcentagem, em valores absolutos essas diferenças podem ser consideradas aceitáveis por se tratarem de ppm e, além disso, os valores encontrados ainda permanecem dentro do limite de 4500 ppm.

Com relação aos resultados da otimização, sempre 2 das restrições impostas foram atingidas. Pode-se ver que nos três casos foi atingida a restrição de 4500 ppm na corrente de destilado, fazendo com que seja priorizada a produção da propileno com o máximo de contaminantes permitidos. Já para a outra restrição atingida, para os pontos #1 e #2 o ótimo foi limitado pela vazão máxima do Compressor, enquanto que para o ponto #3, o ótimo limitou-se pela restrição de composição mínima de propileno imposta para o produto de fundo. Foi necessária a inclusão desta restrição artificial na corrente de fundo, pois, para vazões baixas, como a do Ponto #3, o sistema não encontrava solução. Assim, pode-se perceber que para vazões elevadas o ótimo é restringido pela capacidade do Compressor.

Nos trabalhos de White (1998) e Darby et al. (2011) é ressaltada a importância de comparar os benefícios do RTO com aqueles que podem ser atingidos apenas com o MPC. Devido à integração energética do processo VRD, o custo das utilidades, que representa cerca de 2% do custo total da unidade, torna-se insignificante em relação ao lucro total, como pode ser visto na Tabela 8. Dessa forma, para baixas vazões vemos que o ótimo é limitado pelas restrições de composição dos produtos e para altas vazões, é limitado pela composição do topo e pela vazão do compressor. Dessa forma, já que as restrições sempre são atingidas, leva-se a pensar que o ótimo poderia ser obtido apenas pelo uso do MPC, sem o uso do RTO. Embora um controle de ambas as composições não seja de simples implementação (Jogwar e Daoutidis, 2009), é uma alternativa de controle a ser levada em consideração. Entretanto, como essa análise não faz parte do escopo deste trabalho é sugerida como trabalho futuro.

Com o objetivo de calcular o ganho econômico possível de ser alcançado com a implementação do RTO nesses pontos, foi calculado o lucro e o ganho econômico para cada um deles. A Tabela 8 apresenta esses resultados.



Tabela 8 - Ganho Econômico

	Item	Unidade	Após estimação e reconciliação	Após otimização	Varição
PONTO #1	Lucro Total	unidade monetária / tempo	12382,38	13410,18	8,3%
	Custo da Carga		16874,79	16874,79	0,0%
	Lucro do Propeno		26618,72	28019,49	5,3%
	Lucro do Propano		2908,69	2550,04	-12,3%
	Custo do Compressor		259,03	266,77	3,0%
	Custo da A.R.		11,28	17,72	57,1%
PONTO #2	Lucro Total	unidade monetária / tempo	9422,33	11711,87	24,3%
	Custo da Carga		14677,28	14677,28	0,0%
	Lucro do Propeno		21388,79	24533,92	14,7%
	Lucro do Propano		2981,51	2176,14	-27,0%
	Custo do Compressor		261,42	295,81	13,2%
	Custo da A.R.		9,25	25,09	171,1%
PONTO #3	Lucro Total	unidade monetária / tempo	9104,64	9334,36	2,5%
	Custo da Carga		11020,56	11020,56	0,0%
	Lucro do Propeno		18871,82	19141,92	1,4%
	Lucro do Propano		1518,65	1449,49	-4,6%
	Custo do Compressor		257,04	232,86	-9,4%
	Custo da A.R.		8,26	3,65	-55,8%

A partir dos resultados apresentados acima, é possível ver que todos os casos apresentaram um comportamento semelhante com relação aos lucros: diminuição do lucro correspondente ao produto de fundo (Propano); aumento no lucro do Propileno; e aumento do lucro total, conforme esperado. Com relação às utilidades, houve aumento dos custos para os Pontos #1 e #2 e uma diminuição para o Ponto #3.

Esse aumento no custo das utilidades pode ser justificado pela grande diferença entre esses custos com relação ao preço dos produtos, já que é mais vantajoso gastar mais recursos do compressor e do resfriador visando a uma melhor separação dos produtos. Com relação ao Ponto #3, a diminuição no consumo pode ser justificado pelo fato de o produto que estava sendo gerado pela planta estar muito mais puro do que o exigido, consumindo assim mais utilidades do que o necessário para respeitar o limite máximo de contaminantes no propileno.

Os ganhos econômicos encontrados estão consistentes com os valores reportados na literatura, variando de 2,5 a 24% para os casos estudados. Isso demonstra o

potencial benefício que pode ser atingido quando implementado um sistema de Otimização em Tempo Real. O ganho econômico do ponto #2 representa um ganho de cerca de 18 milhões de dólares por ano. O ganho econômico do ponto #3 foi menor em comparação aos demais principalmente porque os outros dois tinham uma grande quantidade de propileno saindo pelo produto de fundo, e após a otimização, a concentração de propileno no fundo diminuiu consideravelmente.

### 5.3. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

#### 5.3.1. Custos e Preços de Venda

Para verificar a influência dos preços de venda e dos custos das utilidades na otimização, foi realizada uma análise de sensibilidade variando esses itens, tomando como ponto de partida o Ponto #1 (Caso 1 na Tabela 9). A Tabela 9 considera apenas as variações nos preços de venda dos produtos.

Tabela 9 - Variação dos Preços dos Produtos

Item	Unidade	CASO 1	CASO 2	CASO 3	CASO 4	CASO 5
Custo Carga	Unidade monetária/massa	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)
Preço Propileno	Unidade monetária/massa	894 (100%)	447 (50%)	894 (100%)	447 (50%)	894 (100%)
Preço Propano	Unidade monetária/massa	229 (100%)	229 (100%)	458 (200%)	458 (200%)	894 (390%)
Vazão no Topo	massa/tempo	31.4	31.4	31.4	28.5	28.5
Propano no Topo	ppm	4500	4500	4500	4500	4500
Vazão no Fundo	massa/tempo	11.1	11.1	11.1	14.0	14.0
Propileno no Fundo	% (mol)	3.0	3.0	3.0	23.2	23.2
Vazão no Compressor	massa/tempo	460.0	460.0	460.0	362.6	362.6
Lucro	Unidade monetária/tempo	13410	-600	15960	2007	20845

A partir dos dados acima, pode-se ver que mesmo diminuindo o preço de venda do Propileno ou aumentando o preço de venda do Propano, enquanto o produto de topo tiver um preço maior, a otimização vai levar o processo para o mesmo ponto operacional. O ponto de operação somente se altera quando os produtos tiverem preços de venda iguais (Caso 5) ou caso o Propano tenha um valor superior ao Propileno (Caso 4). Observa-se também que a planta teria prejuízo se o preço do Propileno fosse reduzido pela metade (Caso 2).

Além disso, foram feitas variações nos custos das utilidades, indicados na Tabela 10.

Tabela 10 - Variação do Custo das Utilidades

Item	Unidade	CASO 1	CASO 6	CASO 7	CASO 8	CASO 9
Custo Carga	Unidade monetária/massa	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)	397 (100%)
Custo Energia	Unidade monetária/MWh	20 (100%)	600 (3000%)	1000 (5000%)	20 (100%)	20 (100%)
Custo AR	Unidade monetária/massa	0.013 (100%)	0.013 (100%)	0.013 (100%)	0.65 (5000%)	1.3 (10000%)
Vazão no Topo	massa/tempo	31.4	31.3	31.1	31.2	31.0
Propano no Topo	ppm	4500	4500	4500	4500	4500
Vazão no Fundo	massa/tempo	11.1	11.2	11.4	11.3	11.5
Propileno no Fundo	% (mol)	3.0	3.6	5.0	4.5	6.1
Vazão no Compressor	massa/tempo	460.0	449.3	431.6	436.8	422.4
Lucro	Unidade monetária/tempo	13410	5680	404	12615	11957

A partir dos resultados mostrados na Tabela 10, para que o resultado da otimização seja um ponto operacional diferente do inicial (Caso 1), os custos das utilidades teriam que ser multiplicados por fatores altos, como no Caso 6 em que foi considerado um custo de energia elétrica 30 vezes maior do que o considerado.

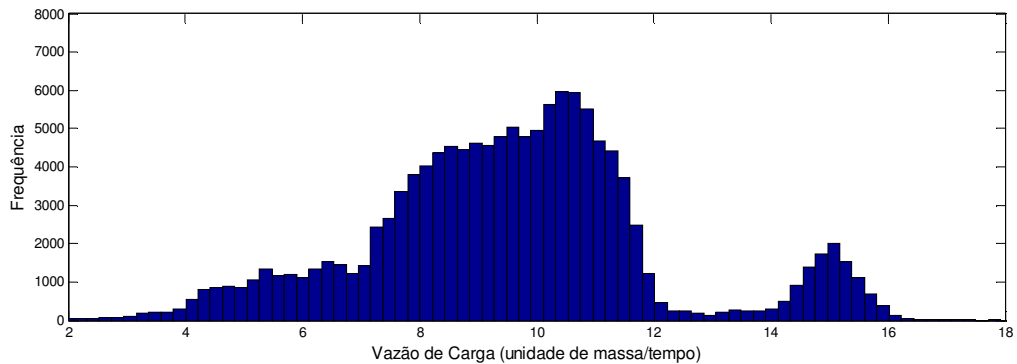
Sabe-se que as extrapolações nos valores feitas acima estão longe da realidade e servem apenas para mostrar os resultados que seriam obtidos caso o custo da energia elétrica fosse maior, fazendo com que a restrição de máxima vazão do compressor não seja atingida.

Para todos os casos mostrados, a restrição de máximo de contaminantes na corrente de topo (4500 ppm) continua sendo atingida, entretanto, não há outra restrição ativa nesses casos extrapolados, já que a capacidade do compressor não é mais a máxima nesses pontos. Esses resultados são coerentes considerando que trata-se de um problema de otimização não linear, no qual o ótimo pode não estar nos limites da região viável.

### 5.3.2. Vazão de Carga

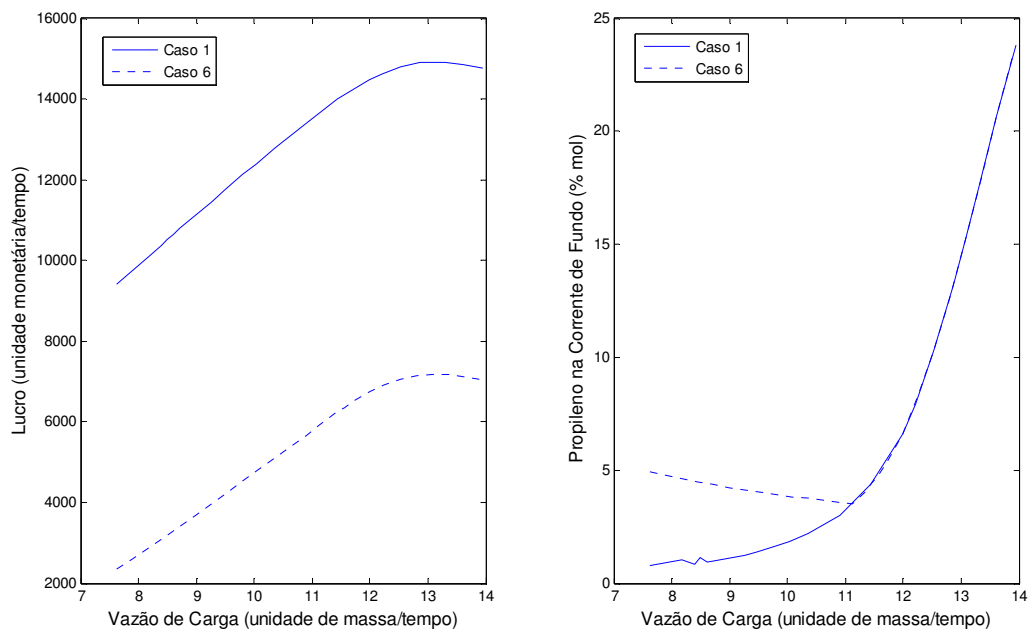
Para poder realizar uma análise de sensibilidade em relação à vazão de carga, primeiramente foram verificados os dados históricos da unidade. A Figura 20 mostra o perfil de distribuição da vazão de carga da unidade ao longo de três anos. É importante verificar que o processo opera em um grande intervalo de vazão, mas 76% do tempo a vazão ficou entre 7 e 12 unidade de massa/tempo.

Figura 20 - Histograma da Vazão de Carga



Assim, foram feitas variações a partir dos casos 1 e 6 do item anterior para calcular os lucros que seriam obtidos e os resultados estão indicados na Figura 21.

Figura 21 – Variação do Lucro pela Vazão de Carga



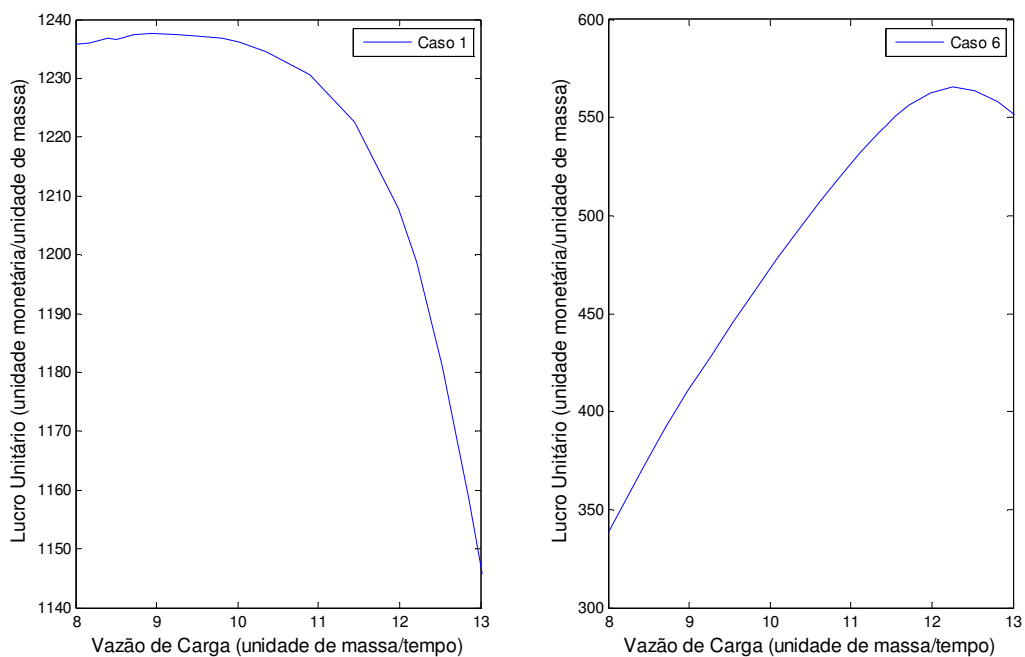
Percebe-se que, para ambos os casos, o lucro é máximo para uma vazão de 13,1 unidade de massa/tempo. Para vazões de carga maiores do que 13,1, o lucro começa a diminuir pelo fato do produto de fundo ter um valor de venda menor do que o custo da corrente de carga da planta. Dessa forma, como a capacidade máxima do compressor já foi atingida, aumenta-se cada vez mais a perda de propileno pelo produto de fundo. Entretanto, observando a Figura 20, nota-se que o processo opera em pouco período de tempo na vazão de 13,1, que apresenta o maior lucro pelo modelo proposto.

Além disso, verifica-se que o comportamento da composição da corrente de fundo é diferente para cada um dos casos enquanto a capacidade máxima do compressor não é atingida (vazão 11,2 unidade de massa/tempo).

Com isso, para uma determinada característica da carga, mostra-se que existe um valor ótimo de vazão de carga que maximiza o lucro da planta, levando em conta as restrições de operação do processo.

Entretanto, quando observado o lucro obtido por unidade de massa de carga da planta (Lucro Unitário), vê-se que o máximo encontra-se em uma vazão menor daquela mostrada na Figura 20. O lucro unitário é máximo, para cada caso, em 9,0 e 12,2 unidade de massa/tempo, conforme indicado abaixo (Figura 21).

Figura 22 – Variação do Lucro Unitário pela Vazão de Carga



## 6 CONCLUSÕES

No desenvolvimento deste trabalho, foi possível, a partir de dados reais disponíveis da planta, aplicar e comparar dois métodos de detecção de estado estacionário. Embora os dados da planta sejam muito instáveis, dificultando a existência desses pontos, os métodos mostraram-se capazes de identificar os estados estacionários, desde que adequadamente sintonizados. Para essa identificação foram consideradas as principais vazões e composições do processo. A principal dificuldade nas aplicações foi o ajuste dos parâmetros de filtragem do método, pois é necessário conhecer um intervalo que esteja em estado estacionário para uma melhor sintonia dos filtros.

Os métodos tiveram resultados consistentes e foi escolhido o método baseado no Teste Estatístico F, proposto por Cao e Rhinehart (1995), para a aplicação do ciclo RTO. Esse método foi utilizado para identificar pontos estacionários nos dados de processo disponíveis.

A partir desses pontos encontrados, foi aplicado o ciclo de RTO utilizando o método de Discriminação Rotacional para a estimação de parâmetros e reconciliação de dados e o método de Nelder-Mead para a otimização econômica do sistema. Os possíveis ganhos econômicos encontrados pela aplicação do RTO mostram que os valores estão consistentes com a literatura, variando, para os pontos encontrados, entre 2,5 e 24%, o que representa um ganho de até 18 milhões de dólares por ano.

A partir dos pontos estacionários em que foram aplicados o ciclo de Otimização em Tempo Real, foi possível perceber que, para o processo estudado, a otimização sempre leva o processo para a restrição de máximo de contaminantes no produto de topo (4500 ppm). Além disso, para altas vazões, o processo é limitado pela capacidade do compressor.

Através da ferramenta desenvolvida, foi possível analisar o comportamento do processo a partir da variação da vazão de carga, dos preços de venda dos produtos e do custo das utilidades. Verificou-se que o processo atinge um lucro máximo devido à restrição de capacidade do compressor. Embora o preço de venda do Propileno seja quase o quádruplo do preço do Propano, verificou-se que o resultado da otimização só é alterado quando esses preços são iguais ou quando o preço

Propano supera o do Propileno. Constatou-se, ainda, que no caso de um maior custo de energia elétrica, a restrição de máxima capacidade de vazão do compressor deixaria de ser ativa.

Entretanto, considerando as condições originais de preço de venda dos produtos e custo das utilidades, sempre são atingidas duas restrições do sistema. Com base em outros trabalhos que questionam os benefícios do RTO em relação ao MPC, isso leva a indagar quais seriam os reais ganhos da implementação do RTO para esse processo específico de produção de propeno, já que talvez o controlador poderia levar a unidade para o ótimo sem o uso do otimizador. Por não se tratar do escopo desse trabalho, essa análise é sugerida para um trabalho futuro.

Além disso, para trabalhos futuros, sugere-se realizar a implementação de uma análise *online* do comportamento dos métodos de detecção de estado estacionário para avaliar o processo em tempo real. Com relação ao ciclo RTO, embora o modelo do processo seja fiel à planta, é necessário um melhor desenvolvimento relacionado ao valor de inicialização utilizado por ele para a solução do modelo em estado estacionário.

Por fim, como observado nas Figuras 20 e 21, a coluna de fracionamento de propano-propileno opera em poucos períodos com a vazão que geraria o maior lucro. Considerando que a carga dessa coluna é a saída de outra coluna de destilação, a otimização das três torres simultaneamente deveria ser considerada para uma melhor análise da vazão ótima de toda a unidade.

## REFERÊNCIAS

- ACEVEDO, A. M. **Avaliação de técnicas de decomposição para a otimização em tempo real de uma unidade de produção de propeno**. 2015. 111 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2015.
- ARORA, N.; BIEGLER, L. T. Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation. **Computers and Chemical Engineering**, v. 25, n. 11-12, p. 1585–1599, 2001.
- BASAK, K. et al. On-Line Optimization of a Crude Distillation Unit with Constraints on Product Properties. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 41, n. 6, p. 1557–1568, mar. 2002.
- BHAT, S. A.; SARAF, D. N. Steady-State Identification, Gross Error Detection, and Data Reconciliation for Industrial Process Units. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 43, n. 15, p. 4323–4336, 2004.
- 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, 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, 1995.
- CHACHUAT, B.; SRINIVASAN, B.; BONVIN, D. Model parameterization tailored to real-time optimization. In: **18th European Symposium on Computer Aided Process Engineering**, v. 25, p. 1-13, 2008.
- CHACHUAT, B.; SRINIVASAN, B.; BONVIN, D. Adaptation strategies for real-time optimization. **Computers and Chemical Engineering**, v.33, n.10, p.1557–1567, 2009.
- CHAUDHARY, M. N. R. **Real Time Optimization of Chemical Processes**. 2009. 125 p. Dissertação (Mestrado) - Curtin University of Technology, Perth, 2009.
- CHEN, C. Y.; JOSEPH, B. On-line optimization using a two-phase approach: an application study. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 26, n. 9, p. 1924–1930, 1987.
- CROWE, C. M. Data reconciliation — Progress and challenges. **Journal of Process Control**, v. 6, n. 2-3, p. 89–98, 1996.
- CUTLER, C. R.; PERRY, R. T. Real time optimization with multivariable control is required to maximize profits. **Computers & Chemical Engineering**, v. 7, n. 5, p. 663–667, 1983.
- DANG, P. X.; BANJERDPONGCHAI, D. Design of integrated real-time optimization and model predictive control for distillation column. **8th Asian Control Conference (ASCC)**, n. 1, p. 988–993, 2011.
- DARBY, M. L. et al. RTO: An overview and assessment of current practice. **Journal of Process Control**, v. 21, n. 6, p. 874–884, 2011.
- DURAIKI, R. G. **Otimização Dinâmica em Tempo Real Utilizando Modelos Não-Lineares Simplificados**. 2009. 135 p. Tese (Doutorado) - Escola de



Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul, 2009.

EDGAR, T. F.; HIMMELBLAU, D. M.; LASDON, L. S. **Optimization of Chemical Process**, 2nd Edition, McGraw-Hill, 2001.

FARISS, R. H.; LAW, V. H. An efficient computational technique for generalized application of maximum likelihood to improve correlation of experimental data. **Computers & Chemical Engineering**, v. 3, n. 1-4, p. 95–104, 1979.

FRIEDMAN, Y. Z. Closed-loop optimization update - a step closer to fulfilling the dream. **Hydrocarbon Processing**, v. 79, n. 1, p. 15–16, 2000.

FUCHS, S. **Desenvolvimento de uma estratégia de controle para colunas de separação propeno-propano**. 2010. 41 p. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul, 2010.

GAO, W.; WENZEL, S.; ENGELL, S. Comparison of Modifier Adaptation Schemes in Real-Time Optimization. **9th IFAC Symposium on Advanced Control of Chemical Processes**, v. 48, n. 8, p. 182–187, 2015.

GARCIA, L. M. P. **Metodologias De Análise De Dados Para Um Sistema De Otimização Em Tempo Real**. 2013. 100 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2013.

GRACIANO, J. E.; MENDOZA, D. F.; LE ROUX, G. A C. Performance comparison of parameter estimation techniques for unidentifiable models. **Computers and Chemical Engineering**, v. 64, p. 24–40, 2014.

HELGESON, N. L.; SAGE, B. H. Latent heat of vaporization of propane. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 12, n. 1, p. 47–49, 14 jan. 1967.

HINOJOSA, A. I.; ODLOAK, D. Using Dynsim® to Study the Implementation of Advanced Control in a Propylene/Propane Splitter. 10th IFAC International Symposium on Dynamics and Control of Process Systems. **Anais...** Mumbai, India. p. 33-38. 2013.

JESUS, N. J. C. DE. **Modelagem e controle de uma superfracionadora industrial de propeno**. 2000. 231 p. Dissertação (Mestrado) - Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2000.

JESUS, N. J. C. DE. **Otimização em Tempo Real em um Processo Industrial de Produção de Etileno**. 2011. 202 p. Tese (Doutorado) - COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.

JIANG, T. et al. Application of steady-state detection method based on wavelet transform. **Computers & Chemical Engineering**, v. 27, n. 4, p. 569–578, 2003.

JIANG, X.; LIU, P.; LI, Z. Data Reconciliation and Gross Error Detection for Operational Data in Power Plants. **Energy**, v. 75, p. 1–10, 2014.

JOGWAR, S. S.; DAOUTIDIS, P. Vapor recompression distillation: Multi-scale dynamics and control. **Proceedings of the American Control Conference**, p. 647–652, 2009.

LARSSON, C. A. et al. Experimental evaluation of model predictive control with excitation (MPC-X) on an industrial depropanizer. **Journal of Process Control**, v. 31, p. 1–16, 2015.

- LI, X. **Refinery-Wide Optimization**. 2000. 229 p. Tese (Doutorado) - Graduate Faculty, Texas Tech University, 2000.
- LIPORACE, F. S. et al. PETROBRAS Experience Implementing Real Time Optimization. In: **10th International Symposium on Process Systems Engineering: Part A**. v. 27, p. 1245–1250, 2009.
- LOPES, M. S. **Estudo de Caso de uma Coluna Depropanizadora**. 2011. 46 p. Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul, 2011.
- MARLIN, T. E.; HRYMAK, A. N. Real-Time Operation Optimization of Continuous Processes. **Fifth International Conference on Chemical Process Control**, p. 156-164. 1997.
- MAUHAR, S. M.; BARJAKTAROVIC, B. G.; SOVILJ, M. N. Optimization of Propylene — Propane Distillation Process. **Chem. Pap**, v. 58, n. 6, p. 386–390, 2004.
- MENDOZA, D. F. et al. Real-time optimization of an industrial-scale vapor recompression distillation process. Model validation and analysis. **Industrial and Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 16, p. 5735–5746, 2013.
- MERCANGÖZ, M.; DOYLE, F. J. Real-time optimization of the pulp mill benchmark problem. **Computers and Chemical Engineering**, v. 32, n. 4-5, p. 789–804, 2008.
- MILETIC, I. P.; MARLIN, T. E. On-line Statistical Results Analysis in Real-Time Operations Optimization. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 37, n. 9, p. 3670–3684, 1998.
- NAYSMITH, M. R.; DOUGLAS, P. L. Review of Real Time Optimization in the Chemical Process Industries. **Developments in Chemical Engineering and Mineral Processing**, p. 67–87, 1995.
- OLUJIĆ, Ž. et al. Conceptual design of an internally heat integrated propylene-propane splitter. **Energy**, v. 31, n. 15, p. 3083–3096, 2006.
- PLÁCIDO, J.; LOUREIRO, L. V. Industrial application of data reconciliation. **Computers & Chemical Engineering**, v. 22, n. 2, p. S1035–S1038, 1998.
- POWELL, T. M.; GIAUQUE, W. F. Propylene. The Heat Capacity, Vapor Pressure, Heats of Fusion and Vaporization. The Third Law of Thermodynamics and Orientation Equilibrium in the Solid. **J. Am. Chem. Soc.**, v. 61, n. 9, p. 2366–2370, 1939.
- QUELHAS, A. D. **Análise Teórica e Prática de Implementações de Sistemas de Otimização em Tempo Real (RTO)**. 2013. 265 p. Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2013.
- RANADE, S.; CHAO, Y. Industrial heat pumps: where and when. **Eleventh National Industrial Energy Technology Conference**, p. 10–14, 1989.
- REN, T. Barriers and drivers for process innovation in the petrochemical industry: A case study. **Journal of Engineering and Technology Management**, v. 26, n. 4, p. 285–304, 2009.
- RHINEHART, R. R. Automated Steady and Transient State Identification in Noisy Processes. **American Control Conference**, p. 4477–4493, 2013.

- RIGGS, J. B. Improve distillation column control. **Chemical Engineering Progress**, v. 94, n. 10, p. 31–47, 1998.
- RINCÓN, F.; ROUX, G.; LIMA, F. A Novel ARX-Based Approach for the Steady-State Identification Analysis of Industrial Depropanizer Column Datasets. **Processes**, v. 3, n. 2, p. 257–285, 22 abr. 2015.
- SAHINIDIS, N. V. Optimization under uncertainty: State-of-the-art and opportunities. **Computers and Chemical Engineering**, v. 28, n. 6-7, p. 971–983, 2004.
- SHOKRI, S. et al. Real Time Optimization As a Tool for Increasing Petroleum Refineries Profits. **Petroleum & Coal**, v. 51, n. 2, p. 110–114, 2009.
- SINGH, A. et al. Model-based real-time optimization of automotive gasoline blending operations. **Journal of Process Control**, v. 10, n. 1, p. 43–58, 2000.
- SKOGESTAD, S. Dynamics and Control of Distillation Columns: A Tutorial Introduction. **Distillation**, v. 75. n. 6, p. 539 - 562, 1997.
- SKOGESTAD, S. Self-optimizing control: the missing link between steady-state optimization and control. **Computers & Chemical Engineering**, v. 24, n. 2-7, p. 569–575, 2000.
- SOARES, R. P.; SECCHI, A R. EMSO: A new environment for modelling, simulation and optimization. **Comp. Aid. Chem. Eng.**, v. 14, n. C, p. 947–952, 2003.
- VANBRUGGHE, C. et al. Real-Time Optimization of a Bleach Plant Using an Imc-Based Optimization Algorithm. Control Systems Conference. **Anais...Quebec**, 2004
- WHITE, D. C. Online optimization: What, where and estimating ROI. **Hydrocarbon Processing**, v. 76, n. 6, p. 43–51, 1997.
- WHITE, D. C. Online optimization: What have we learned? **Hydrocarbon Processing**, v. 77, n. 6, p. 55–59, 1998.
- YIP, W. S.; MARLIN, T. E. Designing plant experiments for real-time optimization systems. **Control Engineering Practice**, v. 11, n. 8, p. 837–845, 2003.
- YOUNG, R. E. Petroleum Refining Process Control and Real-Time Optimization. **IEEE Control Systems Magazine**, v. II, n. December, p. 73–83, 2006.
- ZHANG, Y.; FORBES, J. F. Performance Analysis of Perturbation-Based Methods for Real-Time Optimization. **The Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 84, n. 2, p. 209–218, 2008.
- ZHANG, Y.; MONDER, D.; FORBES, J. F. Real-time optimization under parametric uncertainty: A probability constrained approach. **Journal of Process Control**, v. 12, n. 3, p. 373–389, 2002.
- ZHANG, Y.; NADLER, D.; FORBES, J. F. Results analysis for trust constrained real-time optimization. **Journal of Process Control**, v. 11, n. 3, p. 329–341, 2001.
- ZHANG, Z.; PIKE, R. W.; HERTWIG, T. A. An approach to on-line optimization of chemical plants. **Computers & Chemical Engineering**, v. 19, n. 1994, p. 305–310, jun. 1995.
- ZHIJIANG, S.; JINLIN, W.; JIXIN, Q. Real-time Optimization of Acetaldehyde Production Process. **Develop. in Chem. Eng. Min. Proc.**, v.13, n.3-4, p.249, 2008.

## APÊNDICE A: Relação de Variáveis de Processo Medidas

A Tabela 11 mostra as variáveis medidas no processo de separação de propileno-propano estudado.

Tabela 11 - Relação de Variáveis de Processo Medidas		
TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE
AI97003A	ANALISADOR PROPENO ENTRADA T-9703	% mol
AI97003B	ANALISADOR PROPANO ENTRADA T-9703	% mol
AIC97003	ANALISADOR ETANO ENTRADA T-9703	ppm (massa)
AIC97005	ANALISADOR PROPANO TOPO T-9703	ppm (massa)
AIC97006	ANALISADOR PROPENO FUNDO T-9703	% mol
FFIC97106	PROPENO DO P-9706A/B	t/h
FIC97012	VAZÃO DE CARGA PARA T-9703	t/h
FIC97012	VAZÃO DE CARGA PARA T-9703	kmol/h
FIC97107	VAZÃO DE PROPENO DO P-9707A/B	t/h
FIC97108	VAZÃO DE REFLUXO T-9703	t/h
FIC97109	VAZÃO DE PROPENO PARA LIMITE DE BATERIA	t/h
FIC97110	VAZÃO DE PROPANO PARA LIMITE DE BATERIA	t/h
LIC97111	NIVEL PROPENO V-9709	%
LIC97115	NIVEL P-9707A/B	%
PI97201	PRESSÃO DE ENTRADA T-9703	kgf/cm <sup>2</sup> g
PI97214	PRESSÃO DE DESCARGA B-9708A/B	kgf/cm <sup>2</sup> g
PI97306	PRESSÃO DE SAÍDA DO PROPENO DO P-9706A/B	kgf/cm <sup>2</sup> g
PI97510	PRESSAO NO FUNDO T-9703	kgf/cm <sup>2</sup> g
PIC97206	PRESSAO NO TOPO T-9703	kgf/cm <sup>2</sup> g
PIC97208	PRESSÃO DE DESCARGA C-9701 PARA TOCHA	kgf/cm <sup>2</sup> g
PIC97212	PRESSÃO V-9709	kgf/cm <sup>2</sup> g
PIC97213	ALIVIO V-9709	kgf/cm <sup>2</sup> g
TI97035	TEMP. DE CARGA PARA T-9703	°C
TI97105	TEMP. TOPO T-9703	°C
TI97108	TEMP. SAÍDA DO P-9706A/B	°C
TI97112	TEMP. SUCÇÃO B-9708 A/B	°C
TI97114	TEMP. PRATO # 17 T-9703	°C
TI97115	TEMP. PRATO # 35 T-9703	°C
TI97116	TEMP. PRATO # 51 T-9703	°C
TI97117	TEMP. PRATO # 69 T-9703	°C
TI97118	TEMP. PRATO # 85 T-9703	°C
TI97119	TEMP. PRATO # 103 T-9703	°C
TI97120	TEMP. PRATO # 119 T-9703	°C
TI97121	TEMP. PRATO # 137 T-9703	°C
TI97122	TEMP. PRATO # 153 T-9703	°C
TI97123	TEMP. PRATO # 171 T-9703	°C
TI97125	TEMP. DE RETORNO P-9706A	°C
TI97126	TEMP. DE RETORNO P-9706B	°C
TI97127	TEMP. DE SUCÇÃO B-9709 A/B	°C
TI97128	TEMP. DE SAÍDA P-9706A	°C
TI97129	TEMP. DE SAÍDA P-9706B	°C
TI97130	TEMP. DO PROPANO PARA LIMITE DE BATERIA	°C
TI97137	TEMP. DE SAÍDA PROPENO P-9707A/B	°C
TI97138	TEMP. DE RETORNO ÁGUA DE RESFRIAMENTO DO P-9706A/B	°C
TI97142	TEMP. ENTRADA DA ÁGUA DE RESFRIAMENTO PARA P-9706A/B	°C
TI97702	TEMP. DESC. C-9701	°C
TIC97106	TEMP. SUCÇÃO C-9701	°C

## APÊNDICE B: Pontos Experimentais de ELV Propano-Propileno

A Tabela 12 mostra os dados do equilíbrio líquido-vapor para o Propano-Propileno, utilizados na estimação de parâmetros do modelo caixa preta descrito no item 4.1.1.

Tabela 12 - Relação de Variáveis de Processo Medidas

	Temperatura (°C)	Pressão (bar)	Fração molar do Propano no Líquido	Fração molar do Propano no Vapor
Conjunto de dados 1	30,0	13,08	0,000	0,000
	30,0	12,93	0,095	0,088
	30,0	12,82	0,162	0,147
	30,0	12,68	0,235	0,215
	30,0	12,50	0,319	0,292
	30,0	12,29	0,413	0,378
	30,0	12,12	0,489	0,450
	30,0	11,92	0,568	0,528
	30,0	11,74	0,642	0,604
	30,0	11,54	0,717	0,682
	30,0	11,42	0,768	0,734
	30,0	11,25	0,831	0,802
	30,0	11,07	0,896	0,876
	30,0	10,89	0,963	0,955
	30,0	10,78	1,000	1,000
Conjunto de dados 2	26,8	12,11	0,000	0,000
	26,8	11,95	0,100	0,090
	26,8	11,78	0,200	0,181
	26,8	11,60	0,300	0,273
	26,8	11,40	0,400	0,367
	26,8	11,19	0,500	0,463
	26,8	10,98	0,600	0,562
	26,8	10,75	0,700	0,664
	26,8	10,51	0,800	0,771
	26,8	10,26	0,900	0,883
26,8	9,99	1,000	1,000	
Conjunto de dados 3	20,0	10,19	0,000	0,000
	20,0	10,14	0,049	0,044
	20,0	10,08	0,098	0,089
	20,0	10,01	0,162	0,146
	20,0	9,91	0,228	0,208
	20,0	9,82	0,291	0,262
	20,0	9,73	0,342	0,312
	20,0	9,60	0,410	0,373
	20,0	9,47	0,482	0,446
	20,0	9,31	0,564	0,526
	20,0	9,13	0,650	0,612
	20,0	8,95	0,741	0,702
	20,0	8,76	0,833	0,802
	20,0	8,61	0,903	0,882
20,0	8,47	0,963	0,954	
20,0	8,36	1,000	1,000	
Conjunto de dados 4	16,8	9,39	0,000	0,000
	16,8	9,27	0,100	0,090
	16,8	9,14	0,200	0,180
	16,8	8,99	0,300	0,272
	16,8	8,84	0,400	0,365
	16,8	8,68	0,500	0,460
	16,8	8,50	0,600	0,559
	16,8	8,32	0,700	0,661
	16,8	8,12	0,800	0,768
	16,8	7,92	0,900	0,881
	16,8	7,70	1,000	1,000

## APÊNDICE C: Código para o Método de Cao e Rhinehart

O código abaixo se refere ao algoritmo implementado em MATLAB® para identificação de estado estacionário baseado no trabalho de Cao e Rhinehart (1995).

```

clc
clear all

% Abordagem dos dados
disp('Lendo dados ...');

data = dlmread('Dados/dados-j12-a12_min.txt','\t',[1 1 5000 7]);

% Selecao dos dados que serão considerados na análise
selecao = [1 2 3 5 7];
X = data(:,selecao);% Selecao dos dados

% Inicializacao
j = 0;
Xf=[];
vf=[];
df=[];
issteady = [];

% Parametros de filtro do metodo de Cao-Rhinehart
L1 = 0.700;
L2 = 0.050;
L3 = 0.006;

i=size(X,2);

% Metodo Cao-Rhinehart - Processamento dos dados.
disp('Processando dados ...');
for i = 1:size(X,2)
for j = 1:size(X,1)
if j == 1 % Se estivermos na primeira linha, o filtro nao se
aplica
Xf(1,i) = mean(X(1:10,i));
vf(1,i) = var(X(1:10,i));
df(1,i) = 2*var(X(1:10,i));
else % situacao padrao.
Xf(j,i) = L1.* X (j,i) + (1-L1).*Xf(j-1,i);
vf(j,i) = L2.*((X(j,i)-Xf(j-1,i)).^2 ) + (1-L2).*vf(j-1,i);
df(j,i) = L3.*((X(j,i)-X(j-1,i)).^2 ) + (1-L3).*df(j-1,i);
end

R(j,i) = (2-L1)*(vf(j,i)./df(j,i));
Rc=2; % Rcrit.
Rcrit = ones(size(R,1),1)*Rc;
issteady(j,i) = R(j,i)<Rcrit(j,1); % Verificacao R<Rcrit

end
end

ISS = (prod(issteady'))'; % Verificacao de SS para todas as variaveis

disp('Fim do programa ...');

```

## APÊNDICE D: Código para o Método *Wavelet*

O código abaixo se refere ao algoritmo implementado em MATLAB® para identificação de estado estacionário baseado no trabalho de Jiang et al. (2003).

```

clc
clear all
close all

load('compiled_data.mat');
X(:,1) = Data(:,17);%FIC97012 [t/h]
X(:,2) = Data(:,52);%FIC97109 [t/h]
X(:,3) = Data(:,38);%FIC97110 [t/h]
X(:,4) = Data(:,19);%AI97003A [%mol]
X(:,5) = Data(:,41);%AI97006 [%mol]
X(:,6) = Data(:,51);%AI97005 [ppm]

intervalo = [31000:32000];
dados=X(intervalo,:);
dataArray = dados;

% 1) Especificar lambda para cada variável
lambda = [1 1 1 1 1 1];

Target = size(dados,2);
for jj=1:Target;

% 2) Cálculo das derivadas primeira e segunda da série de dados
d1 = diff(dados(:,jj));
d2 = diff(d1);

% 3) Valor de corte da derivada primeira (desvio padrão)
Ts = std(d1);

% 4) Valor de corte da derivada segunda (mediana)
Tw = median(d2);

% 5) Valor de corte Tu
Tu = 3*lambda(jj)*Ts;

% 5) Cálculo de gama, theta, csi e Bi (para cada variável)
for ii = 1:length(d2)
    if abs(d2(ii)) <= Tw
        gama(ii,jj) = 0;
    elseif abs(d2(ii)) < 3*Tw & abs(d2(ii)) > Tw
        gama(ii,jj) = (abs(d2(ii)) - Tw)/(2*Tw);
    else
        gama(ii,jj) = 1;
    end
end

for ii = 1:length(d2)
    theta(ii,jj) = abs(d1(ii)) + gama(ii)*d2(ii);
    csi(ii,jj) = 1/2*(cos((theta(ii,1)-Ts)*(pi)/(Tu - Ts))+1);

```

```
for ii = 1:length(d2)
    theta(ii,jj) = abs(d1(ii)) + gama(ii)*d2(ii);
    csi(ii,jj) = 1/2*(cos((theta(ii,1)-Ts)*(pi)/(Tu - Ts))+1);

    if theta(ii,jj) >= Tu
        B(ii,jj) = 0;
    elseif theta(ii,jj) > Ts & theta(ii,jj) < Tu
        B(ii,jj) = csi(ii,jj);
    else
        B(ii,jj) = 1;
    end
end

end

Bm = prod(B.^(1/Target),2);
```