



## DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR VIRTUAL DE COMPOSIÇÃO EM COLUNA DE DESTILAÇÃO PARA APLICAÇÃO EM TEMPO REAL.

Eliza Hiromi Corrêa Ito

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi  
Marcos Vinícius de Carvalho  
Gomes

Rio de Janeiro  
Junho de 2014

DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR VIRTUAL DE COMPOSIÇÃO EM  
COLUNA DE DESTILAÇÃO PARA APLICAÇÃO EM TEMPO REAL.

Eliza Hiromi Corrêa Ito

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO  
ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE  
ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE  
JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A  
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA  
QUÍMICA.

Examinada por:

---

Prof. Argimiro Resende Secchi, D.Sc.

---

Prof. Marcos Vinícius de Carvalho Gomes, D.Sc.

---

Prof. Príamo Albuquerque Melo Junior, D.Sc.

---

Prof. Fernando Luiz Pellegrini Pessoa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL  
JUNHO DE 2014

Ito, Eliza Hiromi Corrêa

Desenvolvimento de um Sensor Virtual de Composição em Coluna de Destilação para Aplicação em Tempo Real./Eliza Hiromi Corrêa Ito. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XIX, 111 p.: il.; 29,7cm.

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Marcos Vinícius de Carvalho Gomes

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Química, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 108 – 111.

1. Colunas de Destilação. 2. Inferência. 3. Desbutanizadora. 4. Simulação Dinâmica. 5. Modelo Reduzido. 6. Robustez. I. Secchi, Argimiro Resende *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Química. III. Título.

# Agradecimentos

Em primeiro lugar, agradeço a Deus. Agradeço a Ele que tem cuidado de mim desde sempre, que tem me dado força para crescer e fé para viver tudo que Ele planejou pra minha vida.

Agradeço à minha família pelo apoio e por ser a base da minha vida, a começar pelos meus avós maternos (Júlia e Magno) e paternos (Toshiko e Koki). Agradeço principalmente à minha mãe Tânia que sempre me deu incentivo nos estudos e ao meu pai Takashi que sempre ofereceu apoio para o que eu precisasse na vida. Agradeço ao meu irmão mais velho Fellippe e aos meus irmãozinhos menores (Alice, Luiza, Carlinhos e Yasmim) por todos os momentos de descontração e carinho.

Agradeço muito ao Gabriel, meu noivo, que sempre me apoiou imensamente no mestrado. Desde o início das matérias até a finalização do texto da dissertação, sempre me motivou a acreditar no meu trabalho e valorizar as minhas conquistas. Mesmo sendo engenheiro de controle e automação, sempre queria entender o problema de engenharia química que eu tentava resolver. Em muitas dessas tentativas de explicação, certamente o meu crescimento foi maior. Além disso, foi e tem sido fundamental para a minha vida, como meu companheiro, amigo, namorado e futuro marido.

Quero agradecer muito aos meus orientadores. Primeiro ao professor Argimiro que me acompanha desde a iniciação científica, passando pelo projeto final da graduação e agora com a dissertação de mestrado. O meu muito obrigado por me ajudar a ter mais maturidade na pesquisa, pela paciência ao longo desses anos e por sempre ajudar nas horas mais difíceis do trabalho. Agradeço também ao orientador Marcos Vinícius que já me acompanha desde o estágio, me ensinando muito através dos desafios dos projetos no Cenpes. Agora como orientador, agradeço pelos comentários sempre pertinentes sobre a contribuição e desenvolvimento do trabalho e sua aplicação na indústria.

Agradeço ao professor Enrique Lima, que me deu a oportunidade de trabalhar no LADES. Neste laboratório, agradeço pela oportunidade de amadurecer desde o estágio, pois já são anos de aprendizado profissional e pessoal. Aproveito para agradecer a toda a equipe e todas as pessoas que passaram pelo laboratório: Lilian, Dorigo, Cido, Lizandro, Evandro, Almeida, Lívia, Gerson, Michel, Diego Prata,

Danilo, Franklin, Aline, Diego Trica, Orenstein, Simone, Danielle, Bendia, Thiago, Ramon e Gustavo.

Agradeço em especial ao engenheiro Carlos Paiva por ter me dado a oportunidade de absorver um pouquinho da sua imensa experiência em engenharia de processos na Petrobras. Obrigado também por me fornecer a principal ideia de desenvolvimento deste trabalho e por todas as horas gastas em discussões do problema até que ele funcionasse. Obrigado mesmo!

Agradeço aos amigos de trabalho do Cenpes: Marcos Vinícius, Luiz Paulo, Natã, Lívia, Leonardo, Patrícia, Gregório, Fábio, Bruna e Mário. Especialmente, agradeço à Denise, pela oportunidade de trabalhar juntas no projeto que possibilitou o desenvolvimento deste trabalho, agradeço por todas as vezes que precisei de dados e informações sobre a planta de estudo.

Agradeço aos amigos que conheci através do mestrado no PEQ: Rafael, Mirella, Javier, Bruno, Camila, João, Cauê, e tantos outros. Agradeço também aos amigos do Gabriel que hoje estimo como meus amigos também: Alex, Anderson, Barbosa, Aurélio, Daniel, Diogo, Leonardo, Lucas, Marcelo, Maurício, Rafael, Thiago, Maria Pía, Gabriela, Raquel, Mia e Cecília.

Agradeço a minha amiga de infância Isabela Costa pela sua amizade desde sempre. Agradeço a minha amiga de faculdade Patrícia que apesar de tantas mudanças nas nossas vidas, sempre tem mostrado sua amizade e carinho. Agradeço também aos amigos da UFRJ: Bruna, Susan, Fernando, Carol, Priscila Almeida e Priscila Santoro. Agradeço especialmente à Priscila Badega pela amizade e apoio durante a fase das matérias do mestrado.

Agradeço a banca presente na apresentação do mestrado. Obrigado ao professor Príamo que me orientou na primeira iniciação científica, incentivando o meu desejo de trabalhar com modelagem de processos. Obrigado a presença do professor convidado Fernando Pellegrini.

Por fim, agradeço à UFRJ, à COPPE, ao PEQ e à Escola de Química pela oportunidade de ter estudado numa universidade pública de grande qualidade. Agradeço ao povo brasileiro que contribui para que exista o ensino gratuito neste país.

Muito obrigado a todos!

Eliza Hiromi Corrêa Ito.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## DESENVOLVIMENTO DE UM SENSOR VIRTUAL DE COMPOSIÇÃO EM COLUNA DE DESTILAÇÃO PARA APLICAÇÃO EM TEMPO REAL.

Eliza Hiromi Corrêa Ito

Junho/2014

Orientadores: Argimiro Resende Secchi

Marcos Vinícius de Carvalho Gomes

Programa: Engenharia Química

O controle da composição de produtos de uma coluna de destilação apresenta inúmeros desafios em aplicações industriais. Em muitos casos, as análises disponíveis são obtidas por meio de ensaios de laboratório ou analisadores em linha que apresentam medições em baixas frequências, impedindo a utilização em um sistema automático de controle em tempo real. O desenvolvimento de modelos inferenciais possibilita o conhecimento de variáveis importantes como composição do produto destilado (variável dependente) a partir de outras variáveis facilmente medidas (variáveis independentes) como temperatura e pressão, na frequência desejada para controle. Neste trabalho, um novo procedimento para inferências para uma coluna de destilação multicomponente é proposto. O modelo inferencial se baseia na simplificação do modelo rigoroso de uma coluna de destilação a partir de dois estágios de equilíbrio, estratégias para seleção dos componentes chave leve e chave pesado do processo e regras heurísticas. Neste procedimento, uma metodologia de correção de variáveis de entrada (temperaturas) é utilizada de forma a aumentar a robustez do modelo em aplicações na indústria. O modelo é testado com dados reais de uma coluna desbutanizadora de uma Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN) da Petrobras e seus resultados são comparados com as leituras dos analisadores disponíveis. O modelo inferencial proposto apresenta significativa capacidade de predição, mostrando boa aderência mesmo durante variações significativas do ponto operacional. Em nenhum dos pontos testados houve falha de convergência, o que é altamente desejável para aplicações em tempo real.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

DEVELOPMENT OF A COMPOSITION SOFT SENSOR ON DISTILLATION  
COLUMN FOR REAL-TIME APPLICATION

Eliza Hiromi Corrêa Ito

June/2014

Advisors: Argimiro Resende Secchi

Marcos Vinícius de Carvalho Gomes

Department: Chemical Engineering

The product composition control for a distillation column presents wide challenges in the industry. In many cases, the available analyzes are obtained by laboratory tests or online analyzers that usually provide outputs at low sampling rates, which prevents their utilization on a real-time automatic control system. The development of inferential models enables the monitoring of important variables such as product compositions (dependent variables) of the process from other easily measured variables (independent variables) such as temperature, pressure and flow. In this work, a new procedure for inferences for a multicomponent distillation column is proposed. The inferential model is based on simplifying the rigorous model of a distillation column with two equilibrium stage, strategies for selection of components light key and heavy key from process. In this procedure, a methodology for correction of input variables (temperature) is used to ensure robustness for applications in the industry. The model is tested with real data from a debutanizer column from Natural Gas Processing of Petrobras Company and its results are compared with the analyzers' outputs. The proposed inference model presents a meaningful prediction, showing good accuracy even during variations in operating point. There was no convergence failure in any of the tested points, which is highly desirable for real-time applications.

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xi</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>Nomenclatura</b>	<b>xvi</b>
<b>Lista de Acrônimos</b>	<b>xviii</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>1</b>
1.1 Objetivo . . . . .	2
1.2 Motivação . . . . .	2
1.3 Propostas e Contribuição do Trabalho . . . . .	3
1.4 Organização da Dissertação . . . . .	4
<b>2 Revisão Bibliográfica</b>	<b>5</b>
2.1 Modelos Inferenciais . . . . .	6
2.1.1 Tipos de Modelos . . . . .	8
2.2 Inferências em Colunas de Destilação . . . . .	9
2.2.1 Tipos de Modelos Inferenciais em Colunas de Destilação . . . . .	11
2.2.2 Sensores Virtuais Aplicados para Controle de Composição . . . . .	17
2.3 Considerações Finais . . . . .	18
<b>3 Estudo de Caso da Desbutanizadora</b>	<b>19</b>
3.1 Processamento de Gás Natural . . . . .	19
3.2 Torre Desbutanizadora . . . . .	21
3.2.1 Especificação e análises dos produtos . . . . .	22
3.2.2 Estimativa da PVR da planta . . . . .	23
3.3 Testes na planta e dados industriais . . . . .	26
3.4 Qualidade das inferências . . . . .	27
3.5 Considerações Finais . . . . .	28

<b>4</b>	<b>Modelagem Simplificada do Processo</b>	<b>29</b>
4.1	Desenvolvimento da Modelagem Simplificada por <i>Flash</i> . . . . .	30
4.1.1	Estrutura da modelagem . . . . .	31
4.1.2	Variáveis de entrada . . . . .	33
4.1.3	Definição do chave leve e chave pesado . . . . .	34
4.2	Modelo Estacionário . . . . .	35
4.2.1	Análise de consistência . . . . .	37
4.2.2	Etapas para aplicação do modelo estacionário . . . . .	38
4.3	Modelo Dinâmico . . . . .	39
4.3.1	Definição dos parâmetros dinâmicos . . . . .	42
4.3.2	Definição da carga volumétrica . . . . .	44
4.3.3	Etapas para aplicação do modelo dinâmico . . . . .	45
4.4	Robustez da Metodologia de Resolução do Modelo . . . . .	46
4.4.1	Validação da temperatura do fundo . . . . .	46
4.4.2	Validação da temperatura do topo . . . . .	49
4.5	Avaliação da capacidade de predição do Modelo Simplificado por <i>Flash</i> (MSF) . . . . .	52
4.5.1	Modelo rigoroso estacionário . . . . .	54
4.5.2	Testes de comparação dos modelos . . . . .	56
4.6	Considerações Finais . . . . .	57
<b>5</b>	<b>Resultados</b>	<b>58</b>
5.1	Inferência Estacionária . . . . .	58
5.1.1	Parâmetros de ajuste do chave leve e chave pesado . . . . .	59
5.1.2	Verificação da Capacidade de Predição do Modelo . . . . .	61
5.1.3	Resultados da Inferência Estacionária do Teor de Pentanos do GLP . . . . .	65
5.1.4	Inferência Estacionária da Pressão de Vapor Reid (PVR) da Nafta . . . . .	73
5.2	Inferência Dinâmica . . . . .	78
5.2.1	Parâmetros de ajuste da dinâmica do modelo . . . . .	78
5.2.2	Inferência Dinâmica do Teor de Pentanos do GLP . . . . .	79
5.2.3	Inferência Dinâmica da PVR da Nafta . . . . .	84
5.2.4	Avaliação do Modelo Estacionário e Dinâmico para Aplicação em Tempo Real . . . . .	88
5.2.5	Tempo de simulação e taxa de amostragem . . . . .	97
5.3	Robustez das Inferências . . . . .	98
5.3.1	Aplicação da correção de temperatura na condição de chave pesado no produto de topo da torre . . . . .	98

5.3.2	Aplicação da correção de temperatura na condição de chave leve no produto de fundo da torre . . . . .	100
5.4	Considerações Finais . . . . .	103
<b>6</b>	<b>Conclusões</b>	<b>104</b>
6.1	Trabalhos Futuros . . . . .	106
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>108</b>

# Lista de Figuras

3.1	Fluxograma simplificado de uma UPGN. . . . .	20
3.2	Ilustração da torre desbutanizadora e suas malhas de controle. . . . .	22
3.3	Análises da PVR obtidas por laboratório. . . . .	24
3.4	Comparação das análises da PVR obtidas por laboratório e por estimativa de TVP. . . . .	25
3.5	Esquemas de testes das variáveis manipuladas e a resposta do analisador de GLP. . . . .	27
4.1	Esquema da torre desbutanizadora e os <i>flashes</i> de topo e fundo. . . . .	30
4.2	Fluxograma simplificado do MSF. . . . .	32
4.3	Gráfico da razão molar de pentanos (nC5/iC5) no cromatógrafo do GLP. . . . .	35
4.4	Fluxograma das etapas de aplicação do MSF estacionário. . . . .	39
4.5	Formato geométrico simplificado dos vasos de topo (a) e de fundo (b). . . . .	42
	(a) Vaso horizontal de topo . . . . .	42
	(b) Vaso vertical de fundo . . . . .	42
4.6	Fluxograma das etapas de aplicação do MSF dinâmico. . . . .	45
4.7	Esquema do método de validação da temperatura de fundo da desbutanizadora. . . . .	47
4.8	Esquema do método de validação da temperatura de topo da desbutanizadora. . . . .	50
4.9	Fluxograma da torre desbutanizadora no simulador PRO/II. . . . .	54
5.1	Gráfico teor de C5s com diferentes parâmetros no modelo inferencial. . . . .	60
5.2	Gráfico teor de NC5 e IC5 do GLP para os parâmetros P1 e P2 no modelo inferencial. . . . .	61
5.3	Gráfico da capacidade de predição do modelo proposto e modelo rigoroso para o teor de pentanos do GLP. . . . .	62
5.4	Gráfico da capacidade de predição do modelo proposto e modelo rigoroso para a PVR da Nafta . . . . .	63
5.5	Ganhos estacionários do teor de pentanos no GLP obtidos pelos modelos estacionários rigoroso e reduzido. . . . .	65

(a)	Teste na pressão de topo . . . . .	65
(b)	Teste na vazão de refluxo . . . . .	65
(c)	Teste na temperatura do prato de controle . . . . .	65
(d)	Teste na vazão de recirculação de GLP . . . . .	65
5.6	Teste da vazão de refluxo ( <i>Set point</i> ) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre. . . . .	66
5.7	Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de refluxo. . . . .	67
5.8	Teste da vazão de recirculação de GLP ( <i>Set point</i> ) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre. . . . .	68
5.9	Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de recirculação de GLP. . . . .	68
5.10	Teste da pressão de topo ( <i>Set point</i> ) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre. . . . .	69
5.11	Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da pressão de topo. . . . .	70
5.12	Teste da temperatura do prato de controle ( <i>Set point</i> ) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre. . . . .	71
5.13	Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da temperatura de prato de controle. . . . .	71
5.14	Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de vazão de refluxo. . . . .	74
5.15	Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de vazão de recirculação de GLP. . . . .	75
5.16	Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de pressão de topo. . . . .	76
5.17	Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de temperatura de prato. . . . .	76
5.18	Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de refluxo. . . . .	80
5.19	Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de recirculação de GLP. . . . .	81
5.20	Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da pressão de topo. . . . .	82
5.21	Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste de temperatura do prato de controle. . . . .	83
5.22	Inferência dinâmica da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da vazão de refluxo. . . . .	85
5.23	Inferência dinâmica da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da vazão de recirculação de GLP. . . . .	85

5.24	Inferência dinâmica de da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da pressão de topo. . . . .	86
5.25	Inferência dinâmica de da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste de temperatura do prato de controle. . . . .	87
5.26	Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da vazão de refluxo. . . . .	90
5.27	Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da vazão de refluxo. . . . .	90
5.28	Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da vazão de recirculação de GLP. . . . .	92
5.29	Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da vazão de recirculação de GLP. . . . .	92
5.30	Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da pressão de topo. . . . .	94
5.31	Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da pressão de topo. . . . .	94
5.32	Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da temperatura de prato. . . . .	96
5.33	Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da temperatura de prato. . . . .	96
5.34	Verificação e classificação da temperatura de fundo. . . . .	99
5.35	Verificação e correção da temperatura de topo. . . . .	100
5.36	Verificação e correção da temperatura de topo. . . . .	101
5.37	Verificação e classificação da temperatura de fundo. . . . .	102

# Lista de Tabelas

4.1	Análise de Consistência do modelo de <i>flash</i> . . . . .	38
4.2	Dimensões dos vasos de topo e fundo da torre desbutanizadora . . . . .	43
4.3	Estimativa dos volumes de líquido dos vasos de topo e fundo da torre desbutanizadora . . . . .	44
4.4	Vazões típicas de carga e produtos da torre desbutanizadora . . . . .	44
4.5	Especificações do cálculo de temperaturas limites de fundo do <i>flash</i> . . . . .	47
4.6	Especificações do cálculo de temperatura fundo de referência . . . . .	48
4.7	Especificações do cálculo de temperaturas limites de topo do <i>flash</i> . . . . .	51
4.8	Especificações do cálculo de temperaturas limites de fundo do <i>flash</i> . . . . .	51
4.9	Especificações dos estágios da torre T-03 no modelo rigoroso e no caso real. . . . .	55
4.10	Especificações do caso base no modelo rigoroso da torre T03. . . . .	56
4.11	Especificações da composição de carga no modelo rigoroso da torre T03. . . . .	56
4.12	Testes nas variáveis controladas próximas ao caso base da torre T03. . . . .	57
5.1	Resultados do teor de C5s do GLP estacionário no modelo reduzido comparado ao modelo rigoroso. . . . .	63
5.2	Resultados estacionário da PVR da Nafta com <i>bias</i> no modelo reduzido comparado ao modelo rigoroso. . . . .	64
5.3	Resultados do teor de C5s para diferentes períodos no modelo estacionário. . . . .	72
5.4	Resultados finais do teor de C5s no modelo estacionário. . . . .	73
5.5	Resultados do teor de PVR para dois valores no parâmetro no modelo. . . . .	77
5.6	Resultado final do teor de PVR no modelo estacionário. . . . .	77
5.7	Resultados do teor de C5s do GLP na variação no parâmetro de topo do modelo dinâmico. . . . .	79
5.8	Resultados da PVR na variação no parâmetro de fundo do modelo dinâmico. . . . .	79
5.9	Resultados do teor de C5s no modelo dinâmico nos quatro testes da torre T-03. . . . .	83
5.10	Resultado final do teor de C5s no modelo dinâmico. . . . .	84
5.11	Resultados da PVR da nafta no modelo dinâmico nos quatro testes da torre T-03. . . . .	87
5.12	Resultado final da PVR da nafta no modelo dinâmico. . . . .	88

5.13	Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de refluxo. . . . .	89
5.14	Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de refluxo . . . . .	89
5.15	Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de recirculação de GLP. . . . .	91
5.16	Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de recirculação de GLP. . . . .	91
5.17	Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de pressão de topo. . . . .	93
5.18	Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de pressão de topo. . . . .	93
5.19	Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de temperatura do prato de controle. . . . .	95
5.20	Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de temperatura do prato de controle. . . . .	95
5.21	Comparação do tempo de simulação das inferências no MSF estacionário e dinâmico. . . . .	97

# Nomenclatura

## Índices .

$EE$	Estado estacionário.
$L$	Fase líquida.
$V$	Fase vapor.
$i$	Índice do componente $i$ da mistura.

## Parâmetros .

$A_{seçãotransversal}^{Fundo}$	Área da seção transversal correspondente ao líquido no tanque de armazenamento do fundo da torre.
$A_{seçãotransversal}^{Topo}$	Área da seção transversal correspondente ao líquido no vaso de acúmulo de topo.
$H$	Altura estimada de líquido no vaso de acúmulo de topo.
$L$	Comprimento do vaso de acúmulo de topo.
$NComp$	Número total de componentes $i$ .
$R$	Raio da seção transversal do vaso de acúmulo de topo.
$Vol_{Fundo}^L$	Volume estimado de líquido que representa o <i>hold up</i> do fundo da torre.
$Vol_{Topo}^L$	Volume estimado de líquido que representa o <i>hold up</i> do topo da torre.
$h$	Altura estimada de líquido no tanque de armazenamento do fundo da torre.
$r$	Raio do tanque de armazenamento do fundo da torre.

## Variáveis .

$F^L$	Vazão de líquido na saída do <i>flash</i> .
$F^V$	Vazão de vapor na saída do <i>flash</i> .
$Fvol^{GLP}$	Vazão volumétrica de GLP.
$Fvol^{NAFTA}$	Vazão volumétrica de Nafta.
$F$	Vazão molar de carga.
$M^L$	Acúmulo molar de líquido.
$M^V$	Acúmulo molar de vapor.
$M_i$	Acúmulo molar do componente $i$ .

$P^L$	Pressão da fase líquida.
$P^V$	Pressão da fase vapor.
$P$	Pressão de equilíbrio do <i>flash</i> .
$Q$	Carga térmica do sistema.
$T^L$	Temperatura da fase líquida.
$T^V$	Temperatura da fase vapor.
$T_{Fundo}^{Alta}$	Temperatura de fundo da torre quando todo o chave leve está no topo.
$T_{Fundo}^{Baixa}$	Temperatura de fundo da torre quando todo o chave leve está no fundo.
$T_{Fundo}^{Corrigida}$	Temperatura de fundo da torre corrigida pelos limites de segurança do modelo.
$T_{Fundo}^{Lida}$	Temperatura obtida pelo sensor de temperatura de fundo da torre.
$T_{Fundo}^{Máxima}$	Limite superior de temperatura no fundo da torre.
$T_{Fundo}^{Mínima}$	Limite inferior de temperatura no fundo da torre.
$T_{Fundo}^{Ref}$	Temperatura de fundo da torre em que ocorreria separação perfeita dos componentes chave leve e chave pesado.
$T_{Topo}^{Corrigida}$	Temperatura de topo da torre corrigida pelos limites de segurança do modelo.
$T_{Topo}^{Lida}$	Temperatura obtida pelo sensor de temperatura de topo da torre.
$T_{Topo}^{Máxima}$	Limite superior de temperatura no topo da torre.
$T_{Topo}^{Mínima(I)}$	Limite inferior de temperatura no topo da torre quando todo o chave leve está no topo.
$T_{Topo}^{Mínima(II)}$	Limite inferior de temperatura no topo da torre quando todo o chave pesado está no topo.
$T$	Temperatura de equilíbrio do <i>flash</i> .
$\phi_i^L$	Coefficiente de fugacidade da fase líquida do componente $i$ .
$\phi_i^V$	Coefficiente de fugacidade da fase vapor do componente $i$ .
$\tau^L$	Tempo de residência do líquido.
$\tau^V$	Tempo de residência do vapor.
$\tau^{Fundo}$	Tempo de residência do líquido no fundo da torre.
$\tau^{Topo}$	Tempo de residência do líquido no topo da torre.
$h^L$	Entalpia da fase líquida.
$h^V$	Entalpia da fase vapor.
$h$	Entalpia da carga.
$v$	Fração de vapor.
$x_i$	Fração molar do componente $i$ na saída de líquido do <i>flash</i> .
$y_i$	Fração molar do componente $i$ na saída de vapor do <i>flash</i> .
$z_i$	Fração molar do componente $i$ na carga.

# Lista de Acrônimos

<b>CL</b>	Chave leve.
<b>CP</b>	Chave pesado.
<b>CPM</b>	Controle Preditivo Multivariável.
<b>EE</b>	Estado Estacionário.
<b>EKF</b>	Filtro de Kalman Estendido, do inglês <i>Extended Kalman Filter</i> .
<b>EMSO</b>	<i>Environment for Modeling, Simulation and Optimization</i> .
<b>GLP</b>	Gás Líquido de Petróleo.
<b>LGN</b>	Líquido de Gás Natural.
<b>MSF</b>	Modelo Simplificado por <i>Flash</i> .
<b>NARX</b>	Modelo Não linear Auto-regressivo com Entradas Exógenas, do inglês <i>Non-linear AutoRegressive Network with eXogenous inputs</i> .
<b>NNARX</b>	Rede Neuronal artificial Auto-regressiva com Entradas Exógenas, do inglês <i>Neural Network AutoRegressive with eXogenous inputs</i> .
<b>OTS</b>	Simuladores para Treinamento de Operadores, do inglês <i>Operator Training Simulators</i> .
<b>PCR</b>	Regressão por Componentes Principais, do inglês <i>Principal Component Regression</i> .
<b>PLS</b>	Mínimo Quadrados Parciais, do inglês <i>Partial Least Squares</i> .
<b>PVR</b>	Pressão de Vapor Reid.

<b>R<sup>2</sup></b>	Coeficiente de determinação.
<b>RA</b>	Análise de Regressão, do inglês <i>Regression Analysis</i> .
<b>RMSE</b>	Raíz do Erro Quadrático Médio, do inglês <i>Root Mean Square Error</i> .
<b>RNA</b>	Redes Neurais Artificiais.
<b>TVP</b>	Pressão de Vapor Verdadeira, do inglês <i>True Vapor Pressure</i> .
<b>UPGN</b>	Unidade de Processamento de Gás Natural.

# Capítulo 1

## Introdução

A inferência ou o sensor virtual, como também é chamado, possui diferentes campos de aplicação na indústria, como em refinarias, processos de polimerização, indústria alimentícia, processos de fermentação, plantas nucleares e em processos de monitoramento de poluentes (FORTUNA *et al.*, 2007). Sua aplicação tem sido utilizada em diferentes tipos de problemas como, por exemplo, em predição em tempo real para estratégias de controle, processos de monitoramento e de diagnóstico de falhas, entre outros (KADLEC *et al.*, 2009).

A garantia da qualidade de produtos é um fator essencial nos processos produtivos. Um dos fatores que incentiva esse compromisso são as políticas ambientais que exigem maior monitoramento dos produtos e menor emissão de poluentes das plantas industriais. Com isso, os analisadores da qualidade do produto tornam-se ferramentas importantes para o controle do processo (FORTUNA *et al.*, 2007),(FORTUNA *et al.*, 2005).

No entanto, a aquisição de instrumentos de medição possui um elevado custo e também requer uma manutenção periódica. Numa planta de grande porte, tal investimento pode reduzir a quantidade de variáveis a serem monitoradas e a sua frequência de medição (FORTUNA *et al.*, 2007). No caso de colunas de destilação, a presença de analisadores em linha é muito pequena por conta do elevado custo e complexidade (WERLE, 2009). Devido a estes fatores, o controle da composição de produtos de uma coluna destilação tem sido um dos principais desafios na indústria. Por conta disso, existem vários trabalhos na literatura que apresentam a utilização de modelos inferenciais como uma solução desse tipo de problema (LINHARES *et al.*, 2007; MA *et al.*, 2009; RAMLI *et al.*, 2014). Na maioria dos casos, busca-se obter um modelo inferencial com boa acurácia nas predições e em frequência adequada para aplicações de controle ou otimização.

## 1.1 Objetivo

O desenvolvimento dos modelos inferenciais possibilita o conhecimento de variáveis importantes (variáveis dependentes) do processo a partir de outras variáveis facilmente medidas (variáveis independentes) como temperatura, pressão, vazão, etc. A predição é feita a partir de modelos empíricos ou fenomenológicos capazes de estimar a composição dos produtos em alta frequência de cálculo.

Neste trabalho, um novo modelo inferencial foi desenvolvido para estimar estática e dinamicamente a composição do teor de pentanos no produto de topo (GLP) de uma torre desbutanizadora. Esta variável é o principal item de controle de qualidade do GLP. De forma semelhante, também foi analisado a estimativa da PVR da nafta (produto de fundo) deste processo. A partir de simplificações do balanço de massa que envolvem um modelo rigoroso de torre, uma simulação simplificada e fenomenológica foi proposta.

A nova metodologia proposta para inferência de composição tem sido utilizado pela UPGN apresentada como estudo de caso deste trabalho há aproximadamente um ano. Até o presente conhecimento, a sua implementação tem apresentados bons resultados e tempo de execução rápido, possibilitando sua informação para o controle avançado da Unidade.

Assim, a partir de um modelo simplificado de coluna de destilação, o objetivo deste trabalho foi desenvolver um sensor virtual confiável e robusto, capaz de gerar inferências de composição dos produtos de uma coluna desbutanizadora em frequências adequadas para aplicação de estratégias de controle em tempo real.

## 1.2 Motivação

A necessidade de medições confiáveis e acuradas da composição em colunas industriais ainda é um desafio. Segundo FORTUNA *et al.* (2005), muitos analisadores introduzem uma descontinuidade e/ou atrasos significativos em suas medições. Em casos de análise de óleo pesado como o diesel, a medição geralmente ocorre com analisadores de laboratórios. Como a medição é *offline*, a disponibilidade do dado medido torna-se pouco frequente. Mesmo utilizando analisadores em linha (*online*), o atraso pode ser longo e o custo do instrumento muito elevado.

Por outro lado, quando se trata de variáveis físicas como temperatura, pressão e vazão, existe uma grande variedade de medidores com boa acurácia e com um curto tempo de resposta. A partir da informação dessas variáveis, é possível obter a estimativa das composições do produto de uma coluna de destilação através de um modelo de inferência. Ao contrário dos atrasos das medições dos analisadores, os sensores virtuais possibilitam acompanhar a qualidade dos produtos, inferindo a

composição com tempo de resposta baixo, boa acurácia e baixo custo (ZANATA, 2005).

Sendo assim, a utilização do modelo inferencial pode minimizar a quantidade de dispositivos de medição, melhorar a segurança do processo e desenvolver políticas de controle mais eficientes (FORTUNA *et al.*, 2007). Além disso, existem muitas vantagens do uso de sensores virtuais, tais como:

- Alternativa aos instrumentos de medição de custos elevados;
- Podem trabalhar em paralelo com os instrumentos padrão de medição, possibilitando maior informação do processo em casos de falhas nos analisadores em linha;
- Permitem a estimativa dos dados mais relevantes do processo em tempo real sem atraso geralmente obtido em analisadores.

Uma vez obtidos os modelos inferenciais, pode-se estimar a qualidade do produto em alta frequência de amostragem. Isso possibilita a implementação de estratégias de controle mais eficientes. Uma das ferramentas mais utilizadas para esse fim é o controle avançado.

### 1.3 Propostas e Contribuição do Trabalho

Os principais tipos de sensores virtuais são modelados por princípios físicos (modelos fenomenológicos), estimativas estatísticas multivariáveis ou por modelos empíricos, também conhecidos como modelos caixa-preta (FORTUNA *et al.*, 2007). A seleção do tipo de modelo depende do nível de conhecimento prévio do processo e do tamanho do histórico de dados industriais registrados.

Os modelos fenomenológicos geralmente requerem muito tempo de desenvolvimento devido à complexidade da modelagem do seu processo. Além disso, muitos parâmetros do processo são de difícil acesso ou não são conhecidos (FORTUNA *et al.*, 2005). No entanto, sua capacidade de descrever os fenômenos do processos trazem valiosas informações para um controle de processo mais elaborado.

Neste trabalho, uma inferência de composição do produto de topo foi desenvolvida para uma coluna de destilação pertencente a uma UPGN. A aplicação foi obtida a partir de um modelo fenomenológico simplificado por uma estrutura de dois estágios de equilíbrio na tentativa de simplificar a complexa modelagem rigorosa de uma coluna de destilação. O objetivo desta aplicação é possibilitar o uso do sensor virtual em tempo real de forma robusta para diferentes condições de operação.

## 1.4 Organização da Dissertação

A seguir, o Capítulo 2 apresenta uma revisão do tema proposto na literatura, abrangendo análises dos trabalhos que utilizaram diferentes metodologias para a inferência em colunas de destilação. Uma análise mais detalhada será feita pra os trabalhos aplicados em casos reais da indústria.

No Capítulo 3, é descrito estudo de caso utilizado para a aplicação do modelo proposto: uma Torre Desbutanizadora de uma Unidade de Processamento de Gás Natural. Neste capítulo, também são abordados assuntos relacionados ao tipo de processamento que é utilizado e suas limitações.

O Capítulo 4 apresenta a descrição e a modelagem desenvolvida a partir da simplificação de um modelo fenomenológico de colunas de destilação a partir do uso de *flashes*. Todo o equacionamento dos modelos, parâmetros para ajuste e variáveis de entrada são descritas e justificadas nesta seção.

No Capítulo 5, todos os resultados e etapas necessárias para a obtenção e uso dos modelos simplificados na torre desbutanizadora são detalhadas. Assim, também são avaliadas a qualidade das inferências, capacidade de predição e robustez do modelo proposto.

Por fim, conclusões e propostas de trabalhos futuros são feitas no Capítulo 6.

# Capítulo 2

## Revisão Bibliográfica

Modelos matemáticos têm sido utilizados para diversos fins (predição, estimação de estado, monitoramento e controle, simulação e treinamento, otimização). Uma questão a ser feita é: o modelo desenvolvido representa adequadamente as características desejadas do sistema real?

Segundo AGUIRRE (2004), o modelo matemático é apenas uma representação aproximada de algumas características de um sistema real e, para isto, considerações simplificadoras costumam ser utilizadas. Além disso, a escolha do tipo de modelo depende da quantidade de informação disponível sobre o sistema e o do tempo disponível para o seu desenvolvimento.

No caso da aplicação de modelos inferenciais, o desenvolvimento dos modelos matemáticos envolvem muitas decisões relacionadas a tais aspectos aspectos (DE CAMPOS *et al.*, 2013), como por exemplo:

- Aplicação final da inferência, como controle ou otimização, ou ainda, apenas para acompanhamento e monitoração. Para cada finalidade, deve-se obter a frequência de predição desejada;
- Coleta dos dados que são necessários para a modelagem. É importante saber a qualidade disponível nos dados do processo;
- Variáveis utilizadas no modelo, compreendem as variáveis independentes (valores de entrada no modelo) e as variáveis dependentes (resultados do modelo matemático). No caso de variáveis de entrada do modelo, busca-se variáveis que tenham influência na variável de saída;
- Estrutura e características do modelo inferencial, sendo geralmente obtidos pelo equacionamento físico do processo (modelos fenomenológicos) ou pelas relações matemáticas que representem as variáveis de entrada com as variáveis de predição (modelos empíricos);

- Validação do modelo, utiliza-se dados para a etapa de ajustes dos parâmetros dos modelo como também para a sua validação;
- Ajustes em tempo real implica em ajustes da dinâmica do processo ou ajuste do valor absoluto de predição;
- Acompanhamento e manutenção do modelo de predição, envolve determinação de novos ajustes de parâmetros do modelo, verificação da instrumentação ou mesmo inclusão de novas variáveis no algoritmo utilizado.

Diferentes propriedades podem ser inferidas em processos químicos. Para cada tipo de processo, diferentes tipos de atrasos nas medições são encontrados e diferentes variáveis que possuem influência na predição podem ser utilizadas. Alguns exemplos de propriedades inferidas são (THAM *et al.*, 1991):

- Concentração de biomassa (medições em laboratório até 4 horas) pode ser inferida a partir da concentração de  $CO_2$ ;
- Composição de produto de topo de uma coluna de destilação desmetanizadora (atraso do analisador em linha em 20 minutos) pode ser inferida a partir das leituras de temperatura e vazão de refluxo;
- Índice de fluidez dos polímeros (medições em laboratório até 2 horas) pode ser inferida a partir da vazão da carga, vazão do fluido refrigerante do reator e concentração do hidrogênio.

Portanto, a utilização da inferência de propriedades pode ter diferentes finalidades. Neste trabalho, a principal finalidade do modelo inferencial é obter predições com boa acurácia e em taxa de amostragem elevada em colunas de destilação. Para isto, vários aspectos sobre os modelos inferenciais são vistos e analisados, principalmente quanto a sua aplicação em casos reais. Na Seção 2.1, diferentes modelos são revisados ressaltando as diferenças de aplicação e desenvolvimento. Na Seção 2.2, são apresentados os principais métodos para inferência em colunas de destilação e sua aplicação industrial.

## 2.1 Modelos Inferenciais

Para muitos processos químicos, existe uma dificuldade em se adquirir valores medidos em uma frequência adequada e com qualidade satisfatória para variáveis como a composição e a densidade de produtos. As variáveis de processo tais como temperatura, pressão, vazões, no entanto, podem ser facilmente medidas em uma taxa elevada (minuto a minuto). Nestes casos onde as variáveis de processo (ou variáveis

secundárias) são disponíveis em uma taxa mais frequente do que as variáveis de qualidade (ou variáveis primárias), é interessante o desenvolvimento de métodos de predição em frequências mais altas. Tais métodos são úteis, por exemplo, para o monitoramento em tempo real da qualidade dos produtos gerados em uma unidade industrial (LU *et al.*, 2004).

Modelos inferenciais para aplicações em tempo real também são chamados de sensores virtuais. As principais abordagens nas metodologias utilizadas em sensores virtuais são (CANABARRO, 2011; DE CAMPOS *et al.*, 2013):

- Modelos Fenomenológicos: são modelos que utilizam os princípios físicos e fundamentais do processo. Apresentam certa complexidade no seu desenvolvimento, mas podem gerar resultados confiáveis mesmo quando se faz extrapolações;
- Modelos Empíricos: utilizam algoritmos de estimação de parâmetros e estatística multivariada para relacionar uma massa de dados do processo com as variáveis desejadas para predição. Alguns métodos vastamente utilizados são as Redes Neurais Artificiais (RNA) e Mínimo Quadrados Parciais (PLS, do inglês *Partial Least Squares*). São conhecidos como modelos "caixa-preta", isto é, não têm necessidade de representar os fenômenos físicos do processo. Estes modelos não devem ser utilizados para extrapolações distantes da região caracterizada pelos dados utilizados no desenvolvimento do modelo;
- Métodos Híbridos: Quando há a combinação de dois ou mais métodos diferentes.

DE CAMPOS *et al.* (2013) lista algumas das vantagens e desvantagens do uso de inferências de propriedades, tais como:

- Vantagens: baixo custo, disponibilidade na taxa de amostragem desejada e baixo esforço para manutenção do modelo;
- Desvantagens: limitação da acurácia dos valores inferidos a partir das variáveis utilizadas no modelo (variáveis secundárias), limitação matemática do modelo, complexidade da construção do modelo e desvios do modelo concebido ao longo do tempo (premissas de modelagem desatualizadas).

Portanto, uma forma de aproveitar as vantagens e minimizar as desvantagens, é desejado que sensores virtuais para inferências de propriedades sejam acurados e providenciem dados na frequência adequada. Além disso, é importante que o desenvolvimento dos sensores virtuais seja simples (redução do tempo exigido para sua

construção), confiável (apesar de limitações matemáticas como problemas de convergência) e robusto em diferentes condições operacionais (minimização da degradação do modelo ao longo do tempo).

### 2.1.1 Tipos de Modelos

Conforme é explicado no trabalho de SCHWAAB (2007), os modelos empíricos são comumente utilizados porque são em geral mais simples e fáceis de obter, permitindo a construção de modelos de forma mais rápida e barata a partir de vasta quantidade de dados medidos do processo (ou experimentais), quando comparados à construção de modelos teóricos mais detalhados do processo. Já os modelos teóricos permitem extrapolações muito mais confiáveis que aquelas obtidas com modelos empíricos, pois em geral, os pressupostos teóricos (conservação de massa, energia e quantidade de movimento) utilizados são válidos em ampla faixa de dados de processos de planta (experimentação) ou perturbações inerentes ao processo.

Para obter a validação dos parâmetros do modelo de inferência, o modelo fenomenológico apresenta a vantagem de demandar uma massa de dados menor que o modelo empírico, isso ocorre porque o conhecimento do processo já é obtido a partir das equações fundamentais. Já no caso de modelos empíricos, caso não haja uma grande quantidade de dados, pode-se obter uma massa de dados a partir de uma simulação fenomenológica e utilizar os dados disponíveis para a sua validação (DE CAMPOS *et al.*, 2013). Observa-se que essa metodologia envolve dois trabalhos de modelos inferenciais (fenomenológico e empírico), podendo ser desvantajoso utilizar modelos empíricos se os dados já não forem disponíveis no processo. Além disso, é de se esperar que a qualidade do modelo empírico obtido seja limitada à qualidade do modelo fenomenológico.

Outro aspecto quanto à classificação dos tipos de modelos é se o sistema pode ser descrito como estático (descrito por equações algébricas), ou dinâmico (descrito por equações diferenciais). De maneira geral, todo sistema real é dinâmico, mas muitas vezes um sistema pode ser descrito por um modelo estático quando a dinâmica (variações no tempo) do sistema é muito rápida (AGUIRRE, 2004). No caso de inferências obtidas por modelos estacionários, pode-se obter inferências pobres (por exemplo, quando o valor de inferência está muito distante do valor real de composição) quando o regime está em transiente, principalmente em sistemas com dinâmica significativamente lenta.

Dentro dos principais tipos de modelos de inferenciais, destaca-se na literatura o uso popular das RNAs. A vantagem do uso das RNAs é a utilização de funções arbitrárias como um mecanismo de aproximação capaz de se ajustar a uma massa de dados. No entanto, a sua aplicação envolve um conhecimento detalhado da

metodologia. O primeiro critério envolve a escolha do modelo que dependerá do tipo de apresentação dos dados e sua aplicação. O segundo critério é a escolha do tipo de algoritmo de estimação de parâmetros. A seleção e ajuste do algoritmo na fase de estimação envolve também a disponibilidade de uma grande quantidade de dados para garantir a robustez do modelo selecionado. Outra abordagem de modelos empíricos muito utilizada é o PLS. Este método é obtido por regressão que generaliza e combina as características de uma análise de componente principal e regressões múltiplas. É muito útil em sistemas colineares e com variáveis incompletas e depende do número de variáveis de entradas para obter uma boa acurácia. Tem sido utilizado como uma ferramenta confiável para monitoramento de processos e predição aplicadas em otimizações. Uma desvantagem é o aumento do tamanho do conjunto de dados que limitam a eficiência e interpretação das saídas (RAMLI *et al.*, 2014).

Modelos rigorosos, por outro lado, têm sido amplamente utilizados na indústria em situações *offline*. KLATT e MARQUARDT (2009) comentaram que nos anos 2000 houve uma melhoria consistente na área de simulação dinâmica de processos que, aliada a um aumento da capacidade computacional, permitiu um avanço e popularização do seu uso para Simuladores para Treinamento de Operadores (OTS, do inglês *Operator Training Simulators*). Esse sistema usa a simulação como uma planta virtual que é ligada a sistemas de controle reais em estações de treinamento, permitindo a emulação de *start-up*, *shutdown* e outras situações extremas. Segundo KLATT e MARQUARDT (2009), OTS também são ideais para teste e melhoria de estratégias de controle, desenvolvimento de estratégias de controle avançado e análises de mal-funcionamento de respostas do processo. SCHAICH e FRIEDRICH (2004) e COX *et al.* (2006) relataram benefícios do uso de OTS na indústria para o comissionamento e *start-up*, reduzindo o tempo e os erros desses processos. Infelizmente, por mais que esses modelos tenham se provado úteis na indústria inclusive na simulação de situações extremas, seu uso em tempo real ainda é incipiente.

Na próxima seção, algumas das abordagens com sensores virtuais em colunas de destilação ou processo similar são apresentadas. Em todos os casos, são mostradas as diferentes aplicações do sensor virtual devido à necessidade de obter medidas confiáveis com a frequência necessária para aplicação em tempo real. Em alguns trabalhos, é mostrado como o controle do processo pode se beneficiar de uma predição com boa acurácia por um sensor virtual.

## 2.2 Inferências em Colunas de Destilação

Para o controle da composição de produto de colunas de destilação, é necessário ter a medição contínua de várias correntes do processo. Entretanto, a maioria dos

analisadores, como os cromatógrafos a gás, sofrem grandes atrasos nas medidas (KANO *et al.*, 2000). Para cada tipo de analisador disponível, muitas dificuldades podem ser encontradas (CONZ, 2005; DE CAMPOS *et al.*, 2013), tais como:

- Ensaio em laboratório: análises de composição apresentam atraso entre a amostragem e o resultado do laboratório, impossibilita que as informações sejam disponíveis automaticamente em um sistema de controle em tempo real e a qualidade de medição depende do procedimento de amostragem na área de coleta;
- Analisadores em linha: necessidade de uma equipe de manutenção (padrões de calibração, limpeza, instalação de sensores, etc.), dependência de uma verificação periódica do equipamento para garantir alta confiabilidade, elevado tempo de resposta se utilizado para diversos pontos de análise e investimento na aquisição do equipamento.

Analisadores em linha apresentam uma frequência de medição superior aos ensaios em laboratórios, chegando a análises de 5 a 10 minutos. No entanto, se o analisador em linha é utilizado para análises de várias correntes, o tempo do ciclo pode chegar a 30 minutos (DE CAMPOS *et al.*, 2013). No estudo de caso do presente trabalho, por exemplo, o analisador da carga de entrada do gás natural é o mesmo utilizado para todas as correntes de topo das três colunas de destilação na UPGN, atingindo atrasos de até 20 minutos.

Os atrasos de medição em uma coluna de destilação dificultam a implementação de sistemas automáticos de controle ou mesmo podem dificultar correções dos desvios por parte da equipe de operação da planta. Desta forma, a predição de propriedades de difícil aquisição por sistemas convencionais de análise pode ser realizada por analisadores virtuais, através da medida de variáveis correlacionadas à propriedade que se deseja estimar (DIEHL *et al.*, 2009). A inferência é basicamente constituída de algoritmos e modelos matemáticos e sua qualidade é medida pela acurácia de suas estimativas.

Na destilação, os primeiros modelos inferenciais desenvolvidos para estimar a qualidade do produto em colunas de destilação basearam-se no uso da temperatura de um prato já previamente selecionado como variável de predição indireta (JUNIOR, 1996). Desta forma, no lugar de controlar a composição de um produto, o controle de temperatura do prato é amplamente utilizado, baseado na suposição de que a composição do produto pode satisfazer as suas especificações quando a temperatura especificada do prato é mantida constante em seu set-point.

No entanto, KANO *et al.* (2000) ressalta que para o caso de colunas de destilação multicomponente, o controle de temperatura nem sempre é eficaz para o controle de

composição, uma vez que a temperatura do prato pode não corresponder exatamente à composição de produto.

De maneira geral, os tipos de técnicas a serem empregadas como sensores virtuais dependem do tipo de complexidade do processo como, por exemplo, se apresentam características lineares ou não lineares. A escolha de um determinado método também depende da seleção das variáveis secundárias disponíveis (CONZ, 2005).

No caso de colunas de destilação, a presença de características não lineares significativas costumam ser frequentes. Por esta razão, muitos modelos matemáticos a fim de inferir propriedades do destilado, compreendem essa característica em sua metodologia (PARK e HAN, 2000).

Outro aspecto na modelagem de sensores virtuais em colunas de destilação é a utilização de modelos estacionários e dinâmicos. No trabalho de CONZ (2005), a utilização do modelo dinâmico em colunas de tolueno permitiu verificar o tempo que a composição de topo leva para chegar ao estado estacionário (tempo de assentamento) após uma perturbação na operação da coluna. Também permitiu averiguar o tempo morto, ou seja, o tempo que a variável de interesse leva para começar a variar após a perturbação no processo.

Sendo assim, observa-se que a modelagem de colunas de destilação envolve muitas questões a cerca da não linearidade, dinâmica e seleção das variáveis mais apropriadas para o modelo inferencial. Na Seção 2.2.1, trabalhos que tratam destas questões são analisados.

### **2.2.1 Tipos de Modelos Inferenciais em Colunas de Destilação**

Como mencionado no estudo de JUNIOR (1996), WEBER e BROSILOW (1972) foram os primeiros a sugerir o uso de modelos de inferências empíricos com múltiplas variáveis para inferir a composição dos produtos em colunas de destilação. A utilização deste modelo mostrou na simulação do controle de uma coluna de destilação multicomponente que o controle produzido com um modelo inferencial deste tipo foi comparável ao produzido com a medida direta da composição. Desde então diversos trabalhos tem utilizado este tipo de raciocínio (LINHARES *et al.*, 2007; PARK e HAN, 2000; YEH *et al.*, 2003).

Num trabalho com objetivo muito semelhante ao desta dissertação, FORTUNA *et al.* (2005) propõem um sensor virtual baseado em RNA para a inferência de C5 no topo e de C4 no fundo para uma desbutanizadora, visando a obtenção de resultados intermediários para preencher as lacunas e atrasos introduzidos pelos cromatógrafos. Seus resultados são comparados com as leituras dos cromatógrafos e possuem visualmente boa correlação e baixo erro. Infelizmente o autor não disponibiliza valores

estatísticos de erro médio ou coeficiente de determinação. Contudo, como o próprio autor observa, há uma significativa degradação da performance do sensor virtual após uma parada na planta. Ao reiniciar, a leitura de um dos sensores de temperatura de fundo estava diferente da anterior em cerca de 10°C, o que levou a desvios consistentes da ordem de 2% molar, na inferência do teor de C5 no topo. Isso revela claramente as limitações de uma abordagem de sensor virtual baseada em dados como é a de RNA: quando operam fora da região em que foram ajustados, sua resposta é pouco previsível. Modelos com base fenomenológica têm maior capacidade de extrapolação, pois não dependem do levantamento de dados que representem todo o campo de atuação do processo.

Outra aplicação de um modelo inferencial para a composição do iso-pentano (iC5) no GLP é apresentado por LINHARES *et al.* (2007). Neste trabalho, o autor utiliza um modelo por rede neural de múltiplas camadas e obtém um mapeamento dinâmico do iC5 na coluna desbutanizadora com resultados satisfatórios. O autor destaca o uso do modelo de identificação Rede Neuronal artificial Auto-regressiva com Entradas Exógenas (NNARX, do inglês *Neural Network AutoRegressive with exogenous inputs*) utilizando a vazão de refluxo e temperatura do prato sensível como variáveis que influenciam a composição do iC5. Uma simulação dinâmica em HYSYS foi utilizada como planta virtual para a obtenção dos dados de ajuste e validação das RNAs. Para os dados de teste escolhidos, os autores obtiveram erros RMSE da ordem de 0,01% molar. Infelizmente, o autor não avalia o desempenho de seu sensor virtual frente a perturbações em outras variáveis importantes, tais como pressão da coluna e variação de composição de carga.

KADLEC e GABRYS (2009) propõem um sensor virtual baseado em aprendizado local adaptativo. Essa abordagem trata de modelos de complexidade limitada que focam em partições do espaço de entrada e uma técnica de construção de conjuntos que combinam as predições dos modelos locais num valor predito final. Segundo os autores, essa ferramenta é robusta e apta a lidar com ambientes dinâmicos que incluem dados ruidosos, divergentes, com *outliers* e dados faltantes. Além disso, essa abordagem minimizaria os esforços prévios de levantamento de modelos rigorosos ou ajustes de parâmetros. Num teste com dados industriais reais, o autor consegue um coeficiente de correlação de 50%. Esse valor é superior aos das outras abordagens baseadas em dados a que ele compara, como as RNAs, mas está muito aquém do necessário para o controle de variáveis críticas como as abordadas por este trabalho.

Uma aplicação de RNA recorrentes do tipo *Time Delayed* para a criação de sensores virtuais em uma coluna de destilação reativa ideal é apresentada em (VIJAYA RAGHAVAN *et al.*, 2011). Os autores aplicam essa ferramenta a uma planta virtual simulada em Matlab e comparam seus resultados a outros tipos de RNA e ao Filtro de Kalman Extendido. Infelizmente, esse trabalho não apresenta a aplicação

da ferramenta a um processo real.

Alternativamente, outra abordagem baseada em modelos empíricos para inferência em tempo real é baseada em aproximações por métodos de regressão estatística multivariável como o Regressão por Componentes Principais (PCR, do inglês *Principal Component Regression*) e o PLS (MEJDELL e SKOGESTAD, 1991), principalmente em sistemas com variação de pressão, misturas multicomponentes e não linearidades causadas por mudança operacional.

Baseado nesta metodologia por regressão, MA *et al.* (2009) propuseram um sensor virtual baseado em dados a partir de um processo estatístico para a escolha das variáveis chaves em uma coluna industrial de alta pureza em o-xylene (produto de topo). Na escolha da variável chave, perturbações de carga do componente investigado na coluna e análises estatísticas com as temperaturas ao longo da coluna foram realizados. Os resultados mostraram que a temperatura de topo da coluna foi a melhor variável para a regressão do produto de topo, apresentando um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) de 98,78%. Os autores enfatizam que a escolha é esperada uma vez que a temperatura de topo (destilado), num sistema a pressão constante, indica exatamente a composição do produto de topo. De forma semelhante, o chave pesado mostrou o maior  $R^2$  quando utilizado a temperatura de fundo como variável chave para a regressão.

KANO *et al.* (2000) utilizaram modelos inferenciais empíricos para estimar em linha a composição do produto de uma coluna de destilação multicomponente a partir de variáveis medidas de processo, tais como temperaturas de prato, vazão de refluxo, carga térmica do refeedor e pressão. Estes autores fizeram a comparação dos modelos inferenciais (estado estacionário e dinâmico) construídos a partir da regressão por Mínimos Quadrados Parciais (PLS - Partial Least Squares) junto com o sistema de controle, concluindo então, que a acurácia da estimativa pode ser melhorada através da utilização de modelos dinâmicos.

O método estatístico por PLS costuma ser pouco eficiente em aplicações com fortes não linearidades nas variáveis, pois apenas informações lineares são detectadas nas variáveis do processo. No artigo de PARK e HAN (2000), os autores propuseram uma maneira de lidar com a não linearidade utilizando o PLS como sensor virtual através de uma suavização multivariada (*multivariate smoothing*) com regressão ponderada local. Em seu trabalho, os autores destacam que este método consegue lidar bem com as correlações de uma amostra de variáveis de uma coluna de destilação com característica não linear (tolueno como produto principal) e outra coluna com característica relativamente linear (diesel como produto principal). Os resultados da inferência são bem avaliadas quando comparado aos outros métodos como PLS não linear e em RNA. No levantamento de dados para obtenção e validação do modelo, são utilizadas 16 variáveis disponíveis *online* na coluna (estudo não linear),

além de 57 variáveis no estudo da coluna que produz diesel (caso linear). Destaca-se a informação dada pelos autores que a modelagem depende totalmente da qualidade das medições utilizadas (detecção de *outliers*, redução de ruídos, etc.).

Outro trabalho que tenta aprimorar o efeito da não linearidade em uma coluna de destilação é apresentado por BARATTI *et al.* (1995). Em seu trabalho, um estimador não linear baseado no Filtro de Kalman Estendido (EKF, do inglês *Extended Kalman Filter*), foi utilizado para inferir a composição dos produtos de uma destilação binária (etanol e água) de uma planta piloto, a partir da leitura de duas temperaturas da torre. Nos resultados, conclui-se que os valores inferidos são satisfatórios comparados aos dados da planta. Contudo, como os próprios autores observam, os resultados ficam ruins quando a relação de equilíbrio líquido-vapor não representa adequadamente a composição com temperatura de leitura. Desta forma, os autores sugerem que um bom modelo equilíbrio líquido-vapor pode melhorar muito os resultados estimados.

Dentre as aplicações mais recentes de modelo inferencial em torres desbutanizadoras, destaca-se o trabalho de RAMLI *et al.* (2014) em uma unidade de refino de petróleo. A fim de monitorar a qualidade da composição em tempo real, o componente inferido foi o n-butano (nC4) no produto de topo e de fundo da coluna, utilizando-se técnicas de RNA e modelo de identificação Modelo Não linear Auto-regressivo com Entradas Exógenas (NARX, do inglês *Nonlinear AutoRegressive Network with exogenous inputs*). Em seus resultados, os métodos estatísticos de PLS e Análise de Regressão (RA, do inglês *Regression Analysis*) foram comparados. Baseando-se por análises estatísticas, os autores destacam o melhor desempenho das RNAs frente aos dois métodos estatísticos testados, alcançando valores de Raíz do Erro Quadrático Médio (RMSE, do inglês *Root Mean Square Error*) da ordem de  $10^{-5}$  % molar do n-butano no topo e coeficiente de determinação em  $R^2$  igual a 1,00 num período de 541 minutos. Uma combinação de dados da planta e dados simulados para o ajuste do algoritmo e validação dos testes. Para isto, o simulador HYSYS funciona como planta virtual e fornece as variáveis de temperatura, pressão e composição de fundo da torre que são indisponíveis na planta.

De acordo com CONZ (2005), uma limitação do uso das RNA é a lenta convergência quando muitos dados são utilizados para a sua representação. E apesar da versatilidade no uso de modelos obtidos por regressão como o PLS, eles podem não representar de forma satisfatória quando o sistema for altamente não linear.

Apesar da literatura apresentar uma vasta quantidade de modelos inferenciais a partir de modelos empíricos, muitas dificuldades são observadas, tais como:

- Necessidade de uma massa de dados elevada e com boa qualidade de medição. Pode envolver várias medições de temperaturas, pressão e vazões;

- Utilização de dados que representem o máximo da região operacional da coluna de destilação. Para isto, os dados devem compreender períodos com as perturbações típicas no processo;
- Na ausência ou escassez de dados que representem a coluna de destilação, modelos fenomenológicos são feitos e validados para gerar a massa de dados necessária para os modelos empíricos. Um acúmulo de erros por parte do modelo rigoroso pode ser carregado para os modelos empíricos;
- A dinâmica do modelo é aproximada a partir dos dados, o que pode levar a estimação de constantes de tempos fixas nos períodos de perturbação na coluna. Ou seja, dada uma variação de carga, por exemplo, o modelo pode não representar mais a dinâmica correta;
- A não linearidade do modelo inferencial pode não representar totalmente todos os aspectos de não linearidade da coluna.

Assim, algumas aplicações de modelos fenomenológicos são de grande interesse uma vez que não requerem uma massa de dados de processo muito extensa, permitem grandes extrapolações e permitem o uso de modelos termodinâmicos mais eficazes.

Em (FRUEHAUF e MAHONEY, 1993), a utilização de modelos rigorosos em estado estacionário para controle em colunas de destilação é avaliada. Os autores observam que o modelo em estado estacionário é especialmente importante para o projeto de controladores em colunas multicomponente.

Outra aplicação de modelo rigoroso é visto no trabalho de DIEHL *et al.* (2009) em que utiliza o simulador Aspen Plus para a modelagem rigorosa de uma torre atmosférica, em estado estacionário. Para a aplicação em tempo real como um analisador virtual, os autores propuseram duas alternativas para calcular as inferências são propostas: uma baseada em polinômios ajustados e outra semi-empírica simplificada. Em casos de operação dentro das condições normais, o polinômio ajustado apresentou melhores resultados, mas em situações fora do ponto de operação a modelagem semi-empírica se revelou mais precisa. Os autores ponderaram que isso se devia ao fato da última modelagem ter fundamentação fenomenológica, aumenta-se o seu poder extrapolativo. De um modo geral, nenhuma das duas modelagens teve desempenho próximo ao da simulação rigorosa.

O desenvolvimento de modelo rigoroso e dinâmico de uma coluna de destilação é apresentado por CANABARRO (2011) em uma UPGN. Em sua dissertação, são apresentadas as simulações estacionárias e dinâmicas de duas torres: desetanizadora e desbutanizadora. Com atrasos de medição em intervalos de 40 a 50 minutos na planta, os resultados das inferências em tempos de amostragem menores, possibilitam a utilização do modelo inferencial para estratégias de controle de composição

dos produtos. Adicionalmente, os modelos rigorosos quando comparados ao modelo RNA, apresentaram resultados semelhantes. No entanto, as variáveis preditas pelo RNA, apresentaram necessidade de correção de Bias e sinal de saída discretizado, causado pelos dados de entrada do cromatógrafo (40 a 50 minutos).

Os modelos rigorosos de forma geral, necessitam de algoritmos eficazes e informações específicas sobre o processo a ser modelado. No caso de colunas de destilação, por exemplo, muitos parâmetros devem ser conhecidos ou estimados, tais como:

- Dimensões dos vasos de acúmulo de topo e de fundo;
- Geometria dos pratos (área perfurada, comprimento do vertedouro, diâmetro da bandeja, área ativa);
- Tipo de prato (valvulado, perfurado, borbulhadores);
- Fração do volume ocupado pelo líquido nos vasos de topo e fundo, entre outros dados.

Uma forma de representar a capacidade de predição dos modelos rigoroso é obter uma redução ou simplificação da sua modelagem. Para estes tipos de modelos, obtém-se os chamados modelos reduzidos.

Conforme o trabalho de LINHART e SKOGESTAD (2010), colunas de destilação podem ser representadas por estágios de equilíbrio agregados. Nesta modelagem, parâmetros como *holdup* da coluna são utilizados como ajuste do modelo. Uma vantagem desta metodologia é a utilização dos balanços de massa e energia em cada estágio do processo considerado. Com a redução da quantidade de equações algébricas e diferenciais, obtém-se uma simulação muito mais rápida que a resultante nos modelos rigorosos. Apesar da redução do modelo, resultados do modelo simplificado são muito próximos dos resultados do modelo completo e podem ser interessantes para aplicação em tempo real.

Conforme a definição de NASCIMENTO (2013), modelos de ordem reduzida são sistemas de baixa ordem de equações algébrico-diferenciais. Isto é, trata-se da aproximação do sistema completo por um sistema menor, mas que mantém as principais características do sistema original. Embora os métodos abordados por NASCIMENTO (2013) sejam de natureza matemática, neste trabalho, um modelo simplificado é desenvolvido a partir do conhecimento do processo e utilização da modelagem fenomenológica de forma simplificada.

Desta forma, o modelo inferencial desenvolvido neste trabalho tem como objetivo obter as inferências de composição dos produtos de uma coluna de destilação a partir da simplificação do seu modelo rigoroso. Até o presente conhecimento do autor e em sua revisão bibliográfica, não foram encontrados trabalhos semelhantes utilizando

modelos simplificados de colunas de destilação a partir de apenas dois estágios de equilíbrio para uma carga multicomponente de hidrocarbonetos.

## 2.2.2 Sensores Virtuais Aplicados para Controle de Composição

Aplicações de sensores virtuais no ponto de vista industrial envolve obter um analisador confiável e robusto. Para isto, deve-se atentar para a qualidade das variáveis secundárias utilizadas no modelo de inferência, de forma que dados com *outliers* sejam removidos por reconciliação de dados ou uso de um filtro adequado. Outro aspecto é o monitoramento dos desvios da inferência do sensor com o analisador da planta (se disponível), caso o desvio exceda um valor aceitável, é necessário analisar a falha do sensor virtual. Um possível motivo de falha pode ser consequência de uma mudança operacional da planta, de forma a ultrapassar os limites de validação do modelo. Caso a condição de operação da planta seja modificada permanentemente, o modelo inferencial deve ser atualizado para as novas condições de operação (GONZALEZ, 1999).

Uma prática utilizada para correção dos erros absolutos de um sensor virtual quando comparado aos analisadores em linha (ou laboratórios), é a correção dos desvios através do *Bias*. A sua aplicação, no entanto, é mais apropriada se a inferência possui uma boa tendência, mas apresenta um erro significativo no valor absoluto (DE CAMPOS *et al.*, 2013). Segundo o trabalho de DIEHL *et al.* (2009), atualizações sistemáticas de *Bias* podem melhorar o desempenho dos resultados inferidos. ANSARI e TADÉ (2000) também utiliza modelos de correlação com ajustes de *bias* periódicos para fazer o controle não-linear do tipo GMC (Controle Genérico por Modelo, do inglês *Generic Model Control*).

De acordo com KANO *et al.* (2003), a concepção de um sistema de controle a partir de um modelo de inferência é um bom exemplo para extrair informações úteis a partir dos dados do processo e usá-lo para melhorar o funcionamento do processo. Em seu trabalho, os autores descrevem um modelo inferencial dinâmico empírico de uma coluna de destilação multicomponente é descrito, não para estimar a composição do produto atual, mas para prever a composição futura e faz uso de um esquema de controle, configurando um “controle preditivo inferencial”.

YEH *et al.* (2003) utiliza um estimador não linear através das RNAs para inferência dinâmica de composição a partir de várias variáveis secundárias, tais como temperatura, pressão, nível e vazões. O estudo foi aplicado num sistema composto por dois reatores, um condensador, um separador e um compressor, a partir do *benchmark* de Tennessee Eastman (TE). O sensor virtual é utilizado aliado ao controle regulatório clássico e controle preditivo por modelo (CPM) para controle inferencial.

Nas duas estratégias propostas, o trabalho conclui que o sensor virtual desenvolvido possibilitou um bom controle inferencial nos dois métodos de controle como sensor em tempo real.

Uma forma de obter o controle de composição de uma coluna, é operar o processo utilizando os valores apropriados de *setpoint*. ARAÚJO JÚNIOR (2007) propõe o controle da quantidade de pentanos presentes no GLP por meio da determinação inteligente dos *setpoints* de controladores presentes na instrumentação da coluna de destilação (desbutanizadora) através do sistema *fuzzy*. O trabalho utiliza um modelo inferencial *online* por RNA de múltiplas camadas para inferir o teor de pentanos. O controle por *fuzzy* proposto consegue controlar o valor da fração de IC5 por vários períodos com um nível satisfatório de confiabilidade.

## 2.3 Considerações Finais

Como foi visto, são inúmeras as aplicações de modelos inferenciais para controle de qualidade (especificação) e melhoria de um processo. É vasta a quantidade de trabalhos citados na literatura que utilizam modelos empíricos baseados nos dados históricos do processo, utilizados muitas das vezes, segundo os autores, por conta da complexidade do uso de modelos fenomenológicos.

Felizmente, a referida complexidade é cada vez menos um fator limitante, devido à evolução que se tem visto no poder computacional e nas ferramentas de solução de equações algébricas e/ou diferenciais (MENDES *et al.*, 2010). O tempo para desenvolver esses modelos também não é impeditivo, pois existem ferramentas de simulação disponíveis com interface simples e modular, que permitem modelar componentes industriais complexos de maneira rápida e fidedigna.<sup>1</sup>

Para isto, é proposta uma nova modelagem para estimar as composições de uma coluna de destilação multicomponente. Diferente do que foi visto na literatura, esta nova abordagem não é baseada em dados históricos e também não se trata de um modelo rigoroso, mas busca utilizar as vantagens desses modelos conhecidos. A partir do conhecimento e simplificação do processo de fracionamento em uma coluna de destilação multicomponente, a nova metodologia fornece elevado poder de extrapolação e significativa simplicidade no seu desenvolvimento, gerando menor tempo necessário para o seu desenvolvimento.

Portanto, o desafio deste trabalho foi desenvolver um sensor virtual com a acurácia e o poder extrapolativo dos modelos fenomenológicos sem comprometer a rapidez de execução e a confiabilidade exigidas para essa aplicação. Como é visto nos capítulos a seguir, o desenvolvimento de um modelo fenomenológico simplificado permitiu alcançar todos esses requisitos satisfatoriamente.

---

<sup>1</sup>Mais detalhes sobre um desses simuladores são encontrados no Capítulo 4.

# Capítulo 3

## Estudo de Caso da Desbutanizadora

Neste capítulo é apresentado uma breve descrição da Unidade de Processamento de Gás Natural da PETROBRAS na qual faz parte a coluna de destilação desbutanizadora. Localizado no estado do Espírito Santo (ES), a UPGN se apresenta como uma planta bem instrumentada e adequada para a verificação das estimativas das especificações dos produtos através do modelo de inferência proposto. Além disso, serão apresentadas condições de operação dos analisadores em linha disponíveis na planta e o método utilizado para estimativa da Pressão de Vapor Reid do processo real. Ao final do capítulo, será descrita a programação de testes utilizados para análise do modelo simplificado por *flash*.

### 3.1 Processamento de Gás Natural

A Unidade de Processamento de Gás Natural em estudo tem como objetivos obter a especificação dos seus produtos e garantir o processamento do gás natural. Este gás costuma ser oriundo na forma de gás associado ao petróleo, vindo das plataformas.

A UPGN é composta por três torres de destilação no seu processo: a torre desmetanizadora (T-01), a desetanizadora (T-02) e a desbutanizadora (T-03). Os produtos obtidos na etapa do fracionamento da planta são:

- Gás residual (C1) - Topo da desmetanizadora;
- Gás combustível (C2) - Topo da desetanizadora;
- Gás Líquido de Petróleo (GLP) (C3 e C4) - Topo da desbutanizadora;
- C5+ - Fundo da desbutanizadora.

Trata-se de uma planta com processo do tipo turbo-expansão. A liquefação dos componentes mais pesados do gás natural é obtida a partir de uma caixa-fria e da expansão do gás em um turbo-expansor. No caso do processamento do gás com alto teor de pesados, a unidade conta ainda com um ciclo de refrigeração a propano, com o intuito de não comprometer o desempenho da etapa de expansão do gás natural no turbo-expansor.

Inicialmente, o gás natural de carga é resfriado e desidratado para evitar a formação de hidratos, passa então pelo turbo-expansor e atinge temperaturas muito baixas. A carga segue para a torre T-01 como Líquido de Gás Natural (LGN), a qual produz o gás rico em metano no topo da torre (gás residual) e o condensado de LGN C2+ no fundo da torre.

O gás residual com baixa temperatura segue pela caixa-fria (trocador de calor de placas), sendo o principal responsável pelo resfriamento da carga. Posteriormente, o gás residual passa para a sucção do compressor do turbo-expansor e é encaminhado para o compressor de gás de venda.

Conforme o esquema da Figura 3.1, o gás residual é o primeiro produto a ser obtido, sendo retirado no topo da desmetanizadora (T-01). O condensado de LGN rico em C2+ no fundo da T-01 segue como carga para a torre desetanizadora (T-02), a qual produz etano no produto de topo (gás combustível) e LGN rico em C3+ no fundo. Esta corrente de fundo segue como carga para a desbutanizadora, a qual é responsável por produzir GLP (rico em C3 e C4) no topo e a nafta leve (rica em C5+) como produto de fundo.

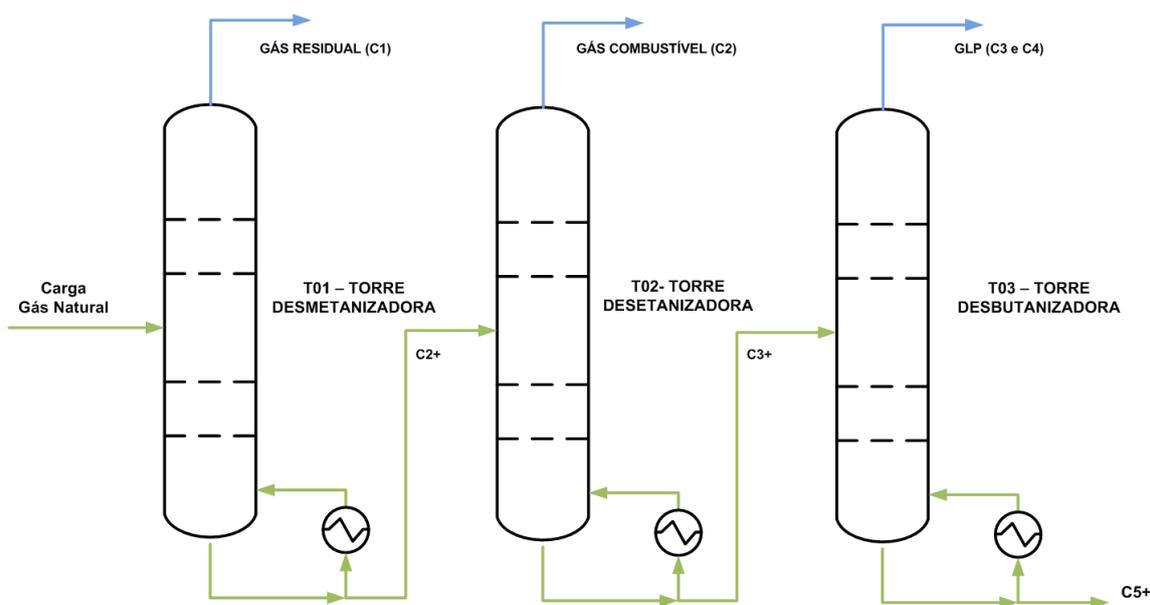


Figura 3.1: Fluxograma simplificado de uma UPGN.

## 3.2 Torre Desbutanizadora

O objetivo da Unidade Desbutanizadora (T-03) é processar o líquido do fundo da torre desetanizadora (T-02) de modo a produzir o GLP (mistura de propano/butano) e a gasolina natural (C5+) que atendam às especificações necessárias.

Neste trabalho foi estudada uma coluna de destilação com 36 bandejas valvuladas, composta por um condensador total e um refeedor parcial. A corrente líquida de C3+ vinda do fundo da torre T-02 passa por um aquecedor de carga da torre desbutanizadora e entra no 11º prato da torre (numeração crescente a partir do topo da torre). A corrente de fundo flui para o refeedor que é um trocador casco tubo que opera com C5+ no lado casco e óleo térmico no lado dos tubos. O vapor do topo da torre desbutanizadora é condensado totalmente no condensador a ar ambiente (*air cooler*). A corrente de topo condensada segue para o vaso acumulador para então ser bombeado. Após a passagem pela bomba, o líquido é dividido em três correntes:

- Vazão de refluxo no prato superior da torre T-03;
- Vazão de recirculação para a carga da torre T-03, a jusante do aquecedor de carga;
- Vazão de GLP que segue para estocagem.

A carga da torre desbutanizadora possui análise cromatográfica a um período de aproximadamente 11 minutos. Sua análise molar compreende os seguintes componentes: C2 (etano), C3 (propano), iC4 (iso-butano), nC4 (n-butano), iC5 (isopentano), nC5 (n-pentano) e C6+ (demais pesados). Um desenho simplificado da torre desbutanizadora estudada encontra-se na Figura 3.2. As principais malhas de controle envolvidas no processo são:

- Controle de nível de líquido da torre é controlado em cascata com o controle da vazão de saída do C5+;
- Controle de nível de líquido do vaso acumulador de topo que é controlado em cascata com o controle da vazão de saída de GLP;
- Controle na vazão de refluxo direto pela válvula;
- Controle de pressão de topo através da vazão de gás para o *flare* e da vazão de *bypass* do *aircooler*;
- Controle de temperatura do prato sensível em cascata com o controle da vazão de óleo térmico do refeedor;

- Controle na vazão de recirculação de GLP para a carga da torre controlado direto por uma válvula.

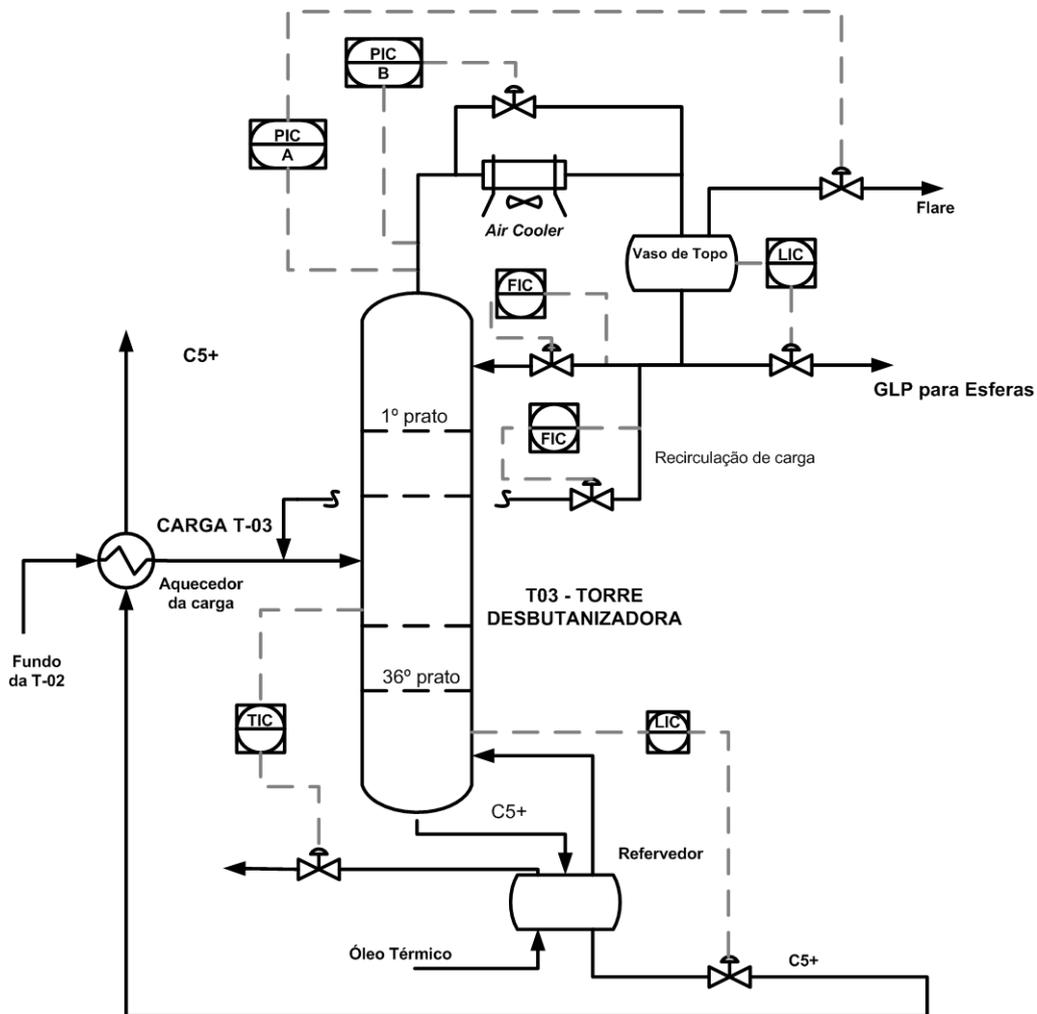


Figura 3.2: Ilustração da torre desbutanizadora e suas malhas de controle.

### 3.2.1 Especificação e análises dos produtos

O GLP é armazenado em esferas e posteriormente vendido para consumo doméstico como gás de cozinha. Sua produção possui um importante papel econômico para a planta, sendo o principal produto da unidade.

Um das principais especificações do GLP é o teor de etano com o valor máximo em 11% volumétrico, sendo os resultados expressos em volume de etano/volume da fase líquida. Outra especificação a ser respeitada é a razão de C2/C5 (etano/pentanos). Nos casos em que esta razão seja inferior a 16, o limite do teor de etano pode ser estendido para 14% vol. na composição do GLP.

A especificação do teor de pentanos no GLP é feita a partir da soma de iC5 e nC5 com valor médio em 1% molar em períodos de regime estacionário. Esta especificação é consequência direta do fracionamento obtido na torre desbutanizadora já que o fracionamento está em butanos e pentanos. O teor de etano do GLP é consequência do fracionamento nas torres anteriores (desmetanizadora e desetanizadora) à desbutanizadora, com cortes de composição entre os componentes mais leves.

As análises do GLP são obtidas por cromatografia gasosa em períodos que variam de 17 a 23 minutos. As análises são obtidas em unidades de % molar dos seguintes componentes: C2 (etano), C3 (propano), iC4 (iso-butano), nC4 (n-butano), iC5 (iso-pentano), nC5 (n-pentano) e C6+ (demais pesados).

A corrente de C5+ é chamada também de Nafta leve que sendo utilizada como gasolina natural em outras unidades de processo. A principal especificação é a Pressão de Vapor Reid que é a pressão de vapor a 37,8 °C. O valor máximo permitido de acordo com as condições atuais de carga da unidade é de 15 psi.

As análises do C5+ são obtidas por cromatografia em períodos que variam de 4 a 6 minutos. As análises são obtidas em unidades de % molar dos seguintes componentes: C3 (propano), iC4 (iso-butano), nC4 (n-butano), iC5 (iso-pentano), nC5 (n-pentano) e C6+ (demais pesados).

### 3.2.2 Estimativa da PVR da planta

Normalmente, o fracionamento do LGN na torre desbutanizadora tem como objetivo produzir GLP devido a sua maior importância econômica. Assim, o produto de fundo da torre é enviado para tanques de estocagem e pode ser utilizado em injeções de correntes de petróleo (VAZ *et al.*, 2008).

Uma forma de monitorar a especificação do produto de fundo da torre desbutanizadora é obter o valor da PVR que trata o nível de volatilidade da gasolina (C5+). Essa especificação é encontrada no estudo de caso a partir de análises de 8 em 8 horas no laboratório da UPGN. Neste caso, a análise de tendência das variáveis é prejudicada devido à baixa taxa de amostragem. Como pode ser observado na Figura 3.3, em um período de 14 dias (01 a 14 de abril de 2013), é possível observar a variabilidade de medição em laboratório.

A taxa de amostragem de laboratório dificulta obter informações da dinâmica da PVR frente às perturbações que ocorrem na coluna de destilação. Para que seja possível a análise da PVR nos testes realizados na torre desbutanizadora, pode-se estimar o valor da PVR da planta a partir da composição obtida no analisador do produto de fundo da torre.

Conforme a definição da PVR, trata-se da pressão de vapor a 37,8°C (100°F). Em

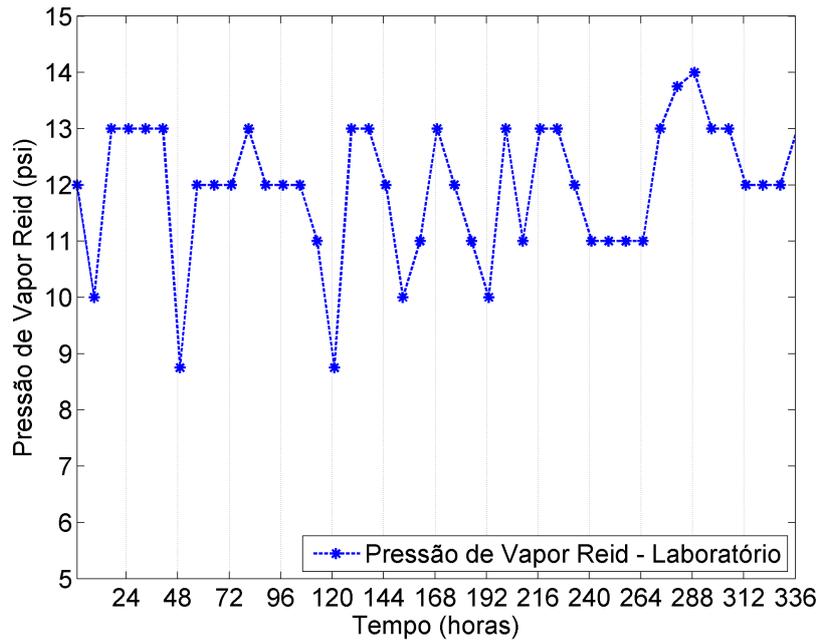


Figura 3.3: Análises da PVR obtidas por laboratório.

sua medição, pelo método ASTM D323-99a, a câmara do líquido do equipamento medidor de pressão de vapor recebe com a amostra resfriada e aquecida a 37,8°C (100°F). A relação volumétrica entre a câmara de vapor e de líquido deve ser de 4:1 (CRUZ, 2003). Neste processo, perdas de uma pequena quantidade de voláteis podem ocorrer, além de haver a presença de vapor de água e ar no espaço confinado da amostra (D323-99A, 1999).

A Pressão de Vapor Verdadeira (TVP, do inglês *True Vapor Pressure*) também é a medida de pressão de equilíbrio do líquido a 37,8°C (100°F). No entanto, ela difere da PVR porque não existe a perda de voláteis e não se considera o efeito do vapor de água presente no ar (D323-99A, 1999). Numericamente, a PVR é menor que a TVP. O cálculo da TVP pode ser obtida por simulação no equilíbrio de líquido com temperatura fixada a partir de um *flash* no ponto de bolha e com leituras de composição obtidas pelo analisador de fundo (C5+) da planta. Como o analisador do C5+ possui uma taxa de amostragem em 4-6 minutos, os valores da TVP estimados são obtidos também nessa mesma taxa de amostragem.

Como os dados de TVP não são iguais à PVR, correlações foram desenvolvidas para relacionar a PVR com a TVP (CRUZ, 2003). Uma forma de obter a estimativa da PVR medida em laboratório é utilizar o cálculo da TVP e converter a PVR pela Equação 3.2.2 (NO.2517, 1989).

$$\ln(TPV) = \left(0,7553 - \frac{413,0}{T + 459,6}\right) S^{0,5} \log_{10}(PVR) - \left(1,854 - \frac{1042}{T + 459,6}\right) S^{0,5} + \left(\frac{2416}{T + 459,6} - 2,013\right) \log_{10}(PVR) - \left(\frac{8742}{T + 459,6}\right) + 15,64 \quad (3.1)$$

Onde TVP e PVR são pressões com valores absolutos em psi e T é a temperatura em °F (100°F na conversão). A variável S é o parâmetro de ajuste para a mistura de petróleo. No caso da nafta leve (9 a 14 psi), utiliza-se o valor 3,5.

No mesmo período apresentado na Figura 3.3, pode-se comparar qualitativamente que o valor estimado da PVR a partir da Equação 3.2.2 foi satisfatório comparado à taxa de amostragem do laboratório. A comparação da PVR de laboratório e a PVR estimada é mostrada na Figura 3.4.

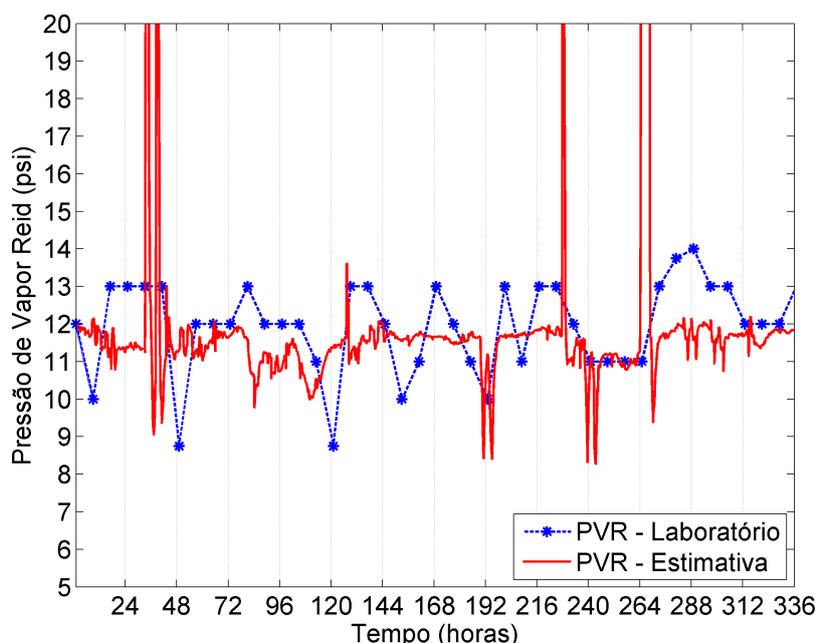


Figura 3.4: Comparação das análises da PVR obtidas por laboratório e por estimativa de TVP.

Os pontos estimados de PVR acima de 15 psi foram períodos de instabilidade da planta, isto é, houve problemas de operação como a falha do forno da planta. Esse efeito é propagado na planta porque os refervedores de cada torre ficam temporariamente sem o óleo térmico aquecido. No caso da torre desbutanizadora, a leitura do teor de butanos com elevados valores levaram a cálculos de PVR muito acima do esperado. Estes períodos, no entanto, não foram utilizados para as análises das inferências com dados da planta.

Neste trabalho, o mesmo cálculo mostrado para a conversão da TVP para PVR

é utilizado com a composição do produto de fundo obtida pelo modelo inferencial. Portanto, o objetivo da utilização da PVR estimada com dados de planta (dados do analisador do C5+, medidos em 4-6 minutos) é obter a sua comparação com a PVR obtida por inferência (medida minuto a minuto) em frequências próximas.

### 3.3 Testes na planta e dados industriais

Dados industriais costumam ser registrados em sistemas históricos de coleta de dados da planta. Muitas vezes estes sistemas armazenam os dados industriais após processos de compressão e exceção para aumentar a capacidade de armazenamento dos dados. Com isso, as variáveis de processo podem sofrer perda das informações. Além disso, existe também a dificuldade de obter períodos com variações significativas das variáveis de entrada do modelo em torno do ponto operacional.

Uma forma de obter bons dados industriais é a utilização de períodos de testes na unidade (DE CAMPOS *et al.*, 2013). Este tipo de planejamento de testes na torre foi realizado com o objetivo de levantar modelos de identificação do processo para aplicação de controle preditivo. Desta forma, os dados desses períodos de testes foram armazenados na forma bruta com informações válidas, configurando também em dados industriais de boa qualidade e com variações significativas em relação ao ponto operacional típico.

Cada período de teste, compreendido no período de 08 a 13 de abril de 2013, foi utilizado para a validação dos modelos propostos para a inferência das especificações do GLP e da Nafta. Em uma análise preliminar dos dados industriais, foi observada a direção das variáveis de saída para cada variação de *setpoint* de uma determinada variável manipulada. Na Figura 3.5, é possível verificar todas as variações do teor de pentanos do GLP (cromatógrafo) quando sujeito a uma mudança no *setpoint* em cada teste realizado.

Alterações no *setpoint* das variáveis manipuladas foram realizadas dentro do limite operacional da planta, com exceção da temperatura do prato de controle que obteve variações muito distantes do normalmente realizado. Ainda assim, toda a informação quanto à dinâmica da variável de saída foi utilizada e comparada com a resposta estimada pelo modelo proposto, tanto o estacionário quanto o dinâmico.

As principais variáveis do controle regulatório da torre utilizados para testes tiveram variações de duas ondas quadradas e com magnitude de *setpoint* específica para cada variável:

- Vazão de refluxo (480 minutos): variação de  $4 \text{ m}^3/h$ ;
- Vazão de recirculação de GLP (960 minutos): variação de  $10 \text{ m}^3/h$ ;

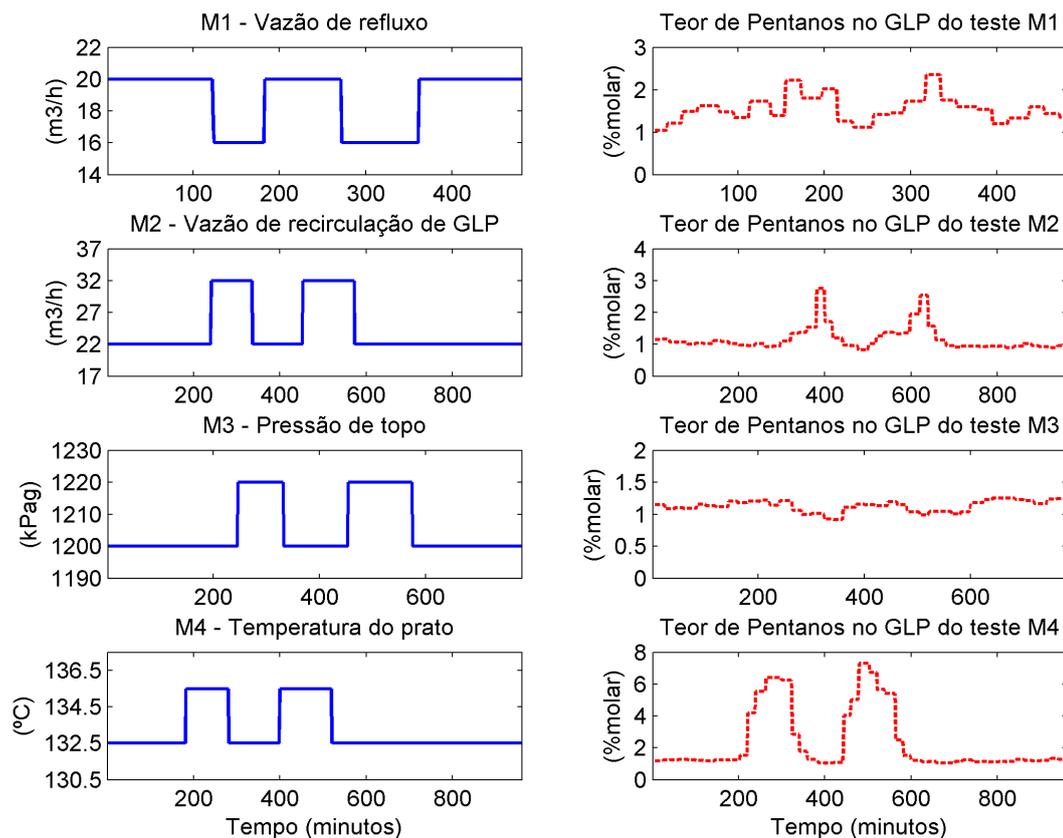


Figura 3.5: Esquemas de testes das variáveis manipuladas e a resposta do analisador de GLP.

- Pressão de topo da torre (780 minutos): variação de 20 kPa;
- Temperatura do prato de controle (960 minutos): variação de 3 °C;

Todos os testes foram obtidos com sucesso na torre desbutanizadora da UPGN sem que houvesse variações significativas de vazão de gás natural da planta ou variações significativas da riqueza da carga. Em geral, também pode-se considerar um período com dados confiáveis devido a boa confiabilidade dos instrumentos da planta.

### 3.4 Qualidade das inferências

O R-quadrado, também conhecido como coeficiente de determinação ( $R^2$ ), é uma medida estatística que indica o quanto o modelo consegue se aproximar dos valores medidos de processo (referência). Sua variação é de 0 a 100%, sendo 0% um valor quando o modelo não explica a variabilidade (ou tendência) dos dados de resposta

com a referência e 100%, quando o modelo explica toda a variabilidade dos dados de resposta em relação à referência.

Para completar a avaliação da qualidade da inferência, foi calculado também os resíduos dos valores inferidos através da RMSE, como mostrado na Equação (3.2).

**Equação do RMSE:**

$$\sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (X_i^{medido} - X_i^{estimado})^2} \quad (3.2)$$

O RMSE é calculado a partir da raiz quadrada da média da soma dos quadrados da diferença entre o valor estimado ( $X_i^{estimado}$ ) e o valor do analisador ( $X_i^{medido}$ ) de um conjunto  $n$  de pontos totais.

### 3.5 Considerações Finais

O estudo de caso a partir de uma torre desbutanizadora permite que análises do produto de topo e fundo sejam obtidas, pois ambas as correntes são produtos importantes numa UPGN.

Os testes realizados nesta torre fazem parte do conjunto de testes realizados para a identificação do processo em malha fechada. Essas informações obtidas por variações dos *setpoints* das principais malhas de controle da torre, uma vez identificadas, podem ser utilizadas na aplicação do Controle Preditivo Multivariável (CPM).

No caso real da UPGN, todos os dados de planta apresentados foram utilizados para a etapa das inferências das especificações dos produtos desta torre. A partir da metodologia do presente trabalho para inferência da torre desbutanizadora, informações das análises em taxa de amostragem de minuto a minuto possibilitaram significativos avanços de implementação do CPM. Há aproximadamente um ano, o novo procedimento para inferência de composição tem sido utilizado pela UPGN apresentada como estudo de caso.

No próximo Capítulo, é apresentada a metodologia do modelo simplificado a partir de dois estágios de equilíbrio. Além disso, são detalhadas as etapas utilizadas para a aplicação das simulações estacionárias e dinâmicas a partir dos dados industriais. Todas as análises para o desenvolvimento da metodologia de correção de variáveis a fim aumentar a robustez do modelo proposto, também são mostradas em detalhes.

## Capítulo 4

# Modelagem Simplificada do Processo

O monitoramento da qualidade dos produtos de uma Unidade de Processamento de Gás Natural é essencial para a busca de condições ótimas de processamento. Um modelo simplificado do processo que seja capaz de inferir as principais especificações dos produtos da Unidade, em tempo real, possibilita que estratégias de controle sejam implementadas de forma confiável e robusta.

Neste trabalho, um novo modelo foi desenvolvido para tratar da modelagem de coluna de destilação de forma simplificada a fim de prever as inferências em tempos de amostragem elevada. A simplificação da modelagem é obtida a partir do uso de dois estágios de equilíbrio e conhecimento prévio dos componentes chaves do fracionamento. Esta simplificação permite também que seu modelo seja inserido num processo de correção de variáveis de forma a obter maior robustez na sua implementação.

Embora o modelo estático apresente vantagens para previsões de composições de produtos destilados como tempo de execução muito rápido e tempo de desenvolvimento menor, este trabalho também desenvolve a modelagem dinâmica a fim de fornecer uma previsão alternativa e mais próxima do caso real. Para isto, o modelo dinâmico necessita uma etapa de ajuste de dois parâmetros no modelo dinâmico. A utilização do modelo mais adequado em tempo real dependerá do processo a ser aplicado.

Neste capítulo, o desenvolvimento do modelo inferencial simplificado por estágios de equilíbrio é apresentado. Todo o equacionamento matemático utilizado nos modelos estacionários e dinâmicos são mostrados nas Seções 4.2 e 4.3. Nestas seções, também são apresentadas as etapas de aplicação dos modelos com testes industriais.

Para maior semelhança com o estudo de caso da UPGN, as informações da torre desbutanizadora necessárias para os ajustes da modelagem serão analisadas e discutidas ao longo do capítulo. Porém, a metodologia apresentada pode ser aplicada

em qualquer coluna de destilação.

## 4.1 Desenvolvimento da Modelagem Simplificada por *Flash*

Daqui em diante, o modelo simplificado por *flash* será referido por MSF. O esquema da Figura 4.1 mostra, de forma simplificada, a representação da torre desbutanizadora a partir de dois estágios de equilíbrio. A seção de absorção da torre, composta pelos estágios acima da entrada da carga, é representada por um *flash* em condições de ponto de orvalho nas temperatura e pressão de topo da coluna. No caso seção retificadora da torre, composta pelos estágios abaixo da entrada da carga, utiliza-se um *flash* em condições de ponto de bolha nas temperatura e pressão de fundo da coluna.

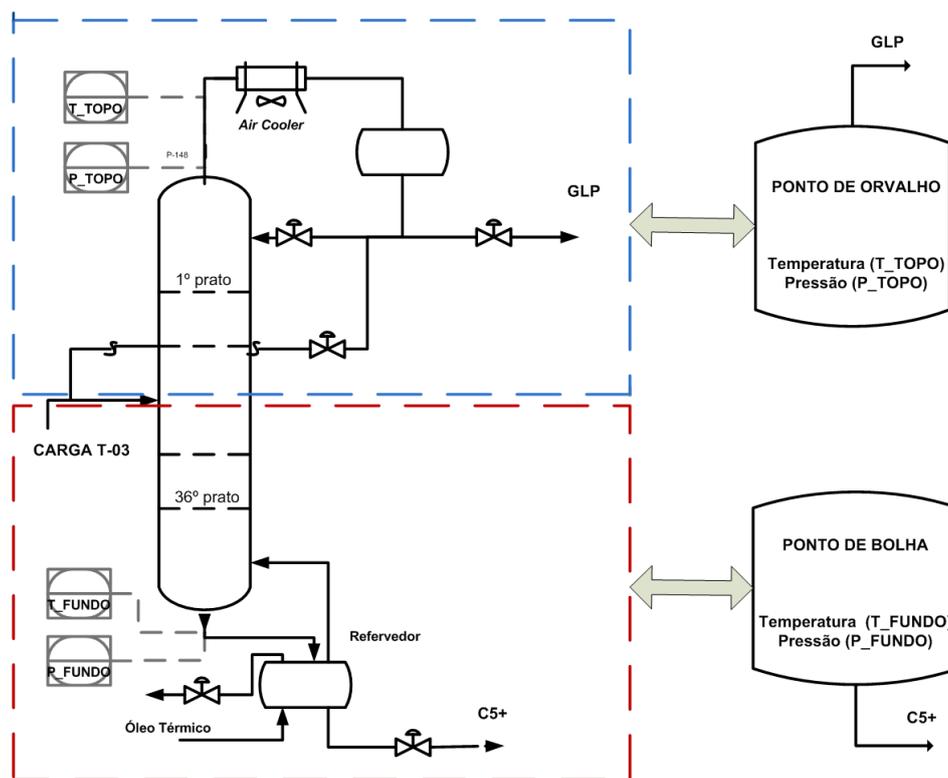


Figura 4.1: Esquema da torre desbutanizadora e os *flashes* de topo e fundo.

Nota-se que as temperaturas e pressões utilizadas em cada *flash*, são indicadas nas correntes de saída de vapor no topo da torre e da corrente de saída de líquido no fundo da torre. Essas variáveis são utilizadas como especificações dos *flashes* e são disponíveis no processo real.

O equacionamento utilizado para cada *flash* no modelo simplificado é detalhado para o modelo estacionário na Seção 4.2 e para o modelo dinâmico na Seção 4.3.

### 4.1.1 Estrutura da modelagem

O modelo simplificado por dois estágios foi baseado na ideia do fracionamento de uma mistura multicomponente a partir da separação de dois componentes de interesse: chave leve e chave pesado. Para isto, a estrutura da modelagem apresenta etapas de cálculo na seguinte ordem:

- Leitura das variáveis de entrada em condições molares (vazão molar da carga e composição molar da carga), mássicas ou volumétricas, além das variáveis intensivas (temperatura de topo e fundo da torre, pressão de topo e fundo da torre);
- A partir do conhecimento da vazão molar de cada componente da carga (vazão e composição molares), as correntes são separadas em quatro principais correntes: Leves (componentes mais leves que o chave leve), chave leve, chave pesado e Pesados (componentes mais pesados que o chave pesado);
- A corrente de Leves e a de Pesados, são destinados a entrada do estágio de equilíbrio de topo e fundo, respectivamente;
- Tanto a corrente de chave leve como a de chave pesado são distribuídos para os dois estágios de equilíbrio, respeitando a quantidade de massa disponível em cada corrente (a diferença do que é destinado ao primeiro estágio é obtida no segundo estágio).
- Em cada estágio de equilíbrio (*flash*), é especificada a condição de ponto de orvalho (*flash* de topo) ou ponto de bolha (*flash* de fundo) a temperatura e pressão estabelecidas;
- Cada *flash* calcula a quantidade de chave leve e chave pesado necessária para atingir o equilíbrio químico.

A modelagem proposta necessita de um método numérico capaz de calcular a quantidade de chave leve e chave pesado para cada *flash* com interação até as equações dos dois estágios de equilíbrio sejam satisfeitas. Neste trabalho, foi utilizado o método numérico *Sundials* para equações algébricas não lineares e o método *Dassl* para as equações algébrico-diferenciais.

Em um fracionamento com muitos componentes, a escolha dos componentes chaves pode ser muito complexa, pois para cada chave de interesse, podem haver dois ou mais componentes em sua composição. Para simplificar o problema, é possível utilizar o conhecimento prévio do processo a ser modelado. Com isso, é necessário saber o perfil de composição típica em cada produto da torre de destilação.

Na torre desbutanizadora utilizada como estudo de caso, os componentes de interesse do GLP (produto de topo) são: C2 (etano), C3 (propano) e C4s (isobutano e n-butano). No caso da nafta (produto de fundo), os componentes de interesse são: C5s (iso-pentano e n-pentano) e componentes mais pesados (C6+). A partir do histórico de dados dos analisadores em linha da torre desbutanizadora, foi possível observar que:

- Os principais componentes do chave leve são os teores de butanos (IC4 e NC4);
- Os principais componentes do chave pesado são os teores de pentanos (IC5 e NC5);
- Todos os componentes mais voláteis que os componentes do chave leve são direcionados ao produto de topo da torre (C2 e C3);
- Todos os componentes menos voláteis que os componentes do chave pesado são direcionados ao produto de fundo da torre (C6+).

Assim, a simplificação do problema foi dada pela consideração de que os componentes mais voláteis que o chave leve aparecem somente no produto de topo e os componentes menos voláteis que o chave pesado, aparecem somente no produto de fundo. Desta forma, a destilação multicomponente fica reduzida a separação de apenas dois elementos de interesse: chave leve e chave pesado. O esquema simplificado desse procedimento pode ser visualizado na Figura 4.2.

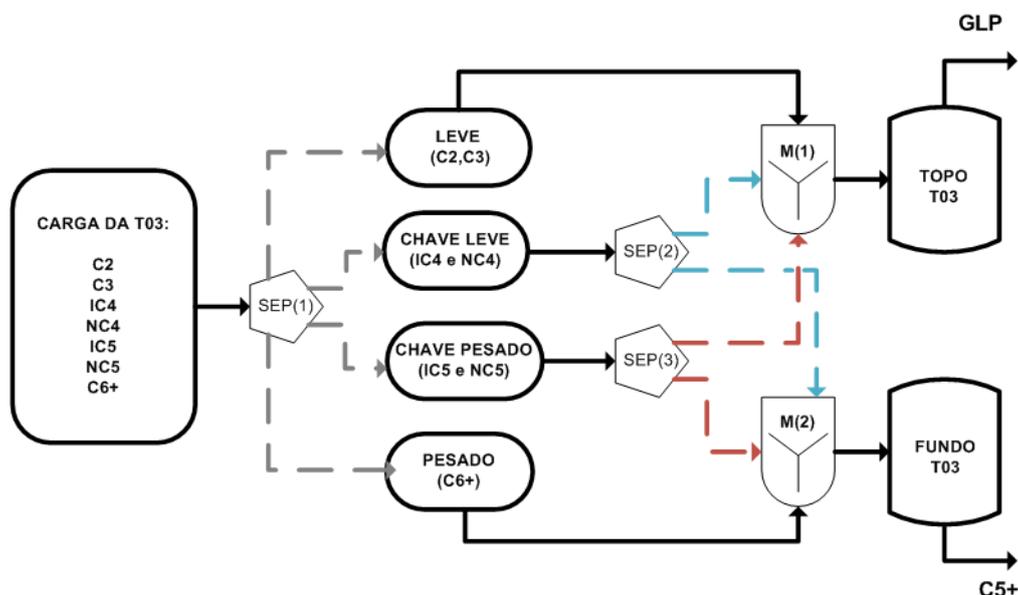


Figura 4.2: Fluxograma simplificado do MSF.

De acordo com o esquema da Figura 4.2, a carga da torre, composta a partir do etano (C2) até o teor de mais pesados (C6+), é separada em quatro correntes:

“leve”, “chave leve”, “chave pesado” e “pesado”. O *flash* de topo em condição de ponto de orvalho, com temperatura e pressão conhecidas, é alimentado diretamente pelo misturador M(1). Nesse misturador, há a entrada direta da corrente de “leves” composta pelo teor de etano e propano da carga da torre. Da mesma forma, o *flash* de fundo em condição de ponto de bolha, com temperatura e pressão conhecidas, é alimentado pela corrente de “pesados” composto pelo teor de hexanos e componentes mais pesados provenientes da carga da torre.

Finalmente, o procedimento de geração das inferências simplifica-se em obter o teor de butanos (iC4 e nC4) que pode ser admitido no fundo e o teor de pentanos (iC5 e nC5) que pode ser admitido no topo, respeitando as condições de equilíbrio determinadas pelos *flashes* de topo e fundo. Este procedimento é detalhado a seguir.

Neste trabalho, o MSF foi desenvolvido no simulador de processos *Environment for Modeling, Simulation and Optimization* (EMSO). Por fornecer uma linguagem aberta ao usuário, este *software* permitiu que toda a estrutura do MSF fosse facilmente implementada.

O modelo termodinâmico foi obtido pela equação de estado de Peng-Robinson, sendo este já inserido no pacote termodinâmico *VRTherm*, encontrado no simulador EMSO. Assim, todas as propriedades físicas e termodinâmicas dos gases e líquidos foram calculadas a partir de um modelo adequado para mistura de hidrocarbonetos leves.

#### 4.1.2 Variáveis de entrada

O MSF conta com dois estágios de equilíbrio de separação, um para o ponto de orvalho e outro para o ponto de bolha. Para que a estrutura obtenha o número de graus de liberdade necessários para o cálculo, é necessário que algumas informações de processo sejam fornecidas. Assim, as variáveis necessárias para o modelo são:

- Composição da carga de entrada;
- Vazão da carga de entrada (molar, mássica ou volumétrica);
- Temperatura de topo (saída de vapor do prato superior da torre);
- Temperatura de fundo (saída de líquido do vaso de fundo da torre);
- Pressão de topo;
- Pressão de fundo ou diferença de pressão da coluna de destilação.

No caso do MSF estacionário, a variável de vazão da carga de entrada pode ser utilizada com qualquer valor fixado, sem que envolva qualquer impacto nas inferências. Em termos gerais, o modelo estacionário não depende desta variável, pois as

equações do fracionamento estacionário só dependem das condições termodinâmicas de equilíbrio nos *flashes*.

Já no caso do MSF dinâmico, a vazão da carga de entrada influencia a dinâmica das inferências, pois o equacionamento do modelo dinâmico depende das vazões calculadas dos produtos. Assim, pelo balanço de massa imposto, as vazões dos produtos variam de acordo com o valor de vazão de entrada alimentada ao modelo.

### 4.1.3 Definição do chave leve e chave pesado

A definição do chave leve e do chave pesado são escolhas que podem mudar significativamente as respostas do MSF. No caso da torre desbutanizadora, o mais adequado foi escolher dois componentes para o chave leve e para o chave pesado de acordo com as informações cromatográficas típicas da planta. No entanto, é necessário também avaliar a proporção destes dois componentes para cada chave de seleção do modelo.

No caso do chave leve, composto pelo teor de butanos, o mais adequado é saber a proporção típica encontrada no produto de fundo. Da mesma forma, para o chave pesado, é necessário saber a proporção típica existente entre o teor de iC5 e de nC5 no produto de topo. Assim, para maior aproximação da inferência com os dados reais medidos, utiliza-se a proporção dos componentes utilizados no chave leve e chave pesado semelhantes ao que é observado nos analisadores.

#### Definição do chave leve

A nafta (produto de fundo) costuma ser especificada apenas pelo valor da PVR e conta com as análises de um cromatógrafo em linha para o monitoramento de composição do produto. No entanto, o analisador em linha disponível não costuma apresentar uma medição significativa do teor de butanos, dificultando muito o conhecimento da proporção típica de butanos na nafta.

Desta forma, partindo da premissa que praticamente todo o teor de butanos costuma ser obtido no produto de topo, a proporção de butanos (iC4/nC4) escolhida foi obtida com a mesma proporção da carga de entrada da torre. Esta premissa pode gerar um desvio absoluto com o valor medido da PVR, porém não terá um impacto significativo no seu cálculo, pois a PVR depende de toda a composição do produto de fundo, composta por uma pequena fração de butanos.

#### Definição do chave pesado

O GLP é um produto analisado detalhadamente através de um cromatógrafo em linha, gerando análises do C2 ao C6+. Para ilustrar a razão típica do teor de pentanos, um período em regime estacionário de cinco horas foi analisado. Como

pode ser observado na Figura 4.3, o valor de razão dos pentanos ( $nC5/iC5$ ) tem um valor médio de 0,30 nas análises de cromatográficas de GLP.

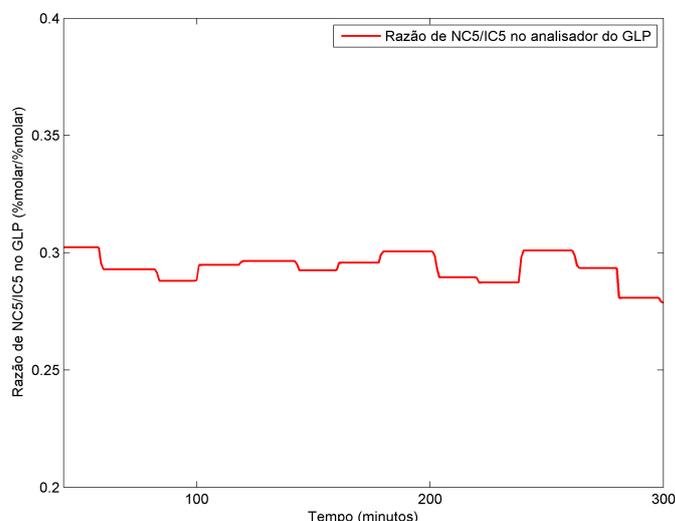


Figura 4.3: Gráfico da razão molar de pentanos ( $nC5/iC5$ ) no cromatógrafo do GLP.

O ajuste da proporção entre os componentes de cada chave de interesse torna-se um fator importante de parametrização do MSF. Para obter uma maior acurácia na inferência de cada componente individual com os dados medidos de planta, é necessário aproximar à proporção típica encontrada nos produtos.

Por exemplo, o teor total de pentanos pode ser inferido de forma satisfatória mesmo que a razão entre o  $iC5$  e  $nC5$  seja diferente do valor típico do analisador. No entanto, se verificado somente os componentes individualmente, o desvio absoluto com os dados medidos de cada componente será maior que o desvio observado no total de pentanos. O mais adequado, neste caso, é utilizar a proporção dos componentes de cada chave de interesse igual ao que é encontrado geralmente nos produtos de interesse.

Neste trabalho, a definição do chave leve e do chave pesado, trata-se uma forma de obter a parametrização do MSF para um melhor ajuste com os dados industriais. Este ajuste foi válido tanto no modelo estático quanto no dinâmico.

## 4.2 Modelo Estacionário

O modelo estacionário foi desenvolvido utilizando as equações termodinâmicas e conservação de massa e energia no estágio de equilíbrio para o cálculo de ponto de bolha e de ponto de orvalho. As equações do estágio de equilíbrio estão disponíveis na biblioteca EML - EMSO Model Library do simulador EMSO, sendo desenvolvidos

por STAUDT (2007) e utilizados em seu trabalho como estágio de equilíbrio de pratos de coluna de destilação. Algumas das considerações simplificadoras são:

- O líquido e o vapor estão idealmente misturados;
- A pressão e a temperatura no estágio são uniformes.

Nesta modelagem, as dimensões dos equipamentos do processo não são utilizadas, pois considera-se que o tempo necessário para o sistema entrar em equilíbrio é instantâneo.

As condições de equilíbrio são as de equilíbrio mecânico e térmico são expressas pelas Equações (4.1) e (4.2), respectivamente,

$$P^L = P^V = P \quad (4.1)$$

$$T^L = T^V = T \quad (4.2)$$

em que  $P^L$ ,  $P^V$  e  $P$  são as pressões de líquido, de vapor e pressão de equilíbrio *flash*, respectivamente.  $T^L$ ,  $T^V$  e  $T$  são as temperaturas de líquido, de vapor e temperatura do *flash*, respectivamente.

O equilíbrio químico é obtido pela igualdade da energia de Gibbs que pode ser representada através do coeficiente de fugacidade líquido ( $\phi_i^L$ ) e de vapor ( $\phi_i^V$ ) para cada componente  $i$ , Equação (4.3). As composições  $x_i$  e  $y_i$  são as composições dos componentes  $i$  das correntes líquidas e vapor do sistema, respectivamente.

$$\phi_i^L \cdot x_i = \phi_i^V \cdot y_i \quad (4.3)$$

$$\phi_i^L = f(T^L, P^L, x_i) \quad (4.4)$$

$$\phi_i^V = f(T^V, P^V, y_i) \quad (4.5)$$

em que  $i = 1, 2, \dots, NComp$ .

Dada uma carga molar representada por  $F$  de composição  $z_i$  com as vazões de saída de vapor ( $F^V$ ) e de líquido ( $F^L$ ), tem-se as seguintes equações do balanço de massa global e por componente:

**Balanço de massa global:**

$$F = F^V + F^L \quad (4.6)$$

**Balço de massa por componente:**

$$F \cdot z_i = F^V \cdot y_i + F^L \cdot x_i \quad (4.7)$$

**Restriço da fraço molar:**

$$\sum x_i = \sum y_i \quad (4.8)$$

A partir do balço de energia é possível calcular a carga térmica  $Q$  do sistema através dos valores de entalpias envolvidas em cada fase:  $h^V$ ,  $h^L$  e  $h$  que são as entalpias da corrente de vapor, de líquido e da carga, respectivamente. A temperatura e pressão da carga são representadas por  $T^F$  e  $P^F$ , respectivamente.

**Balço de energia:**

$$F \cdot h + Q = F^V \cdot h^V + F^L \cdot h^L \quad (4.9)$$

$$h = f(T^F, P^F, z_1, z_2, \dots, z_C) \quad (4.10)$$

$$h^V = f(T, P, y_1, y_2, \dots, y_C) \quad (4.11)$$

$$h^L = f(T, P, x_1, x_2, \dots, x_C) \quad (4.12)$$

Finalmente, especifica-se o valor de fraço de vaporização  $v$ , Equação 4.13, que determina a condição de vapor do *flash*.

$$F^V = F \cdot v \quad (4.13)$$

em que:

$v = 0 \rightarrow$  Ponto de bolha

$v = 1 \rightarrow$  Ponto de orvalho

### 4.2.1 Análise de consistência

Conhecidas as condições de carga do sistema de separação por *flash*, verifica-se a análise de consistência do modelo. As variáveis de carga que devem ser definidas no problema são:

- Vazão molar ( $F$ );
- Temperatura ( $T^F$ );
- Pressão ( $P^F$ );
- Composição ( $z_i$ );

Na Tabela 4.1 são resumidas as variáveis desconhecidas e as equações e especificações disponíveis na modelagem de um *flash*.

Tabela 4.1: Análise de Consistência do modelo de *flash*.

Variáveis desconhecidas	$F^L, F^V, T^L, P^L, T^V, P^V, Q, h^V, h^L, v, h$ $z_i, x_i, y_i, \phi_i^L, \phi_i^V : (5C + 11)$
Especificações	$z_i$ e $v : C + 1$
Número de equações	[4.1],[4.2], [4.6],[4.9], [4.8] [4.10],[4.11],[4.12],[4.13]: (9)
“C” equações nos componentes $i$	[4.3], [4.4], [4.5], [4.7] ( $4C$ )
Grau de liberdade	$(5C + 11) - (4C) - (9) - (C + 1) = 1$

Normalmente, as variáveis recomendadas para fechar o grau de liberdade do *flash* com a fração de vaporização especificada podem ser: temperatura, pressão ou carga térmica. No entanto, para obter a composição da saída do *flash*, serão utilizados as variáveis de pressão e temperatura como especificações do problema. Deste modo, a especificação de um componente passa a ser a incógnita do *flash* na condição de ponto de bolha ou de orvalho.

Como a estrutura do MSF conta com dois equipamentos de *flash*, dois graus de liberdade ficam disponíveis. Assim, as composições dos componentes chave leve e chave pesado ficam disponíveis como as incógnitas do problema geral.

O método para o cálculo das equações algébricas não lineares utilizado no EMSO foi o *Sundials* (*SU*ite of *N*onlinear and *D*ifferential/*A*lgebraic equation *S*olvers).

## 4.2.2 Etapas para aplicação do modelo estacionário

Antes da simulação do MSF, verifica-se a necessidade de obter os dados de entrada e os valores dos parâmetros de chave leve (CL) e chave pesado (CP), como descrito nas Seções 4.1.1 e 4.1.3, respectivamente.

A aplicação do MSF no modo estacionário foi feita a partir de algumas etapas como mostrado no fluxograma da Figura 4.4. Neste fluxograma, todas as caixas destacadas em hachurado são etapas que podem ser ajustadas e dependem dos dados industriais disponíveis.

Após a predição do CL e CP nos produtos da torre, há a necessidade de ajustar as predições do Estado Estacionário (EE) com um atraso para o produto de topo e de fundo. Este atraso é necessário porque o modelo estático prevê as inferências sem considerar a dinâmica do processo. Isto é, as inferências estacionárias apresentam os resultados antecipadamente ao tempo em que são observadas as análises dos produtos. Com isso, o atraso estacionário será utilizado para compreender os possíveis efeitos do processo real nas análises de referência:

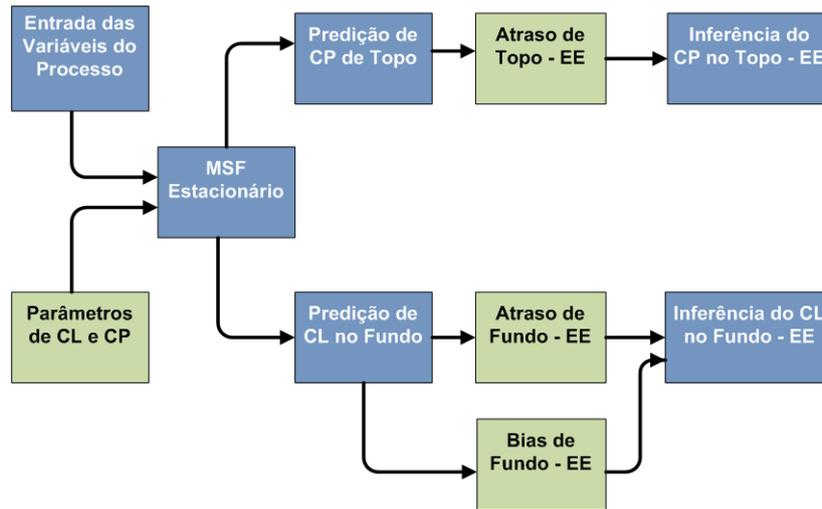


Figura 4.4: Fluxograma das etapas de aplicação do MSF estacionário.

- Dinâmica do processo de fracionamento e transporte (tempo morto do processo);
- Atraso de medição dos analisadores;
- Tempo de residência dos componentes líquidos nos estágios da torre, principalmente dos vasos de acúmulo de líquido dos produtos.

A aplicação do *bias* nas inferências do produto de fundo é utilizada para ajustar os dados inferidos da PVR com os dados medidos na planta. Isso se deve ao fato que a inferência no *flash* de fundo é alimentada com o teor de pesados (C6+) sem o conhecimento exato da distribuição existente do teor de C6+ em C6, C7, C8 e C9, pois essa distribuição de componentes não é medida pelo analisador em linha de carga. O teor de CL no produto de fundo dependerá da temperatura de equilíbrio e a composição de C6+ já aplicada no *flash* de fundo. Isto pode levar a um desvio do valor inferido de CL no produto de fundo com relação à PVR estimada pela composição da planta. Para que a comparação dos resultados seja viável, um *bias* fixo foi estimado e utilizado nas inferências do produto de fundo.

Para obter inferências que considerem a dinâmica intrínseca do processo real, foi proposta a utilização do MSF no modo dinâmico. Na seção a seguir, todos os efeitos dinâmicos do processo são detalhados, mostrando também as etapas necessárias para a sua aplicação com dados industriais.

### 4.3 Modelo Dinâmico

O modelo dinâmico foi obtido a partir da consideração do efeito de *hold up* no vaso de topo e de fundo da coluna de destilação. Desta forma, os produtos apre-

sentam um tempo de residência significativo no seu percurso de fracionamento na coluna até a saída do processo. Além das considerações feitas no modelo estático, as considerações adicionais do modelo dinâmico foram:

- A dinâmica do acúmulo de vapor (*hold up*) é desprezível;
- A dinâmica do acúmulo de líquido (*hold up*) considera o líquido dos pratos da torre e o líquido dos vasos de acúmulo da torre;
- A dinâmica do acúmulo de líquido deve ser estimada para o *flash* de topo (seção de absorção da torre e vaso de acúmulo de topo) e para o *flash* de fundo (seção de retificação da torre);
- Parâmetros do modelo dinâmico compreendem o efeito dinâmico do tempo de residência, atraso de medição e tempo morto do processo.

Na equação dinâmica de balanço de massa no *flash*, Equação (4.14) a variável de *hold up*  $M_i$  que caracteriza o acúmulo molar de cada componente é calculada pelo somatório do acúmulo molar de líquido ( $M^L$ ) e acúmulo molar de vapor ( $M^V$ ).

#### Equação dinâmica do balanço de massa:

$$\frac{dM_i}{dt} = F \cdot z_i - F^L \cdot x_i - F^V \cdot y_i \quad (4.14)$$

em que:

$$M_i = M^L \cdot x_i - M^V \cdot y_i \quad (4.15)$$

No caso em que o *flash* está com a fração vaporizada especificada, obtém-se o ponto de orvalho ( $v = 1, F = F^V$ ) e ponto de bolha ( $v = 0, F = F^L$ ). As equações diferenciais simplificadas são apresentadas para cada condição.

#### Equação dinâmica do balanço de massa no ponto de orvalho:

$$M^V \cdot \frac{dy_i}{dt} = F(z_i - y_i) \quad (4.16)$$

No caso estacionário, isto é, em condição de equilíbrio, o valor de composição de saída do *flash* é igual ao valor de composição de entrada. Assim, a equação de balanço dinâmico pode ser reescrita da seguinte forma:

$$M^V \cdot \frac{dy_i}{dt} = F \cdot (y_i^{EE} - y_i) \quad (4.17)$$

A equação acima pode ser simplificada utilizando o termo do tempo de residência do vapor ( $\tau^V$ ). Este termo é dado pela razão do acúmulo molar de vapor com a vazão molar do processo.

$$\tau^V = \frac{M^V}{F} \quad (4.18)$$

$$\frac{dy_i}{dt} = \frac{y_i^{EE} - y_i}{\tau^V} \quad (4.19)$$

Assim, se o valor de *hold up* molar for considerado constante, a equação passa a depender do tempo de residência que pode variar de acordo com a vazão molar de produto obtida.

De forma semelhante, com a fração vaporizada no valor de  $v = 0$  ( $F = F^L$ ), a equação conta com um tempo de residência do líquido ( $\tau^L$ ) dado pela razão do acúmulo molar de líquido ( $M^L$ ) pela vazão do processo.

### **Equação dinâmica do balanço de massa no ponto de bolha:**

$$\tau^L = \frac{M^L}{F} \quad (4.20)$$

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{x_i^{EE} - x_i}{\tau^L} \quad (4.21)$$

A definição do tempo de residência está diretamente ligado ao dimensionamento do volume de líquido de cada seção da torre e a vazão de produto de saída. Assim, o *hold up* molar apresentado nas Equações (4.18) e (4.20), pode ser obtido mais facilmente através de dados volumétricos.

Apesar do volume de líquido de cada seção da torre compreender os volumes de líquidos dos pratos da torre e do vaso de acúmulo, a estimativa inicial será simplificada utilizando-se o valor do líquido do vaso de acúmulo. Para obter a estimativa inicial do volume de *hold up* para cada *flash*, foi utilizado os volumes dos vasos acumuladores dos produtos, conforme mostrado nas Equações (4.22) e (4.23).

### **Tempos de residência:**

$$\tau^{Topo} = \frac{Vol_{Topo}^L}{Fvol^{GLP}} \quad (4.22)$$

$$\tau^{Fundo} = \frac{Vol_{Fundo}^L}{Fvol^{NAFTA}} \quad (4.23)$$

em que os tempo de residência de topo e fundo são dados por  $\tau^{Topo}$  e  $\tau^{Fundo}$ . Os volumes de líquido (*hold up*) de topo e fundo são representados por  $Vol_{Topo}^L$  e  $Vol_{Fundo}^L$ , respectivamente. As vazões volumétricas de GLP ( $Fvol^{GLP}$ ) e de nafta ( $Fvol^{NAFTA}$ ) são vazões volumétricas nas condições de temperatura e pressão de saída dos produtos.

As mesmas considerações feitas no MSF estacionário para a análise de consistência são válidas no modelo dinâmico. Deste modo, o MSF dinâmico mantém as mesmas especificações do *flash* estacionário, com acréscimo apenas das especificações de  $Vol^{Topo}$  e  $Vol^{Fundo}$ . As variáveis extras obtidas por cálculo do modelo dinâmico são  $\tau^{Topo}$ ,  $\tau^{Fundo}$ ,  $Fvol^{GLP}$  e  $Fvol^{NAFTA}$ .

O método para o cálculo das equações diferenciais algébricas utilizado no EMSO foi o *Dasslc (Differential-Algebraic System Solver in C)*. O método para o cálculo das equações algébricas não lineares utilizado foi o *Sundials*.

### 4.3.1 Definição dos parâmetros dinâmicos

O efeito transiente foi utilizado nas equações diferenciais de balanço de massa utilizando o volume de líquido como um parâmetro do MSF para o ajuste com os dados reais de processo. O volume líquido foi obtido de acordo com as dimensões de cada vaso acumulador de produto e suas respectivas vazões volumétricas de saída.

Desta forma, os volumes de cada vaso de acúmulo foram estimados de acordo com a sua geometria. No caso do vaso de topo, trata-se de um vaso horizontal de raio  $R$  (diâmetro  $D$ ) e comprimento  $L$ , com altura  $H$  variável. No caso do vaso de fundo, aproximou-se o fundo da torre para um cilindro vertical de raio  $r$  (diâmetro  $d$ ) e altura de líquido  $h$  variável. Na Figura 4.5, observa-se a geometria dos vasos com altura de líquido.

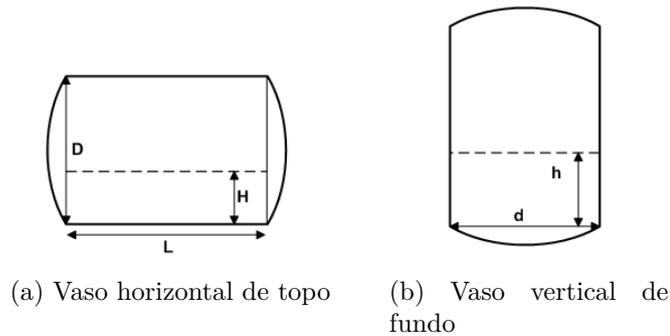


Figura 4.5: Formato geométrico simplificado dos vasos de topo (a) e de fundo (b).

O volume de líquido do vaso de topo ( $Vol_{Topo}^L$ ) da torre foi estimado com formato de um cilindro horizontal sem calotas. O  $Vol_{Topo}^L$  foi obtido a partir da área de seção transversal ( $A_{seção\ transversal}^{Topo}$ ) e a altura de líquido  $H$ , de acordo com as Equações (4.24) e (4.25).

**Volume de cilindro horizontal:**

$$Vol_{Topo}^L(H) = A_{seçãotransversal}^{Topo} \cdot H \quad (4.24)$$

$$A_{seçãotransversal}^{Topo} = R^2 \cdot \arccos\left(\frac{R-H}{R}\right) - (R-H) \cdot \sqrt{2RH - H^2} \quad (4.25)$$

O volume de líquido  $Vol_{Fundo}^L$  no vaso de fundo da torre foi estimado como o volume de um cilindro vertical sem calota de fundo. O  $Vol_{Fundo}^L$  foi calculado a partir da área de seção transversal ( $A_{seçãotransversal}^{Fundo}$ ) e a altura de líquido  $h$ , de acordo com a Equação (4.26) e (4.27).

**Volume de cilindro horizontal:**

$$Vol_{Fundo}^L(h) = A_{seçãotransversal}^{Fundo} \cdot h \quad (4.26)$$

$$A_{seçãotransversal}^{Fundo} = \frac{\pi \cdot r^2}{4} \quad (4.27)$$

O  $Vol_{Topo}^L$  da torre compreende o *hold up* dos pratos da seção de absorção e do vaso de acúmulo de topo. Da mesma forma, o  $Vol_{Fundo}^L$  compreende o *hold up* dos pratos da seção retificadora e do vaso de acúmulo de fundo da torre. Para simplificar as estimativas iniciais de  $Vol_{Topo}^L$  e de  $Vol_{Fundo}^L$ , utilizou-se o volume de líquido dos vasos acumuladores dos produtos como volumes de *hold up* do processo. As dimensões dos vasos de acúmulo são mostradas na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Dimensões dos vasos de topo e fundo da torre desbutanizadora .

Vaso de Acúmulo	Diâmetro (m)	Comprimento (m)
Vaso de topo	1,65	3,90
Vaso de fundo	1,37	1,00

Para isto, utilizou-se os valores de níveis típicos de processo de cada vaso. Admitiu-se que as pequenas variações de níveis no controle regulatório e seu valor pode ser utilizado com uma boa estimativa inicial para o parâmetro de ajuste do modelo. Na Tabela 4.3, observam-se os valores das estimativas iniciais de  $Vol_{Topo}^L$  e  $Vol_{Fundo}^L$  obtidos a partir dos níveis típicos de líquido nos vasos de acúmulo.

Assim, a partir dos valores estimados dos volumes de cada vaso de acúmulo de produto, alguns testes com variações dos  $Vol_{Topo}^L$  e  $Vol_{Fundo}^L$  foram feitos da seguinte forma:

- $Vol_{Topo}^L$ : Variação a partir do volume de  $5,5 \text{ m}^3$ , com incremento de  $+0,5 \text{ m}^3$  até que a qualidade de inferência da especificação de GLP seja satisfeita, isto é, quando não aumentar mais o  $R^2$  ou não obter valores de RMSE menores.

Tabela 4.3: Estimativa dos volumes de líquido dos vasos de topo e fundo da torre desbutanizadora .

Vaso de Acúmulo	Nível de líquido ( $m$ )	$A_{seçãotransversal}$ ( $m^2$ )	$Vol^L$ ( $m^3$ )
Vaso de topo	1,01	1,38	5,38
Vaso de fundo	0,60	1,48	0,89

Para este teste, o valor de  $Vol_{Fundo}^L$  igual a  $1,0 m^3$  é mantido constante como estimativa inicial do ajuste de  $Vol_{Topo}^L$ ;

- $Vol_{Fundo}^L$ : Variação a partir do volume de  $1,0 m^3$ , com incremento de  $+0,5 m^3$  até que a qualidade de inferência da especificação de Nafta seja satisfeita da mesma forma que a especificação do GLP. Nesta caso, utiliza-se os dois melhores resultados obtidos para  $Vol_{Topo}^L$  para cada variação de  $Vol_{Fundo}^L$ .

### 4.3.2 Definição da carga volumétrica

A carga volumétrica da torre é uma variável importante no modelo dinâmico porque o seu valor determina as vazões dos produtos da torre. Desta forma, diferentes tempos de residência são obtidos para cada seção, pois são inversamente proporcionais às vazões dos produtos. Como pode ser observado na Tabela 4.4, os valores típicos de medição das vazões de carga e dos produtos da torre desbutanizadora são apresentadas.

Tabela 4.4: Vazões típicas de carga e produtos da torre desbutanizadora .

	$Vol_{molar}^{padrão}$ ( $m^3/mol$ )	$Fvol^{padrão}$ ( $m^3/mol$ )	$Fmol$ ( $kmol/h$ )
Carga da torre	0,095	46	484
GLP	0,091	32	352
Nafta	0,124	5,5	44

Nos testes obtidos na torre desbutanizadora, os valores de vazão volumétrica de carga (condição padrão a  $20^\circ C$  e  $1 atm$ ) apresentou dados de medição acima do valor do somatório dos produtos. A partir de um balanço de massa molar na torre, foi observado que a diferença no balanço de massa global (vazão de carga subtraída das vazões de produtos) apresentou desvio absoluto em  $88 kmol/h$ , equivalente a um desvio relativo de  $18\%$  em relação ao valor de entrada.

Para evitar que erros de medição se propagassem nas análises do MSF, os testes dinâmicos foram realizados com uma vazão volumétrica de carga fixa. O valor estimado de carga com valor fixo foi obtido pela média do somatório das vazões dos

produtos da torre desbutanizadora. Desta forma, o valor da vazão de carga utilizado foi de  $400 \text{ kmol/h}$ , obtendo aproximadamente  $36 \text{ m}^3/\text{h}$  em vazão volumétrica em condições padrão de  $20^\circ\text{C}$  e  $1 \text{ atm}$  (condição adotada pela UPGN) e composição típica do processo.

A utilização da carga da torre com valor fixo também não impediu de obter os cálculos de vazão dos produtos da torre próximo aos dados da planta. Isso mostrou também que os valores dos tempo de residência calculados seriam mais condizentes com as vazões medidas dos produtos.

### 4.3.3 Etapas para aplicação do modelo dinâmico

A aplicação do MSF no modo dinâmico (DIN) conta com todas as etapas do modelo estacionário mostrado na Seção 4.2.2. Há, no entanto, a adição de uma etapa de estimação de parâmetros como mostrado no fluxograma da Figura 4.6.

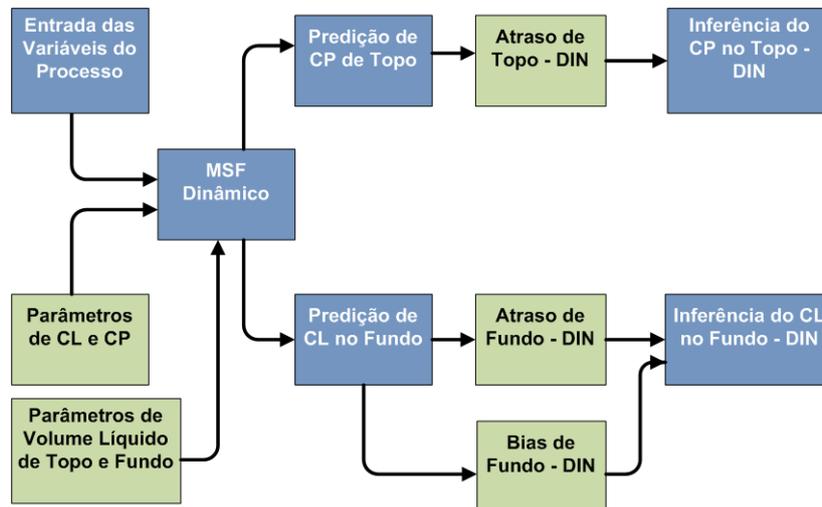


Figura 4.6: Fluxograma das etapas de aplicação do MSF dinâmico.

A etapa de obtenção dos parâmetros de  $Vol_{Topo}^L$  e de  $Vol_{Fundo}^L$  são fundamentais para que o MSF dinâmico seja bem ajustado com a dinâmica característica de cada seção da torre em estudo.

As etapas de ajuste de atrasos de topo e fundo no modelo dinâmico podem compreender o efeito do atraso dos analisadores em linha da planta ou algum efeito do tempo morto do processo. Neste caso, o atraso no MSF dinâmico será utilizado para obter o melhor ajuste somado com a dinâmica prevista nos *hold up* de volumes de líquido de cada seção da torre.

O MSF foi desenvolvido e testado com dados de um processo real, com dados de entrada amostrados no período de um minuto. Os modelos estacionário e dinâmico foram também protegidos por uma metodologia de correção de temperaturas de

entrada desenvolvida a partir de regras de conhecimento prévio do processo. Todas as etapas da lógica de correção de temperaturas são apresentadas na seção 4.4.

## 4.4 Robustez da Metodologia de Resolução do Modelo

Uma metodologia de validação de temperatura nos limites operacionais foi desenvolvida com o objetivo de garantir uma boa robustez na resolução do Modelo Simplificado por *Flash*. Desta forma, foi possível implementar o modelo proposto sujeito a diferentes tipos de perturbações em quatro testes realizados na planta em malha fechada.

A robustez da metodologia de resolução do modelo consiste em verificar se as temperaturas enviadas (variáveis de entrada) ao MSF encontram-se dentro dos limites operacionais calculados pelo modelo. As correções das temperaturas são acionadas somente se estiverem fora dos limites calculados. Neste caso, os valores são corrigidos utilizando os próprios valores dos limites calculados até que a leitura esteja novamente dentro dos limites. Em caso contrário, a correção não é necessária e a temperatura alimentada ao modelo não é alterada. Assim, pode-se dizer que os limites de temperatura calculados são os limites de convergência do MSF.

O MSF depende das especificações de duas temperaturas (topo e fundo) para fechar o grau de liberdade. Por esta razão, foi considerada primeiro a validação da temperatura de fundo, e posteriormente, a validação da temperatura de topo.

As variáveis utilizadas como especificações para obter cada uma das temperaturas limites são detalhadas a seguir. O método de cálculo usado foi o mesmo apresentado na Figura 4.2 da Seção 4.1.1, alterando apenas as variáveis de entrada (2 graus de liberdade) e de saída. Essa estrutura é utilizada para cada cálculo de temperatura de forma independente, ou seja, são vários submodelos iguais, cada um com as duas especificações e 2 variáveis livres de interesse.

### 4.4.1 Validação da temperatura do fundo

A temperatura de fundo é validada dentro dos limites operacionais considerados extremos, ou seja, quando ocorrer perdas muito elevadas de componentes leves no fundo ou de contaminação de pesados no topo. Desta forma, a correção será acionada em condições fora do ponto operacional.

Na Tabela 4.5 são mostradas as especificações utilizadas nos cálculos das temperaturas de fundo máxima ( $T_{Fundo}^{Máxima}$ ) e mínima ( $T_{Fundo}^{Mínima}$ ). As variáveis de especificação são duas chaves de interesse especificadas com valor zero, restando outras duas variáveis que não são especificadas (NE:não especificado). Nota-se que as condições

escolhidas são extremas, pois o limite mínimo é obtido quando o chave leve (CL) e chave pesado(CP) são totalmente obtidos no produto de fundo. No caso do limite máximo, o CL e CP são obtidos totalmente no produto de topo. Nestas condições, a temperatura de equilíbrio no fundo são muito distantes do ponto operacional e indicam que a torre está operando inadequadamente.

Tabela 4.5: Especificações do cálculo de temperaturas limites de fundo do *flash*.

Variáveis de especificação	Especificações no modelo	
	Limite Mínimo $T_{Fundo}^{Mínima}$	Limite Máximo $T_{Fundo}^{Máxima}$
Chave Leve no GLP	0	NE*
Chave Pesado no GLP	0	NE*
Chave Leve na Nafta	NE*	0
Chave Pesado na Nafta	NE*	0

\*NE: Não especificado.

Nota-se que as correções de temperatura, em condições normais de operação, não serão acionadas. No entanto, a validação da temperatura de fundo foi desenvolvida para garantir a utilização do MSF com dados industriais, onde situações como perda de carga térmica do forno podem ocorrer com certa frequência. Para este caso, por exemplo, a temperatura corrigida obteria o valor da  $T_{Fundo}^{Mínima}$ .

Na Figura 4.7, é possível verificar que a lógica de correção de temperatura de fundo só é corrigida se esta se encontra fora dos limites calculados.

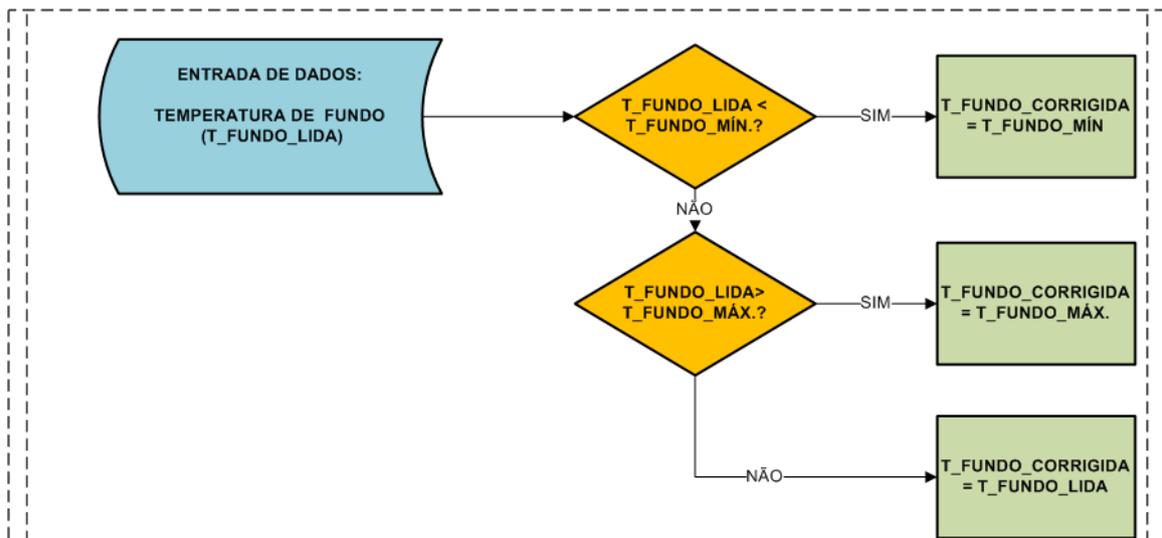


Figura 4.7: Esquema do método de validação da temperatura de fundo da desbutanizadora.

Em condições operacionais, a temperatura de fundo a ser utilizada como entrada no modelo tende a ser a mesma temperatura lida do processo. A correção é prevista

apenas se a leitura estiver fora dos limites calculados para esta variável. Desta forma, este procedimento foi feito como uma verificação da leitura de temperatura de fundo, validando-a para ser utilizada nas próximas verificações de temperatura.

### Classificação da temperatura do fundo

Considerando que a temperatura de fundo foi validada nos seus limites operacionais, os cálculos dos limites da temperatura de topo dependerão da condição da temperatura de fundo. Para isto, ela será classificada como elevada ou baixa em relação a uma temperatura de referência.

A referência é obtida como uma temperatura de referência de fundo ( $T_{Fundo}^{Ref}$ ) que corresponde à temperatura em que ocorre a separação perfeita do componente chave leve e chave pesado. Isto é, existe uma temperatura de equilíbrio no fundo que corresponde a temperatura sem chave leve (CL) no produto de fundo e sem chave pesado (CP) no produto de topo. Assim, existe duas condições de operação que dependem da  $T_{Fundo}^{Ref}$ :

- Condição de chave pesado no topo  $\rightarrow$  ocorre quando a temperatura de fundo é maior que a  $T_{Fundo}^{Ref}$ ;
- Condição de chave leve no fundo  $\rightarrow$  ocorre quando a temperatura de fundo é menor que a  $T_{Fundo}^{Ref}$ ;

No caso da temperatura de fundo lida ( $T_{Fundo}^{Lida}$ ) ser menor que a  $T_{Fundo}^{Ref}$ , então significa que o produto de fundo estará com alguma quantidade de CL. Assim, a temperatura de fundo estará com uma temperatura de equilíbrio menor devido à presença do teor de leves no produto de fundo. Da mesma forma, se  $T_{Fundo}^{Lida}$  é maior que a  $T_{Fundo}^{Ref}$ , significa que o produto de topo estará admitindo uma quantidade de CP. Dessa forma, a temperatura de fundo apresentará uma temperatura de equilíbrio maior, pois estará com menos componentes leves no produto de fundo.

As especificações para este cálculo são obtidos quando o teor de C5s no GLP e o teor de C4s na nafta são iguais à zero, como mostrado na Tabela 4.6. Nesta estrutura, a segunda variável calculada é a temperatura de referência no topo, mas esta não será utilizada na metodologia de correção de temperaturas.

Tabela 4.6: Especificações do cálculo de temperatura fundo de referência .

Variáveis de especificação	$T_{Fundo}^{Ref}$
Chave Pesado no GLP	0
Chave Leve na Nafta	0

A partir da temperatura de fundo validada e classificada, os limites de temperatura de topo são calculados, utilizando a partir desta etapa, a especificação da

temperatura de fundo. Posteriormente, a temperatura de topo é avaliada nos limites de operação.

#### 4.4.2 Validação da temperatura do topo

Nas duas condições de temperatura de fundo (elevada ou baixa), foram observadas diferentes condições para os cálculos dos limites de temperatura de topo. Para cada condição, novos cálculos para os limites da temperatura de topo foram propostos:

- Condição de chave pesado no topo  $\rightarrow$  Temperatura de fundo elevada  $\rightarrow$  temperatura de topo com limite mínimo I e temperatura máxima ;
- Condição de chave leve no fundo  $\rightarrow$  Temperatura de fundo baixa  $\rightarrow$  temperatura de topo com limite mínimo II e temperatura máxima.

As temperaturas calculadas de topo mínimas I e II e a temperatura máxima de topo são utilizadas na lógica de correção a partir do conhecimento da temperatura de fundo. Assim, todos os cálculos de temperaturas limites de topo, utiliza-se apenas um grau de liberdade (diferentes especificações de chave leve ou pesado), pois em todos os casos, a temperatura de fundo já está inserida no modelo como especificação.

A Figura 4.8 mostra de forma resumida o esquema de lógica de validação da temperatura de topo em que a variável “T\_TOPO\_CORRIGIDA” representa a temperatura inserida no MSF.

#### Condição de chave pesado no topo

Na condição de chave pesado (CP) no produto de topo, espera-se uma quantidade do CP no produto de topo e seu valor dependerá se a temperatura de topo do processo estiver alta ou baixa. Quanto mais alta a temperatura de topo, maior será o teor de pesados no topo. De forma semelhante, se a temperatura de topo for muito baixa, o teor de pesados tenderá ao valor mínimo.

Sendo assim, podemos resumir da seguinte forma:

- Na temperatura mínima de topo: o teor de pesados no produto de topo será mínimo  $\rightarrow$  teor de C4's na Nafta = 0  $\rightarrow$  temperatura mínima I;
- Na temperatura máxima de topo: o teor de pesados no produto de topo será máximo  $\rightarrow$  teor de C5's na Nafta = 0  $\rightarrow$  temperatura máxima.

Na Tabela 4.7, observa-se que a temperatura de topo máxima ( $T_{Topo}^{Máxima}$ ) é obtida quando não há CP no produto de fundo. Então, para obter o topo no seu limite máximo de temperatura, considera-se que todo o chave pesado é destinado ao produto de topo. Caso a  $T_{Topo}^{Lida}$  seja maior que a  $T_{Topo}^{Máxima}$ , é possível que uma

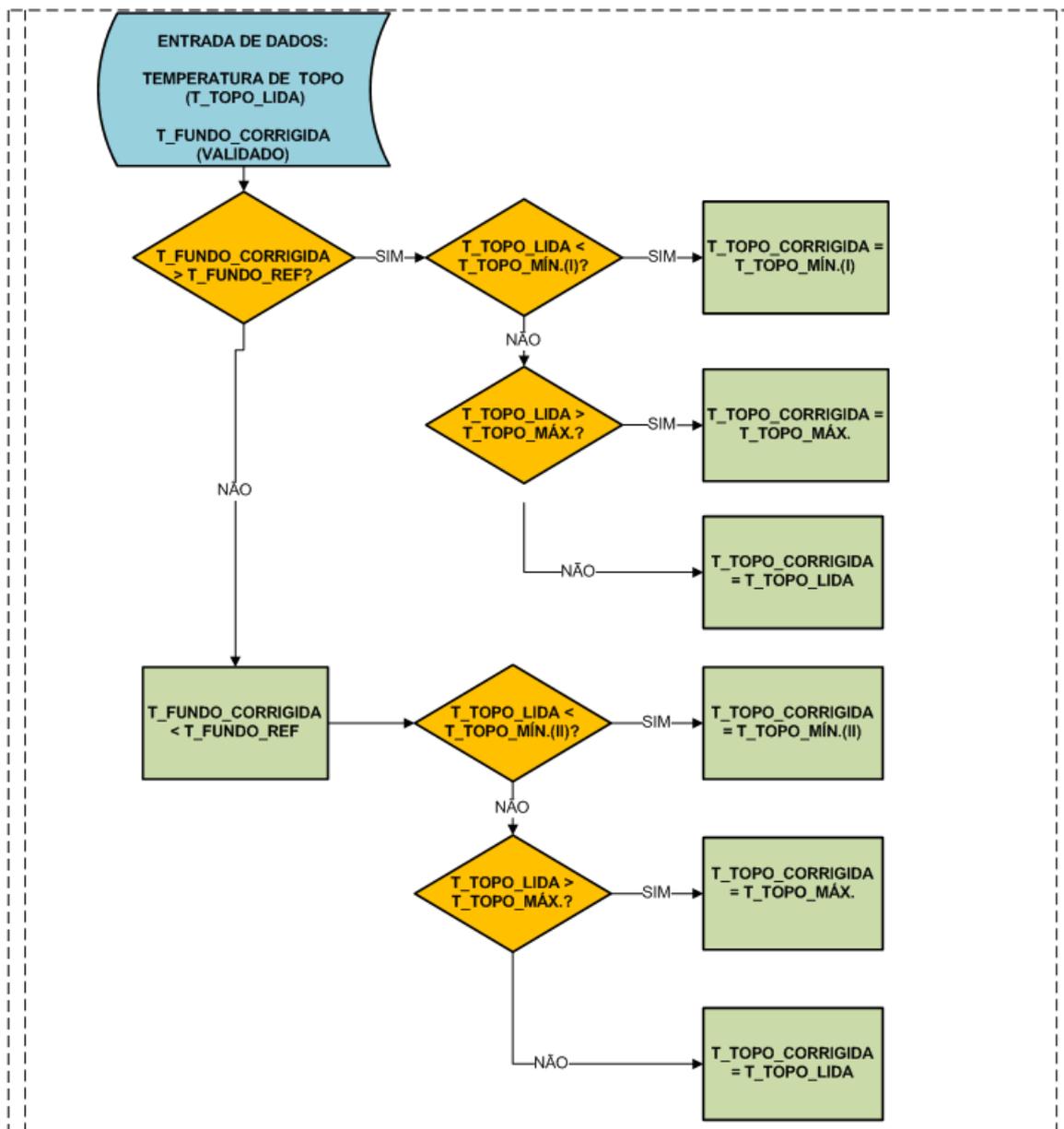


Figura 4.8: Esquema do método de validação da temperatura de topo da desbutanizadora.

quantidade maior que nC5 e C6+ esteja sendo perdido para o topo. A temperatura de topo corrigida ( $T_{Topo}^{Corrigida}$ ) será dada pelo mesmo valor da  $T_{Topo}^{Máxima}$ , impedindo que o MSF não apresente convergência.

Nota-se que se a temperatura de equilíbrio no topo estiver próximo ao valor da  $T_{Topo}^{Máxima}$ , é possível que a torre esteja fora da condição de especificação máxima do teor de pentanos no produto de topo. Outra observação a ser feita é que  $T_{Topo}^{Máxima}$  calculada depende da composição do chave pesado utilizada. Isto é, para obter  $T_{Topo}^{Máxima}$  mais elevada, basta que a composição de chave pesado admita mais teor de pesados (nC5 e C6+). No entanto, neste trabalho, a  $T_{Topo}^{Máxima}$  será utilizada como

uma restrição adequada e suficiente para o MSF, considerando fixa a composição estimada para o chave pesado do fracionamento.

Tabela 4.7: Especificações do cálculo de temperaturas limites de topo do *flash*.

Variáveis de especificação	Especificações do <i>flash</i> de topo	
	Limite Mínimo $T_{Topo}^{Mínima(I)}$	Limite Máximo $T_{Topo}^{Máxima}$
Chave Leve na Nafta	0	NE*
Chave Pesado na Nafta	NE*	0

\*NE: Não especificado.

A temperatura de topo mínima (I) ( $T_{Topo}^{Mínima(I)}$ ) foi obtida com a especificação que todo o chave leve é obtido no produto de topo. Neste cenário, a temperatura de equilíbrio possui a presença de todo CL no topo, isto possibilita que temperatura seja muito baixa, mesmo com a presença de pouco teor de chave pesado. Nota-se que a temperatura de equilíbrio depende da característica da composição do produto, pois quanto mais leves os componentes do chave leve, menor será a  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$ .

### Condição de chave leve no fundo

Na condição de chave leve (CL) no produto de fundo e a temperatura de fundo baixa ( $T_{Fundo}^{Baixa}$ ), espera-se que o CL esteja presente no produto de fundo. Nesta condição, a  $T_{Topo}^{Máxima}$  é a mesma obtida na condição de CP no produto de topo, pois a restrição de máximo CP no topo também pode ser válida para a condição de chave leve no fundo. Assim, observa na Tabela 4.8, as especificações para o cálculo da temperatura de topo mínima (II) ( $T_{Topo}^{Mínima(II)}$ ).

Tabela 4.8: Especificações do cálculo de temperaturas limites de fundo do *flash*.

Variáveis de especificação	Especificações do <i>flash</i> de topo	
	Limite Mínimo $T_{Topo}^{Mínima(II)}$	Limite Máximo $T_{Topo}^{Máxima}$
Chave Pesado no GLP	0	NE*
Chave Pesado na Nafta	NE*	0

\*NE: Não especificado.

Sendo assim, podemos resumir da seguinte forma:

- Na temperatura mínima de topo: o teor de pesados no produto de topo será nulo  $\rightarrow$  teor de C5's no GLP = 0  $\rightarrow$  temperatura mínima II;
- Na temperatura máxima de topo: o teor de pesados no produto de topo será máximo  $\rightarrow$  teor de C5's na Nafta = 0  $\rightarrow$  temperatura máxima.

Para o topo, a condição de ausência de CP no topo leva a temperatura de equilíbrio no topo ser muito baixa. A  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$  é obtida com valor abaixo do valor de  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  porque a especificação do teor pentanos pode ser afirmada como nula na condição de  $T_{Fundo}^{Baixa}$ . Já na condição de  $T_{Fundo}^{Alta}$ , a condição de chave pesado no topo impede que a  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  seja tão baixa quanto a  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$ , pois qualquer quantidade do CP no topo, torna a temperatura de topo admissível maior.

Uma forma de entender mais facilmente a diferença das  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  e  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$  é verificar situações mais distantes da condição de especificação dos produtos. Assim, para o caso de temperatura de fundo muito alta,  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  poderá admitir uma quantidade de chave pesado no topo maior que a  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$ , pois mesmo mantendo todo o chave leve no topo (especificação), a variável de chave pesado será determinada de acordo com temperatura de topo lida. Se utilizado a  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$  neste caso, o valor do teor de pentanos admissível no topo seria mínimo, mas esse valor não seria esperado na predição em condição de temperatura de fundo elevada.

Já no caso de temperatura de fundo muito baixa, o uso da  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$  poderá admitir uma quantidade de chave leve maior que em  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  no produto de fundo. Neste caso, todo o chave pesado no topo é nula (especificação), mas não impede que a variável de chave leve seja obtida no produto de fundo. Se utilizado a  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  neste caso, o valor do teor de butanos admissível no fundo seria baixo, o que não é esperado uma vez que a temperatura de fundo está baixa.

Nota-se que a especificação de chave pesado para obter a  $T_{Topo}^{Mínima(II)}$  como nula no topo é uma resposta trivial para a condição de  $T_{Fundo}^{Baixa}$ . Da mesma forma, a especificação de chave leve obtida totalmente no produto de topo para obter a  $T_{Topo}^{Mínima(I)}$  é uma resposta esperada para a condição de  $T_{Fundo}^{Alta}$ . Assim, observa-se que as condições utilizadas para os cálculo dos limites operacionais foram baseados no conhecimento do processo. Além disso, todas as temperaturas limites são calculadas de acordo com a riqueza da carga da torre. Por esta razão, a robustez proposta pode abranger o máximo de condições operacionais, pois os limites não são fixos e sim calculados por ponto de simulação.

## 4.5 Avaliação da capacidade de predição do MSF

Este estudo tem como objetivo avaliar a qualidade das inferências obtidas pelo MSF quando a planta está submetida a grandes variações nas condições operacionais. Desta forma, foi criada uma planta virtual em um simulador de processos que possui modelos rigorosos de colunas de destilação para suprir os dados de entrada do MSF e as respostas das inferências podem ser comparadas com as respectivas variáveis geradas pelo simulador.

A capacidade de predição de um modelo pode ser verificada quando testado com

uma variação significativa em algumas das variáveis de entrada. Para isto, foram adicionados incrementos de mesma magnitude em uma dada entrada, em torno de um ponto operacional, com as demais variáveis de entradas fixas. É possível então avaliar o comportamento das saídas do modelo para cada variável perturbada, tanto com o seu valor absoluto como também verificando a direção da sua resposta.

No entanto, dificilmente é possível obter testes distantes do ponto operacional típico de uma planta industrial. Sendo assim, a utilização de um modelo rigoroso e fenomenológico é uma alternativa importante para a simulação do comportamento de um processo real.

Um modelo estacionário fenomenológico foi utilizado a fim de simular o estudo de caso de forma abrangente. O simulador comercial chamado PRO/II® foi utilizado para simular grandes variações nas variáveis controladas da torre desbutanizadora. Este simulador utiliza o método rigoroso *inside-out* para o cálculo do equilíbrio líquido e vapor nos estágios da coluna de destilação. O algoritmo escolhido é devido a sua boa capacidade de convergência para colunas de destilação multicomponentes. O método consiste em utilizar modelos termodinâmicos simples para o cálculos das entalpias e das constantes de equilíbrio líquido e vapor em um *loop* interno, permitindo um cálculo simples e confiável. No *loop* externo, os cálculos dos parâmetros dos modelos termodinâmicos simplificados são atualizados com base nas novas composições e nos resultados do modelo termodinâmico rigoroso. Assim, quando os valores das entalpias e das constantes de equilíbrio são iguais nos dois modelos, simples e rigoroso, o algoritmo é finalizado.

Para analisar o MSF, tanto os valores estimados do teor de pentanos no GLP e o valor de PVR da nafta foram comparados com os valores calculados pelo modelo rigoroso. Ambos os modelos utilizaram a equação termodinâmica de Peng-Robinson e mesmos dados de carga de entrada da torre.

Outra forma de avaliar as respostas das simulações foi obtida comparando as derivadas das respostas em relação a cada incremento da variável de perturbação. Este valor calculado é chamado também de ganho estacionário do processo. Para o cálculo do ganho estacionário do teor de pentanos do GLP ( $K_{C5sGLP}^{EE}$ ) em relação à uma variável de controle ( $M$ ), utilizou-se o seguinte cálculo:

$$K_{C5sGLP}^{EE} = \frac{\Delta C5sGLP}{\Delta M} \quad (4.28)$$

$$\Delta C5sGLP = C5sGLP(i) - C5sGLP(i - 1) \quad (4.29)$$

$$\Delta M = M(i) - M(i - 1) \quad (4.30)$$

Em que o  $\Delta M$  é o incremento da variável de controle ( $M$ ) utilizada,  $i$  é a resposta do passo atual e  $(i - 1)$  é a resposta do passo anterior.



Desta forma, a partir de um número de pratos teóricos menor, foi utilizado um número de estágios que correspondesse ao perfil de temperatura da torre (temperatura de topo, temperatura de fundo e temperatura do prato de controle). Para isto, a entrada da torre também foi ajustada de maneira proporcional ao da carga da torre. O estágio do prato de controle na simulação foi mantido com o valor do caso real, pois sua temperatura se manteve com valor similar do caso real. Os valores do caso real e do caso simplificado para a simulação rigorosa podem ser observados na Tabela 4.9.

Tabela 4.9: Especificações dos estágios da torre T-03 no modelo rigoroso e no caso real.

Variáveis	Torre T-03 real	Torre T-03 simulada
Número de pratos teóricos	36	26
Número de estágios totais	38	28
Condensador	1º estágio	1º estágio
Refrervedor	38º estágio	28º estágio
Entrada da carga	12º estágio	9º estágio
Prato de controle de temperatura	18º estágio	18º estágio

As principais especificações no modelo foram baseadas nos dados reais da torre desbutanizadora, tais como:

a) Pré-aquecedor da carga: Utilizou-se um  $\Delta T = 3,5^{\circ}\text{C}$  correspondente à diferença de temperatura da corrente de C5+ na saída do trocador com a temperatura de entrada da carga;

b) Utilizou-se um  $\Delta P = 0,294\text{bar}$  na coluna de destilação e a pressão no topo da torre como variável especificada;

c) As cargas térmicas do condensador e do refrervedor foram utilizadas como variáveis (graus de liberdade) da torre dadas as especificações de vazão de refluxo e de temperatura de controle de prato;

d) Uso do refrervedor do tipo termossifão e de condensador do tipo *air cooler*;

e) As condições padrão para as vazões especificadas foram a  $20^{\circ}\text{C}$  e 1 atm, de acordo com os dados da planta.

Para simular uma condição típica do processo, foram especificadas as principais variáveis de controle da torre com os valores operacionais típicos da planta como mostrado na Tabela 4.10.

A partir de uma composição típica dos analisadores da planta, foi utilizado a composição de carga como mostrado na Tabela 4.11.

Tabela 4.10: Especificações do caso base no modelo rigoroso da torre T03.

Variáveis	Valor	Unidade
Vazão de carga	45	$m^3/h$ @padrão
Pressão de topo	1200	kPag
Vazão de refluxo	20	$m^3/h$ @padrão
Temperatura do prato sensível	132	°C
Vazão de recirculação de GLP p/ carga	22	$m^3/h$ @padrão

Tabela 4.11: Especificações da composição de carga no modelo rigoroso da torre T03.

Variáveis	Valor base	Unidade
Teor de etano (C2)	11,65	% molar
Teor de propano (C3)	49,83	% molar
Teor de iso-butano (iC4)	9,62	% molar
Teor de n-butano (nC4)	16,08	% molar
Teor de iso-pentano (iC5)	4,05	% molar
Teor de n-pentano (nC5)	4,33	% molar
Teor de hexanos e pesados (C6+)	4,44	% molar

## 4.5.2 Testes de comparação dos modelos

Uma das vantagens de poder utilizar uma simulação de modelo rigoroso é poder extrair ao máximo as possibilidades de operação. Sendo assim, o modelo rigoroso foi avaliado em vários cenários com variações significativas em suas principais variáveis das malhas de controle, conforme mostrado na Tabela 4.12.

A comparação dos resultados do MSF e rigoroso permitem obter uma primeira análise do modelo proposto como ferramenta rigorosa e simplificada por *flashes*. Neste caso, o objetivo é obter o resultado mais próximo com relação ao comportamento das inferências frente aos testes propostos. Desta forma, além das inferências, foi possível também avaliar as respostas dos ganhos estacionários do processo.

Feita esta pré avaliação do MSF no modo estático, quatro testes de identificação da T03 em malha fechada foram utilizados a fim de comprovar a acurácia dos resultados inferidos pelo modelo e os dados medidos de planta.

Tabela 4.12: Testes nas variáveis controladas próximas ao caso base da torre T03.

Variáveis	Valor base	Valor Mínimo	Valor Máximo	Incremento
Pressão de topo (kPag)	1200	1158.7	1248.7	10
Vazão de refluxo ( $m^3/h$ @padrão)	20	16	25	1
Temperatura do prato sensível ( $^{\circ}C$ )	132	127	136	1
Vazão de recirculação de GLP $m^3/h$ @padrão	22	14	32	2

## 4.6 Considerações Finais

O desenvolvimento do Modelo Simplificado por *Flash* (MSF) mostrou que algumas etapas são necessárias para sua utilização com dados industriais, tanto no modelo estático quanto no dinâmico, tais como:

- Verificação das entradas do modelo;
- Definição de chave leve e chave pesado;
- Ajuste de atrasos e bias nas previsões do modelos.

No caso do modelo dinâmico, há também a etapa da “definição dos parâmetros dinâmicos”, sendo ajustada a partir do dimensionamento do equipamento como estimativa inicial do *hold up* nos volumes líquidos de cada seção da torre.

Além das etapas necessárias para aplicação com dados industriais, etapas de avaliação do modelo também foram realizadas, tais como:

- Comparação da capacidade de predição do MSF com o modelo rigoroso a partir da análises das inferências e ganhos estacionários do processo;
- Avaliação da robustez com as correções de temperatura de alimentação do modelo.

Desta forma, todas as etapas citadas são apresentadas ao longo do capítulo de resultados. Todas as etapas necessárias para a obtenção e uso do MSF na torre desbutanizadora são detalhadas. Assim, também são avaliadas a qualidade das inferências, capacidade de predição e robustez do modelo proposto.

# Capítulo 5

## Resultados

Neste capítulo, os resultados de simulações do MSF, no modo estacionário e dinâmico, são apresentados. As simulações foram geradas a partir de dados reais do processo de uma torre desbutanizadora, e seus resultados são comparados com os valores reais da planta.

Na Seção 5.1 são avaliadas as definições de chave leve e pesado na torre e na Seção 5.1.2 são apresentadas as análises da capacidade de predição do modelo comparado ao modelo rigoroso, em simulações estacionárias. Na Seção 5.1, os resultados da inferência estacionária são mostrados e analisados, enquanto os resultados da inferência dinâmica encontram-se na Seção 5.2. A robustez das inferências é avaliada na Seção 5.3. Finalmente, a Seção 5.4 apresenta algumas considerações finais sobre os resultados.

### 5.1 Inferência Estacionária

A partir dos dados industriais resultantes dos testes de identificação em malha fechada da torre desbutanizadora, foi possível obter dados industriais com variações significativas nas variáveis de processo. Deste modo, quatro testes foram utilizados para comparar as respostas previstas pelo modelo proposto com os resultados da planta.

O MSF foi alimentado com os dados industriais a cada minuto e simulado tanto no modo estacionário quanto no dinâmico. Os resultados das inferências do teor de pentanos do GLP e de PVR da nafta foram comparados com os dados disponíveis na planta.

No caso da PVR, a comparação foi feita a partir da composição do analisador do produto de fundo, com estimativas do valor da PVR em período médio de amostragem de seis minutos. Já o GLP foi comparado diretamente com os resultados do analisador disponível em período médio de amostragem de 16 minutos.

Como mostrado na Figura 3.5 do Capítulo 3, os testes compreendem as principais variáveis do controle da desbutanizadora, tais como:

- M1 - Vazão de refluxo;
- M2 - Vazão de recirculação do GLP;
- M3 - Pressão de topo;
- M4 - Temperatura de controle do prato;

A qualidade das inferências foi verificada pelo RMSE, apresentado com a unidade de medição do valor inferido, e pelo  $R^2$ , com unidade em porcentagem.

### 5.1.1 Parâmetros de ajuste do chave leve e chave pesado

O GLP é o principal produto da torre desbutanizadora e por isso o modelo foi ajustado para melhor atender as especificações tipicamente encontradas na sua composição. Sendo assim, as proporções dos componentes do chave leve e do chave pesado no GLP foram aproximados para os valores observados na planta:

- Chave leve (nC4 e iC4): a quantidade molar de iC4 e nC4 observada no produto de topo foram muito semelhantes à proporção encontrada na carga de entrada da torre. Desta forma, o total de butanos da carga de entrada foi utilizada como chave leve do modelo;
- Chave pesado (nC5 e iC5): a quantidade de iC5 em relação à quantidade de nC5 foi verificada em média no valor de 0,30 no GLP. Assim, considerando a mesma quantidade molar de iC5 e nC5 na carga, foi utilizado o valor de 30% de nC5 e 100% iC5 da carga de entrada para compor o total de chave pesado do modelo.

No processo real, a variação da razão dos componentes pode variar, tanto no chave leve como no chave pesado. Para avaliar, por exemplo, o impacto que a razão de pentanos pode causar no teor de pentanos total a ser estimado pelo modelo, um teste com dois valores de razão de pentanos ( $nC5/iC5$ ) foi analisado. Os parâmetros testados foram:

- Razão de pentanos  $P1 = 0,30$  (valor típico);
- Razão de pentanos  $P2 = 1,0$  (máximo valor);

Nesta análise, foi observado que a inferência estática do teor de pentanos no GLP gerou resultados próximos aos valores de cromatógrafo, tanto para a razão de P1 quanto para P2. Este resultado pode ser observado na Figura 5.1. O resultado do valor de RMSE foi menor para o caso da razão P1, com valor de 0,0601 contra o valor obtido no P2 em 0,1084.

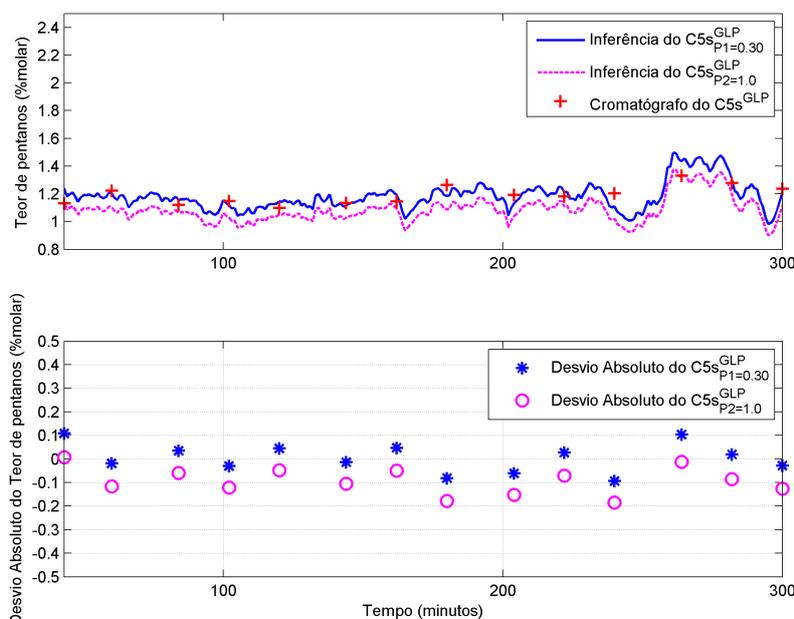


Figura 5.1: Gráfico teor de C5s com diferentes parâmetros no modelo inferencial.

Já no caso dos valores das inferências individuais de pentanos no produto de topo, observa-se que a razão de pentanos com valor de 0,30 (P1) no chave pesado apresentou um resultado de inferência do teor de iC5 e nC5 com maior acurácia com os dados reais da planta. Na Figura 5.2 verificam-se as estimativas individuais do iso-pentano e do n-pentano e com dados de medição do cromatógrafo. Neste resultado, observa-se que o desvio das inferências de cada pentano com os dados de cromatografia de cada componente são menores com a utilização da razão de pentanos P1.

Embora no processo real a razão de pentanos possa variar dependendo do regime em que se encontra, a escolha da proporção de iC5 e nC5 no GLP utilizada com valor fixo mostrou uma boa aproximação com os dados típicos da planta. O valor da razão P1 foi utilizado nos modelos estacionário e dinâmico, mesmo em condições de maior variação do ponto operacional.

No caso da especificação do produto de fundo, a razão de butanos pode afetar o valor da PVR, pois a estimativa da PVR é baseada na composição total do produto de fundo. Por conta dessa influência e o fato que o analisador não apresenta medições

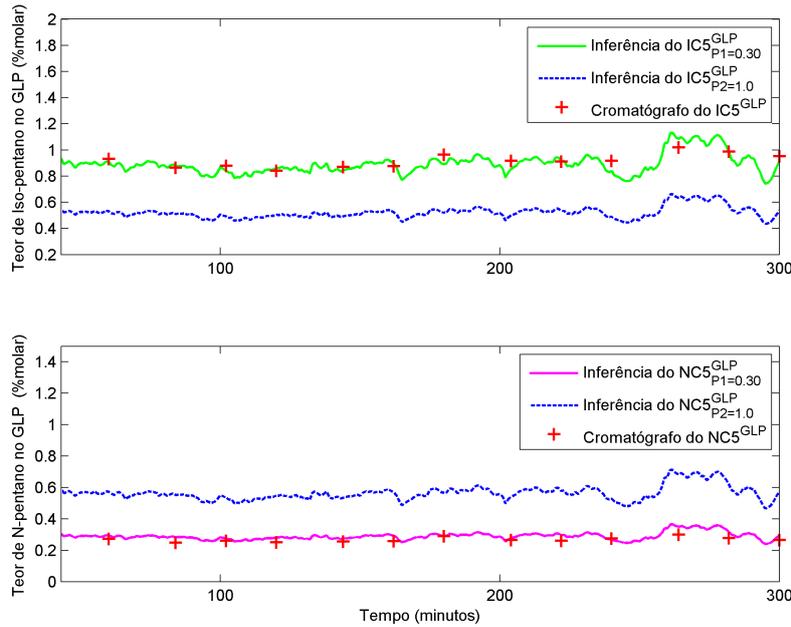


Figura 5.2: Gráfico teor de NC5 e IC5 do GLP para os parâmetros P1 e P2 no modelo inferencial.

significativas do teor de butanos, espera-se que a correção do bias seja suficiente para o ajuste do modelo às incertezas de composição no produto de fundo.

### 5.1.2 Verificação da Capacidade de Predição do Modelo

A verificação inicial do MSF estacionário foi obtida por simulações com diferentes variações nas variáveis controladas da torre desbutanizadora realizadas individualmente.

A utilização do modelo rigoroso no simulador PRO-II permitiu reproduzir a torre desbutanizadora como uma planta virtual. Desta forma, as variações de cada variável controlada partiram de valores mínimos e máximos significativamente distantes do ponto operacional típico. Além disso, todas as variáveis intensivas do modelo reduzido, como temperatura de topo e de fundo da torre, foram obtidas pela simulação do modelo rigoroso.

A Figura 5.3 mostra os resultados dos quatro testes realizados, individualmente, para cada variável controlada a partir de um ponto de operação base. Por exemplo, variando-se a pressão de topo do seu valor mínimo ( $P_{min}$ ) ao valor máximo ( $P_{max}$ ), todas as demais variáveis controladas foram utilizadas com os valores de operação fixados. Em cada teste, dez pontos foram simulados de forma independente, mas são apresentados no mesmo gráfico a fim de mostrar a variação da composição para as quatro variáveis controladas.

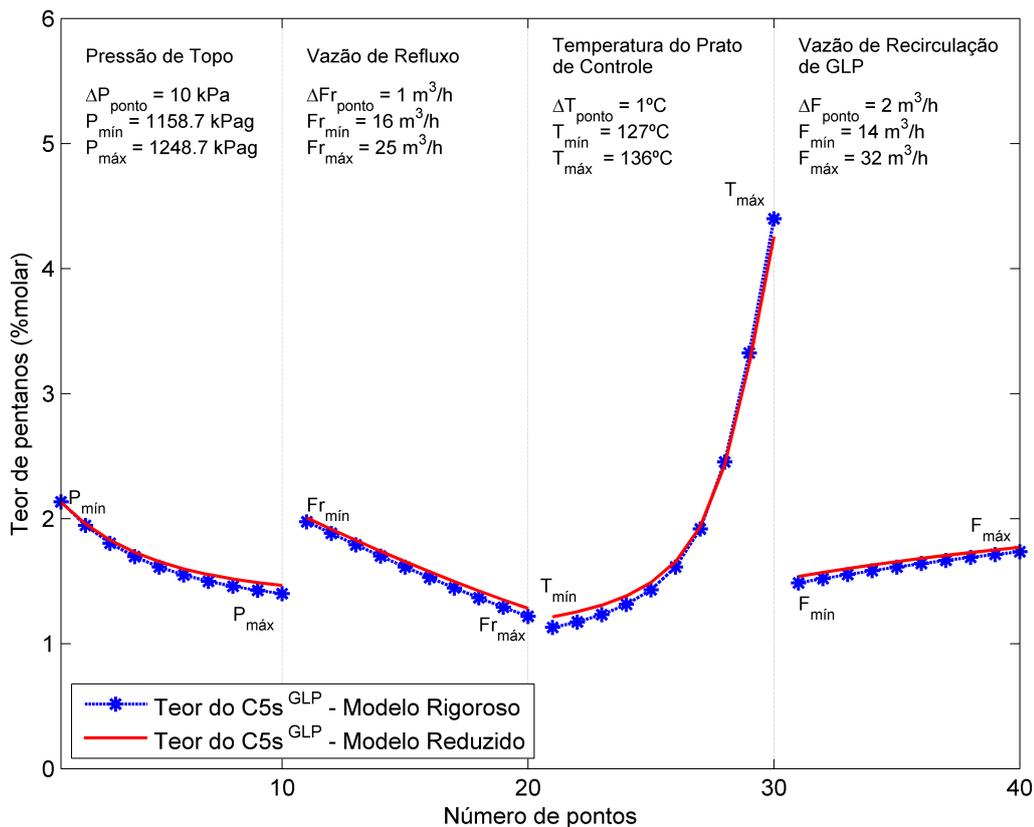


Figura 5.3: Gráfico da capacidade de previsão do modelo proposto e modelo rigoroso para o teor de pentanos do GLP.

Observa-se na Figura 5.3 que as inferências do teor de pentanos apresentam a mesma tendência do valor obtido no modelo rigoroso. Isso mostra, que apesar da leitura do modelo proposto ser simplificada com leitura das variáveis intensivas como temperatura e pressão, os resultados são próximos ao que é obtido no modelo rigoroso que utiliza variáveis de controle como vazão de refluxo e temperatura do prato sensível. Além disso, destaca-se que na variação não linear da temperatura do prato sensível, o cálculo do teor pentanos em ambos os modelos foram semelhantes.

Na Tabela 5.1, verifica-se quantitativamente que os testes realizados foram muito semelhantes. Valores de  $R^2$  sempre maiores que 99,9% indicam que a tendência da variação é muito bem capturada pelo modelo reduzido. Da mesma forma, os valores de RMSE ficaram sempre inferiores a 0,1% molar. Esses resultados indicam que a acurácia do modelo proposto nesse trabalho para a inferência do teor de C5s não apresenta diferenças significativas à previsão do modelo rigoroso.

No caso da PVR da nafta, observou-se no modelo rigoroso que o teor de butanos no produto de fundo era da ordem de 0,6% molar. Já no modelo reduzido, o valor

Tabela 5.1: Resultados do teor de C5s do GLP estacionário no modelo reduzido comparado ao modelo rigoroso.

Testes de variação	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
Vazão de refluxo	0,0470	100
Vazão de recirculação de GLP	0,0432	99,92
Pressão de topo	0,0456	100
Temperatura de prato	0,0761	100

médio do teor de butanos foi em média 4,8% molar. O teor de butanos afetou o valor da PVR com valores no modelo reduzido maiores que o do modelo rigoroso.

Assim, os resultados foram ajustados com o valor de correção (*bias*) fixo no valor de 2,2309 psi, obtido pela média da diferença dos dados simulados. Os resultados desta análise de PVR pode ser vista na Figura 5.4 com as mesmas variações feitas no teor de pentanos de GLP.

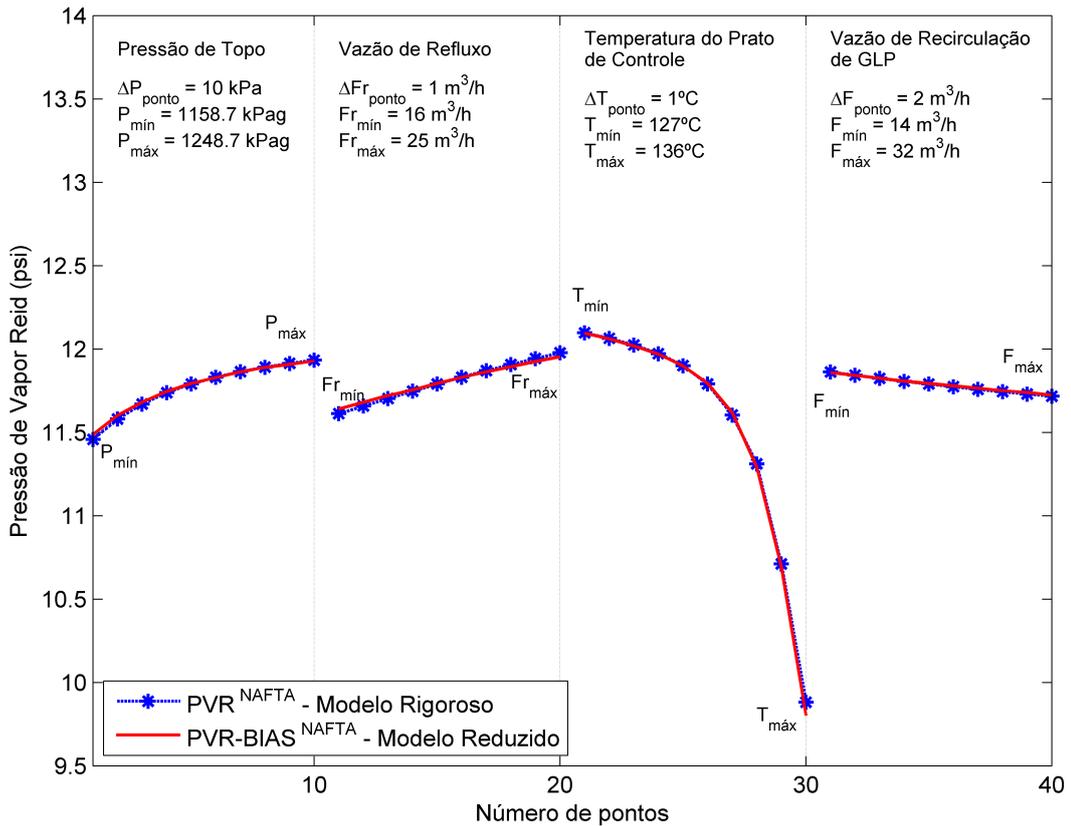


Figura 5.4: Gráfico da capacidade de previsão do modelo proposto e modelo rigoroso para a PVR da Nafta

Na Tabela 5.2 são mostrados os valores de RMSE e  $R^2$  para a PVR da nafta

ajustada com o *bias* fixo. Uma vez feita a correção do *bias*, observa-se que os resultados apresentaram baixos valores do RMSE mesmo para um *bias* fixo em todos as variações dos testes.

Tabela 5.2: Resultados estacionário da PVR da Nafta com *bias* no modelo reduzido comparado ao modelo rigoroso.

Testes de variação	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
Vazão de refluxo	0,0166	99,99
Vazão de recirculação de GLP	0,0053	99,96
Pressão de topo	0,0126	99,99
Temperatura de prato	0,0271	99,98

Os resultados iniciais do modelo estacionário reduzido mostraram que mesmo utilizando as variáveis intensivas da torre virtual, o modelo reduzido obteve resultados muito semelhantes ao do modelo rigoroso.

### Ganhos estáticos do teor de pentanos no GLP

Os ganhos estacionários das inferências foram obtidos para avaliar o grau de não linearidade da torre desbutanizadora e a qualidade do modelo proposto para reproduzir de forma semelhante os resultados do modelo rigoroso.

Na Figura 5.5, foi possível analisar quatro gráficos de ganhos estático obtidos a partir de testes nas quatro principais variáveis de controle da torre em estudo. As principais observações quanto às respostas dos testes foram:

- Nos gráficos de testes na pressão de topo (a) e de temperatura de prato sensível (c), os ganhos estáticos mostraram uma não linearidade significativa para uma variação de 10 *kPa* e de 1 °C, respectivamente. Os valores dos ganhos do teor de C5s no GLP foram aproximadamente 0,080% molar/*kPa* no caso (a) e 0,18 % molar/°C no caso (c) para os valores operacionais. Observa-se que os modelos responderam de forma muito parecida ao longo dos incrementos dados nas variáveis de controle;
- Nos gráficos dos testes de vazão de refluxo (b) e de recirculação de GLP (d), os ganhos estáticos foram relativamente constantes para uma variação de 1 *m*<sup>3</sup>/*h* e de 2 *m*<sup>3</sup>/*h*, respectivamente. Os valores dos ganhos do teor de C5s no GLP foram aproximadamente 0,085% molar/(*m*<sup>3</sup>/*h*) no caso (b) e 0,027% molar/(*m*<sup>3</sup>/*h*) no caso (d) para os valores operacionais. Nestes testes, verifica-se que a não linearidade é pequena pois não há grandes variações dos ganhos ao longo do teste.

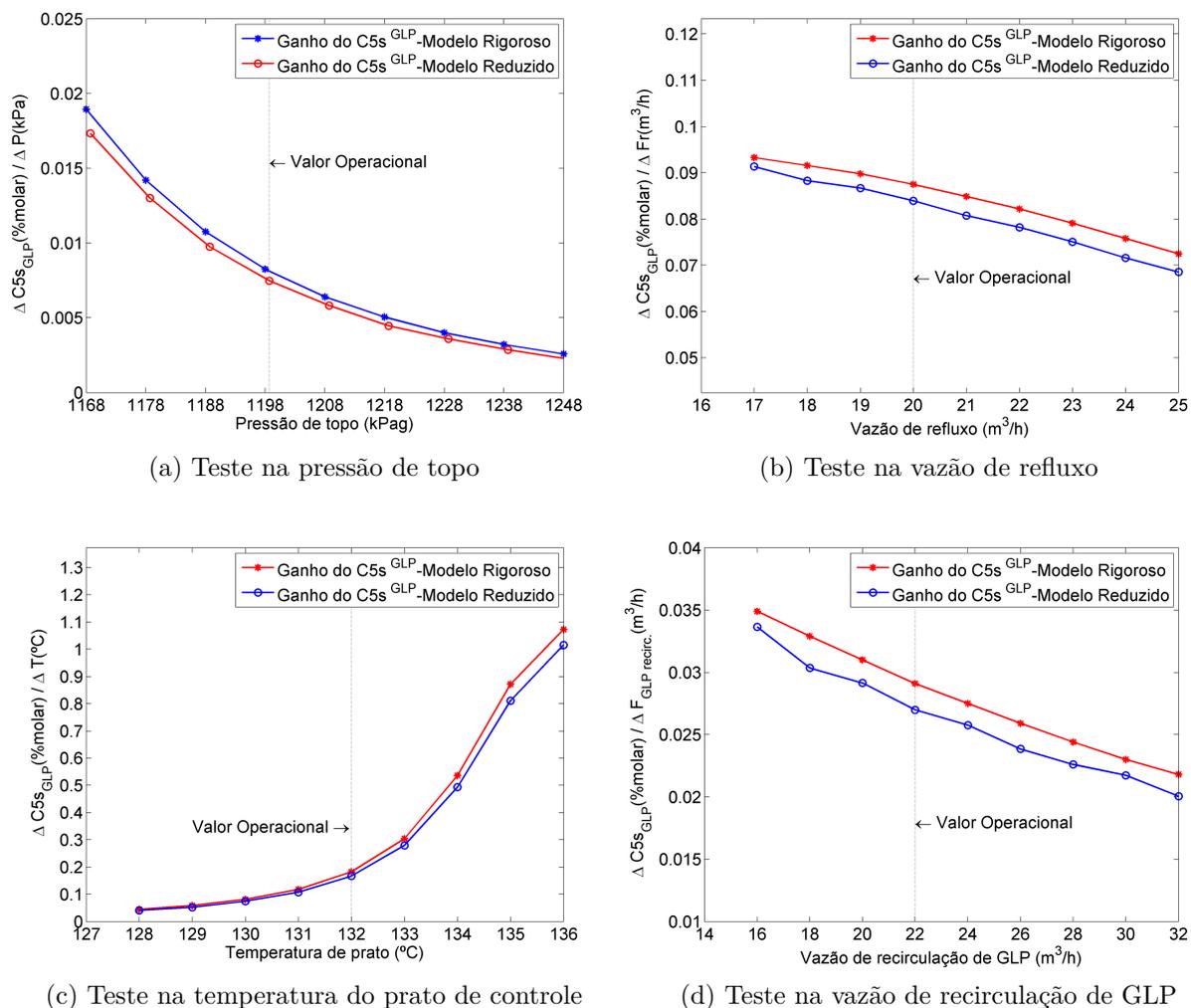


Figura 5.5: Ganhos estacionários do teor de pentanos no GLP obtidos pelos modelos estacionários rigoroso e reduzido.

### 5.1.3 Resultados da Inferência Estacionária do Teor de Pentanos do GLP

O modelo estacionário foi testado em períodos com variações significativas das principais variáveis manipuladas da torre desbutanizadora. Para cada período foi testado a capacidade preditiva do modelo estacionário obtidas ponto a ponto, sendo cada ponto simulado de minuto a minuto. Análises do valor absoluto do teor de pentanos do GLP predita e sua tendência nas respostas comparado ao cromatógrafo da planta foram obtidas para cada teste.

#### a) Teste da vazão de refluxo:

Este período é composto por dois degraus negativos de onda quadrada no *set point* da vazão de refluxo da torre desbutanizadora. Estas perturbações na vazão permitiram analisar a dinâmica nas composições dos produtos da torre.

No caso da vazão de refluxo, quando há uma queda no seu valor, a resposta da torre é aumentar a quantidade do teor de pentanos no topo. Isso ocorre porque o topo fica mais aquecido, permitindo uma quantidade maior do teor de pesados no topo. Caso contrário, se a temperatura de topo diminui, o teor de pentanos no topo também diminui.

Conforme a Figura 5.6, observa-se que a temperatura de topo aumentou significativamente quando o degrau no *set point* (SP) da vazão de refluxo foi negativo, e no caso de degrau positivo, observou-se uma queda na temperatura.

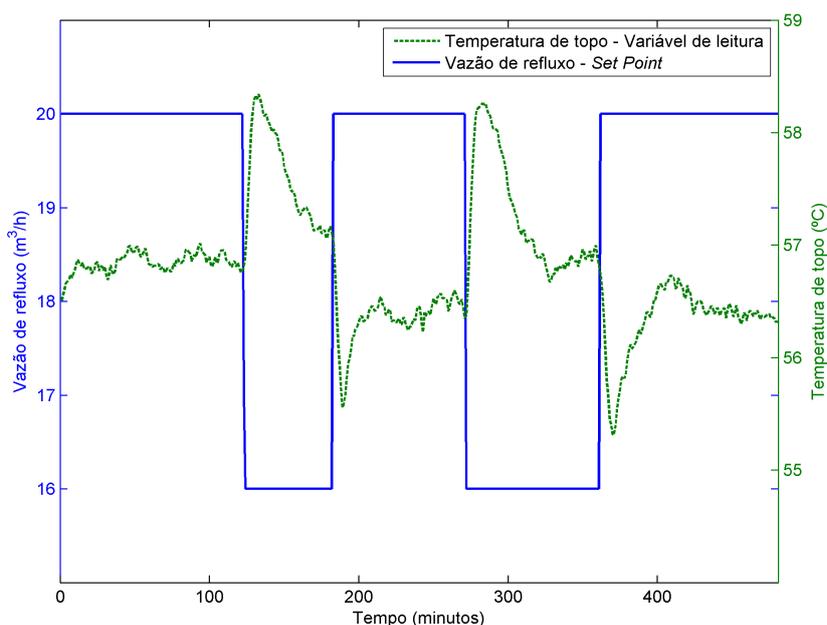


Figura 5.6: Teste da vazão de refluxo (*Set point*) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre.

Desta forma, de acordo com as variações da temperatura de topo, o teor de pentanos variou de forma semelhante com a temperatura medida, como mostrado na Figura 5.7. Neste gráfico, verificam-se dois momentos em que o teor de pentanos aumentam até aproximadamente 2,5% molar e duas quedas até próximo a 1% molar. Neste gráfico, cada ponto medido pelo analisador em linha foi comparado com a resposta do modelo inferencial no respectivo ponto.

A partir destes dados foi possível calcular o coeficiente de determinação de 86,68% e valor de 0,2424 no RMSE. Além de um desvio absoluto de até 0,6% molar.

#### b) Teste da vazão de recirculação de GLP:

O teste foi composto por dois degraus positivos de onda quadrada no *set point* com variação de 10  $m^3/h$  da vazão de recirculação de GLP. Esta variável possibilitou um

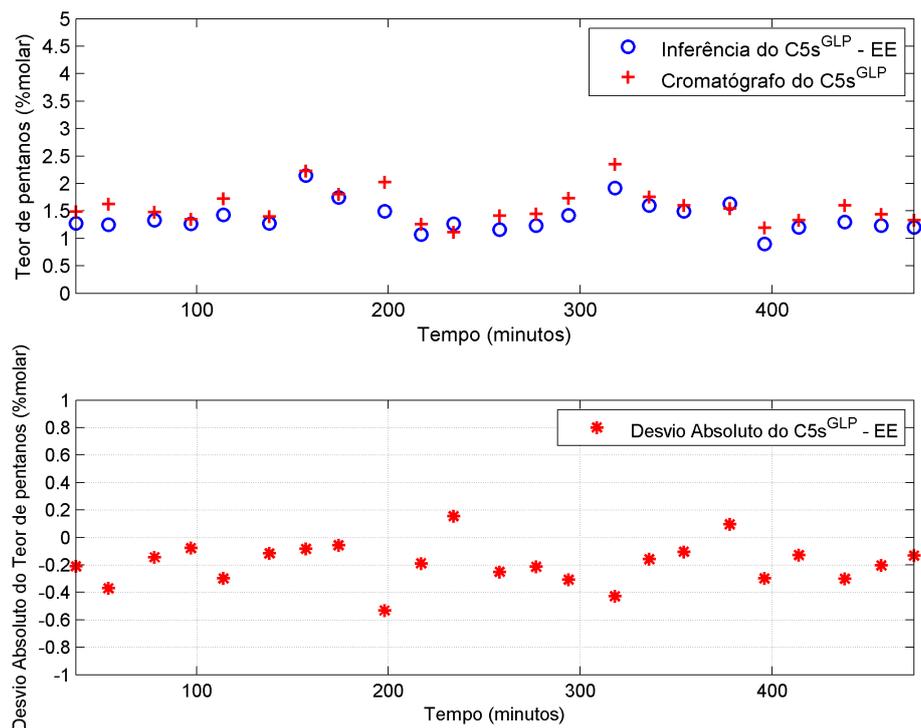


Figura 5.7: Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de refluxo.

teste com variações significativas do teor de pentanos de GLP dentro dos limites normais de processo.

O aumento vazão de recirculação de GLP significa um aumento da vazão de produto de topo que retorna para a torre quando somada à carga de entrada. Isso gera, indiretamente, uma queda de temperatura da torre, pois a carga tende a ficar mais leve e mais fria. Já quando ocorre a queda da vazão de recirculação de GLP, ocorre um rápido aumento da temperatura da torre e gera um aumento do teor de pesados no topo.

Na Figura 5.8, pode-se observar o degrau positivo da vazão de recirculação de GLP gerou um pico negativo. Já no caso contrário, quando houve queda desta vazão, a temperatura de topo mostrou um salto positivo em sua medição.

A resposta da inferência do modelo neste teste pode ser visualizada na Figura 5.9. O coeficiente de determinação obtido foi de 93,96% e valor de 0,1769 no RMSE. Observa-se neste teste que houve pontos com desvio absoluto de até 0,6% molar nas inferências próximas de 3% molar de pentanos.

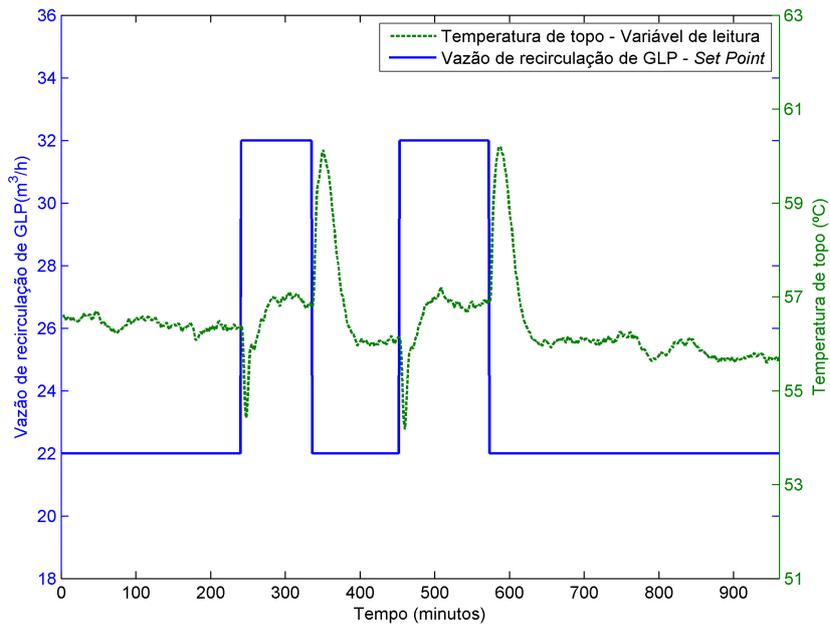


Figura 5.8: Teste da vazão de recirculação de GLP (*Set point*) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre.

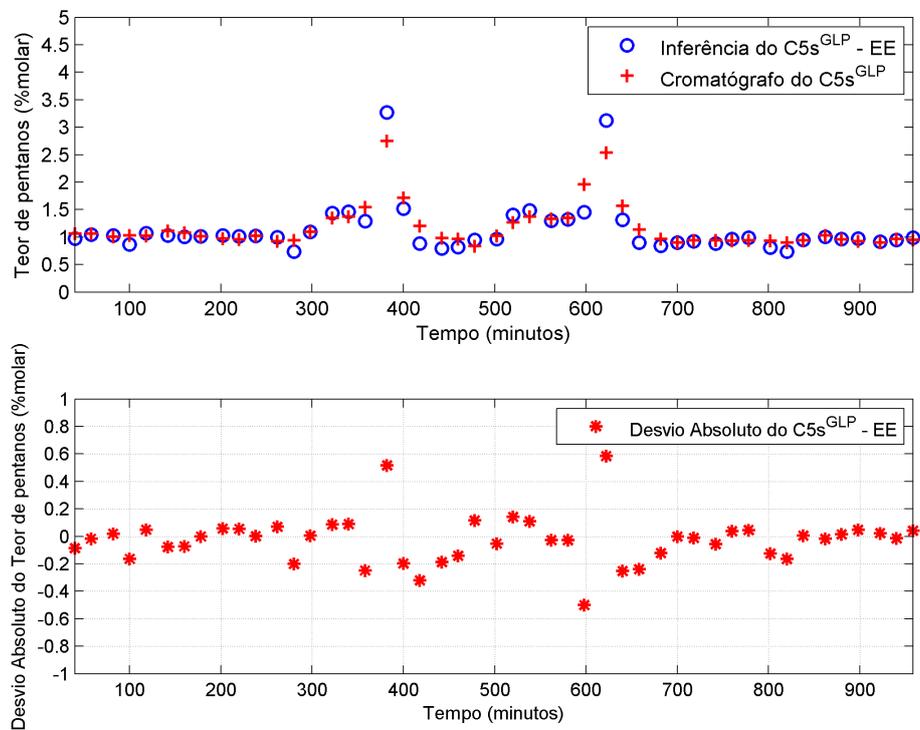


Figura 5.9: Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de recirculação de GLP.

### c) Teste da pressão de topo:

Este período foi obtido por dois degraus positivos na pressão de topo da torre desbutanizadora. Infelizmente, por se tratar de uma variável muito importante para o controle da torre, as variações no SP da pressão não foram significativas para grandes variações do teor de pentanos do GLP.

Ainda assim, é possível verificar na Figura 5.10 dois momentos muito semelhantes de resposta da temperatura de topo para cada onda quadrada do SP da pressão de topo. Quando houve o aumento da pressão, rapidamente ocorreu uma brusca queda da temperatura de topo seguida de um aumento de temperatura. Neste breve intervalo, espera-se que o teor de pentanos diminua muito pouco, já que a mudança de temperatura foi praticamente momentânea.

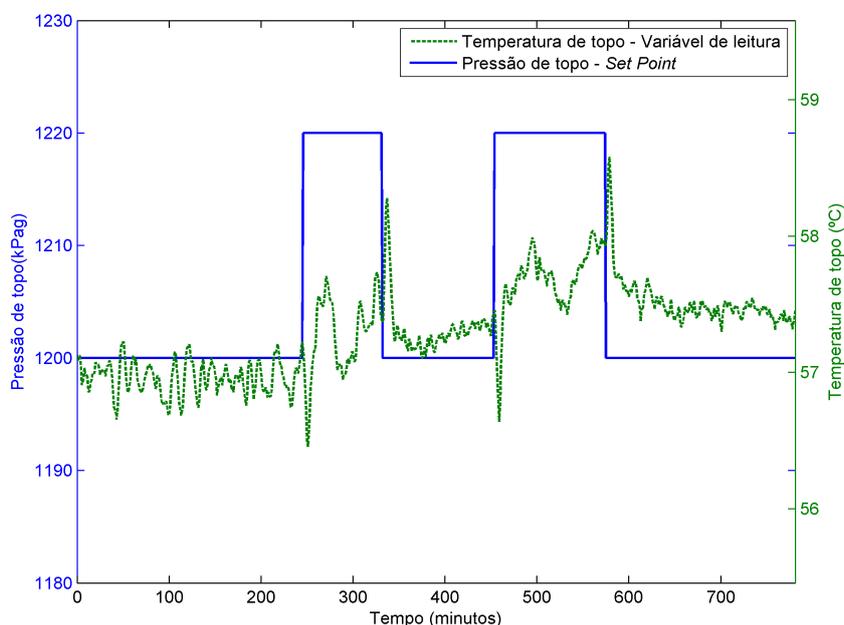


Figura 5.10: Teste da pressão de topo (*Set point*) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre.

A Figura 5.11 mostra o resultado do teor de pentanos no GLP inferido comparado ao valor medido do analisador. O coeficiente de determinação deste período foi de 77,83% e 0,0939 no RMSE. O desvio absoluto se concentrou em torno de 0,20% molar em quase todos os pontos.

### d) Teste da temperatura de prato:

Este teste foi obtido por dois degraus positivos na temperatura do prato de controle da torre desbutanizadora. Neste teste, houve variações que atingiram perdas muito elevadas do teor de pentanos. Na Figura 5.12, observa-se que para uma variação de três graus positivos no *set point* da temperatura do prato de controle, houve um

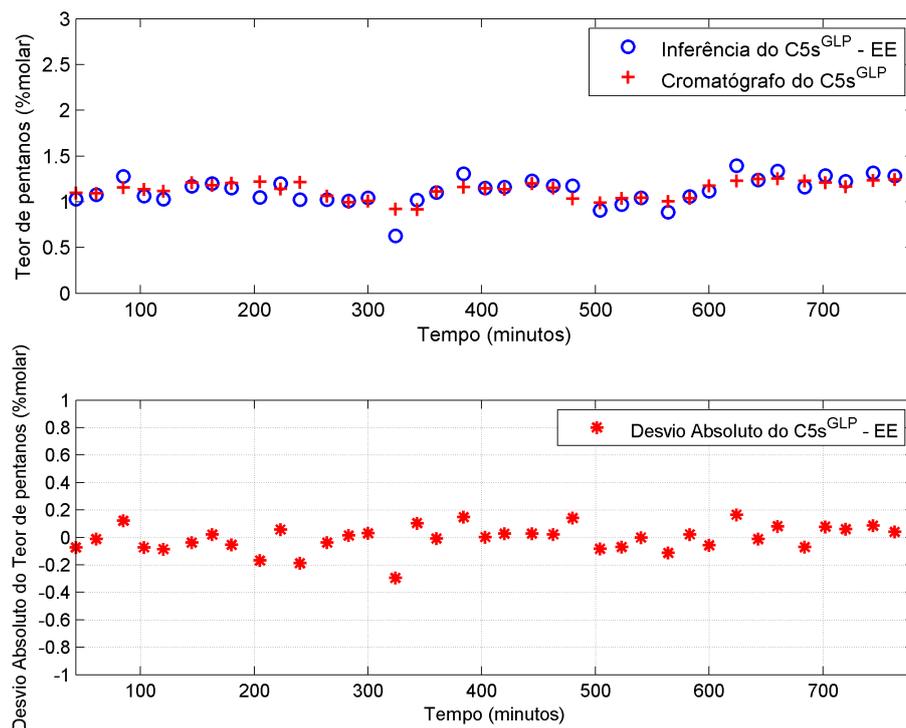


Figura 5.11: Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da pressão de topo.

aumento de aproximadamente 9°C. Esta forte relação (maior ganho estacionário) é causada porque a temperatura do prato de controle é a variável com maior força em relação ao teor de pentanos. Assim, quanto maior a temperatura, maior será a quantidade de pentanos no GLP.

Na Figura 5.13 é mostrado o resultado do teor de pentanos no GLP inferido comparado ao valor medido do analisador. Observam-se que os desvios absolutos atingiram valores elevados de até 1,6% molar nos momentos de elevada quantidade do teor de pentanos no topo. É importante notar que nesses momentos a temperatura foi saturada nos limites de segurança do MSF, causando este maior desvio. O coeficiente de determinação deste período foi de 98,52% e 0,3671 no RMSE.

#### e) Análise da capacidade de predição do modelo estacionário:

Como o modelo apresentado nessa seção é estacionário, ele tende a obter resultados antecipados com relação ao processo real, uma vez que esse possui características dinâmicas. Uma aproximação muito simplificada dessas dinâmicas se dá através de um atraso. Esse atraso se faz necessário para que os resultados do modelo estejam

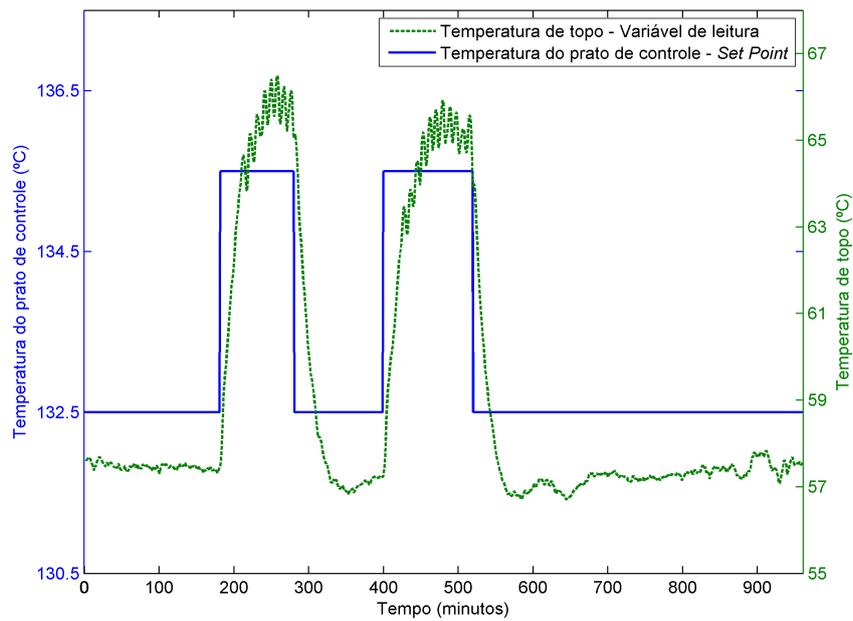


Figura 5.12: Teste da temperatura do prato de controle (*Set point*) e resposta da variável medida de temperatura de topo da torre.

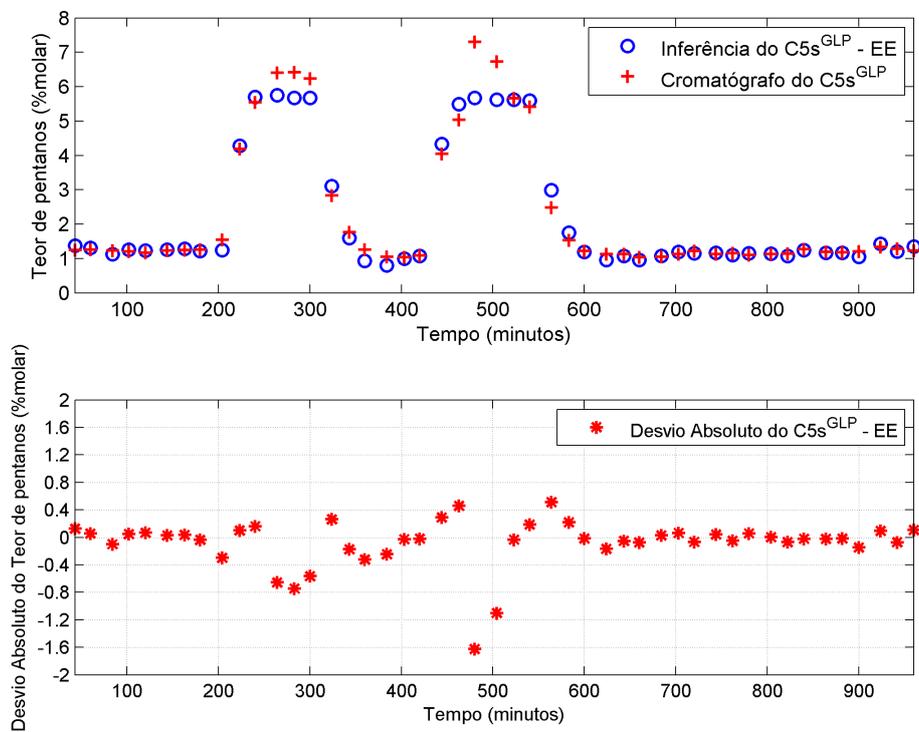


Figura 5.13: Inferência estacionária de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da temperatura de prato de controle.

na mesma faixa temporal daqueles lidos no processo.<sup>1</sup>

Todos os resultados do modelos estacionário foram obtidos com o melhor ajuste possível de atraso das medições. Isto é, a partir da melhor correlação dos pontos inferidos com o pontos do analisador a partir do valor do  $R^2$ . Assim, o atraso que conferisse o melhor resultado para cada teste realizado seria o escolhido para análise dos dados.

No entanto, para que seja escolhido um modelo estacionário com o melhor ajuste possível do atraso, foram analisados os quatro testes disponíveis na torre desbutanizadora. Desta forma, os resultados mostrados na Tabela 5.3 resumem todos as informações sobre a qualidade das inferências e o atraso estimado para o melhor ajuste com os dados da planta.

Tabela 5.3: Resultados do teor de C5s para diferentes períodos no modelo estacionário.

Testes de validação	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)	Atraso estimado (min)
M1 - Vazão de refluxo	0,2424	86,68	20
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1769	93,96	26
M3 - Pressão de topo	0,0939	77,83	36
M4 - Temperatura de prato	0,3671	98,52	24

Os testes apresentaram atrasos estimados relativamente próximos, com exceção apenas do teste de pressão de topo. Este teste, no entanto, apresentou também baixa correlação por se tratar de um teste com pouca excitação. Para que os dados sejam mais próximos em termos de correlação com os dados medidos, optou-se por utilizar uma média do atraso estimado dos testes M2 e M4, resultado em 25 minutos como ajuste final do modelo estacionário.

Assim, escolhido o atraso médio de 25 minutos, os ajustes feitos para o teor de pentanos de GLP pode ser visualizados na Tabela 5.4. Como pode ser observado, a qualidade da inferência teve pouca alteração final. Apenas o teste da pressão de topo apresentou menor qualidade da inferência comparado aos demais testes, no entanto, ainda mostrou um coeficiente de determinação de 72% e o menor valor de RMSE. Além disso, resultados muito bons podem ser observados para o teste de vazão de recirculação de GLP e de temperatura de prato, com valores de  $R^2$  acima de 93,6% e 98,4%, respectivamente.

Pode-se concluir que o modelo estacionário para a predição do teor de pentanos do GLP gerou bons resultados comparados às análises de cromatógrafo da planta. Apesar do ajuste necessário para a correção do atraso com os dados medidos de planta, foi possível obter um coeficiente de determinação de até 98,4% e valores satisfatórios de RMSE, inferiores 0,4% molar.

<sup>1</sup>Na Seção 5.2, os resultados para o modelo dinâmico são avaliados.

Tabela 5.4: Resultados finais do teor de C5s no modelo estacionário.

Testes de validação	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
M1 - Vazão de refluxo	0,2897	84,42
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1721	93,62
M3 - Pressão de topo	0,1087	72,21
M4 - Temperatura de prato	0,3732	98,44

#### 5.1.4 Inferência Estacionária da PVR da Nafta

A inferência da PVR da nafta foi obtida para ser comparada com a PVR estimada da planta. Como o analisador de fundo permitiu análises frequentes da composição de fundo, a estimativa da PVR da planta foi obtida com a mesma frequência do analisador da nafta, com período médio de 6 minutos.

As inferências de PVR foram corrigidas com um *bias* fixo obtido pela desvio médio dos dados inferidos com os dados de planta. Desta forma, cada teste foi ajustado com um *bias* fixo do período total de teste.

Todos os testes já mostrados para o modelo estacionário permitiram avaliar a resposta da planta quanto a sua concentração de leves no fundo. Através da análise da PVR, foi possível verificar que nos momentos de aumento do teor de pentanos no GLP, também houve a queda da PVR, pois a composição do produto de fundo ficou mais concentrada em componentes pesados (nC5 e C6+).

Cada teste será avaliado quanto a qualidade de PVR aplicada com *bias* em cada período de teste da torre. Ao final dos quatro testes da torre, o modelo estacionário utilizará a correção de (*bias*) com um valor fixo, assim como também será ajustado o atraso adequado. Este valor será obtido a partir da média dos valores de *bias* observados nos períodos de testes.

##### a) Teste da vazão de refluxo:

A inferência estacionária da PVR no teste da vazão de refluxo apresentou alguns desvios com relação à estimativa feita na planta, mesmo após o ajuste do *bias*.

Na Figura 5.14, verifica-se que os desvios da PVR resultaram em erros absolutos de até 0,4 psi. Isso afetou também o coeficiente de determinação, sendo o valor obtido de 73%. Já no trecho inicial do gráfico, observa-se que a inferência apresentou resultados de forma muito similar aos dados da planta. Além disso, tanto o patamar inicial (próximo à 12 psi) como o final (abaixo de 12 psi) do teste mostram que a tendência da PVR inferida foi seguir as estimativas da PVR da planta. Assim, o RMSE obtido neste teste foi de apenas 0,0951 psi, apesar de alguns desvios observados.

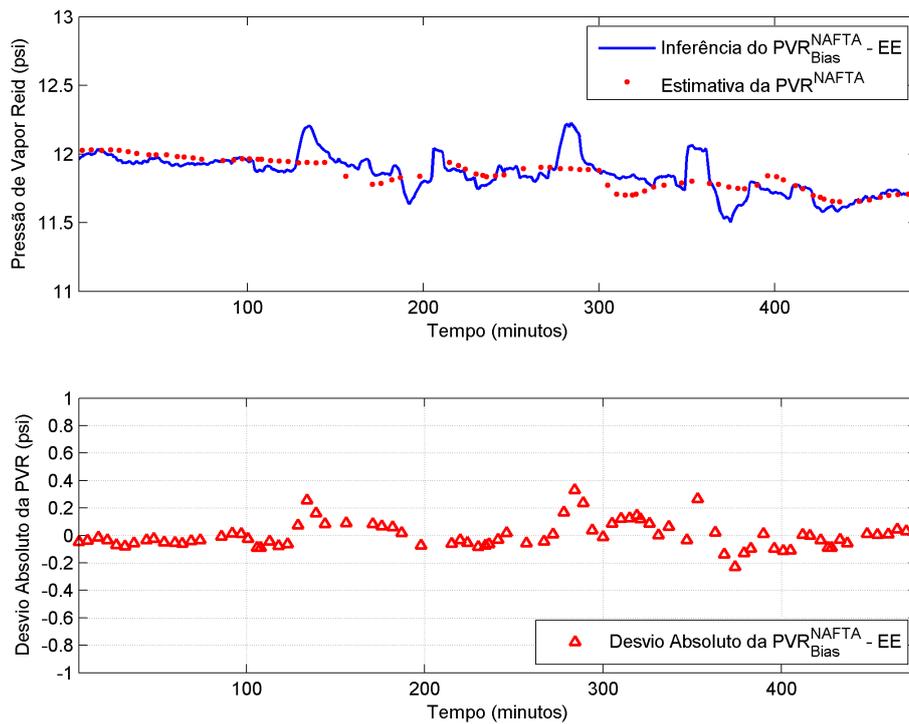


Figura 5.14: Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de vazão de refluxo.

**b) Teste da vazão de recirculação de GLP:**

No teste da vazão de recirculação de GLP, as variações da PVR foram mais significativas, o que permitiu uma melhor comparação com os dados inferidos e dados da planta.

Na Figura 5.15, observa-se que a tendência da resposta predita PVR foi muito parecida com a estimativa da planta. Isto resultou em um coeficiente de determinação mais elevado que o do teste com a vazão de refluxo. A qualidade da inferência foi de 85% no  $R^2$  e de 0,1137 psi no RMSE. Como alguns picos da inferência não foram observados nos dados de planta, o desvio absoluto chegou à 0,6 psi, porém trata-se de ponto muito isolado se comparado com a média de desvio em mais ou menos 0,2 psi.

**c) Teste da pressão de topo:**

O período do teste de pressão de topo possibilitou uma análise de PVR em um período sem grandes variações de processo. Ainda assim, foi possível observar que a inferência PVR apresentou bons resultados.

Na Figura 5.16, verifica-se que a comparação dos pontos da inferência PVR praticamente não desvia dos valores estimados de planta, apresentando um elevado

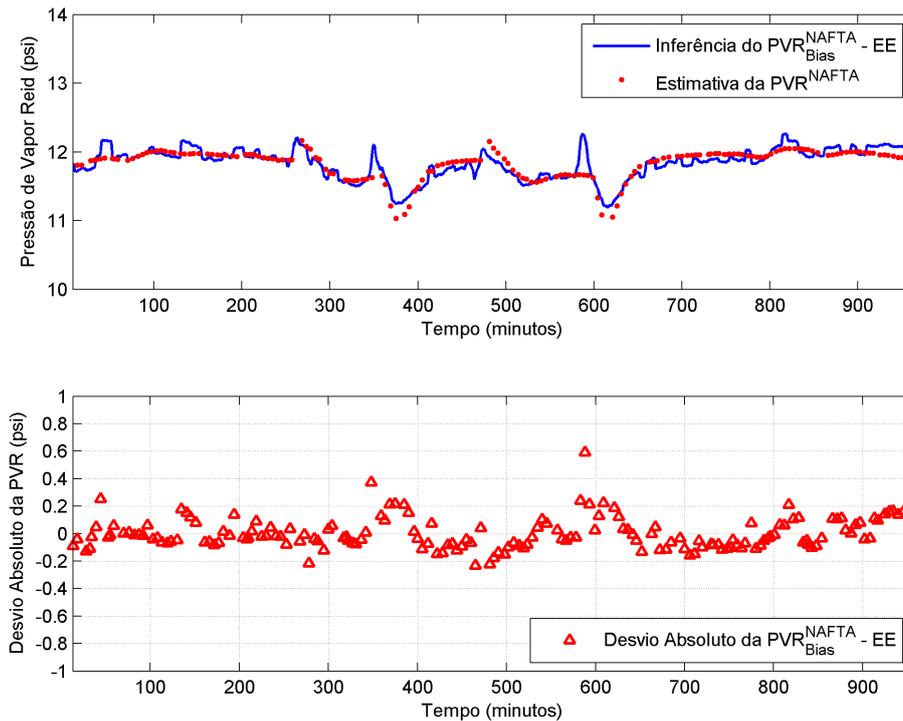


Figura 5.15: Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de vazão de recirculação de GLP.

$R^2$  em 91,81%. A qualidade deste resultado pode ser comprovada a partir do gráfico do desvio absoluto que oscilou muito próximo a zero, com desvio absoluto máximo em 0,20 psi.

**d) Teste da temperatura do prato de controle:**

O teste da temperatura do prato de controle foi fundamental para a análise do modelo quando submetido à grandes variações na variável inferida. Como houve um grande aumento na temperatura da torre seguindo de um decréscimo da mesma, foi possível observar uma resposta inversa na PVR. Isto é, nos momentos de temperaturas elevadas, a PVR estava drasticamente menor.

Na Figura 5.17, verifica-se que a resposta de predição da PVR acompanhou a tendência da estimativa da planta. Com isso, foram obtidos valores de  $R^2$  em 95,76%. Por conta das oscilações de predição, o valor do RMSE foi o mais elevado dos testes, no valor de 0,3092 psi.

**e) Análise da capacidade de predição do modelo estacionário:**

Todos os testes para a análise inicial da PVR mostraram bons resultados com os dados estimados de planta. Em cada teste, foi utilizado o melhor ajuste de atraso com os dados de planta.

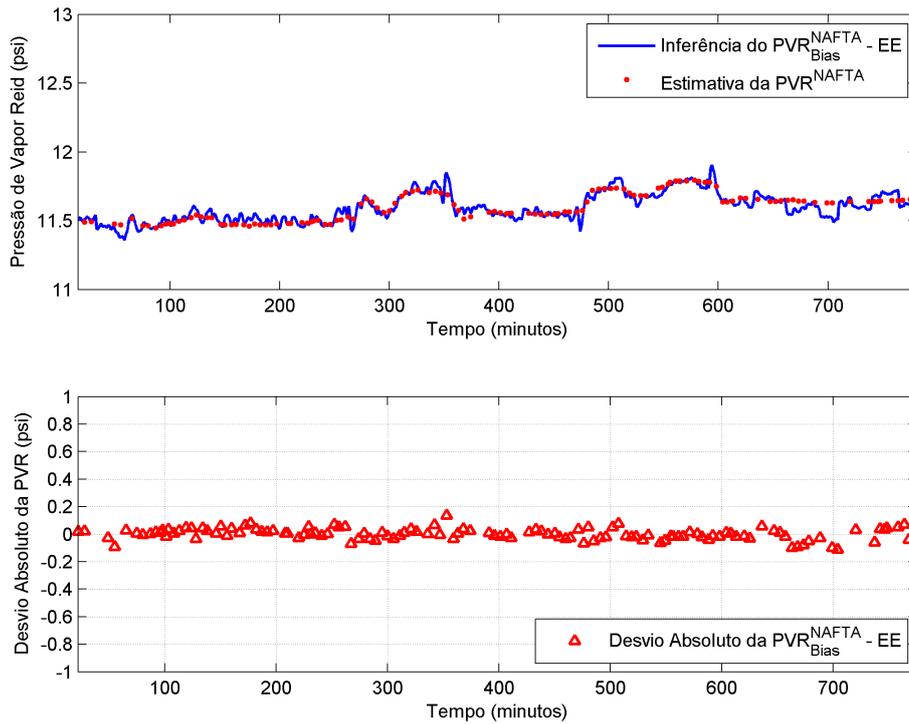


Figura 5.16: Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de pressão de topo.

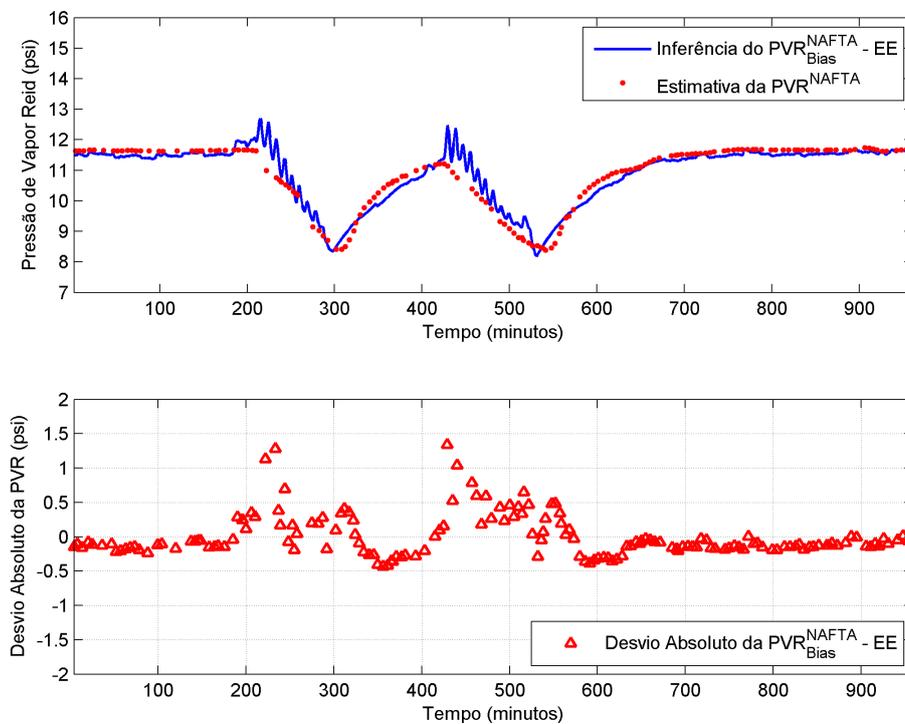


Figura 5.17: Inferência da PVR da nafta e o desvio absoluto no teste de temperatura de prato.

Na Tabela 5.5 encontram-se todos os resultados das análises dos testes de inferência da PVR, bem como os atrasos utilizados. Nestes testes, observa-se que os atrasos foram muito diferentes, sendo a principal diferença entre os testes M3 e M4.

Tabela 5.5: Resultados do teor de PVR para dois valores no parâmetro no modelo.

Testes de validação	RMSE (psi)	$R^2$ (%)	<i>Bias</i> (psi)	Atraso estimado (min)
M1 - Vazão de refluxo	0,0951	73,34	2,5963	3
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1137	85,61	2,5768	7
M3 - Pressão de topo	0,0406	91,81	2,7071	15
M4 - Temperatura de prato	0,3092	95,76	2,8356	1

Para que os resultados do modelo estacionário fossem o mais bem ajustados para diferentes cenários de processo, optou-se por escolher o atraso referente ao teste M2, com o valor de 7 minutos. O ajuste do *bias* foi obtido a partir da média dos quatro testes, obtendo-se o valor de 2,6807 psi.

Desta forma, todas as análises da qualidade da inferência foram refeitas para um modelo estacionário ajustado com um *bias* fixo e valor de atraso estimado em 7 minutos, como mostrado na Tabela 5.6.

Tabela 5.6: Resultado final do teor de PVR no modelo estacionário.

Testes de validação	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
M1 - Vazão de refluxo	0,1274	71,44
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1540	85,61
M3 - Pressão de topo	0,0599	86,78
M4 - Temperatura de prato	0,4215	93,05

Os resultados da inferência da PVR foram satisfatórios quando comparado aos dados de planta. Mesmo com uma correção fixa de *bias* para todos os períodos de testes, foi possível obter correlações elevadas de até 93,06% no  $R^2$  e de valor baixo de RMSE em até 0,06 psi.

Todos estes resultados mostraram que os desvios observados do modelo estacionário com os dados estimados de PVR da planta não afetaram significativamente a qualidade da predição pelo modelo estacionário proposto. Em geral, todos os resultados mostraram que o modelo estacionário reduzido foi muito promissor, tanto pela simplicidade do modelo quanto pela qualidade dos resultados.

## 5.2 Inferência Dinâmica

O MSF dinâmico foi desenvolvido a fim de obter uma ferramenta capaz de considerar a dinâmica inerente dos processos reais.

No caso em estudo, a torre desbutanizadora possui uma dinâmica consideravelmente lenta, pois trocas térmicas e de transferência de massa ocorrem ao longo de 36 bandejas de equilíbrio. Além disso, existem diferentes volumes nos tanques de topo (vaso de acúmulo de topo) e fundo (vaso de fundo da torre) que permitem que diferentes tempos de residência sejam obtidos nas saídas dos produtos de topo e de fundo.

Sendo assim, o modelo reduzido dinâmico foi desenvolvido utilizando o melhor ajuste possível dos parâmetros dinâmicos a partir do conhecimento das dimensões da torre desbutanizadora e utilização de testes com perturbações nas principais variáveis de controle da torre.

### 5.2.1 Parâmetros de ajuste da dinâmica do modelo

Como já visto na Seção 4.3.1, os ajustes dos parâmetros do modelo dinâmico foram obtidos através da variação do volume de líquido estimado no topo e no fundo. Nesta etapa, observou-se que os valores de volumes dos vaso de acúmulo de líquido no topo ( $Vol_{Topo}^{Liq.}$ ) da torre e o vaso de fundo ( $Vol_{Fundo}^{Liq.}$ ) ajustaram os resultados das inferências com a dinâmica semelhante ao do processo real.

Inicialmente, foram obtidos diversos valores para o parâmetro volume de líquido do vaso de topo, partindo-se de seu valor inicial estimado. Além disso, foi utilizado o volume de fundo constante em  $1\ m^3$  que corresponde ao volume estimado de líquido no vaso de fundo. Esta avaliação inicial do parâmetro de topo foi necessária para explorar os diferentes valores de volume possíveis para a inferência do teor de pentanos no GLP.

Como pode ser observado na Tabela 5.7, observou-se que o valor de  $R^2$  foi elevado para todas as variações de volume de topo, com valores acima de 98%. Os valores de RMSE também foram satisfatórios em valores com média de 0,07% molar. Esses resultados indicam que existe o melhor ajuste para o  $Vol_{Topo}^{Liq.}$  para a inferência de chave pesado no produto de topo.

Nesta avaliação do parâmetro de topo, optou-se por utilizar dois valores de volume de topo como melhores resultados em termos de  $R^2$ , sendo portanto, os volumes de  $7,5\ m^3$  e de  $8,5\ m^3$ . A partir destes valores, foram testados diferentes valores do volume de fundo.

Para estimar o parâmetro de fundo, foi utilizada a qualidade da inferência da PVR como variável de decisão, pois a dinâmica do *flash* de fundo está diretamente relacionada à especificação do produto de fundo. Para isto, foi necessário utilizar a

Tabela 5.7: Resultados do teor de C5s do GLP na variação no parâmetro de topo do modelo dinâmico.

$Vol_{Fundos}^{Liq.}$	$Vol_{Topo}^{Liq.} (m^3)$	RMSE (% molar)	$R^2$ (%)
1,0	5,5	0,0888	98,64
1,0	6,5	0,0775	98,77
1,0	7,5	0,0693	98,86
1,0	8,5	0,0666	98,82
1,0	9,5	0,0660	98,74
1,0	10,5	0,0707	98,45

correção de *bias* fixada para cada teste.

Como pode ser observado na Tabela 5.8, os valores do  $R^2$  da PVR foram elevados, todos acima de 86%. O menor valor de RMSE foi de 0,1007 e máximo valor de  $R^2$  de 88,39%, ambos obtidos com a combinação de  $Vol_{Fundos}^{Liq.}$  igual a  $1,0m^3$  e  $Vol_{Topo}^{Liq.}$  de  $7,5m^3$ . Sendo assim, esses foram os parâmetros fixos para o modelo dinâmico ser testado nos quatro períodos de testes da torre desbutanizadora.

Tabela 5.8: Resultados da PVR na variação no parâmetro de fundo do modelo dinâmico.

$Vol_{Fundos}^{Liq.} (m^3)$	$Vol_{Topo}^{Liq.} (m^3)$	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
0,5	7,5	0,1052	87,47
1,0	7,5	0,1007	88,39
1,5	7,5	0,1030	87,78
2,0	7,5	0,1091	86,20
0,5	8,5	0,1049	87,54
1,0	8,5	0,1011	88,29
1,5	8,5	0,1032	87,73
2,0	8,5	0,1090	86,22

## 5.2.2 Inferência Dinâmica do Teor de Pentanos do GLP

O modelo dinâmico foi testado para os mesmos períodos de testes da torre desbutanizadora realizadas com o modelo estacionário. Além de obter as análises dos valores absolutos do teor de pentanos do GLP comparado ao cromatógrafo da planta, os quatro testes foram utilizados para a melhor estimativa do atraso inerente do processo.

Da mesma forma que o modelo estacionário, o atraso foi ajustado para cada teste a partir da melhor correlação dos dados inferidos em cada período de teste. Este atraso, caracterizado pelo atraso de medição do analisador em linha e pelo tempo morto do processo, foi aplicado ao final das análises de qualidade das inferências dos

testes da torre. Desta forma, foi possível analisar melhor o atraso adequado para o ajuste final do modelo.

#### a) Teste da vazão de refluxo:

A inferência do teor de pentanos no teste da vazão de refluxo pode ser verificada na Figura 5.18. Neste gráfico, observa-se que os desvios absolutos se concentram dentro de 0,20% molar, com exceção de apenas dois pontos mais próximos ao erro de 0,40% molar.

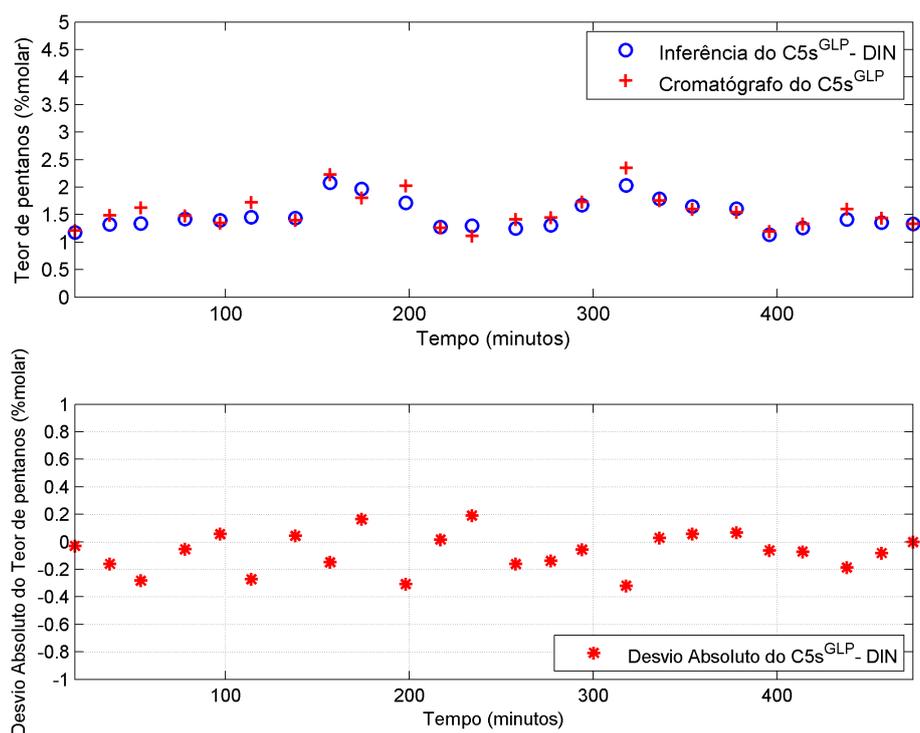


Figura 5.18: Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de refluxo.

Estes resultados obtiveram um coeficiente de determinação de 89,28% e valor de RMSE em 0,1553% molar.

#### b) Teste da vazão de recirculação de GLP:

O período de teste na vazão de recirculação de GLP apresentou resultados satisfatórios, com um coeficiente de determinação elevada em 98,86% no  $R^2$  e valor de RMSE de apenas 0,0693% molar. O atraso obtido neste teste foi de 16 minutos.

Na Figura 5.19 é possível observar como os desvios absolutos foram pequenos, com a grande maioria inferior a 0,1% molar.

Vale destacar neste teste que a variação do teor de pentanos foi muito importante para a avaliação do modelo dinâmico, pois trata-se de um teste com perturbação

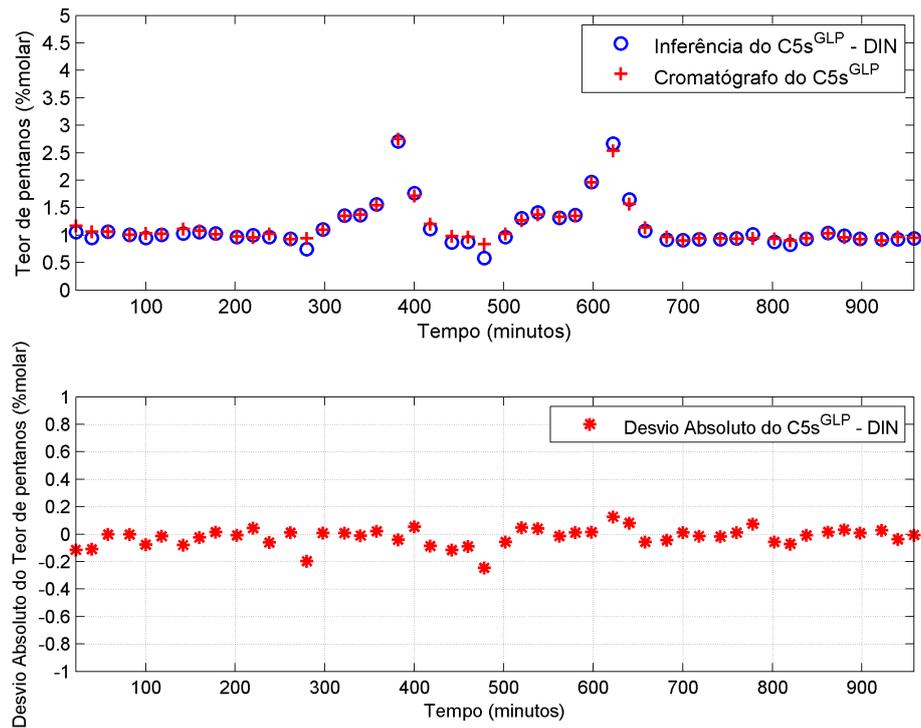


Figura 5.19: Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da vazão de recirculação de GLP.

significativa nas variáveis de processo. Os desvios ficaram inferiores a 0,2% molar mesmo quando a perturbação levava a mudanças no teor de C5 em torno de 2% molar. Observa-se, portanto, que os parâmetros dinâmicos escolhidos levaram a resultados satisfatórios para este período.

### c) Teste da pressão de topo:

O teste da pressão de topo não apresentou grandes variações do teor de pentanos medido. No entanto, este teste foi muito importante para avaliar o modelo quando as respostas do analisador são mais suaves em torno de um ponto operacional típico.

Na Figura 5.20, observa-se que os pontos inferidos foram muito próximos dos valores do analisador da planta, principalmente nas poucas variações em torno dos valores de 0,5% molar e de 1,5% molar de pentanos. Neste teste, foram obtidos 88,87% no  $R^2$  e valor de RMSE de apenas 0,0679% molar. Já o atraso calculado foi de 21 minutos.

### d) Teste da temperatura do prato de controle:

O teste da variação de temperatura de prato serviu para verificar o modelo quando ocorrem grandes variações nas variáveis de processo. Neste caso, a torre perdeu muito do teor de pentanos, ficando fora da especificação de 2% molar no GLP.

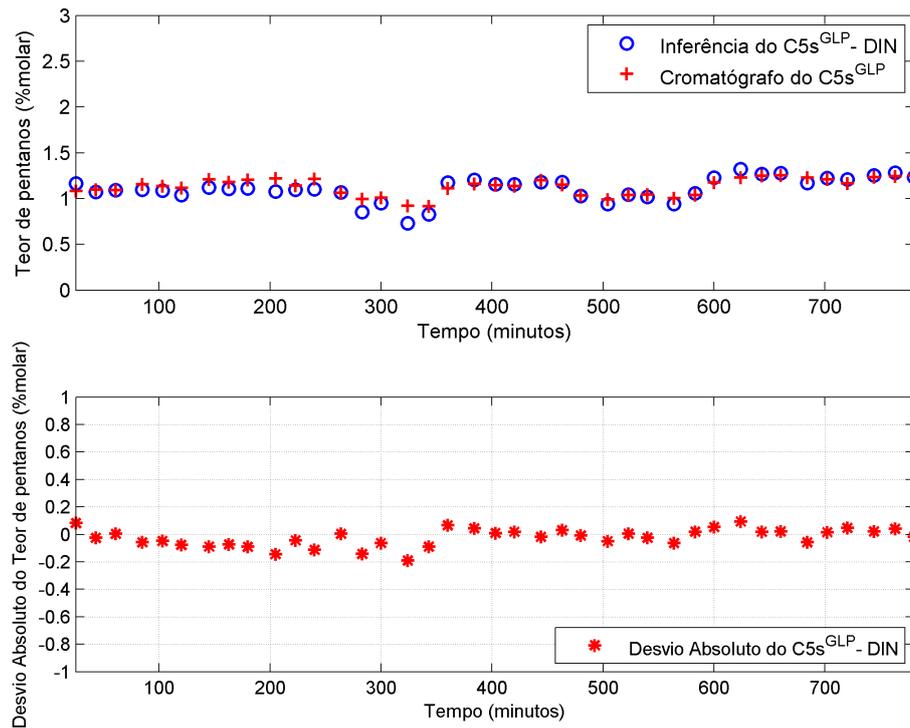


Figura 5.20: Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste da pressão de topo.

Ainda assim, este teste mostrou que o modelo foi capaz de perseguir os pontos medidos de forma satisfatória em sua maior parte dos pontos. Como pode ser visto na Figura 5.21, apenas nos pontos acima de 4% molar de pentanos o modelo apresentou desvios superiores a 0,8% molar. Como esses valores já se encontram muito além da especificação do GLP, esses erros não se configuram um problema prático. Para aplicações em tempo real, o modelo é capaz de captar a tendência com acurácia, o que é fundamental para o controle.

Este teste também foi utilizado para avaliar a robustez do modelo reduzido. Desta forma, os dados de leitura na simulação passaram por ajustes para que o modelo obtivesse todos os pontos convergidos. Por esta razão, os desvios observados na Figura 5.21 são elevados quando o teor de pentanos estava acima de 4% molar. Todo o detalhamento destas correções de leitura são apresentados na Seção 5.3

#### e) Análise da capacidade de predição do modelo dinâmico:

Todos os resultados para obter a inferência do teor de pentanos com o modelo dinâmico estão resumidos na Tabela 5.9. Observa-se que todos os testes apresentaram elevados valores de correlação pelo  $R^2$ . Já os valores de RMSE foram mais baixos nos testes de recirculação de GLP e de pressão de topo.

Para que todos os testes estejam mais próximos do melhor ajuste, o atraso

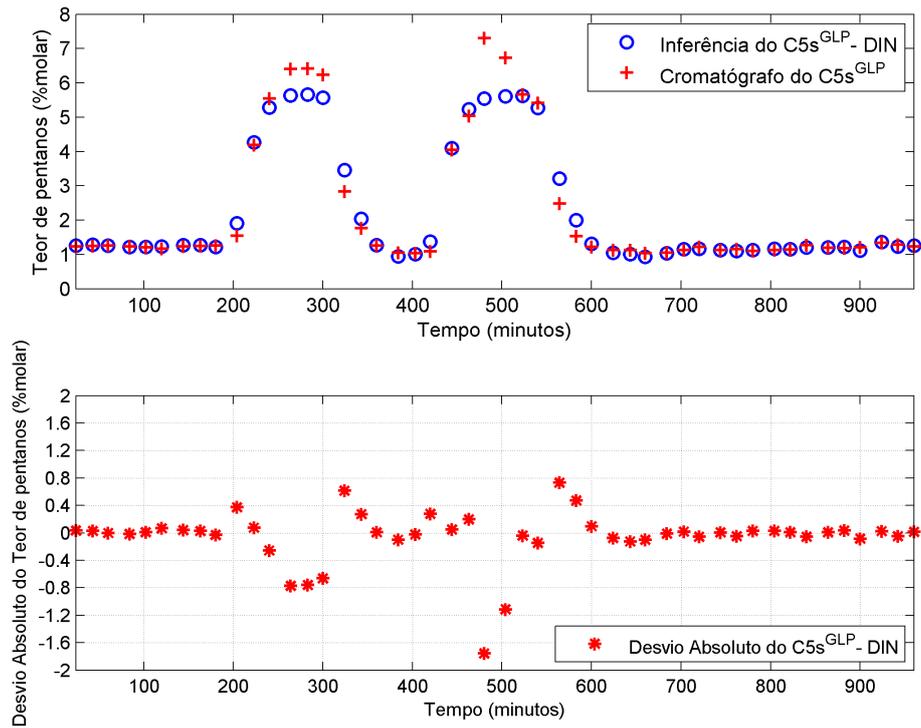


Figura 5.21: Inferência dinâmica de C5s do GLP nos pontos de virada do cromatógrafo no teste de temperatura do prato de controle.

Tabela 5.9: Resultados do teor de C5s no modelo dinâmico nos quatro testes da torre T-03.

Testes de validação	RMSE (% molar)	$R^2$ (%)	Atraso (min)
M1 - Vazão de refluxo	0,1553	89,27	13
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,0693	98,87	16
M3 - Pressão de topo	0,0679	88,16	21
M4 - Temperatura de prato	0,3978	98,44	12

escolhido para o modelo dinâmico foi obtido pela média dos atrasos dos testes M1, M2 e M4, resultando em 14 minutos. Este valor, pode ser atribuído ao atraso nas medições dos analisadores em linha, pois estes variam de 17 a 23 minutos.

Apenas o atraso calculado no teste de pressão de topo (M3) foi descartado porque é o período em que houve pouca alteração do teor de pentanos, ou seja, foi um período muito próximo do estacionário, o que pode prejudicar na escolha do atraso do modelo.

O resultado final com o uso do atraso fixo pode ser analisado na Tabela 5.10. Verifica-se que todos os valores de  $R^2$  decrescem um pouco quando comparados ao melhor ajuste possível mostrado na Tabela 5.9. Ainda assim, os resultados são muito satisfatórios para uma inferência de composição molar. O valor máximo de  $R^2$  chega

à 98,30% e o RMSE chega a valores mínimos em 0,0710% molar.

Tabela 5.10: Resultado final do teor de C5s no modelo dinâmico.

Testes de validação	RMSE (% molar)	$R^2$ (%)
M1 - Vazão de refluxo	0,1560	89,16
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,0878	97,96
M3 - Pressão de topo	0,0710	85,41
M4 - Temperatura de prato	0,4101	98,31

Com relação ao ajuste do volume de líquido de topo no modelo dinâmico reduzido, verificou-se que os resultados de inferência obtiveram uma boa acurácia quando comparados aos dados de planta. Com isso, as variações observadas no teor de pentanos medido nos quatro testes na torre foram previstas satisfatoriamente pelo modelo proposto.

### 5.2.3 Inferência Dinâmica da PVR da Nafta

O uso do modo dinâmico no modelo reduzido permitiu avaliar a dinâmica do fundo da torre desbutanizadora a partir das estimativas de PVR da planta. Conforme já explicado nas análises do modelo estacionário, essas estimativas de PVR foram obtidas com a frequência das análises de composição do produto de fundo da torre desbutanizadora.

As inferências de PVR foram corrigidas com um *bias* fixo da mesma forma que no modelo estacionário. Assim, todos os testes foram ajustados, cada um, com um *bias* fixo do período.

#### a) Teste da vazão de refluxo:

A inferência da PVR no teste da vazão de refluxo apresentou um coeficiente de determinação de 73,77% e valor de RMSE em 0,0880 psi. Este resultado pode ser verificado na Figura 5.22. Neste gráfico, observa-se que houveram períodos com desvios das inferência PVR em relação aos pontos estimados em até 0,2 psi.

#### b) Teste da vazão de recirculação de GLP:

O teste na vazão de recirculação de GLP apresentou resultados nas previsões de PVR próximos aos dados estimados de planta. Alguns desvios podem ser observados, atingindo até 0,4 psi. Estas análises podem ser observadas na Figura 5.23.

Neste período, a qualidade da inferência da PVR apresentou um coeficiente de determinação de 88,39% e valor de RMSE em 0,1007 psi. No geral, a tendência dos pontos inferidos foi satisfatória, considerando que foi utilizado apenas um *bias* fixo.

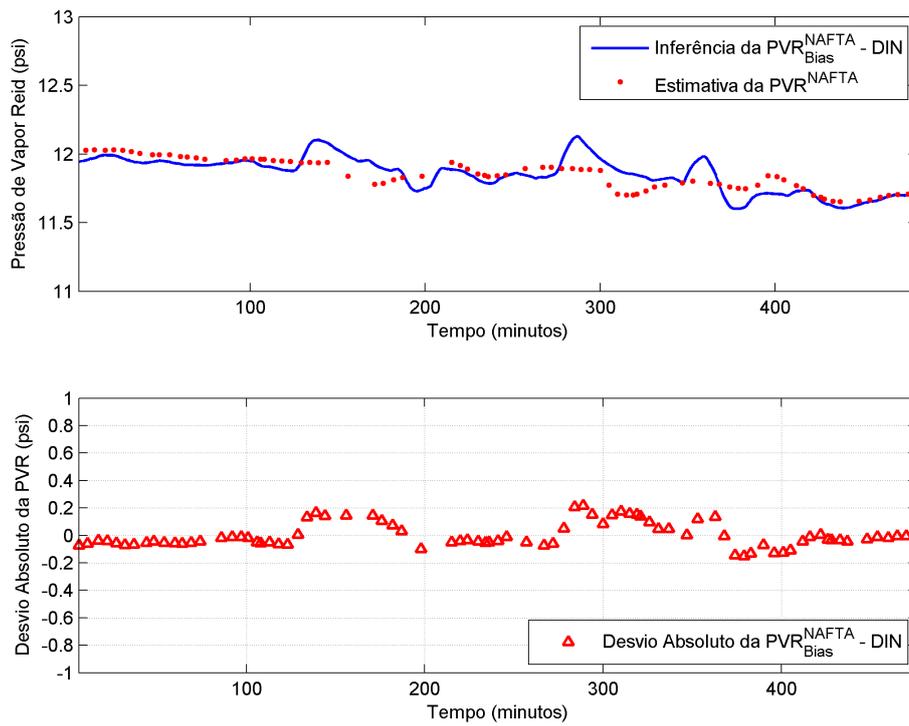


Figura 5.22: Inferência dinâmica da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da vazão de refluxo.

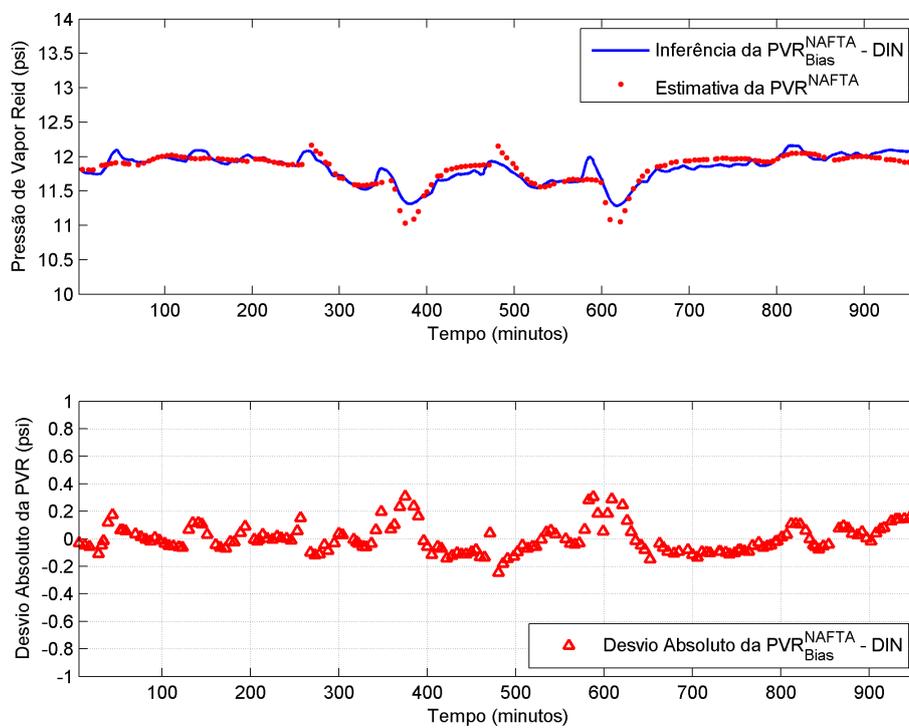


Figura 5.23: Inferência dinâmica de da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da vazão de recirculação de GLP.

### c) Teste da pressão de topo:

O teste da pressão de topo apresentou resultados muito satisfatórios, com 94,92% de  $R^2$  e valor de RMSE em 0,0316 psi. Neste teste, pode-se ver que grande parte das variações da PVR estimada de planta foram previstas pelo modelo dinâmico reduzido. Na Figura 5.24 é possível observar a qualidade da inferência. Destaca-se que os desvios absolutos foram muito próximos de zero.

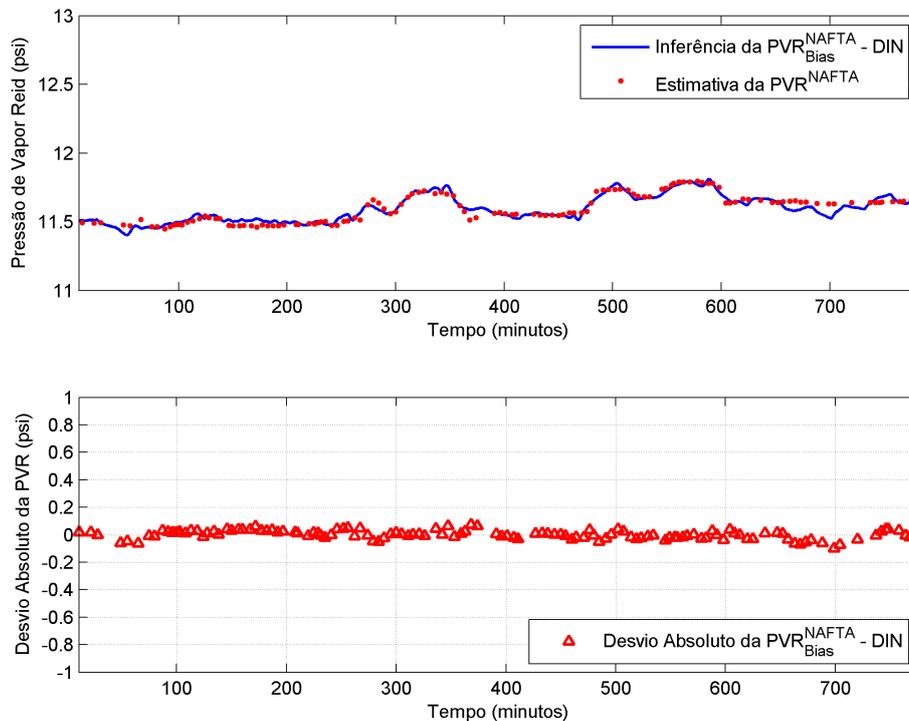


Figura 5.24: Inferência dinâmica de da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste da pressão de topo.

### d) Teste da temperatura do prato de controle:

O teste da temperatura do prato de controle mostrou grandes variações de PVR estimada de planta. O modelo conseguiu prever bem essas variações, mas desvios absolutos das inferências chegaram a 1,2 psi, conforme mostrado na Figura 5.25.

Observa-se que a trajetória das curvas foram mais afastadas durante as grandes variações de aproximadamente 4 psi, afetando o valor de RMSE para um valor mais alto, com erro em 0,4129 psi. Ainda assim, foi obtido 92,27% de  $R^2$ , mostrando que a tendência dos dados foi bem capturada.

### e) Análise da capacidade de predição do modelo dinâmico:

Os resultados da inferência da PVR da nafta obtidos pelo modelos dinâmico reduzido estão ser resumidos na Tabela 5.11. Nesta tabela, os valores de *bias* utilizados para

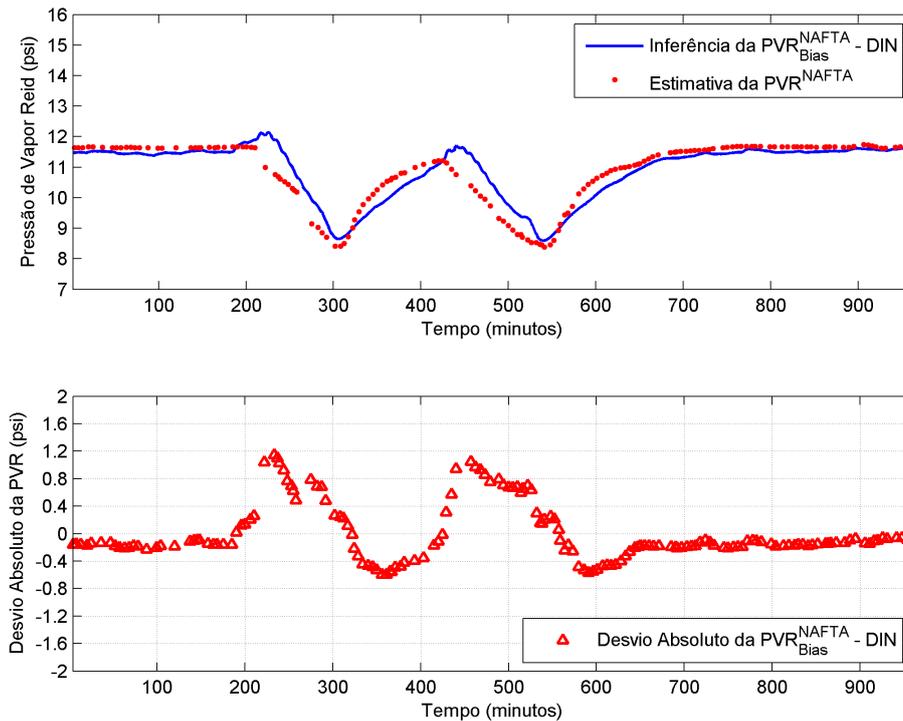


Figura 5.25: Inferência dinâmica de da PVR da nafta e o valor estimado de planta no teste de temperatura do prato de controle.

cada teste podem ser visualizados. Nota-se que os valores são próximos.

Tabela 5.11: Resultados da PVR da nafta no modelo dinâmico nos quatro testes da torre T-03.

Testes de validação	RMSE (psi)	$R^2$ (%)	<i>Bias</i> (psi)	Atraso (min)
M1 - Vazão de refluxo	0,0880	73,76	2,6533	1
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1007	88,39	2,5815	1
M3 - Pressão de topo	0,0316	94,91	2,7073	7
M4 - Temperatura de prato	0,4129	92,27	2,8533	1

Quanto ao atraso calculado para cada teste, verifica-se que os valores foram iguais em quase todos os testes com o valor de 1 minuto. Apenas no teste de pressão de topo o valor foi de 7 minutos, o que pode ser explicado por se tratar de um período com poucas variações da PVR. Com isso, apesar do bom resultado obtido no teste M3, foi escolhido o atraso de 1 minuto para o ajuste final nos quatro testes da torre desbutanizadora.

Na Tabela 5.12 é possível observar que a mudança no valor do atraso do teste de pressão de topo não alterou muito a qualidade da inferência, permitindo ainda um  $R^2$  de 93,10% e um erro baixo, com RMSE em 0,0382 psi.

O uso do modelo dinâmico reduzido na inferência da PVR mostrou resultados

Tabela 5.12: Resultado final da PVR da nafta no modelo dinâmico.

Testes de validação	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
M1 - Vazão de refluxo	0,0880	73,76
M2 - Vazão de recirculação de GLP	0,1007	88,39
M3 - Pressão de topo	0,0382	93,10
M4 - Temperatura de prato	0,4129	92,27

semelhantes aos valores estimados da PVR planta. O parâmetro de ajuste do modelo, volume de líquido de fundo, levou a resultados mais suaves, sem comprometer a característica dinâmica dos dados analisados.

#### 5.2.4 Avaliação do Modelo Estacionário e Dinâmico para Aplicação em Tempo Real

O MSF mostrou resultados satisfatórios para a maioria dos testes realizados na torre desbutanizadora, tanto com a utilização do modo estacionário (ME) como no dinâmico (MD). No caso do modelo dinâmico, é esperado que a predição seja mais bem ajustada aos dados medidos nos intervalos com perturbações das variáveis de controle da torre. Ambos os modelos (ME e MD), no entanto, podem apresentar bons resultados nos períodos sem grandes variações de processo.

Os valores de teor de pentanos no GLP e da PVR na nafta foram comparadas com os dados disponíveis da planta na frequência de análise dos produtos da torre. No entanto, é essencial que tanto o modelo estacionário quanto o dinâmico apresentem um desempenho de predição adequado, além de uma frequência maior que a do analisador. A principal relevância do uso de um estimador de composição é exatamente poder contar com predições confiáveis e em alta frequência. Por isso, é necessário avaliar também os resultados nos períodos em que não houve medição de planta para validação dos dados inferidos.

Com isso, todas as inferências para o teor de pentanos no GLP e para a PVR na nafta foram comparadas com os resultados do estacionário e com o do dinâmico, nos quatro testes aplicados na torre desbutanizadora. O objetivo foi analisar o modelo mais adequado para aplicação em tempo real. Em todos os gráficos foram utilizados os ajustes finais de atrasos para as inferências de topo e de fundo. No caso da PVR, também foi utilizado o *bias* fixo nos resultados.

Os resultados das inferências obtidos pelos modelos estacionário e dinâmico foram comparados a partir dos resumos dos resultados do  $R^2$  e do valor de RMSE. A seguir, são mostrados os quatro testes realizados em cada modelo e a análise de suas diferenças:

### 1) Teste de vazão de refluxo da torre desbutanizadora

A vazão de refluxo costuma ser uma das variáveis controladas mais utilizadas no controle de composição de uma coluna de destilação. No teste de vazão de refluxo da torre desbutanizadora, observou-se que a trajetória das respostas das inferências do modelo reduzido às perturbações foram muito semelhantes à trajetória dos dados do analisador.

Na Tabela 5.13, observa-se que houve uma melhora dos resultados na condição do modelo dinâmico. A aumento de  $R^2$  foi de quase 5% e o valor de RMSE diminuiu em 0,14% molar no modelo dinâmico quando comparado ao estacionário.

Tabela 5.13: Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de refluxo.

Modelo Reduzido	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
Estacionário (ME)	0,2897	84,42
Dinâmico (MD)	0,1560	89,15
Variação (MD-ME)	-0,1337	+4,73

Na Figura 5.26, nota-se que muitos desvios absolutos foram maiores no modelo estacionário. Além disso, quanto ao comportamento da linha contínua da inferência, observa-se que o modelo dinâmico apresentou menos picos e vales que o modelo estacionário.

No caso da PVR da nafta, observa-se na Tabela 5.14 que o aumento de  $R^2$  foi de quase 2,3% e o valor de RMSE diminuiu em 0,04% molar no modelo dinâmico quando comparado ao estacionário. O valor do coeficiente de determinação dos dois modelos foram abaixo de 75%, pois ambos apresentaram oscilações no processo não observados na PVR estimada de planta.

Tabela 5.14: Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de refluxo.

Modelo Reduzido	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,1274	71,44
Dinâmico (MD)	0,0880	73,76
Variação (MD-ME)	-0,0394	+2,32

Na Figura 5.27 é possível observar que as predições dos modelos foram semelhantes entre si, porém ambos se distanciaram do comportamento da planta em vários pontos. Neste caso, o modelo dinâmico seria mais adequado por apresentar menor erro no RMSE e maior  $R^2$  que o modelo estacionário.

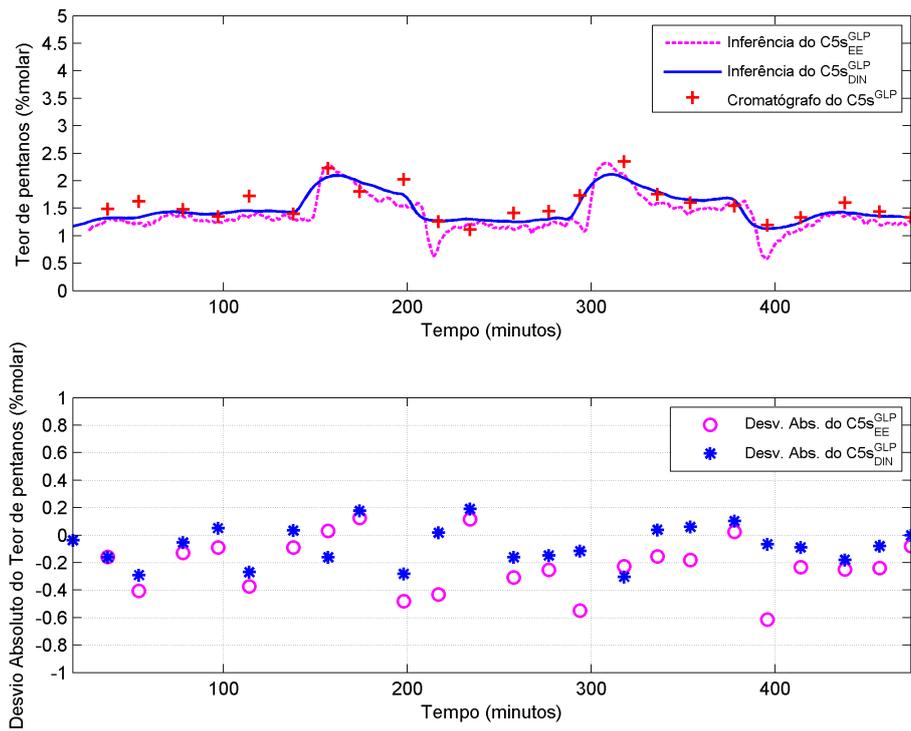


Figura 5.26: Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da vazão de refluxo.

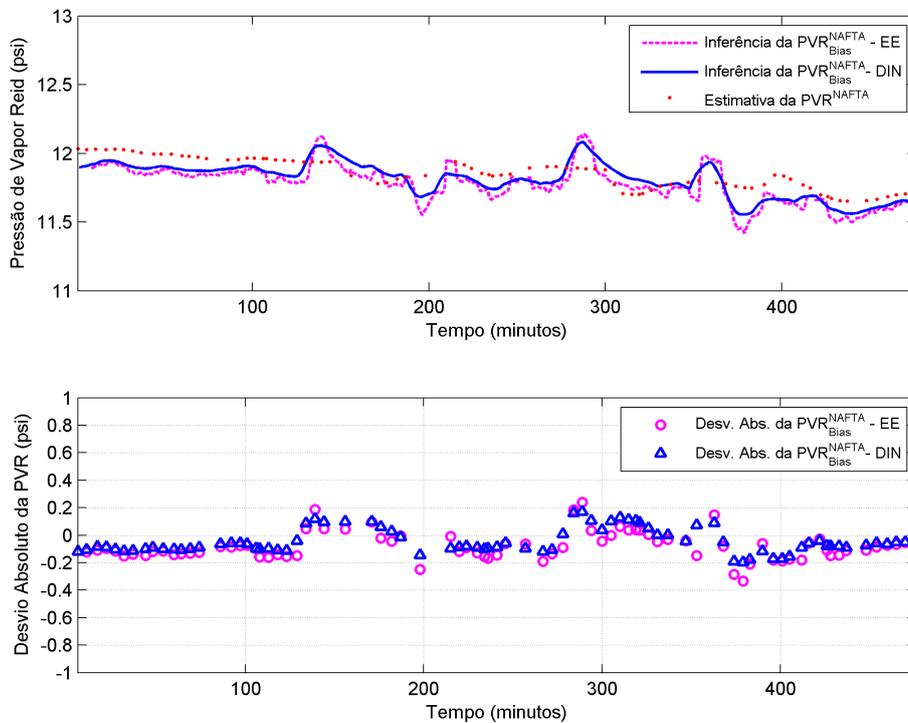


Figura 5.27: Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da vazão de refluxo.

## 2) Teste de vazão de recirculação de GLP da torre desbutanizadora

A vazão de recirculação do GLP para carga da torre desbutanizadora costuma ser utilizada para garantir a carga necessária da operação da torre em condições de baixa carga da unidade da planta. Devido ao impacto que esta variável tem sobre o teor de pentanos que vai para o topo, o teste com esta variável foi de grande contribuição para a avaliação dos modelos.

Na Tabela 5.15, observa-se que o modelo dinâmico apresentou um aumento no  $R^2$  de aproximadamente 4,3%. O valor de RMSE diminuiu em 0,08% molar, praticamente a metade do valor de RMSE do valor obtido no modelo estacionário.

Tabela 5.15: Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de recirculação de GLP.

Modelo Reduzido	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
Estacionário (ME)	0,1721	93,62
Dinâmico(MD)	0,0878	97,96
Varição (MD-ME)	-0,0843	+4,34

A Figura 5.28 apresenta uma diferença acentuada das respostas dos modelos estacionários e dinâmicos nos momentos de grandes variações do teor de pentanos. Observam-se dois momentos com elevação e queda do teor de C5's de GLP no modelo estacionário. Já o modelo dinâmico, apresenta uma trajetória mais próxima dos dados de planta. Assim, os desvios absolutos do modelo estacionário mostraram uma dispersão maior se comparados aos do modelo dinâmico.

Na inferência da PVR da nafta neste período, o modelo dinâmico apresentou um aumento no  $R^2$  de 2,78%. Já o valor de RMSE diminuiu em 0,05% molar, conforme mostrado na Tabela 5.16.

Tabela 5.16: Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de vazão de recirculação de GLP.

Modelo Reduzido	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,1540	85,61
Dinâmico (MD)	0,1007	88,39
Varição (MD-ME)	-0,0533	+2,78

A Figura 5.29 mostra que os modelos acompanharam bem a trajetória dos dados estimados da PVR da nafta. No entanto, o ajuste do *bias* fixo afetou um pouco a qualidade das predições, pois gerou um desvio absoluto médio de 0,20 psi. Isso é consequência do *bias* escolhido como fixo para o modelo final. Como esperado, o *bias* fixo deixa o modelo sujeito a desvios, apesar de conseguir capturar bem a tendência.

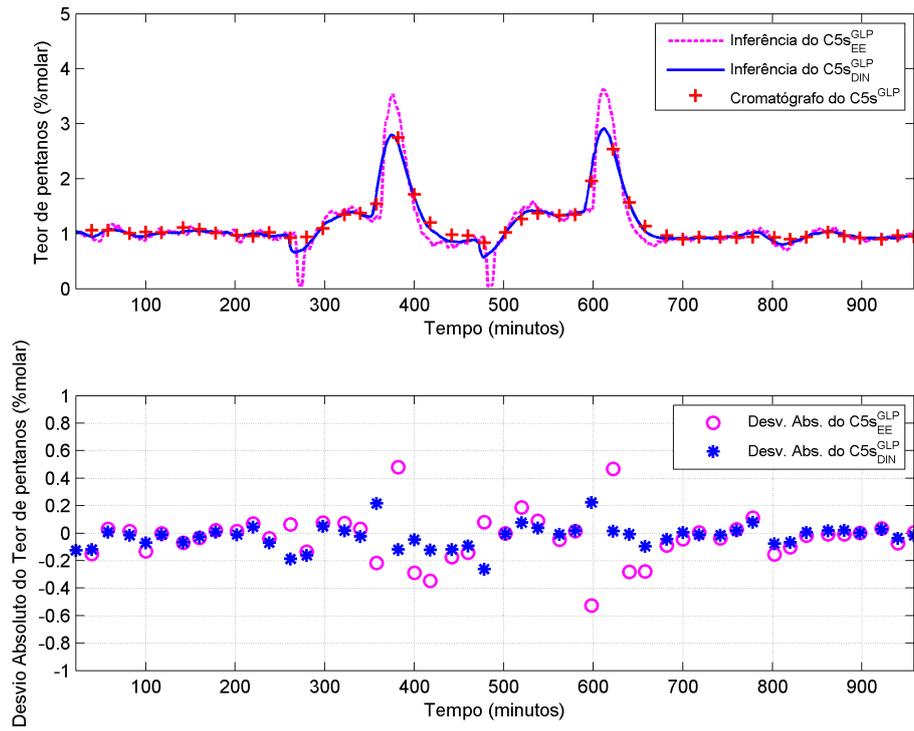


Figura 5.28: Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da vazão de recirculação de GLP.

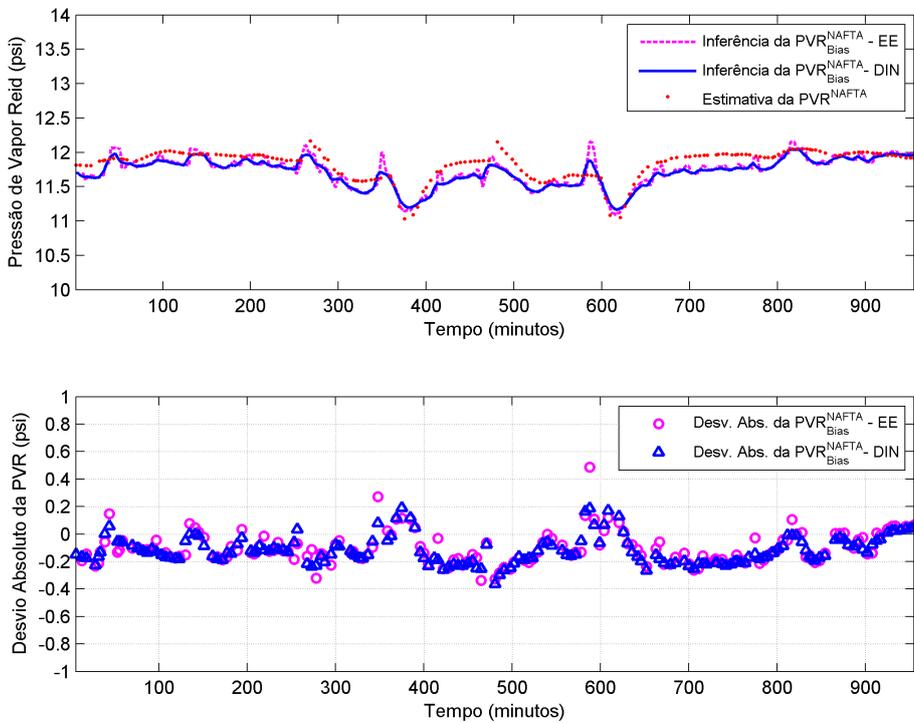


Figura 5.29: Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da vazão de recirculação de GLP.

Em geral, os resultados do modelo dinâmico mostraram que este é mais adequado para implementação em tempo real.

### 3) Teste de pressão de topo da torre desbutanizadora

O teste na pressão de topo teve pouca variação no seu *setpoint*, isso porque trata-se de uma variável importante de ser controlada para evitar que ocorra o *flare* no vaso de topo da torre. Assim, apesar do teste não ter apresentado grandes variações nas inferências de topo e fundo, foi possível observar variações significativas nas medições de planta.

No caso da inferência do teor de C5's no GLP, o resultado do coeficiente de determinação do modelo dinâmico comparado ao modelo estacionário apresentou um elevado aumento de 13,2% no  $R^2$ . Já o valor do RMSE diminuiu em 0,04% molar. Todos estes resultados como podem ser verificados na Tabela 5.17.

Tabela 5.17: Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de pressão de topo.

Modelo Reduzido	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,1087	72,21
Dinâmico(MD)	0,0710	85,41
Variação (MD-ME)	-0,0377	+13,20

Na Figura 5.30 é mostrada a diferença dos modelos reduzidos utilizados para inferência do teor de pentanos. Nota-se que muitos picos e vales prejudicaram muito a inferência no modelo estacionário.

Para a inferência da PVR da nafta, observa-se que o modelo dinâmico apresentou um aumento de 6,31% no  $R^2$  comparado ao modelo estacionário. O RMSE obteve uma melhora de 0,020 psi, conforme é mostrado na Tabela 5.18.

Tabela 5.18: Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de pressão de topo.

Modelo Reduzido	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,0599	86,79
Dinâmico (MD)	0,0382	93,10
Variação (MD-ME)	-0,0217	+6,31

Resultados semelhantes ao teor de C5's no GLP foram obtidos para a PVR da nafta. Isto é, observou-se que a ausência de picos e vales nas trajetórias inferenciais contínuas contribuíram para que o modelo dinâmico fosse o mais adequado para este período. Essa comparação dos modelos dinâmicos para a inferência da PVR da nafta é mostrada na Figura 5.31.

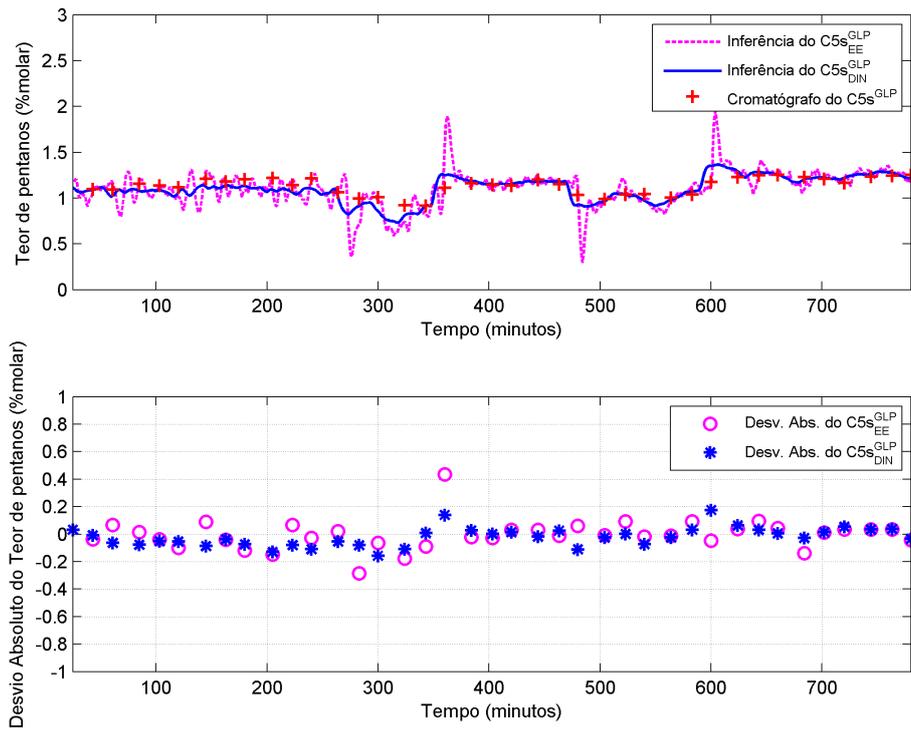


Figura 5.30: Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da pressão de topo.

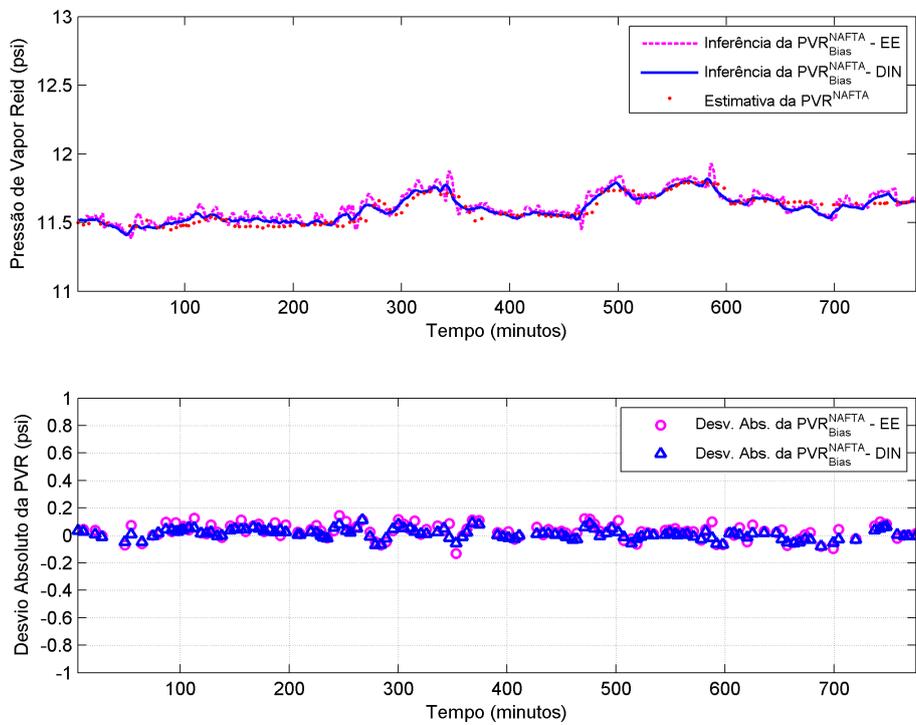


Figura 5.31: Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da pressão de topo.

#### 4) Teste de temperatura do prato de controle da torre desbutanizadora

O teste da temperatura do prato de controle foi utilizado para comprovar a eficácia do modelo reduzido mesmo em condições extremas. Neste caso, os dois modelos responderam de forma a obter a convergência mesmo em condição de elevada perda do teor de C5s no topo, ou seja, condições muito distantes do ponto operacional típico da planta.

Os resultados das inferências do teor de C5's de GLP foram semelhantes no modelo reduzido estacionário e dinâmico. Na Tabela 5.19, verifica-se que as variações de  $R^2$  e RMSE foram relativamente pequenas.

Tabela 5.19: Comparação das inferências do teor de C5s no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de temperatura do prato de controle.

Modelo Reduzido	RMSE (% mol)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,3732	98,44
Dinâmico(MD)	0,4101	98,31
Varição (MD-ME)	+0,0369	-0,13

A Figura 5.32 mostra a semelhança dos modelos reduzidos na predição do teor de pentanos. Ambos os modelos apresentaram uma dispersão dos erros absolutos muito semelhante, atingindo valores de até 1,6% molar nos pontos de maior medição do teor de pentanos ( aproximadamente 7,5% molar).

No caso da PVR da nafta, a Tabela 5.20 mostra que os resultados dos modelos estacionário e dinâmico foram parecidos. Observa-se que valor do coeficiente de determinação foi elevado nos dois modelos e o valor do RMSE foi em torno de 0,040% psi. Isso mostra que as inferências apresentaram um boa tendência com os dados da planta.

Tabela 5.20: Comparação das inferências da PVR da nafta no modelo estacionário e no modelo dinâmico no teste de temperatura do prato de controle.

Modelo Reduzido	RMSE (psi)	$R^2$ (%)
Estacionário(ME)	0,4215	93,06
Dinâmico (MD)	0,4129	92,27
Varição (MD-ME)	-0,0086	-0,79

Como pode ser visto na Figura 5.33, o modelo estático e dinâmicos tiveram suas trajetória muito parecidas, sendo a resposta estática mais oscilatória nos períodos de grandes variações. Ambos os modelos apresentaram desvios absolutos semelhantes quando comparados aos dados de planta, com valores elevados de até 1,6 psi.

Em todos os testes da torre desbutanizadora, verificou-se que a qualidade dos

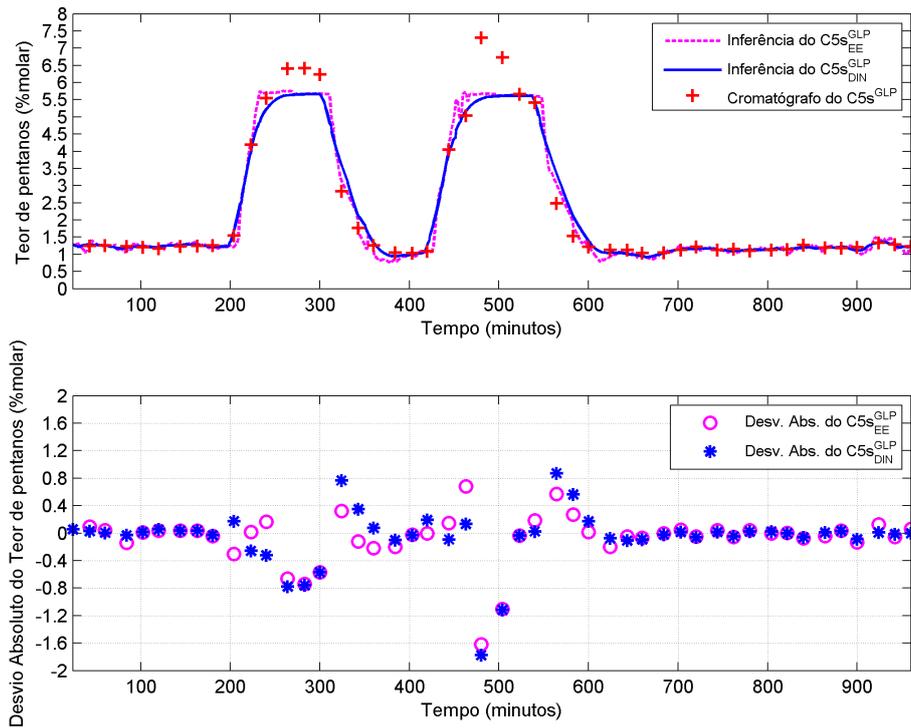


Figura 5.32: Inferência contínua estacionária e dinâmica de C5s do GLP com o desvio absoluto no teste da temperatura de prato.

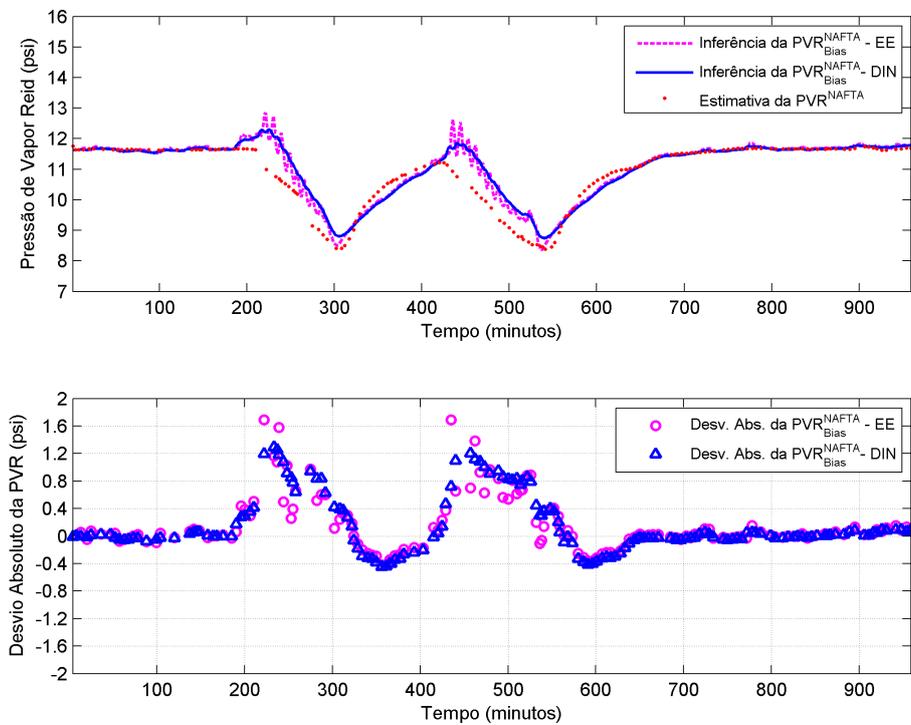


Figura 5.33: Inferência contínua estacionária e dinâmica da PVR da nafta com o desvio absoluto no teste da temperatura de prato.

modelos reduzidos para a inferência dos produtos de topo e de fundo tiveram coeficientes de determinação acima de 70%, sendo a maioria acima de 80%.

A utilização dos testes nas principais variáveis de controle da torre serviram para mostrar que o modelo proposto atendeu bem às predições do teor de C5's de GLP e da PVR da nafta, mesmo quando sujeitos às grandes variações de processo.

Para implementação do modelo reduzido inferencial dos produtos da torre desbutanizadora, verificou-se que o modelo no modo dinâmico traz uma qualidade estatística superior e com perfil de trajetória suave no tempo contínuo, o que a torna mais adequada para estratégias de controle ou de otimização em tempo real.

### 5.2.5 Tempo de simulação e taxa de amostragem

Além da verificação da qualidade do modelo desenvolvido, o tempo de simulação é um importante parâmetro de decisão para a utilização do modelo inferencial em tempo real. Neste trabalho, a taxa de amostragem foi a cada um minuto, e portanto, é importante que o tempo de simulação seja menor que 60 segundos.

Para que seja possível comparar e avaliar o modelo mais adequado para cada finalidade industrial, é importante saber o tempo de convergência de cada ponto simulado. Na Tabela 5.21, observam-se os tempos obtidos nos modelos reduzidos no modo estacionário e dinâmico <sup>2</sup>. O período utilizado para esta análise foi de 8 horas que compreendem 480 pontos (amostragem de minuto a minuto) do teste de vazão de refluxo da torre.

Tabela 5.21: Comparação do tempo de simulação das inferências no MSF estacionário e dinâmico.

Modelo Simplificado por <i>Flash</i>	Tempo de simulação total (minutos)	Tempo de simulação por amostragem (segundos)
Estacionário(ME)	21	2,62
Dinâmico (MD)	92	11,5
Variação (MD-ME)	71	8,88

Ambos os modelos estacionários e dinâmicos apresentaram tempo de simulação a cada ponto de amostragem com valores satisfatórios, pois representam tempo suficiente para a variável de saída ser obtida antes da próxima alimentação de variáveis ao modelo. Vale ressaltar que a frequência de amostragem real dos analisadores são superiores a 5 minutos e podem chegar a 30 minutos. Assim, qualquer tempo até 1 minuto já apresenta uma grande vantagem em termos de acompanhamento da qualidade do produto.

<sup>2</sup>O computador que executou o software é um desktop convencional, com Intel® Quad Core™ i7-2600 com 3.40GHz e uma memória de 6GB.

Como era esperado, o tempo de simulação do modelo estacionário é menor que o valor do tempo de simulação no modelo dinâmico por conta deste último resolver equações algébrico-diferenciais. Ainda assim, o tempo estimado de 11,5 segundos para cada amostragem de dados de entrada é satisfatória para o modelo dinâmico. Desta forma, os modelos simplificados desenvolvidos neste trabalho mostram ter grande potencial para diversas aplicações em tempo real.

## 5.3 Robustez das Inferências

O desenvolvimento do MSF (estacionário e dinâmico) foi feito de forma a garantir sua robustez em simulações com dados de processo real obtidos de minuto a minuto.

Limites das variáveis de entrada do modelo foram implementados para as temperaturas lidas do processo. No caso das temperaturas de topo e fundo de uma coluna de destilação, por serem variáveis intensivas do processo, costumam apresentar muitas vezes grandes variações em repostas das perturbações inerentes do processo.

Todas as variáveis de entrada devem ser qualificadas como variáveis adequadas para o modelo, isto é, não apresentarem ruídos de medição elevados ou erros grosseiros de medição. Entretanto, mesmo com todas as variáveis de leitura do modelo sendo previamente validadas nos limites normais de operação, observou-se que o modelo apresentava limitações para algumas combinações de temperaturas lidas do processo. O entendimento dessas combinações de temperatura, no entanto, não é trivial. Por esta razão, as regras de correção de temperatura propostas auxiliam o entendimentos das restrições do modelo.

Desta forma, as correções das temperaturas foram desenvolvidas a fim de se obter a confiabilidade do modelo proposto para diversas condições de processo. No caso das simulações com dados industriais, a correção para as temperaturas lidas do processo foi fundamental para o entendimento e análise do modelo proposto nos testes realizados na torre desbutanizadora como pode ser verificado nas Seções 5.3.1 e 5.3.2.

### 5.3.1 Aplicação da correção de temperatura na condição de chave pesado no produto de topo da torre

A utilização da correção da temperatura de topo depende da condição da temperatura de fundo lida. Para isto, a temperatura de fundo deve ser comparada com a temperatura de referência e, assim, é possível saber os momentos em que o processo está com a temperatura de fundo alta ou baixa.

A correção de temperatura de topo durante a condição de chave pesado no produto de topo foi obtida no teste realizado com a temperatura do prato de controle da torre desbutanizadora.

Neste teste, a temperatura de fundo não foi corrigida, pois apesar da variação acentuada do seu valor, ainda estava dentro dos limites críticos do modelo. Assim, esta temperatura foi apenas avaliada em sua condição de temperatura alta ou baixa.

Como pode ser visto na Figura 5.34, a temperatura de fundo ( $T_{Lida}^{Fundo}$ ) lida do processo foi comparada à temperatura de referência ( $T^{Ref}$ ). Os períodos em que a  $T_{Lida}^{Fundo}$  estava acima da  $T^{Ref}$  foram os períodos em que pode ser observada a classificação da  $T_{Lida}^{Fundo}$  como temperatura Alta ( $T_{Alta}^{Fundo}$ ) no segundo gráfico. No caso contrário, foi observado que a  $T_{Lida}^{Fundo}$  estava na condição de temperatura baixa ( $T_{Baixa}^{Fundo}$ ), conforme a sobreposição mostrada das curvas neste gráfico.

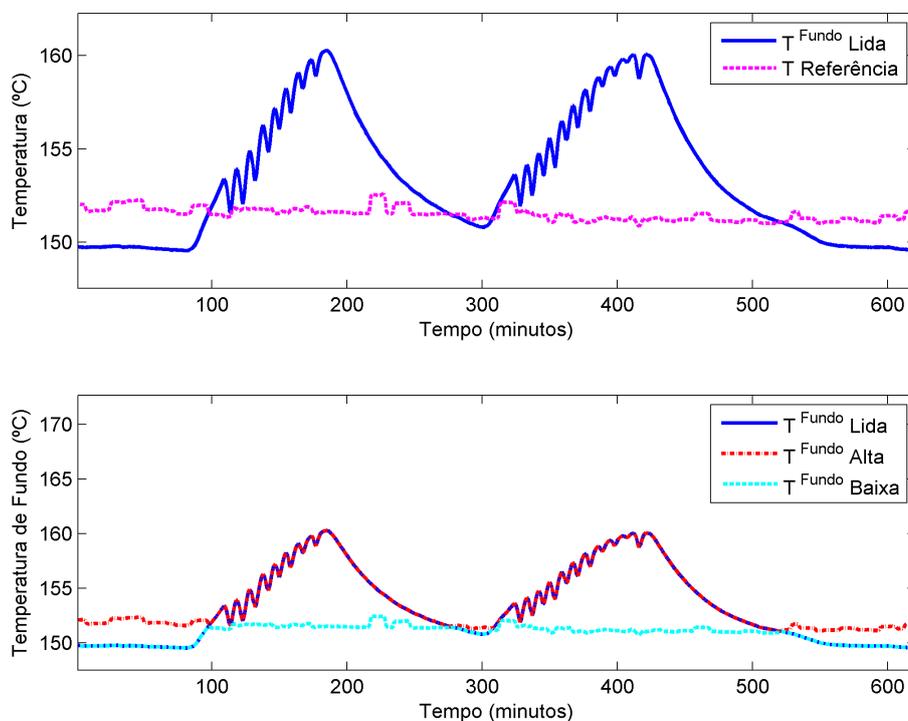


Figura 5.34: Verificação e classificação da temperatura de fundo.

Uma vez definidos os períodos da condição de temperatura de fundo como alta ou baixa, os limites da temperatura de topo foram analisados. Pela Figura 5.35, observa-se que a temperatura de topo corrigida ( $T_{Corrigida}^{Topo}$ ) seguiu sobreposta a curva da temperatura de lida ( $T_{Lida}^{Topo}$ ). Nessa sobreposição, significa que não houve alteração do valor da temperatura de topo para o modelo. Apenas quando a  $T_{Corrigida}^{Topo}$  atingiu um limite (superior ou inferior), a temperatura atual do modelo foi alterada para o valor limite em questão. Na figura, isso pode ser visto nos momentos em que

a curva de temperatura corrigida seguiu sobreposta a uma curva de temperatura limite (mínima ou máxima).

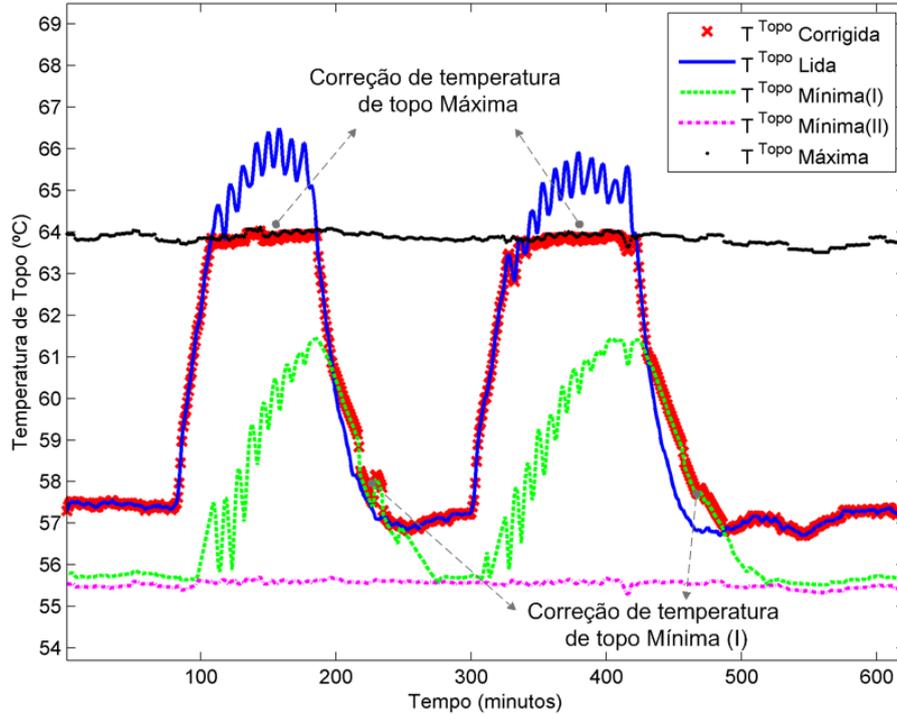


Figura 5.35: Verificação e correção da temperatura de topo.

Assim, como indicado na Figura 5.35, quatro momentos de correção de temperatura de topo foram obtidos: dois períodos na temperatura de topo máxima ( $T_{Máxima}^{Topo}$ ) e outros dois na temperatura de topo mínima(I) ( $T_{Mínima(I)}^{Topo}$ ). Observa-se que a temperatura de topo mínima(II) ( $T_{Mínima(II)}^{Topo}$ ) não foi acionada, pois durante os períodos de  $T_{Alta}^{Fundo}$  ativado, a  $T_{Lida}^{Topo}$  seguiu com valores acima do limite mínimo.

Observa-se que a temperatura da torre atingiu valores muito acima das condições normais de operação. Nestes períodos, a garantia da convergência do modelo passou a ser prioritária, pois os valores inferidos dos produtos já se encontraram muito acima da especificação. Neste sentido, a correção de temperatura de topo para valores de  $T_{Máxima}^{Topo}$  durante esses períodos, com valores praticamente fixos, são considerados como restrições (limites) do modelo proposto.

### 5.3.2 Aplicação da correção de temperatura na condição de chave leve no produto de fundo da torre

O período que apresentou correção na temperatura de topo nas condições de chave leve no fundo foi o do teste na vazão de recirculação de GLP. Após o degrau aplicado

na vazão, observou-se na resposta da temperatura de topo dois vales que foram corrigidos para garantir a convergência deste período.

A Figura 5.36 mostra a temperatura de fundo lida ( $T_{Lida}^{Fundo}$ ) do processo classificada como na condição de temperatura baixa ( $T_{Baixa}^{Fundo}$ ) em todo o período do teste, conforme a sobreposição mostrada das curvas neste gráfico. Neste caso, a condição de chave leve no fundo leva a correção de temperatura de topo ser dada pela temperatura mínima de topo (II) ( $T_{Mínima(II)}^{Topo}$ ).

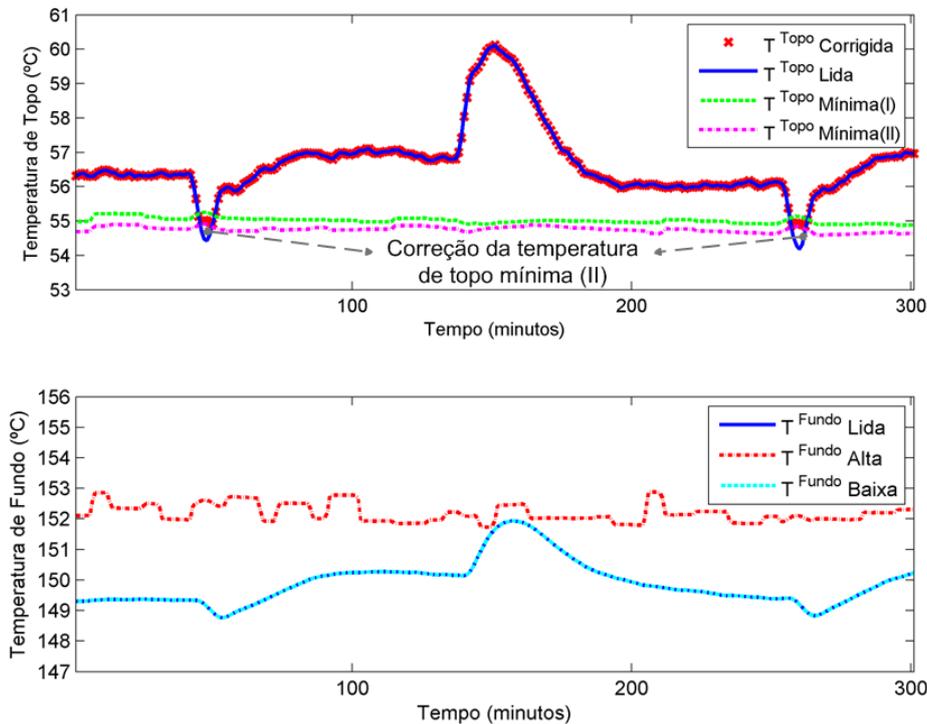


Figura 5.36: Verificação e correção da temperatura de topo.

Neste caso, observa-se que os limites de temperatura mínima (I) e (II) foram muito próximos, mostrando não haver problemas em utilizar-se uma delas como temperatura mínima única. Essa consideração pode ser utilizada para fins de simplificação do modelo, mas alguns aspectos devem ser considerados, tais como:

- Quanto menor a temperatura de fundo, maior será a diferença dos limites mínimos (I) e (II);
- A qualidade da inferência para o chave pesado no topo tende a ser mais afetada, pois o chave pesado é diretamente relacionado à variação de temperatura de topo;
- Todas as temperaturas limites (mínima e máxima) do modelo estão calculadas pelo modelo a partir da composição de carga da torre. Isto é, se a riqueza da

carga for maior ou menor, os limites podem ser alterados para o perfil de cada riqueza na carga, sem que ocorra problemas de convergência.

A dinâmica das variáveis intensivas, como as temperaturas, podem apresentar grandes variações. Nesta proposta de modelo visando a robustez, foram considerados os limites em que o MSF poderia convergir. Para ilustrar isso, considerou-se um período que apresentou uma perda de carga térmica do refeedor da torre. Como pode ser mostrado na Figura 5.37, este período mostra uma queda de temperatura de fundo muito acentuada. Observa-se que a temperatura de fundo foi corrigida quando atingiu o limite inferior desta temperatura ( $T_{Mínima}^{Fundo}$ ).

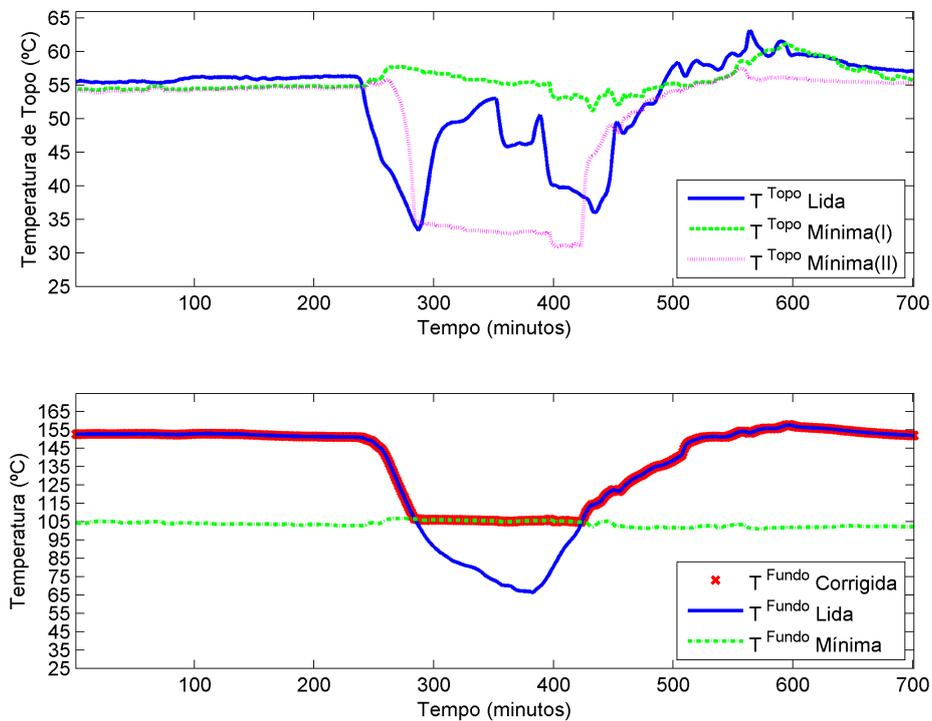


Figura 5.37: Verificação e classificação da temperatura de fundo.

Neste exemplo, também ficou evidente a diferença das temperaturas  $T_{Mínima(I)}^{Topo}$  e  $T_{Mínima(II)}^{Topo}$ . Nota-se que a  $T_{Lida}^{Topo}$  também sofreu uma grande queda no seu valor e depois voltou a subir. Neste cenário, se a utilização da  $T_{Mínima(II)}^{Topo}$  fosse única, a  $T_{Lida}^{Topo}$  seria corrigida na maior parte do período. Isto implicaria numa restrição prejudicial para o MSF.

Vale ressaltar que esta metodologia de correção varia de acordo com a composição da carga de entrada da torre. Logo, os limites de temperaturas calculados são impostos de acordo com a operação da planta.

Com isso, o desenvolvimento desta metodologia de correção de temperaturas baseadas em algumas regras heurísticas e no próprio MSF foi aplicado com sucesso para dados industriais. Este procedimento permitiu que todos os testes com variações significativas do ponto operacional da coluna desbutanizadora fossem avaliados, sem apresentar pontos sem convergência.

## 5.4 Considerações Finais

Os quatro testes de perturbação na torre permitiram que o modelo proposto gerasse as predições das inferências dos produtos em períodos de grandes variações na torre desbutanizadora. Algumas das etapas mais importantes aplicadas foram:

- A pré-validação da estrutura do MSF a partir da comparação com o modelo rigoroso em diversas faixas de operação;
- Ajustes de composição do chave leve e chave pesado no início da modelagem, obtidos a partir da composição típica dos produtos da torre;
- Ajuste adequado dos parâmetros (volume de líquido de topo e fundo) para o modelo dinâmico;
- Inferências dos produtos foram obtidas com sucesso nos quatro períodos de testes da torre desbutanizadora, dentro dos limites que garantem a convergência, considerando as leituras das variáveis reais do processo;
- Verificação do tempo de simulação de cada ponto alimentado ao MSF, tanto no estacionário quanto no dinâmico;
- Verificação das temperaturas corrigidas e os períodos que foram necessários para manter a robustez no modelo inferencial.

# Capítulo 6

## Conclusões

Neste trabalho um novo procedimento de inferências para coluna de destilação multicomponente foi proposto. A novidade do modelo inferencial se baseia na simplificação do modelo rigoroso de uma coluna de destilação a partir de dois estágios de equilíbrio: *flash* de topo em condições de ponto de orvalho e *flash* de fundo em condições de ponto de bolha, representando as seções de absorção e de retificação da torre, respectivamente. A partir do modelo reduzido, uma metodologia de correção de variáveis de entrada (temperaturas) foi desenvolvida para garantir robustez em aplicações da indústria em tempo real.

O modelo reduzido por dois estágios de equilíbrio em uma coluna de destilação mostrou as seguintes vantagens:

- Redução do tempo de desenvolvimento e de ajustes do modelo para uma coluna de destilação multicomponente da indústria;
- Uso de equações termodinâmicas rigorosas, como a equação de estado de Peng-Robinson;
- Necessidade de poucas de variáveis de entrada no modelo, sendo em sua maioria variáveis intensivas de processo;
- Não linearidades intrínsecas de uma torre real consideradas no modelo simplificado, gerando uma maior aproximação do modelo com as características de um processo real;
- Obtenção de um modelo simplificado que permite o maior conhecimento das suas restrições de modelagem;
- Redução do número de equações diferenciais não lineares da modelagem dinâmica. Obtenção de um modelo mais fácil de implementar e com maior rapidez no tempo de simulação;

- Por fim, possibilita que estratégias de robustez sejam obtidas a partir do conhecimento do processo. Permitindo assim, que o modelo apresente a convergência em diversas condições de processo.

Com relação ao objetivo de verificar o uso de um modelo simplificado de coluna de destilação multicomponente, tanto para o caso estacionário quanto para o dinâmico, todos os resultados de inferência dos produtos da torre desbutanizadora apresentados foram satisfatórios. A vantagem do caso estacionário em relação ao dinâmico é a obtenção do modelo com tempo de desenvolvimento menor. Isto é, no modelo estacionário, não há necessidade de ajustes dos parâmetros dinâmicos ( $Vol_{Topo}^{Liq.}$  e  $Vol_{Fundo}^{Liq.}$ ) que necessitam de períodos com variação significativa do *set-point* de variáveis que influenciem a composição desejada para predição.

O estudo da inferência estacionária foi essencial para dar o início aos estudos de inferência dinâmica. Além disso, verificou-se que o modelo estacionário correspondia às inferências de composição dos produtos de topo e fundo de forma semelhante aos valores observados num simulador comercial estático, para grandes variações das principais variáveis de processo. Um dos principais resultados nesta análise inicial foi a indicação que a característica não linear da torre, com variação do ganho estático, foi predita de forma satisfatória pelo modelo simplificado.

Visto que uma coluna de destilação é um processo dinâmico sujeito a vários tipos de perturbações de processo, os resultados das inferências dinâmicas foram relevantes. Com isso, verificou-se que as inferências dinâmicas acompanharam a tendência dos valores de composição dos produtos da planta nos períodos de testes da torre com boa acurácia. O modelo dinâmico respondeu de forma mais satisfatória que o modelo estático, pois o seu comportamento não apresentou variações bruscas no tempo contínuo.

De forma geral, os quatro testes de perturbação na torre mostraram que o modelo proposto atendeu satisfatoriamente à predição das inferências dos produtos comparados aos dados reais de planta. Alguns dos pontos mais relevantes observados foram:

- A pré validação da estrutura do modelo simplificado apresentou resultados semelhantes ao do modelo rigoroso em vários aspectos: não linearidade, tendência, valor absoluto e convergência em faixa ampla de operação;
- A qualidade das inferências depende principalmente dos ajustes de composição do chave leve e chave pesado. No caso do uso do modelo dinâmico, a qualidade de predição também depende de um ajuste adequado dos seus parâmetros (volume de líquido de topo e fundo);

- O objetivo do modelo simplificado de fornecer as inferências dos produtos, dentro dos limites que garantem a convergência, foi alcançado com sucesso nos quatro períodos de testes da torre desbutanizadora.
- Nestes testes, o modelo gerou inferências de qualidade elevada mesmo em condições distantes do ponto operacional típico. O modelo gerou coeficientes de determinação ( $R^2$ ) superiores a 95% e valores de RMSE inferiores a 0,1% molar na predição da composição do teor de pentanos no GLP (principal produto da UPGN);
- O desenvolvimento da metodologia de correção de temperatura permitiu explorar a utilização do modelo proposto para diversas condições de operação. Isso viabiliza sua aplicação para o caso industrial, mesmo para casos com grandes variações de processo;
- A metodologia de obter a estimativa dos parâmetros dinâmicos do modelo simplificado dinâmico mostrou ser suficiente e bem adequada para capturar a dinâmica das seções da torre;
- Ausência de pontos não convergidos em todos os testes realizados e tempo de simulação reduzido quando comparado à taxa de amostragem dos dados;
- Para a aplicação em tempo real, observou-se que o modelo simplificado dinâmico apresentou um comportamento mais adequado para aplicação em estratégias de controle, além de apresentar também predições superiores, quando comparado ao modelo simplificado estacionário.

Portanto, a utilização do modelo simplificado na inferência mostrou ser uma ferramenta confiável e acurada para a predição das composições dos produtos de uma coluna de destilação multicomponente. A estimativa de componentes de maior interesse no processo, como as inferências de pentanos no produto de topo (perdas não desejadas) e de componentes leves no produto de fundo, podem ser obtidas em frequência elevadas, o que permite aplicação de estratégias de controle e de otimização do processo.

## 6.1 Trabalhos Futuros

Como perspectivas de trabalhos futuros, o modelo simplificado pode ser analisado frente a grandes variações de composição de carga. Neste caso, é interessante utilizar como estudo de caso uma UPGN que processe cargas de gás natural provenientes de diferentes plataformas, mostrando, diferentes vazões e riquezas (C3+) na planta.

A modelagem reduzida pode ser estendida para todas as colunas de uma UPGN e obter as inferências de composição de outros tipos de produtos, como por exemplo, a inferência das perdas de propanos nas torres desmetanizadora e desetanizadora. Neste caso, uma vantagem seria obter análises de composição do gás de entrada em alta taxa de amostragem. Desta forma, todas as outras composições das correntes de produtos podem ser estimadas por sensores virtuais. Isso poderia permitir o acompanhamento da composição dos produtos em tempo real e aplicação de estratégias de controle em todo o processo.

Comparações do modelo simplificado com modelos rigorosos e modelos empíricos podem trazer conhecimento sobre as vantagens e desvantagens de cada método. De maneira geral, essas comparações podem motivar o uso de outros tipos de modelos simplificados a partir da modelagem rigorosa de um processo.

O uso de correções de variáveis a partir do conhecimento do modelo simplificado e de conhecimento do próprio processo pode ser aplicado para monitoramento de processo. No caso aplicado na torre desbutanizadora, outros tipos de restrições podem ser testadas para calcular os limites de temperaturas. Por exemplo, para acompanhar os valores máximos do teor de pentanos no GLP, os valores de temperaturas lidas da planta podem ser classificadas como altas ou baixas comparados às temperaturas limites estimadas para obter a especificação máxima de pentanos no GLP.

Finalmente, uma grande contribuição pode ser obtida com a aplicação do modelo proposto em fracionadoras de refinarias, utilizando o conhecimento de pseudo componentes do petróleo e curvas de destilação. Neste caso, o desafio seria obter dados suficientes para uma boa análise de predição com os dados da planta.

# Referências Bibliográficas

- AGUIRRE, L. A., 2004, *Introdução à identificação de sistemas—Técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais*. editora UFMG.
- ANSARI, R. M., TADÉ, M. O., 2000, “Non-Linear Model-Based Multivariable Control of a Debutanizer”. In: *Nonlinear Model-based Process Control*, Springer, pp. 59–78.
- ARAÚJO JÚNIOR, J. M., 2007, *Técnicas de Inteligência Artificial para a Geração Dinâmica de Setpoints para uma Colunas de Destilação*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Norte - UFRN, Programa de Pós Graduação em Engenharia Elétrica.
- BARATTI, R., BERTUCCO, A., DA ROLD, A., et al., 1995, “Development of a composition estimator for binary distillation columns. Application to a pilot plant”, *Chemical Engineering Science*, v. 50, n. 10, pp. 1541–1550.
- CANABARRO, L. R., 2011, *Inferência Dinâmica em Colunas de Destilação para uma Unidade de Processamento de Gás Natural*. Dissertação de mestrado, Universidade de Federal do Rio de Janeiro-RJ, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ.
- CONZ, V., 2005, *Desenvolvimentos de Analisadores Virtuais Aplicados a Colunas de Destilação industriais*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul - UFRGS, Departamento de Engenharia Química.
- COX, R. K., SMITH, J. F., DIMITRATOS, Y., 2006, “Can simulation technology enable a paradigm shift in process control?: Modeling for the rest of us”, *Computers & chemical engineering*, v. 30, n. 10, pp. 1542–1552.
- CRUZ, M. J. F., 2003, *Determinação Experimental e Predição da Pressão de Vapor de Gasolinas com Aditivos Oxigenados*. Dissertação de mestrado, Universidade de Federal de Pernambuco - UFPE, Departamento de Engenharia Química.

- D323-99A, A. S., 1999, “Standard Test Method for Vapor Pressure of Petroleum Products (Reid Method)”. ASTM International, West Conshohocken, PA.
- DE CAMPOS, M. C. M. M., GOMES, M. V. D. C., PEREZ, J. M. G. T., 2013, *Controle Avançado e Otimização na Indústria do Petróleo*. Editora Interciência. ISBN: 9788571933095.
- DIEHL, F., SECCHI, A., LUSA, L., et al., 2009, “Simulação operacional de uma torre de destilação atmosférica via Aspen Plus e avaliação de modelos de analisadores virtuais”, *Sba: Controle & Automação Sociedade Brasileira de Automatica*, v. 20, n. 3, pp. 305–322.
- FORTUNA, L., GRAZIANI, S., RIZZO, A., et al., 2007, “Soft Sensors in Industrial Applications”. In: *Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes*, Advances in Industrial Control, Springer London, pp. 1–13. ISBN: 978-1-84628-479-3. doi: 10.1007/978-1-84628-480-9\_1. Disponível em: <[http://dx.doi.org/10.1007/978-1-84628-480-9\\_1](http://dx.doi.org/10.1007/978-1-84628-480-9_1)>.
- FORTUNA, L., GRAZIANI, S., XIBILIA, M. G., 2005, “Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns”, *Control Engineering Practice*, v. 13, n. 4, pp. 499–508.
- FRUEHAUF, P. S., MAHONEY, D. P., 1993, “Distillation column control design using steady state models: Usefulness and limitations”, *ISA Transactions*, v. 32, n. 2, pp. 157–175.
- GONZALEZ, G., 1999, “Soft sensors for processing plants”. In: *Intelligent Processing and Manufacturing of Materials, 1999. IPMM'99. Proceedings of the Second International Conference on*, v. 1, pp. 59–69. IEEE.
- JUNIOR, A. P. C., 1996, *Inferencia na otimização e controle de colunas de destilação via funções racionais*. Dissertação de mestrado, Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.
- KADLEC, P., GABRYS, B., 2009, “Soft sensor based on adaptive local learning”. In: *Advances in Neuro-Information Processing*, Springer, pp. 1172–1179.
- KADLEC, P., GABRYS, B., STRANDT, S., 2009, “Data-driven Soft Sensors in the process industry”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 33, n. 4, pp. 795 – 814.
- KANO, M., MIYAZAKI, K., HASEBE, S., et al., 2000, “Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression”, *Journal of Process Control*, v. 10, n. 2, pp. 157–166.

- KANO, M., SHOWCHAIYA, N., HASEBE, S., et al., 2003, “Inferential control of distillation compositions: selection of model and control configuration”, *Control engineering practice*, v. 11, n. 8, pp. 927–933.
- KLATT, K.-U., MARQUARDT, W., 2009, “Perspectives for process systems engineering? Personal views from academia and industry”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 33, n. 3, pp. 536–550.
- LINHARES, L. L., ARAÚJO JÚNIOR, J., ARAÚJO, F. M., 2007, “Redes neurais artificiais para identificação da fração molar de pentanos na composição do GLP”, *Anais do VIII Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente (SBAI)*.
- LINHART, A., SKOGESTAD, S., 2010, “Reduced distillation models via stage aggregation”, *Chemical Engineering Science*, v. 65, n. 11, pp. 3439–3456.
- LU, N., YANG, Y., GAO, F., et al., 2004, “Multirate dynamic inferential modeling for multivariable processes”, *Chemical engineering science*, v. 59, n. 4, pp. 855–864.
- MA, M.-D., KO, J.-W., WANG, S.-J., et al., 2009, “Development of adaptive soft sensor based on statistical identification of key variables”, *Control Engineering Practice*, v. 17, n. 9, pp. 1026–1034.
- MEJDELL, T., SKOGESTAD, S., 1991, “Estimation of distillation compositions from multiple temperature measurements using partial-least-squares regression”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 30, n. 12, pp. 2543–2555.
- MENDES, D., MARANGONI, C., MENEGUELO, A., et al., 2010, “Educational simulator for multicomponent distillation research and teaching in chemical engineering”, *Computer Applications in Engineering Education*, v. 18, n. 1, pp. 175–182.
- NASCIMENTO, A. J. V., 2013, *Análise de Modelos Reduzidos de Colunas de Destilação para Aplicações em Tempo Real*. Dissertação de mestrado, Universidade de Federal do Rio de Janeiro-RJ, Programa de Engenharia Química, COPPE/UFRJ.
- NO.2517, B., 1989, *Evaporative Loss From External Internal Floating Roof Tanks*. Washington, DC, American Petroleum Institute.

- PARK, S., HAN, C., 2000, “A nonlinear soft sensor based on multivariate smoothing procedure for quality estimation in distillation columns”, *Computers & Chemical Engineering*, v. 24, n. 2, pp. 871–877.
- RAMLI, N. M., HUSSAIN, M., JAN, B. M., et al., 2014, “Composition Prediction of a Debutanizer Column using Equation Based Artificial Neural Network Model”, *Neurocomputing*.
- SCHAICH, D., FRIEDRICH, M., 2004, “Operator training simulation (OTS) for the chemical industry—experience and perspectives”, *ATP International*, v. 1, n. 2, pp. 39–48.
- SCHWAAB, M., 2007, *Análise de Dados Experimentais: I. Fundamentos de Estatística e Estimação de Parâmetros*. Editora E-papers.
- STAUDT, P. B., 2007, *Modelagem e Simulação Dinâmica de Colunas de Destilação*. Dissertação de mestrado, Universidade de Federal do Rio Grande do Sul - UFRS, Departamento de Engenharia Química.
- THAM, M. T., MONTAGUE, G. A., JULIAN MORRIS, A., et al., 1991, “Soft-sensors for process estimation and inferential control”, *Journal of Process Control*, v. 1, n. 1, pp. 3–14.
- VAZ, C. E. M., MAIA, J. L. P., DOS SANTOS, W. G., 2008, *Tecnologia da Indústria do Gás Natural*. Editora Blucher. ISBN: 9788521204213.
- VIJAYA RAGHAVAN, S., RADHAKRISHNAN, T., SRINIVASAN, K., 2011, “Soft sensor based composition estimation and controller design for an ideal reactive distillation column”, *ISA transactions*, v. 50, n. 1, pp. 61–70.
- WEBER, R., BROSILOW, C., 1972, “The use of secondary measurements to improve control”, *AIChE Journal*, v. 18, n. 3, pp. 614–623.
- WERLE, L. O., 2009, *Implementação de Sensores por Software em Colunas de Destilação com Aquecimento Distribuído*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico-CTC.
- YEH, T.-M., HUANG, M.-C., HUANG, C.-T., 2003, “Estimate of process compositions and plantwide control from multiple secondary measurements using artificial neural networks”, *Computers & chemical engineering*, v. 27, n. 1, pp. 55–72.
- ZANATA, D. R. P., 2005, *Desenvolvimento de sensor virtual empregando redes neurais para medição da composição em uma coluna de destilação*. Dissertação de mestrado, Universidade de São Paulo-USP, Escola Politécnica.