

OTIMIZAÇÃO SEQÜENCIAL POR APROXIMAÇÕES – UMA APLICAÇÃO EM
TEMPO REAL PARA O REFINO DE PETRÓLEO

Marcos Vinicius de Carvalho Gomes

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA QUÍMICA.

Aprovada por:

Prof. Evaristo Chalbaud Biscaia Jr., D.Sc.

Prof. Darci Odloak, Ph.D.

Dr. Lincoln Fernando Lautenschlager Moro, D.Sc.

Prof. Maurício Bezerra de Souza Jr., D.Sc.

Prof. Enrique Luis Lima, D.Sc.

Prof. José Carlos Costa da Silva Pinto, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

AGOSTO DE 2007

GOMES, MARCOS VINICIUS DE CARVALHO

Otimização Seqüencial por aproximações – Uma aplicação em tempo real para o refino de petróleo [Rio de Janeiro] 2007

XV, 220p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc., Engenharia Química, 2007)

Tese – Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Otimização de Processos Químicos
2. Metamodelos
3. Modelos *kriging*
4. Petróleo
5. Destilação

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedicatória

Aos meus pais Geraldo e Mariza,
origem de tudo que eu puder fazer de bom.

À minha esposa Cristina,
pelo carinho, atenção e apoio incondicional em todos os momentos,
além do imenso desprendimento de pôr seus objetivos profissionais
em segundo plano para viabilizar a realização deste trabalho.

A meus filhos Victor e Renan,
fontes permanentes de alegria e motivação.

Agradecimentos

À PETROBRAS pela oportunidade e pelo suporte necessário à realização deste trabalho.

Ao Reynaldo Pinto Jr., que incentivou e tornou possível a realização deste trabalho, e com isso proporcionou a mim e à minha família experiências e conhecimentos inestimáveis.

À minha irmã Márcia e ao Jorge, que juntamente com meus pais cuidaram de nossas coisas no Brasil enquanto estávamos em Londres, além de gentilmente cederem sua casa e seu tempo para nossas reuniões “internacionais” de família.

Aos professores Evaristo Chalbaud Biscaia Jr. e Darci Odloak pela orientação, apoio e paciência ao longo deste trabalho.

Ao Professor David Bogle, pela orientação, apoio e constante motivação durante toda a minha estada na University College London e depois.

À minha família, aos amigos de sempre e às novas amizades que surgiram ao longo desta jornada.

À minha “família” no Centro de Pesquisas da PETROBRAS (CENPES), não apenas pelas contribuições técnicas - fundamentais para a realização deste trabalho - e pelo apoio de sempre, mas especialmente por serem uma fonte inesgotável de alegria.

À Anna Coelho e toda a equipe da PETROBRAS Europe Ltd. (PEL) pela gentileza, simpatia e todo o apoio durante nossa estada em Londres.

Aos amigos e colegas da PETROBRAS, do Programa de Engenharia Química da COPPE e grupo CAPE da University College London pelo apoio e incentivo.

Aos professores do Programa de Engenharia Química da COPPE pelos valiosos ensinamentos e contribuições para este trabalho.

Aos funcionários do Programa de Engenharia Química da COPPE/UFRJ, da University College London e do Imperial College London.

A todas as pessoas que direta ou indiretamente colaboraram para que este trabalho fosse realizado.

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

OTIMIZAÇÃO SEQÜENCIAL POR APROXIMAÇÕES – UMA APLICAÇÃO EM TEMPO REAL PARA O REFINO DE PETRÓLEO

Marcos Vinicius de Carvalho Gomes

Agosto/2007

Orientadores: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Darci Odloak

Programa: Engenharia Química

Modelos *kriging* têm sido utilizados em inúmeras aplicações de engenharia, para aproximar modelos matemáticos rigorosos quando seus códigos computacionais exigem tempo demasiadamente grande para que a sua utilização prática seja possível. Neste contexto, eles são denominados metamodelos.

Neste trabalho, uma metodologia para otimização de processos baseada em metamodelos foi proposta. O desempenho da otimização baseada em metamodelos é comparado com resultados obtidos com um modelo matemático rigoroso pertencente a um simulador de processos seqüencial-modular comercial. Mostra-se que a otimização baseada em metamodelos com adaptação seqüencial ao longo do procedimento de otimização pode proporcionar resultados com precisão razoável e esforço computacional significativamente menor. A metodologia foi testada com um exemplo envolvendo a otimização de uma unidade de destilação de petróleo.

A comparação do desempenho entre redes neuronais, largamente utilizadas na modelagem de processos químicos, e modelos *kriging*, raramente utilizados na engenharia de química, como metamodelos é uma outra contribuição deste trabalho.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc)

SEQUENTIAL APROXIMATE OPTIMIZATION – A REAL TIME APLICATION ON
CRUDE OIL REFINING

Marcos Vinicius de Carvalho Gomes

August/2007

Advisors: Evaristo Chalbaud Biscaia Jr.

Darci Odloak

Department: Chemical Engineering

Kriging models have been used in a number of engineering applications, to approximate rigorous models when computer codes become too time-consuming to allow its practical use. In this context, they are called surrogate models or metamodels.

In this work, a methodology for metamodel-based process optimization has been proposed. The performance of optimization based on metamodels is compared with results obtained with the optimization based on a rigorous – first principles model, embedded in a commercial sequential-modular process simulator. It is shown that metamodel-based optimization with sequential adaptation of the metamodels along the optimization procedure provides results with reasonable accuracy and significantly less computational effort. The methodology was tested with an example involving the optimization of a crude distillation unit.

The performance comparison between neural networks, widely used on chemical processes modelling, and *kriging* models, barely used in chemical engineering, as metamodels is another contribution of this work.

ÍNDICE

I. INTRODUÇÃO	1
I.1. MOTIVAÇÃO	1
I.2. A OTIMIZAÇÃO APLICADA À INDÚSTRIA DO PETRÓLEO	2
I.3. RTO - OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL	5
I.4. MODELOS REDUZIDOS, METAMODELOS E MODELOS <i>KRIGING</i>	17
I.5. OBJETIVO DO TRABALHO	18
I.6. ESTRUTURA DO TEXTO	20
II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	21
II.1. OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS	21
II.2. MODELOS REDUZIDOS E METAMODELOS	32
III. MODELOS <i>KRIGING</i>	44
III.1. ESTRUTURA DOS MODELOS <i>KRIGING</i>	44
III.2. OBTENÇÃO DE MODELOS <i>KRIGING</i>	49
III.3. O TOOLBOX DACE	54
IV. APRESENTAÇÃO DOS EXEMPLOS PARA ESTUDO	56
IV.1. UM EXEMPLO DE PEQUENO PORTE (P1)	56
IV.2. AS UNIDADES DE DESTILAÇÃO E SOLVENTES DA RECAP (P2)	58
V. GERAÇÃO DE METAMODELOS	68
V.1. GERAÇÃO DE DADOS COM O MODELO RIGOROSO	68
V.2. SELEÇÃO DE VARIÁVEIS PARA OS METAMODELOS	69
V.3. TREINAMENTO DE REDES NEURONAIS	72
V.4. ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DE MODELOS <i>KRIGING</i>	72
V.5. COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS <i>KRIGING</i> E REDES NEURONAIS	89

VI. OTIMIZAÇÃO BASEADA EM METAMODELOS **110**

VI.1. UM PROCEDIMENTO ADAPTATIVO PARA OTIMIZAÇÃO COM METAMODELOS	111
VI.2. ESTUDO DE CASOS	117

VII. CONCLUSÕES E CRÍTICAS **140**

VII.1. SOBRE A METODOLOGIA PROPOSTA PARA OTIMIZAÇÃO	140
VII.2. VISÃO GERAL SOBRE OS RESULTADOS	142
VII.3. CONTRIBUIÇÕES DESTE TRABALHO	144
VII.4. SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS	145

VIII. BIBLIOGRAFIA **146**

ANEXO I - O SIMULADOR PETROX **156**

A-I.1. DESCRIÇÃO	156
A-I.2. FERRAMENTAS EM TEMPO REAL BASEADAS NO SIMULADOR PETROX	157

ANEXO II - METODOLOGIA PARA SOLUÇÃO DOS PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO **159**

A-II.1. O PROGRAMA NPSOL	159
A-II.2. A FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	160
A-II.3. ASPECTOS GERAIS	162

ANEXO III - MODELOS KRIGING **165**

A-III.1. IMPLEMENTAÇÃO DO EXEMPLO DE SASENA (2002)	165
--	-----

ANEXO IV - REDES NEURONAIS **169**

ANEXO V - FERRAMENTAS DESENVOLVIDAS PARA EXECUÇÃO DO TRABALHO **174**

A-V.1. CONFIGURAÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO	174
A-V.2. EXECUÇÃO DOS PROCEDIMENTOS DE CÁLCULO	179

ANEXO VI - INFORMAÇÕES COMPLEMENTARES PARA O EXEMPLO P1 **185**

A-VI.1. OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE 185

ANEXO VII - INFORMAÇÕES COMPLEMENTARES PARA O EXEMPLO P2 **189**

A-VII.1. A CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO 189

A-VII.2. OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE 200

ANEXO VIII - OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE ALQUILAÇÃO **214**

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura I-1 - Pirâmide de atividades no refino do petróleo (ROMAGNOLI E SÁNCHEZ (2000). _____	2
Figura I-2 - Principais módulos de uma aplicação de Otimização em tempo real (RTO). _____	6
Figura I-3 - Inter-relação entre o sistema de RTO e a unidade de processo. Em geral, a solução ótima é implementada por meio de controladores preditivos multivariáveis. _____	7
Figura I-4 - Otimização baseada em modelos com estrutura seqüencial-modular (SM): Dois níveis de convergência. _____	15
Figura I-5 - Um problema de otimização genérico baseado nas abordagens Seqüencial-modular e Modular-contínua. _____	17
Figura III-1 - Reprodução do exemplo de SASENA <i>et al.</i> (2003). _____	53
Figura IV-1 – Representação gráfica das funções do caso P1 com $\omega = 6$, $\alpha = 1$ e $\varphi = 1$. (a) Função objetivo; (b) Curva de nível da função objetivo; (c) Restrição de igualdade; (d) Curvas de nível da restrição de igualdade e da função objetivo. A solução do problema de otimização está assinalada nos gráficos (b) e (d) pelo símbolo “+”. _____	57
Figura IV-2 - Imagens da Refinaria de Capuava (RECAP) da PETROBRAS. _____	58
Figura IV-3 - Esquema Simplificado das Unidades de Destilação Atmosférica e de Solventes da RECAP. _____	62
Figura IV-4 - Detalhamento da modelagem da integração energética entre a bateria de pré-aquecimento e a torre Atmosférica (N506). _____	65
Figura V-1 - Utilização das variáveis selecionadas pelo procedimento FSR nas redes neuronais e nos modelos <i>kriging</i> . _____	71
Figura V-2 – Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros. _____	78
Figura V-3 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros. _____	79
Figura V-4 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros. _____	80
Figura V-5 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros. _____	81
Figura V-6 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros. _____	82

Figura V-7 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	83
Figura V-8 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	84
Figura V-9 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	85
Figura V-10 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	86
Figura V-11 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	87
Figura V-12 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.	88
Figura V-13 - Comparação entre modelos <i>kriging</i> e redes neuronais para o exemplo P1.	90
Figura V-14 - Comparação entre modelos <i>kriging</i> e redes neuronais para o exemplo P1.	91
Figura V-15 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	100
Figura V-16 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	101
Figura V-17 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	102
Figura V-18 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	103
Figura V-19 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	104
Figura V-20 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	105
Figura V-21 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	106
Figura V-22 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	107
Figura V-23 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	108
Figura V-24 – Comparação do desempenho de modelos <i>kriging</i> e redes neuronais.	109
Figura VI-1 - Procedimento típico para otimização com metamodelos	110
Figura VI-2 - Esquema do procedimento SAO proposto.	116
Figura VI-3 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso base.	129
Figura VI-4 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso I.	131
Figura VI-5 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso II.	

	133
Figura VI-6 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso III.	135
Figura VI-7 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso IV.	137
Figura VI-8 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso V.	139
Figura AVIII-1 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. Legendas para a representação de correntes e módulos.	194
Figura AVIII-2 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. (a) Formação da carga da torre de Pre-Flash; (b-e) Formação de correntes de utilidades.	195
Figura AVIII-3 - Representação gráfica do trecho da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. (a) Composição da carga e bateria de preaquecimento; (b) Processamento do petróleo; (c) Integração energética entre o <i>pumparound</i> da Torre Atmosférica e a Bateria de preaquecimento (flash BPA1).	196
Figura AVIII-4 - Representação gráfica da simulação PETROX da formação das correntes de carga da Unidade de Solventes da RECAP.	197
Figura AVIII-5 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Solventes da RECAP.	198
Figura AVIII-1 - O processo de alquilação (EDGAR et al., 2001)	214
Figura AVIII-2 - Resultados obtidos com os estudos de caso para o processo de alquilação.	217

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela I-I – BENEFÍCIOS TÍPICOS DE RTO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO (CANNEY,2003)	2
Tabela II-I - ALGUMAS APLICAÇÕES INDUSTRIAIS DE RTO E SUAS CARACTERÍSTICAS.	22
Tabela II-II - EXEMPLOS UTILIZADOS EM TRABALHOS UTILIZANDO A METODOLOGIA MC.	31
Tabela II-III - PROCEDIMENTO DE ATUALIZAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA (RC) DA ESTRATÉGIA SAO DE GIUNTA E ELDRED (2000)	43
Tabela III-I - MODELOS DE CORRELAÇÃO DISPONÍVEIS NO TOOLBOX MATLAB DACE (LOPHAVEN <i>et al.</i> , 2002a)	55
Tabela IV-I - ESPECIFICAÇÕES DE QUALIDADE PARA OS PRODUTOS DA UNIDADE DE SOLVENTES	60
Tabela IV-II- PARCELAS DA FUNÇÃO OBJETIVO DO EXEMPLO P2	63
Tabela IV-III - VARIÁVEIS DE DECISÃO DO EXEMPLO P2	63
Tabela IV-IV - RESTRIÇÕES DO EXEMPLO P2	66
Tabela IV-V - RESUMO DOS RESULTADOS DO EXEMPLO P2 NAS CONDIÇÕES BASE	67
Tabela V-I – MODELOS UTILIZADOS PARA AVALIAÇÃO DA METODOLOGIA DE ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS BASEADO NO EXEMPLO P2	75
Tabela V-II - ERROS MÉDIOS DE PREDIÇÃO PARA OS METAMODELOS KRIGING	77
Tabela V-III – INFORMAÇÕES BÁSICAS PARA GERAÇÃO DOS METAMODELOS PARA O EXEMPLO P1	89
Tabela V-IV - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM OS MODELOS <i>KRIGING</i> UTILIZADOS NO EXEMPLO P1	92
Tabela V-V - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM AS REDES NEURONAIIS UTILIZADAS NO EXEMPLO P1	92
Tabela V-VI – INFORMAÇÕES BÁSICAS PARA GERAÇÃO DOS METAMODELOS PARA O EXEMPLO P2	93

Tabela V-VII - DESTAQUE DE RESULTADOS OBTIDOS COM A OTIMIZAÇÃO COM METAMODELOS PARA O EXEMPLO P2 _____	94
Tabela V-VIII - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM OS MODELOS <i>KRIGING</i> UTILIZADOS NO EXEMPLO P2 _____	96
Tabela V-IX - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM AS REDES NEURONAIS UTILIZADAS NO EXEMPLO P2 _____	97
Tabela V-X - ERROS MÉDIOS DE PREDIÇÃO PARA COMPARAÇÃO DOS METAMODELOS _____	98
Tabela V-XI - NÚMERO DE PARÂMETROS DOS METAMODELOS _____	99
Tabela VI-I - PROCEDIMENTO DE ATUALIZAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA (RC) ADAPTADO A PARTIR DA ESTRATÉGIA SAO DE GIUNTA E ELDRED (2000) _____	114
Tabela VI-II - CASOS PARA AVALIAÇÃO DO PROCEDIMENTO SAO COM O EXEMPLO P1 _____	117
Tabela VI-III - CASOS PARA AVALIAÇÃO DO PROCEDIMENTO SAO COM O EXEMPLO P1 _____	119
Tabela VI-IV – DESVIOS RELATIVOS (%) EM RELAÇÃO À OTIMIZAÇÃO COM O MODELO RIGOROSO NO EXEMPLO P1 _____	120
Tabela VI-V - CASOS PARA ESTUDO DA ABORDAGEM SAO COM O EXEMPLO P2 _____	121
Tabela VI-VI - DESTAQUES DOS RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO BASEADA NA ABORDAGEM SAO _____	127
Tabela VI-VII – AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO BASE _____	128
Tabela VI-VIII - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO I _____	130
Tabela VI-IX - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO II _____	132
Tabela VI-X - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO III _____	134
Tabela VI-XI – AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO IV _____	136
Tabela VI-XII - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO V _____	138
Tabela AII-1 – ATRIBUTOS DE CONFIGURAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO _____	163
Tabela AVII-1 – GRUPO DE CORTES UTILIZADO NA SIMULAÇÃO PETROX _____	189

Tabela AVII-2 – PROPRIEDADES DOS PSEUDO-COMPONENTES DA SIMULAÇÃO PETROX _____	190
Tabela AVII-3 – COMPONENTES PUROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO PETROX _____	191
Tabela AVII- 4 - LISTA DE MÓDULOS DA SIMULAÇÃO PETROX _____	199
Tabela AVIII-1 - Variáveis do modelo matemático do exemplo P2 _____	215
Tabela AVIII-2 - Seqüência de cálculo no procedimento utilizado neste trabalho para solução do problema P2 _____	216
Tabela AVIII-3 - CASOS DE ESTUDO PARA O EXEMPLO P2 _____	217
Tabela AVIII-4 - EXEMPLO DO PROCESSO DE ALQUILAÇÃO – OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE. _____	218

I. INTRODUÇÃO

I.1. MOTIVAÇÃO

Métodos de otimização vêm sendo aplicados aos processos químicos há várias décadas, na busca contínua da máxima exploração do potencial das unidades de processo. Grande parte destes métodos, consolidados em ferramentas de otimização, controle e automação de processos, foram destinados ao setor de petróleo e petroquímica. A justificativa para este fato é a escala de produção: o grande volume de produtos gerados e o elevado consumo de energia e insumos fazem com que até pequenas melhorias na eficiência dos processos se traduzam em ganhos expressivos.

Os sistemas de Otimização em Tempo Real (frequentemente referenciados pela sigla **RTO** – “*Real Time Optimization*”) estão entre as ferramentas de otimização cujo uso se encontra em expansão a nível mundial. No Brasil o uso do RTO encontra-se em fase inicial (LIPORACE *et al.*, 2007), a despeito dos benefícios potenciais já reportados (ver Tabela I-I).

Os problemas de otimização que surgem neste contexto baseiam-se essencialmente em modelos matemáticos do processo em estudo e algoritmos de otimização que, através destes, buscam determinar estratégias de operação que maximizem lucros operacionais levando em consideração restrições de capacidade, de segurança, de mercado e ambientais. A busca de descrições mais completas e precisas dos processos ou sistemas a serem otimizados leva à concepção de modelos matemáticos de complexidade crescente, tornando a atividade de otimização de processos também crescentemente complexa. Outro aspecto relevante associado ao aumento da complexidade dos modelos e problemas diz respeito à quantidade, qualidade e diversidade de dados e informações requeridos.

A combinação dos benefícios potenciais das ferramentas de otimização aplicadas ao setor de petróleo com o aumento contínuo e crescente da complexidade dos problemas de otimização são, portanto, grande motivação para novos trabalhos investigativos na busca de metodologias alternativas para a realização da Otimização em Tempo Real.

**Tabela I-I – BENEFÍCIOS TÍPICOS DE RTO NA INDÚSTRIA DO PETRÓLEO
(CANNEY,2003)**

Unidade	Benefício, \$/bbl	Capacidade típica da unidade, 1000bbl/d	Benefícios típicos, \$1.000.000/ano
Destilação de petróleo	0,03 – 0,05	135	1,2 - 2,0
Craqueamento catalítico fluido (FCC)	0,07 – 0,15	38	0,8 - 1,7
Reforma catalítica	0,10 – 0,40	25	0,75 - 3,0
Hidrocraqueamento	0,10 – 0,20	26	0,78 - 1,5
Hidrotratamento	0,10 – 0,20	-	-
Blending de gasolina	0,05 – 0,20	-	-

I.2. A OTIMIZAÇÃO APLICADA À INDÚSTRIA DO PETRÓLEO

Vários trabalhos relatam o desenvolvimento e utilização de ferramentas de otimização voltadas para a indústria de petróleo e petroquímica desde a década de 50 (BIRCHFIELD, 2002, BODINGTON e BAKER, 1990). Em função da grande complexidade da estrutura de refino, o emprego da otimização (do ponto de vista econômico) na indústria do petróleo é realizada em vários níveis (ver) (SHOBRYE e WHITE, 2002):

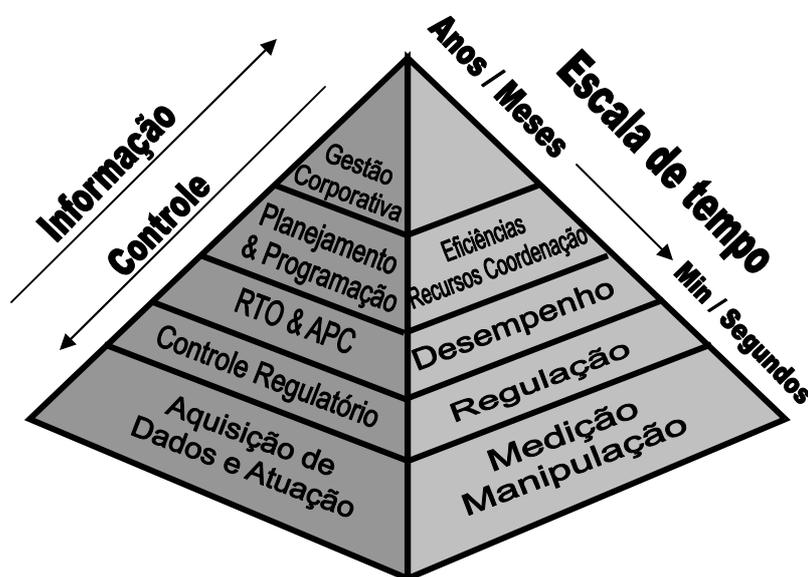


Figura I-1 - Pirâmide de atividades no refino do petróleo (ROMAGNOLI E SÁNCHEZ (2000).

Planejamento de Investimentos

O problema básico do planejamento de investimentos é determinar quais são as oportunidades ou necessidades de investimento prioritárias, levando em consideração definições estratégicas, tendências mercadológicas, alterações em legislações, cenários políticos, e disponibilidade de capital. A partir desta avaliação de oportunidades pode ocorrer a construção ou aquisição de novas plantas ou unidades de processo, ampliações, incorporação de novas tecnologias, etc. Esta atividade é realizada no nível corporativo das empresas, e se baseia em cenários de médio e longo prazo revistos a cada um ou dois anos.

Planejamento da produção

Nas grandes empresas, o planejamento da produção se dá em dois níveis. No nível corporativo, decisões são tomadas considerando toda a estrutura da empresa (logística, distribuição, transporte e produção), projeções de demanda e preços de produtos, e disponibilidade e custo de matéria-prima. É neste nível que são definidos os volumes e tipos de petróleo a serem comprados no mercado para posterior refino, aproveitando-se a escala para obter melhores preços. As ferramentas de otimização utilizadas neste nível baseiam-se em modelos simplificados (em geral lineares) do processo, em função do elevado grau de complexidade do problema. O planejamento neste nível considera, tipicamente, horizontes de seis meses com atualização mensal.

No nível das plantas de uma grande empresa de petróleo (por exemplo, refinarias), o mesmo problema é resolvido em escala menor. O modelo contempla apenas os processos da unidade em questão e a parte da cadeia logística utilizada pela mesma. Neste momento, a previsão de demanda é mais precisa que no caso corporativo, e busca-se refinar a estratégia prevista no planejamento corporativo para maximizar os lucros. Mesmo neste nível utilizam-se basicamente modelos lineares acoplados a algoritmos de programação linear. Muitas ferramentas especializadas de otimização são oferecidas no mercado para o problema de planejamento da produção.

Programação da Produção

Este problema, ainda de grande complexidade, também é resolvido no nível de unidades de uma empresa (p.ex. uma refinaria). Seu objetivo é programar as operações a serem realizadas, de forma a atender às demandas no prazo, minimizando o armazenamento de matéria-prima e produtos (que implica em capital imobilizado). Assim, a programação de produção consiste em um problema dinâmico que define tempos e volumes envolvidos em cada operação. Em refinarias, o horizonte

considerado para programação varia de dois a sete dias, com atualização diária. As atividades de planejamento e programação da produção são realizadas com estreita relação entre si. Atualmente, as ferramentas disponíveis comercialmente ou citadas na literatura para programação da produção baseiam-se em modelos bastante complexos, que podem ser lineares ou não, e que envolvem variáveis discretas e contínuas simultaneamente. Em função da complexidade do problema, estas ferramentas não são utilizadas para se determinar a solução ótima do ponto de vista matemático, mas auxiliam o usuário a chegar a uma programação *viável*. Assim como no caso do planejamento da produção, a utilização bem-sucedida de ferramentas de programação depende fortemente da experiência do usuário e da qualidade intrínseca da imensa quantidade de informações necessárias para a formulação do problema.

Otimização de unidades de processo

No nível das unidades de processo, o objetivo da otimização é determinar o valor apropriado para as variáveis do processo que proporcionem máximo desempenho, dentro do perfil de produção definido pelas camadas superiores. Embora esta decisão possa ser tomada a partir da experiência e conhecimentos dos técnicos responsáveis pela operação da unidade, muitas vezes a determinação precisa do ponto ótimo exige a utilização de ferramentas de apoio.

Entre as ferramentas mais sofisticadas para otimização de unidades de processo estão os sistemas de RTO. Estas ferramentas baseiam-se na associação de modelos matemáticos rigorosos do processo a algoritmos de otimização, que em tempo real buscam continuamente a determinação do ponto ótimo operacional.

Controle Preditivo Multivariável

A implementação de um ponto ótimo operacional definido por um sistema de RTO não pode, em geral, ser realizada de forma instantânea. Variações drásticas poderiam levar a unidade de processo a oscilações indesejáveis ou mesmo à instabilidade. Frequentemente, a solução do problema dinâmico de como conduzir o processo ao novo ponto operacional com segurança e confiabilidade é deixado a cargo dos controladores preditivos multivariáveis. Uma vez implementado o ponto ótimo, o controlador deverá ainda rejeitar eventuais perturbações, tomando ações que minimizem as flutuações do processo em torno do ponto ótimo definido. A atuação do Controle Preditivo Multivariável sobre o processo é feito através do envio de *setpoints* às malhas de controle regulatório da unidade de processo.

As aplicações comerciais desta classe de controladores possuem também um

otimizador em tempo real geralmente baseado em modelos lineares do processo. Na ausência de sistemas de RTO ou em associação a estes, estes otimizadores determinam o ponto operacional a ser perseguido pelo controlador. WHITE (1997) apresenta uma discussão sobre quando o Controle Preditivo Multivariável é suficiente para a otimização de um processo e quando a camada de RTO se faz necessária.

I.3. RTO - OTIMIZAÇÃO EM TEMPO REAL

As ferramentas de otimização em tempo real baseiam-se na associação de um modelo matemático do processo a um algoritmo de otimização que periodicamente determina o ponto ótimo operacional a ser perseguido. Esta seção apresenta as características básicas destas ferramentas.

I.3.1. Estrutura e mecanismo

Para assegurar a confiabilidade dos resultados, as aplicações industriais de RTO envolvem uma série de etapas preliminares antes do equacionamento do problema de otimização econômica propriamente dito. Baseado em WHITE (1997), estas etapas são apresentadas a seguir. A Figura I-2 e a Figura I-3 ilustram a arquitetura e o mecanismo típico de atuação dos sistemas de RTO.

Condicionamento e validação de dados

Este módulo incorpora metodologias para detecção e remoção de erros grosseiros, em geral baseadas na combinação de testes estatísticos com estratégias de identificação (ROMAGNOLI e SÁNCHEZ, 2000). Em geral, verifica-se se os dados de processo estão dentro dos limites pré-estabelecidos, definidos através de experiência prévia e/ou por meio de intervalos de confiança construídos a partir de análises estatísticas que caracterizam a variabilidade típica de cada variável de processo. Verifica-se ainda a possibilidade de ocorrência de eventos como variações bruscas (e portanto improváveis) e “congelamento” de sinais.

Detecção do estado estacionário

Quando o modelo matemático do processo é estacionário, a realização de simulações baseadas em dados obtidos durante o transiente pode levar a resultados inconsistentes (JIANG *et al.*, 2003). Assim, a implementação de um procedimento para determinar se o processo está suficientemente próximo do estado estacionário torna-se necessária. Em geral define-se um intervalo de tempo do passado a ser analisado

(imediatamente anterior ao início do procedimento de otimização), em que são coletados dados referentes aos sinais de um conjunto de variáveis de processo selecionadas para representar a condição estacionária do mesmo. A partir destes dados, a variabilidade das variáveis em questão é quantificada e comparada com parâmetros previamente definidos por meio de testes estatísticos ou heurísticos que definem se o processo pode ou não ser considerado estacionário.

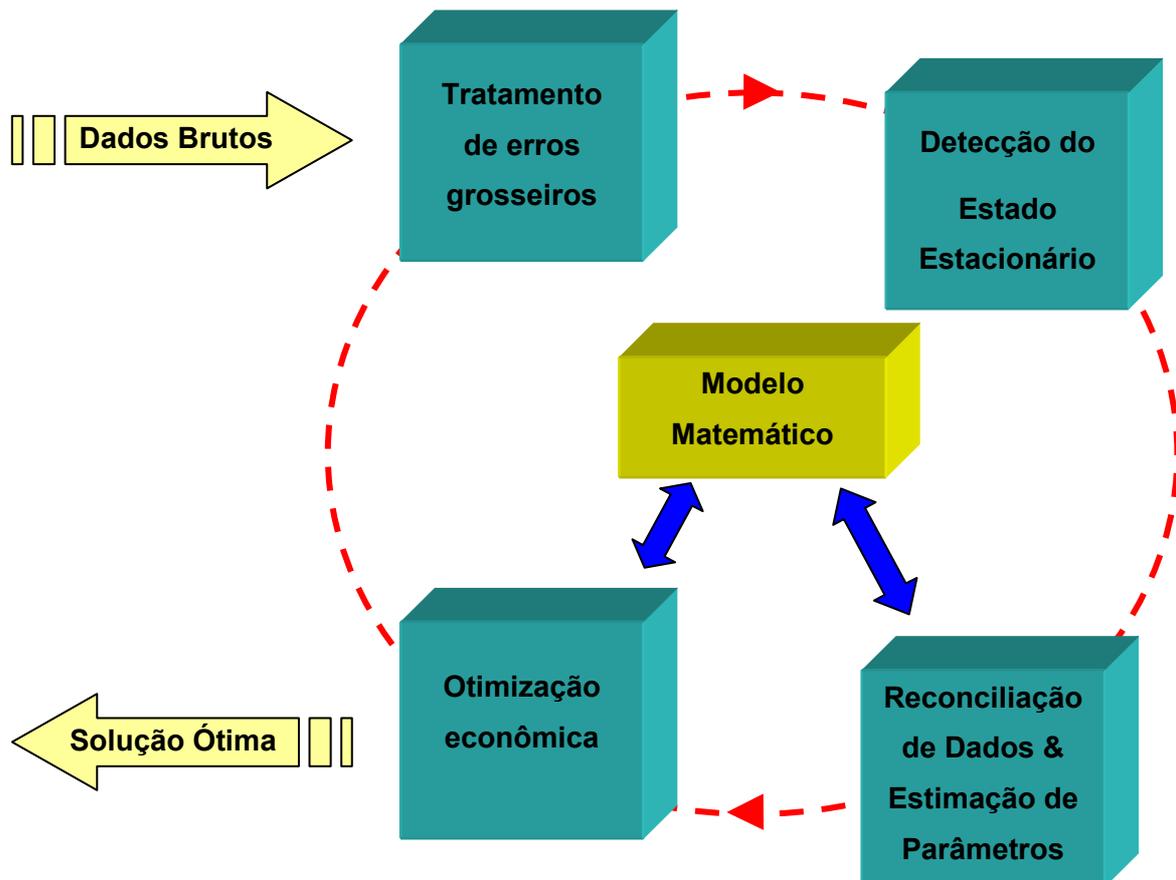


Figura I-2 - Principais módulos de uma aplicação de Otimização em tempo real (RTO).

Reconciliação de dados e Estimação de parâmetros

Mesmo após a remoção de erros grosseiros, podem restar ainda erros nos valores medidos que podem comprometer a precisão da solução do problema de otimização. A detecção e correção destes desvios são feitas através da reconciliação de dados. A reconciliação de dados consiste em um procedimento de otimização através do qual um conjunto de dados é confrontado com um modelo matemático considerado confiável – em geral um modelo fenomenológico baseado nas leis de conservação de massa, energia e quantidade de movimento e modelos rigorosos para a descrição de

fenômenos como o equilíbrio de fases e o mecanismo de sistemas reacionais. Com base nos valores estimados para as variáveis através deste procedimento, e análise estatística prévia da sua variabilidade típica, verifica-se se os valores medidos gerados pelos instrumentos de medição são aceitáveis dentro de certo grau de probabilidade.

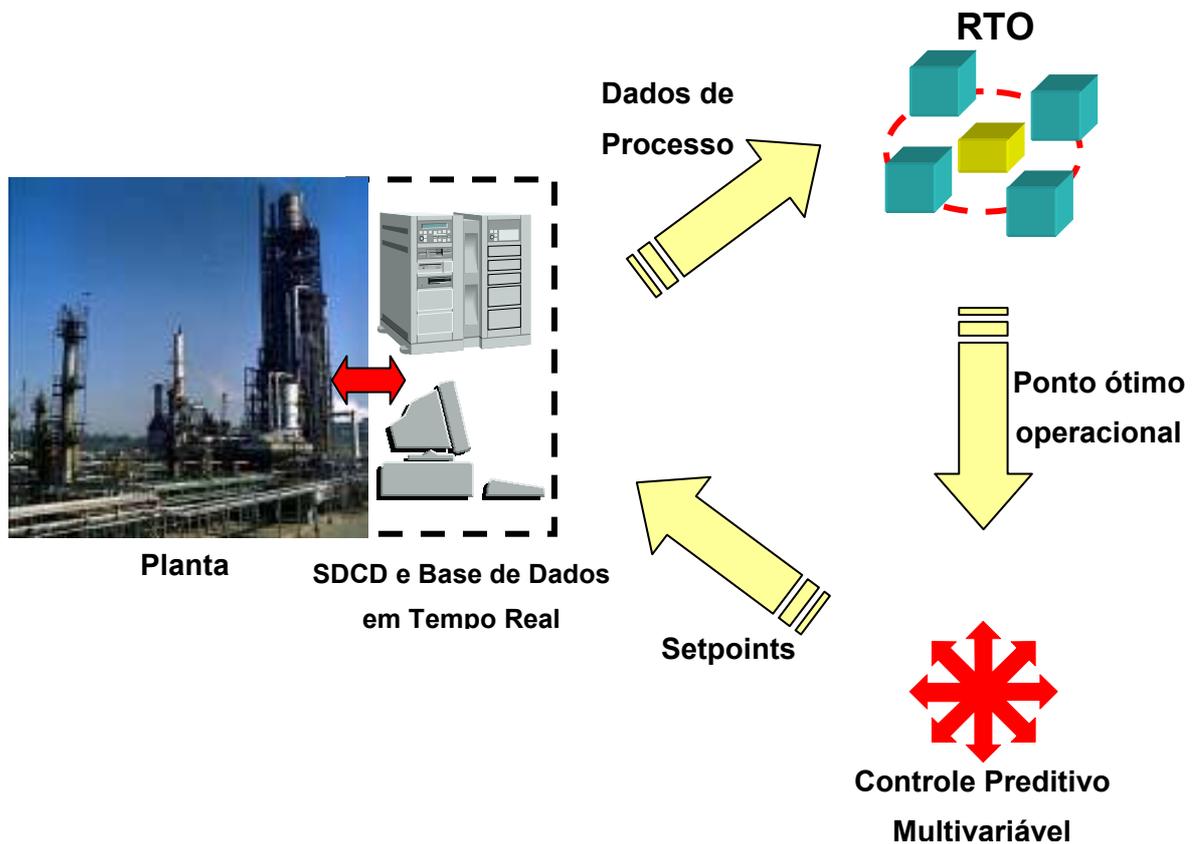


Figura I-3 - Inter-relação entre o sistema de RTO e a unidade de processo. Em geral, a solução ótima é implementada por meio de controladores preditivos multivariáveis.

O problema de otimização decorrente caracteriza-se por uma função objetivo que leva em consideração os desvios entre os valores medidos e estimados (pelo modelo) para as variáveis de processo, e que tem como variáveis de decisão as variáveis independentes do modelo. Um exemplo de um caso particular de reconciliação de dados é apresentado pelas equações (I-1).

$$\min_x \mathfrak{S} = \sum_k^{N_{\text{exp}}} \left[\sum_j^{N_x} \frac{(x_{kj}^M - x_{kj}^C)^2}{\sigma_{x_j}^2} + \sum_i^{N_y} \frac{(y_{ki}^M - y_{ki}^C)^2}{\sigma_{y_i}^2} \right]$$

$$y^C = y(x)$$

$$h(x) = 0$$

$$g(x) \leq 0$$

$$x^L \leq x \leq x^U$$

(I-1)

onde:

- \mathfrak{S} - Função objetivo
- g - Restrições de desigualdade
- h - Restrições de igualdade
- x - Variáveis independentes do modelo matemático do processo a serem reconciliadas
- y - Variáveis dependentes do modelo matemático do processo a serem reconciliadas
- σ_x, σ_y - Variâncias das variáveis independentes e dependentes, respectivamente
- L, U - Indicador para limites inferior e superior, respectivamente
- C - Indicador para valor estimado
- M - Indicador para valor medido
- N_{exp} - Número de experimentos
- N_x - Número de variáveis independentes
- N_y - Número de variáveis dependentes
- i, j, k - Índices para o número de variáveis dependentes, independentes e experimentos, respectivamente

Contudo, erros de predição podem surgir ainda se o modelo do processo não tiver condições de representá-lo com a precisão necessária. Frequentemente, o processo sofre alterações em seu comportamento (por exemplo em função de alterações na composição da carga de uma unidade ou da desativação de um catalisador), e torna-se necessário corrigir parâmetros do modelo matemático para garantir resultados satisfatórios. A estimação de parâmetros é também realizada através de um problema de otimização como em (I-2). Aqui as variáveis de decisão são os parâmetros do modelo e a função objetivo geralmente representa os desvios entre valores medidos e estimados para as variáveis dependentes.

$$\min_{\beta} \mathfrak{S} = \sum_k^{N_{\text{exp}}} \left[\sum_i^{N_y} \frac{(y_{ki}^M - y_{ki}^C)^2}{\sigma_{y_i}^2} \right]$$

$$y = y(\beta, x^M)$$

$$\beta^L \leq \beta \leq \beta^U$$

(I-2)

onde:

- \mathfrak{S} - Função objetivo baseada na diferença entre os valores medidos e estimados para as variáveis de processo

x	-	Variáveis independentes do modelo matemático do processo
y	-	Variáveis dependentes do modelo matemático do processo a serem reconciliadas
σ_y	-	Variâncias das variáveis independentes e dependentes, respectivamente
L,U	-	Indicador para limites inferior e superior, respectivamente
M	-	Indicador para valor medido
N _{exp}	-	Número de experimentos
N _y	-	Número de variáveis dependentes
β	-	Vetor de parâmetros do modelo
i,k	-	Índices para o número de variáveis dependentes e experimentos, respectivamente

Tanto a reconciliação de dados como o Ajuste de parâmetros se constituem em problemas de otimização que podem ser resolvidos separadamente ou de forma simultânea (ARORA e BIEGLER, 2001). Estes autores apresentam para este problema a seguinte forma geral:

$$\begin{aligned}
 & \min_{x,u,p} \mathfrak{J}(x^M, x) \\
 & h(x, u, p) = 0 \\
 & g(x, u, p) \leq 0 \\
 & x^L \leq x \leq x^U \\
 & u^L \leq u \leq u^U \\
 & p^L \leq p \leq p^U
 \end{aligned} \tag{I-3}$$

onde:

\mathfrak{J}	-	Função objetivo
g	-	Restrições de desigualdade
h	-	Restrições de igualdade
x	-	Variáveis de processo a serem reconciliadas
u	-	Variáveis de processo não medidas
p	-	Parâmetros do modelo matemático
L,U	-	Índices para limites inferior e superior, respectivamente
M	-	Índice para valor medido

A função \mathfrak{J} é freqüentemente obtida através do problema da máxima verossimilhança, assumindo a forma de um problema de mínimos quadrados sob certas condições. Quando modelos dinâmicos são considerados, a variável tempo é freqüentemente incorporada às restrições e à função objetivo, e as variáveis x e u tornam-se funções.

As implementações industriais em tempo real de problemas de reconciliação de dados e estimação de parâmetros podem ser feitas de inúmeras formas. Embora a solução integrada dos dois problemas seja considerada mais eficiente (ARORA e BIEGLER, 2001), há implementações em que a reconciliação de dados é resolvida primeiro

utilizando-se modelos mais simples (p.ex. apenas os balanços de massa e energia), e os valores reconciliados das variáveis de processo (vazões, temperaturas) são então utilizados na estimação de parâmetros. Com isto, reduz-se a magnitude e a complexidade dos problemas de otimização a serem resolvidos. Outro recurso freqüentemente utilizado para este fim é selecionar apenas um subconjunto de todos os parâmetros e variáveis possíveis para reconciliação e/ ou estimação em tempo real.

O problema de otimização econômica

O problema de otimização econômica em uma aplicação de RTO consiste na determinação do ponto operacional que melhor satisfaça um determinado critério de desempenho de uma planta. Este critério é expresso matematicamente através de uma **função objetivo** que pode representar, por exemplo, o lucro operacional de uma unidade de processo, o rendimento de um produto, ou mesmo uma combinação de diferentes objetivos. O espaço de busca do ponto ótimo é normalmente limitado por **restrições**. Estas restrições em geral representam limites de segurança ou capacidade de equipamentos, especificações de qualidade de produtos, restrições ambientais, etc. A relação entre as variáveis utilizadas para definir o ponto ótimo operacional (doravante denominadas **variáveis de decisão**) e as variáveis que expressam as respostas do processo a estímulos externos é dada por um **modelo matemático** do processo. Este modelo pode ser representado como um conjunto de restrições de igualdade impostas ao problema de otimização.

A classificação de problemas de otimização pode ser feita de diversas maneiras, considerando as características das variáveis, das funções objetivo e das restrições (se existentes) impostas ao problema. BIEGLER e GROSSMANN (2004) apresentam de forma abrangente as inúmeras alternativas possíveis. Aplicações em tempo real para a indústria do petróleo em geral baseiam-se em variáveis contínuas, e por conseguinte os problemas típicos decorrentes são de Programação não-linear (NLP):

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in \mathcal{R}^n} \varphi(\mathbf{x}) \\ & \text{sujeito a : } \begin{cases} h(\mathbf{x}) = 0 \\ g(\mathbf{x}) = 0 \end{cases} \quad (1-4) \end{aligned}$$

onde:

- $\varphi(\mathbf{x})$ - Função objetivo
- \mathbf{x} - Vetor de variáveis de decisão
- $h(\mathbf{x})$ - Restrições de igualdade
- $g(\mathbf{x})$ - Restrições de desigualdade

Em sua forma mais geral, as funções ϕ , g e h são não-lineares.

Implementação da solução ótima

A implementação do ponto ótimo operacional obtido como solução do problema de otimização na planta não pode, em geral, ser feita de forma instantânea. Se houver diferença significativa entre o estado vigente das variáveis de processo e aquele proposto, a implementação instantânea da nova solução pode gerar uma severa perturbação sobre o processo. Para evitar que isto ocorra, a implementação do ponto ótimo é geralmente feita através de controladores preditivos multivariáveis, que realizam a implementação de forma suave, distribuindo-a ao longo de certo horizonte de tempo, e levando em consideração (através de seu próprio modelo matemático) as restrições vigentes e a eventual ocorrência de perturbações. Na ausência de controladores preditivos, pode-se ainda utilizar algoritmos simples para implementação suave dos valores ótimos como *setpoints* do sistema de controle regulatório. Detalhes adicionais de implementação devem ser levados em conta quando os controladores preditivos incorporarem um módulo de otimização baseado em modelos simplificados (p.ex. programação linear). Neste caso os valores da solução ótima são convertidos em uma região estreita de operação que passa a ser o espaço de busca do módulo simplificado de otimização, ou são utilizados por este módulo como valores de referência a serem alcançados na ausência de perturbações externas.

Otimização baseada em modelos dinâmicos

A utilização de modelos dinâmicos em aplicações industriais de RTO (frequentemente referenciada como DRTO) está ainda em fase embrionária, com poucas aplicações reportadas na literatura. BIEGLER *et al.* (2002) propõem como forma geral para um problema de otimização dinâmica o problema descrito em (I-5). O modelo dinâmico torna a atuação do sistema de otimização independente do estabelecimento de estado estacionário no processo, além de eliminar uma das fontes de erro de modelagem (modelo estático x dados que expressam dinâmica) e criar a possibilidade de que os problemas de otimização e controle possam ser resolvidos simultaneamente. Contudo, o uso de modelos dinâmicos pode trazer outros desafios em função de possível aumento do porte e complexidade do problema de otimização. O estudo de metodologias para a solução de problemas como em (I-5) e sua utilização em tempo real tem sido objeto de inúmeros estudos (KAMESVARAM e BIEGLER, 2006, ENGELL, 2007, KADAM *et al.*, 2007, BLOSS *et al.*, 1999).

$$\begin{aligned}
& \min_{z(t), y(t), u(t), t_f, p} \varphi(z(t_f), y(t_f), u(t_f), t_f, p) \\
& \text{sujeito a :} \\
& \frac{dz(t)}{dt} = F(z(t), y(t), u(t), t, p); z(0) = z^0 \\
& G(z(t), y(t), u(t), t, p) = 0 \\
& H_s(z(t_s), y(t_s), u(t_s), t_s, p) = 0 \\
& z^L \leq z(t) \leq z^U \\
& y^L \leq y(t) \leq y^U \\
& u^L \leq u(t) \leq u^U \\
& p^L \leq p \leq p^U \\
& t_f^L \leq t_f \leq t_f^U
\end{aligned} \tag{I-5}$$

onde:

- φ - Função objetivo escalar
- F - Lado direito das restrições sob a forma de equações diferenciais
- G - restrições sob a forma de equações algébricas
- H_s - Condições pontuais referentes a instantes de tempo específicos t_s
- z - Vetor de estado diferencial
- z^0 - Condições iniciais de z
- y - Vetor de estado algébrico
- u - Vetor de controle
- p - Parâmetros do modelo matemático invariantes no tempo
- t_f - Tempo final
- L, U - Indicadores para limites inferior e superior, respectivamente

1.3.2. Modelagem e Simulação de Processos

Os modelos de processo utilizados para otimização podem ser totalmente empíricos (ZHANG e FORBES, 2000) ou com base fenomenológica. A estrutura do modelo e a forma com que este se integra ao algoritmo de otimização influenciam de forma fundamental as características da ferramenta de otimização. A seguir são discutidas as estruturas mais usuais de integração entre modelo e algoritmo de otimização.

Modelos de Equações Abertas (EA)

Grande parte das aplicações industriais de otimização em tempo real (RTO) baseia-se em modelos de equações abertas (ALKAYA *et al.*, 2000, TOLSMA e BARTON, 2000). Nesta abordagem, o problema de otimização e a solução do modelo do processo são resolvidos em um único nível de iteração, em que a convergência do modelo ocorre simultaneamente à convergência do problema de otimização. Na realidade, as equações diferenciais e/ou algébricas do modelo matemático integram as restrições do problema de otimização em questão, que só são plenamente satisfeitas ao final do

procedimento de otimização. Esta característica, freqüentemente designada na literatura por *infeasible path*, proporciona grande eficiência computacional aos simuladores baseados em EA. A disponibilidade das equações do modelo matemático na forma aberta também contribui neste sentido, pois viabiliza a utilização de ferramentas de computação simbólica para determinação analítica (e portanto precisa) de derivadas. Derivadas mais precisas proporcionam maior eficiência a algoritmos de otimização baseados no cálculo de gradientes (freqüentemente utilizados). Além disso, o esforço computacional envolvido no seu cálculo é menor que o despendido no cálculo numérico de derivadas através de perturbações. gPROMS, ROMeO e ASPEN PLUS são exemplos de sistemas comerciais com estas características. Outro aspecto considerado positivo das ferramentas de modelagem baseadas em EA está no fato de o usuário ter liberdade para introduzir alterações ou modelos complementares de acordo com suas necessidades.

No entanto, a utilização da abordagem EA pode apresentar desvantagens ou desafios para sua utilização, especialmente para o usuário não especializado (ALKAYA ET AL., 2000). Quando o ambiente de modelagem exige ou permite que o usuário escreva diretamente as equações do modelo, podem surgir dificuldades para implementação e manutenção de modelos complexos, e eventualmente a necessidade de maior nível de especialização do usuário final relacionados ao conhecimento avançado sobre modelagem matemática e métodos numéricos. Modelos de processos reais freqüentemente envolvem centenas ou milhares de equações (algébricas e/ou diferenciais). Nestes casos a inicialização adequada do problema pode se tornar uma tarefa complexa, em função de sua dimensão, ocasionando dificuldades para a obtenção de resultados. Algumas ferramentas comerciais lançam mão de simuladores seqüenciais-modulares para gerar as estimativas iniciais. Outra possível fonte de dificuldades pode ocorrer quando partes específicas do modelo apresentarem problemas de convergência, exigindo grande esforço computacional para seu cálculo, ou ainda quando existe a possibilidade de ocorrerem múltiplas soluções (SHAO ET AL., 2004). As ferramentas comerciais EA em geral apresentam dispositivos e metodologias que buscam minimizar as dificuldades apontadas. Contudo, no estado atual, problemas como os citados ainda são observados.

Abordagem Seqüencial-Modular (SM)

A abordagem SM vem sendo amplamente utilizada em ferramentas comerciais de modelagem e simulação há várias décadas, e até recentemente com maior extensão que as ferramentas EA. A implementação do modelo, neste caso, é feita através da

configuração do fluxograma, ou seja, do encadeamento de módulos pré-definidos que representam as operações unitárias do processo. Estes módulos são computados seqüencialmente, no mesmo sentido do escoamento de material ao longo dos vários equipamentos da unidade real. Embora os modelos intrínsecos aos módulos não sejam acessíveis ao usuário, são em geral baseados em algoritmos e códigos largamente testados, e portanto localmente robustos (ALKAYA *ET AL.*, 2000). A abordagem SM torna também mais simples e intuitiva para o engenheiro de processo a inicialização das variáveis envolvidas e a formulação da estratégia de simulação. Assim, os simuladores SM proporcionam grande facilidade de uso para o usuário não-especializado. Os simuladores SM são mais freqüentemente utilizados para atividades de projeto e análise de processos, freqüentemente realizadas de forma interativa. Como exemplos de simuladores comerciais freqüentemente utilizados com esta finalidade, pode-se citar os programas PRO/II e PETROX.

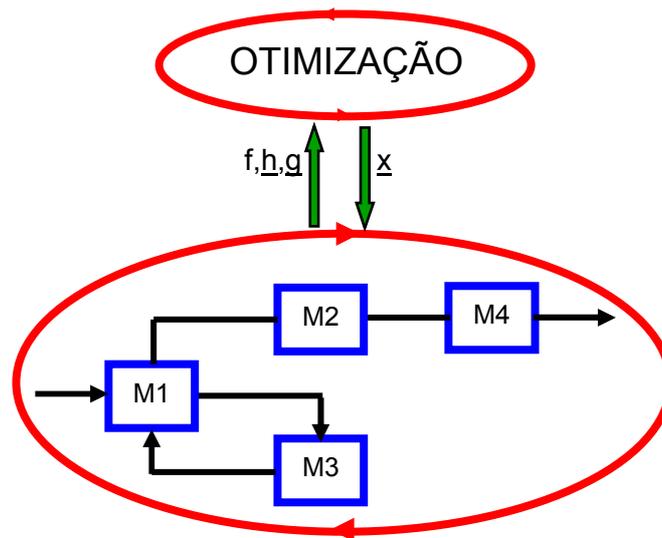
A solução de um fluxograma implica na solução seqüencial dos modelos matemáticos de todos os módulos de processo, o que pode dar origem a problemas de difícil solução quando existem correntes de reciclo. A convergência de correntes de reciclo envolve a utilização de algoritmos de convergência que tendem a ser lentos e pouco robustos, dada a necessidade de se utilizar algoritmos de simples utilização pelo usuário (como exemplo, pode-se citar os algoritmos de substituição sucessiva e Wegstein).

A utilização de modelos SM em aplicações de otimização (ver Figura I-4) implica em dois ciclos iterativos: um ciclo interno onde o modelo é computado, e outro externo para a convergência do problema de otimização. Quando o modelo do processo exige esforço computacional significativo, a arquitetura SM é nitidamente menos eficiente que a abordagem EA. Embora existam simuladores SM que contenham o cálculo analítico de derivadas como parte do modelo (BIEGLER *et al.*, 1994), são poucas as ferramentas comerciais que dispõem desta facilidade. Assim, o cálculo de gradientes só pode ser computado numericamente, já que não há acesso explícito às equações do modelo. Esta deficiência implica em baixa precisão e maior esforço computacional.

Abordagem Modular-contínua

Uma metodologia inicialmente utilizada na simulação de processos químicos por BERNA *ET AL.* (1980), deu origem a uma linha de desenvolvimento que procurou viabilizar o uso de simuladores SM para a otimização de processos (fluxogramas) complexos. Esta abordagem, denominada **modular-contínua** (MC), consiste em equacionar o problema de otimização introduzindo a estratégia *infeasible path*, de

forma que a convergência global do modelo matemático do processo só seja alcançada ao final do procedimento iterativo de otimização (BIEGLER, 1985, BIEGLER E CUTHRELL, 1985). Aplicando-se a abordagem modular-contínua a um simulador SM, apenas os módulos (ou grupos de módulos) independentes do fluxograma precisariam ser computados, sem a necessidade de convergir todo o fluxograma a cada iteração. Tal procedimento faz com que o simulador SM se aproxime conceitualmente da abordagem EA.



**Figura I-4 - Otimização baseada em modelos com estrutura seqüencial-modular (SM):
Dois níveis de convergência.**

A Figura I-5 procura ilustrar a abordagem modular-contínua comparando-a com a abordagem seqüencial-modular equivalente para o mesmo problema de otimização. No problema original, dois módulos representativos de duas operações unitárias genéricas são interligados por uma corrente de processo C_{12} . Um conjunto de variáveis de decisão \underline{x} formado pelos dois subconjuntos \underline{x}_1 e \underline{x}_2 podem ser manipuladas para otimizar a função objetivo $f(\underline{x}_1, \underline{x}_2)$. O subconjunto \underline{x}_1 engloba as variáveis de decisão fisicamente associados ao módulo 1, enquanto que \underline{x}_2 engloba as variáveis de decisão associados ao módulo 2. Da mesma forma, \underline{y}_1 e \underline{y}_2 são subconjuntos de variáveis dependentes do modelo matemático associadas respectivamente aos módulos 1 e 2. A partir de \underline{x} e \underline{y} podem ser computados os valores da função objetivo e restrições. Implementado desta forma, o problema de otimização toma a forma da estrutura em duas camadas cujas deficiências foram apontadas anteriormente.

Na abordagem MC, a primeira ação consiste em romper a corrente de conexão em duas, surgindo uma corrente de saída C_{S12} do módulo 1 e uma corrente de entrada

C_{E12} do módulo 2. A estas correntes estão associados conjuntos de propriedades que as definem como composição, temperatura, pressão e entalpia. As propriedades da corrente de saída C_{S12} , agrupadas no vetor \underline{z}_S , são funções dos dados de entrada do módulo 1 (e portanto variáveis dependentes), enquanto que o vetor \underline{z}_E (que contém as propriedades da corrente C_{E12}) torna-se um conjunto de variáveis independentes do módulo 2.

Contudo as correntes C_{S12} e C_{E12} são, na verdade, a mesma corrente. Logo é necessário que:

$$\underline{Z}_E - \underline{Z}_S = 0 \quad (I-6)$$

Assim, o problema de otimização pode ser reformulado para considerar o novo conjunto de restrições de igualdade expresso pelo sistema de equações (I-6). Além disto, o novo conjunto de variáveis independentes formado pelas propriedades da corrente de entrada \underline{Z}_E torna-se um conjunto adicional de variáveis de decisão do problema de otimização.

Desta forma a convergência global do fluxograma só é atingida juntamente com a convergência do problema de otimização, pois só neste momento o conjunto de restrições que garante que as correntes C_{S12} e C_{E12} são iguais será satisfeito. No exemplo da Figura I-5, ao longo do processo de convergência, os módulos 1 e 2 serão executados independentemente, o que pode minimizar significativamente as deficiências apontadas para utilização de simuladores SM na otimização de processos com fluxogramas complexos. Neste sentido, o problema de otimização passa a ser equacionado em uma única camada, de forma similar à abordagem EA (sem considerar os processos iterativos internos aos módulos). No entanto, é preciso ressaltar que a obrigatoriedade do uso de derivadas determinadas numericamente (e portanto menos precisas) permanece.

Outra peculiaridade da abordagem modular-contínua é que, com a introdução de novas variáveis de decisão e restrições no problema de otimização, surge a necessidade de cálculo de maior número de derivadas, podendo implicar em um maior esforço computacional. Assim, o número de partições realizadas no fluxograma e a definição das variáveis que compõem o vetor de propriedades das correntes de conexão tornam-se aspectos importantes para o desempenho de soluções baseadas nesta abordagem. Na prática, apenas as correntes de reciclo devem ser rompidas, de forma a preservar as vantagens dos simuladores SM no que diz respeito à eficiência e confiabilidade dos módulos e facilidade de inicialização do problema.

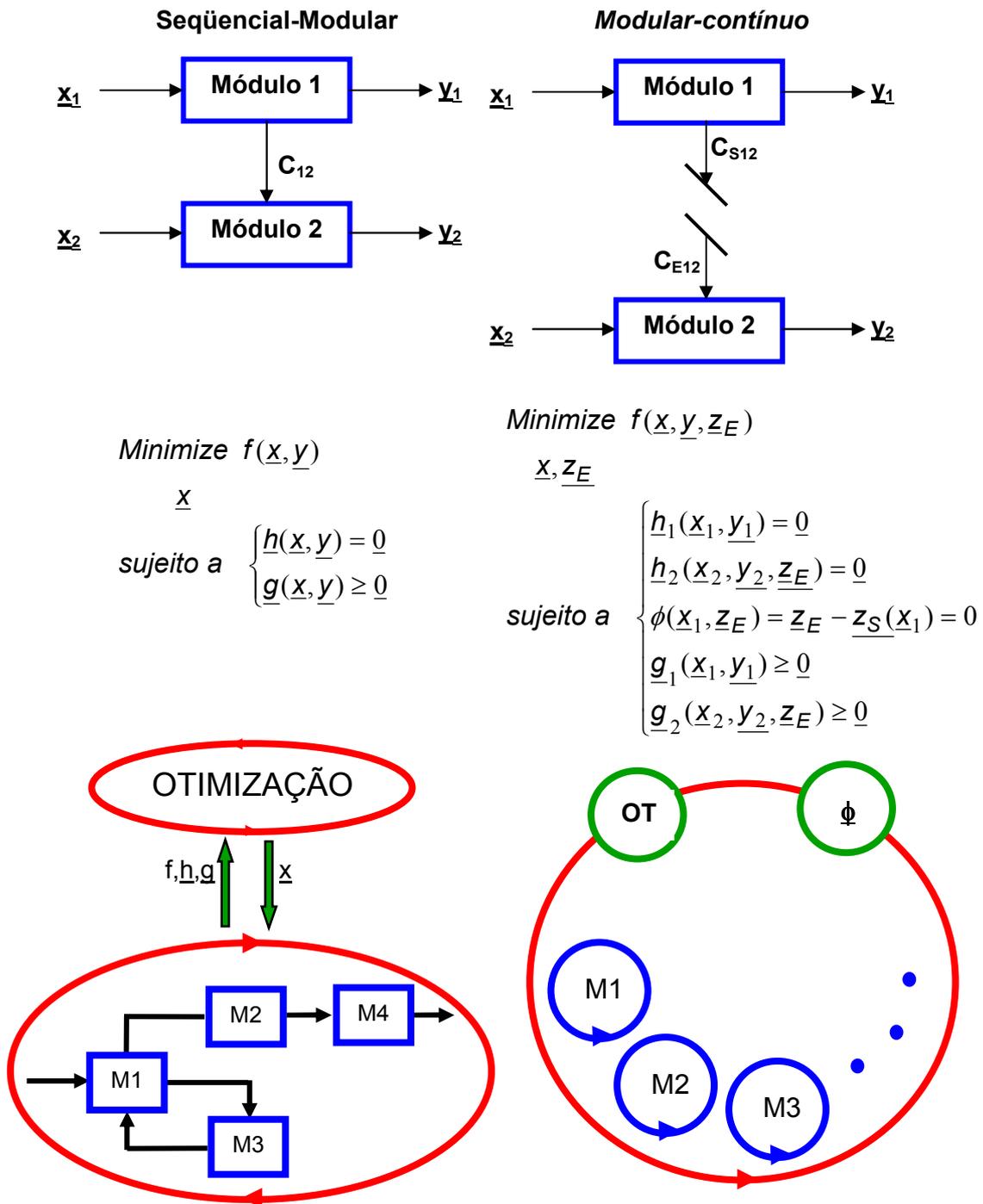


Figura I-5 - Um problema de otimização genérico baseado nas abordagens Seqüencial-modular e Modular-contínua.

I.4. MODELOS REDUZIDOS, METAMODELOS E MODELOS KRIGING

Para enfrentar problemas de simulação, projeto e otimização baseados em modelos complexos de forma viável, muitas soluções baseadas em modelos reduzidos e técnicas de aproximação foram propostas na literatura (PALMER e REALFF, 2002a).

Modelos reduzidos que são obtidos a partir de dados gerados com um modelo rigoroso são freqüentemente designados na literatura por **metamodelos** (MECKESHEIMER *et al* , 2002). Metamodelos são utilizados para aproximação de modelos rigorosos, substituindo-os total ou parcialmente quando os códigos computacionais oriundos destes demandam esforço computacional demasiadamente grande para que sua utilização direta seja viável (CLARKE *ET AL.*, 2003, MECKESHEIMER *ET AL.*, 2001). O uso de metamodelos pode ser também interessante quando o modelo rigoroso apresenta limitações relacionadas a aspectos numéricos, como problemas de convergência em procedimentos iterativos.

1.4.1. Modelos kriging

Os modelos *kriging* foram originalmente criados na área de engenharia de minas (SACKS *et al.*, 1989) na década de 50 e a partir de então vêm sendo utilizados em diversos ramos da engenharia (MARTIN e SIMPSON, 2005) como um dos mais populares metamodelos. De acordo com PALMER e REALFF, (2002a), esta classe de modelos tem mostrado grande flexibilidade para representar funções complexas e não-lineares, tipicamente demandando menor quantidade de dados que outros tipos de metamodelos como redes neurais (SIMPSON *et al.*, 2001) ou *splines* (FRIEDMAN, 1991).

Uma das aplicações mais comuns dos modelos *kriging* na engenharia é a atividade de projeto, onde problemas de otimização relacionados a diversos cenários podem ser resolvidos através de procedimentos seqüenciais e iterativos, devido à computação rápida e confiável proporcionada por estes metamodelos. Contudo, a despeito do uso dos modelos *kriging* em muitas áreas da engenharia, o trabalho de PALMER e REALFF (2002a e 2002b) é a única aplicação conhecida em processos químicos.

I.5. OBJETIVO DO TRABALHO

Nas seções anteriores deste capítulo, buscou-se mostrar a potencialidade das ferramentas de otimização em aplicações na indústria. Dentro dos vários níveis de otimização utilizados pelas grandes empresas está a otimização em tempo real (RTO), cuja utilização em nível mundial está em expansão, embora ainda com poucas aplicações no setor industrial brasileiro.

Diferentes formas de integração do modelo do processo aos algoritmos de otimização foram apresentadas, sendo a abordagem de Equações Abertas (EA) a mais utilizada por sua maior eficiência computacional. Contudo, a literatura aponta ainda a existência

de desafios no uso destas ferramentas, especialmente para o usuário não especializado. Em contraponto aos modelos baseados em EA estão os simuladores seqüenciais-modulares (SM), cuja utilização pelo engenheiro de processo é bastante simples, mas que apresenta deficiências para sua aplicação na otimização de processos complexos, tanto na abordagem seqüencial-modular como na abordagem modular-contínua, em consequencia de sua baixa eficiência computacional.

Este trabalho tem como objetivo o estudo de uma metodologia onde metamodelos sejam utilizados em substituição ou combinados a modelos de processo rigorosos em um procedimento de otimização de processos que seja aplicável a sistemas em tempo real (RTO). Duas classes de modelos reduzidos são utilizadas como metamodelos: modelos *kriging* e redes neuronais. Os modelos *kriging*, pouco utilizados na engenharia química, são utilizados em função do potencial demonstrado como metamodelos em diversas áreas da engenharia. As redes neuronais, por sua vez, são largamente utilizadas na modelagem de processos químicos. Buscando tirar partido da boa combinação de flexibilidade e rápida resolução dos metamodelos, procura-se mostrar que a otimização de processos pode ser realizada com mínima utilização do modelo rigoroso e, portanto, proporcionando confiabilidade e eficiência computacional nas situações em que o modelo matemático em questão apresenta dificuldades para aplicações em tempo real, como esforço computacional excessivo ou dificuldades numéricas na sua solução.

Para verificar a potencialidade de utilização de metamodelos, estuda-se um caso real de otimização em escala industrial baseado em uma unidade de destilação de petróleo, utilizando como modelo matemático o simulador seqüencial-modular PETROX. Mostra-se que significativa melhora de desempenho computacional e confiabilidade¹ são obtidas quando o modelo rigoroso é combinado aos metamodelos, viabilizando sua utilização na otimização em tempo real. Outros problemas de programação não-linear foram também utilizados para desenvolver e ilustrar a metodologia proposta.

Em síntese, as principais contribuições deste trabalho são:

- A proposição de uma metodologia para utilização de metamodelos na otimização em tempo real de processos químicos, baseada em mecanismos

¹ O termo confiabilidade é utilizado aqui para designar a propriedade de baixa predisposição do sistema de otimização para a ocorrência de problemas numéricos, como falhas na convergência em procedimentos iterativos.

- para adaptação dos metamodelos ao longo do procedimento de otimização;
- A aplicação da referida metodologia de RTO a um problema de porte industrial na indústria de processos químicos;
 - Avaliação e adaptação das metodologias propostas para obtenção de modelos *kriging* para um processo químico real de grande porte;
 - A comparação do desempenho de modelos *kriging* e das redes neuronais, freqüentemente utilizadas na engenharia de processos químicos, como metamodelos. Mostra-se que os modelos *kriging* apresentam desempenho comparável ao das redes neuronais, sendo portanto uma alternativa a ser considerada em outras aplicações na área.

I.6. ESTRUTURA DO TEXTO

Ao longo deste capítulo foram apresentadas informações gerais que visam proporcionar uma visão do contexto em que se inserem os sistemas de otimização em tempo real, além da sua importância para a indústria de processos químicos. Em seguida, foi discutido o uso de metamodelos e foram apresentados os objetivos específicos deste trabalho.

O capítulo 2 apresenta a revisão bibliográfica, que tem como temas principais metodologias para otimização de processos e metodologias e aplicações relacionadas a metamodelos. No capítulo 3 é feita apresentação detalhada dos modelos *kriging* e do ferramental para sua utilização. O capítulo 4 apresenta os casos para estudo a serem utilizados neste trabalho. A metodologia para obtenção de metamodelos proposta neste trabalho e os resultados obtidos com os casos para estudo são apresentados no capítulo 5. O capítulo 6 apresenta a metodologia utilizada para a aplicação de metamodelos na otimização de processos, e os resultados obtidos com os exemplos. Por fim, o capítulo 7 apresenta as conclusões deste trabalho e sugestões para a evolução do mesmo.

II. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

II.1. OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

O assunto otimização é extremamente vasto, com inúmeras linhas possíveis de investigação, como o estudo de novos algoritmos, novas aplicações, aspectos de modelagem matemática e metodologias complementares. Em face do escopo definido para este trabalho, são discutidos a seguir relatos de aplicações industriais de RTO e suas características, e estudos exploratórios recentes mais voltados a metodologias de aplicação de ferramentas de otimização em unidades de processo. Não são contemplados trabalhos relacionados ao desenvolvimento de algoritmos e problemas envolvendo variáveis inteiras (IP, MILP, MINLP). Uma visão bem ampla dos desenvolvimentos realizados na área de otimização no passado e ainda uma avaliação das suas perspectivas futuras foram conduzidas por Biegler e Grossmann em trabalhos recentes (BIEGLER e GROSSMANN, 2004, GROSSMANN e BIEGLER, 2004). Trabalhos que também podem contribuir para uma visão da história e estado-da-arte em otimização são o de WESTERBERG (2004), voltado para a atividade de projeto de processos e KAMESWARAM e BIEGLER (2006), onde estratégias alternativas para problemas de otimização dinâmica são discutidas.

II.1.1. Desenvolvimentos aplicados a processos industriais

Boa parte das aplicações industriais de RTO se baseia em modelos fenomenológicos e na abordagem EA, em que a Programação Seqüencial Quadrática (SQP) é ainda o principal algoritmo de otimização utilizado. Como alternativa à abordagem fenomenológica, existem aplicações onde um modelo linear estático do processo é atrelado a um algoritmo de programação linear (LP). Apesar das limitações inerentes ao modelo matemático linear, muitas aplicações deste tipo foram implementadas, principalmente com a função de definir o ponto ótimo a ser perseguido por dois ou mais sistemas de controle preditivo multivariável subordinados.

A Tabela II-I apresenta uma lista de referências de algumas aplicações industriais de RTO na área de petróleo e petroquímica, e algumas de suas características e resultados.

Tabela II-I - ALGUMAS APLICAÇÕES INDUSTRIAIS DE RTO E SUAS CARACTERÍSTICAS.²

Referencia	Processo	Empresa	Produto/ Empresa	Algoritmo	Op. Unitárias	Modelo	Dimensão ³	Período de Execução	Benefício reportado
PEDERSEN <i>et al.</i> (1995)	HCC	Refinaria Sarnia, SUNOCO Inc., Canadá	DMO/DMCC	SQP	HDT, HCC, UGH, 8 colunas	Fenomenológico	32 x 290	20-40 min	2-5% lucratividade nominal
HARDIN <i>et al.</i> (1995)	UDAV	Refinaria Lake Charles, CONOCO Inc., EUA	MultiOpt-Xprt,RT-Opt/Setpoint,AspenTech	SQP	2 fornos, 4 colunas	Fenomenológico	27 x N/I ⁴	90	USD 7MM/ano
GEORGIOU <i>et al.</i> (1997)	Etileno	Planta de Olefinas Beaumont, Mobil Chemicals, EUA	DMO/DMCC	SQP	Fornos de pirólise, colunas	Fenomenológico	48 x N/I	N/I	N/I
MUDT <i>et al.</i> (2001)	UDAV, Reforma catalítica e BTX e outros	Refinaria Sarnia, SUNOCO Inc., Canadá							
TERADO <i>et al.</i> (2002)	FCC	Refinaria Tokuyama, Idemitsu, Japão	ROMeO, Invensys	SQP	Reator, Regenerador, 7 colunas	Fenomenológico	N/I	30 min	N/I
RANGANATHAN <i>et al.</i> (2003)	UDAV	Refinaria ISLA, Curaçau	ROMeO, Invensys	SQP	6 colunas + reator	Fenomenológico + Divisor	N/I	N/I	USD 0.03-0.06/barril
JACKSON <i>et al.</i> (2003)	UDAV	Refinaria Corpus Christi, Citgo, EUA	PVO/RMPCT, Honeywell	SQP	1 coluna + reator	Fenomenológico + Linear	N/I	N/I	USD 620000,00/ano
LIPORACE <i>et al.</i> (2007)	UDAV	REVAP/PETROBRAS	aspenONE/Aspentech	SQP	4 colunas, fornos	Fenomenológico	N/I	N/I	N/I

² Atualizada a partir da tabela apresentada em SARAF *et al.* (2002).

³ Dimensão expressa em termos de número de variáveis de decisão X número de restrições.

⁴ N/I – Valores não informados pelos autores.

II.1.2. Desenvolvimentos de Procedimentos Fundamentais

RTO e Controle Preditivo Multivariável em uma única camada

A grande maioria das aplicações de RTO existentes parte da premissa de que o problema econômico resolvido neste nível deve ser repassado a um nível inferior (em geral um controlador preditivo multivariável) responsável pela implementação do ponto ótimo operacional. Um caminho alternativo foi proposto por GOUVÊA e ODLOAK (1998), onde o problema econômico de otimização e o problema dinâmico de controle são resolvidos em uma única camada. O trabalho utiliza como objeto de estudo uma unidade de FCC, e a abordagem tradicional (duas camadas) é comparada com a proposta com base em simulações dinâmicas. Em uma extensão deste trabalho, ZANIN *ET AL.* (2000) realizaram uma implementação industrial de um sistema de otimização e controle simultâneos em uma unidade de FCC da PETROBRAS (Brasil). Os autores reportam resultados preliminares positivos de desempenho, em função da capacidade do novo sistema de rejeitar perturbações significativas e simultaneamente conduzir o processo a novos pontos operacionais mesmo quando sujeito a regiões operacionais de busca bastante limitadas. QIN e BADGWELL (2003) reportam a existência de um sistema comercial (NOVA-NLC) baseado nesta proposta.

BENAMOR *et al.* (2004) implementaram dois problemas de otimização envolvendo modelos dinâmicos de processos de polimerização utilizando como plataforma o sistema comercial de otimização *Romeo® (Invensys)*. Este sistema, largamente utilizado em aplicações industriais, é tipicamente utilizado com modelos matemáticos estacionários. Para implementar os modelos dinâmicos, os autores utilizaram a linguagem de programação nativa do sistema *Romeo®*. Os problemas de otimização implementados combinam em uma única camada os problemas de otimização e controle de processos. Os autores visam a utilização desta abordagem no projeto de sistemas complexos de controle de processos, envolvendo controladores preditivos multivariáveis não-lineares. Em trabalho similar, porém visando efetivamente controle e otimização de processos em tempo real (DRTO), ENGELL (2007), propõe também uma metodologia que permita a combinação dos problemas de otimização e controle de processos em uma única camada, baseada na otimização de uma função econômica ao longo de um horizonte de tempo finito. A metodologia foi testada com um exemplo baseado em processo de separação por cromatografia. Entre as conclusões deste trabalho, o autor afirma que a implementação prática de um sistema de otimização desta natureza seria justificável em processos multivariáveis

complexos e não-lineares, onde sistemas de controle regulatório e/ou avançado tradicionais não seriam suficientes para se obter o desempenho desejado. O autor sugere ainda que em uma implementação prática a compensação de incertezas, tanto quanto possível, deveria ficar a cargo de controladores feedback. Apenas variáveis-chave dinâmicas deveriam ser tratadas pelo controlador/otimizador baseado em um modelo rigoroso da dinâmica e de relações estacionárias em menor grau de detalhe.

Determinação do ponto ótimo real

A capacidade de um sistema de RTO determinar o ponto ótimo real foi o objeto de estudo de FORBES e MARLIN (1996), cuja finalidade era propor uma metodologia de projeto de sistemas de RTO que levasse esta questão em consideração. Para isto os autores propõem uma métrica para quantificar a perda de desempenho do RTO, denominada *design cost*. A premissa deste trabalho é de que a perda de desempenho tem duas componentes: a diferença entre o ponto ótimo real e o computado pelo método de otimização, e a variância do ponto ótimo calculado em função de efeitos como ruídos em medições. Utilizando um exemplo baseado no modelo do reator de Williams-Otto, os autores mostram que a metodologia proposta pode ser utilizada para determinar que conjunto de parâmetros ajustáveis do modelo (entre duas alternativas) levaria ao sistema de RTO com melhor desempenho. Em uma extensão deste trabalho, ZHANG e FORBES (2000) propõem um aperfeiçoamento da métrica anterior denominada *extended design cost*. Com isto, os autores passam a considerar uma terceira componente para desvios, que dizem respeito ao comportamento do RTO quando o processo está no transiente. Posteriormente, um novo trabalho foi proposto por FRALEIGH ET AL. (2003) em que um procedimento para seleção de sensores para RTO é proposto. A consideração básica é de que a variância dos parâmetros do modelo do processo afeta diretamente os resultados obtidos na otimização, e esta está diretamente associada à qualidade dos dados de processo medidos. Assim, o procedimento proposto envolve a combinação de técnicas de planejamento experimental para seleção de medições, combinado com o conceito de *design cost* para seleção do conjunto de parâmetros mais adequados.

Determinação de valores marginais

Os preços de produtos e insumos incorporados à função objetivo de problemas de otimização são parâmetros fundamentais para RTO, pois definem a forma da função e norteiam a solução a ser obtida. HUI (2002) mostra que a determinação correta destes valores marginais não é trivial, e que eles podem variar de acordo com as restrições

de mercado e/ou processo que se imponham em diferentes situações. O autor define três classes de valores marginais: O Lucro Marginal, o Custo Marginal de Cargas e Custo Marginal de Produtos. Após análise crítica das estratégias mais comuns, uma nova metodologia é proposta baseada na construção de modelos lineares globais da planta em estudo (por exemplo, uma refinaria) que representam as equações de balanço de massa e/ou energia. Nestes modelos são incorporadas parcelas fictícias para cada insumo ou produto a ser considerado. A partir do modelo e de uma função objetivo baseada em valores de mercado de insumos e produtos, é formulado um problema de programação linear (LP) que pode ser resolvido para diferentes cenários, considerando eventuais restrições de recursos ou de demanda de produtos. A partir de exemplos, o autor mostra que a solução dos problemas LP para os diferentes cenários permite o cálculo dos valores marginais em cada situação, e como eles podem se alterar em função das restrições vigentes.

RTO e Ajuste de Parâmetros simultaneamente

As aplicações de RTO mais comuns envolvem procedimentos de ajuste do modelo matemático do processo (ver seção 1.3.1). Contudo, existem linhas de desenvolvimento que propõem que o ajuste de parâmetros do modelo e a otimização econômica sejam resolvidos simultaneamente. Um exemplo desta abordagem é o trabalho de CHENG e ZAFIRIOU (2000), que propõem um procedimento de otimização que dispensa o processo formal de estimação de parâmetros. A primeira etapa do procedimento é determinar um ponto de partida factível, que deve ser implementado ao processo. A partir da resposta do processo, os gradientes da função objetivo e das restrições são automaticamente atualizados com dados da planta. Com os gradientes atualizados define-se nova direção de busca, e dimensão do passo, e o procedimento continua até a convergência. É imposta uma limitação à variação máxima para cada variável de decisão, de forma que o ponto ótimo só será atingido após várias passagens pelo algoritmo de otimização. Os autores afirmam que esta característica, juntamente com a correção dos gradientes através de dados de processo, traz maior precisão ao procedimento de otimização, principalmente no que diz respeito a disparidades entre as predições do modelo e as respostas do processo real. Esta afirmação é comprovada através de exemplos baseados no modelo do CSTR de Williams-Otto. O desempenho do algoritmo proposto é testado comparando-se o ponto ótimo computado com o modelo original com três reações químicas com otimizações baseadas em dois modelos simplificados (respectivamente com duas e uma reação química) e com uma situação em que haveria ruído nos dados de

processo. Nas três situações, o ponto ótimo original é obtido de forma rápida e correta. Premissas importantes deste trabalho são a inexistência de erros grosseiros e erros de medição pequenos e aleatórios.

Otimização da planta x Otimização de unidades de processo

O ponto de ótimo desempenho de uma planta não corresponde necessariamente à situação em que cada unidade que a compõe atinge seu ponto ótimo operacional determinado independentemente. ZHANG e ZHU (2000) apresentam uma metodologia para determinação do ponto ótimo global de uma planta. Inicialmente, os autores mostram que a otimização neste nível é feita a partir de modelos simplificados (ver seção 1.2) baseados em modelos de rendimentos, já que a modelagem rigorosa levaria a imensas dificuldades práticas. Esta simplificação leva a resultados limitados, embora tenha a grande vantagem de levar em consideração a utilização integrada das unidades de processo. Por outro lado, as diferentes unidades podem ter seu ponto ótimo local determinado a partir de modelos rigorosos, capazes de determinar o ponto ótimo da unidade com grande precisão. Contudo, o ponto ótimo encontrado pode não corresponder àquele que leva ao máximo desempenho da planta. Outra dificuldade está no fato de que as unidades em geral possuem como cargas ou produtos correntes intermediárias cujos preços podem ser difíceis de definir (HUI, 2002). Para determinar o ponto ótimo global da planta, os autores propõem uma metodologia que se baseia na decomposição do problema em duas camadas. No início do processo iterativo é realizada a otimização da planta a partir do modelo simplificado, gerando como saídas adicionais os custos marginais das correntes do processo. Estes valores são repassados à segunda camada, composta pelos problemas de otimização baseados em modelos rigorosos. A otimização de cada unidade é computada, e no ponto ótimo operacional de cada uma são determinados novos coeficientes de rendimentos que são repassados à primeira camada. O processo se repete até que haja convergência dos custos marginais e coeficientes de rendimento. Desta forma, seria obtida uma solução ótima para a planta em perfeita sintonia com o ponto ótimo de cada unidade, explorando ao máximo a sinergia entre as unidades. Como exemplo para teste da metodologia, foi utilizada uma refinaria contendo unidades de FCC, destilação atmosférica e a vácuo, coqueamento retardado, hidrotreatamento e *blending*, entre outras. Os resultados obtidos no exemplo sugerem a possibilidade de ganhos significativos. Em 2006, ZHANG e ZHU propuseram uma evolução desta metodologia, onde o algoritmo de otimização que integra as duas camadas foi modificado, novos critérios de convergência são propostos e outros aspectos práticos são considerados,

como a existência de possíveis correntes de reciclo (e como tratá-las dentro da estratégia de decomposição). Novamente utiliza-se uma refinaria de petróleo como exemplo ilustrativo.

Herança de modelos em códigos-fonte

Muitos modelos de processo de interesse foram originalmente implementados matematicamente através de linguagens de programação, como o PASCAL, C ou FORTRAN. A utilização destes modelos em sistemas de otimização baseados em equações abertas pode ser difícil, sujeito a erros e ainda muito demorado, se for necessário reescrever todo o modelo em um novo ambiente. TOLSMA e BARTON (2000) apresentam um ambiente aberto para modelagem denominado DAEPACK. Este ambiente proporciona ferramentas que permitem a herança e incorporação automática de modelos expressos em códigos-fonte a um sistema de equações abertas, preservando todas as suas vantagens de precisão e desempenho. Para a incorporação dos códigos-fonte, o DAEPACK dispõe de funcionalidades para análise simbólica e geração de código, detecção do padrão de esparsidade e tratamento de descontinuidades. Derivadas podem ser computadas utilizando ferramentas para diferenciação automática. Entre as ferramentas numéricas disponíveis, estão procedimentos para reorganização de grandes sistemas de equações algébricas na forma bloco-triangular, com a possibilidade de resolver cada bloco com diferentes algoritmos. Funcionalidades adicionais estão disponíveis, como métodos para geração de inicialização consistente, e a possibilidade de incorporação de novos modelos através do padrão CAPE-OPEN.

Otimização global aplicada à metodologia MC

De acordo com BOGLE E BYRNE (2000), os trabalhos científicos voltados à área de otimização global têm se baseado em modelos cujas equações estão explícitas. Neste trabalho, é desenvolvido estudo aplicando um método determinístico de otimização global para otimização de um fluxograma, utilizando a abordagem modular-contínua. O algoritmo de otimização utilizado é o de análise intervalar. Para sua utilização associada à arquitetura modular, os autores propõem operadores ou *tipos aritméticos estendidos* a serem utilizados com os módulos, de forma a viabilizar as operações necessárias e a obtenção das informações internas aos módulos requeridas pelo algoritmo. Exemplos da literatura são utilizados para demonstrar a viabilidade da proposta.

Evolução em tempo real (RTE)

Um processo evolutivo de otimização sem a necessidade de aguardar o estado estacionário foi proposto por SEQUEIRA *et al.* (2002). Em seu trabalho, os autores propõem um procedimento diferente do adotado em aplicações tradicionais de RTO baseado em modelos estacionários, onde só se inicia um processo de otimização quando o estado estacionário é detectado. De acordo com esta metodologia denominada RTE, o problema de otimização pode ser continuamente resolvido e seus resultados implementados, uma vez incorporados valores atualizados das variáveis que perturbam o processo. Componentes importantes do procedimento são o algoritmo de evolução, a vizinhança (região) de exploração, o período de tempo entre dois procedimentos de RTE e o modelo utilizado. Para validação da metodologia, são utilizados dois exemplos: um baseado no reator de William-Otto e outro em uma unidade piloto. Modelos para os dois processos foram implementados em um simulador dinâmico para representar a planta real. Modelos estacionários são implementados para comparação das abordagens RTO (tradicional) e RTE. São introduzidas perturbações através do simulador dinâmico, e os resultados são comparados ao longo do tempo. Os autores apontam que a abordagem RTE requer mais tempo para chegar ao ponto ótimo, porém tem a vantagem de implementar correções imediatamente após a ocorrência de perturbações. Além disso, os algoritmos utilizados no RTE seriam mais simples e mais rápidos que os utilizados no RTO, o que facilitaria o uso intensivo de modelos rigorosos do processo com um esforço computacional aceitável. Por fim, afirma-se que a abordagem RTE é menos afetada que o RTO quando o desempenho do controle preditivo multivariável não é plenamente satisfatório. Esta metodologia foi incrementada em trabalho posterior (SEQUEIRA *et al.*, 2004) em que os autores propõem uma metodologia para determinação dos parâmetros essenciais à abordagem RTE: a dimensão da região de exploração e o período de execução. Estes parâmetros são computados levando em consideração a variabilidade e a frequência das variáveis que perturbam o desempenho ótimo do processo. Por fim, os autores sugerem que estes parâmetros possam ser reajustados a partir de procedimentos periódicos de caracterização das perturbações.

Otimização aplicada a unidades de refino de petróleo

A otimização de uma unidade de destilação atmosférica visando sua utilização para RTO foi feita por SARAF *et al.* (2002). Utilizando dados de processo reais, um modelo aberto representando uma torre atmosférica e uma torre estabilizadora e o pacote de

otimização NPSOL (SQP), foi implementado um problema de otimização que envolve as etapas de estimação de parâmetros (eficiências de estágios), reconciliação e ajuste da curva de Ponto de Ebulição Verdadeiro (PEV) da carga e a otimização econômica propriamente dita.

Outra aplicação foi realizada por GUPTA *et al.*(2002), voltado para uma unidade de FCC. Um modelo empírico foi ajustado a partir de dados de processo disponíveis na literatura, e quatro problemas de otimização multi-objetivo foram propostos envolvendo sempre duas funções objetivo concorrentes. A solução do problema de otimização foi obtida através de um algoritmo genético que incorpora o conceito de elitismo. Em uma extensão deste trabalho, GUPTA e KASAT (2003) introduziram no algoritmo genético de otimização do trabalho anterior um novo operador baseado na analogia com o fenômeno genético *jumping genes*. Os autores reportam uma redução de quase 80% do tempo de CPU consumido nos problemas de otimização do trabalho anterior com a modificação.

Cálculo de derivadas para otimização

SHAO *et al.* (2004) propuseram uma metodologia para o cálculo de derivadas que conjuga diferentes métodos de diferenciação. A argumentação básica é que o método mais eficiente para diferenciação depende da estrutura do modelo, que em seu caso mais geral pode envolver equações abertas conjugadas a módulos caixa-preta e ainda rotinas em código FORTRAN, C, etc. Assim, o modelo é dividido em módulos para os quais se define a abordagem a ser utilizada para diferenciação, como diferenciação simbólica, diferenciação automática (e sua variante SAD) e diferenças-finitas. Em seguida, os resultados obtidos são reunidos para compor a matriz jacobiana. Com três exemplos distintos de problemas de otimização, os autores mostram que a combinação dos diferentes métodos de diferenciação traz significativa redução no esforço computacional, em função da exploração mais eficiente da estrutura de cada componente do modelo.

Otimização baseada na abordagem modular-contínua (MC)

De acordo com BIEGLER e HUGHES (1981), a primeira aplicação deste conceito para simuladores de processos químicos foi feita por BERNA *et al.* (1980). BIEGLER e HUGUES (1982) apresentaram formalmente em seu trabalho um procedimento para a metodologia MC, ilustrado com uma aplicação baseada em um sistema com um flash com reciclo. Diversas observações e recomendações para implementação do método são fornecidas. A partir deste período, inúmeros estudos foram conduzidos com o

objetivo de aperfeiçoar a metodologia para aplicação da abordagem modular contínua (BIEGLER e HUGHES,1985, BIEGLER,1985, BIEGLER e CUTHRELL,1985, KISALA *et al.*, 1987, BIEGLER e LANG, 1987). Em 1994, BIEGLER *et al.* estudaram a otimização e análise da sensibilidade da solução de problemas de otimização aplicados a fluxogramas (modelos baseados em arquitetura modular) utilizando derivadas analíticas. A avaliação de desempenho foi feita para três algoritmos de otimização: Gradiente reduzido, SQP e rSQP (*reduced-Hessian SQP*). Os autores apontam grande redução do esforço computacional ao se utilizar derivadas analíticas em detrimento das derivadas numéricas. Outra conclusão interessante é que esta redução foi muito mais significativa para os algoritmos SQP. Entre estes, pouca diferença foi observada. PAGES *et al.* (1996) utilizaram a abordagem MC na implementação de um problema de estimação de parâmetros para processos descritos através de um simulador seqüencial-modular. Por fim, ALKAYA *et al.* (2000) propuseram uma metodologia genérica para otimização baseada em modelos sob a forma de fluxogramas. Uma interface foi construída para receber informações relacionadas à estrutura do fluxograma e formular automaticamente a implementação do problema de otimização correspondente. A otimização é realizada utilizando uma versão do algoritmo rSQP com características especiais que proporcionam maior eficiência ao processo de convergência.

A Tabela II-II apresenta um resumo dos exemplos utilizados em referências bibliográficas para estudo da metodologia MC. Comparando os exemplos em questão com as aplicações industriais apresentadas na Tabela II-I (todas baseadas em Equações Abertas), nota-se que os exemplos disponíveis para estudo da abordagem MC são de complexidade muito inferior aos casos industriais reportados. Não apenas o número de variáveis de decisão envolvidas é significativamente menor, mas os modelos matemáticos utilizados são de menor complexidade. O número de componentes das correntes, que na abordagem MC tem papel fundamental (já que afeta o número de variáveis e restrições do problema de otimização), também é relativamente baixo em comparação com aplicações típicas da indústria do petróleo, onde em geral há dezenas ou centenas de componentes. Não foram encontradas referências bibliográficas de aplicações industriais de RTO baseadas na abordagem MC, embora seja amplamente conhecido que o sistema para RTO *SPOT (Shell Global Solutions)*, baseado no simulador seqüencial-modular *PRO/II (Invensys)* seja utilizado em diversas plantas industriais de petróleo e petroquímica. Estes fatos sugerem uma tendência para a utilização da abordagem EA em detrimento da abordagem MC em aplicações de RTO, possivelmente em função dos motivos já expostos no capítulo I.

Tabela II-II - EXEMPLOS UTILIZADOS EM TRABALHOS UTILIZANDO A METODOLOGIA MC⁵.

REFERÊNCIA	Processo ou Problema	Módulos principais	NMOD	NCOMP	Variáveis de conexão ⁶	NCONEX	Variáveis reais			Variáveis totais		
							NVD	NRI	NRD	NVD	NRI	NRD
BERNA <i>et al.</i> , 1980	Alquilação	Fracionadora, Reator	2	-	-		10	3	28			
BIEGLER E HUGUES, 1982	Flash com reciclo (Biegler e Hughes, 1982)	Misturador, Flash, Divisor, Bomba	4	6	V _i , H	1	2	0	2	9	7	9
BIEGLER, 1985	Flash com reciclo	Flash	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Cloração de propeno	Reator, 3 colunas	6	6	V _i , H	1	9	0	3	16	7	10
BIEGLER E HUGUES, 1985	Flash com reciclo	Flash	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Cloração de propeno	Reator, 3 colunas	6	6	V _i , H	1	9	0	3	16	7	10
KISALA <i>et al.</i> , 1987	Reator plug flow com reciclo	Misturador, Flash, Divisor, Bomba, Reator	5	3	-	1	1	-	-	-	-	-
	Síntese de Amônia A (Parker e Hughes, 1981)	-	13	5	-	1	11	2	4	-	-	-
BIEGLER E LANG, 1987	Cavett (simulação)	Flashes, Misturadores	6	-	-	2	0	0	0	18	18	0
	Síntese de Amônia A	-	-	-	V _i , T, P	1	5	0	4	12	7	5
	Monoclorobenzeno	2 colunas, permutador	5	3	V _i , T, P	1	6	1	0	11	6	0
	Síntese de Amônia B [Biegler e Lang (1987)]	reator, flashes	8	5	V _i , T, P	1	8	2	3	15	9	3
BIEGLER <i>et al.</i> , 1994	Síntese de Amônia B	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
PAGES <i>et al.</i> (1996)	Flash com reciclo	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
	Síntese de Amônia B	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-

⁵ NMOD – No. Módulos; NCOMP – No. Componentes; NCONEX – No. correntes rompidas; NVD – No. variáveis de decisão; NRI / D – No. Restrições de Igualdade / Desigualdade

⁶ V_i – Vazões molares por componente; H – Entalpia específica; T – Temperatura; P – Pressão

II.2. MODELOS REDUZIDOS E METAMODELOS

Metamodelos e modelos *kriging* são aqui abordados de forma a proporcionar uma visão geral da sua história, sua utilização em outras áreas do conhecimento (especialmente em outros campos da engenharia) e das metodologias e linhas de pesquisa associadas. Para melhor organização do texto, uma apresentação detalhada dos modelos *kriging* é feita adiante em capítulo específico.

II.2.1. Modelos reduzidos e suas aplicações na indústria de processos químicos

Modelos que são obtidos por aproximações ou simplificações de processos e fenômenos cuja descrição matemática rigorosa é difícil ou inviável vêm sendo largamente utilizados ao longo do tempo. Tratando-se especificamente da modelagem de processos químicos, a vasta utilização de modelos reduzidos não é exceção, como mostram os trabalhos de PALMER E REALFF (2002a) e BIEGLER *et al.* (1985). A utilização de modelos reduzidos está sempre associada à necessidade de desenvolver aplicações onde esforço computacional, tempo e confiabilidade são aspectos essenciais e conflitantes, como é comum na atividade de controle e otimização de processos.

As redes neurais⁷ são freqüentemente citadas como “aproximadores universais”, tendo sido demonstrada (KAHRS E MARQUARDT, 2007a e FERREIRA, 2003 em referência ao trabalho de CYBENKO, 1988) sua grande capacidade para mapeamento de funções e representação de comportamentos complexos. Possivelmente por esta razão, as redes neurais estão entre os modelos reduzidos mais utilizados em processos químicos. Mesmo com a atual disponibilidade de eficientes simuladores baseados em modelos rigorosos aliados a computadores potentes, observa-se ainda um expressivo número de aplicações em que elas são utilizadas (KAHRS E MARQUARDT, 2007a, SOTELO, 2006, FERREIRA, 2003), das quais inúmeras são voltadas para a otimização de processos (KAHRS E MARQUARDT, 2007b, ALVES E NASCIMENTO, 2004, NASCIMENTO *et al.*, 2000, NASCIMENTO E GIUDICI, 1998).

⁷ Muitos textos científicos em língua portuguesa utilizam o termo rede *neural*, possivelmente por associação ao termo em inglês *neural network*. Ao longo deste trabalho será dada preferência ao termo redes *neurais*, pois até onde foi possível determinar o termo *neural* em língua portuguesa não se refere a neurônios, objetos da analogia que deu nome a esta classe de modelos.

II.2.2. Metamodelos e modelos kriging

PALMER E REALFF (2002a) definem metamodelo como “uma função matemática relativamente simples baseada em dados obtidos por simulação. O propósito do metamodelo é aproximar as relações entre dados de entrada e saída desta simulação”. Embora o termo *metamodelo* seja incomum na engenharia de processos químicos, a prática de gerar modelos reduzidos a partir de modelos rigorosos não o é. Metamodelos são utilizados para aproximação de modelos rigorosos, substituindo-os total ou parcialmente quando os códigos computacionais oriundos destes demandam esforço computacional demasiadamente grande para que sua utilização direta seja viável (CLARKE *et al.*, 2003, MECKESHEIMER *et al.*, 2001). O uso de metamodelos pode ser também interessante quando o modelo rigoroso apresenta limitações relacionadas a confiabilidade, como problemas de convergência em procedimentos iterativos. Situações como as descritas são freqüentes em diversas áreas do conhecimento, e comuns a diversas áreas da engenharia. Isto explica o esforço realizado para o estudo e aplicação de metamodelos em inúmeras áreas da engenharia, como elétrica, mecânica, aeroespacial e de minas, freqüentemente em associação com pesquisas fundamentais em estatística.

Diversas famílias de modelos já foram propostas para utilização como metamodelos (JIN *et al.*,2000, MECKESHEIMER *et al.*,2001, VAN BEERS E KLEIJNEN, 2004, CHEN *et al.*,2006), podendo-se citar entre elas diferentes classes de polinômios, splines, redes neurais, funções de base radial e modelos *kriging*.

A metodologia para obtenção de metamodelos é freqüentemente designada pela sigla DACE (*Design and Analysis of Computer Experiments*), expressão provavelmente cunhada por SACKS *et al.* (1989). De acordo com SIMPSON *et al.* (2001) esta metodologia envolve (i) a escolha de uma estratégia de planejamento experimental para a geração de dados; (ii) a escolha de um modelo para representar os dados e (iii) ajuste do modelo aos dados. Há contudo outros aspectos importantes também explorados na literatura, como a validação dos metamodelos e a análise de sensibilidade.

Planejamento experimental

A obtenção de dados para geração do metamodelo através de sucessivas execuções do modelo rigoroso para diferentes conjuntos de variáveis independentes é freqüentemente denominada **experimento computacional** (SACKS *et al.*, 1989). De forma análoga aos experimentos físicos, técnicas de planejamento de experimentos

podem ser utilizadas para a obtenção de modelos confiáveis com o menor número possível de simulações com o modelo rigoroso, minimizando o esforço computacional. Contudo, a metodologia ideal de amostragem para experimentos computacionais pode diferir das utilizadas em experimentos físicos, sobretudo pelo fato de que não há necessidade da realização de réplicas (partindo-se da premissa de que o modelo matemático em questão produzirá sempre os mesmos resultados quando alimentado com as mesmas entradas).

SANTNER *et al.* (2003) apresentam diversas metodologias de planejamento experimental voltadas especificamente para experimentos computacionais. Em algumas delas, parte-se da premissa de que características importantes do modelo rigoroso a serem incorporadas ao metamodelo podem estar em qualquer ponto do espaço experimental com igual probabilidade. Estratégias de planejamento experimental baseadas nesta premissa buscam de alguma forma preencher o espaço de busca, sendo freqüentemente designados na literatura pela expressão *space filling*. Outras estratégias baseiam-se em um critério específico para orientar a região do espaço a ser explorada. Algumas delas baseiam-se em critérios estatísticos, como as estratégias de Máxima Entropia e diversas variações baseadas no Erro Médio Quadrático de Predição. Os autores afirmam que, em geral, planejamentos experimentais baseados nestes métodos tendem a ser robustos, e por isso exigem grande esforço computacional. Sugerem ainda que seu uso deve ser feito através de planos seqüenciais, combinado a técnicas do tipo *space filling*. Planos seqüenciais foram também tratados por JIN *et al.* (2004), em trabalho onde duas novas estratégias de planejamento experimental seqüencial foram propostas e comparadas a outras estratégias seqüenciais existentes e a um planejamento único. Para comparar o desempenho das estratégias propostas com as existentes, metamodelos baseados em modelos *kriging* e funções de base radial foram gerados para representar seis funções com diferentes características. Os autores concluíram não ser possível garantir, a partir dos resultados deste trabalho, que a utilização de um plano seqüencial pudesse melhorar a qualidade de metamodelos obtidos a partir de um planejamento único.

Várias estratégias de planejamento experimental foram propostas objetivando aplicações de otimização (SANTNER *et al.*, 2003). Estas estratégias são inerentemente seqüenciais, com a seleção de novos pontos à medida que o procedimento de otimização avança em busca da solução. Algumas das estratégias propostas aplicam-se a problemas sem restrições, e a grande maioria das demais é especialmente voltada para problemas de otimização global, o que implica em significativo esforço computacional. A única exceção é, possivelmente, o trabalho de

BERNARDO *et al.* (1992), a ser discutido adiante.

Comparação entre classes de metamodelos

JIN *et al.* (2000) efetuaram um estudo comparativo entre modelos polinomiais, splines, funções de base radial e modelos *kriging*, para avaliação de seu desempenho em aplicações de otimização. Os critérios de comparação utilizados foram precisão, robustez, eficiência computacional, transparência e simplicidade conceitual. Foram utilizados 14 problemas de otimização para a avaliação de desempenho. Destes, 13 são exemplos matemáticos e o último um problema de engenharia voltado para o projeto de veículos. Os exemplos foram selecionados de forma a cobrir diferentes características, como o grau de não-linearidade, o número de variáveis independentes e desempenho com dados ruidosos. Além disso, foram utilizados três diferentes grupos de dados para treinamento representando conjuntos de pequena, intermediária e grande quantidade de dados. Após extenso trabalho de comparação os autores concluíram que o metamodelo de função de base radial apresentou os melhores resultados na maioria das situações.

Em seu trabalho de avaliação de novas estratégias de planejamento experimental seqüencial, JIN *et al.* (2004) realizaram nova comparação entre modelos *kriging* e funções de base radial para seis diferentes tipos de funções com diferentes características, como o número de variáveis independentes e grau de não-linearidade. A partir dos dados obtidos com as diferentes estratégias de planejamento experimental, modelos *kriging* e funções de base radial foram obtidos. Com estes metamodelos, foi computada a predição dos valores das funções para um conjunto independente de dados. Conhecendo-se os valores das funções originais para o mesmo conjunto de dados, foram construídos gráficos de dispersão do erro de predição dos metamodelos, expresso na forma da raiz quadrada do erro médio quadrático. A partir da avaliação da dispersão do erro de predição para as diferentes situações, os autores concluíram que para três dos exemplos, nos quais a função comportava-se de forma “suave”, os modelos *kriging* superavam largamente as funções de base radial. Para as funções-exemplo que exibiam perfil muito irregular, o desempenho dos modelos *kriging* tornava-se muito sensível à localização dos pontos selecionados para treinamento.

Outro extenso estudo comparativo foi conduzido por CHEN *et al.* (2006). Neste trabalho são comparados modelos polinomiais, splines, funções de base radial, modelos *kriging*, árvores de regressão, redes neuronais e polinômios de mínima interpolação. Metamodelos foram gerados com dados de treinamento baseados em

cinco diferentes critérios de planejamento experimental e testados para três exemplos. A avaliação dos resultados foi feita através do erro de predição, e complementada por informações qualitativas sobre o processo para obtenção dos metamodelos e situações a que cada metamodelo se aplicou melhor. Os autores concluíram que nenhum dos diferentes tipos de metamodelos mostrou-se significativamente melhor em todas as situações, embora afirmem que os modelos *kriging* e as funções de base radial apresentaram em geral os resultados mais consistentes.

Análise de sensibilidade

Ferramentas de análise de sensibilidade buscam quantificar a influência que uma determinada variável independente pode ter em uma dada variável dependente do modelo matemático, ou ainda a existência de correlação entre variáveis independentes. Algumas das técnicas comumente utilizadas são descritas a seguir, a partir do texto de SANTNER *et al.* (2003).

Gráficos de dispersão - Podem demonstrar a existência e a magnitude de uma relação de causa e efeito com facilidade, podendo ser muito úteis em processos de avaliação interativos. Como a avaliação é visual, a relação entre causa e efeito poderá, em alguns casos, ser detectada mesmo que esta seja complexa do ponto de vista matemático. No entanto, estes gráficos podem não permitir a fácil detecção da interação entre duas influências.

Coefficientes de correlação - Coeficientes de correlação entre variáveis de entrada e saída podem ser uma alternativa interessante para a análise de sensibilidade. Contudo, esta avaliação só será útil para detectar associações aproximadamente lineares.

Coefficientes de regressão linear – A avaliação dos coeficientes de um modelo de regressão linear relacionando variáveis independentes a uma variável dependente pode ser utilizada para análise de sensibilidade quando todas as variáveis independentes estiverem definidas em uma escala comum. Havendo disponibilidade de dados esta avaliação pode ser feita facilmente, e permite ainda que se possa verificar a influência de termos quadráticos ou de interação entre variáveis. Entre as ferramentas que utilizam esta abordagem, pode-se mencionar o método para discriminação de modelos *Forward Stepwise Regression*.

Índices de sensibilidade – Estes índices são baseados na decomposição da variância de uma dada variável dependente em função das contribuições das variáveis independentes a ela associadas (SANTNER *et al.*, 2003, SALTELLI, 2002). Estes

índices são obtidos através de integrais da função que representa a variável dependente ao longo do domínio normalizado das variáveis independentes. Da mesma forma, podem ainda ser computados índices similares de sensibilidade em relação a termos de segunda ordem. A partir destes índices podem ainda ser construídos os chamados *gráficos de efeitos principais*, e *gráficos de interação*, utilizados em procedimentos interativos. A necessidade do cálculo de integrais pode trazer certa dificuldade para a ampla utilização destes índices.

Estimação de parâmetros

Os procedimentos de estimação de parâmetros podem ser bastante diferentes e específicos para as diferentes famílias de metamodelos, como é o caso dos procedimentos para o treinamento de redes neuronais. A metodologia para estimação de parâmetros dos modelos *kriging* será tratada no capítulo III.

Avaliação e Validação de Metamodelos

A forma mais eficaz de se validar metamodelos é, possivelmente, utilizar um conjunto independente de dados (diferente daquele utilizado para a estimação de parâmetros) para computar suas predições e compará-las com as predições obtidas com o modelo rigoroso. Contudo, a obtenção destes dados implica em novas simulações com o modelo rigoroso, o que a princípio se pretende evitar ou minimizar. Os trabalhos a seguir procuraram alternativas para fazê-lo.

MECKESHEIMER *et al.* (2002) estudaram o uso do método da validação cruzada para validação e comparação de metamodelos, em função da sua característica intrínseca de não depender de um conjunto de dados independentes para avaliação do desempenho do metamodelo obtido. O método da validação cruzada consiste em:

- (i) Obter um conjunto de N pontos por planejamento experimental para o qual são computados os valores das variáveis dependentes com o modelo rigoroso;
- (ii) Definir o número de pontos k a ser excluído para a validação cruzada;
- (iii) Selecionar um subconjunto de k pontos a partir do conjunto inicial de N pontos a serem utilizados na estimação de parâmetros;
- (iv) Estimar os parâmetros dos metamodelos com os $N-k$ pontos restantes;
- (v) Computar as predições com os metamodelos com os k pontos anteriormente excluídos, e a partir delas o erro de predição.
- (vi) Se ainda houver subconjuntos possíveis a serem excluídos, retornar a (iii). Se

não, computar o erro médio a partir dos erros de predição para cada subconjunto excluído.

Testes foram conduzidos a partir de dois exemplos e três tipos de metamodelos: *kriging*, funções de base radial (RBF) e polinômios de baixa ordem. Além disto, diferentes estratégias de planejamento experimental foram utilizadas, e com cada uma foram gerados três conjuntos de dados de tamanho diferente. O valor médio dos erros de predição e a sua distribuição foram comparadas para avaliar os diversos metamodelos obtidos. As principais conclusões deste trabalho foram:

- A eficiência numérica do teste de validação cruzada depende do metamodelo, devido aos procedimentos específicos de estimação de parâmetros;
- Os metamodelos *kriging* e RBF apresentaram melhor desempenho que os polinômios;
- $K=1$ foi o melhor valor encontrado para RBF e os polinômios. Para os modelos *kriging*, os autores sugerem $k=0.1N$ or $k=\sqrt{N}$, onde N é o tamanho da amostra;
- O método da validação cruzada é um indicador razoável da fidelidade do metamodelo.

MARTIN AND SIMPSON (2005) afirmam que uma utilização mais ampla dos modelos *kriging* é limitada pelos seguintes fatos:

- Carência de algoritmos eficientes para estimação de parâmetros;
- Métodos mais efetivos para avaliação do desempenho dos metamodelos;
- Ausência de metodologias para seleção da estrutura ideal dos modelos *kriging* para diferentes aplicações

Neste trabalho, duas abordagens para avaliação da qualidade de metamodelos *kriging* são comparadas: O método da validação cruzada e o Critério de Informação de Akaike (este último combinando informações sobre a função objetivo – oriunda do método da máxima verossimilhança e o número de parâmetros do metamodelo). Os resultados obtidos com as duas abordagens foram comparados entre si e contra a avaliação baseada em dados independentes. Os testes foram conduzidos por meio de seis exemplos envolvendo funções de uma a cinco dimensões. As principais conclusões deste estudo referentes à validação de metamodelos são:

- O Critério de Akaike corrigido é útil para a comparação de dois modelos, mas não fornece informações conclusivas sobre o desempenho de um metamodelo específico;

- Parece não haver um método preciso para avaliar o erro de predição baseado no método de validação cruzada a partir dos dados utilizados para a estimação de parâmetros do metamodelo;
- Os autores sugerem efetivamente o uso de dados independentes para validação dos metamodelos

Otimização baseada em metamodelos

Entre os usos mais comuns dos metamodelos está a atividade de projeto ótimo, com aplicações em diversas áreas da engenharia. No trabalho de BERNARDO *et al.* (1992), os autores propõem a seguinte abordagem para o projeto ótimo de circuitos elétricos:

- (i) Propor um modelo reduzido para cada variável associada a desempenho, de acordo com os critérios de projeto;
- (ii) Realizar um planejamento experimental (computacional) e utilizar o modelo matemático rigoroso para gerar os dados;
- (iii) Ajustar os modelos reduzidos (metamodelos) com os dados obtidos;
- (iv) Verificar a precisão dos metamodelos e gerar gráficos de efeitos principais;
- (v) Se os modelos não forem suficientemente precisos, escolha uma sub-região para o próximo experimento e retorne a (i)
- (vi) Quando os modelos forem suficientemente precisos, determine o ponto ótimo da função objetivo, utilizando o metamodelo ajustado.

Esta abordagem foi utilizada no projeto de dois circuitos elétricos. Em ambos os casos, o metamodelo utilizado foi um modelo *kriging* com modelo de regressão inicialmente de ordem zero e modelo de correlação do tipo Gauss (ver Tabela III-I). O primeiro exemplo utilizado constituiu-se em um problema de otimização envolvendo seis variáveis de decisão, enquanto o segundo envolvia quatorze variáveis. Gráficos de efeitos principais foram utilizados ao longo do procedimento como ferramentas de análise de sensibilidade. Através deles, não apenas as sub-regiões foram definidas, mas também variáveis cuja influência foi considerada desprezível foram eliminadas do problema ao longo do procedimento iterativo. A verificação da precisão dos metamodelos foi feita através de novos dados obtidos com o modelo rigoroso. No exemplo de maior porte, após a segunda iteração, o modelo de regressão de ordem zero foi substituído por um modelo de 1ª ordem para aumentar a sua precisão.

BOOKER *et al.* (1998) utilizaram modelos *kriging* como metamodelos no projeto ótimo

do rotor de um helicóptero. A metodologia proposta para a solução deste problema de otimização não-convexa, baseava-se em um algoritmo de busca direta também proposto pelos autores a partir de um algoritmo existente. Este algoritmo, denominado *Surrogate Management Framework* (SMF) (BOOKER *et al.* 1999), baseia-se no uso de metamodelos para determinação dos pontos candidatos a ótimo e utiliza simulações com o modelo rigoroso para avaliar e eventualmente aumentar a precisão local do metamodelo. Por ser um algoritmo que mapeia o espaço de busca como uma rede, o SMF mostra-se bastante robusto em termos de convergência.

PALMER e REALFF (2002a, 2002b) executaram o projeto ótimo de fluxogramas de processo por meio de metamodelos. Modelos *kriging* e polinômios foram utilizados neste trabalho, que segue procedimento iterativo similar ao de BERNARDO *et al.* (1992). O exemplo de maior porte utilizado no trabalho foi um problema de síntese de um processo de amônia da literatura, cujo modelo rigoroso foi implementado em um simulador seqüencial-modular comercial. Gráficos de efeitos principais foram utilizados para análise de sensibilidade e exclusão de variáveis independentes ao longo do procedimento de projeto. A função objetivo foi computada através de modelos *kriging* de duas formas: (i) um metamodelo da função objetivo foi obtido diretamente através das variáveis independentes e (ii) As variáveis de processo integrantes da função teórica da função objetivo foram aproximadas por modelos *kriging*. Os resultados obtidos com o modelo *kriging* em que a função objetivo foi aproximada de forma indireta mostraram os melhores resultados, superando os metamodelos baseados em polinômios. Os autores afirmam, baseado em extensa revisão bibliográfica, que este trabalho seria a primeira utilização de modelos reduzidos como metamodelos na simulação de fluxogramas de processo de engenharia química.

GOMES ET AL. (2005) implementaram um problema de otimização de um processo de alquilação da literatura, utilizando modelos *kriging*. Neste trabalho foi implementado algoritmo para adaptação dos metamodelos *kriging* ao longo do procedimento de otimização. Mais detalhes sobre este trabalho são apresentados no ANEXO VIII .

Otimização Seqüencial por Aproximações

GIUNTA e ELDRED (2000) definem otimização seqüencial por aproximações (SAO) como uma estratégia que decompõe o procedimento de otimização em uma seqüência de subproblemas de otimização (II-1), em que cada subproblema fica confinado a uma sub-região do espaço de busca original. Em cada sub-região, denominada região de confiança (II-2), o problema de otimização é resolvido para aproximações das funções originalmente envolvidas no problema.

$$\begin{aligned} & \min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n} \hat{f}^k(\mathbf{x}) \\ & \text{sujeito a :} \\ & \hat{g}_i^k(\mathbf{x}) \leq 0, \quad i = 1, \dots, m \quad (\text{II-1}) \\ & \mathbf{x}_{\min} \leq \mathbf{x}_l^k \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}_u^k \leq \mathbf{x}_{\max} \\ & k = 0, 1, \dots, k_{\max} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_l^k &= \mathbf{x}_c^k - \Delta^k \\ \mathbf{x}_u^k &= \mathbf{x}_c^k + \Delta^k \end{aligned} \quad (\text{II-2})$$

onde:

- $\hat{f}(\mathbf{x})$ - Aproximação da função objetivo
- $\hat{g}_i(\mathbf{x})$ - Aproximações das funções restrição
- $\mathbf{x}_{\min}, \mathbf{x}_{\max}$ - Limites das variáveis de decisão no problema original
- $\mathbf{x}_l^k, \mathbf{x}_u^k$ - Limites inferior e superior das variáveis de decisão na região de confiança da iteração k
- \mathbf{x}_c^k - Coordenadas do centro da região de confiança da iteração k
- Δ^k - Tamanho da região de confiança

Os autores sugerem a utilização da estratégia SAO em situações onde as funções matemáticas associadas ao problema (função objetivo e restrições) exigem grande esforço computacional ou apresentam superfícies que não sejam suaves.

Define-se a região de confiança como o espaço paramétrico em que as variáveis de decisão \mathbf{x} satisfazem a seguinte relação:

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_c^k\|_{\infty} \leq \Delta^k \quad (\text{II-3}).$$

De acordo com os autores, as estratégias típicas de SAO buscam continuamente garantir que a cada iteração k as condições de consistência entre as funções originais e aproximadas sejam satisfeitas:

$$\begin{aligned} L(\mathbf{x}_c^k) &= \hat{L}(\mathbf{x}_c^k) \\ \nabla L(\mathbf{x}_c^k) &= \nabla \hat{L}(\mathbf{x}_c^k) \end{aligned} \quad (\text{II-4})$$

onde:

- L - Lagrangiano associado às funções originais do problema de otimização
- \hat{L} - Lagrangiano do problema de otimização computado a partir das aproximações

Os autores afirmam que o cálculo do termo $\nabla L(\mathbf{x}_c^k)$ pode exigir grande esforço

computacional se for realizado através de diferenças finitas. Em seu trabalho, propõe-se uma estratégia alternativa para SAO que abre mão das condições de consistência a fim de obter um procedimento computacionalmente viável. Para isso, o procedimento concebido dispensa o cálculo de derivadas. As etapas deste procedimento são apresentadas a seguir:

- (i) Obter um pequeno número de dados a partir do modelo matemático rigoroso para a função objetivo (f) e as restrições (g_i) na região de confiança;
- (ii) Ajustar modelos reduzidos com os dados obtidos;
- (iii) Resolver o problema de otimização dentro da região de confiança usando os modelos reduzidos;
- (iv) Determinar os valores da função objetivo (f) e das restrições (g_i) com o modelo rigoroso no ponto ótimo obtido em (iii);
- (v) Verificar a convergência. Se convergir, FIM.;
- (vi) Mover/Ampliar/Reduzir a região de confiança de acordo com a precisão dos modelos reduzidos em comparação ao modelo rigoroso;
- (vii) Retornar a (i).

A métrica para avaliação da precisão dos modelos reduzidos é expressa pelo parâmetro ρ , que é computado por meio das expressões a seguir:

$$\rho_k = \min(\rho_k^f, \rho_{ki}^g) \quad i = 1, \dots, m \quad (II-5)$$

$$\rho_k^f = \frac{f(\mathbf{x}_c^k) - f(\mathbf{x}^*)}{\hat{f}(\mathbf{x}_c^k) - \hat{f}(\mathbf{x}^*)} \quad (II-6)$$

$$\rho_{ki}^g = \frac{g_i(\mathbf{x}_c^k) - g_i(\mathbf{x}^*)}{\hat{g}_i(\mathbf{x}_c^k) - \hat{g}_i(\mathbf{x}^*)} \quad (II-7)$$

onde \mathbf{x}^{*k} representa a solução do sub-problema de otimização na iteração k .

O mecanismo de atualização da região de confiança proposto está associado à precisão dos modelos reduzidos, e é apresentado na Tabela II-III.

O procedimento proposto foi testado com dois exemplos de pequeno porte da literatura. Foram utilizados polinômios como metamodelos. Em ambos os casos foram obtidas soluções satisfatórias em comparação aos valores obtidos com as funções originais. Observou-se diferenças de desempenho em função do tamanho inicial da região de confiança, com alguns casos em que não houve convergência. Os autores

observaram um processo lento de convergência, explicado pelo fato de não se utilizar derivadas.

Tabela II-III - PROCEDIMENTO DE ATUALIZAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA (RC) DA ESTRATÉGIA SAO DE GIUNTA E ELDRED (2000)

ρ^k	Cenário	Ações	$\mathbf{x}_c^{k+1} =$	$\Delta^{k+1} =$
$\rho^k \leq 0$	Aproximações imprecisas	Rejeitar \mathbf{x}^k e reduzir RC	\mathbf{x}_c^k	$0.25 \Delta^k$
$\rho^k \leq 0.25$	Aproximações marginalmente precisas	Reduzir RC	\mathbf{x}^k	$0.25 \Delta^k$
$0.25 < \rho^k < 0.75$	Aproximações moderadamente precisas	Manter RC	\mathbf{x}^k	Δ^k
$\rho^k \geq 0.75$ e $\ \mathbf{x}^k - \mathbf{x}_c^k\ _\infty < \Delta^k$	Aproximações precisas e \mathbf{x}^k fica dentro da RC	Manter RC	\mathbf{x}^k	Δ^k
$\rho^k \geq 0.75$ e $\ \mathbf{x}\ _\infty = \Delta^k$	Aproximações precisas e \mathbf{x}^k fica na borda da RC	Ampliar RC	\mathbf{x}^k	$2\Delta^k$

Em uma extensão deste trabalho, ELDRED *et al.* (2004) implementaram diferentes alternativas para aproximar gradientes e matrizes hessianas associados ao problema de otimização em questão, de forma a tentar assegurar as condições de consistência sem necessariamente aumentar de forma significativa o esforço computacional. Os autores reportam vantagens em relação à abordagem anterior, porém pouco significativas para os exemplos estudados.

PERSPECTIVAS

Vários autores sugerem a necessidade de mais investigações sobre diversos aspectos da geração e utilização de metamodelos. MARTIN e SIMPSON (2005) afirmam que a utilização mais ampla de modelos *kriging* demandará mais investigações sobre a metodologia de estimação de parâmetros, em função do esforço computacional envolvido e da complexidade do problema de otimização, que é inerentemente não convexo. SIMPSON *et al.* (2001) indicam a necessidade de mais investigações sobre a utilização da metodologia de metamodelos a problemas de maior porte. CHEN *et al.* (2006) sugerem as metodologias de planejamento seqüencial e critérios de projeto ótimo como temas para futuros desenvolvimentos.

Não foram encontradas referências associadas ao uso de metamodelos em aplicações em tempo real ou outras referências associadas à indústria de processos químicos além da de PALMER e REALFF (2002a, 2002b).

III. MODELOS KRIGING

Este capítulo apresenta os modelos *kriging*, descrevendo sua estrutura típica, principais características e a metodologia para estimação de seus parâmetros. O nome *kriging* originou-se a partir do nome do engenheiro de minas sul-africano D.G. Krige, que desenvolveu estes modelos na década de 50 (VAN BEERS E KLEIJNEN, 2004). A estrutura dos modelos *kriging* na qual se baseia este trabalho é a mais freqüentemente utilizada na literatura (LOPHAVEN *et al.*, 2002). Para apresentação mais detalhada e visão mais abrangente da estrutura dos modelos *kriging*, sugere-se ainda o livro de SANTNER *et al.*, (2003).

III.1. ESTRUTURA DOS MODELOS KRIGING

Seja o conjunto de funções $\mathbf{y}(\mathbf{x}, \mathbf{p})$ representativo do modelo matemático rigoroso que descreve um processo ou fenômeno:

$$y_i = y_i(\mathbf{x}, \mathbf{p}), i = 1 \dots nY \quad (\text{III-1})$$

onde \mathbf{x} são variáveis independentes e \mathbf{p} parâmetros do modelo. O índice i distingue as nY funções que compõem o vetor \mathbf{y} de saídas ou variáveis dependentes. Considere-se ainda um conjunto \mathbf{S} de pontos de projeto definido pela matriz \mathbf{X} , onde x_{kj} é o valor da variável independente j para o k -ésimo ponto de \mathbf{S} . Computando-se os valores das variáveis dependentes do modelo rigoroso avaliados em \mathbf{S} para um conjunto particular de parâmetros \mathbf{p}_0 , obtém-se o vetor \mathbf{Y}_i^0 :

$$Y_i^0 = y_i(\mathbf{X}, \mathbf{p}_0), i = 1 \dots nY \quad (\text{III-2})$$

O conjunto de metamodelos *kriging* \mathbf{y}^{kr} que aproximam o modelo rigoroso original pode ser construído a partir do conjunto \mathbf{S} de pontos de projeto e suas respectivas respostas \mathbf{Y}_i^0 . Estes metamodelos serão funções constituídas por duas contribuições:

$$y_i^{kr,0}(\mathbf{x}) = \mathfrak{S}_i(\mathbf{x}) + z_i(\mathbf{x}), i = 1 \dots nY \quad (\text{III-3})$$

Neste capítulo nenhum outro tipo de metamodelo será tratado, e apenas o conjunto de parâmetros \mathbf{p}_0 será utilizado. Assim, para dar maior simplicidade à notação, definimos:

$$\hat{\mathbf{y}} \equiv \mathbf{y}^{kr,0} \quad (\text{III-4})$$

O índice i referente a cada variável dependente a ser aproximada será também

omitido; as expressões a serem definidas a seguir serão válidas para cada uma destas variáveis. Assim, a equação (III-3) é reescrita como:

$$\hat{y}(x) = \mathfrak{Z}(x) + z(x) \quad (\text{III-5})$$

onde:

- \hat{y} - Modelo kriging que aproxima uma variável dependente do modelo rigoroso em estudo
- x - Vetor de variáveis independentes do problema

As funções \mathfrak{Z} são freqüentemente definidas como modelos de regressão:

$$\mathfrak{Z}(\beta, x) = \mathbf{f}(x)^T \cdot \beta = \sum_{k=1}^{nF} \beta_k \cdot f_k(x) \quad (\text{III-6})$$

onde o conjunto de funções \mathbf{f} são em geral escolhidas de forma que \mathfrak{Z} seja um polinômio de baixa ordem, e os vetores β são conjuntos de parâmetros obtidos por regressão linear para cada variável i . Se os valores de $\mathbf{f}(x)$ forem computados a partir dos valores das variáveis independentes em \mathbf{S} , obtém-se a matriz \mathbf{F} :

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= [F_{mk}], m = 1, \dots, nS \text{ e } k = 1, \dots, nF \\ \text{onde} & \\ F_{mk} &= f_k(X_m) \\ X_m &= [x_{m,1} \cdots x_{m,nx}] \end{aligned} \quad (\text{III-7})$$

As funções $z(x)$ são inspiradas em funções randômicas gaussianas ou processos estocásticos gaussianos, e apresentam ainda a propriedade de serem estacionárias (SANTNER *et al.*, 2003). Em geral, as funções utilizadas para este fim têm média zero e variância σ^2 . Uma função covariância está associada à função $z(x)$, de forma que a covariância entre dois pontos w e x é dada por:

$$E[z(w), z(x)] = \sigma^2 \mathfrak{R}(\theta, w, x) \quad (\text{III-8})$$

onde \mathfrak{R} é a matriz de correlação à qual está associado um vetor de parâmetros θ . Para funções estacionárias, é necessário que \mathfrak{R} possa ser expresso como uma função C da diferença entre os dois pontos, ou seja:

$$\mathfrak{R}(\theta, w, x) = C(w - x) \quad (\text{III-9}).$$

Conseqüentemente,

$$\sigma^2 = \mathfrak{R}(\theta, x, x) = C(0) \quad (\text{III-10})$$

Por fim, é ainda necessário que as funções correlação sejam tais que:

$$\begin{aligned} &\text{se } d \rightarrow \infty, C(d) \rightarrow 0 \\ &\text{onde } d_j = w_j - x_j \end{aligned} \quad (\text{III-11})$$

A expressão da matriz de correlação dada pela equação (III-8) depende ainda da seleção do modelo de correlação a ser adotado. A forma geral da função correlação entre dois pontos w e x é, em geral, expressa como:

$$\mathfrak{R}(\theta, w, x) = \left[\prod_{j=1}^{n \times} \mathfrak{R}_j(\theta, d_j) \right]^T \quad (\text{III-12})$$

onde a correlação é dada pelo produtório de funções correlação \mathfrak{R}_j , referentes a cada dimensão da função. Pode-se citar como exemplo as funções da família exponencial:

$$\begin{aligned} \mathfrak{R}_j(\theta, w, x) &= \exp[-\theta_j(w_j - x_j)^p] \\ &\text{onde } 0 < p \leq 2 \quad \text{e} \quad \theta_j > 0 \end{aligned} \quad (\text{III-13})$$

Uma das maneiras de interpretar a estrutura dos modelos *kriging* é identificar a segunda parcela como uma função que representa os desvios entre o modelo rigoroso $y_i(x, p)$ e uma função polinomial $\mathfrak{Z}_i(x)$ escolhida para aproximá-la, assumindo portanto o papel de um “termo de correção”. Os vetores de coeficientes β_i podem ser determinados por regressão, através da solução do seguinte problema:

$$\min_{\beta} (F\beta - Y)^T \cdot R^{-1} \cdot (F\beta - Y) \quad (\text{III-14})$$

De onde se obtém a seguinte solução:

$$\beta = (F^T R^{-1} F)^{-1} F^T R^{-1} Y \quad (\text{III-15})$$

A seguir, apresenta-se um procedimento para determinar a forma das funções $z_i(x)$. Inicialmente, define-se a matriz R como a matriz dos valores de \mathfrak{R} computados entre os pontos de projeto, e Z como o vetor de valores de $z(x)$ também computados a partir destes pontos:

$$[R]_{mq} = \mathfrak{R}(\theta, X_m - X_q), m, q = 1 \dots nS \quad (\text{III-16})$$

$$[Z]_m = z(X_m), m = 1 \dots nS \quad (\text{III-17})$$

Da mesma forma, para um ponto x qualquer em relação aos pontos de projeto, define-se o vetor $r(x)$:

$$r(x) = \mathfrak{R}(\theta, X_m - x), m = 1 \dots nS \quad (\text{III-18})$$

As predições $\hat{y}(x)$ são inicialmente expressas por uma combinação dos valores de Y com um conjunto de funções $c(x)$:

$$\hat{y}(x) = c^T(x) \cdot Y \quad (\text{III-19})$$

$$\hat{y}(x) - y(x) = c^T(x) \cdot Y - y(x) \quad (\text{III-20})$$

$$\hat{y}(x) - y(x) = c^T(x) \cdot (F\beta + Z) - [f(x)^T \cdot \beta + z(x)] \quad (\text{III-21})$$

$$\hat{y}(x) - y(x) = c^T(x) \cdot Z - z(x) + [F^T c(x) - f(x)]^T \cdot \beta \quad (\text{III-22})$$

Para assegurar que a predição seja não-tendenciosa, é necessário que:

$$F^T c(x) = f(x) \quad (\text{III-23})$$

Portanto,

$$\hat{y}(x) - y(x) = c^T(x) \cdot Z - z(x) \quad (\text{III-24})$$

Para a determinação das funções $c(x)$, é resolvido um problema de otimização em que a função objetivo é o desvio médio quadrático em (III-25), que pode ser reescrita de forma a explicitar as funções correlação como em (III-27).

$$\psi(x) = E \left\{ [\hat{y}(x) - y(x)]^2 \right\} \quad (\text{III-25})$$

$$\psi(x) = E \left\{ [c^T(x) \cdot Z - z(x)]^2 \right\} = E \left\{ z(x)^2 + c^T(x) \cdot Z \cdot Z^T c(x) - 2c^T(x) \cdot Z \cdot z(x) \right\} \quad (\text{III-26})$$

$$\psi(x) = \sigma^2 (1 + c^T(x) \cdot R \cdot c(x) - 2c^T(x) \cdot r(x)) \quad (\text{III-27})$$

O problema de otimização incorpora a equação (III-23) como restrição, e pode ser resolvido analiticamente a partir das condições de otimalidade de 1ª ordem (condições de Kuhn-Tucker). Assim, define-se a função Lagrangiano e a partir do mesmo chega-se ao sistema algébrico em e (III-30), cuja solução é apresentada em (III-31).

$$L(c, \lambda) = \sigma^2 (1 + c^T(x) \cdot R \cdot c(x) - 2c^T(x) \cdot r) - \lambda^T (F^T c(x) - f(x)) \quad (\text{III-28})$$

$$\begin{aligned} L'_c(c(x), \lambda) &= 2\sigma^2 (R \cdot c(x) - r) - F\lambda \\ L'_\lambda(c(x), \lambda) &= F^T c(x) - f(x) \end{aligned} \quad (\text{III-29})$$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{R} & \mathbf{F} \\ \mathbf{F}^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \mathbf{c}(\mathbf{x}) \\ \tilde{\lambda} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{r} \\ \mathbf{f}(\mathbf{x}) \end{bmatrix}, \quad \text{onde } \tilde{\lambda} = \frac{-\lambda}{2\sigma^2} \quad (\text{III-30})$$

$$\begin{aligned} \mathbf{c}(\mathbf{x}) &= \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{F}\tilde{\lambda}) \\ \tilde{\lambda} &= (\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F})^{-1}[\mathbf{F}^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{f}(\mathbf{x})] \end{aligned} \quad (\text{III-31})$$

Substituindo-se os resultados (III-31) em (III-19), obtém-se a expressão do estimador *kriging*:

$$\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{x}) = \mathbf{f}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\beta} + \mathbf{r}(\mathbf{x})^T\boldsymbol{\gamma} \quad (\text{III-32})$$

onde

$$\boldsymbol{\gamma} = \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}) \quad (\text{III-33})$$

Portanto, a função randômica $z(\mathbf{x})$ será dada por:

$$\mathbf{z} = \mathbf{r}^T(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}) \quad (\text{III-34})$$

Pode-se observar que os vetores $\boldsymbol{\beta}$ e $\boldsymbol{\gamma}$ dependem exclusivamente dos pontos de projeto. Uma vez estimados os parâmetros θ da função correlação em (IV-12), estes vetores podem ser computados. Com isto, o cálculo da predição através da equação (IV-28) passa a requerer apenas o cômputo das funções $f(\mathbf{x})$ e $r(\mathbf{x})$ nos pontos desejados.

Quando o estimador *kriging* em (III-32) é utilizado em um ponto de projeto \mathbf{X}_m , pode-se observar que todos os pontos de projeto são interpolados, como é demonstrado a seguir:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{y}}(\mathbf{X}_m) &= \mathbf{f}(\mathbf{X}_m)^T\boldsymbol{\beta} + \mathbf{r}(\mathbf{X}_m)^T\mathbf{R}^{-1}(\mathbf{Y} - \mathbf{F}\boldsymbol{\beta}) \\ \text{onde} \\ \mathbf{r}(\mathbf{X}_m)^T\mathbf{R}^{-1} &= [0_1 \quad \dots \quad 0_{m-1} \quad 1_m \quad 0_{m+1} \quad \dots \quad 0_{n_S}] \\ \mathbf{r}(\mathbf{X}_m)^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{Y} &= \mathbf{Y}_m = y(\mathbf{X}_m) \\ \mathbf{r}(\mathbf{X}_m)^T\mathbf{R}^{-1}\mathbf{F}\boldsymbol{\beta} &= \mathbf{F}_m\boldsymbol{\beta} = [f_1(\mathbf{X}_m) \dots f_{n_F}(\mathbf{X}_m)]\boldsymbol{\beta} \end{aligned} \quad (\text{III-35}).$$

e

$$\mathbf{f}(\mathbf{X}_m)^T\boldsymbol{\beta} = \mathbf{F}_m\boldsymbol{\beta}$$

Por fim,

$$\hat{\mathbf{y}}(\mathbf{X}_m) = y(\mathbf{X}_m)$$

Esta é uma característica essencial dos modelos *kriging* baseados na estrutura apresentada. Esta propriedade faz com que modelos *kriging* sejam freqüentemente

utilizados para aproximar funções de grande complexidade, embora possa também trazer dificuldades para seu uso em algumas situações.

III.2. OBTENÇÃO DE MODELOS KRIGING

III.2.1. Formulação do problema de estimação de Parâmetros

Duas das principais abordagens para a estimação dos parâmetros dos modelos *kriging* são o método da máxima verossimilhança e o método da validação cruzada (SANTNER *et al.*, 2003, MARTIN E SIMPSON, 2005, JIN *et al.*, 2002). No primeiro caso, a estimação de parâmetros consiste em resolver o seguinte problema:

$$\min_{\theta} m \cdot \log[\hat{\sigma}_z^2(\theta)] + \log[\det(\mathfrak{R}(\theta))]$$

onde (III-36)

$$\hat{\sigma}_z^2(\theta) = \frac{1}{m} (\mathbf{F}\beta - \mathbf{Y})^T \cdot \mathbf{R}^{-1} \cdot (\mathbf{F}\beta - \mathbf{Y})$$

e o vetor β é determinado em função dos parâmetros θ na função correlação a partir de (III-15).

O método da validação cruzada pode ser implementado de inúmeras formas, das quais a mais comum é denominada *leave-one-out*. Neste caso, para um conjunto de nS pontos de projeto, a predição $\hat{y}_k(\theta)$ pode ser obtida estimando-se os parâmetros θ a partir dos dados de projeto excluindo-se o k -ésimo ponto. No método da validação cruzada, o conjunto ótimo de parâmetros θ é aquele capaz de minimizar simultaneamente o desvio das predições $\hat{y}_k(\theta)$ para $k = 1 \dots nS$, o que significa resolver o seguinte problema:

$$\min_{\theta} \sum_{m=1}^{nS} [\hat{y}_{-m}(\theta, X_{-m}) - Y_{-m}]^2 \quad (III-37).$$

Em todas as referências citadas conclui-se, a partir de resultados de estudos de caso, que a abordagem baseada no método da máxima verossimilhança tende a proporcionar resultados mais satisfatórios.

III.2.2. Aspectos computacionais da estimação de parâmetros de modelos *kriging*

MARTIN E SIMPSON (2005) destacam três tipos de problemas computacionais que ocorrem freqüentemente durante a estimação de parâmetros de modelos *kriging*

baseada no princípio da máxima verossimilhança: i) A função objetivo pode ser não-convexa; ii) A função objetivo pode apresentar longos vales com valores quase constantes; iii) Matrizes de correlação mal-condicionadas. Estes e outros aspectos típicos da estimação de parâmetros dos modelos *kriging* são apresentados a seguir.

Não-convexidade da função objetivo

LOPHAVEN *et al.* (2002b) sugerem que a não-convexidade pode ser observada quando a função correlação envolve duas ou mais variáveis. MARTIN E SIMPSON (2005) mostram ainda em seu trabalho que não-convexidades são também observadas quando se utiliza a abordagem de validação cruzada, embora não tenham identificado problemas do tipo ii.

SASENA (2002) discute o surgimento de não-convexidades resultantes da utilização de dados ruidosos. Como os modelos *kriging* interpolam os dados de projeto, eventuais flutuações numéricas presentes serão reproduzidas pelo modelo. Conseqüentemente, o uso deste modelo em problemas de otimização pode eventualmente levar a soluções incorretas ou imprecisas. Para evitar este problema, é sugerida (baseado em referências anteriores) a utilização de modelos *kriging* não-interpoladores, em que a função correlação assume a forma geral como nas equações (III-38) ou (III-39):

$$\mathfrak{R}(\theta, \eta, \mathbf{w}, \mathbf{x}) = (1 - \eta) \left[\prod_{j=1}^{nX} \mathfrak{R}_i(\theta_i, d_j) \right] \quad (\text{III-38})$$

onde $0 \leq \eta < 1$

$$\mathfrak{R}(\theta, \eta, \mathbf{w}, \mathbf{x}) = \left[\prod_{j=1}^{nX} (1 - \eta_j) \mathfrak{R}_i(\theta_i, d_j) \right] \quad (\text{III-39})$$

onde $d_j = w_j - x_j$

e $0 \leq \eta_j < 1$

O fator (1- η) na equação (III-38) (onde η assume tipicamente valores próximos de zero) faz com que os dados de projeto não sejam mais interpolados, obtendo-se um modelo *kriging* cuja resposta é “suavizada”. Neste caso, o parâmetro η deverá ser estimado juntamente com os parâmetros θ . A equação (III-39) apresenta conceito similar, em que são introduzidos parâmetros η para cada uma das dimensões da função.

SASENA (2002) aponta ainda um outro tipo de problema também característico dos modelos *kriging* e que também pode causar não-convexidades. Em seu trabalho, a partir de um exemplo numérico, o autor mostra que de acordo com os dados utilizados para a estimação de parâmetros, a função objetivo pode tornar-se monotonicamente decrescente, e o procedimento de otimização apresentará como resultado valores elevados dos parâmetros θ . Para ilustrar melhor o problema, buscou-se reproduzir o exemplo utilizado pelo autor (o resultado, embora bastante próximo, pode não ser idêntico ao gerado por SASENA (2002). Ver detalhes da implementação do exemplo no anexo A-III.1). Utilizou-se como exemplo a função em (III-40):

$$Y(\mathbf{x}) = -\text{sen}(x) - \exp\left(\frac{x}{100}\right) + 10 \quad (\text{ III-40 })$$

Valores da função foram computados para dois conjuntos de dados de entrada A e B. O primeiro conjunto (A) compreende sete pontos igualmente espaçados entre 0 e 10 (incluindo as extremidades). O segundo conjunto (B) é composto dos seguintes valores: {0, 2, 4, 5, 6, 8, 10}. Modelos *kriging* foram gerados com os conjuntos A e B através do método da máxima verossimilhança. A estrutura dos modelos baseia-se no modelo de correlação de Gauss Tabela III-I e em um valor constante (polinômio de grau zero) para o modelo de regressão. Os gráficos (a) e (c) da Figura III-1 mostram os valores de $Y(x)$ estimados pelos modelos *kriging* A e B no intervalo de x [0,10] contra os valores reais. Os pontos destacados com círculos correspondem aos pontos de projeto. Pode-se observar que a predição com o modelo *kriging* B acompanha a tendência geral da função real com erro de predição relativamente pequeno. Já o modelo A proporciona uma resposta errática e não mostra capacidade de aproximar a função original. A explicação proposta por SASENA (2002) para este fato está na característica das funções objetivo geradas a partir dos dados integrantes dos conjuntos A e B. O comportamento das funções objetivo ψ (III-36) nos casos A e B para o intervalo de θ (0,30] com $x = 0$ pode ser observado nos gráficos (b) e (d) da Figura III-1. No gráfico (d) a função objetivo apresenta um ponto de mínimo para $\theta = 3.9685$, enquanto em (b) a função decresce monotonicamente, levando ao ponto de mínimo em um valor elevado de θ , que corresponde ao limite máximo definido (30). SASENA (2002) mostra que para valores elevados de θ a matriz correlação tende à matriz identidade, e em conseqüência a função objetivo tende a convergir assintoticamente para o valor constante $-m\log(\sigma^2_Y)$, onde σ^2_Y é a variância dos dados no vetor \mathbf{Y} . O autor sugere ainda que este comportamento pode ser detectado verificando-se se o valor da função objetivo no ponto ótimo é menor que $-m\log(\sigma^2_Y)$. Quando este evento ocorre, uma solução sugerida consiste em substituir um ou mais

pontos do conjunto de dados de projeto. No exemplo em questão, SASENA (2002) mostra que a substituição de um único ponto é suficiente para viabilizar a obtenção de um modelo *kriging* satisfatório.

Os métodos de verificação e solução do problema em questão sugeridos por SASENA (2002) podem não ser satisfatórios quando a função objetivo em questão for multimodal.

Mal-condicionamento da matriz correlação R

Problemas de mal-condicionamento da matriz correlação (eq. (III-16)) são discutidos em diversos trabalhos. A solução mais simples para minimizar o problema consiste em adicionar um pequeno valor à diagonal principal da matriz, como é feito por BOOKER *et al.* (1999). LOPHAVEN *et al.* (2002b) adotaram solução similar no *toolbox* DACE (MATLAB), onde o valor adicionado é dado pela expressão $(10+m)\epsilon_M$, onde m é a dimensão da matriz e ϵ_M a precisão do computador utilizado.

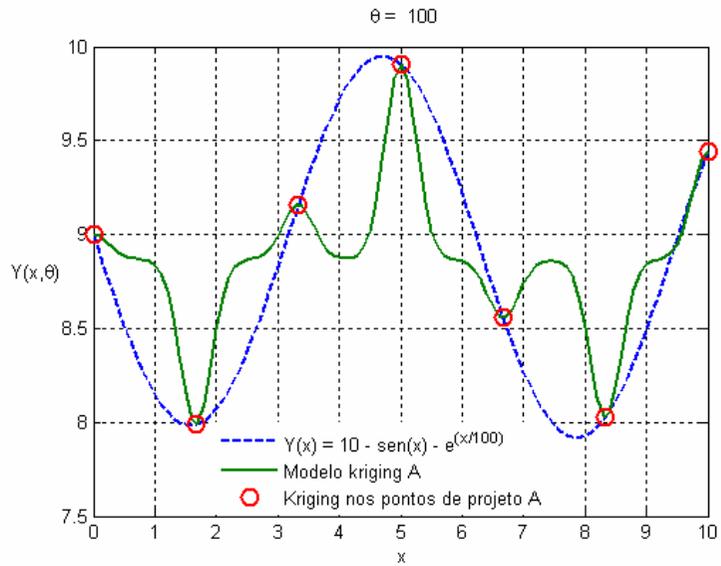
SASENA (2002) utilizou a função correlação em (III-38) em lugar da função (III-16), atribuindo ao parâmetro η um pequeno valor (10^{-12}). BOOKER (2000) propôs uma solução alternativa para problemas de mal-condicionamento ao utilizar modelos *kriging* como metamodelos em problemas de otimização. O algoritmo de otimização global utilizado (BOOKER *et al.*, 1999) baseia-se em um *grid* multidimensional que vai sendo reduzido ao longo de um processo iterativo. O modelo *kriging* vai sendo continuamente refinado por meio de novos pontos obtidos com o modelo rigoroso em torno do ponto candidato a ótimo. Quando o *grid* se torna muito reduzido, os pontos utilizados para ajustar o metamodelo tornam-se muito próximos, e a matriz correlação pode tornar-se mal-condicionada. A solução proposta foi introduzir um segundo processo randômico:

$$\hat{y}(\mathbf{x}) = \mathfrak{Z}(\mathbf{x}) + z(\mathbf{x}) + z_2(\mathbf{x}) \quad (\text{III-41})$$

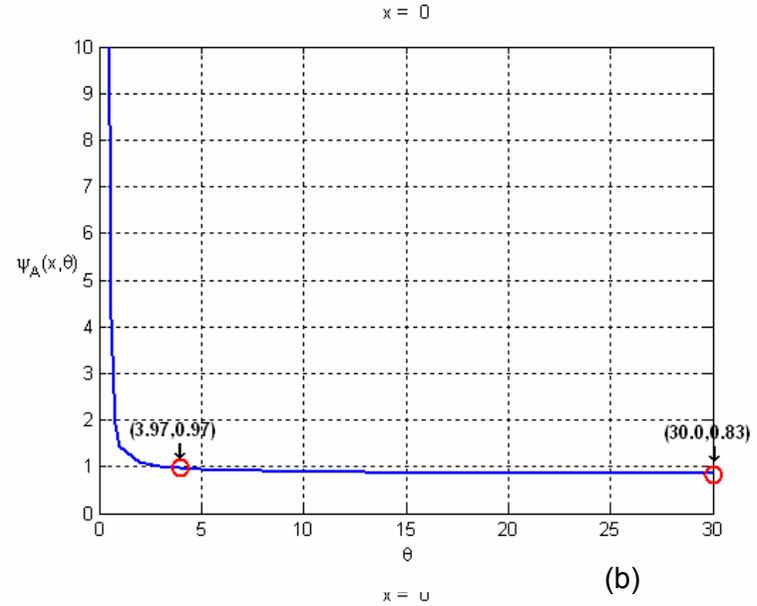
O processo randômico $Z(x)$ é obtido a partir de um conjunto de dados iniciais e mantido ao longo do procedimento de otimização, enquanto o processo randômico $Z_2(x)$ é construído com uma estrutura mais simples e continuamente atualizado com novas simulações com o modelo rigoroso.

III.2.3. Seleção da função correlação

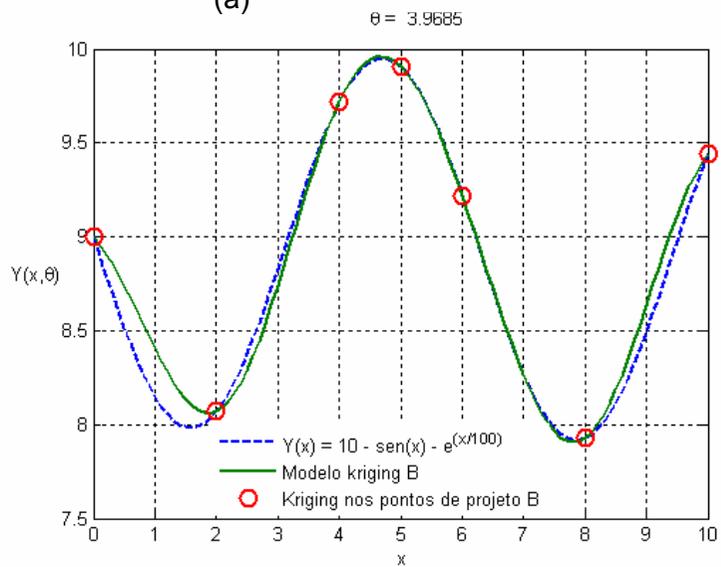
A função correlação utilizada na geração do modelo *kriging* é um dos aspectos determinantes do seu desempenho. Contudo, há pouca informação na literatura a ser



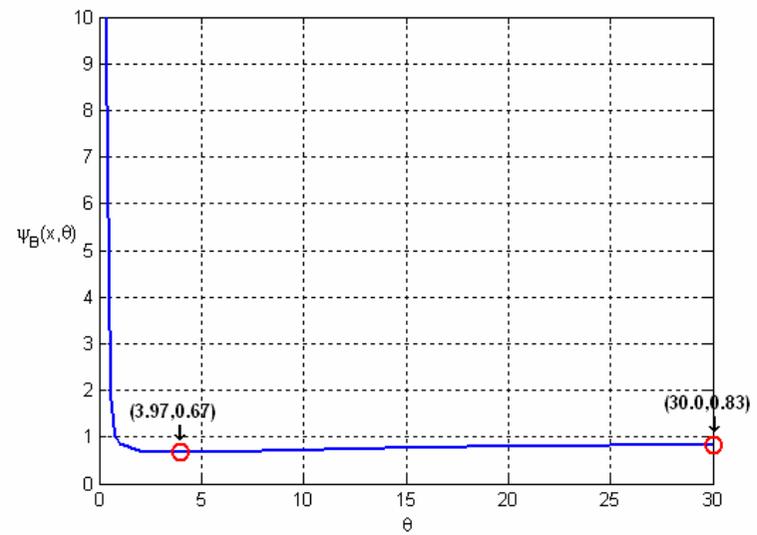
(a)



(b)



(c)



(d)

Figura III-1 - Reprodução do exemplo de SASENA *et al.* (2003).

utilizada como guia para a sua escolha (MARTIN E SIMPSON, 2005). Entre as “famílias” de funções correlação mais utilizadas estão a família exponencial (ver Tabela III-I) e a família Matérn (SANTNER *et al.*, 2003). A função mais utilizada na literatura é a função exponencial para o caso em que $p = 2$, denominada **função correlação de Gauss**¹. As propriedades de continuidade e diferenciabilidade (infinita) na origem estão entre as principais razões para sua larga utilização.

III.3. O TOOLBOX DACE

O *toolbox* DACE (sigla largamente utilizada na literatura para *Design and Analysis of Computer Experiments*) (LOPHAVEN *et al.* 2002a, LOPHAVEN *et al.* 2002b) oferece um conjunto de ferramentas que permite ao usuário gerar modelos *kriging* e utilizá-los na predição de resultados. A expressão do estimador dada pela equação (III-32) depende ainda da seleção dos modelos de regressão e de correlação a serem adotados. O modelo de regressão pode ser um polinômio de graus 0, 1 ou 2. Há sete opções de modelos de correlação, apresentados a seguir na Tabela III-I.

III.3.1. Metodologia e Ferramental

O *toolbox* DACE computa as predições através da equação (III-32). A estimação dos parâmetros θ envolve a solução do seguinte problema de otimização, baseado no método da máxima verossimilhança (LOPHAVEN *et al.*, 2002b):

$$\min_{\theta} \psi(\theta) = \left| \mathfrak{R}_i(\theta) \right|^m \cdot \sigma_i^2(\theta), \quad i = 1 \dots nY \quad (\text{III-42})$$

onde \mathfrak{R}_i é definido em (III-12) e a variância σ_i^2 é dada por:

$$\sigma_i^2(\theta) = \frac{1}{nS} (Y_i - F_i \beta_i)^T \mathfrak{R}_i^{-1} (Y_i - F_i \beta_i) \quad (\text{III-43})$$

Um algoritmo foi desenvolvido para a estimação de parâmetros que leva em consideração aspectos característicos dos modelos *kriging*. Há, no entanto, um aspecto importante das ferramentas disponíveis para estimação de parâmetros: o algoritmo de otimização é determinístico e o problema de estimação de parâmetros pode não ser convexo se o metamodelo contiver mais de uma variável independente.

¹ SANTNER *et al.* (2003) sugerem que esta denominação, embora amplamente utilizada, seja inadequada.

**Tabela III-I - MODELOS DE CORRELAÇÃO DISPONÍVEIS NO TOOLBOX MATLAB DACE
(LOPHAVEN *et al.*, 2002a)**

Função Correlação	$\mathfrak{R}_j(\theta_j, w_j, x_j) =$	
Exponencial:	$\exp[-\theta_j d_j]$	(III-44)
Exponencial Geral:	$\exp[-\theta_j d_j ^{\theta_{n+1}}], \quad 0 < \theta_{n+1} \leq 2$	(III-45)
Gauss:	$\exp[-\theta_j (d_j)^2]$	(III-46)
Linear:	$\max\{0, 1 - \theta_j d_j \}$	(III-47)
Esférica	$1 - 1.5\xi_j + 0.5\xi_j^3, \quad \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$	(III-48)
Cúbica	$1 - 3\xi_j + 2\xi_j^3, \quad \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$	(III-49)
<i>Spline</i>	$\zeta(\xi_j), \quad \xi_j = \theta_j d_j $ $\zeta(\xi_j) = \begin{cases} 1 - 15\xi_j^2 + 30\xi_j^3, & 0 \leq \xi_j \leq 0.2 \\ 1.25(1 - \xi_j)^3, & 0.2 \leq \xi_j \leq 1 \\ 0, & \xi_j \geq 1 \end{cases}$	(III-50)

IV. APRESENTAÇÃO DOS EXEMPLOS PARA ESTUDO

As metodologias desenvolvidas neste trabalho foram testadas por meio de dois exemplos, que serão descritos neste capítulo.

IV.1. UM EXEMPLO DE PEQUENO PORTE (P1)

Este exemplo, doravante denominado **P1**, é um problema de programação não-linear de pequeno porte, cujo objetivo é permitir fácil visualização e entendimento das metodologias de modelagem e otimização a serem propostas:

$$\begin{aligned} \min_{x_1, x_2} f(x_1, x_2) \\ \text{sujeito a : } h(x_1, x_2) = 0 \quad (\text{IV-1}) \\ -0.4 \leq x_1, x_2 \leq 1 \end{aligned}$$

onde a função-objetivo f e a restrição de igualdade h são respectivamente definidas por:

$$f(x_1, x_2) = 0.2 \ln(1 + 100x_1^2) - \text{sen} \left[\frac{\pi}{8} (\omega x_2 + 2) \right]$$

(IV-3)

$$h(x_1, x_2) = \alpha \left[(0.01 + x_1^2)^2 + 0.01x_2^2 - 0.25 \right] - \cos \left[\frac{\pi}{4} (\varphi(x_1 + x_2) + 2) \right]$$

Foram adotados como valores-base dos parâmetros das funções f e h : $\omega = 6$, $\alpha = 1$ e $\varphi = 1$. A Figura IV-1 mostra gráficos destas funções para estes valores.

Resolvendo-se o problema de otimização (IV-1) através do programa NPSOL (ver ANEXO II), obtém-se a seguinte solução (ver solução em detalhes no ANEXO VI):

$$x_{1^*} = 0.672; x_{2^*} = 0.375; f^*(x_1, x_2) = -0.229.$$

Alterando-se os parâmetros ω , α e φ , é possível alterar as características das funções de forma significativa, fato que será explorado posteriormente para a geração de casos para estudo.

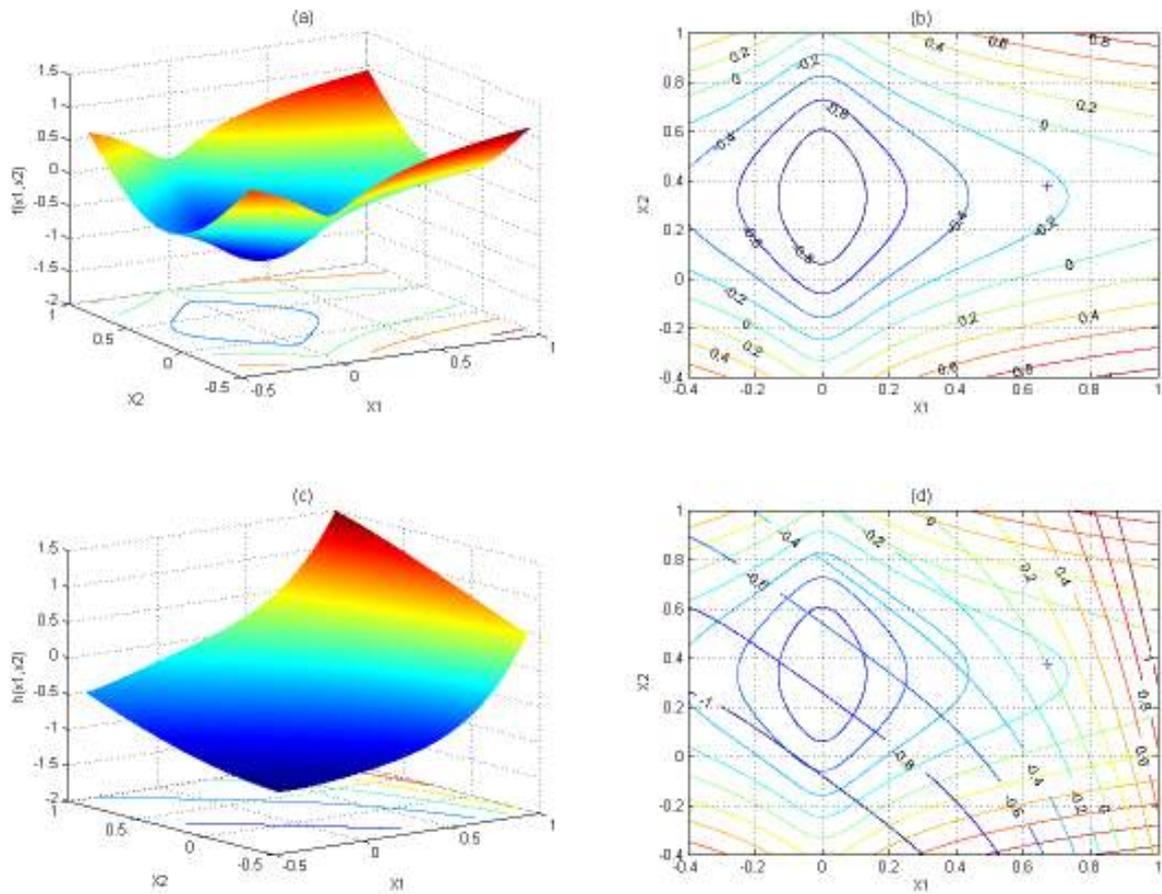


Figura IV-1 – Representação gráfica das funções do caso P1 com $\omega = 6$, $\alpha = 1$ e $\varphi = 1$. (a) Função objetivo; (b) Curva de nível da função objetivo; (c) Restrição de igualdade; (d) Curvas de nível da restrição de igualdade e da função objetivo. A solução do problema de otimização está assinalada nos gráficos (b) e (d) pelo símbolo “+”.

IV.2. AS UNIDADES DE DESTILAÇÃO E SOLVENTES DA RECAP (P2)

Este exemplo tem como objetivo a otimização de unidades de processo existentes: a Unidade de Destilação Atmosférica (U-500) e as Unidades de Solvente U-700 e U750 da Refinaria de Capuava (RECAP).

IV.2.1. Descrição do processo

A Refinaria de Capuava (RECAP, Figura IV-2) foi fundada em 1954, e localiza-se no estado de São Paulo, no município de Mauá. Seus produtos destinam-se basicamente à região metropolitana de São Paulo. Entre os principais produtos estão: Gasolina, Óleo Diesel, GLP, Propeno, Solvente para Borracha e Diluente de Tintas. As principais unidades de processo que compõem a refinaria são a Unidade de Destilação Atmosférica, A Unidade de Solventes, A Unidade de Craqueamento Catalítico Fluido de Resíduo (URFCC) e A Unidade de Propeno.

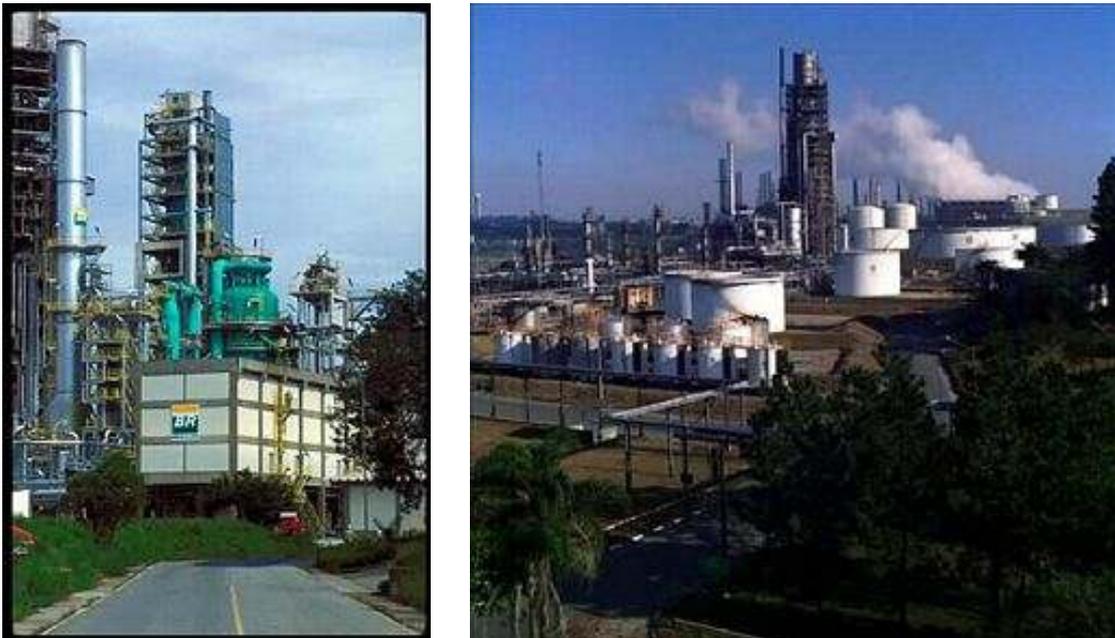


Figura IV-2 - Imagens da Refinaria de Capuava (RECAP) da PETROBRAS.

O óleo diesel oriundo da Unidade de Destilação Atmosférica é o produto responsável pela maior parte do faturamento da refinaria, enquanto que os produtos das Unidades de Solventes (Solvente de borracha e Diluente de tintas) são, juntamente com o propeno, os produtos de maior valor agregado. Este fato ratifica a importância da otimização da operação destas unidades, já que a maximização do rendimento de

seus produtos implica em retorno significativo.

Figura IV-3). A corrente de petróleo a ser refinada (**Cru**), passa por uma bateria de preaquecimento e por dessalgadoras e em seguida é alimentada à torre de **Pre-flash**. Nesta torre, a corrente de cru é destilada dando origem a três correntes. O produto de fundo é o **cru reduzido**, que contém a maior parte da corrente original, e segue para torre atmosférica. Uma corrente intermediária que pode ou não ser retirada, é o **Diesel Extra-Leve (DEL)**. O destilado líquido oriundo do vaso de topo da torre de Pre-flash é a **nafta leve não estabilizada**, que constitui a carga da Unidade de Solventes.

Na torre **atmosférica**, o cru reduzido é fracionado em **nafta pesada (NP)**, **querosene (Q)**, **diesel pesado (DP)** e **resíduo atmosférico (RAT)**. O RAT é enviado para a URFCC como carga. As correntes de querosene e diesel pesado irão compor a corrente de diesel linha (DL) juntamente com o DEL. Esta corrente de Diesel Linha é a parcela mais significativa do óleo diesel produzido na RECAP. A corrente de Nafta Pesada pode ser destinada ao *pool* de gasolina ou à unidade de solventes.

As especificações de qualidade do Diesel Linha são as mais significativas para a Unidade de Destilação : Mínimo Ponto de Fulgor, Máximo Ponto 85% (ASTM D86), Mínimo Índice de Cetano.

A corrente de Nafta Leve não estabilizada constitui a carga das **Unidades de Solventes**, eventualmente somada à corrente de Nafta pesada. Esta unidade pode ainda ser dividida (apenas para facilitar a compreensão) em duas unidades. A Unidade de Solventes I (SI) destina-se à produção de Diluente de Tintas (DTI), enquanto que o produto da Unidade de Solventes II (SII) é o Solvente de Borracha (SBO). Nas duas unidades a primeira torre é sempre responsável pela remoção dos componentes leves indesejáveis nos solventes, enquanto que a segunda torre de cada unidade remove componentes pesados. Assim, os produtos DTI e SBO são obtidos no topo da segunda torre de destilação de cada unidade. As especificações de qualidade para os solventes são apresentados na Tabela IV-I. A especificação do ponto seco do Solvente de Borracha é menor que a do Diluente de Tintas, o que faz com que parte do produto de fundo da coluna N-753 ainda possa ser aproveitado como Diluente de Tintas. Em função disto, o produto de fundo desta torre compõe a carga da N-701, juntamente com parte da Nafta Leve. Para minimizar eventuais perdas no produto de topo da N-701, uma outra coluna (N-751) é utilizada para retificar esta corrente. A fração recuperada é enviada ao tanque de Nafta Leve, constituindo-se em uma **corrente de reciclo**. O produto de fundo da torre N-701 é então enviado à torre N-703, onde se obtém o Diluente de Tintas como produto de topo. O produto de fundo

desta torre constitui-se de uma fração pesada em relação aos solventes, que é também integrado à corrente de Diesel linha.

Tabela IV-I - ESPECIFICAÇÕES DE QUALIDADE PARA OS PRODUTOS DA UNIDADE DE SOLVENTES

Produto	Propriedade	Valor
Solvente de Borracha	Mínimo Ponto Inicial, ASTM D86	52°C
	Máximo Ponto Seco	128°C
Diluyente de Tintas	Mínimo Ponto Inicial, ASTM D86	110°C
	Máximo Ponto Seco	143°C

IV.2.2. Modelagem e simulação

A simulação das unidades de destilação e solventes da RECAP empregada neste trabalho foi implementada através do simulador seqüencial-modular de processos PETROX, utilizando como ponto de partida simulação desenvolvida por BERLIM e MENDONÇA (2004). Esta simulação busca representar a unidade de processo da forma mais fiel possível do ponto de vista de configuração. Parâmetros intrínsecos do modelo como os números de estágios ideais das colunas de destilação foram ajustados de forma a reproduzir da melhor forma possível conjuntos de dados históricos de processo e de análises de laboratório. As composições das correntes de petróleo e de produtos foram caracterizadas através de componentes puros e pseudocomponentes, buscando-se utilizar o menor número possível de componentes para minimizar o esforço computacional da simulação. Uma descrição detalhada da simulação PETROX utilizada é apresentada no ANEXO VII .

IV.2.3. Formulação do problema de otimização

A função objetivo

O objetivo definido para a otimização do processo em questão é maximizar o lucro operacional, aqui definido da seguinte forma:

$$\Lambda = \sum_i^{nP} \$_i \cdot P_i - \sum_j^{nF} \$_j \cdot F_j - \sum_k^{nU} \$_k \cdot U_k \quad (\text{IV-5})$$

onde:

- Λ - Função lucro operacional
- P_i - Produto i
- F_j - Carga j
- U_k - Utilidade k
- nP, nF, nU - Número total de produtos, cargas e utilidades
- $\$$ - Preço / Custo associado a uma parcela de Λ

O gradiente da função objetivo (IV-6) a ser fornecido ao algoritmo de otimização foi computado neste trabalho como função dos gradientes de cada variável que compõe a função objetivo. Isto foi feito para proporcionar valores mais precisos do mesmo.

$$\frac{\partial \Lambda}{\partial x_i} = \sum_{i=1}^{n^P} \$i \frac{\partial P_i}{\partial x_i} + \sum_{j=1}^{n^F} \$j \frac{\partial F_j}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{n^U} \$k \frac{\partial U_k}{\partial x_i} \quad (\text{IV-6})$$

onde:

x_i - Variáveis de decisão do problema de otimização

Os preços associados às parcelas da função Lucro Operacional para o exemplo P2 são apresentadas na Tabela IV-II. Para que haja consistência com as equações (IV-5) e (IV-6), foi atribuído sinal negativo a preços de variáveis que representam custos (cargas e utilidades). Analisando-se a função, pode-se observar que a otimização do processo em questão dar-se-á principalmente através da maximização do rendimento dos produtos, buscando-se maximizar a vazão de carga e a proporção ótima entre os produtos de maior valor agregado e de maior rendimento. O ponto ótimo de operação poderá variar para diferentes cenários, como mudanças na composição da carga, no comportamento intrínseco dos equipamentos e nos limites definidos para diferentes restrições.

Variáveis

O problema de otimização utiliza 19 variáveis de decisão e 21 variáveis que representam restrições do processo. 18 variáveis de processo são ainda utilizadas no cálculo da função objetivo. A escolha das variáveis integrantes do problema de otimização foi feita levando-se em conta os objetivos de otimização da unidade, e as características do simulador PETROX.

Dentre as variáveis de decisão utilizadas (ver Tabela IV-III), nem todas têm equivalente imediato como graus de liberdade da unidade (por exemplo, como *set points* de malhas de controle). Contudo, foram selecionadas para que a estratégia de simulação adotada pudesse ser tão confiável e computacionalmente eficiente quanto possível.

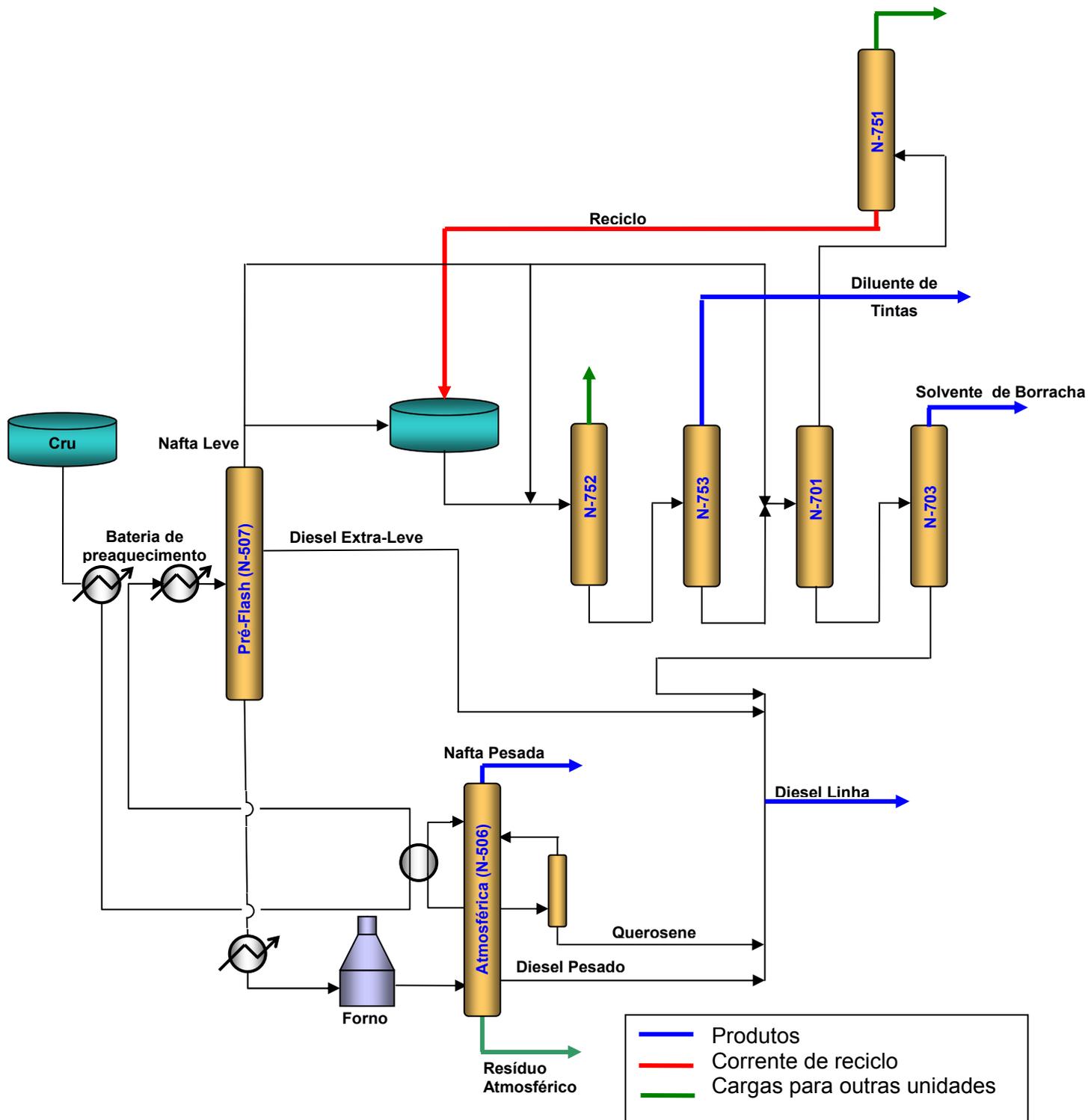


Figura IV-3 - Esquema Simplificado das Unidades de Destilação Atmosférica e de Solventes da RECAP.

Tabela IV-II- PARCELAS DA FUNÇÃO OBJETIVO DO EXEMPLO P2

Produtos

	Descrição	Preço Unitário	Unidade
1	Resíduo Atmosférico	105	\$/m ³ @ 20°C
2	Diesel Extra-Leve	130	\$/m ³ @ 20°C
3	Diesel Pesado	130	\$/m ³ @ 20°C
4	Querosene	130	\$/m ³ @ 20°C
5	Fundo da torre N703	130	\$/m ³ @ 20°C
6	Solvente de borracha	160	\$/m ³ @ 20°C
7	Diluyente de Tintas	180	\$/m ³ @ 20°C

Cargas

	Descrição	Preço Unitário	Unidade
1	Óleo Cru	100	\$/m ³ @ 20°C

Utilidades

	Descrição	Preço Unitário	Unidade
1	Vapor preaquec. carga N701, M621	4	\$/t
2	Vapor preaquec. carga N752, M759	4	\$/t
3	Vazão de vapor para a N507	4	\$/t
4	Vazão de vapor para a N506	4	\$/t
5	Vapor refervedor N703, M710	8	\$/t
6	Vapor refervedor N753, M757	8	\$/t
7	Vapor refervedor N701, M705	8	\$/t
8	Vapor refervedor N752, M756	8	\$/t
9	Carga termica do RCI	-7	\$/Gcal
10	Carga termica no forno atmosferico	7	\$/Gcal

Tabela IV-III - VARIÁVEIS DE DECISÃO DO EXEMPLO P2

Variável	Descrição	Unidade	Limite inferior	Limite superior
F_CRU	Vazao total de cru	m ³ /d	7400	7800
VN507	Vazao de vapor para a N507	t/h	0.8	1.8
VN506	Vazão de vapor para a N506	t/h	1.5	2.5
F_RCI	Vazao do refluxo circulante	m ³ /d	4000	5000
TFAT	Temp. saída do forno atmosferico	°C	365	382
F_Q	Vazao de querosene	m ³ /d	1000	1500
F_Rdiesel	Refluxo de Diesel para N506	m ³ /d	1000	1700
M_NP	Vazao molar de nafta pesada	kgmol/h	50	70
F_DEL	Vazão de retirada de DEL da N507	m ³ /d	1	300
T#2_N507	Temp. #2 N507	°C	105	125
F_C01	Carga de nafta da N701	m ³ /d	360	550
T_CONT_N701	Temperatura de controle N701	°C	143	150
T_CONT_N703	Temperatura de controle N703	°C	137	145
R_N703	Refluxo topo N703	m ³ /d	2	20
T_CONT_N752	Temperatura controle N752	°C	117	122
R_N753	Refluxo topo N753	m ³ /d	5	20
T_ENT_RCI	Temperatura de retorno RCI	°C	130	150
V/F_N753	Razao Vtopo/Carga da N753	Kmol/Kmol	0.9	0.985
Q_BPA2	Carga Térmica PPA/ RCI (lado da bateria)	Gcal/h	7	10

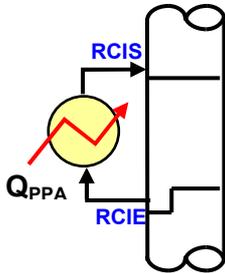
As restrições definidas para o problema P2 (ver Tabela IV-III e Tabela IV-IV) estão associadas a aspectos distintos e são aqui descritas de forma geral:

- Limites arbitrários que definem a região de operação desejada para a unidade de processo em estudo, como os limites das variáveis de decisão e alguns dos limites atribuídos a variáveis dependentes do modelo matemático.
- Disponibilidade de utilidades
- Especificações de qualidade de produtos
- Limites para vazões de líquido em estágios de colunas de destilação. A introdução destes limites tem o objetivo de evitar que se busquem soluções em condições indesejáveis, pois vazões internas excessivamente baixas inviabilizariam a operação eficiente das torres, e do ponto de vista computacional poderiam levar a problemas de convergência do simulador PETROX.

Além das restrições já descritas, duas restrições adicionais estão associadas à integração energética entre a torre atmosférica (N506) e a bateria de preaquecimento. Embora o modelo do processo não contemple a bateria de preaquecimento e sua integração ao processo em toda sua complexidade real, decidiu-se incorporar uma parte relevante desta, em que a carga (petróleo) que entra na unidade cede calor à torre atmosférica através do seu refeedor lateral. A forma mais imediata de representar a integração energética seria criar um módulo trocador de calor independente da torre que receberia a retirada lateral da torre a ser aquecida (denominada refluxo circulante) e a corrente de petróleo associada à carga. Contudo, fazê-lo desta forma implicaria em introduzir um reciclo adicional à simulação. Para evitar fazê-lo, foi utilizada a abordagem modular-simultânea. O módulo da coluna de destilação do PETROX permite a configuração de refluxos circulantes (*pumparounds*) integrados ao modelo da coluna, e que por isso são equacionados de forma simultânea com a coluna, sem a introdução de reciclos externos. Este módulo, de acordo com a estratégia de simulação adotada, recebe como entradas a vazão da corrente de retirada que é aquecida no refluxo circulante e a temperatura da corrente que retorna à torre, e calcula o valor da carga térmica fornecida à coluna pelo refeedor lateral, aqui denominado Q_{PPA} . Na representação da bateria de pré-aquecimento, foi utilizado um módulo do tipo flash adiabático, que adiciona à carga da unidade um certo valor especificado de carga térmica, Q_{BPA2} , influenciando assim a entalpia da carga que entra na unidade. Por fim, para representar de forma fidedigna a troca térmica entre as duas correntes, foi introduzido um módulo trocador de calor que

recebe como entradas as correntes que também entram no pumparound da torre Atmosférica e no flash adiabático (RCIE e CRW2, respectivamente).

MÓDULO COLUNA N506



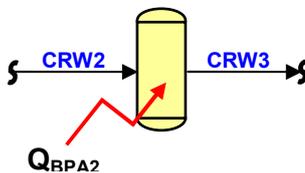
Entradas:

- Vazão da corrente de retirada (RCIE)
- Temperatura da corrente de retorno (RCIS)

Saída:

- Carga térmica do refervedor lateral (Q_{PPA})

MÓDULO FLASH ADIABÁTICO BPA2



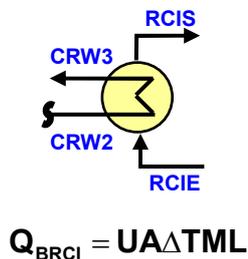
Entrada:

- Carga térmica do refervedor lateral (Q_{BPA2})

Saída:

- Temperatura da corrente de petróleo CRW3

MÓDULO TROCADOR DE CALOR BRCI



Entradas:

- Temperaturas das correntes
- Produto UA

Saída:

- Carga térmica do refervedor lateral (Q_{BRCI})

Figura IV-4 - Detalhamento da modelagem da integração energética entre a bateria de pré-aquecimento e a torre Atmosférica (N506).

A partir de valores arbitrários para o coeficiente global de troca térmica e para a área de troca térmica, e das temperaturas das quatro correntes envolvidas, a carga térmica trocada no módulo trocador de calor BRCI (Q_{BRCI}) pode ser computada pelo simulador PETROX. Para que a integração energética entre a torre e a bateria de pré-aquecimento seja representada na simulação, é suficiente que as cargas térmicas no refervedor lateral da torre atmosférica, no flash adiabático BPA2 e no trocador de calor BRCI sejam iguais, pois todos representam o mesmo equipamento. Daí surgem as equações (IV-7) e (IV-8), que são introduzidas no problema de otimização como restrições de igualdade:

$$Q_{PPA} - Q_{BRCI} = 0 \quad (IV-7)$$

$$Q_{PPA} - Q_{BPA2} = 0 \quad (IV-8)$$

Os resíduos das equações acima foram definidos como variáveis-restrição, e correspondem às duas primeiras variáveis da Tabela IV-IV.

Tabela IV-IV - RESTRIÇÕES DO EXEMPLO P2

Variável	Descrição	Unidade	Limite inferior	Limite superior
RCIxBPA	Diferença Q(RCI)-Q(BPA)	Gcal/h	0	0
RCIxBPA2	Diferença Q(RCI)-Q(BPA2) - lado da bateria	Gcal/h	0	0
F_NLI	Vazao da Nafta Leve Inst	M3/D	800	1200
DL_85	ASTMD86 T85% do Diesel Linha	adimensional	354	357
F_SD51	Vazao reciclo de nafta	m3/d	20	700
DTI_PSECO	Diluyente de Tintas - Ponto Seco	Celsius	137	143
DTI_PIE	Diluyente de Tintas - Ponto Inicial de ebulição ASTM D86	Celsius	110	116
V_N703	Vapor refervedor N703, M710	t/h	0.5	0.75
SBO_PSECO	Solvente de borracha - Pto Seco	Celsius	122	128
SBO_PIE	Solvente de borracha - Ponto Inicial de ebulição ASTM D86	Celsius	52	58
T_CONT_N753	Temperatura controle N753	Celsius	145	152
V_N753	Vapor refervedor N753, M757	t/h	0.5	3
F_HSBO	Vazao fundo N753> para N701	m3/d	10	100
T#2_N506	Temp #2 N506	Celsius	102	120
L#10_N506	N506 - Vazao molar estagio 10	kgmol/h	20	1000
L#22_N506	N506 - Vazao molar estagio 22	kgmol/h	5	100
L#10_N507	N507 - Vazao molar estagio 10	Kmol/h	20	700
L#17_N701	N701 - Vazao molar estagio 17	kgmol/h	50	700
L#3_N703	N703 - Vazao molar estagio 3	kgmol/h	5	700
L#8_N752	N752 - Vazao molar estagio 8	kgmol/h	30	700
L#14_N753	N753 - Vazao molar estagio 14	kgmol/h	10	700

Outra questão interessante é o retorno do produto de fundo da N-751 para o tanque de nafta (Figura IV-4). Nesta simulação é feita uma simplificação do problema, assumindo-se que a mistura no tanque é instantânea. Assim, fica configurada uma **corrente de reciclo** na simulação. Simulações preliminares do processo mostraram que o reciclo tem impacto significativo no resultado final, afetando o comportamento de todas as colunas da unidade de solventes. Do ponto de vista computacional, o reciclo também tem grande impacto, pois exige a realização de vários ciclos de convergência onde todas as colunas da unidade de solventes têm de ser convergidas seqüencialmente.

A solução deste problema através do algoritmo NPSOL (ANEXO II) para o caso-base pode ser observada a seguir, na Tabela IV-V. Informações detalhadas de configuração e da solução do caso base são apresentadas no ANEXO VII .

Tabela IV-V - RESUMO DOS RESULTADOS DO EXEMPLO P2 NAS CONDIÇÕES
BASE

Função Objetivo - valor inicial :		150512.6	\$/d				
Função Objetivo (modelo rigoroso) :		165746.9	\$/d				
VARIÁVEIS DE DECISÃO							
	Descrição	Unidade	X_{inic}	X_{min}	X*	X_{max}	At
1	Vazao total de cru	M3/D	7630	7400	7799.99	7800	AHI
2	Vazao de vapor para a N507	t/h	1	0.8	1.8	1.8	AHI
3	Vazão de vapor para a N506	t/h	1.7	1.5	2.5	2.5	AHI
4	Vazao do refluxo circulante	m3/d	4622.2	4000	5000	5000	AHI
5	Temp. saída do forno atmosférico	Celsius	379.6	365	382	382	AHI
6	Vazao de querosene	m3/d	1311	1000	1500	1500	AHI
7	Refluxo de Diesel para N506	m3/d	1249	1000	1251.09	1700	---
8	Vazao molar de nafta pesada	kgmol/h	55.76	50	70	70	AHI
9	Vazão de retirada de DEL da N507	m3/d	199.9	1	1	300	ALO
10	Temp. #2 N507	Celsius	121.2	105	114.505	125	---
11	Carga de nafta da N701	m3/d	415	360	360.003	550	ALO
12	Temperatura de controle N701	Celsius	145	143	149.995	150	AHI
13	Temperatura de controle N703	Celsius	139	137	145	145	AHI
14	Refluxo topo N703	M3/D	6.24	2	3.102	20	---
15	Temperatura controle N752	Celsius	118.1	117	117	122	ALO
16	Refluxo topo N753	m3/d	14.12	5	7.25308	20	---
17	Temperatura de retorno RCI	Celsius	138.2	130	142.198	150	---
18	Razão Vtopo/Carga da N753	Kmol/Kmol	0.9805	0.9	0.970281	0.985	---
19	Carga Térmica PPA/ RCI (lado da bateria)	Gcal/h	8.5	7	8.30862	10	---
RESTRIÇÕES							
	Descrição	Unidade	G_{inic}	G_{min}	g*	G_{max}	At
1	Temperatura controle N753	Celsius	146.675	145	149.138	152	---
2	ASTMD86 T85% do Diesel Linha	adimensional	341.715	354	357	357	AHI
3	N506 - Vazao molar estagio 10	kgmol/h	465.977	20	649.214	1000	---
4	Vazao da Nafta Leve Inst	M3/D	969.394	800	987.209	1200	---
5	N507 - Vazao molar estagio 10	Kmol/h	76.9451	20	173.883	700	---
6	Diluyente de Tintas - Ponto Seco	Celsius	145.986	137	142.975	143	AHI
7	Diluyente de Tintas - Ponto Inicial de ebulição AST	Celsius	95.0223	110	113.205	116	---
8	Vapor refervedor N703, M710	t/h	0.62094	0.5	0.581415	0.75	---
9	Solvente de borracha - Pto Seco	Celsius	127.053	122	126.913	128	---
10	Solvente de borracha - Ponto Inicial de ebulição A	Celsius	53.3825	52	53.5458	58	---
11	Vapor refervedor N753, M757	t/h	2.5438	0.5	3.00013	3	AHI
12	Diferença Q(RCI)-Q(BPA)	Gcal/h	8.85E-03	0	1.47E-05	0	AHL
13	Vazao reciclo de nafta	m3/d	63.996	20	94.9748	700	---
14	Vazao fundo N753> para N701	m3/d	68.9945	10	56.4401	100	---
15	Temp #2 N506	Celsius	107.011	102	115.962	120	---
16	N701 - Vazao molar estagio 17	kgmol/h	194.624	50	160.757	700	---
17	N703 - Vazao molar estagio 3	kgmol/h	9.52891	5	4.99969	700	ALO
18	N752 - Vazao molar estagio 8	kgmol/h	57.8878	30	70.9967	700	---
19	N753 - Vazao molar estagio 14	kgmol/h	19.1557	10	9.99975	700	ALO
20	N506 - Vazao molar estagio 22	kgmol/h	34.8252	5	31.0073	100	---
21	Diferença Q(RCI)-Q(BPA2) - lado da bateria	Gcal/h	-2.47E-02	0	2.10E-05	0	AHL

V. GERAÇÃO DE METAMODELOS

Este capítulo apresenta a metodologia utilizada neste trabalho para a obtenção dos metamodelos a serem posteriormente utilizados para otimização. Duas classes de modelos reduzidos são utilizadas neste trabalho: os modelos *kriging* e as redes neurais. Os modelos *kriging* são largamente utilizados na construção de metamodelos aplicados a diversas áreas da ciência e vários ramos da engenharia, mas pouco utilizados na engenharia química (PALMER E REALFF, 2002a). Em contrapartida, as redes neurais são largamente utilizadas na modelagem de processos químicos. As redes neurais foram utilizadas neste trabalho nos mesmos exemplos para que se possa verificar o seu potencial como metamodelos e ainda ser um parâmetro para a avaliação do potencial dos modelos *kriging*. Inicialmente, é apresentada a metodologia proposta para a geração dos metamodelos, e em seguida, são avaliados os metamodelos obtidos para os exemplos.

A metodologia para obtenção de metamodelos considera os seguintes aspectos:

- Estratégias para geração de dados a partir do modelo rigoroso
- Seleção de variáveis independentes
- Estimação de parâmetros
- Validação do modelo

Para cada um destes aspectos, já discutidos de forma geral nos capítulos II e III, são apresentadas as metodologias adotadas em função das características e necessidades deste trabalho.

V.1. GERAÇÃO DE DADOS COM O MODELO RIGOROSO

Uma possível alternativa para a metodologia de obtenção de dados a serem utilizados na otimização com metamodelos seria o uso de estratégias de planejamento experimental específicas para este fim. Contudo, algumas das estratégias propostas não se aplicam a problemas com restrições, e a grande maioria das demais é especialmente voltada para problemas de otimização global, o que implica em significativo esforço computacional de acordo com SANTNER *et al.* (2003). Em função das informações apresentadas por estes autores e considerando que este trabalho tem como foco problemas de otimização convexos que envolvem restrições, concluiu-

se que estratégias de planejamento experimental baseadas em critérios de otimização não seriam particularmente úteis. Assim, decidiu-se optar por uma estratégia de planejamento experimental com propriedades *space filling*. Dentre estas, o *Latin Hypercube Design* (LHD) é a técnica de planejamento experimental mais freqüentemente utilizada com modelos *kriging* (KLEIJNEN, 2005), e por isso foi adotada neste trabalho. A amostragem baseada em LHD procura preencher o espaço de busca de forma que todas as dimensões do espaço vetorial sejam representadas (LOPHAVEN *et al.*, 2002). O algoritmo utilizado para a geração de planejamentos experimentais LHD neste trabalho baseia-se no procedimento descrito em SANTNER *et al.* (2003).

O tamanho da amostra a ser utilizado é outro aspecto em aberto. Existem recomendações na literatura (SANTNER *et al.*, 2003, BERNARDO *et al.*, 1992), que no entanto não mostram concordância entre si. Em função disto, este aspecto será avaliado ao longo deste trabalho.

V.2. SELEÇÃO DE VARIÁVEIS PARA OS METAMODELOS

Esta fase é importante para que se evite a incorporação de influências irreais ou não significativas aos metamodelos, com o objetivo de se obter predições coerentes e minimizando a ocorrência de erros de tendência. Além disto, a utilização apenas das variáveis independentes necessárias leva a um menor conjunto de parâmetros, que por sua vez demandarão um menor conjunto de dados a serem obtidos com o modelo rigoroso para sua estimação.

As redes neurais, em função de sua estrutura, já incorporam de certa forma possíveis interações entre as variáveis independentes. Os modelos *kriging*, em contrapartida, não possuem termos de interação. Para evitar que efeitos significativos de interação entre duas variáveis fossem omitidos e aumentar o potencial de representação dos modelos *kriging*, decidiu-se que termos de interação e termos quadráticos também seriam avaliados como possíveis candidatos a integrar os modelos *kriging*.

Portanto, como ponto de partida, consideram-se como possíveis variáveis independentes todas as variáveis de decisão integrantes do problema de otimização a ser resolvido, termos de interação entre estas variáveis e termos quadráticos. Estes termos correspondem aos integrantes de um modelo de regressão polinomial de segunda ordem:

$$\hat{y}_i = b_{i0} + \sum_{j=1}^{nX} b_{ij}x_j + \sum_{j=1}^{nX} \sum_{k=j}^{nX} c_{ijk}x_jx_k, i = 1, \dots, nY \quad (\mathbf{V-1})$$

Mesmo um número moderado de variáveis de decisão levaria a um grande número de parâmetros em (V-1).

O procedimento de seleção a ser utilizado deve, idealmente, satisfazer os seguintes requisitos:

- Ser adequado para seleção a partir de um número relativamente grande de variáveis independentes;
- Permitir a avaliação da significância de termos de interação e termos quadráticos
- Permitir implementação de forma automática, para viabilizar sua eventual utilização em tempo real.
- Rápida execução

Dentre as ferramentas disponíveis para este fim descritas no capítulo II, as únicas que atendem a estes requisitos são aquelas baseadas na avaliação de coeficientes de modelos lineares de regressão. Em função destes motivos, a seleção de variáveis independentes foi realizada neste trabalho através do procedimento *Forward Stepwise Regression* (FSR) (NETER, 1989). O procedimento FSR pode ser descrito de forma sucinta pelas seguintes etapas:

- (i) Inicia-se com um modelo sem variáveis;
- (ii) Para todas as variáveis candidatas, determina-se a estatística t correspondente (V-2) caso elas fossem adicionados ao modelo independentemente. Para cada valor de t pode-se determinar o valor correspondente da probabilidade $P(t)$ na curva de distribuição t . Escolhe-se para entrar no modelo a variável que apresentar a menor probabilidade, contanto que esta seja menor que um valor máximo pré-estabelecido para entrada no modelo. Caso não haja mais variáveis candidatas, FIM;
- (iii) Uma vez incorporada uma nova variável, verifica-se se há variáveis no modelo cujo novo valor de $P(t)$ tornou-se maior que o máximo valor aceitável para remoção de variáveis. Se houver, remove-se do modelo a variável que apresentar o maior valor para $P(t)$.
- (iv) Retorna a (ii)

$$t_k = \frac{\beta_k}{s(\beta_k)} \quad (V-2)$$

onde:

- t_k - Estatística t da variável de índice k em um modelo de regressão
- b_k - Coeficiente da variável de índice k em um modelo de regressão
- $s(b_k)$ - Desvio padrão do coeficiente b_k

Diferentes critérios podem ser utilizados para adição ou remoção de variáveis no procedimento FSR. Além da estatística t, há implementações baseadas na estatística F, coeficientes de correlação parcial e na redução da soma do erro quadrático. O procedimento FSR não garante que necessariamente a melhor seleção possível de variáveis será obtida. Contudo, os modelos obtidos para os exemplos mostraram-se bastante coerentes com o que se poderia esperar teoricamente.

A forma como os resultados do FSR foram utilizados na construção dos modelos *kriging* e rede neurais é ilustrada na Figura V-1. Todas as variáveis selecionadas irão compor o modelo de regressão do modelo *kriging*. A rede neuronal e o modelo de correlação integrante do modelo *kriging* recebem apenas as variáveis de decisão propriamente ditas.

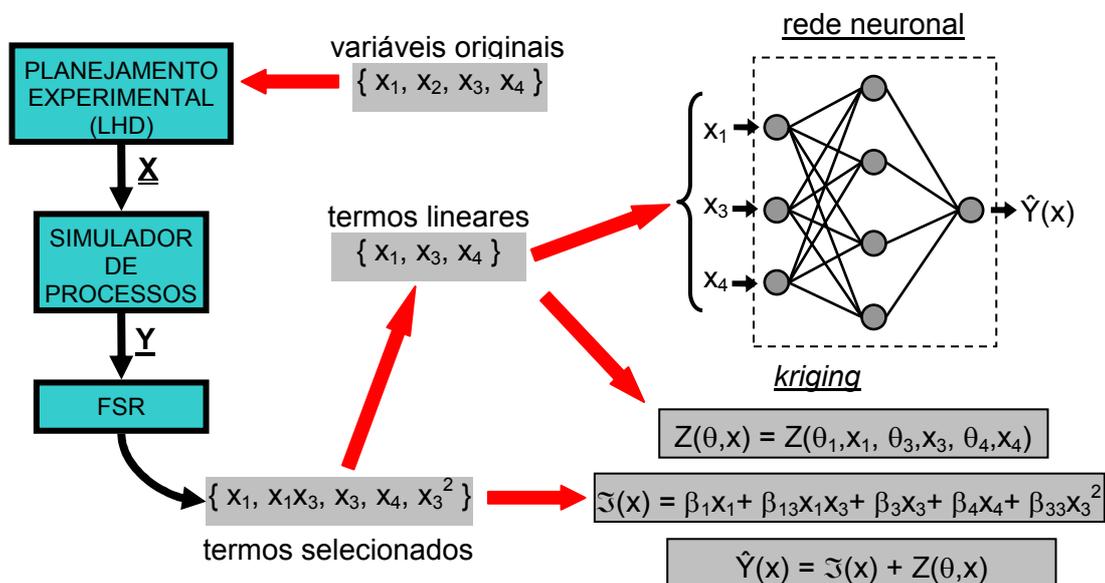


Figura V-1 - Utilização das variáveis selecionadas pelo procedimento FSR nas redes neurais e nos modelos *kriging*.

Um aspecto importante da implementação do procedimento FSR diz respeito ao tratamento de situações em que termos de interação ou quadráticos tenham sido selecionados sem que os termos lineares correspondentes façam parte do modelo.

V.3. TREINAMENTO DE REDES NEURONAIS

As ferramentas utilizadas para o uso das redes neuronais como metamodelos foram adaptadas a partir de um conjunto de funções desenvolvidas por BARBOSA (2002) para treinamento das redes neuronais e simulação baseadas no *toolbox* de redes neuronais do programa MATLAB. Para a obtenção das redes neuronais, dois conjuntos de dados são utilizados. Um conjunto de dados, dito **de treinamento**, obtido através de um planejamento experimental LHD, é efetivamente utilizado no procedimento de treinamento que determina os pesos da rede neuronal. Como este problema de otimização é não-convexo, o treinamento é repetido diversas vezes com diferentes estimativas iniciais, a partir dos quais se obtém diferentes redes neuronais. A seleção da melhor rede é feita através do segundo conjunto de dados, dito **de validação**, buscando-se a rede que apresenta o menor erro de predição.

As estruturas das redes neuronais utilizadas neste trabalho são sempre compostas de três camadas: entrada, intermediária e saída. O algoritmo *backpropagation* foi utilizado para o seu treinamento. A função de ativação da camada de saída foi definida como linear. Para a função de ativação da camada intermediária foram avaliadas três diferentes alternativas: logaritmo-sigmoidal, tangente-sigmoidal e base radial. Em avaliação baseada no exemplo P2, Optou-se pela função logaritmo-sigmoidal. Embora as três alternativas tenham apresentado resultados similares, as funções tangente-sigmoidal e de base radial apresentaram pequenas flutuações numéricas nas predições computadas para os dados de validação, o que não foi observado com a função logaritmo-sigmoidal.

Mais informações sobre a implementação das ferramentas para treinamento e simulação com as redes neuronais são apresentadas no ANEXO IV .

V.4. ESTIMAÇÃO DOS PARÂMETROS DE MODELOS *KRIGING*

O *toolbox* DACE/MATLAB (LOPHAVEN *et al.*, 2002a) provê ferramentas para estimação dos parâmetros do modelo *kriging* e simulação. Para isto, os dados obtidos com o planejamento LHD a partir do modelo rigoroso e a estrutura do modelo de regressão selecionada são alimentados ao *toolbox*, que procede a estimação de parâmetros através da solução do problema descrito em (III-36). Contudo, a função objetivo deste problema (baseado no método da máxima verossimilhança) pode ser não-convexa dependendo do modelo de correlação selecionado (MARTIN E SIMPSON, 2005) e do número de variáveis independentes, e o algoritmo de

otimização implementado no toolbox não é adequado para a solução de problemas de otimização deste tipo. Para solucionar este problema, foi necessário implementar procedimentos adicionais para complementar o procedimento existente no *toolbox* DACE. Duas alternativas para estes procedimentos foram avaliadas neste trabalho e são descritos a seguir.

Estimação através de Otimização Heurística(PSO)

O procedimento do toolbox DACE foi modificado para incorporar um algoritmo do tipo *Particle Swarm* (PSO) de otimização global disponível no *toolbox* MATLAB desenvolvido por BIRGE (2003). Este algoritmo parte de um conjunto de estimativas (partículas) iniciais que correspondem a diferentes conjuntos de parâmetros θ e gera como solução um único vetor θ que corresponde ao menor valor encontrado da função objetivo em (III-36). Este vetor é então fornecido ao algoritmo de determinístico de otimização nativo do *toolbox* DACE que refina esta solução determinando de forma mais precisa o ponto de mínimo.

Seleção do modelo kriging através de dados de validação

Neste caso utiliza-se uma abordagem similar ao procedimento descrito anteriormente para a seleção das redes neuronais. Um conjunto de dados de treinamento é utilizado na estimação de parâmetros através do procedimento nativo do *toolbox* DACE. Diferentes modelos *kriging* são então gerados a partir de diferentes estimativas iniciais, selecionando-se aquele que proporcionar o menor erro de predição a partir de um conjunto de dados de validação. Neste caso, o número de estimativas iniciais utilizado (igual ao número de modelos *kriging* gerado) torna-se um parâmetro do procedimento de obtenção do modelo.

Seleção do modelo de correlação

O toolbox DACE disponibiliza sete diferentes modelos de correlação (ver Tabela III-I), ficando a cargo do usuário determinar qual deles deverá ser utilizado. No procedimento implementado neste trabalho, a seleção do modelo de correlação foi incorporada ao procedimento de estimação de parâmetros. Para isto, o usuário seleciona um subconjunto desejado dos modelos de correlação disponíveis. Os dois procedimentos de estimação de parâmetros descritos acima são repetidos para cada tipo de modelo de correlação. No procedimento baseado no algoritmo PSO, seleciona-se o modelo de correlação que proporcionar o menor valor para a função objetivo em (III-36). No procedimento baseado no conjunto de dados de validação, a seleção

baseia-se no menor erro de predição obtido com os dados de validação.

V.4.2. Avaliação das abordagens para estimação de parâmetros

Para definir a melhor dentre as duas abordagens propostas para estimação dos parâmetros dos modelos *kriging*, foram estudados os modelos *kriging* gerados com as duas abordagens para os modelos das 63 variáveis dependentes do exemplo P2. Para esta avaliação, considera-se o erro relativo de predição computado a partir do conjunto de dados independente, aqui referenciado por **dados de validação**. Além disto, os erros de predição foram computados também para um segundo conjunto independente de dados, aqui denominado **dados de avaliação**. Isto foi feito para que a comparação entre as abordagens não seja tendenciosa, já que o conjunto de dados de validação (embora não utilizado para a estimação de parâmetros) foi efetivamente utilizado para a seleção das redes neuronais e dos modelos *kriging* na segunda estratégia. Os pontos dos dados de validação foram gerados de maneira uniforme a partir de um ponto central do espaço definido pelos limites de operação das variáveis de decisão do problema de otimização em questão. Os dados de avaliação, por sua vez, foram gerados por meio de um planejamento LHD. Para o exemplo P2 os conjuntos de dados de validação e avaliação foram construídos com 399 e 400 pontos respectivamente.

Para cada um dos procedimentos, quatro metamodelos foram gerados a partir de conjuntos de dados de treinamento de diferentes tamanhos. O número de pontos do primeiro conjunto de dados, 57, baseia-se na sugestão de BERNARDO *et al.* (1992), de que o número de pontos deveria ser da ordem de 3 vezes o número de variáveis independentes (19 é o número máximo no exemplo P2). SANTNER *et al.* (2003), por sua vez, sugerem um fator de 5. Considerando que em nenhum dos trabalhos foram utilizados modelos de regressão de segunda ordem, que poderiam demandar mais parâmetros, decidiu-se testar também dois conjuntos de dados ainda maiores, com número de pontos aproximadamente igual a 7 e 10 vezes o número de variáveis independentes.

Os diagramas Box-and-Whisker permitem uma avaliação visual da magnitude e da distribuição do erro de predição, e por isso foram utilizados para comparação. Os resultados desta avaliação para dez das restrições do problema P2 e a função objetivo podem ser acompanhados através das figuras V-2 a V-12 e da Tabela V-II. Os diagramas Box-and-Whisker na caixa superior de cada figura mostra a distribuição do erro relativo de predição computado para os dados de validação, enquanto que a caixa

Tabela V-I – MODELOS UTILIZADOS PARA AVALIAÇÃO DA METODOLOGIA DE ESTIMAÇÃO DE PARÂMETROS BASEADO NO EXEMPLO P2

Modelo	Tipo	No. pontos	Abordagem
K57-I	<i>kriging</i>	57	PSO
K95-I	<i>kriging</i>	95	PSO
K133-I	<i>kriging</i>	133	PSO
K186-I	<i>kriging</i>	186	PSO
K57-II	<i>kriging</i>	57	Dados de validação
K95-II	<i>kriging</i>	95	Dados de validação
K133-II	<i>kriging</i>	133	Dados de validação
K186-II	<i>kriging</i>	186	Dados de validação

inferior mostra os resultados equivalentes para os dados de avaliação. Cada diagrama está associado a um dos modelos descritos na Tabela V-I. Os quatro diagramas à esquerda em cada caixa foram obtidos a partir do procedimento baseado no algoritmo PSO, enquanto que os quatro diagramas à direita representam os modelos selecionados com dados de validação.

Observa-se que os erros de predição com dados de avaliação são significativamente maiores que os erros obtidos com os dados de validação, sugerindo que a comparação entre modelos *kriging* baseada exclusivamente nos dados de validação poderia ser de fato tendenciosa.

A influência do tamanho do conjunto de dados de treinamento no desempenho do modelo *kriging* pode ser percebida claramente através dos diagramas baseados nos dados de avaliação, embora não apareça de forma tão clara nos diagramas baseados nos dados de validação. A magnitude da influência, contudo, varia para cada variável de processo.

O procedimento baseado no uso de dados de validação gerou, neste caso, modelos com erro de predição menor ou igual aos obtidos para a maioria das variáveis, embora nem sempre a diferença entre os erros obtidos fosse significativa. Outro fato observado, é que os modelos obtidos com dados de validação mostraram uma ocorrência muito menor de problemas associados a flutuações numéricas nas respostas dos modelos. Em função disto, o procedimento de estimação baseado na seleção com dados de validação foi adotada para as demais etapas do trabalho.

O número ideal de estimativas iniciais a ser utilizado foi determinado em avaliação preliminar. Constatou-se, para o exemplo em questão, que acima de valores entre 10 e 30 estimativas iniciais havia pouco ganho em termos de precisão dos modelos. Assim, o valor a ser utilizado foi fixado em 10.

Não se observou diferença significativa no esforço computacional envolvido na

estimação dos parâmetros com os dois procedimentos. De acordo com as observações na literatura, constatou-se esforço computacional considerável ao estimar parâmetros para o modelo P2, que envolve maior número de variáveis. É importante ressaltar que este esforço deve-se quase que exclusivamente à solução do problema de estimação de parâmetros propriamente dito. Em função disto, o esforço computacional é também diretamente proporcional ao produto do número de estimativas iniciais pelo número de modelos de correlação a serem considerados, para o procedimento baseado em dados de validação.

Tabela V-II - ERROS MÉDIOS DE PREDIÇÃO⁹ PARA OS METAMODELOS KRIGING

VARIÁVEIS	DADOS DE VALIDAÇÃO						DADOS DE AVALIAÇÃO					
	K95-I	K133-I	K186-I	K95-II	K133-II	K186-II	K95-I	K133-I	K186-I	K95-II	K133-II	K186-II
T_CONT_N753	0.20	0.19	0.24	0.17	0.11	0.12	0.75	0.45	0.36	0.75	0.37	0.31
DL_85	0.03	0.02	0.01	0.03	0.01	0.01	0.08	0.06	0.05	0.09	0.06	0.05
L#10_N506	0.56	0.26	0.22	0.36	0.17	0.15	1.58	1.10	0.75	1.32	0.72	0.61
F_NLI	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.05	0.04	0.03	0.04	0.04	0.03
L#10_N507	0.07	0.02	0.03	0.14	0.02	0.03	0.27	0.12	0.11	0.17	0.11	0.16
DTI_PSECO	0.19	0.20	0.17	0.14	0.16	0.13	0.91	0.80	0.71	0.84	0.76	0.61
DTI_PIE	0.49	0.43	0.37	0.46	0.33	0.29	2.08	1.36	1.15	2.13	1.27	0.96
V_N703	1.67	1.62	1.14	1.28	0.83	0.64	3.54	3.02	2.71	5.34	3.14	2.54
SBO_PSECO	0.18	0.20	0.16	0.15	0.16	0.10	0.84	0.70	0.53	0.69	0.61	0.47
SBO_PIE	0.15	0.14	0.13	0.12	0.12	0.11	0.58	0.63	0.55	0.68	0.63	0.53
V_N753	0.15	0.18	0.08	0.13	0.11	0.06	0.79	0.80	0.59	0.93	0.60	0.39
RCIxBPA	8.18E-04	5.01E-04	5.49E-04	9.65E-04	4.57E-04	2.51E-04	5.32E-03	2.86E-03	2.02E-03	4.06E-03	2.40E-03	1.46E-03
F_SD51	0.66	0.86	0.62	1.07	0.38	0.38	4.09	3.99	3.02	4.23	3.01	2.49
F_HSBO	0.17	0.17	0.17	0.21	0.14	0.14	0.83	0.58	0.55	1.10	0.59	0.39
T#2_N506	0.06	0.05	0.06	0.05	0.06	0.04	0.33	0.23	0.21	0.19	0.19	0.16
L#17_N701	0.07	0.05	0.04	0.06	0.05	0.02	0.37	0.23	0.17	0.40	0.25	0.12
L#3_N703	0.31	0.27	0.18	0.32	0.23	0.19	0.90	0.62	0.53	1.00	0.57	0.51
L#8_N752	0.17	0.22	0.16	0.19	0.12	0.08	0.87	0.95	0.68	1.09	0.80	0.59
L#14_N753	0.14	0.17	0.12	0.13	0.12	0.12	0.62	0.54	0.45	0.54	0.52	0.44
L#22_N506	0.16	0.05	0.09	0.12	0.06	0.06	0.41	0.32	0.27	0.45	0.29	0.31
RCIxBPA2	1.11E-03	8.87E-04	9.67E-04	9.67E-04	1.46E-03	4.70E-04	1.11E-03	8.87E-04	9.67E-04	9.67E-04	1.46E-03	4.70E-04
Fobj	0.35	0.35	0.15	0.16	0.20	0.13	0.35	0.35	0.15	0.16	0.20	0.13

⁹Todos os valores são erros médios relativos, exceto para as restrições de igualdade RCIxBPA e RCIxBPA2, em que são apresentados os erros absolutos.

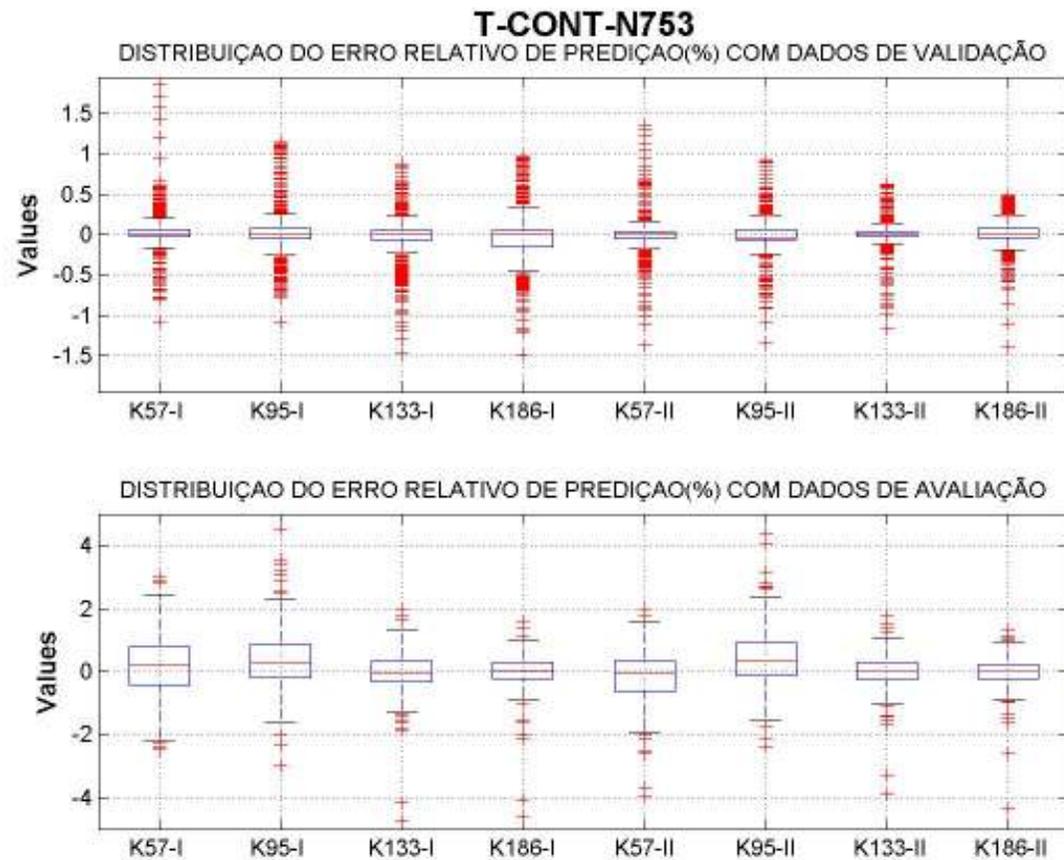


Figura V-2 – Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

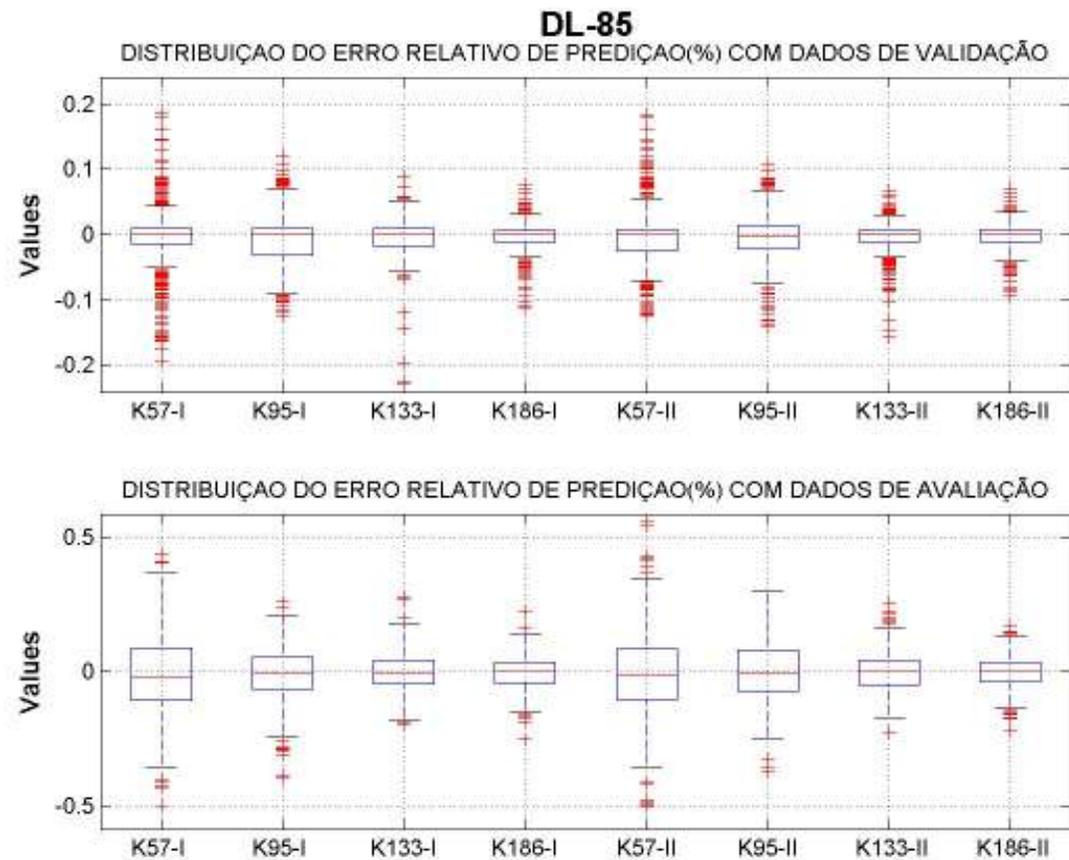


Figura V-3 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

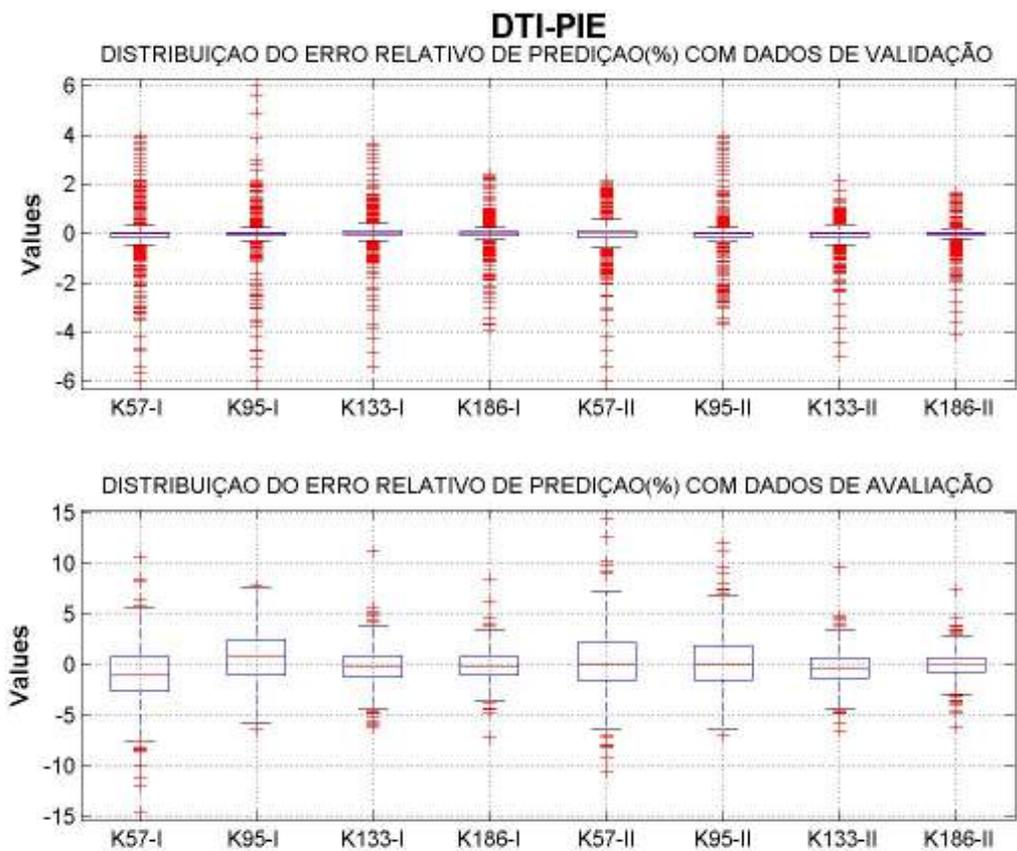


Figura V-4 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

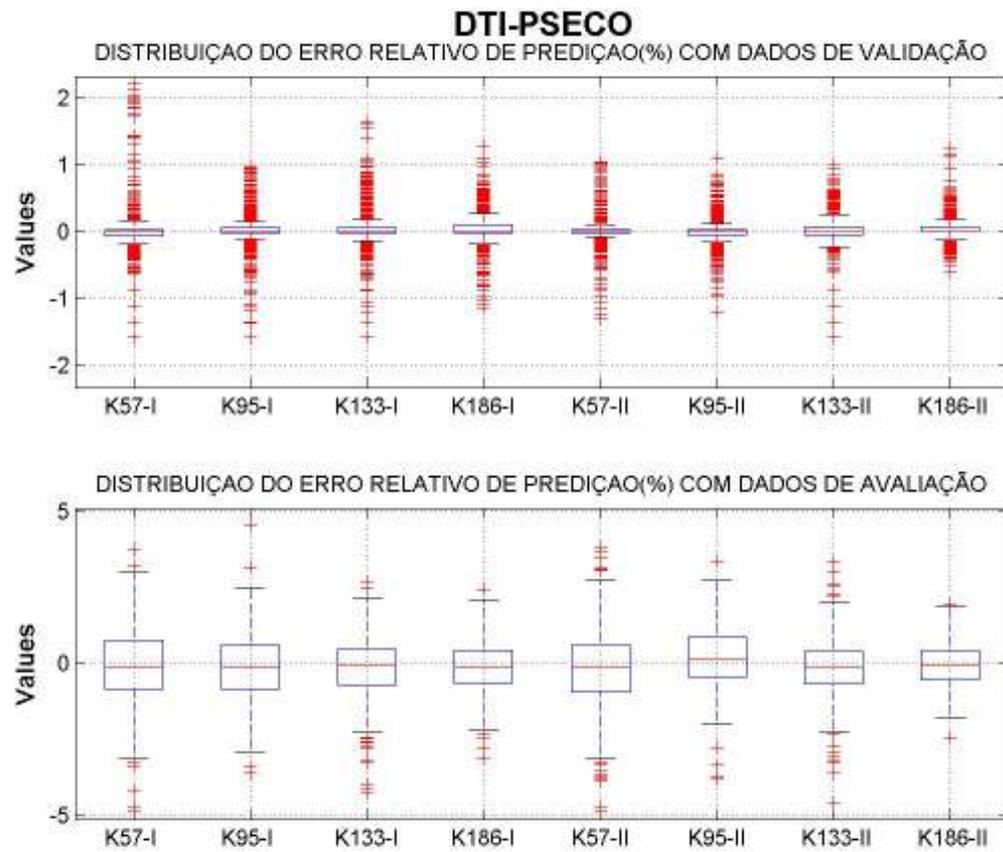


Figura V-5 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

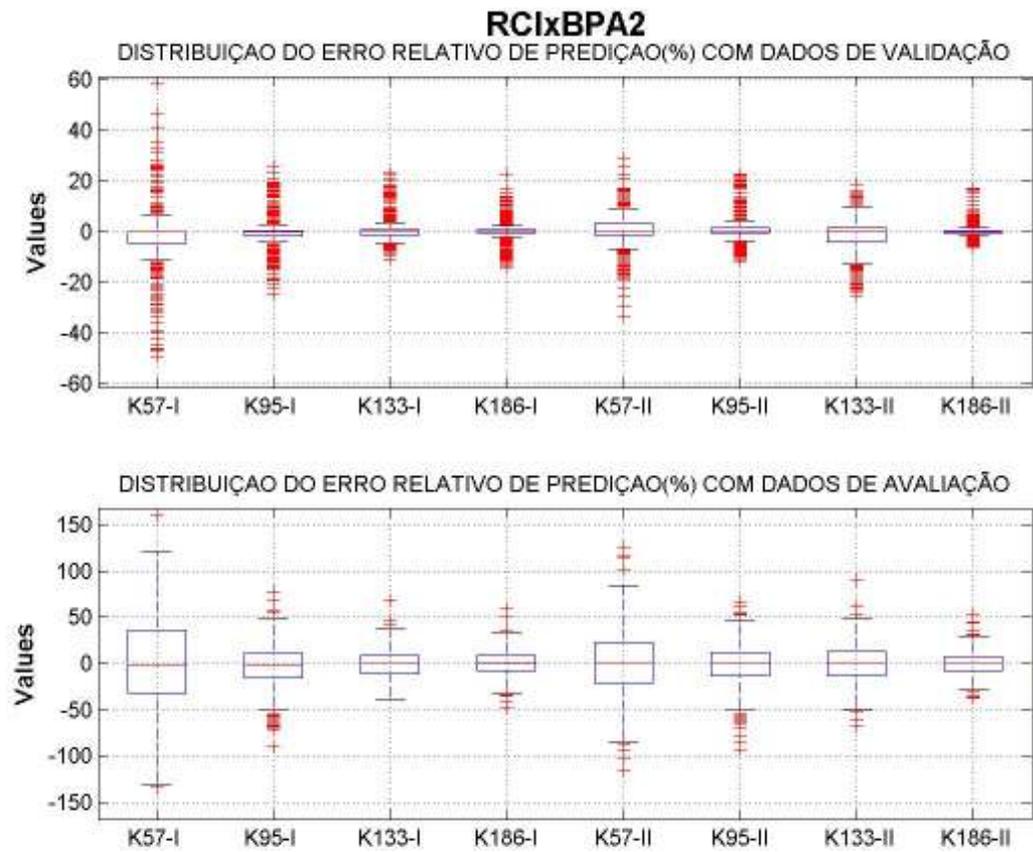


Figura V-6 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

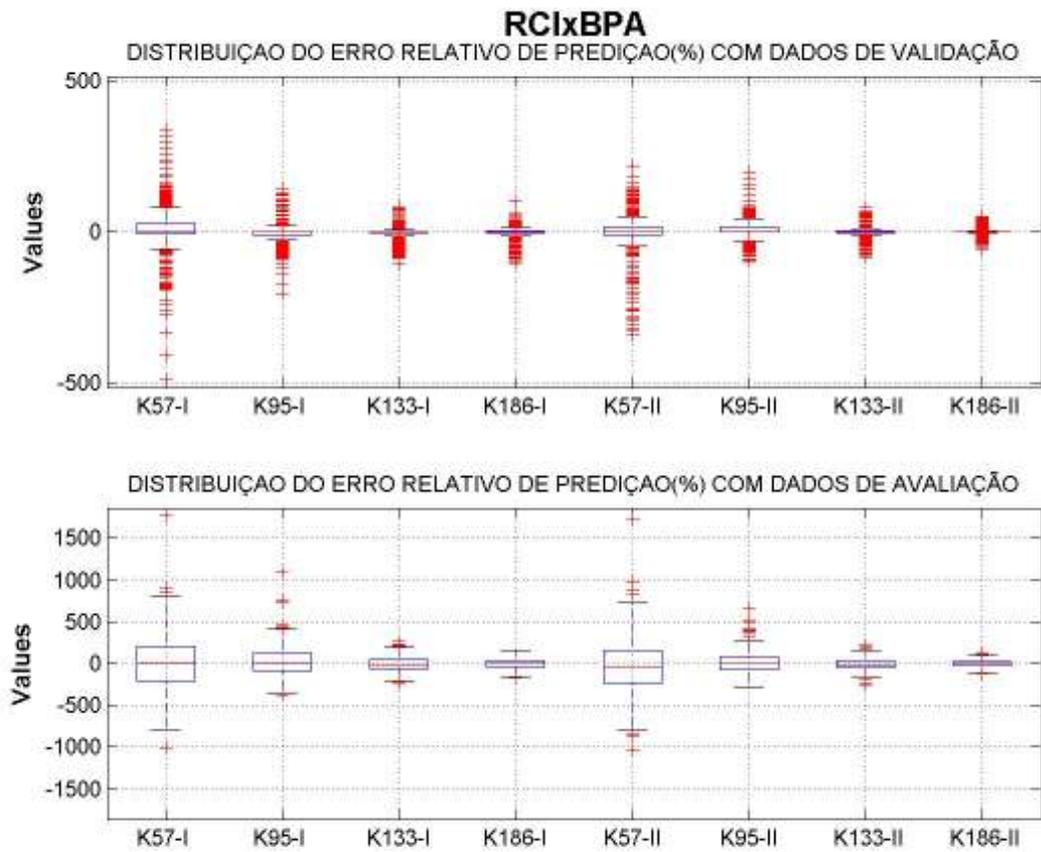


Figura V-7 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

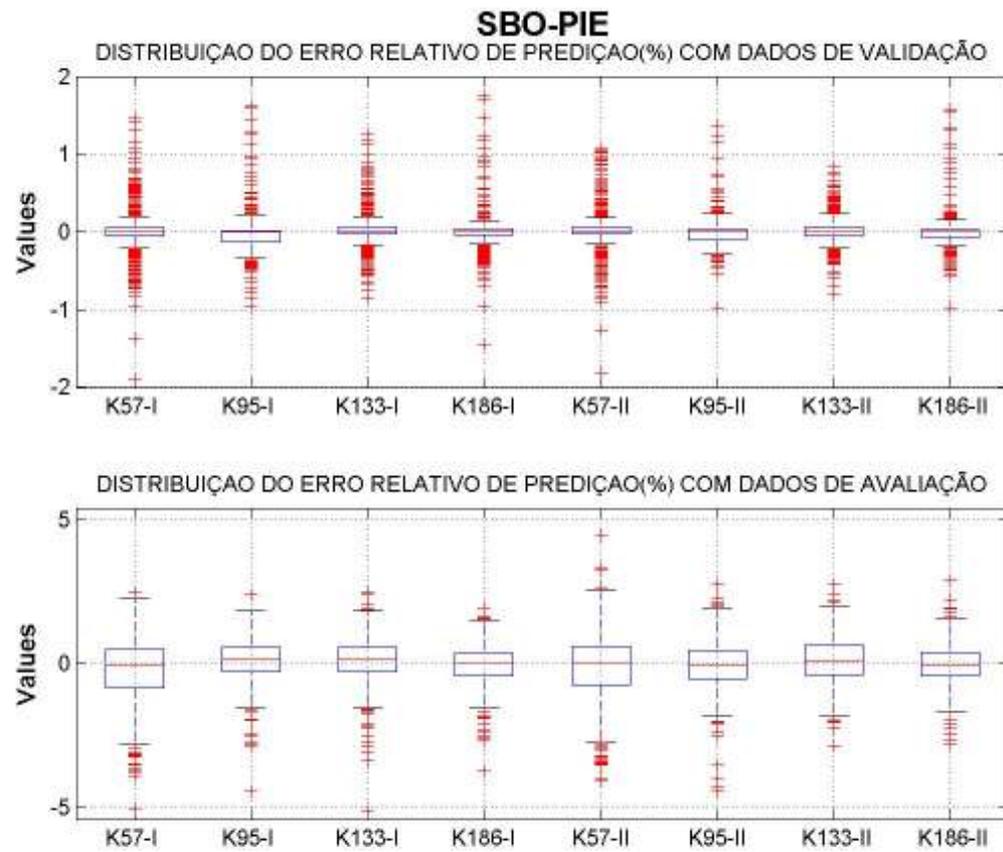


Figura V-8 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

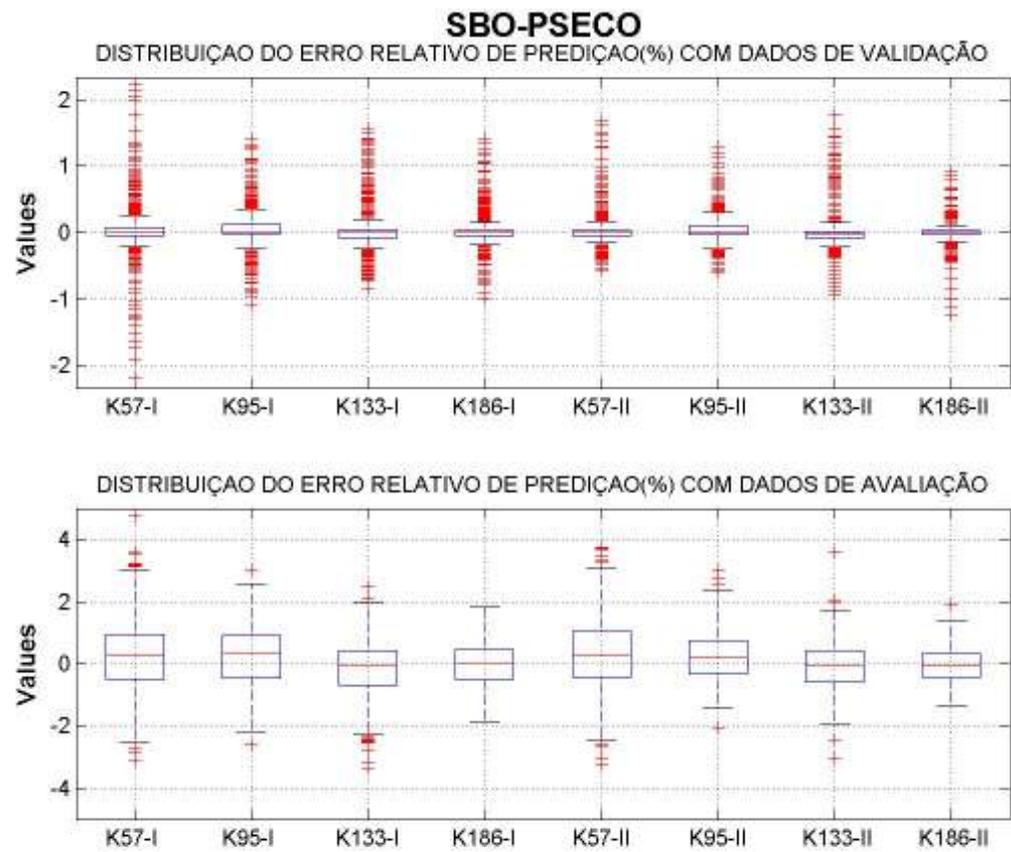


Figura V-9 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

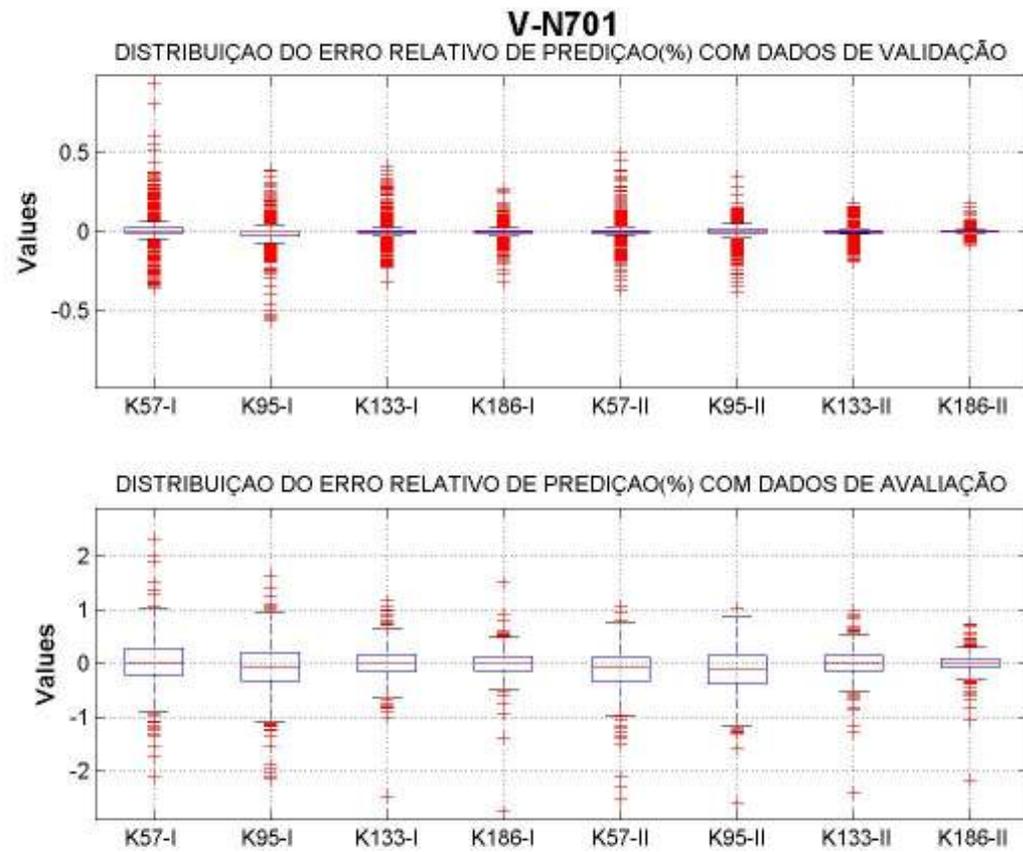


Figura V-10 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

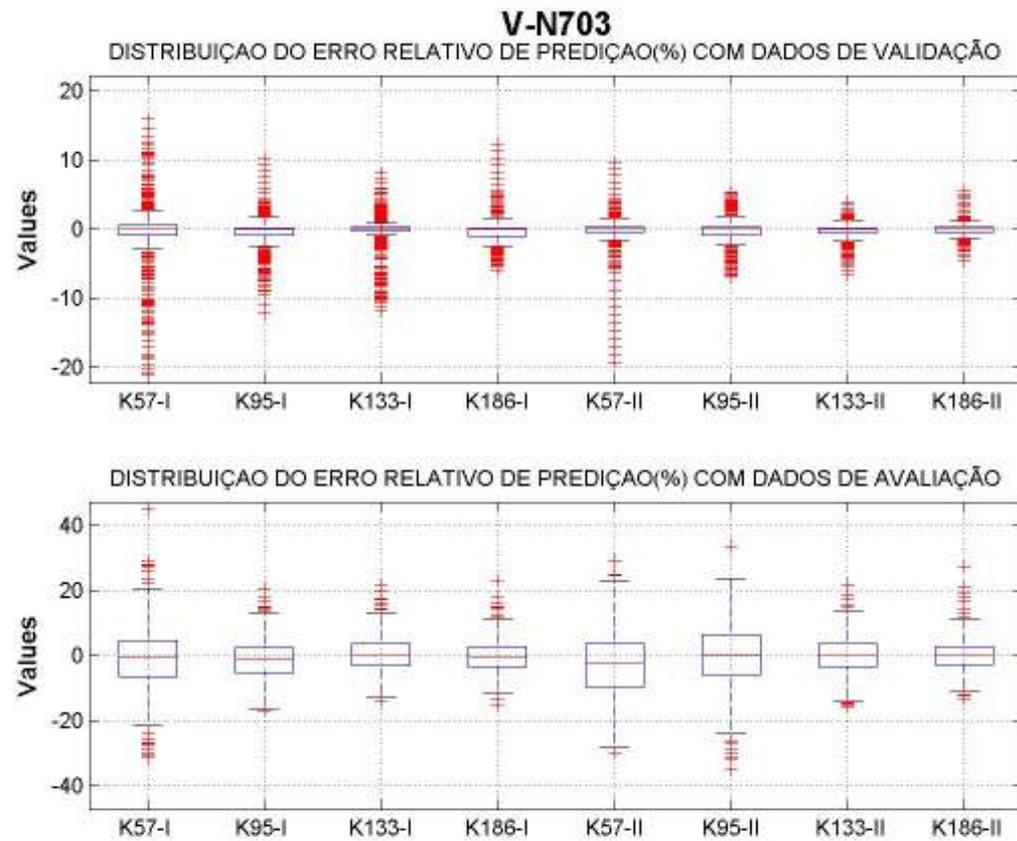


Figura V-11 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

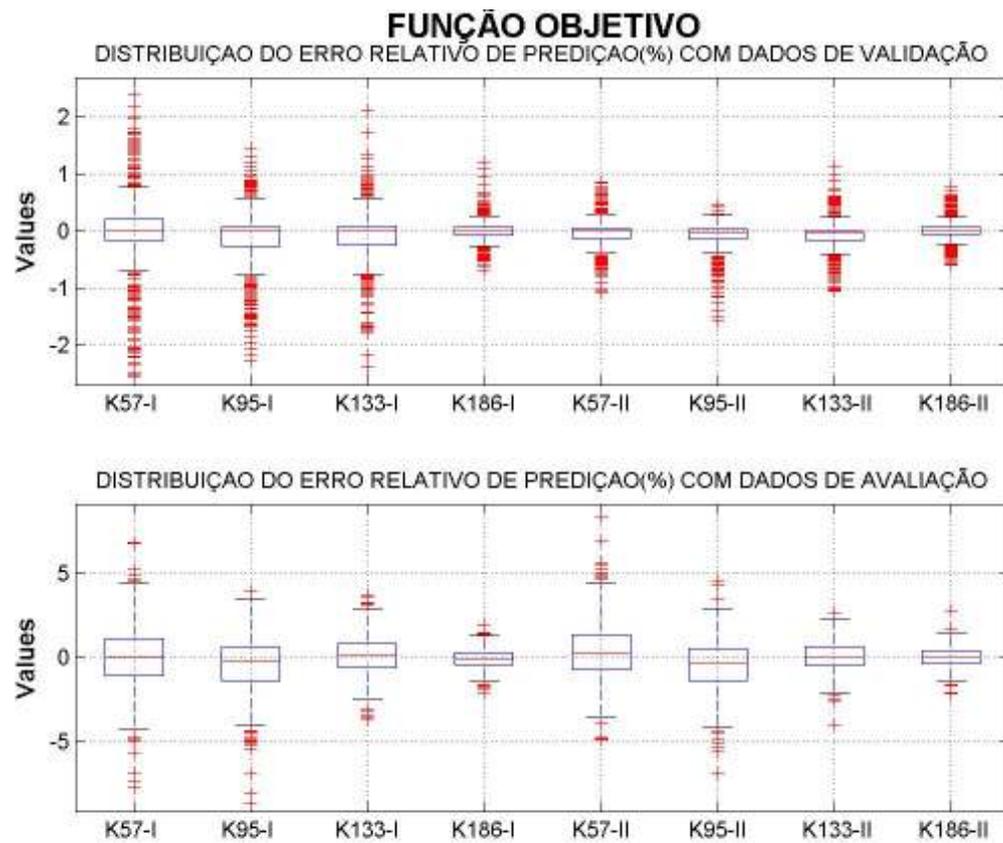


Figura V-12 - Gráficos para avaliação do procedimento de estimação de parâmetros.

V.5. COMPARAÇÃO ENTRE MODELOS *KRIGING* E REDES NEURONAIS

A seguir são apresentadas comparações de desempenho entre modelos *kriging* e redes neuronais para os exemplos.

V.5.1. Exemplo P1

As informações básicas para geração dos modelos *kriging* e das redes neuronais para o exemplo P1 são apresentadas na Tabela V-III. Os metamodelos foram gerados a partir de três conjuntos de dados para treinamento com 15, 30 e 50 pontos respectivamente.

Para a definição da função de ativação da camada intermediária das redes neuronais, foi realizado estudo preliminar em que três tipos de funções de ativação foram considerados: logaritmo-sigmoidal, tangente-sigmoidal e funções de base radial. As funções de base radial mostraram os melhores resultados e foram utilizadas para as etapas posteriores deste trabalho. O intervalo de valores para o número de neurônios na camada intermediária foi definido de forma que o número total de parâmetros das redes neuronais não fosse excessivamente maior que o número correspondente de parâmetros dos modelos *kriging*.

Tabela V-III – INFORMAÇÕES BÁSICAS PARA GERAÇÃO DOS METAMODELOS PARA O EXEMPLO P1

Conjuntos de dados		Nº de pontos	
Validação		42	
Avaliação		42	
Nº de estimativas iniciais: 10			
<i>kriging</i>	Modelos de correlação	Gauss	
		Spline	
		Esférico	
redes neuronais	Neurônios na camada intermediária		2 a 5
	Funções de ativação	Intermediária:	Base radial
		Saída:	Linear
Modelo	Tipo	No. pontos	Abordagem
K15-I	<i>kriging</i>	15	Dados de validação
K30-I	<i>kriging</i>	30	Dados de validação
K50-I	<i>kriging</i>	50	Dados de validação
N15-III	rede neuronal	15	Dados de validação
N30-III	rede neuronal	30	Dados de validação
N50-III	rede neuronal	50	Dados de validação

Comparação baseada no erro de predição

Os metamodelos gerados para a restrição de igualdade e a função objetivo do exemplo P1 podem ser comparados através dos diagramas Box-and-Whisker nas figuras V-13 e V-14. O erro de predição dos metamodelos baseados no conjunto de dados de treinamento de 15 pontos pode ser significativamente maior que nos demais modelos em muitas situações, sobretudo no cálculo da função objetivo. A magnitude e a dispersão do erro para os modelos baseados nos conjuntos de dados de 30 e 50 pontos são bastante próximos entre si.

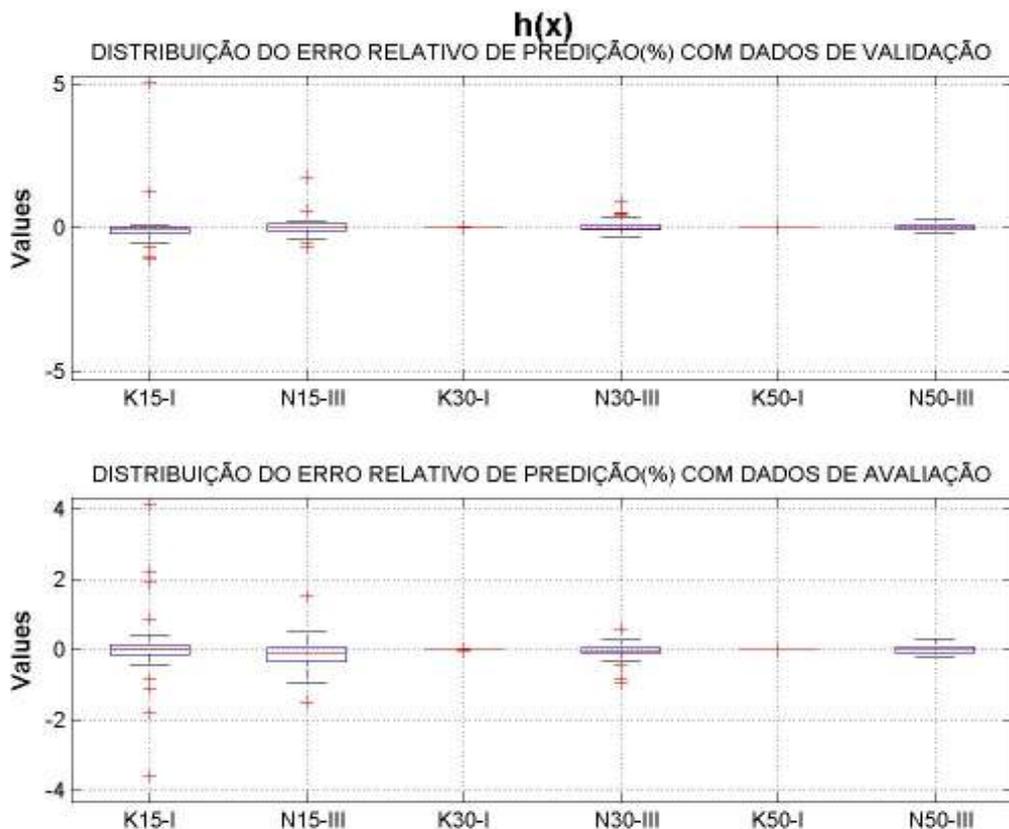


Figura V-13 - Comparação entre modelos *kriging* e redes neurais para o exemplo P1.

Comparação baseada nos resultados de otimização

O problema de otimização nas condições base do exemplo P1 foi resolvido utilizando todos os metamodelos gerados. Os resultados obtidos com os modelos *kriging* e com as redes neurais podem ser constatados nas tabelas V-IV e V-V, respectivamente. Todas as redes neurais mostram resultados satisfatórios, embora o erro de predição da função objetivo para a rede N15-III (diferença relativa entre o valor da função computado com o metamodelo e com o modelo rigoroso) seja grande comparado às

demais. Os modelos *kriging* de 30 e 50 pontos apresentam bons resultados, comparáveis às redes neurais. O modelo *kriging* de 15 pontos (K15-I) apresenta o pior desempenho, com erro de predição na função objetivo da ordem de 10% e desvios das variáveis de decisão na solução no mínimo dez vezes maiores que os observados com os demais modelos.

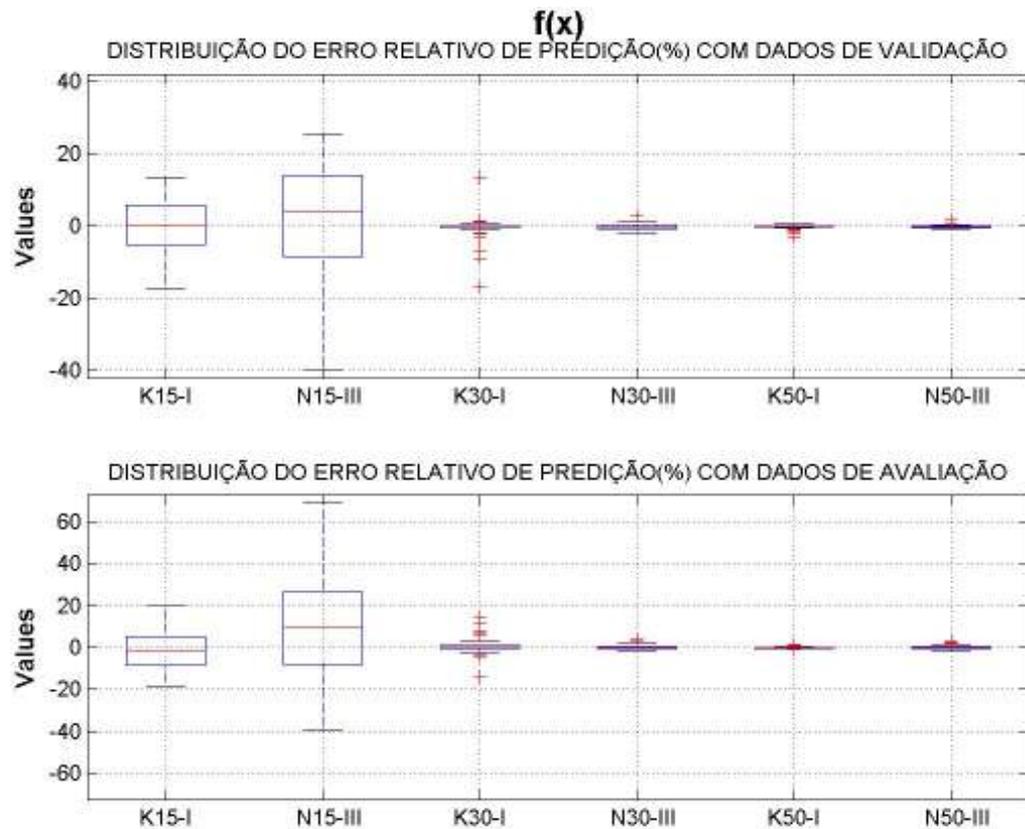


Figura V-14 - Comparação entre modelos *kriging* e redes neurais para o exemplo P1.

Tabela V-IV - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM OS MODELOS KRIGING UTILIZADOS NO EXEMPLO P1

		RIGOROSO		K15-I		K30-I		K50-I	
	$F(x^0)$	-0.707107		-0.707106		-0.707106		-0.707106	
	$\hat{F}(x^*)$	-		-0.202946		-0.230513		-0.229386	
	$F(x^*)$	-0.229164		-0.222833		-0.229146		-0.229164	
	Status término:	0		0		6		6	
	No. iterações :	11		11		11		11	
	No simulações:	56		55		68		46	

	TAG	X*	At	X*	At	X*	At	X*	At
1	x1	0.671513	---	0.690426	---	0.67255	---	0.671421	---
2	x2	0.374513	---	0.325764	---	0.371862	---	0.374748	---

	Tag	g*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At
1	h(X)	8.8E-11	AHL	6.4E-04	2.1E-11	AHL	-1.3E-06	7.7E-08	AHL	-8.4E-07	-2.8E-08	AHL

$F(x^0)$ – Valor da função objetivo computado com o modelo em uso (rigoroso ou metamodelo) nas condições iniciais.

$F(x^*)$ – Valor da função objetivo computado com o modelo rigoroso na solução

g^* - Valor da restrição computado com o modelo rigoroso na solução

\hat{g}^* - Valor da restrição computado com o metamodelo na solução

Tabela V-V - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM AS REDES NEURONAIS UTILIZADAS NO EXEMPLO P1

		BASE		N15-III		N30-III		N50-III	
	$F(x^0)$	-0.707107		-0.676151		-0.706210		-0.704594	
	$\hat{F}(x^*)$	-		-0.235393		-0.231788		-0.230063	
	$F(x^*)$	-0.229164		-0.228316		-0.229183		-0.229109	
	Status término:	0		0		0		0	
	No. iterações :	11		14		12		9	
	No simulações:	56		67		61		39	

	TAG	X*	At	X*	At	X*	At	X*	At
1	x1	0.671513	---	0.678143	---	0.670906	---	0.671864	---
2	x2	0.374513	---	0.358114	---	0.375956	---	0.373856	---

	Tag	g*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At
1	h(X)	8.8E-11	AHL	5.4E-04	4.2E-11	AHL	-8.3E-05	2.8E-11	AHL	1.9E-04	6.7E-13	AHL

V.5.2. Exemplo P2

Comparação baseada no erro de predição

As informações básicas para geração dos modelos *kriging* e das redes neurais para o exemplo P2 são apresentadas na . O número de parâmetros (pesos para redes neurais e vetores β e θ para os modelos *kriging*) para cada metamodelo é apresentado na Tabela V-XI. Os metamodelos gerados foram inicialmente avaliados

através dos diagramas Box-and-Whisker nas figuras V-15 a V-24 e dos erros médios de predição apresentados na Tabela V-X. A função objetivo foi computada a partir dos metamodelos das variáveis de processo que a compõem (ver eq. (IV-5)). Embora haja pouca diferença entre os erros de predição para algumas variáveis, é possível observar que o tamanho do conjunto de dados de treinamento tem influência significativa. O erro de predição dos metamodelos obtidos com 57 pontos é, em geral, bastante superior aos demais. A dispersão do erro de predição da função objetivo baseada em redes neuronais obtidas com 95 pontos (Figura V-24) mostrou-se muito maior que nos demais metamodelos, sugerindo que neste caso talvez fossem necessárias mais iterações para se chegar a melhores metamodelos para os seus componentes.

Tabela V-VI – INFORMAÇÕES BÁSICAS PARA GERAÇÃO DOS METAMODELOS PARA O EXEMPLO P2

Conjuntos de dados		Nº de pontos	
Validação		399	
Avaliação		400	
Nº de estimativas iniciais:		10	
<i>kriging</i>	Modelos de correlação	Gauss	
		Spline	
		Esférico	
redes neuronais	Neurônios na camada intermediária		2 a 5
	Funções de ativação	Intermediária:	Logaritmo-sigmoidal
Saída:		Linear	
Modelo	Tipo	No. pontos	Abordagem
K57-II	<i>kriging</i>	57	Dados de validação
K95-II	<i>kriging</i>	95	Dados de validação
K133-II	<i>kriging</i>	133	Dados de validação
K186-II	<i>kriging</i>	186	Dados de validação
N57	rede neuronal	57	Dados de validação
N95	rede neuronal	95	Dados de validação
N133	rede neuronal	133	Dados de validação
N186	rede neuronal	186	Dados de validação

Comparação baseada no desempenho dos metamodelos para otimização

A segunda comparação entre os metamodelos foi realizada através da avaliação dos resultados obtidos quando estes metamodelos foram utilizados para resolver o problema de otimização do caso base, e comparando estes resultados àquele obtido com o modelo rigoroso. A partir desta etapa, os modelos obtidos com o primeiro conjunto de dados de treinamento (57 pontos) serão descartados, por apresentarem resultados menos satisfatórios.

Um resumo dos resultados dos problemas de otimização é apresentado a seguir (Tabela V-VIII e Tabela V-IX). Contudo, para facilitar a análise, alguns dos aspectos mais importantes da comparação a ser feita foram destacados na tabela Tabela V-VII.

Os três primeiros itens da tabela visam a comparação entre o valor da função objetivo na solução rigorosa (baseada no modelo rigoroso) com o valores da função objetivo aproximado e rigoroso obtidos na solução aproximada (baseada em metamodelos).

Os dois itens seguintes procuram mostrar a capacidade do metamodelo de representar adequadamente as restrições do problema de otimização. O número de restrições não encontradas indica que restrições ativas na solução rigorosa não foram identificadas como ativas nas soluções aproximadas (identificadas em azul na Tabela V-VIII e na Tabela V-IX). O número de restrições incorretas indica restrições ativas encontradas nas soluções aproximadas inexistentes na solução rigorosa (destacadas em letras vermelhas na Tabela V-VIII e na Tabela V-IX).

Os dois itens seguintes, desvio máximo em \mathbf{x}^* e $\hat{\mathbf{g}}^*$, indicam a aderência da solução aproximada à solução rigorosa, considerando-se os valores finais das variáveis de decisão e das restrições de desigualdade. O item seguinte mostra o erro de predição para as restrições de desigualdade na solução aproximada.

Por fim, os dois últimos itens mostram o valor das restrições de igualdade (cujo valor teórico é zero) na solução aproximada.

Tabela V-VII - DESTAQUE DE RESULTADOS OBTIDOS COM A OTIMIZAÇÃO COM METAMODELOS PARA O EXEMPLO P2

RESULTADOS	K95-II	K133-II	K186-II	N95-I	N133-I	N-186-I
Erro relativo de predição da Função Objetivo, %	-4.7	-2.8	-0.7	-4.9	-1.8	-3.2
Desvio entre Função Objetivo aproximada e no caso base, %	-4.0	0.4	0.0	-1.8	0.2	-2.8
Desvio entre Função Objetivo na solução e no caso base, %	0.7	3.2	0.7	2.9	2.0	0.3
Nº de restrições não encontradas	3	4	3	4	6	2
Nº restrições incorretas	4	4	2	2	3	2
Máximo desvio relativo em x	299.000	299.000	2.489	221.928	42.395	0.046
Máx desvio relativo em $\hat{\mathbf{g}}^*$	0.934	0.646	2.454	0.605	0.414	0.270
Máx erro relativo de predição em $\hat{\mathbf{g}}^*$	0.185	0.066	0.130	0.362	0.047	0.028
Restrição de igualdade RC1xBPA	0.004	0.002	-0.002	-0.006	-0.002	-0.005
Restrição de igualdade RC1xBPA2	-0.013	0.015	-0.005	-0.009	-0.007	-0.001

Estes resultados mostram claramente a superioridade dos metamodelos obtidos com 186 pontos de treinamento, que proporcionam erros de predição menores, maior aderência à solução rigorosa, menos erros na predição de restrições ativas e maior precisão na determinação de restrições de igualdade. A rede neuronal de 186 pontos mostra algumas vantagens sobre o modelo *kriging* equivalente.

Combinando estas observações com os resultados observados por meio dos diagramas Box-and-Whisker (figuras V-15 a V24), conclui-se que as recomendações encontradas na literatura para o tamanho ideal do conjunto de dados de treinamento não são adequadas para este exemplo.

**Tabela V-VIII - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM OS
MODELOS KRIGING UTILIZADOS NO EXEMPLO P2**

	BASE	K95-II	K133-II	K186-II
$F(x^0)$	150512.6	150823.8	150766.7	150823.9
$\hat{F}(x^*)$	0.00E+00	172372.6	165058.8	165678
$F(x^*)$	165746.9	164608.6	160492.6	164575.6
Status término:	0	0	6	0
No. iterações :	6	9	10	11
No simulações:	299	407	423	502
Tempo (min) :	26.56	2.46	2.576	3.326

	TAG	X*	At	X*	At	X*	At	X*	At
1	F_CRU	7799.99	AHI	7800.000	AHI	7799.990	AHI	7800.0	AHI
2	VN507	1.8	AHI	1.800	AHI	0.800	ALO	1.8	AHI
3	VN506	2.5	AHI	2.500	AHI	2.500	AHI	2.5	AHI
4	F_RCI	5000	AHI	5000.000	AHI	4999.960	AHI	5000.0	AHI
5	TFAT	382	AHI	382.000	AHI	382.000	AHI	382.0	AHI
6	F_Q	1500	AHI	1500.000	AHI	1499.990	AHI	1500.0	AHI
7	F_Rdiesel	1251.09	---	1017.530	---	1100.760	---	1198.9	---
8	M_NP	70	AHI	50.000	ALO	70.000	AHI	50.1	---
9	F_DEL	1	ALO	300.000	AHI	300.000	AHI	1.0	ALO
10	T#2_N507	114.505	---	115.157	---	115.475	---	119.3	---
11	F_C01	360.003	ALO	360.000	ALO	417.375	---	360.0	ALO
12	T_CONT_N701	149.995	AHI	150.000	AHI	150.000	AHI	150.0	AHI
13	T_CONT_N703	145	AHI	145.000	AHI	137.001	ALO	145.0	AHI
14	R_N703	3.102	---	5.932	---	4.486	---	10.8	---
15	T_CONT_N752	117	ALO	117.000	ALO	117.216	---	117.0	ALO
16	R_N753	7.25308	---	7.308	---	7.323	---	8.7	---
17	T_ENT_RCI	142.198	---	149.291	---	147.991	---	142.3	---
18	V/F_N753	0.970281	---	0.985	AHI	0.985	---	1.0	AHI
19	Q_BPA2	8.30862	---	9.273	---	8.834	---	8.3	---

	Tag	g*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At
1	T_CONT_N753	149.138	---	150.979	151.999	AHI	147.348	147.513	---	152.7	151.8	---
2	DL_85	357	AHI	358.464	357.000	AHI	356.744	357.000	AHI	356.7	357.0	AHI
3	L#10_N506	649.214	---	369.377	437.858	---	433.191	440.590	---	623.8	616.9	---
4	F_NLI	987.209	---	975.100	975.205	---	861.496	862.731	---	1061.2	1060.9	---
5	L#10_N507	173.883	---	97.622	98.333	---	61.572	61.310	---	147.0	147.7	---
6	DTI_PSECO	142.975	AHI	143.866	142.976	---	142.905	142.997	AHI	144.7	143.0	AHI
7	DTI_PIE	113.205	---	114.536	113.405	---	114.196	112.833	---	112.3	114.8	---
8	V_N703	0.581415	---	0.589	0.583	---	0.469	0.500	ALO	0.7	0.7	AHI
9	SBO_PSECO	126.913	---	126.712	125.165	---	123.361	126.931	---	128.5	127.8	---
10	SBO_PIE	53.5458	---	53.379	53.350	---	52.349	52.530	---	53.8	53.4	---
11	V_N753	3.00013	AHI	2.821	2.810	---	2.565	2.568	---	3.0	3.0	AHI
12	RCIxBPA	1.5E-05	AHL	3.9E-03	-6.7E-10	AHL	1.6E-03	-3.3E-06	AHL	-2.2E-03	-1.6E-05	AHL
13	F_SD51	94.9748	---	107.777	115.429	---	129.266	124.210	---	90.8	86.9	---
14	F_HSBO	56.4401	---	41.397	40.955	---	39.929	40.911	---	48.1	47.8	---
15	T#2_N506	115.962	---	113.829	114.024	---	107.163	107.923	---	107.4	107.7	---
16	L#17_N701	160.757	---	151.149	151.519	---	168.523	168.786	---	157.4	158.6	---
17	L#3_N703	4.99969	ALO	9.668	9.594	---	7.340	7.520	---	17.3	17.2	---
18	L#8_N752	70.9967	---	65.394	67.411	---	62.180	60.745	---	69.2	68.7	---
19	L#14_N753	9.99975	ALO	10.095	10.000	ALO	10.123	9.999	ALO	11.9	12.1	---
20	L#22_N506	31.0073	---	20.050	19.636	---	23.875	22.974	---	29.0	29.6	---
21	RCIxBPA2	2.1E-05	AHL	-1.3E-02	-8.4E-10	AHL	1.5E-02	-7.2E-06	AHL	-5.2E-03	-1.09E-05	AHL

Tabela V-IX - RESULTADOS DO PROBLEMA DE OTIMIZAÇÃO BASE COM AS REDES NEURONAIS UTILIZADAS NO EXEMPLO P2

		BASE		N95-I		N133-I		N-186-I	
	$F(x^0)$	150512.6		150755.1		150663.3		150865.7	
	$\hat{F}(x^*)$	0.00E+00		168772.7		165458.7		170456.7	
	$F(x^*)$	165746.9		160858.7		162465		165227.1	
	Status término:	0		0		0		0	
	No. iterações :	6		11		10		6	
	No simulações:	299		491		459		289	
	Tempo (min) :	26.56		8.262		7.507		3.826	

	TAG	X*	At	X*	At	X*	At	X*	At
1	F_CRU	7799.99	AHI	7800.000	AHI	7800.000	AHI	7800.000	AHI
2	VN507	1.8	AHI	1.800	AHI	1.800	AHI	1.800	AHI
3	VN506	2.5	AHI	1.502	---	1.500	ALO	2.500	AHI
4	F_RCI	5000	AHI	5000.000	AHI	5000.000	AHI	5000.000	AHI
5	TFAT	382	AHI	381.993	AHI	378.874	---	382.000	AHI
6	F_Q	1500	AHI	1500.000	AHI	1500.000	AHI	1500.000	AHI
7	F_Rdiesel	1251.09	---	1067.300	---	1000.820	---	1245.720	---
8	M_NP	70	AHI	70.000	AHI	63.427	---	68.909	---
9	F_DEL	1	ALO	222.928	---	43.395	---	1.000	ALO
10	T#2_N507	114.505	---	105.073	---	114.103	---	114.852	---
11	F_C01	360.003	ALO	360.000	ALO	360.000	ALO	360.000	ALO
12	T_CONT_N701	149.995	AHI	150.000	AHI	145.340	---	146.286	---
13	T_CONT_N703	145	AHI	145.000	AHI	145.000	AHI	145.000	AHI
14	R_N703	3.102	---	2.885	---	3.201	---	3.245	---
15	T_CONT_N752	117	ALO	117.000	ALO	118.497	---	117.000	ALO
16	R_N753	7.25308	---	7.479	---	8.130	---	7.022	---
17	T_ENT_RCI	142.198	---	145.646	---	143.413	---	142.629	---
18	V/F_N753	0.970281	---	0.985	AHI	0.985	AHI	0.985	AHI
19	Q_BPA2	8.30862	---	8.649	---	8.467	---	8.275	---

	Tag	g*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At	g*	ĝ*	At
1	T_CONT_N753	149.138	---	149.175	146.417	---	149.536	152.001	AHI	151.700	151.763	---
2	DL_85	357	AHI	356.134	356.523	---	356.401	357.000	AHI	357.226	356.999	AHI
3	L#10_N506	649.214	---	530.430	505.529	---	542.739	534.751	---	650.400	642.199	---
4	F_NLI	987.209	---	799.446	800.000	ALO	976.884	975.089	---	992.240	992.506	---
5	L#10_N507	173.883	---	164.220	163.520	---	166.047	166.312	---	170.785	171.446	---
6	DTI_PSECO	142.975	AHI	140.577	137.296	---	141.483	143.000	AHI	142.723	143.000	AHI
7	DTI_PIE	113.205	---	115.730	115.471	---	109.459	110.018	ALO	110.273	110.000	ALO
8	V_N703	0.581415	---	0.458	0.623	---	0.619	0.648	---	0.594	0.606	---
9	SBO_PSECO	126.913	---	125.121	124.516	---	126.342	125.715	---	127.421	126.545	---
10	SBO_PIE	53.5458	---	52.284	52.114	---	54.989	54.970	---	54.452	54.547	---
11	V_N753	3.00013	AHI	2.686	2.735	---	2.872	2.862	---	3.027	3.000	AHI
12	RCixBPA	1.47E-05	AHL	-6.1E-03	-5.8E-07	AHL	-1.7E-03	2.19E-06	AHL	-4.8E-03	1.6E-05	AHL
13	F_SD51	94.9748	---	152.407	149.115	---	80.628	82.764	---	84.273	85.512	---
14	F_HSBO	56.4401	---	41.141	39.732	---	44.465	44.932	---	41.216	40.076	---
15	T#2_N506	115.962	---	119.375	118.990	---	115.965	115.656	---	115.512	114.537	---
16	L#17_N701	160.757	---	140.076	140.754	---	157.663	158.693	---	155.356	155.850	---
17	L#3_N703	4.99969	ALO	4.759	4.997	ALO	5.048	5.000	ALO	5.143	5.000	ALO
18	L#8_N752	70.9967	---	64.973	64.759	---	66.483	66.116	---	69.705	69.340	---
19	L#14_N753	9.99975	ALO	10.283	10.259	ALO	11.299	11.137	---	9.802	10.000	ALO
20	L#22_N506	31.0073	---	20.831	20.932	---	18.182	18.194	---	30.755	31.349	---
21	RCixBPA2	2.1E-05	AHL	-9.0E-03	7.4E-08	AHL	-6.6E-03	-1.7E-06	AHL	-5.2E-04	2.5E-05	AHL

Tabela V-X - ERROS MÉDIOS DE PREDIÇÃO¹⁰ PARA COMPARAÇÃO DOS METAMODELOS

VARIÁVEIS	DADOS DE VALIDAÇÃO						DADOS DE AVALIAÇÃO					
	K95-II	K133-II	K186-II	N95-III	N133-III	N186-III	K95-II	K133-II	K186-II	N95-III	N133-III	N186-III
T_CONT_N753	0.17	0.11	0.12	0.18	0.14	0.10	0.75	0.37	0.31	0.71	0.63	0.37
DL_85	0.03	0.01	0.01	0.03	0.02	0.02	0.09	0.06	0.05	0.08	0.06	0.04
L#10_N506	0.36	0.17	0.15	0.36	0.17	0.20	1.32	0.72	0.61	1.39	0.74	0.66
F_NLI	0.01	0.01	0.01	0.02	0.02	0.01	0.04	0.04	0.03	0.08	0.09	0.05
L#10_N507	0.14	0.02	0.03	0.07	0.07	0.04	0.17	0.11	0.16	0.24	0.13	0.12
DTI_PSECO	0.14	0.16	0.13	0.15	0.18	0.14	0.84	0.76	0.61	0.81	0.79	0.55
DTI_PIE	0.46	0.33	0.29	0.59	0.24	0.22	2.13	1.27	0.96	4.34	0.79	0.72
V_N703	1.28	0.83	0.64	0.99	1.00	0.90	5.34	3.14	2.54	5.27	3.10	2.25
SBO_PSECO	0.15	0.16	0.10	0.13	0.22	0.10	0.69	0.61	0.47	1.45	0.76	0.44
SBO_PIE	0.12	0.12	0.11	0.17	0.07	0.06	0.68	0.63	0.53	0.62	0.37	0.32
V_N753	0.13	0.11	0.06	0.11	0.14	0.08	0.93	0.60	0.39	0.84	0.53	0.38
RCIxBPA	9.65E-04	4.57E-04	2.51E-04	6.48E-04	3.85E-04	8.02E-04	4.06E-03	2.40E-03	1.46E-03	3.39E-03	1.65E-03	1.41E-03
F_SD51	1.07	0.38	0.38	0.41	0.39	0.38	4.23	3.01	2.49	4.32	9.29	2.10
F_HSBO	0.21	0.14	0.14	0.10	0.22	0.18	1.10	0.59	0.39	1.05	0.74	0.63
T#2_N506	0.05	0.06	0.04	0.06	0.05	0.05	0.19	0.19	0.16	0.23	0.19	0.19
L#17_N701	0.06	0.05	0.02	0.07	0.06	0.03	0.40	0.25	0.12	0.37	0.28	0.16
L#3_N703	0.32	0.23	0.19	0.23	0.18	0.16	1.00	0.57	0.51	0.88	0.57	0.45
L#8_N752	0.19	0.12	0.08	0.17	0.10	0.11	1.09	0.80	0.59	0.83	0.85	0.48
L#14_N753	0.13	0.12	0.12	0.13	0.14	0.19	0.54	0.52	0.44	0.72	0.56	0.44
L#22_N506	0.12	0.06	0.06	0.06	0.05	0.08	0.45	0.29	0.31	0.21	0.22	0.18
RCIxBPA2	9.67E-04	1.46E-03	4.70E-04	1.20E-03	1.05E-03	6.77E-04	5.25E-03	4.95E-03	3.03E-03	5.61E-03	4.56E-03	2.97E-03
Fobj	0.16	0.20	0.13	0.27	0.20	0.19	1.27	0.72	0.48	51.94	0.78	0.73

¹⁰Todos os valores são erros médios relativos, exceto para as restrições de igualdade RCIxBPA e RCIxBPA2, em que são apresentados os erros absolutos.

Tabela V-XI - NÚMERO DE PARÂMETROS¹¹ DOS METAMODELOS

VARIÁVEIS	K95-II	K133-II	K186-II	N95-III	N133-III	N186-III
T_CONT_N753	33	54	52	40	76	61
DL_85	46	58	63	65	69	81
L#10_N506	47	59	74	71	71	76
F_NLI	24	32	25	36	41	36
L#10_N507	28	26	28	33	36	41
DTI_PSECO	29	23	44	27	21	37
DTI_PIE	27	29	28	51	61	34
V_N703	34	39	55	27	27	65
SBO_PSECO	44	45	39	57	61	61
SBO_PIE	43	47	44	46	66	57
V_N753	39	54	49	43	40	66
RCixBPA	47	57	62	40	57	71
F_SD51	34	36	30	66	61	28
F_HSBO	35	43	52	45	49	43
T#2_N506	40	47	50	37	53	43
L#17_N701	42	52	52	71	71	66
L#3_N703	34	35	39	37	45	49
L#8_N752	47	50	49	61	57	57
L#14_N753	17	30	27	41	40	51
L#22_N506	45	38	56	45	45	53
RCixBPA2	44	74	59	61	91	57

¹¹Pesos para as redes neuronais e vetores β e θ para os modelos kriging.

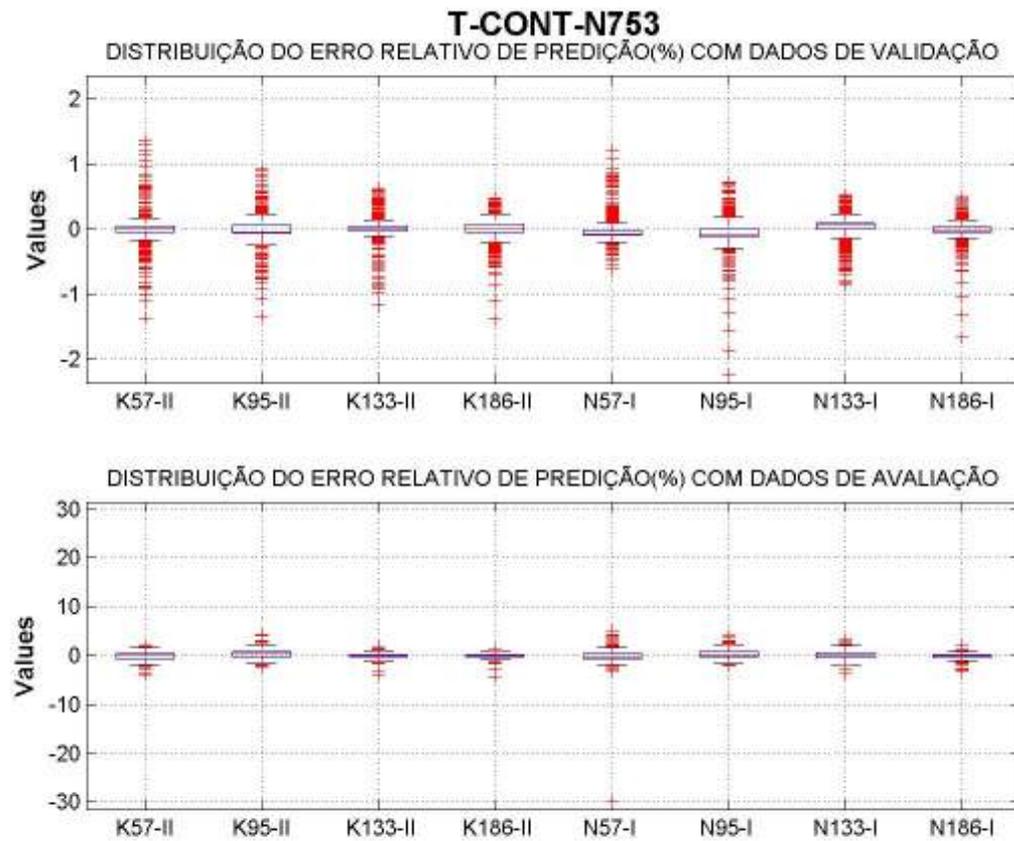


Figura V-15 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

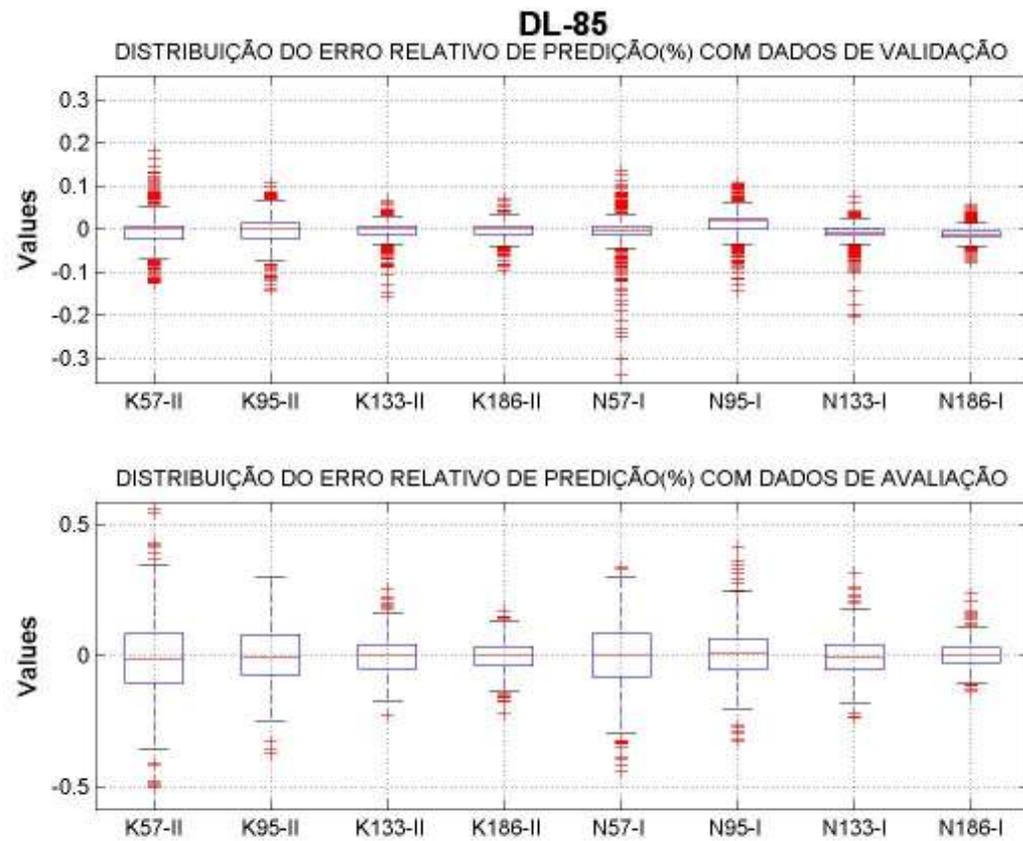


Figura V-16 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

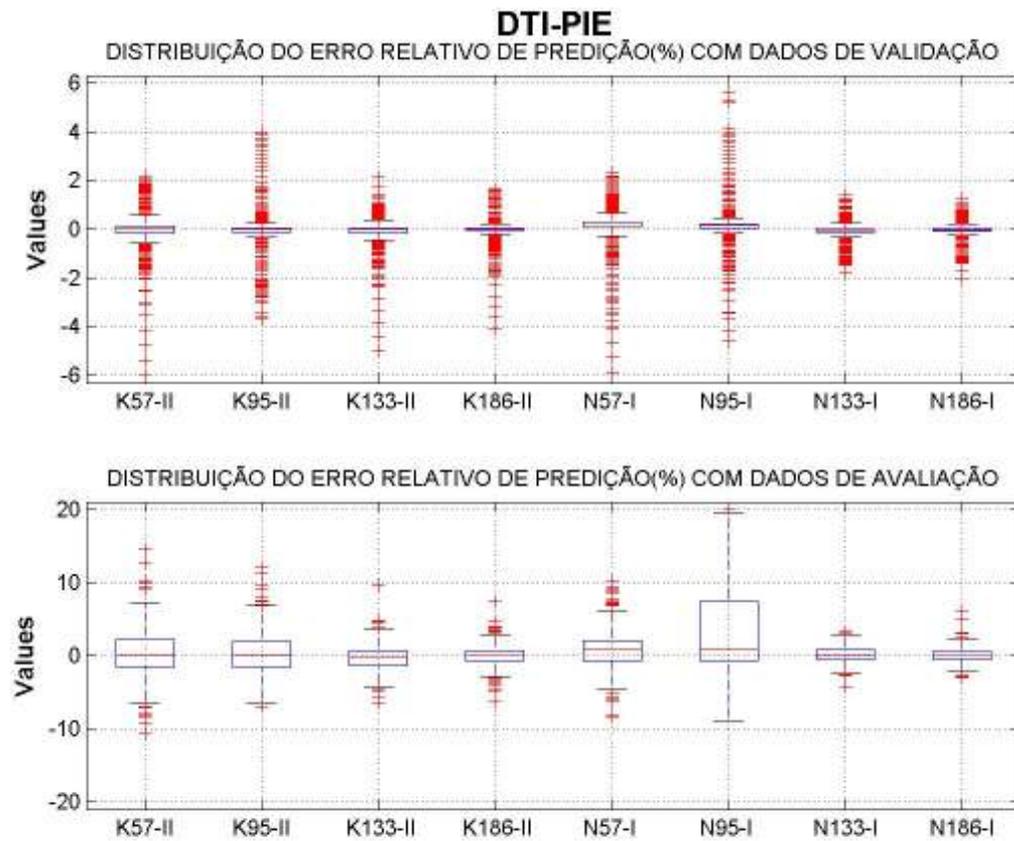


Figura V-17 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

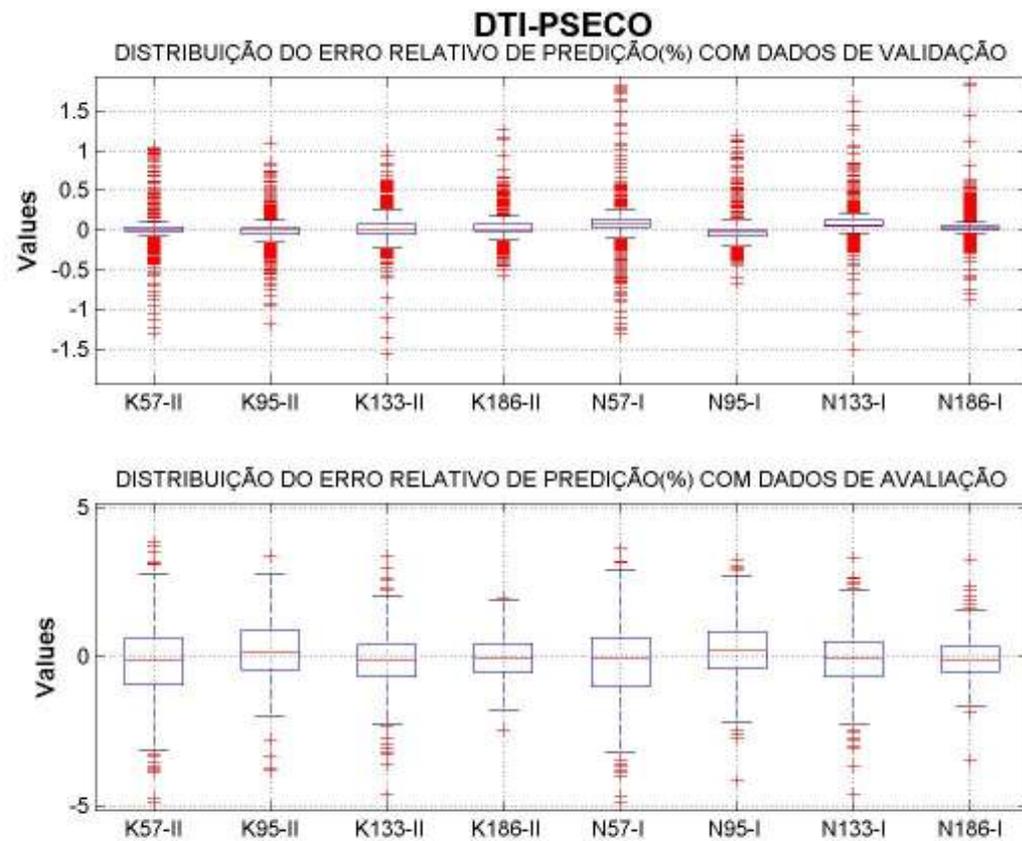


Figura V-18 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

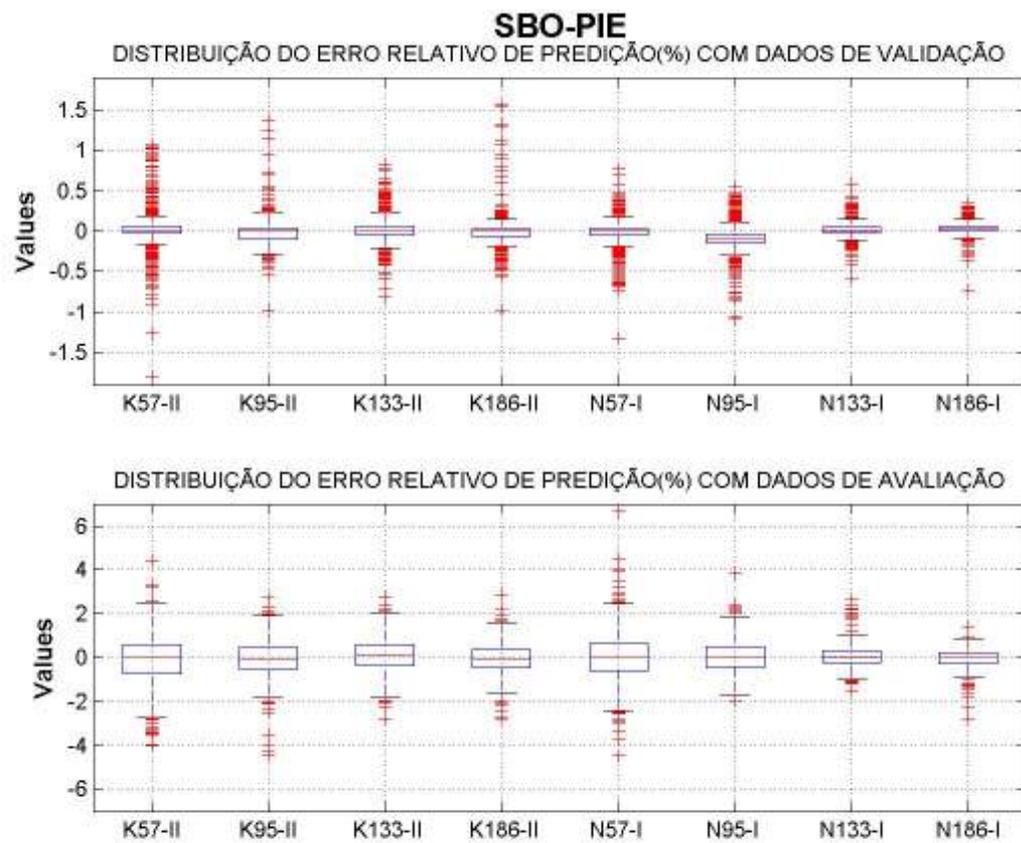


Figura V-19 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

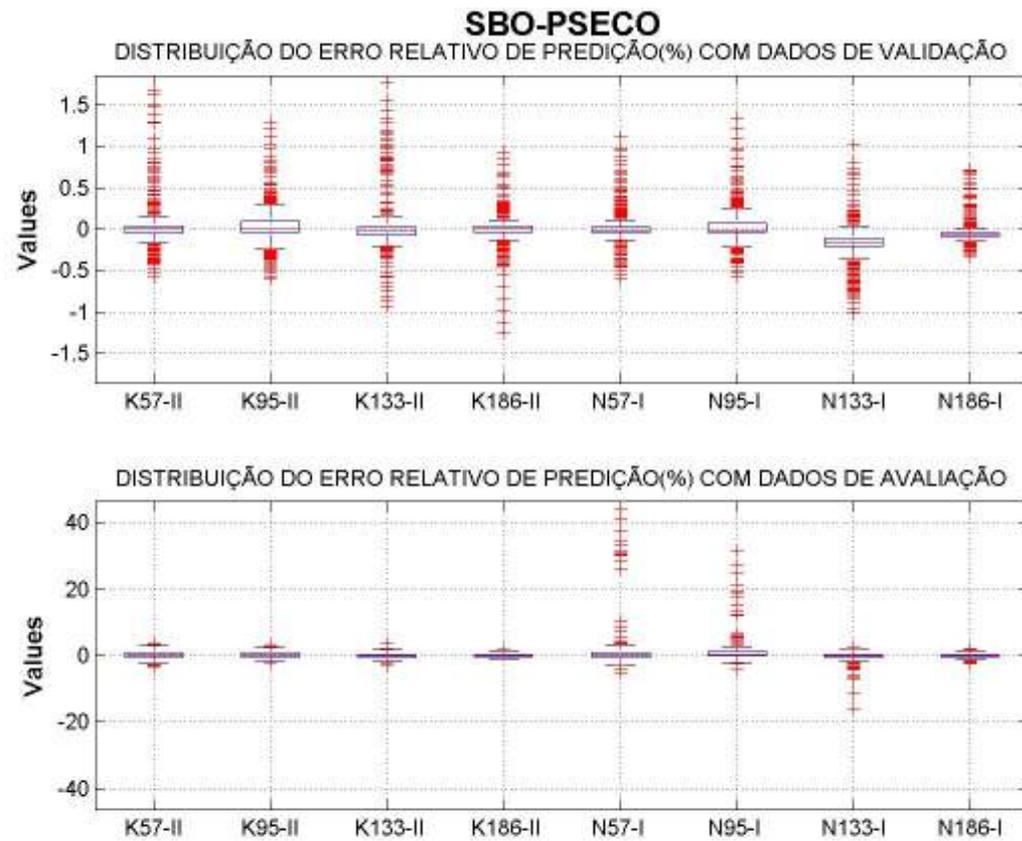


Figura V-20 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

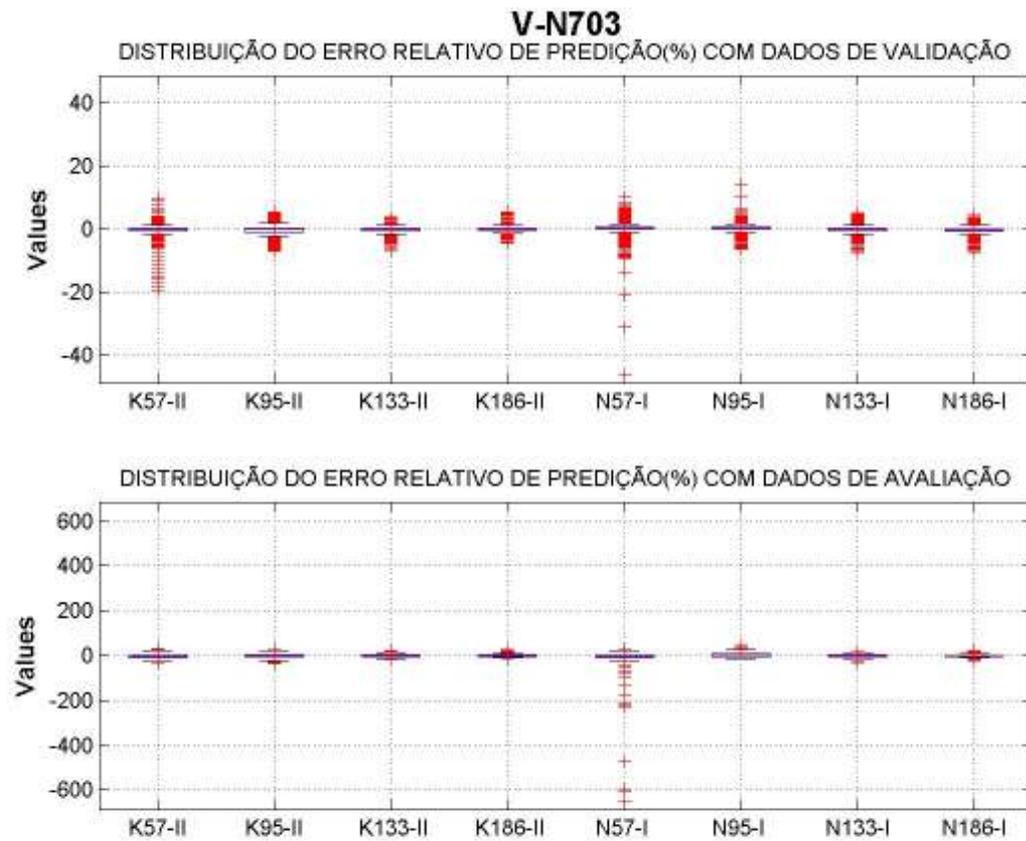


Figura V-21 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

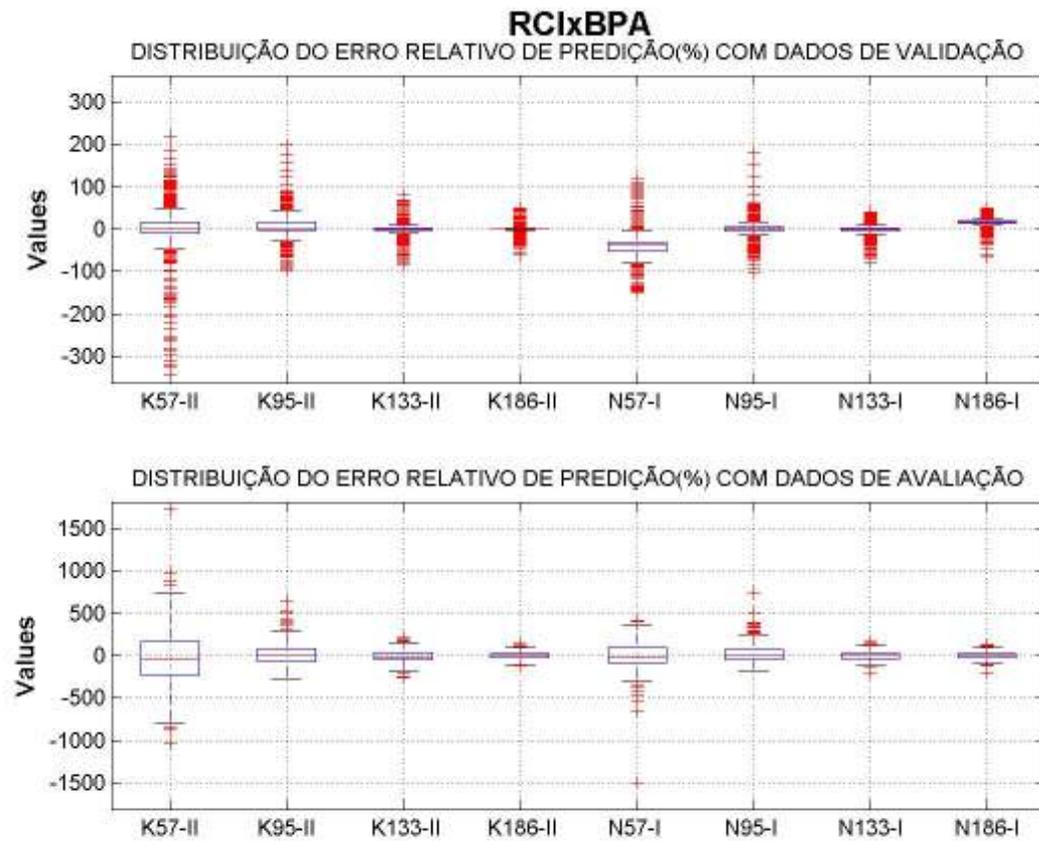


Figura V-22 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

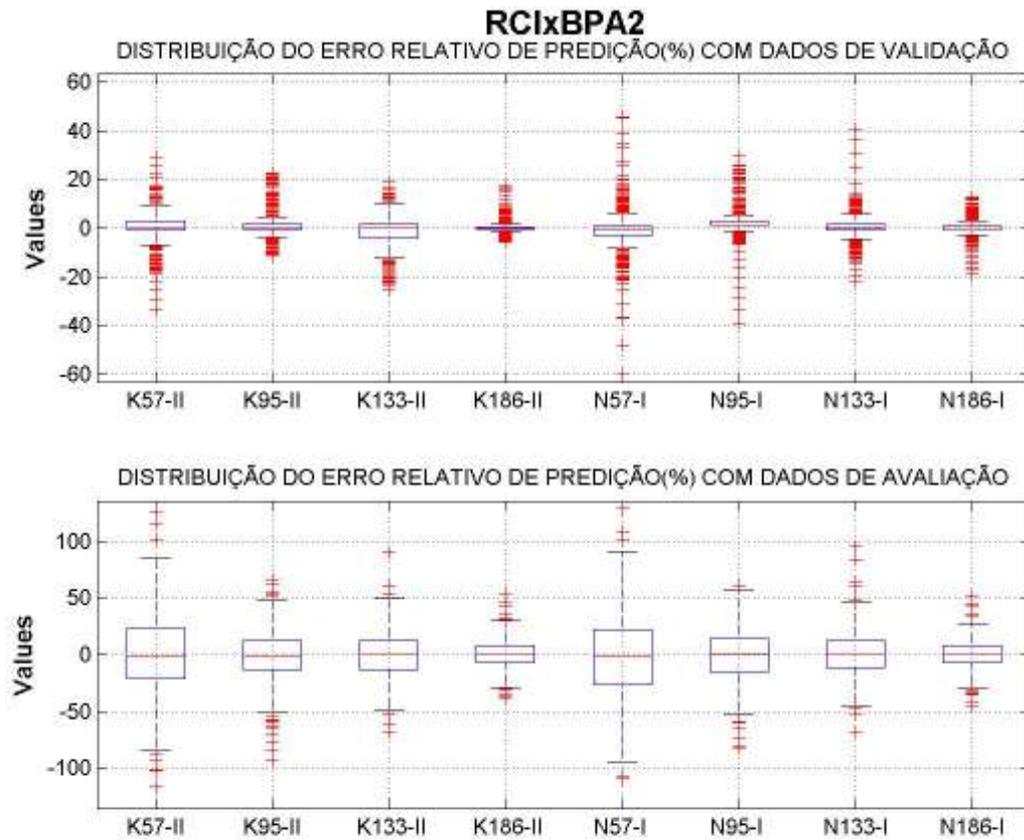


Figura V-23 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

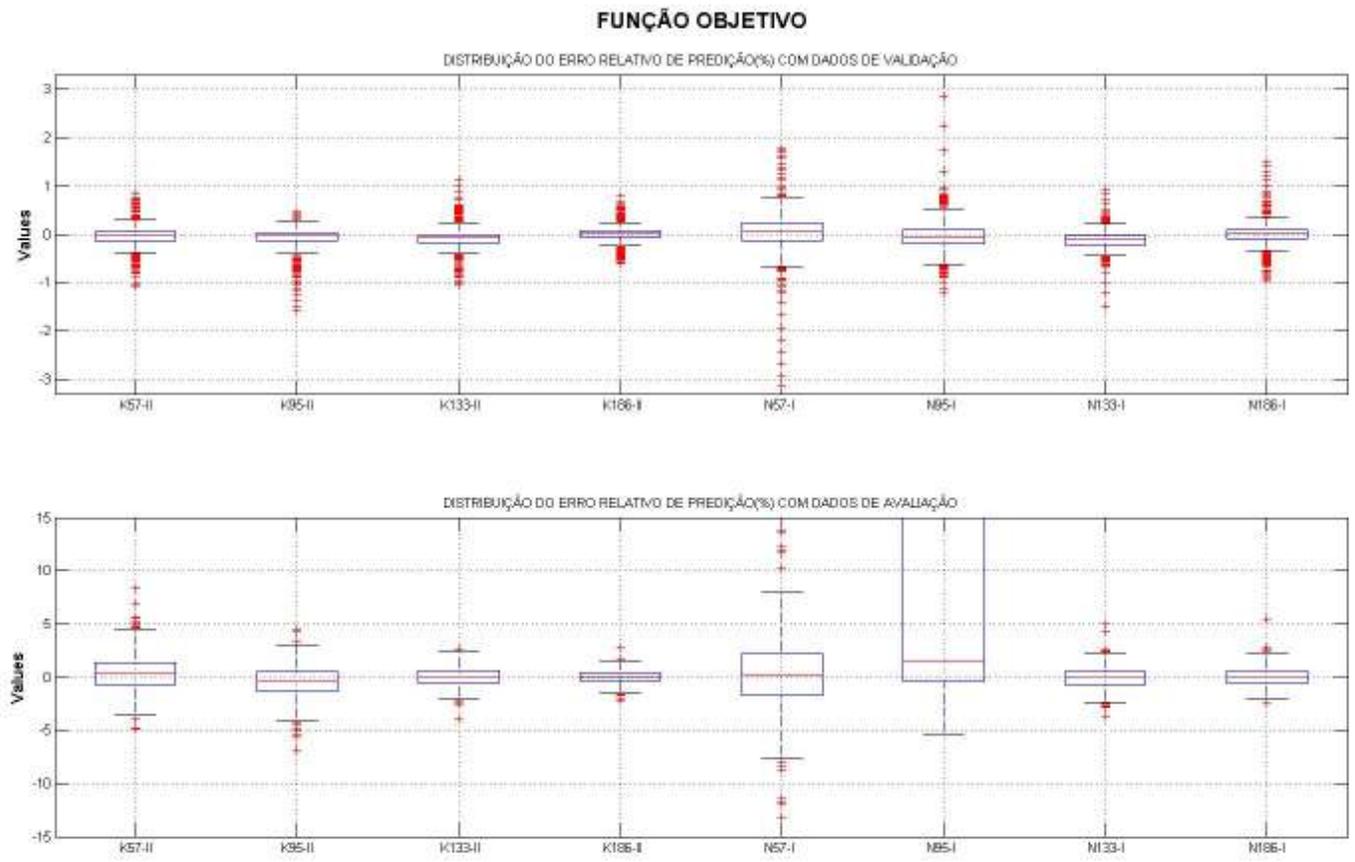


Figura V-24 – Comparação do desempenho de modelos *kriging* e redes neurais.

VI. OTIMIZAÇÃO BASEADA EM METAMODELOS

Este trabalho visa o desenvolvimento de uma metodologia que permita a utilização de metamodelos na otimização em tempo real de processos. Este capítulo mostra a metodologia proposta para fazê-lo, que se baseia nos procedimentos tipicamente utilizados para projeto ótimo baseado em metamodelos.

Muitas das propostas para projeto ótimo com metamodelos (BERNARDO *ET AL.*, 1991, WANG, 2003, SANTNER, 2003) apresentam uma linha geral similar, como a que é apresentada na Figura VI-1.

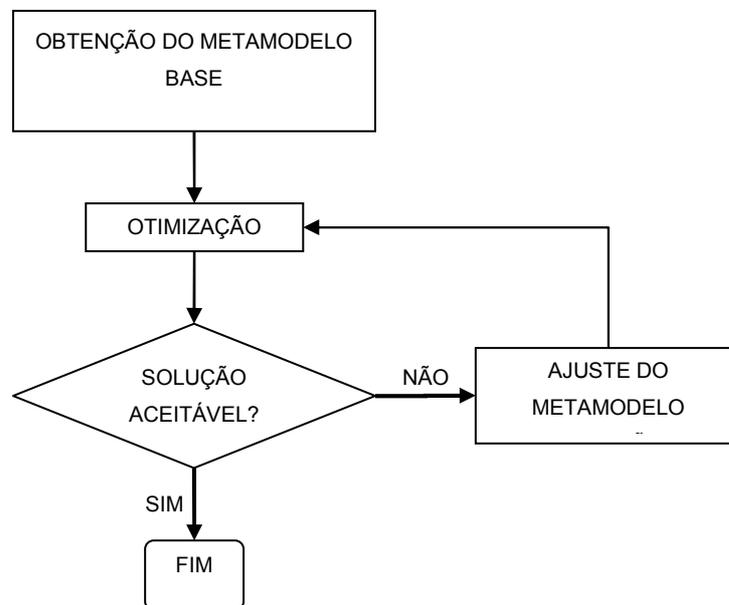


Figura VI-1 - Procedimento típico para otimização com metamodelos

Quando metamodelos são utilizados em atividades de projeto, todas as etapas estão sujeitas à intervenção humana. Ao longo do procedimento iterativo de projeto, os metamodelos e os resultados podem ser avaliados de diferentes formas, utilizando-se inclusive ferramentas gráficas. É possível eliminar variáveis dos modelos reduzidos e redefinir o espaço de busca em função de critérios subjetivos.

Ao adaptar o uso de metamodelos para aplicações em tempo real, ferramentas não-automáticas como gráficos para análise de sensibilidade ou verificação da aderência do metamodelo ao modelo rigoroso não podem ser utilizados. Outro aspecto importante de um ambiente em tempo real, é a possibilidade de alterações

significativas no comportamento do processo, em consequência de alterações de parâmetros como a composição de correntes de processo, a capacidade de troca térmica de permutadores de calor, características de catalisadores ou vazões internas de uma coluna de destilação. Mesmo que (como ocorre em muitos casos) estas propriedades não sejam mensuráveis, um modelo rigoroso do processo em questão poderá ter parâmetros ajustáveis que permitirão que suas respostas permaneçam confiáveis. Contudo, um metamodelo construído a partir de respostas de um modelo rigoroso para um conjunto específico de parâmetros não necessariamente apresentará respostas aceitáveis para um novo conjunto de parâmetros de processo. Assim, aplicações em tempo real de metamodelos poderão requerer um mecanismo para ajuste e adaptação de suas respostas quando ocorrerem mudanças no comportamento do processo, e conseqüentemente nas respostas do modelo rigoroso correspondente.

VI.1. UM PROCEDIMENTO ADAPTATIVO PARA OTIMIZAÇÃO COM METAMODELOS

O procedimento de otimização seqüencial por aproximações (SAO) proposto por GIUNTA e ELDRED (2000), descrito no capítulo II, incorpora um mecanismo de adaptação que se baseia no ajuste local do modelo rigoroso por polinômios de baixa ordem válidos dentro da região de confiança vigente. Neste trabalho os autores optaram por abrir mão das condições de consistência na eq. (II-4) em prol da redução no esforço computacional.

A metodologia proposta neste trabalho para otimização baseada em metamodelos constitui-se na utilização de um procedimento SAO similar ao de GIUNTA e ELDRED (2000), combinado a aspectos dos procedimentos para projeto ótimo baseado em metamodelos *kriging* propostos na literatura. Contudo, para viabilizar a sua utilização em tempo real, é necessário que os procedimentos para avaliação da precisão das predições dos metamodelos e o mecanismo de adaptação do mesmo a diferentes regiões do espaço de busca possam ser executados de forma automática.

VI.1.1. Aspectos do procedimento SAO proposto

Aproximações do modelo rigoroso

O modelo matemático original será aproximado globalmente por um metamodelo como os obtidos no capítulo V. Ao longo do procedimento SAO o metamodelo será

localmente adaptado através de aproximações secundárias válidas dentro da região de confiança vigente. A necessidade de utilização de aproximações secundárias é justificada pelo menor esforço computacional potencialmente envolvido em comparação à alternativa de reajustar os parâmetros do metamodelo diretamente.

Quando um metamodelo é utilizado em lugar do modelo rigoroso, haverá um erro de predição, como o definido abaixo:

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_0) + \varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (\text{VI-1})$$

Considera-se que o erro de predição ε seja conseqüência de duas contribuições: erros causados por mudanças em parâmetros intrínsecos ao modelo rigoroso ($\mathbf{u} \neq \mathbf{u}_0$), ε^{PAR} , e erros inerentes à incapacidade do metamodelo de representar perfeitamente a função original, mesmo que $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$, aqui designado por ε^{FIT} :

$$\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \varepsilon^{\text{PAR}}(\mathbf{u}) + \varepsilon^{\text{FIT}}(\mathbf{x}) \quad (\text{VI-2})$$

As relações entre ε^{PAR} , ε^{FIT} e \hat{y} não são necessariamente aditivas como em (VI-1) e (VI-2), porém adota-se aqui esta forma como uma simplificação do comportamento real.

Uma vez que as formas das funções ε^{PAR} e ε^{FIT} sejam definidas, torna-se possível propor procedimentos de ajuste contínuo do metamodelo a diferentes situações. Contudo, se é conhecido que uma determinada variável influencia o processo e é mensurável, esta variável pode ser incorporada ao metamodelo *a priori*. Em uma aplicação em tempo real, o seu valor poderia ser previamente medido ou estimado e fornecido ao metamodelo, em um procedimento similar às etapas de ajuste de parâmetros e reconciliação de dados em tempo real descritas no capítulo I. Com base nesta premissa, parte-se do pressuposto de que (i) a contribuição do termo ε^{PAR} pode ser considerada desprezível em comparação ao termo ε^{FIT} ; e (ii) ε^{FIT} será função exclusiva das variáveis de processo que são variáveis de decisão no problema de otimização que se pretende resolver:

$$y(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = \hat{y}(\mathbf{x}, \mathbf{u}_0) + \varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (\text{VI-3})$$

$$\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \cong \varepsilon^{\text{FIT}}(\mathbf{x}) \quad (\text{VI-4})$$

Diferentes formas de representar a função do erro de predição podem ser imaginadas, como por exemplo uma função quadrática:

$$\varepsilon^{\text{FIT}} = b_{i0} + \sum_{j=1}^{nX} b_{ij} \cdot x_j + \sum_{j=1}^{nX} \sum_{k=1}^{nX} c_{ijk} \cdot x_j \cdot x_k, i = 1 \dots nY \quad (\text{VI-5})$$

Pode-se ainda propor uma função mais complexa para a correção, como por exemplo o modelo *kriging* secundário proposto por BOOKER (2000).

$$\varepsilon^{\text{FIT}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) = z_i^{\text{KRG}}(\mathbf{x}, \mathbf{u}) \quad (\text{VI-6})$$

Adaptação do metamodelo

Considerando a necessidade de que o procedimento de adaptação seja automático e ágil, optou-se por utilizar a função quadrática em (VI-5). Esta escolha é ainda vantajosa por um outro motivo. Sendo um modelo linear em relação aos parâmetros, a cada etapa de adaptação é possível utilizar o procedimento *Forward Stepwise Regression* (FSR) para seleção das influências efetivamente significativas em diferentes regiões do espaço de busca. Isto permite a redução no número de simulações com o modelo rigoroso para a obtenção dos dados necessários à execução do ajuste dos parâmetros do modelo secundário, e por conseqüência a minimização do esforço computacional.

Para a determinação dos locais dentro da região de confiança em que seriam computados novos valores com o modelo rigoroso, duas alternativas foram preliminarmente avaliadas. A primeira delas, seria utilizar pontos uniformemente distribuídos em torno do centro da região de confiança, enquanto o segundo seria gerar um planejamento experimental LHD dentro dos limites da região. Testes preliminares mostraram resultados mais satisfatórios com o planejamento LHD, que foi adotado.

Um aspecto do procedimento SAO que pode ser útil quando o modelo rigoroso está sujeito a problemas na obtenção de sua solução (p.ex. a não convergência de um procedimento iterativo) está no fato de que erros deste tipo não inviabilizam o procedimento de otimização. Foi implementado um processo lógico que detecta a ocorrência de erros na solução do modelo rigoroso e calcula novos valores em pontos alternativos, complementando o conjunto de dados necessários para a atualização do modelo. Com isto, é possível conferir maior confiabilidade ao procedimento de otimização.

Ajuste da região de confiança

Em seu trabalho, GIUNTA e ELDRED (2000) atrelaram a precisão do modelo reduzido ao mecanismo que determina se a região de confiança será ampliada, reduzida ou mantida. A precisão deste modelo reduzido foi expressa através do parâmetro ρ , definido pelas equações (II-5) a (II-7). Ao tentar aplicar o mecanismo de atualização da região de confiança aos exemplos estudados, verificou-se que o critério original era, em muitas situações insuficiente. Quando a região de confiança torna-se pequena, os valores das funções no centro da região de confiança e na solução tornam-se muito próximos. Nestes casos, o parâmetro ρ pode assumir grandes valores positivos ou negativos apenas por que as diferenças entre os valores das funções são muito próximos de zero, mesmo que a precisão do modelo já seja satisfatória. Isto acarreta redução excessiva e desnecessária da região de confiança. A métrica para avaliação do modelo foi mantida, porém complementada com uma comparação adicional do erro de predição a um valor máximo pré-estabelecido. A Tabela VI-I resume o procedimento implementado.

**Tabela VI-I - PROCEDIMENTO DE ATUALIZAÇÃO DA REGIÃO DE CONFIANÇA (RC)
ADAPTADO A PARTIR DA ESTRATÉGIA SAO DE GIUNTA E ELDRED (2000)**

ρ^k, Δ^k	Cenário	Ações	$x_c^{k+1} =$	$\Delta^{k+1} =$
$\rho^k \leq 0$	Aproximações imprecisas	Rejeitar x^k e reduzir RC	x_c^k	$0.25 \Delta^k$
$\rho^k \leq 0.25$ ou $\varepsilon^{FIT} > v\varepsilon^{MAX}$	Aproximações marginalmente precisas	Reduzir RC	x^k	$0.25 \Delta^k$
$0.25 < \rho^k < 0.75$ ou $\varepsilon^{MAX} < \varepsilon^{FIT} < v\varepsilon^{MAX}$	Aproximações moderadamente precisas	Manter RC	x^k	Δ^k
$(\rho^k \geq 0.75$ ou $\varepsilon^{FIT} \leq \varepsilon^{MAX})$ e $\ x^k - x_c^k\ _\infty < \Delta^k$	Aproximações precisas e x^k fica dentro da RC	Manter RC	x^k	Δ^k
$(\rho^k \geq 0.75$ ou $\varepsilon^{FIT} \leq \varepsilon^{MAX})$ e $\ x^k - x_c^k\ _\infty = \Delta^k$	Aproximações precisas e x^k fica na borda da RC	Ampliar RC	x^k	$2\Delta^k$

Dois outros parâmetros foram incorporados ao algoritmo. Limites máximos e mínimos para o fator de ampliação da região de confiança foram estabelecidos. O problema pode ser iniciado utilizando todo o espaço de busca disponível. Contudo, a partir da primeira adaptação do metamodelo, a maior fração do espaço de busca que um subproblema de otimização poderá assumir fica limitado à fração máxima estabelecida. Isto foi feito porque se observou, em certas situações, que a qualidade da adaptação do metamodelo pode ser comprometida quando as sub-regiões do espaço de busca tornam-se muito amplas. O limite mínimo do fator foi definido para

impedir que a solução do problema de otimização torne-se inviável pelo fato de a região de busca do sub-problema ter sido excessivamente reduzida.

Critérios de terminação

Para que uma solução intermediária possa ser considerada satisfatória, ela deverá atender aos seguintes critérios:

- Precisão do modelo aceitável, de acordo com os critérios definidos na Tabela VI-I;

- Convergência da função objetivo:

$$\begin{aligned} \hat{f}^k(x^*) - \hat{f}^{k-1}(x^*) &\leq \text{tol} \\ \frac{\hat{f}^k(x^*) - \hat{f}^{k-1}(x^*)}{\hat{f}^{k-1}(x^*)} &\leq \text{tolr} \end{aligned} \quad (\text{VI-7})$$

- Convergência da das variáveis de decisão:

$$\|x\|_2 \leq \text{tolX} \quad (\text{VI-8})$$

onde tol, tolr e tolX são tolerâncias definidas para o problema.

Condições de erro que levam à interrupção do procedimento SAO são:

- Impossibilidade de realizar a adaptação do modelo;
- Redução da região de confiança a valor menor que o mínimo permitido;
- Número máximo de iterações atingido

A Figura VI-2 apresenta um esquema do procedimento SAO implementado.

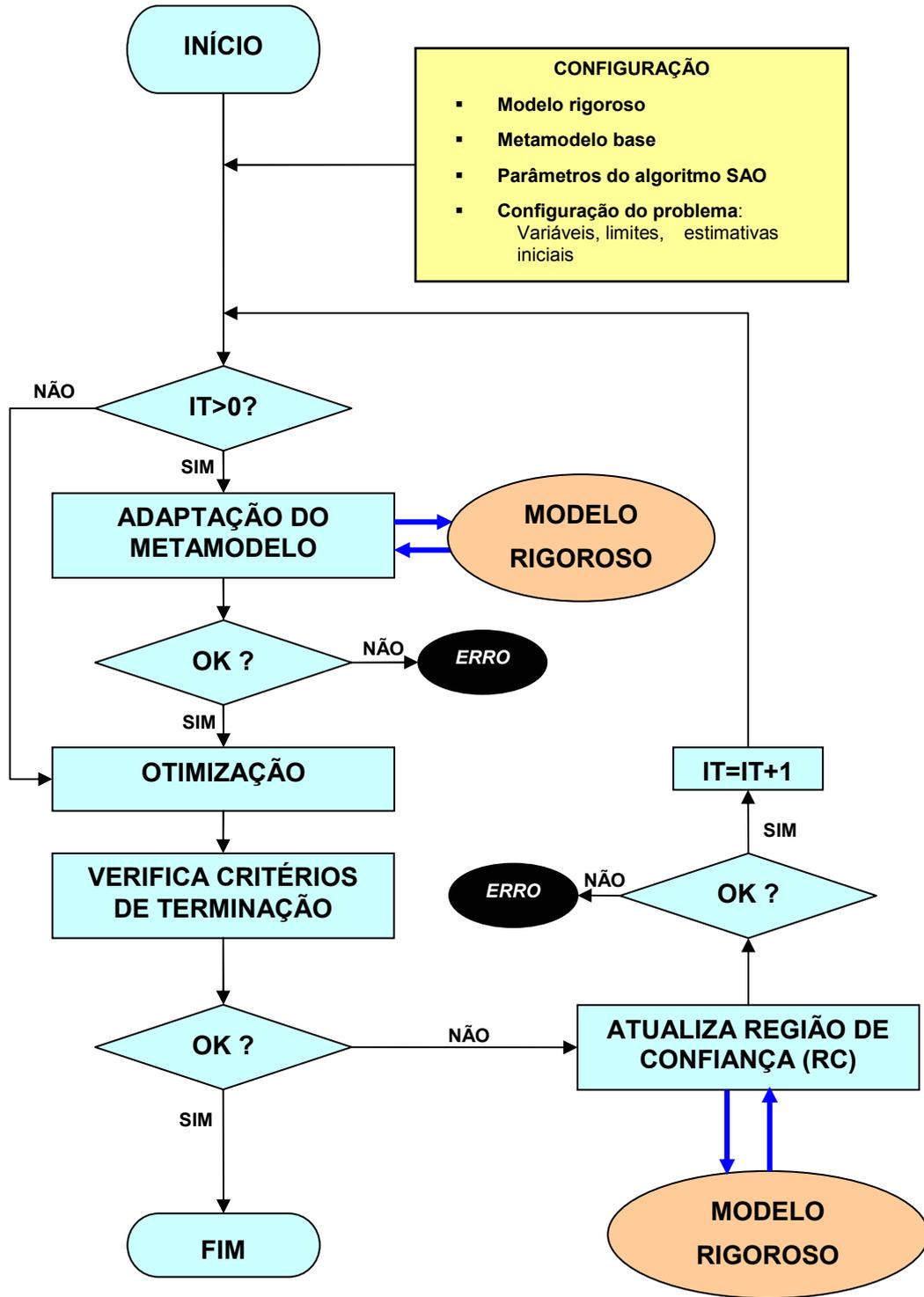


Figura VI-2 - Esquema do procedimento SAO proposto.

VI.2. ESTUDO DE CASOS

VI.2.1. Exemplo P1

O procedimento SAO descrito na seção anterior foi utilizado na solução do exemplo P1. Foi escolhido como metamodelo o modelo *kriging* obtido com 15 pontos (K15-I). A razão desta escolha foi o fato de este ter apresentado o pior desempenho entre todos os metamodelos gerados. Este teste pretende verificar se este metamodelo pode ser adaptado pelo procedimento proposto para proporcionar melhores resultados, e verificar o esforço computacional envolvido em fazê-lo.

Foram propostos diferentes casos para os quais o problema P1 foi resolvido (ver Tabela VI-II). Os casos I a III consistem em resolver o problema de otimização original com condições iniciais diferentes. Nos demais casos os parâmetros do modelo, ω , α e ϕ foram alterados, de forma a modificar as características das funções originais do problema.

Tabela VI-II - CASOS PARA AVALIAÇÃO DO PROCEDIMENTO SAO COM O EXEMPLO P1

CASO	x_1^0	x_2^0	ω	α	ϕ
BASE	0.0000	0.0000	6.0	1.0	1.0
I	-0.4000	-0.4000	6.0	1.0	1.0
II	1.0000	1.0000	6.0	1.0	1.0
III	-0.4000	1.0000	6.0	1.0	1.0
IV	0.0000	0.0000	6.0	1.0	0.5
V	0.0000	0.0000	6.0	0.7	1.0
VI	0.0000	0.0000	5.0	1.0	1.0
VII	0.0000	0.0000	5.5	0.7	1.0
VIII	0.0000	0.0000	7.0	1.0	1.0
IX	0.0000	0.0000	6.0	0.9	1.0
X	0.0000	0.0000	6.0	1.0	1.1
XI	0.0000	0.0000	7.0	0.9	1.1
XII	0.0000	0.0000	7.0	0.7	1.0

Os problemas de otimização referentes a cada caso foram resolvidos com o modelo rigoroso e a abordagem SAO e seus resultados são apresentados na Tabela VI-III. Para facilitar a comparação destes resultados, os desvios relativos entre os resultados baseados no metamodelo e através do procedimento SAO foram computados e apresentados na Tabela VI-IV. Pode-se observar que o procedimento SAO proporciona melhora significativa dos resultados obtidos exclusivamente com o

metamodelo. Dos treze casos, em apenas duas situações (casos X e XI) o algoritmo falhou em aperfeiçoar a solução. Nestes casos, o problema inicial com o metamodelo base (K15-I) não chegou a uma solução aceitável, como se pode constatar pelo valor da restrição de igualdade $h(x)$. No Caso IV ocorreu situação similar, mas o procedimento SAO obteve aperfeiçoamento satisfatório da solução. A última coluna da Tabela VI-IV mostra a razão entre o número de execuções do modelo rigoroso quando este foi utilizado para a otimização e o número de execuções do modelo rigoroso ao longo do procedimento SAO. Excluindo-se da análise os casos em que o algoritmo falhou em aperfeiçoar a solução inicial, pode-se constatar que houve redução do número de execuções do modelo rigoroso em todos os demais casos exceto um (caso VII). Estes resultados sugerem que o procedimento SAO tem potencial para ser utilizado em procedimentos de otimização visando a redução do esforço computacional.

Tabela VI-III - CASOS PARA AVALIAÇÃO DO PROCEDIMENTO SAO COM O EXEMPLO P1

CASO	MODELO RIGOROSO					METAMODELO (K15-I)					SAO (K15-I)					
	$f^{RIG}(x^*)$	$h^{RIG}(x^*)$	x_1^*	x_2^*	NS_RIG	$f^{RIG}(x^*)$	$f(x^*)$	$h^{RIG}(x^*)$	x_1^*	x_2^*	$f^{RIG}(x^*)$	$f(x^*)$	$h^{RIG}(x^*)$	x_1^*	x_2^*	NS_SAO
BASE	-0.2292	8.8E-11	0.6715	0.3745	56	-0.2029	-0.2228	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2292	-0.2292	-5.8E-07	0.6721	0.3731	23
I	-0.2292	7.0E-11	0.6715	0.3745	42	-0.2029	-0.2228	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2292	-0.2292	-5.8E-07	0.6721	0.3731	23
II	-0.2292	2.8E-10	0.6715	0.3745	52	-0.2029	-0.2228	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2292	-0.2292	-5.8E-07	0.6721	0.3731	23
III	-0.2292	2.4E-10	0.6715	0.3745	46	-0.2029	-0.2228	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2292	-0.2292	-5.8E-07	0.6721	0.3731	23
IV	-0.1372	3.2E-12	0.8581	0.3441	43	-0.2029	-0.2228	-0.3889	0.6904	0.3258	-0.1371	-0.1372	5.0E-05	0.8584	0.3421	26
V	-0.2354	2.2E-11	0.6593	0.3861	59	-0.2029	-0.2228	4.2E-3	0.6904	0.3258	-0.2353	-0.2354	-0.0059	0.6608	0.3754	46
VI	-0.2481	7.3E-12	0.6321	0.4700	58	-0.2029	-0.2123	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2358	-0.2357	-6.4E-07	0.6675	0.3847	36
VII	-0.2442	1.3E-12	0.6359	0.4322	52	-0.2029	-0.2196	4.3E-3	0.6904	0.3258	-0.2456	-0.2469	-0.0095	0.6470	0.3985	69
VIII	-0.2177	5.6E-11	0.6948	0.3132	67	-0.2029	-0.2169	6.4E-4	0.6904	0.3258	-0.2170	-0.2171	-3.1E-07	0.6898	0.3266	57
IX	-0.2303	9.5E-11	0.6682	0.3777	61	-0.2029	-0.2228	1.9E-3	0.6904	0.3258	-0.2303	-0.2303	3.1E-07	0.6670	0.3806	63
X	-0.2542	8.9E-12	0.6251	0.3859	58	-0.2029	-0.2228	0.0803	0.6904	0.3258	-0.2229	-0.2227	0.0798	0.6903	0.3256	23
XI	-0.2412	6.9E-11	0.6505	0.3226	57	-0.2029	-0.2169	0.0815	0.6904	0.3258	-0.2171	-0.2169	0.0810	0.6903	0.3256	24
XII	-0.21846	6.2E-11	0.6905	0.3201	54	-0.2029	-0.2169	4.2E-3	0.6904	0.3258	-0.2174	-0.2174	-7.6E-05	0.6823	0.3379	46

f^{RIG} – Valor da função objetivo computada com o modelo rigoroso

f – Valor da função objetivo computada com o metamodelo

h^{RIG} – Valor final da restrição de igualdade computada com o modelo rigoroso para os valores de x^* .

NS_RIG – No de simulações na otimização com o modelo rigoroso

NS_SAO – No de execuções com o modelo rigoroso ao longo do procedimento SAO

Tabela VI-IV – DESVIOS RELATIVOS (%) EM RELAÇÃO À OTIMIZAÇÃO COM O MODELO RIGOROSO NO EXEMPLO P1

CASO	METAMODELO (K15-I)					SAO (K15-I)					
	$f^{RIG}(x^*)$	$f(x^*)$	$h^{RIG}(x^*)$	X_1^*	X_2^*	$f^{RIG}(x^*)$	$f(x^*)$	$h^{RIG}(x^*)$	X_1^*	X_2^*	NS_RIG/NS_SAO
BASE	11.5	2.8	-6.4E-04	-2.8	13.0	0.0	0.0	5.8E-07	-0.1	0.4	41.1
I	11.5	2.8	-6.4E-04	-2.8	13.0	0.0	0.0	5.8E-07	-0.1	0.4	54.8
II	11.5	2.8	-6.4E-04	-2.8	13.0	0.0	0.0	5.8E-07	-0.1	0.4	44.2
III	11.5	2.8	-6.4E-04	-2.8	13.0	0.0	0.0	5.8E-07	-0.1	0.4	50.0
IV	-47.9	-62.4	3.9E-01	19.5	5.3	0.1	0.0	-5.0E-05	0.0	0.6	60.5
V	13.8	5.4	-4.2E-03	-4.7	15.6	0.0	0.0	5.9E-03	-0.2	2.8	78.0
VI	18.2	14.4	-6.4E-04	-9.2	30.7	5.0	5.0	6.4E-07	-5.6	18.1	62.1
VII	16.9	10.1	-4.3E-03	-8.6	24.6	-0.6	-1.1	9.5E-03	-1.7	7.8	132.7
VIII	6.8	0.4	-6.4E-04	0.6	-4.0	0.3	0.3	3.1E-07	0.7	-4.3	85.1
IX	11.9	3.3	-1.9E-03	-3.3	13.7	0.0	0.0	-3.1E-07	0.2	-0.8	103.3
X	20.2	12.4	-8.0E-02	-10.4	15.6	12.3	12.4	-8.0E-02	-10.4	15.6	39.7
XI	15.9	10.1	-8.1E-02	-6.1	-1.0	10.0	10.1	-8.1E-02	-6.1	-0.9	42.1
XII	7.1	0.7	-4.2E-03	0.0	-1.8	0.5	0.5	7.6E-05	1.2	-5.6	85.2

h^{RIG} – Valor final da restrição de igualdade computada com o modelo rigoroso para os valores de x^* .

VI.2.2. Exemplo P2

Descrição dos casos para estudo

Para estudar a aplicação da abordagem SAO à otimização do caso P2, foram propostos cinco casos para estudo além do caso base. Em cada um destes casos, parâmetros do modelo matemático do processo que influenciam as suas respostas foram alterados. As alterações destes parâmetros procuram representar possíveis alterações no comportamento do processo real. Uma das perturbações mais significativas que influenciam as unidades de destilação e de solventes da RECAP é a composição da carga. Para simular esta perturbação, foram introduzidas alterações na densidade da carga ($^{\circ}\text{API}$), referente aos casos I e II. A simulação PETROX utilizada possui um módulo controlador (ver ANEXO VII) que altera a proporção entre as duas correntes petróleo que compõem a carga da unidade, de forma a ajustar a densidade da carga para o valor especificado. A alteração nesta proporção acarreta mudanças na composição da carga. Nos casos III e IV altera-se o coeficiente global de troca térmica no refeedor lateral da torre atmosférica. Do ponto de vista de processo, estas alterações representariam a operação deste permutador de calor em diferentes condições – com maior ou menor grau de incrustação. Para o problema de otimização em questão, esta alteração representa mudanças no valor das restrições de igualdade RC1xBPA e RC1xBPA2 . O caso V, onde se altera o coeficiente global de troca térmica no condensador de topo da torre N753, procura representar uma condição onde este condensador possui maior capacidade de troca térmica.

Tabela VI-V - CASOS PARA ESTUDO DA ABORDAGEM SAO COM O EXEMPLO P2

Caso	Parâmetros		
	$^{\circ}\text{API}$ carga	U_{PPA_1} $\text{Kcal}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C})$	U_{COND_1} $\text{Kcal}/(\text{m}^2 \cdot \text{h} \cdot \text{C})$
Base	33.0	967	750
I	32.5	967	750
II	33.5	967	750
III	33.0	800	750
IV	33.0	1300	750
V	33.0	967	900

Para cada um dos casos para estudo, o problema de otimização foi resolvido baseado no modelo rigoroso (PETROX), por meio do algoritmo NPSOL. Em seguida, os mesmos problemas foram resolvidos através da abordagem SAO, proposta anteriormente. Foram utilizados os metamodelos obtidos com o conjunto de

treinamento de 186 pontos (K186-II e N186-III), em função de estes terem apresentado os melhores resultados anteriormente.

As tabelas VI-VII a VI-XII apresentam os resultados dos problemas de otimização, comparando a solução rigorosa (baseada no modelo PETROX e o algoritmo SQP/NPSOL) com as soluções obtidas com a estratégia SAO para os dois metamodelos. Destaques da avaliação realizada a partir destas tabelas são apresentados na Tabela VI-VI. As figuras VI-3 a VI-8 apresentam de forma gráfica as soluções dos problemas de otimização obtidos para todos os casos. Através destes gráficos pode-se comparar os valores finais escalonados para as restrições e as variáveis de decisão com o modelo rigoroso (PETROX), com os metamodelos (K186-II e N186-III), e através da abordagem SAO (também para os dois metamodelos).

Critérios para avaliação dos resultados

Para avaliação dos resultados obtidos, diferentes métricas ou critérios foram utilizados, e seus valores são apresentados na Tabela VI-VI. Para melhor compreensão da tabela, estes critérios são descritos a seguir.

- **Erro de predição da função Objetivo (ErrPredFob)** – Diferença relativa (%) entre os valores da função objetivo computados com o modelo rigoroso e com o metamodelo na solução SAO.

$$\text{Err Pr edFob} = 100 \times \frac{|F(x^{\text{SAO}}) - f(x^{\text{SAO}})|}{F(x^{\text{RIG}})} \quad (\text{VI-9})$$

onde:

- x^{SAO} - Solução do problema de otimização com a abordagem SAO
- x^{RIG} - Solução rigorosa do problema de otimização
- $F(x)$ - Valor da função objetivo computada com o modelo rigoroso em x
- $f(x)$ - Valor da função objetivo computada com o metamodelo em x

- **Desvio na função objetivo I (ΔFob1)** – Diferença relativa (%) entre os valores da função objetivo computados com o modelo rigoroso na solução rigorosa (x^{RIG}) e com o metamodelo na solução SAO (x^{SAO}).

$$\Delta\text{Fob1} = 100 \times \frac{|F(x^{\text{RIG}}) - f(x^{\text{SAO}})|}{F(x^{\text{RIG}})} \quad (\text{VI-10})$$

- **Desvio na função objetivo II (ΔFob2)** – Diferença relativa (%) entre os valores da função objetivo computados com o modelo rigoroso na solução rigorosa (x^{RIG}) e na solução SAO (x^{SAO}).

$$\Delta F_{ob2} = 100 \times \frac{|F(x^{RIG}) - F(x^{SAO})|}{F(x^{RIG})} \quad (VI-11)$$

- **Fração do benefício obtido (Benefício)** – Mede a fração (%) do benefício proporcionado com a solução rigorosa que pôde ser obtido com a abordagem SAO.

$$Beneficio = 100 \times \frac{|F(x^{SAO}) - F(x^0)|}{|F(x^{RIG}) - F(x^0)|} \quad (VI-12)$$

onde:

x^0 - Condição inicial do problema de otimização

- **Máximo desvio nas variáveis de decisão (Δx)** – Máximo desvio relativo (%) entre a solução SAO e a solução rigorosa. Duas variáveis de decisão foram excluídas deste cálculo, por razões a serem expostas adiante.
- **Máximo erro de predição nas restrições de desigualdade (ErrPred_g)** Máxima diferença relativa (%) entre os valores das restrições de desigualdade computados com o modelo rigoroso e com o metamodelo na solução SAO.

$$ErrPred_g = 100 \times \max \left\{ \frac{|G(x^{SAO}) - g(x^{SAO})|}{G(x^{RIG})} \right\} \quad (VI-13)$$

onde:

$G(x)$ - Vetor de restrições de desigualdade computadas com o modelo rigoroso em x

$g(x)$ - Vetor de restrições de desigualdade computadas com o metamodelo em x

- **Máximo desvio nas restrições de desigualdade (Δg)** - Máxima diferença relativa (%) entre os valores das restrições de desigualdade computados com o modelo rigoroso na solução rigorosa (x^{RIG}) e com o metamodelo na solução SAO (x^{SAO}). Este cálculo não contemplou os erros de predição das restrições que representam vazões internas das colunas de destilação.

$$\Delta g = 100 \times \max \left\{ \frac{|G(x^{RIG}) - g(x^{SAO})|}{G(x^{RIG})} \right\} \quad (VI-14)$$

- **Valores finais das restrições de igualdade RC1xBPA e RC1xBPA2 (h1, h2)** – Estes são os valores das restrições de igualdade computados com o modelo

rigoroso ao final do problema de otimização. Devem ser tão próximos de zero quanto possível.

- **Número de simulações com o modelo rigoroso (Nsim_SAO)** – Número total de simulações realizadas com o modelo rigoroso durante a solução SAO.
- **Razão entre o número de simulações com o modelo rigoroso na estratégia SAO e o número de simulações demandadas pela solução rigorosa (% Nsim)**
- **Número de restrições ativas existentes na solução rigorosa não encontradas pela abordagem SAO (Err_restr_I)** – Nas tabelas VI-VII a VI-XII, estes erros são indicados por “(1)”.
- **Número de restrições ativas encontradas pela abordagem SAO não existentes na solução rigorosa (Err_restr_II)** – Nas tabelas VI-VII a VI-XII, estes erros são indicados por “(2)”.

Discussão dos resultados

Em todos os casos a solução rigorosa do problema de otimização seguiu praticamente o mesmo padrão, com quase as mesmas restrições ativas em quase todos os casos. Entre os resultados obtidos com a abordagem SAO, três deles chegaram ao final sem que houvesse convergência da função objetivo: o Caso IV para os dois metamodelos e o Caso III para a rede neuronal. Estes resultados foram considerados como soluções, no entanto, porque a sua utilização não é necessariamente inviável. Pode-se observar que no Caso IV dois dos valores das restrições de igualdade são relativamente elevados (superiores a 10^{-3}). Contudo, como estes valores são ainda pequenos em relação ao valor da carga térmica no refeedor lateral ($\sim 8,0$ Gcal/h), deve-se avaliar se a solução obtida não seria ainda viável para implementação do ponto de vista de processo. Por outro lado, como o propósito dos Casos III e IV era exatamente avaliar a capacidade do algoritmo SAO de aproximar a solução rigorosa na situação em que a restrição de igualdade foi deslocada de sua posição original, a dificuldade de se obter a convergência pode ser interpretada como uma deficiência do algoritmo.

Os erros de predição da função objetivo e das restrições de desigualdade na solução final são pequenos, sugerindo que o procedimento de adaptação dos metamodelos foi relativamente bem-sucedido no que diz respeito à capacidade de realizar a aproximação do metamodelo a uma sub-região do espaço de busca. Contudo, o desvio observado para as restrições de desigualdade em relação à solução rigorosa mostrou ainda valores significativos para algumas variáveis. Estes desvios

correspondem em geral a variáveis que tiveram pouca influência no resultado final do procedimento de otimização, por não serem restrições ativas.

O desvio entre os valores das variáveis de decisão pode ser explicado por dois motivos. Algumas das variáveis de decisão integrantes do problema têm influência sobre restrições mas pouca ou nenhuma influência sobre a função objetivo, como é o caso das razões de refluxo RN703 e RN753. Observou-se que o valor da razão de refluxo RN703 oscilava de forma significativa durante o procedimento SAO, provocando certa dificuldade para que a convergência dos valores das variáveis de decisão pudesse ser obtido. Uma possível explicação para este fato pode ser uma possível dificuldade de os metamodelos reproduzirem relações sutis entre variáveis do modelo matemático. Outra variável, esta de impacto moderado sobre a função objetivo, em que se observou grandes desvios foi a vazão de Diesel Extra-Leve (DEL). Neste caso, observa-se também uma deficiência do algoritmo. Em geral, a solução rigorosa tende a levar esta vazão ao valor mínimo (próximo de zero), pois isto proporciona pequeno aumento nos rendimentos dos produtos. Contudo, o algoritmo SAO ao convergir para a região do espaço de busca apontada como solução, não conseguiu em diversos casos, identificar o valor mínimo da vazão de DEL como integrante da solução ótima. Os desvios referentes às variáveis F_DEL e R_N703 não foram considerados no cálculo do valor máximo de Δx . Os maiores desvios nas variáveis de decisão foram observados nos estudos realizados com os modelos kriging.

Os erros do tipo I (restrições ativas existentes na solução rigorosa não encontradas) nas previsões das restrições ativas foram mais frequentes que o tipo II (restrições ativas não existentes na solução rigorosa). Embora não seja trivial apontar com certeza quando os erros e desvios são causados por deficiências de modelagem ou do algoritmo de otimização, a maior ocorrência de erros do tipo I pode sugerir deficiência do algoritmo SAO para definir as regiões de confiança mais adequadas.

Na maioria dos procedimentos (exceto pelo Caso IV com o modelo kriging) o número de simulações realizadas com o modelo rigoroso foi igual ou inferior a 55% do número de simulações necessárias para a obtenção da simulação rigorosa, mostrando para os casos estudados uma redução significativa do esforço computacional envolvido no uso do modelo rigoroso. O procedimento FSR executado ao longo da otimização não exigiu esforço significativo, assim como os cálculos envolvendo os modelos kriging. As simulações com redes neurais mostraram-se mais lentas, demandando aproximadamente o triplo do tempo gasto com os modelos kriging. Esta questão não foi investigada.

Tal como reportado na literatura, observou-se que o algoritmo SAO baseado no trabalho de GIUNTA e ELDRED (2000) utilizado proporciona um processo lento de convergência. Melhorias no procedimento de atualização da região de confiança, e a incorporação de condições de consistência de forma computacionalmente viável podem ser importantes para que se possa alcançar maior eficiência. Uma das dificuldades de implementação do algoritmo foi a definição de critérios de convergência que sejam adequados para diferentes problemas. Em problemas onde o porte e a precisão dos modelos são tão diferentes quanto os exemplos P1 e P2, foi necessário adotar conjuntos de valores bem diferentes, embora tenham sido utilizados os mesmos critérios.

O benefício alcançado através da estratégia SAO pode ser considerado significativo, já que em todas as situações obteve-se mais de 70% do benefício alcançado com a solução rigorosa.

As tentativas feitas de utilizar os metamodelos obtidos com menores conjuntos de dados para o procedimento SAO não foram bem-sucedidos. Como regra geral observou-se processos de convergência ainda mais lentos, e que freqüentemente não obtinham soluções inteiramente satisfatórias. Embora não seja possível afirmar que a deficiência observada esteja associada exclusivamente ao metamodelo, pode-se sugerir que para exemplos similares ao exemplo P2 deve-se, se possível, gerar o metamodelo-base com conjuntos de dados maiores que os até então sugeridos na literatura.

Os resultados finais obtidos não permitem apontar vantagem significativa no uso de redes neuronais e modelos kriging.

Tabela VI-VI - DESTAQUES DOS RESULTADOS DA OTIMIZAÇÃO BASEADA NA ABORDAGEM SAO

Caso	Metamodelo	ErrPredFob	ΔF_{ob1}	ΔF_{ob2}	Beneficio	Δx	ErrPred_g	Δg	h1	h2	Nsim_SAO	% Nsim	Err_restr_I	Err_restr_II
Base	K186-II	0.12	0.67	0.55	94.0	10.05	0.09	10.89	-5.2E-05	-1.4E-04	107	35.8	5	1
	N186-III	0.09	0.36	0.27	97.1	6.66	0.17	26.25	-6.0E-05	-6.4E-04	129	43.1	3	0
Caso I	K186-II	0.03	2.00	2.02	78.7	23.57	0.08	13.33	-7.9E-03	-9.2E-03	122	42.5	5	0
	N186-III	0.07	2.10	2.17	77.1	20.00	0.19	17.49	-1.5E-05	1.7E-04	122	42.5	10	1
Caso II	K186-II	0.08	0.89	0.97	89.0	46.67	0.96	17.27	4.2E-04	-9.0E-04	62	22.4	5	0
	N186-III	0.12	0.79	0.90	89.7	13.27	0.12	40.86	-1.2E-04	1.8E-04	147	53.1	2	2
Caso III	K186-II	0.05	1.34	1.29	85.2	41.86	0.82	22.15	6.6E-04	-4.4E-04	75	21.1	5	0
	N186-III ^(*)	0.10	1.25	1.35	84.6	9.48	0.22	18.18	-4.7E-03	5.4E-03	46	12.9	2	1
Caso IV	K186-II ^(*)	0.21	0.02	0.19	97.9	11.07	2.95	13.38	-6.0E-03	-1.4E-02	201	87.0	4	1
	N186-III ^(*)	0.15	0.71	0.55	93.9	19.40	0.07	22.19	-1.6E-01	6.8E-04	45	19.5	8	0
Caso V	K186-II	0.04	0.93	0.89	90.2	26.78	0.36	16.92	-1.7E-03	-7.7E-04	107	29.7	2	2
	N186-III	0.24	0.25	0.49	94.6	26.78	1.56	26.29	-1.8E-05	-2.9E-05	197	54.7	3	1

Tabela VI-VII – AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO BASE

ALGORITMO		NPSOL				SAO				SAO			
MODELO		PETROX				K186-II				N186-III			
f(x ₀)		150512.6				150823.9				150865.6			
f(x*)		-				164630.8				165155.1			
F(x*)		165746.9				164829.6				165301.2			
NITER		6				7				7			
NSIM		299				107				129			
	V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x ^{RIG}	At	x ^{SAO}		At		x ^{SAO}		At	
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0		AHI		7800.0		AHI	
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.8		AHI		1.8		AHI	
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.4		---		2.4		---	
4	F_RCI	4000	5000	5000.0	AHI	4943.9		---		4925.3		(1)	
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	381.7		AHI		381.7		AHI	
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1490.9		AHI		1500.0		AHI	
7	F_Rdiesel	1000	1700	1251.1	---	1136.3				1217.7		---	
8	M_NP	50	70	70.0	AHI	64.9		---		65.3		---	
9	F_DEL	1	300	1.0	ALO	151.6		---	(1)	1.0		ALO	
10	T#2_N507	105	125	114.5	---	115.0		---		114.6		---	
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	360.0		ALO		360.0		ALO	
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	149.9		AHI		148.5		AHI	
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	145.0		AHI		144.6		---	
14	R_N703	2	20	3.1	---	8.2		---		3.1		---	
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	117.1		ALO		117.1		ALO	
16	R_N753	5	20	7.3	---	8.0		---		7.2		---	
17	T_ENT_RCI	130	150	142.2	---	145.6		---		140.9		---	
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	---	1.0		---		1.0		AHI	
19	Q_BPA2	7	10	8.3	---	8.7		---		8.2		---	
	RESTRIÇÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At	
1	T_CONT_N753	145	152	149.14	---	152.0	152.0	AHI	(2)	150.2	150.2	---	
2	DL_85	354	357	357.00	AHI	357.0	357.0	AHI		357.1	357.0	AHI	
3	L#10_N506	20	1000	649.21	---	495.9	495.6	---		655.1	653.9	---	
4	F_NLI	800	1200	987.21	---	977.6	977.7	---		987.9	987.8	---	
5	L#10_N507	20	700	173.88	---	130.9	130.9	---		170.9	170.9	---	
6	DTI_PSECO	137	143	142.98	AHI	143.1	143.0	AHI		142.6	142.5	---	
7	DTI_PIE	110	116	113.21	---	113.4	113.4	---		113.1	113.1	---	
8	V_N703	0.5	0.75	0.58	---	0.64	0.64	---		0.56	0.56	---	
9	SBO_PSECO	122	128	126.91	---	128.0	128.0	---		126.3	126.3	---	
10	SBO_PIE	52	58	53.55	---	53.9	53.9	---		54.0	53.9	---	
11	V_N753	0.5	3	3.00	AHI	3.0	3.0	AHI		3.0	3.0	AHI	
12	RCIxBPA	0	0	0.00	AHL	-5.2E-05	1.4E-05	AHL		-6.0E-05	-1.7E-04	AHL	
13	F_SD51	20	700	94.97	---	103.3	103.2	---		97.5	97.5	---	
14	F_HSBO	10	100	56.44	---	50.3	50.3	---		41.6	41.6	---	
15	T#2_N506	102	120	115.96	---	117.5	117.5	---		113.9	113.9	---	
16	L#17_N701	50	700	160.76	---	155.9	155.6	---		153.2	153.2	---	
17	L#3_N703	5	700	5.00	ALO	13.3	13.3	---	(1)	5.0	5.0	ALO	
18	L#8_N752	30	700	71.00	---	69.4	69.4	---		69.8	69.8	---	
19	L#14_N753	10	700	10.00	ALO	11.0	11.0	---	(1)	10.0	10.0	ALO	
20	L#22_N506	5	100	31.01	---	25.8	25.8	---		29.3	29.3	---	
21	RCIxBPA2	0	0	0.00	AHL	-1.4E-04	-1.3E-05	AHL		-6.4E-04	2.6E-06	AHL	

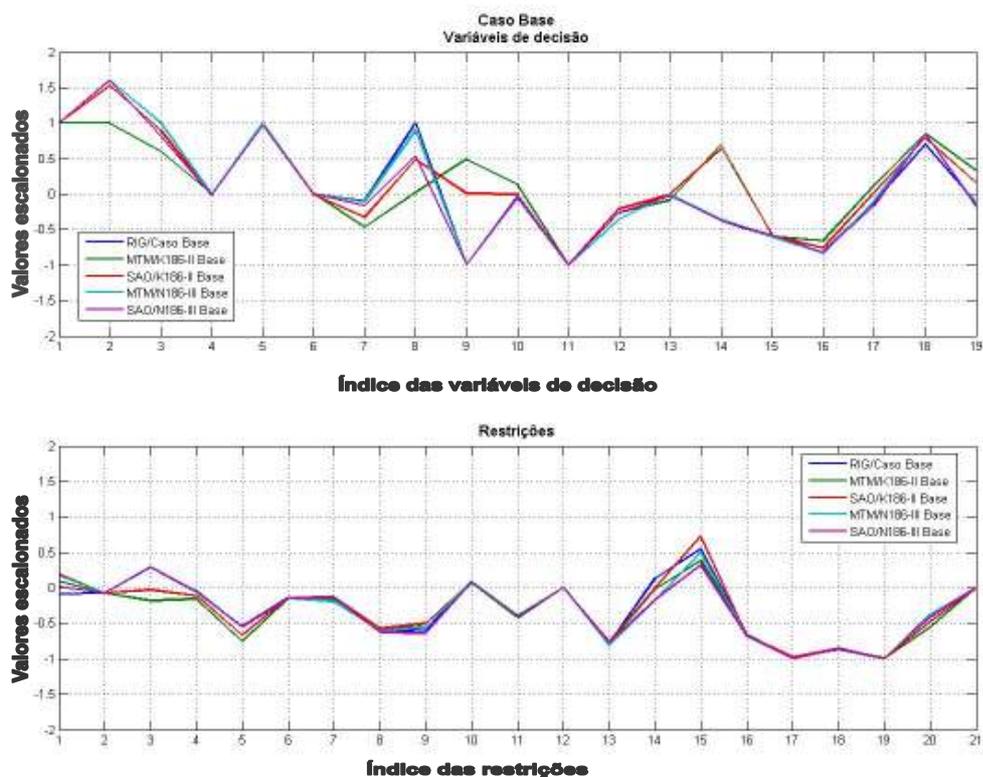


Figura VI-3 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso base.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCIxBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCIxBPA2

Tabela VI-VIII - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO I

ALGORITMO		NPSOL				SAO				SAO			
MODELO		PETROX				K186-II				N186-III			
f(x ₀)		146468.5				150823.9				150865.6			
f(x*)		-				158579.8				158411.4			
F(x*)		161812.7				158537.4				158296.9			
NITER		7				8				8			
NSIM		287				122				122			
V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x _{RIG}	At	x ^{SAO}		At		x ^{SAO}		At		
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0	AHI		7800.0	AHI			
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.5	---	(1)	1.6			(1)	
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.2	---		2.3			(1)	
4	F_RCI	4000	5000	5000.0	AHI	4351.3	---		4590.6			(1)	
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	382.0	AHI		381.7	---		(1)	
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1500.0	AHI		1500.0	AHI			
7	F_Rdiesel	1000	1700	1254.6	---	1088.9	---		1180.7	---			
8	M_NP	50	70	70.0	AHI	53.5	---	(1)	56.0	---		(1)	
9	F_DEL	1	300	1.0	ALO	184.9	---	(1)	20.5	---		(1)	
10	T#2_N507	105	125	113.6	---	114.1	---		114.9	---			
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	360.0	ALO		360.0	ALO			
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	150.0	AHI		147.4	---		(1)	
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	145.0	AHI		142.9	---		(1)	
14	R_N703	2	20	3.8	---	6.2	---		3.1	---			
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	117.0	ALO		119.6	---		(1)	
16	R_N753	5	20	7.2	---	7.8	---		7.1	---			
17	T_ENT_RCI	130	150	143.6	---	139.1	---		137.5	---			
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	AHI	1.0	AHI		1.0	AHI			
19	Q_BPA2	7	10	8.4	---	8.5	---		8.1	---			
RESTRICÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		
1	T_CONT_N753	145	152	152.0	AHI	147.1	147.1	---	(1)	148.1	148.4	---	(1)
2	DL_85	354	357	357.0	AHI	357.2	357.2	AHI		357.0	357.0	AHI	
3	L#10_N506	20	1000	589.4	---	484.6	484.6	---		617.3	617.8	---	
4	F_NLI	800	1200	939.9	---	895.6	895.6	---		932.5	932.8	---	
5	L#10_N507	20	700	173.1	---	101.7	101.7	---		144.8	144.8	---	
6	DTI_PSECO	137	143	143.0	AHI	142.5	142.5	---	(1)	143.0	143.0	AHI	
7	DTI_PIE	110	116	115.1	---	114.8	114.7	---		111.7	111.7	---	
8	V_N703	0.5	0.75	0.6	---	0.60	0.60	---		0.55	0.55	---	
9	SBO_PSECO	122	128	127.5	---	123.6	123.6	---		124.7	124.7	---	
10	SBO_PIE	52	58	54.0	---	52.7	52.7	---		54.9	54.9	---	
11	V_N753	0.5	3	3.0	---	2.6	2.6	---		2.6	2.6	---	
12	RCIXBPA	0	0	1.3E-04	AHL	-7.9E-03	-7.9E-03	AHL		-1.5E-05	-1.1E-06	AHL	
13	F_SD51	20	700	109.2	---	108.6	108.6	---		90.0	90.1	---	
14	F_HSBO	10	100	41.5	---	41.9	41.9	---		39.6	39.6	---	
15	T#2_N506	102	120	117.2	---	108.8	108.8	---		108.0	108.0	---	
16	L#17_N701	50	700	150.8	---	150.2	150.2	---		152.9	152.9	---	
17	L#3_N703	5	700	6.2	---	10.1	10.1	---		5.0	5.0	ALO	(2)
18	L#8_N752	30	700	68.9	---	61.3	61.3	---		62.1	62.1	---	
19	L#14_N753	10	700	10.0	ALO	10.8	10.8	---		9.9	9.9	ALO	
20	L#22_N506	5	100	31.7	---	23.6	23.6	---		27.9	27.9	---	
21	RCIXBPA2	0	0	2.6E-04	AHL	-9.2E-03	-9.3E-03	AHL		1.7E-04	3.7E-06	AHL	

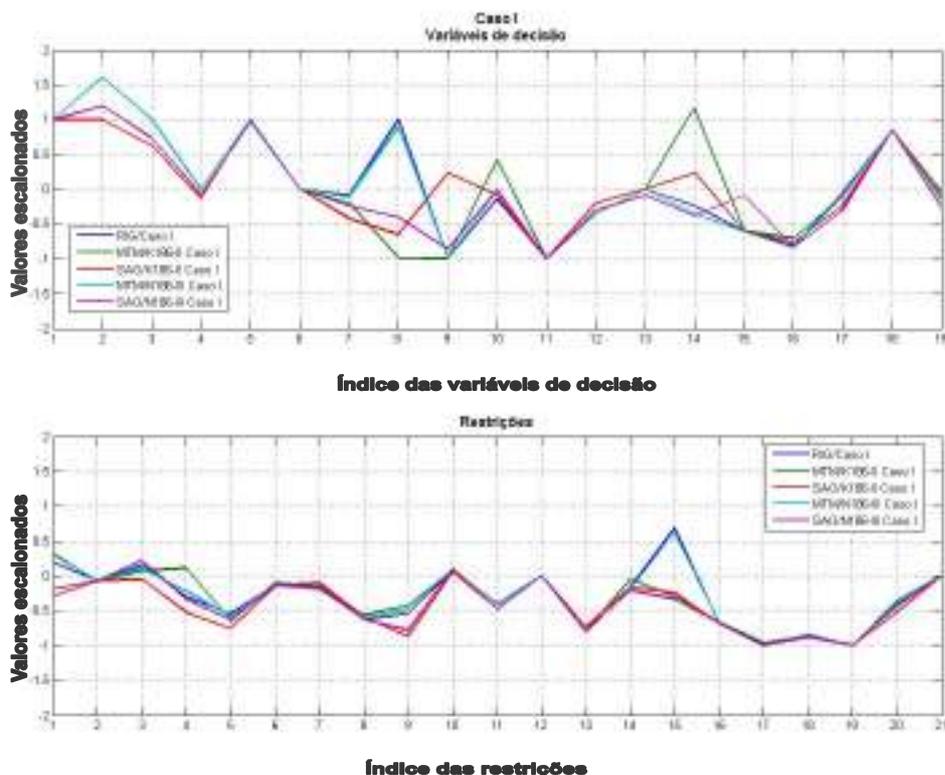


Figura VI-4 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso I.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCixBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCixBPA2

Tabela VI-IX - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO II

ALGORITMO		NPSOL				SAO				SAO			
MODELO		PETROX				K186-II				N186-III			
f(x ₀)		154623.6				150823.9				150865.6			
f(x*)		-				168025.9				168198.6			
F(x*)		169533.3				167895.1				168001.9			
NITER		7				4				8			
NSIM		277				62				147			
	V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x _{RIG}	At	x ^{SAO}		At		x ^{SAO}		At	
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0		AHI		7800.0		AHI	
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.8		AHI		1.6		AHI	
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.5		AHI		2.4		AHI	
4	F_RCI	4000	5000	5000.0	AHI	5000.0		AHI		4981.3		---	
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	382.0		AHI		382.0		AHI	
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1500.0		AHI		1493.9		---	
7	F_Rdiesel	1000	1700	1249.5	---	1199.8		---		1183.8		---	
8	M_NP	50	70	70.0	AHI	52.4		---		68.6		---	
9	F_DEL	1	300	1.0	ALO	10.2		---		117.0		---	
10	T#2_N507	105	125	114.8	---	117.1		---		114.6		---	
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	360.0		ALO		360.0		ALO	
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	150.0		AHI		147.8		---	
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	145.0		AHI		143.5		---	
14	R_N703	2	20	3.1	---	9.6		---		3.1		---	
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	117.0		ALO		117.6		---	
16	R_N753	5	20	7.4	---	10.8		---		7.1		---	
17	T_ENT_RCI	130	150	140.9	---	140.2		---		143.0		ALO	
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	---	1.0		---		1.0		AHI	
19	Q_BPA2	7	10	8.2	---	8.1		---		8.4		---	
	RESTRIÇÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At	
1	T_CONT_N753	145	152	146.2	---	147.1	147.1	---		150.3	150.4	---	
2	DL_85	354	357	357.0	AHI	357.0	357.0	AHI		357.0	357.0	AHI	
3	L#10_N506	20	1000	710.3	---	707.2	706.8	---		616.0	615.4	---	
4	F_NLI	800	1200	1020.4	---	1055.5	1055.5	---		981.7	981.7	---	
5	L#10_N507	20	700	176.9	---	158.1	158.0	---		139.4	139.4	---	
6	DTI_PSECO	137	143	143.1	AHI	143.0	142.0	---		143.0	143.0	AHI	
7	DTI_PIE	110	116	114.8	---	113.1	113.0	---		112.1	112.08	---	
8	V_N703	0.5	0.75	0.62	---	0.70	0.69	---		0.55	0.55	---	
9	SBO_PSECO	122	128	125.9	---	125.5	125.5	---		126.5	126.6	---	
10	SBO_PIE	52	58	53.4	---	53.1	53.1	---		54.2	54.2	---	
11	V_N753	0.5	3	3.0	AHI	3.0	3.0	AHI		3.0	3.0	AHI	
12	RCixBPA	0	0	-2.2E-06	AHL	4.2E-04	-3.0E-05	AHL		-1.2E-04	-9.4E-06	AHL	
13	F_SD51	20	700	95.7	---	93.2	93.1	---		95.7	95.7	---	
14	F_HSBO	10	100	72.6	---	60.0	60.1	---		42.9	42.9	---	
15	T#2_N506	102	120	114.6	---	106.6	106.6	---		114.1	114.0	---	
16	L#17_N701	50	700	168.9	---	163.2	163.2	---		153.6	153.6	---	
17	L#3_N703	5	700	5.0	ALO	15.5	15.5	---		5.0	5.0	ALO	
18	L#8_N752	30	700	73.4	---	70.3	70.3	---		70.3	70.3	---	
19	L#14_N753	10	700	10.0	ALO	14.5	14.5	---		9.8	9.9	ALO	
20	L#22_N506	5	100	30.5	---	28.2	28.3	---		27.3	27.2	---	
21	RCixBPA2	0	0	9.5E-06	AHL	-9.0E-04	-2.8E-05	AHL		1.8E-04	1.5E-05	AHL	

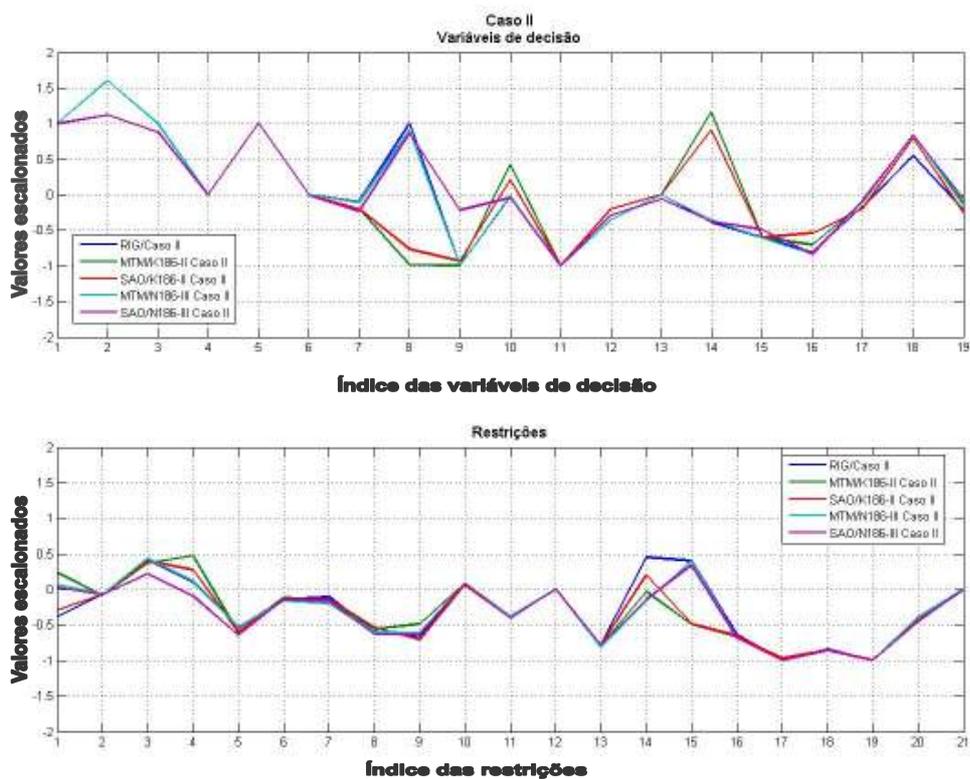


Figura VI-5 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso II.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCIxBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCIxBPA2

Tabela VI-X - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO III

ALGORITMO		NPSOL				SAO			SAO		
MODELO		PETROX				K186-II			N186-III		
f(x ₀)		150823.7				150823.9			150865.6		
f(x*)		-				163027.5			163186.9		
F(x*)		165245.2				163106.4			163018.7		
NITER		8				4			4		
NSIM		356.0				75.0			46.0		
	V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x _{RIG}	At	x ^{SAO}		At	x ^{SAO}		At
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0		AHI	7781.8		---
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.8		AHI	1.8		AHI
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.4		---	2.5		AHI
4	F_RCI	4000	5000	4978.0	---	4721.6		---	4809.3		---
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	381.7		AHI	382.0		AHI
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1500.0		AHI	1500.0		AHI
7	F_Rdiesel	1000	1700	1254.2	---	1148.9		---	1219.2		---
8	M_NP	50	70	70.0	AHI	58.3		---	63.4		---
9	F_DEL	1	300	1.0	ALO	103.7		---	23.3		---
10	T#2_N507	105	125	114.1	---	115.3		---	114.5		---
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	366.9		ALO	360.4		ALO
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	150.0		AHI	146.9		---
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	144.9		AHI	142.6		---
14	R_N703	2	20	4.5	---	9.2		---	3.6		---
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	117.2		ALO	117.0		ALO
16	R_N753	5	20	7.2	---	10.3		---	7.2		---
17	T_ENT_RCI	130	150	150.0	AHI	149.6		AHI	148.8		---
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	AHI	1.0		AHI	1.0		AHI
19	Q_BPA2	7	10	7.4	---	7.5		---	7.2		---
	RESTRIÇÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At
1	T_CONT_N753	145	152	149.6	---	147.6	147.6	---	149.2	149.2	---
2	DL_85	354	357	357.0	AHI	357.0	357.0	AHI	357.0	356.9	AHI
3	L#10_N506	20	1000	749.0	---	651.6	652.1	---	736.0	736.0	---
4	F_NLI	800	1200	964.2	---	968.8	968.8	---	965.4	965.4	---
5	L#10_N507	20	700	150.2	---	113.0	113.0	---	138.6	138.8	---
6	DTI_PSECO	137	143	143.0	AHI	143.0	143.0	AHI	143.2	143.2	AHI
7	DTI_PIE	110	116	114.9	---	113.4	113.4	---	110.6	110.6	---
8	V_N703	0.5	0.75	0.57	---	0.68	0.68	---	0.56	0.56	---
9	SBO_PSECO	122	128	126.0	---	125.2	125.2	---	125.6	125.61	---
10	SBO_PIE	52	58	53.7	---	53.1	53.1	---	53.7	53.7	---
11	V_N753	0.5	3	3.0	AHI	2.8	2.8	---	2.8		---
12	RCixBPA	0	0	5.6E-06	AHL	6.6E-04	-8.3E-10	AHL	-4.7E-03	-4.7E-03	AHL
13	F_SD51	20	700	106.0	---	101.2	100.9	---	86.7	86.7	---
14	F_HSBO	10	100	42.8	---	52.3	52.3	---	41.1	41.1	---
15	T#2_N506	102	120	112.5	---	108.9	108.9	---	109.9	109.6	---
16	L#17_N701	50	700	151.6	---	159.7	159.8	---	154.3	154.3	---
17	L#3_N703	5	700	7.4	---	14.9	14.9	---	5.8	5.8	---
18	L#8_N752	30	700	70.6	---	66.3	65.7	---	66.6	66.6	---
19	L#14_N753	10	700	10.0	ALO	14.0	14.0	---	10.0		ALO
20	L#22_N506	5	100	31.0	---	26.1	26.0	---	29.4	29.5	---
21	RCixBPA2	0	0	1.5E-06	AHL	-4.4E-04	6.5E-09	AHL	5.4E-03	4.2E-03	AHL

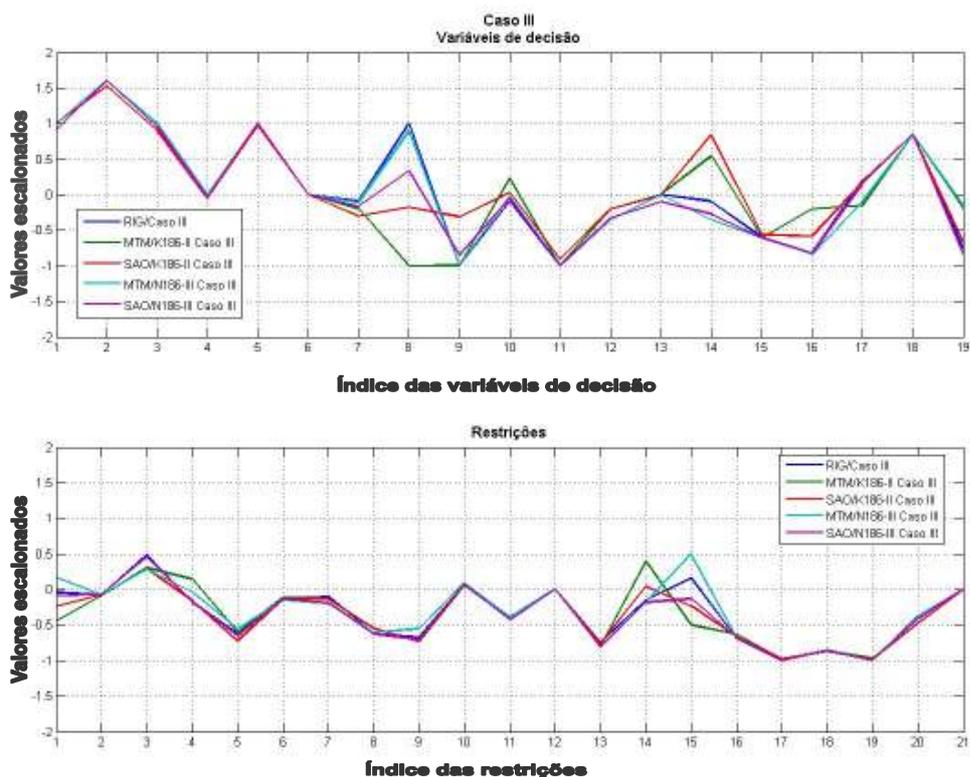


Figura VI-6 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso III.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCixBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCixBPA2

Tabela VI-XI – AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO IV

ALGORITMO		NPSOL				SAO				SAO			
MODELO		PETROX				K186-II				N186-III			
f(x ₀)		150823.7				150823.9				150865.6			
f(x*)		-				166006.3				164798.1			
F(x*)		165976.0				165663.6				165055.0			
NITER		5				11				3			
NSIM		231.0				201.0				45.0			
	V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x _{RIG}	At	x ^{SAO}		At		x ^{SAO}		At	
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0		AHI		7800.0		AHI	
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.8		AHI		1.8		AHI	
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.2		---	(1)	2.5		AHI	
4	F_RCI	4000	5000	5000.0	AHI	4981.5		---	(1)	4925.0		---	(1)
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	382.0		AHI		382.0		AHI	
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1446.1		---	(1)	1482.6		---	(1)
7	F_Rdiesel	1000	1700	1182.1	---	1096.6		---		1246.9		---	
8	M_NP	50	70	58.9	---	52.4		---		70.0		AHI	
9	F_DEL	1	300	87.1	---	107.7		---		1.0		ALO	
10	T#2_N507	105	125	115.5	---	117.5		---		114.6		---	
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	360.4		---		360.0		ALO	
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	150.0		AHI		146.3		---	(1)
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	145.0		AHI		145.0		AHI	
14	R_N703	2	20	5.8	---	8.5		---		3.2		---	
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	117.7		---	(1)	117.0		---	(1)
16	R_N753	5	20	7.3	---	6.8		---		7.0		---	
17	T_ENT_RCI	130	150	130.0	ALO	130.0		ALO		142.4		---	(1)
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	---	1.0		---		1.0		---	
19	Q_BPA2	7	10	10.0	AHI	10.0		AHI		8.1		---	(1)
	RESTRIÇÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At	
1	T_CONT_N753	145	152	150.9	---	152.3	152.2	AHI	(2)	151.4	151.4	---	
2	DL_85	354	357	357.0	AHI	357.8	357.8	AHI		357.2	357.4	AHI	
3	L#10_N506	20	1000	431.1	---	425.7	425.2	---		682.1	682.1	---	
4	F_NLI	800	1200	1011.9	---	1042.0	1041.9	---		984.6	984.6	---	
5	L#10_N507	20	700	185.7	---	164.9	164.8	---		166.0	166.0	---	
6	DTI_PSECO	137	143	143.0	AHI	143.3	143.6	AHI		142.7	142.6	---	(1)
7	DTI_PIE	110	116	114.3	---	113.4	113.6	---		110.3	110.3	---	
8	V_N703	0.5	0.75	0.62	---	0.65	0.67	---		0.59	0.59	---	
9	SBO_PSECO	122	128	127.6	---	127.9	127.9	---		127.3	127.3	---	
10	SBO_PIE	52	58	53.8	---	54.4	54.5	---		54.4	54.4	---	
11	V_N753	0.5	3	3.0	AHI	3.0	3.0	AHI		3.0	3.0	AHI	
12	RCIxBPA	0	0	-6.2E-05	AHL	-6.0E-03	-6.8E-03	AHL		-1.6E-01	-1.6E-01	VLO	
13	F_SD51	20	700	103.4	---	99.5	99.5	---		84.7	84.7	---	
14	F_HSBO	10	100	52.9	---	45.9	45.8	---		41.2	41.2	---	
15	T#2_N506	102	120	117.9	---	115.8	115.7	---		115.1	115.1	---	
16	L#17_N701	50	700	158.4	---	155.9	155.9	---		155.1	155.0	---	
17	L#3_N703	5	700	9.4	---	13.8	13.8	---		5.1	5.2	---	
18	L#8_N752	30	700	70.0	---	69.4	69.4	---		69.6	69.6	---	
19	L#14_N753	10	700	10.0	ALO	9.5	9.5	ALO		9.8	9.8	---	(1)
20	L#22_N506	5	100	28.1	---	23.9	23.9	---		30.9	30.9	---	
21	RCIxBPA2	0	0	-8.6E-05	AHL	-1.4E-02	-1.2E-02	VLO		6.8E-04	6.8E-04	AHI	

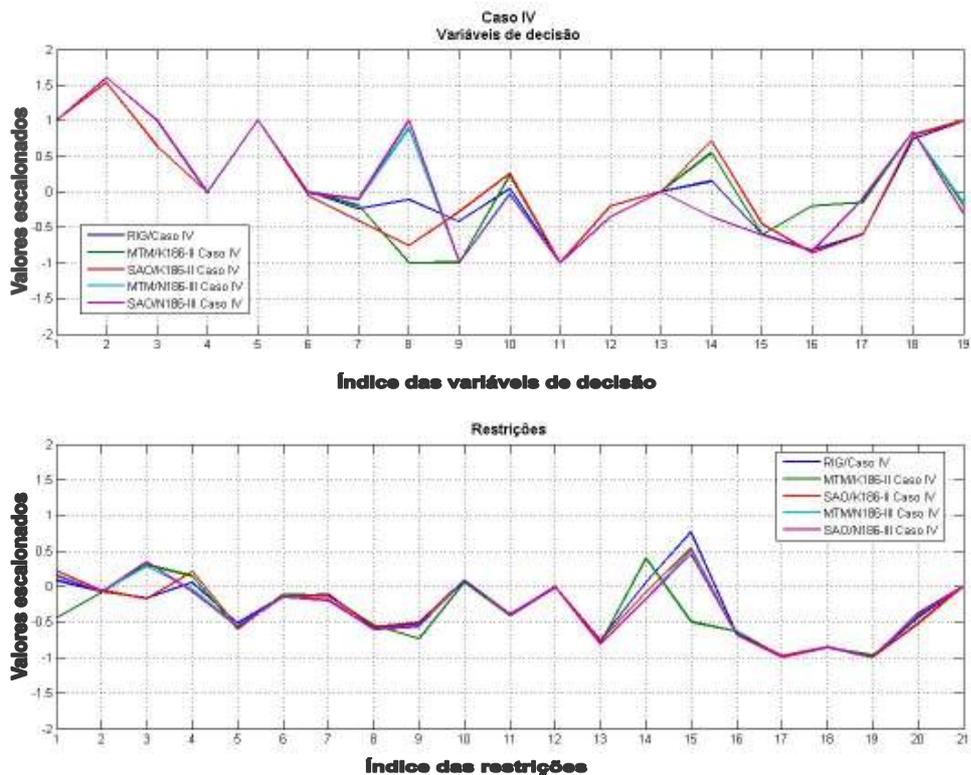


Figura VI-7 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso IV.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCIxBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCIxBPA2

Tabela VI-XII - AVALIAÇÃO DA ABORDAGEM SAO PARA O CASO V

ALGORITMO		NPSOL				SAO				SAO			
MODELO		PETROX				K186-II				N186-III			
f(x ₀)		150820.5				150823.9				150865.6			
f(x*)		-				164379.6				165511.7			
F(x*)		165926.0				164443.1				165116.3			
NITER		9				7				13			
NSIM		360.0				107.0				197.0			
	V. DECISÃO	x _{MIN}	x _{MAX}	x _{RIG}	At	x ^{SAO}		At		x ^{SAO}		At	
1	F_CRU	7400	7800	7800.0	AHI	7800.0		AHI		7800.0		AHI	
2	VN507	0.8	1.8	1.8	AHI	1.8		AHI		1.8		AHI	
3	VN506	1.5	2.5	2.5	AHI	2.3		---		2.4		---	
4	F_RCI	4000	5000	5000.0	AHI	5000.0		AHI		5000.0		AHI	
5	TFAT	365	382	382.0	AHI	381.9		AHI		382.0		AHI	
6	F_Q	1000	1500	1500.0	AHI	1500.6		AHI		1500.0		AHI	
7	F_Rdiesel	1000	1700	1247.5	---	1177.3		---		1201.0		---	
8	M_NP	50	70	70.0	AHI	54.7		>	"(1)"	59.2		<	
9	F_DEL	1	300	11.7	---	1.0		ALO		23.4		---	
10	T#2_N507	105	125	114.2	---	117.5				115.8		---	
11	F_C01	360	550	360.0	ALO	360.0		ALO		360.0		ALO	
12	T_CONT_N701	143	150	150.0	AHI	150.0		AHI		150.0		AHI	
13	T_CONT_N703	137	145	145.0	AHI	145.0		AHI		143.9		AHI	
14	R_N703	2	20	3.1	---	9.8				6.3		---	
15	T_CONT_N752	117	122	117.0	ALO	118.0			(1)	117.2		ALO	
16	R_N753	5	20	7.1	---	9.0				7.1		---	
17	T_ENT_RCI	130	150	142.4	---	142.1				142.3		---	
18	V/F_N753	0.9	0.985	1.0	---	1.0		AHI	(2)	1.0		AHI	
19	Q_BPA2	7	10	8.3	---	8.3				8.3		---	
	RESTRICÕES	g _{MIN}	g _{MAX}	G(x ^{RIG})	At	G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At		G(x ^{SAO})	g(x ^{SAO})	At	
1	T_CONT_N753	145	152	149.1	---	150.3	150.4	---		150.5	150.6	---	
2	DL_85	354	357	357.0	AHI	357.0	357.0	AHI		357.0	357.0	AHI	
3	L#10_N506	20	1000	642.7	---	629.8	629.9	---		627.1	623.2	---	
4	F_NLI	800	1200	980.9	---	1033.2	1033.2	---		1005.0	1004.9	---	
5	L#10_N507	20	700	172.6	---	155.5	155.5	---		158.6	158.5	---	
6	DTI_PSECO	137	143	143.2	AHI	143.4	142.9	AHI		143.0	143.0	AHI	
7	DTI_PIE	110	116	115.0	---	112.9	112.9	---		114.1	114.1	---	
8	V_N703	0.5	0.75	0.57	---	0.67	0.67	---		0.59	0.59	---	
9	SBO_PSECO	122	128	126.8	---	127.1	127.1	---		126.5	126.4	---	
10	SBO_PIE	52	58	53.7	---	54.2	54.2	---		53.8	53.8	---	
11	V_N753	0.5	3	3.0	AHI	3.0	3.0	AHI		3.0	3.0	AHI	
12	RCIXBPA	0	0	1.2E-04	AHL	-1.7E-03	-1.7E-03	AHL		-1.8E-05	-1.9E-05	AHL	
13	F_SD51	20	700	102.7	---	95.2	95.1	---		103.2	104.8	---	
14	F_HSBO	10	100	56.1	---	48.6	48.6	---		41.3	41.4	---	
15	T#2_N506	102	120	116.1	---	109.8	109.8	---		112.0	112.0	---	
16	L#17_N701	50	700	159.2	---	157.0	157.0	---		152.2	152.1	---	
17	L#3_N703	5	700	5.0	ALO	15.8	15.7	---	(1)	10.3	10.3	---	
18	L#8_N752	30	700	71.3	---	69.1	69.1	---		69.7	69.8	---	
19	L#14_N753	10	700	10.0	ALO	12.6	12.6	---	(2)	10.0	10.0	ALO	
20	L#22_N506	5	100	30.8	---	27.4	27.4	---		28.6	28.6	---	
21	RCIXBPA2	0	0	2.6E-04	AHL	-7.7E-04	-8.1E-04	AHL		-2.9E-05	3.6E-05	AHL	

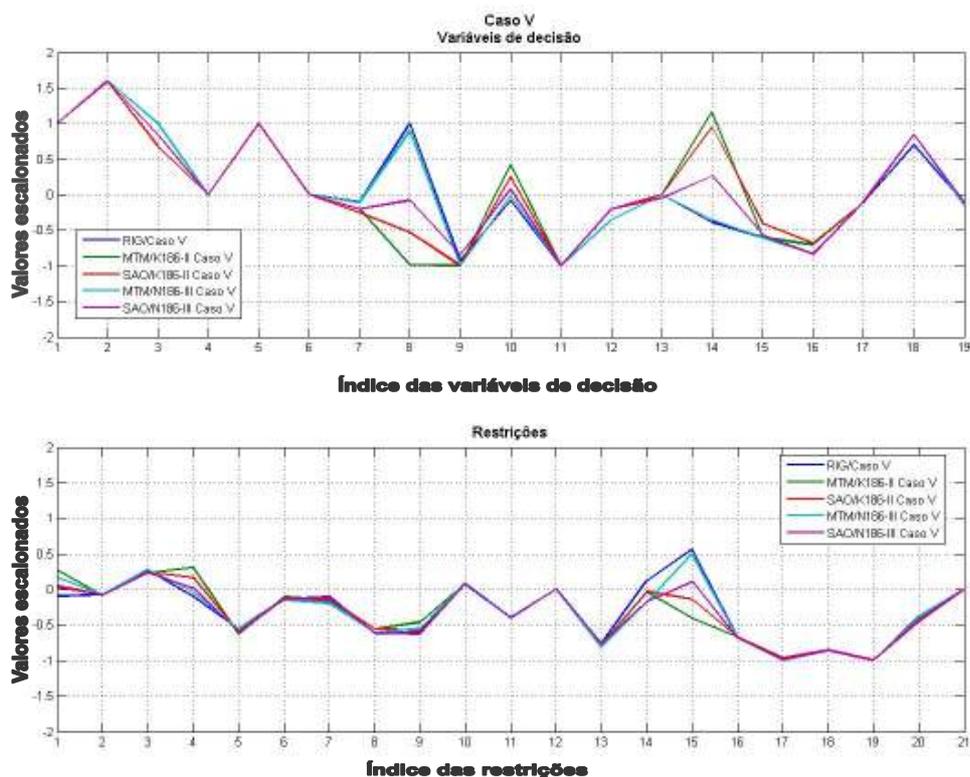


Figura VI-8 - Comparação entre as soluções do problema de otimização para o caso V.

RIG – Solução obtida com o modelo rigoroso (PETROX)
 MTM – Solução obtida exclusivamente com o metamodelo
 SAO – Solução obtida com a abordagem SÃO

Variáveis de Decisão

1/ F_CRU; 2/ VN507; 3/ VN506; 4/ F_RCI; 5/ TFAT; 6/ F_Q; 7/ F_Rdiesel; 8/ M_NP; 9/ F_DEL; 10/ T#2_N507; 11/ F_C01; 12/ T_CONT_N701; 13/ T_CONT_N703; 14/ R_N703; 15/ T_CONT_N752; 16/ R_N753; 17/ T_ENT_RCI; 18/ V/F_N753; 19/ Q_BPA2

Restrições

1/T_CONT_N753; 2/DL_85; 3/L#10_N506; 4/F_NLI; 5/L#10_N507; 6/DTI_PSECO; 7/DTI_PIE; 8/V_N703; 9/SBO_PSECO; 10/SBO_PIE; 11/V_N753; 12/RCIxBPA; 13/F_SD51; 14/F_HSBO; 15/T#2_N506; 16/L#17_N701; 17/L#3_N703; 18/L#8_N752; 19/L#14_N753; 20/L#22_N506; 21/RCIxBPA2

VII. CONCLUSÕES E CRÍTICAS

VII.1. SOBRE A METODOLOGIA PROPOSTA PARA OTIMIZAÇÃO

Neste trabalho foi proposta uma metodologia em que metamodelos são utilizados em substituição ou combinados a modelos de processo rigorosos em um procedimento que visa sua aplicação na otimização em tempo real (RTO). Esta substituição dos modelos originais por metamodelos tem dois objetivos:

- Substituir os modelos rigorosos quando o esforço computacional envolvido no seu cálculo for demasiadamente grande para que o seu uso na aplicação em tempo real seja viável;
- Proporcionar maior confiabilidade¹² quando a solução do modelo rigoroso está sujeita a problemas de não-convergência ou sensibilidade à inicialização, pois a falha no cálculo do modelo deixa de ser necessariamente fatal para o prosseguimento do problema de otimização.

A concepção desta metodologia baseou-se na combinação do conceito de otimização seqüencial por aproximações (SAO) com aspectos do procedimento iterativo comumente utilizado para a execução de projeto ótimo baseado em metamodelos. Todos os procedimentos que, na atividade de projeto, são executados de forma interativa, foram substituídos por ferramentas ou procedimentos que possam ser utilizados de forma automática. A necessidade de procedimentos automáticos visa não apenas a aplicabilidade da metodologia a sistemas em tempo real, mas também permitir a sua utilização em situações em que modelos complexos, com grande número de variáveis são considerados.

Duas classes de metamodelos foram utilizadas: os modelos *kriging* e as redes neurais. Os modelos *kriging* têm sido largamente utilizados como metamodelos em diversas áreas da engenharia, embora pouco utilizados na modelagem de processos

¹² O termo confiabilidade é utilizado aqui para designar a propriedade de baixa predisposição do sistema de otimização para a ocorrência de problemas numéricos, como falhas na convergência em procedimentos iterativos que comprometam a obtenção de uma solução viável.

químicos. As redes neurais, por sua vez, são largamente utilizadas em processos químicos. A sua utilização neste trabalho cumpre dois propósitos: (i) o estudo da sua aplicabilidade na otimização em tempo real como metamodelos; e (ii) Ser um parâmetro para avaliação do desempenho dos modelos *kriging* na modelagem de processos químicos.

Para estudar os procedimentos de geração dos metamodelos e de otimização seqüencial por aproximações foram utilizados dois exemplos. O primeiro deles um exemplo de pequeno porte, e o segundo um exemplo baseado em uma unidade de destilação de petróleo real, que foi modelada matematicamente através do simulador de processos PETROX. A utilização deste último exemplo cumpre vários objetivos:

- Os simuladores seqüenciais modulares apresentam limitações para sua utilização em RTO, em função de sua baixa eficiência computacional e da necessidade de utilização de derivadas numéricas. Assim, é essencialmente um caso em que o uso do modelo matemático rigoroso do processo em aplicações de RTO torna-se difícil;
- É um exemplo que envolve grande número de variáveis independentes, o que atende a demanda freqüente da literatura de metamodelos;
- É um teste de porte interessante para se avaliar a viabilidade do uso de metamodelos em RTO para processos químicos.
- Os casos estudados para este exemplo procuraram simular situações em que: (i) o comportamento do processo e do modelo rigoroso que o descreve se modificam em função de influências não mensuráveis, buscando-se reproduzir o que ocorreria em uma aplicação em tempo real; e (ii) quando o metamodelo base não pode representar o modelo rigoroso adequadamente.

A metodologia proposta baseia-se em aproximações do modelo rigoroso e em um algoritmo de otimização que abre mão das condições de consistência que poderiam garantir a melhor aderência possível do metamodelo ao modelo rigoroso. Contudo, para os exemplos estudados, foi possível obter soluções próximas do ponto ótimo real com bom desempenho. A utilização prática desta metodologia pode ser feita exatamente como aqui descrita, porém pode-se cogitar ainda duas alternativas adicionais:

- O resultado do procedimento SAO pode ser utilizado como uma estimativa inicial para o problema rigoroso, caso esta implementação seja computacionalmente viável e maior precisão na solução final seja desejada;

- Alguns autores sugerem que a contínua atualização das direções ótimas a serem implementadas em tempo real podem ser tão ou mais efetivas que a implementação de uma solução ótima final, dadas as imprecisões associadas à solução que pode ser obtida para a otimização mesmo quando se utiliza um modelo rigoroso (SEQUEIRA *et al.*, 2002, ENGELL, 2007). Assim, soluções viáveis obtidas ao longo do procedimento SAO poderiam ser implementadas continuamente, proporcionando atualização contínua da direção de ótimo desempenho a ser perseguida.

VII.2. VISÃO GERAL SOBRE OS RESULTADOS

Modelos kriging

A geração de modelos *kriging* mostrou-se um processo de difícil execução, pelos seguintes motivos:

- O surgimento de flutuações numéricas na resposta, em função do conjunto de parâmetros estimado. Estas flutuações, discutidas no trabalho de SASENA (2002), podem dificultar o procedimento de otimização. Foram feitos testes com as sugestões dadas por SASENA (2002) para evitar este problema, mas não foi obtido resultado inteiramente satisfatório.
- O *toolbox* DACE/MATLAB fornece ferramentas para estimação de parâmetros de modelos *kriging* que não contemplam a freqüente situação em que a função de mínimos quadrados apresenta múltiplos pontos de mínimo. Procedimentos complementares foram implementados para fazer frente a esta situação. Duas abordagens foram testadas: a primeira baseada no uso do algoritmo swarm, e o segundo utilizando múltiplos pontos iniciais como ponto de partida do processo de estimação, selecionando-se o modelo que produzisse o menor erro de predição computado a partir de um conjunto independente de dados de validação. Este último procedimento mostrou melhores resultados para os exemplos estudados. Empiricamente, observou-se que a ocorrência de flutuações numéricas foi menor.
- O esforço computacional envolvido na estimação de parâmetros é considerável.

Redes neuronais

Este trabalho não procurou esgotar as alternativas possíveis para gerar as redes neuronais a serem utilizadas. Foi utilizada a estratégia *backpropagation* para treinamento e apenas algumas das funções de ativação típicas foram consideradas como alternativas. Assim, é possível que se possa melhorar ainda mais o desempenho das redes. O esforço computacional envolvido na geração das redes neuronais foi significativo, e similar ao despendido na geração dos modelos *kriging*.

Modelos *kriging* X Redes neuronais

Para os exemplos estudados, a influência do tamanho do conjunto dos dados de treinamento no desempenho dos metamodelos foi igualmente importante para modelos *kriging* e redes neuronais. As regras sugeridas na literatura para determinação do número de pontos de treinamento como função do número de variáveis não foram satisfatórias para os exemplos deste trabalho. O número de pontos ideal para os exemplos estudados foi da ordem de sete a dez vezes o número de variáveis independentes candidatas (podendo ser ainda maior para o exemplo P1).

A comparação do desempenho dos modelos *kriging* e das redes neuronais foi realizada de duas formas: através de diagramas Box-and-Whisker que mostram a dispersão do erro de predição, e avaliando-se o resultado obtido com a solução dos problemas de otimização em comparação ao resultado obtido com o modelo rigoroso. No exemplo P1 há pequena diferença de desempenho entre as famílias de modelos, exceção feita ao caso em que o menor conjunto de dados treinamento foi utilizado. Neste caso, as redes proporcionaram resultado significativamente melhor. No exemplo P2 também não é possível afirmar que uma das classes de modelos mostra vantagens muito significativas, embora o resultado da rede neuronal N186-I no exemplo de otimização tenha mostrado desempenho superior na capacidade de reproduzir as restrições ativas da solução rigorosa.

O procedimento SAO

O procedimento de otimização seqüencial por aproximações proposto por GIUNTA e ELDRED (2000) foi adaptado neste trabalho para ser utilizado associado a metamodelos. Em sua concepção, foram dispensadas as condições de consistência que proporcionariam maiores garantias de convergência ao algoritmo para se obter, em contrapartida, menor esforço computacional.

Para os exemplos estudados, foi possível obter soluções próximas daquelas obtidas

com o modelo rigoroso, com significativa redução do esforço computacional.

Observou-se um processo lento de convergência. O mecanismo de alteração da região de confiança é outro aspecto que pode ser aperfeiçoado, possivelmente através de regras mais sofisticadas para determinar o fator de ampliação ou redução em função de características do problema. Outra possibilidade pode ser a alteração da região de confiança de forma diferente para cada variável de decisão. Outro aspecto que merece aperfeiçoamento está em mecanismos genéricos para definição de tolerâncias e critérios de terminação. Neste trabalho, mesmo com o escalonamento das variáveis, não foi possível determinar um único critério para os dois exemplos estudados.

Um dos aspectos que influenciou a velocidade do processo de convergência foi a presença de variáveis que têm pouca influência sobre a função objetivo, embora tenham influência sobre restrições do problema de otimização. Uma abordagem que pode trazer melhorias neste caso seria a introdução de termos de penalização da variação destas variáveis na função objetivo.

Os exemplos e o estudo de casos

Os exemplos utilizados e os casos de estudo propostos a partir destes cumpriram o papel de mostrar a viabilidade da metodologia proposta, porém não são suficientes para que se possa fazer afirmações sobre a amplitude da sua aplicabilidade. Para isso são necessários mais testes com outros exemplos e ainda explorando os exemplos utilizados com maior variedade de casos.

VII.3. CONTRIBUIÇÕES DESTE TRABALHO

Uma contribuição deste trabalho é a proposição de uma metodologia para utilização de metamodelos na otimização de processos químicos, baseada em mecanismos para adaptação dos metamodelos ao longo do procedimento de otimização (SAO). A metodologia proposta baseou-se em procedimentos automáticos, visando possíveis aplicações em tempo real.

Os modelos *kriging* são largamente utilizados como metamodelos em diversas áreas da engenharia. Porém, há apenas uma aplicação conhecida na engenharia química, voltada para o projeto ótimo de processos. Os procedimentos para estimação de parâmetros de modelos *kriging* existentes foram adaptados para as necessidades deste trabalho, visando sua utilização em um exemplo de porte industrial.

As redes neuronais são largamente utilizadas na modelagem de processos químicos. Neste trabalho, elas foram avaliadas como alternativa para metamodelos e serviram ainda como parâmetro para que os modelos *kriging* pudessem ser avaliados na modelagem de processos químicos. Concluiu-se que modelos *kriging* e redes neuronais mostraram desempenho similar para os exemplos estudados. Os modelos *kriging* podem, portanto, ser uma alternativa a ser considerada para a modelagem, simulação e otimização de processos químicos.

A combinação do procedimento de otimização seqüencial por aproximações com o uso de modelos *kriging* e redes neuronais como metamodelos mostrou potencial interessante para futuras investigações. Foi constatado que é possível obter resultados próximos daqueles obtidos através da solução rigorosa, com significativa redução do esforço computacional.

O exemplo P2 mostra que a utilização da abordagem SAO pode ser um caminho para o uso de simuladores seqüenciais modulares em aplicações em tempo real com melhor eficiência computacional e maior confiabilidade.

VII.4. SUGESTÕES PARA FUTUROS TRABALHOS

Inúmeros aspectos relacionados à otimização baseada em metamodelos encontram-se em aberto. Algumas sugestões para a evolução deste assunto são feitas a seguir:

- A metodologia para estimação de parâmetros dos modelos *kriging* é um aspecto que merece aperfeiçoamento. O procedimento de estimação de parâmetros baseado no método da máxima verossimilhança exige grande esforço computacional e apresenta múltiplas soluções, cuja escolha não é trivial;
- Estratégias para utilização de planejamento experimental seqüencial voltado para a otimização de processos com restrições.
- O estudo de outras classes de metamodelos, como as funções de base radial.

A avaliação de alternativas de algoritmos SAO e o seu aperfeiçoamento buscando o melhor compromisso entre eficiência computacional, precisão e confiabilidade podem ser outra linha de desenvolvimento interessante, juntamente com mais testes da metodologia envolvendo número mais amplo de casos e situações.

VIII. BIBLIOGRAFIA

- ALKAYA, D., VASANTHARAJAN, S., BIEGLER, L.T., 2000, "Generalization of a Tailored Approach for Process Optimization", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.39, pp. 1731-1742
- ALVES, R.M.B., NASCIMENTO, C.A.O., 2002, "Gross error detection of industrial data by neural network and cluster techniques". *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, v. 19, n. 4, pp. 483-489.
- ALVES, R.M.B., NASCIMENTO, C.A.O., 2004, "Neural Network Based Approach Applied for Modeling and Optimization of an Industrial Isoprene Unit Production". In: *Proceedings of AIChE Annual Meeting*, Austin, USA.
- ARORA, N., BIEGLER, L.T., 2001, "Redescending estimators for data reconciliation and parameter estimation", *Computers and Chemical Engineering*. v. 25, pp. 1585-1599.
- AUDET, C., DENNIS Jr., J.E., MOORE, D.W. *et al.*, 2000, "A Surrogate-Model Based Method for Constrained Optimization", In: *Proceedings of the 8th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, Long Beach, CA, USA, September – paper AIAA-2000-4891
- BABU, B.V., CHATURVEDI, G., 2000, "Evolutionary computation strategy for optimization of an alkylation reaction". In: *Proceedings of International Symposium & 53rd Annual session of IIChe (CHEMCON-2000)*, Science City, Calcuta, Dec.
- BARBOSA, C.H., MELO, B., VASCONCELOS, L.P. *ET AL.* 2002, "Inference of distillation product quality using bayesian networks". In: *Proceedings of the 2002 International Joint Conference on Neural Networks (IJCNN'02)*, Vol. 1, pp 86-91, Honolulu, HI, USA.
- BARBOSA, C.H., 2002, "Relatório de Execução - Desenvolvimento de um produto de geração de inferências". Relatório Técnico PETROBRAS \CENPES TER33.
- BENAMOR, S., DOYLE III, F.J., MCFARLANE, R., 2004, "Polymer grade transition control using advanced real-time optimization software", *Journal of Process Control*, v. 14, pp. 349-364.
- BERLIM, R., MENDONÇA, E., 2004, *Concepção de simulação PETROX para as*

unidades de destilação e solventes da RECAP. Comunicação Técnica da PETROBRAS CT-EB-SAP-001/2004.

- BERNA, T.J., LOCKE, M.H., WESTERBERG, A. W., 1980, "A New Approach to Optimization of Chemical Processes", *AIChE Journal*, v. 26, n. 1, pp. 37-43.
- BERNARDO, M.C., BUCK, R., LIU, L., *et al.*, 1992, "Integrated Circuit Design Optimization Using a Sequential Strategy", *IEEE Transactions on Computer-Aided Design*, v. 11, n. 3, pp. 361-372.
- BIEGLER, L.T., GROSSMANN, I. E., 2004, "Retrospective on optimization", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, n. 8, pp. 1169-1192.
- BIEGLER, L.T., HUGHES, R.R., 1981, "Approximation Programming Of Chemical Processes with Q/LAP", *Chemical Engineering Progress*, v. 77, n. 4, pp. 76-83.
- BIEGLER, L.T., HUGHES, R.R., 1982, "Infeasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators", *AIChE Journal*. v. 28, n.6, pp. 994-1002.
- BIEGLER, L.T., HUGHES, R.R., 1985, "Feasible Path Optimization with Sequential Modular Simulators", *Computers and Chemical Engineering*. v. 9 n.4, pp. 379-394.
- BIEGLER, L.T., 1985, "Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators I: The Interface", *Computers and Chemical Engineering*, v. 9, n. 3, pp. 245-256.
- BIEGLER, L.T., CUTHRELL, J.E., 1985, "Improved Infeasible Path Optimization for Sequential Modular Simulators II: The Optimization Algorithm", *Computers and Chemical Engineering*, v. 9 n. 3, pp. 257-267.
- BIEGLER, L.T., GROSSMANN, I.E., WESTERBERG, A.W., 1985, "A Note on Approximation Techniques Used for Process Optimization", *Computers and Chemical Engineering*, v. 9, n. 2, pp. 201-206.
- BIEGLER, L.T., LANG, Y-D, 1987, "A Unified Algorithm for Flowsheet Optimization", *Computers and Chemical Engineering*. v. 11, n. 2, pp. 143-158.
- BIEGLER, L.T., WOLBERT, D., JOULIA, X., *ET AL.*, 1994, "Flowsheet Optimization and Optimal Sensitivity Analysis Using Analytical Derivatives", *Computers and Chemical Engineering*, v. 18, n. 11/12, pp. 1083-1095.
- BIEGLER, L.T., GROSSMANN, I. E., WESTERBERG, A.W., 1997, *Systematic*

Methods of Chemical Process Design. New Jersey, Prentice-Hall, Inc.

- BIEGLER, L.T., CERVANTES, A.M., WÄCHTER, A., 2002, "Advances in simultaneous strategies for dynamic process optimization", *Chemical Engineering Science*, v. 57, pp. 575-593.
- BIRCHFIELD, G.S., 2002, *Advanced Process Control, Optimization and Information Technology in the Hydrocarbon Processing Industries – The Past, Present and Future*. AspenTech
- BIRGE, B., 2003, "PSOt, A Particle Swarm Optimization Toolbox for Matlab". In: IEEE Swarm Intelligence Symposium Proceedings, April 24-26.
- BLOSS, K.F., BIEGLER, L.T., SCHIESSER, W.E., 1999, "Dynamic Process Optimization through Adjoint Formulations and Constraint Aggregation", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 38, pp. 421-432.
- BODINGTON, C.E., BAKER, T.E., 1990, "A History of Mathematical Programming in the Petroleum Industry", *Interfaces*, v. 20, n. 4 (July-August), pp. 117-127
- BOGLE, I.D.L., BYRNE, R.P., 2000, "Global Optimization of Modular Process Flowsheets", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, pp. 4296-4301.
- BOOKER, A.J., FRANK, P.D., DENNIS, J.E., ET AL., 1998, "Managing Surrogate Objectives to Optimize a Helicopter Rotor Design – Further Experiments". In: Proceedings of the 7th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, St. Louis, MO, USA, September – paper AIAA-1998-4717.
- BOOKER, A.J., DENNIS, J.E., FRANK, P.D., SERAFINI, D.B., TORCZON, V., TROSSET, M.W., 1999, "A rigorous framework for optimization of expensive functions by surrogates", *Structural Optimization*, v. 17, pp. 1-13.
- BOOKER, A.J. 2000, *Well-Conditioned Kriging Models for Optimization of Computer Simulations*, M&CT-TECH-00-002, February, 2000. Phantom Works, Mathematics & Computing Technology, The Boeing Co., Bellevue, WA, EUA.
- CANNEY, W.M., 2003, "The future of advanced process control promises more benefits and sustained value", *Oil and Gas Journal*, v. 101, n. 16 (Apr), pp. 48-54.
- CHEN, V.C.P., TSUI, K., BARTON, R.R., MECKESHEIMER, M., 2006, "A review on design, modeling and applications of computer experiments", *IIE Transactions*, v. 38, pp. 273-291.

- CHENG, J-H E ZAFIRIOU, E., 2000, "Robust Model-Based Iterative Feedback Optimization of Steady State Plant Operations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, pp. 4215-4227.
- CHENG, J-H E ZAFIRIOU, E., 2000, "Robust Model-Based Iterative Feedback Optimization of Steady State Plant Operations", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, pp. 4215-4227.
- CLARKE, S.M., GRIEBSCH, J.H., SIMPSON, T.W., 2005, "Analysis of Support Vector Regression for Approximation of Complex Engineering Analyses", *Journal of Mechanical Design*, n. 127, v. 6, pp. 1077-1087.
- EDGAR, T.F., HIMMELBLAU, D.M. E LASDON, L.S., 2001, *Optimization of Chemical Processes*. 2nd Ed. New York, McGraw-Hill.
- ELDRED, M.S., GIUNTA, A.A., COLLIS, S.S., 2004, "Second-Order Corrections for Surrogate-Based Optimization with Model Hierarchies", In: Proceedings of the 12th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, USA, September – paper AIAA-2004-4457
- ENGELL, S., 2007, "Feedback control for optimal process operation", *Journal of Process Control.*, v. 17, pp. 203-219.
- FERREIRA, H.S., 2003, *Métodos matemáticos em modelagem e simulação do craqueamento térmico do 1,2 dicloroetano*. Tese de D.Sc., Universidade Estadual de Campinas, Campinas, SP, Brasil.
- FORBES, J.F. E MARLIN, T.E, 1996, "Design Cost: A Systematic Approach to Technology Selection for Model-Based Real-Time Optimization Systems", *Computers and Chemical Engineering.*, v. 20, n. 6/7, pp. 717-734.
- FRALEIGH, L.M., GUAY, M. E FORBES, J.F., 2003, "Sensor selection for model-based real-time optimization: relating design of experiments and design cost", *Journal of Process Control*, v. 13, pp. 667-678.
- FRIEDMAN, J.H., 1991, "Multivariate Adaptive Regression Splines", *The Annals of Statistics*, v. 19, pp. 1-67.
- GEORGIOU, A., SAPRE, A.V., TAYLOR, P. ET AL., 1997, "Plant Wide Closed Loop Real Time Optimization and Advanced Control of Ethylene Plant – CLRTO Improves Plant Profitability & Operability". In: *NPRA Computer Conference*, CC-97-139.
- GEORGIOU, A., SAPRE, A.V., TAYLOR, P. ET AL., 1998, "Ethylene optimization

- system reaps operations and maintenance benefits”, *Oil & Gas Journal*, v. 9 (Mar), pp. 46-49.
- GILL, P.E., MURRAY, W., SAUNDERS, M.A. *ET AL.*, 1998, *User’s Guide for NPSOL 5.0: A FORTRAN package for Nonlinear Programming*. Technical Report SOL86-1
- GIUNTA, A.A., ELDRED, M.S., 2000, “Implementation of a Trust Model Management Strategy in the Dakota Optimization Toolkit”. In: Proceedings of the 8th AIAA/USAF/NASA/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization, Long Beach, CA, USA, September – paper AIAA-2000-4935
- GOMES, M.V.C., BOGLE, I.D.L., ODLOAK, D., BISCAIA JR., E.C., 2006, “An application of Metamodels for Process Optimization”. In: *Proceedings of the 16th European Symposium on Computer Aided Process Engineering and 9th International Symposium on Process Systems Engineering*, Garmisch-Partenkirchen, Germany, July – paper 1271, pp. 1449-1454.
- GOUVÊA, M.T., ODLOAK, D., 1998, “One-layer real-time optimization of LPG production in the FCC unit: procedure, advantages and disadvantages”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 22, Suppl. (ESCAPE 88), pp. S191-S198
- GROSSMANN, I. E., BIEGLER, L.T., 2004, “Part II. Future perspective on optimization. *Computers and Chemical Engineering*”, v. 28, pp. 1193-1218.
- GUPTA, S.K., KASAT, R.B., 2003, “Multi-objective optimization of an industrial fluidized-bed catalytic cracking unit (FCCU) using genetic algorithm (GA) with the jumping genes operator”, *Computers and Chemical Engineering*, v. 27, pp. 1785-1800.
- GUPTA, S.K., KASAT, R.B., KUNZRU, D. *ET AL.*, 2002, “Multiobjective Optimization of Industrial FCC Units Using Elitist Nondominated Sorting Genetic Algorithm”, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 41, pp. 4765-4776.
- HARDIN, M.B., SHARUM, R., JOSHI, A. *ET AL.*, 1995, “Rigorous Crude Unit Optimization”. In: *NPRA Computer Conference* CC-95-122.
- HUI, CHI-WAI, 2002, “Determining marginal values of intermediate materials and utilities using a site model”, *Computers and Chemical Engineering* v. 24, pp. 1023-1029
- JACKSON, J., PIATT, M., TIMMONS, C., *ET AL.* 2004, “Online optimisation to

- improve performance”, *Petroleum Technology Quarterly, Processing* February, pp.113-116
- JAKHETE, R., RAGER, W., HOFFMAN, D.W. , 1999, “Online implementation of composite LP optimizes FCCU/GPU complex”, *Hydrocarbon Processing* February, pp.69-76
- JIANG,T., CHEN, B., HE, X., STUART, P., 2003, “Application of steady-state detection method based on wavelet transform”, *Computers and Chemical Engineering* v. 27, pp. 569-578
- JIN, R., CHEN, W., SUDJIANTO, A. 2004, “On Sequential Sampling for Global Metamodeling in Engineering Design”. In: *Proceedings of DETC’02 – ASME Design Engineering Technical Conferences and Computers and Information in Engineering Conference*, No. 34092, Montreal, Canada.
- JIN, R., CHEN, W., SIMPSON, T.W., 2000, “Comparative Studies of Metamodeling Techniques Under Multiple Modeling Criteria”. In: *8th AIAA/NASA/USAF/ISSMO Symposium on Multidisciplinary Analysis and Optimization*, paper 4801, Long Beach, CA, USA.
- KADAM, J.V., SHLEGEL, M., SRINIVASAN, B. *et al.*, 2007, “Dynamic optimization in the presence of uncertainty: From off-line nominal solution to measurement-based implementation”, *Journal of Process Control*. v. 17, pp. 389-398.
- KAHRS, O., MARQUARDT, W., 2007, “Incremental identification of hybrid process models”, *Computers and Chemical Engineering*, Artigo em impressão.
- KAHRS, O., MARQUARDT, W., 2007, “The validity domain of hybrid process models and its application in process optimization”, *Computers and Chemical Engineering*. Artigo em impressão.
- KAMESWARAM, S., BIEGLER, L.T., 2006, “Simultaneous dynamic optimization strategies: Recent advances and challenges”, *Computers and Chemical Engineering*. v. 30, pp. 1560-1575.
- KISALA, T.P., TREVINO-LOZANO, R.A., BOSTON, J.F., *ET AL.*, 1987, “Sequential Modular and Simultaneous Modular Strategies for Process Flowsheet Optimization”, *Computers and Chemical Engineering*. v. 11, n.6, pp. 567-579.
- KLEIJNEN, J.P.C., 2005, “An overview of the design and analysis of simulation experiments for sensitivity analysis”, *European Journal of Operational Research*. v. 164, pp.287-300.

- LI, R., SUDJIANTO, A., 2005, "Analysis of Computer Experiments Using Penalized Likelihood in Gaussian *Kriging* Models", *Technometrics*, v.47, n.2, pp. 111-120
- LIPORACE, F.S., KATATA, A.C., ZANIN, A.C., 2007, *Avaliação de Metodologia para RTO em Unidades de Destilação*, RL-6952. PETROBRAS\CENPES, Rio de Janeiro.
- LOPHAVEN, S.N., NIELSEN, H.B., SØNDERGAARD, J. 2002, *DACE A MATLAB Kriging Toolbox*, Technical Report IMM-TR-2002-12, version 2.0, Agosto, 2002 Technical University of Denmark, Denmark.
- LOPHAVEN, S.N., NIELSEN, H.B., SØNDERGAARD, J. 2002, *Aspects of MATLAB Toolbox DACE*, Technical Report IMM-REP-2002-13, 2002 Technical University of Denmark, Denmark.
- MARTIN, J.D., SIMPSON, T.W., 2005, "Use of *Kriging* Models to Approximate Deterministic Computer Models", *AIAA Journal*, v. 43, pp. 853-863
- MECKESHEIMER, M., BARTON, R., SIMPSON, T. *et al.*, 2001, "Metamodeling of Combined Discrete/Continuous Responses", *AIAA Journal*, v. 39, n. 10, pp. 1950-1959.
- MECKESHEIMER, M., BOOKER, A.J., BARTON, R. *et al.*, 2002, "Computationally Inexpensive Metamodeling Assessment Strategies", *AIAA Journal*, v. 40, n. 10, pp. 2053-2060.
- MUDT, D.R., PEDERSEN, C.C., JEDT, M.D. ET AL., 2000, "Use of rigorous models in refinery-wide optimization", *Petroleum Technology Quarterly*.
- NASCIMENTO, C.A.O., GIUDICI, R., 1998, "Neural network based approach for optimization applied to a industrial nylon-6,6 polymerization process, *Computers and Chemical Engineering* v. 22, pp. S595-S600.
- NASCIMENTO, C.A.O., GIUDICI, R., GUARDANI, R., 2000, "Neural network based approach for optimization of chemical processes, *Computers and Chemical Engineering* v. 24, pp. 2303-2314.
- NATH, R., ALZEIN, Z., 2000, "On-line dynamic optimization of olefin plants", *Computers and Chemical Engineering* v. 24, pp. 533-538.
- NETER, J., WASSERMAN, W., KUTNER, M.H., 1989, *Applied Linear Regression Models*, 2nd ed., New York, Richard D. Irwin.
- NIEDERBERGER, J., WAINTRAUB, S., AYRES, J.S.S., ET AL. , 2000, PETROX – Simulador de Processos de Refino e Petroquímica. In: *Anais do XIII*

Congresso Brasileiro de Engenharia Química (COBEQ)

- PAGES, A., PINGAUD, H., MEYER, M. *ET AL.*, 1996, "From Process Simulation to General Estimation", *Computers and Chemical Engineering* v. 20, n. 12, pp. 1413-1424.
- PALMER, K., REALFF, M., 2002, "Metamodeling Approach to Optimization of Steady-state Flowsheet Simulations – Model Generation", *Trans IChemE*, v. 80, Part A, pp. 760-772.
- PALMER, K., REALFF, M., 2002, "Optimization and Validation of Steady-state Flowsheet Simulation Metamodels", *Trans IChemE*, v. 80, Part A, pp. 773-782.
- PALMER, K., TSUI, K., 2001, "A minimum bias Latin hypercube design", *IIE Transactions*, v. 33, pp. 793-808.
- PEDERSEN, C.C., MUDT, D.R., BAILEY, J.K. *ET AL.*, 1995, "Closed Loop Real Time Optimization of a Hydrocracker Complex". In: *NPRA Computer Conference* CC-95-121
- PINTO, J.M., JOLY, M., MORO, L.F.L., 2000, "Planning and scheduling models for refinery operations", *Computers and Chemical Engineering* v. 24, pp. 2259-2276
- QIN, S.J., BADGWELL, T.A., 2003, A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice* v.11, pp.733-764
- RANADE, S.M., SHREAK, S.C., 1989, "Know Marginal Utility Costs", *Hydrocarbon Processing*, **September**, 81-84
- RANGANATHAN, S., OFFERMAN, A., CIJNTJE, J. *ET AL.*, 2003, "Improved optimisation of a refinery crude unit", PTQ spring 2003
- RIDDLE, A.L., BHAT, N.V., 1997, "Neural Networks Help Optimize Solvent Extraction Process in a Lube Oil Plant". In: *NPRA Computer Conference*, CC-97-135.
- ROMAGNOLI, J.A., SÁNCHEZ, M.C., 2000, *Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations.*, Academic Press.
- SACKS, J., WELCH, J.W., MITCHELL, T.J. *ET AL.*, 1989, "Design and Analysis of Computer Experiments", *Statistical Science.*, v.4, pp. 409-435.
- SALTELLI, A., 2002, "Making best use of models evaluations to compute sensitivity indices", *Computer Physics Communications.*, v.145, pp. 280-297.
- SANTNER, T.J., WILLIAMS, B.J., NOTZ, W.I., 2003, *The Design and Analysis of*

Computer Experiments, New York, Springer-Verlag.

- SARAF, D.N., BASAK, K., ABHILASH, K.S. *ET AL.*, 2002, "On-line Optimization of a Crude Distillation Unit with Constraints on Product Properties", *Ind. Eng. Chem. Res.* **2002**, v.41, pp. 1557-1568.
- SASENA, J.M., 2002, *Flexibility and Efficiency Enhancements for Constrained Global Design Optimization with Kriging Approximations*. Ph.D. dissertation, University of Michigan, USA.
- SEQUEIRA, S.E., GRAELLS, M., PUIGJANER, L., 2002, "Real-time Evolution for On-line Optimization of Continuous Processes", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 41, pp. 1815-1825.
- SEQUEIRA, S.E., HERRERA, M., GRAELLS, M., PUIGJANER, L., 2004, "On-line process optimization: parameter tuning for the real-time evolution (RTE) approach", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 661-672.
- SHAO, Z., LI, X., QIAN, J., 2004, "Module-oriented automatic differentiation in chemical process systems optimization", *Computers and Chemical Engineering Article in Press*.
- SHOBRYNS, D.E., WHITE, D.C., 2002, "Planning, scheduling and control systems: why cannot they work together", *Computers and Chemical Engineering*, v. 26, pp. 149-160
- SIMPSON, T.W., MARTIN, J.D., 2005, "Use of *Kriging* Models to Approximate Deterministic Computer Models", *AIAA Journal*, v. 43, No. 4, pp. 853-863
- SIMPSON, T.W., PEPLINSKI, J.D., KOCH, P.N. *et al.*, 2001, "Metamodels for Computer-based Engineering Design: Survey and recommendations", *Engineering with Computers*, v. 17, pp. 129-150
- SOTELO, F.F., 2006, *Aplicação da espectroscopia de infravermelho próximo na caracterização de petróleo. Simulação de uma unidade de destilação atmosférica*. Tese de D.Sc., Universidade de São Paulo / EPUSP, São Paulo, SP, Brasil.
- TANG, B., 2001, "Orthogonal Array-Based Latin Hypercubes", *Journal of the American Statistical Association*, v. 88, n. 424, pp. 1392-1397.
- TERADO, S., WATANEBE, J., CHI, YUAN, 2002, "Benefits of Real-time Optimization of a FCCU at Idemitsu – A Romeo Case Study". In: *Proceedings of ARTC Computing, Singapore*.

- THOMAS, L.R., SHOBRY, D.E., 1988, "Planning and scheduling lube blending and packaging", *Hydrocarbon Processing* **June**, 43-51
- TOLSMA, J.E.; BARTON, P.I., 2000, "DAEPACK: An Open Modeling Environment for Legacy Models", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 39, pp. 1826-1839.
- VAN BEERS, W.C.M., KLEIJNEN, J.P.C., 2004, "Kriging interpolation in simulation: a survey". In: *Proceedings of the 2004 Winter Simulation Conference*, No. 34092, Montreal, Canada.
- WESTERBERG, A.W., 2004, "A retrospective on design and process synthesis", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 447-458
- WHITE, D., 1997, "Online Optimization: what, where and estimating ROI", *Hydrocarbon Processing* **November**, 111-120
- YIP, W.S., MARLIN, T.E, 2004, "The effect of model fidelity on real-time optimization performance", *Computers and Chemical Engineering*, v. 28, pp. 267-280.
- ZANIN, A.C., GOUVÊA, M.T., ODLOAK, D., 2000, "Industrial implementation of a real-time optimization strategy for maximizing production of LPG in a FCC unit", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 525-531.
- ZHANG, Y., FORBES, J.F., 2000, "Extended design cost: a performance criterion for real-time optimization systems", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 1829-1841
- ZHANG, N., ZHU, X.X., 2000, "A novel modeling and decomposition strategy for overall refinery optimisation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 1543-1548
- ZHANG, N., ZHU, X.X., 2006, "Novel modeling and decomposition strategy for total site optimisation", *Computers and Chemical Engineering*, v. 30, pp. 765-777
- ZHANG, J., ZHU, X.X., TOWLER, G.P., 2001, "A Simultaneous optimization Strategy for Overall Integration in Refinery Planning", *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.40, pp. 2640-2653.
- ZHAO, W., CHEN, D., HU, S., 2000, "Optimizing operating conditions based on ANN and modified Gas", *Computers and Chemical Engineering*, v. 24, pp. 61-65.

ANEXO I - O SIMULADOR PETROX

A-I.1. DESCRIÇÃO

O PETROX é um simulador estático de processos químicos cujo desenvolvimento no Centro de Pesquisas da PETROBRAS (CENPES) foi iniciado no final da década de 80 (NIEDERBERGER *et al.*, 2000). Desde então ele vem sendo largamente utilizado no projeto de novas unidades de processo e análise de unidades existentes. Para a execução destas atividades tipicamente interativas, o usuário utiliza uma interface gráfica (ver figura) através da qual ele tem acesso a todas as funcionalidades necessárias à configuração da simulação desejada.

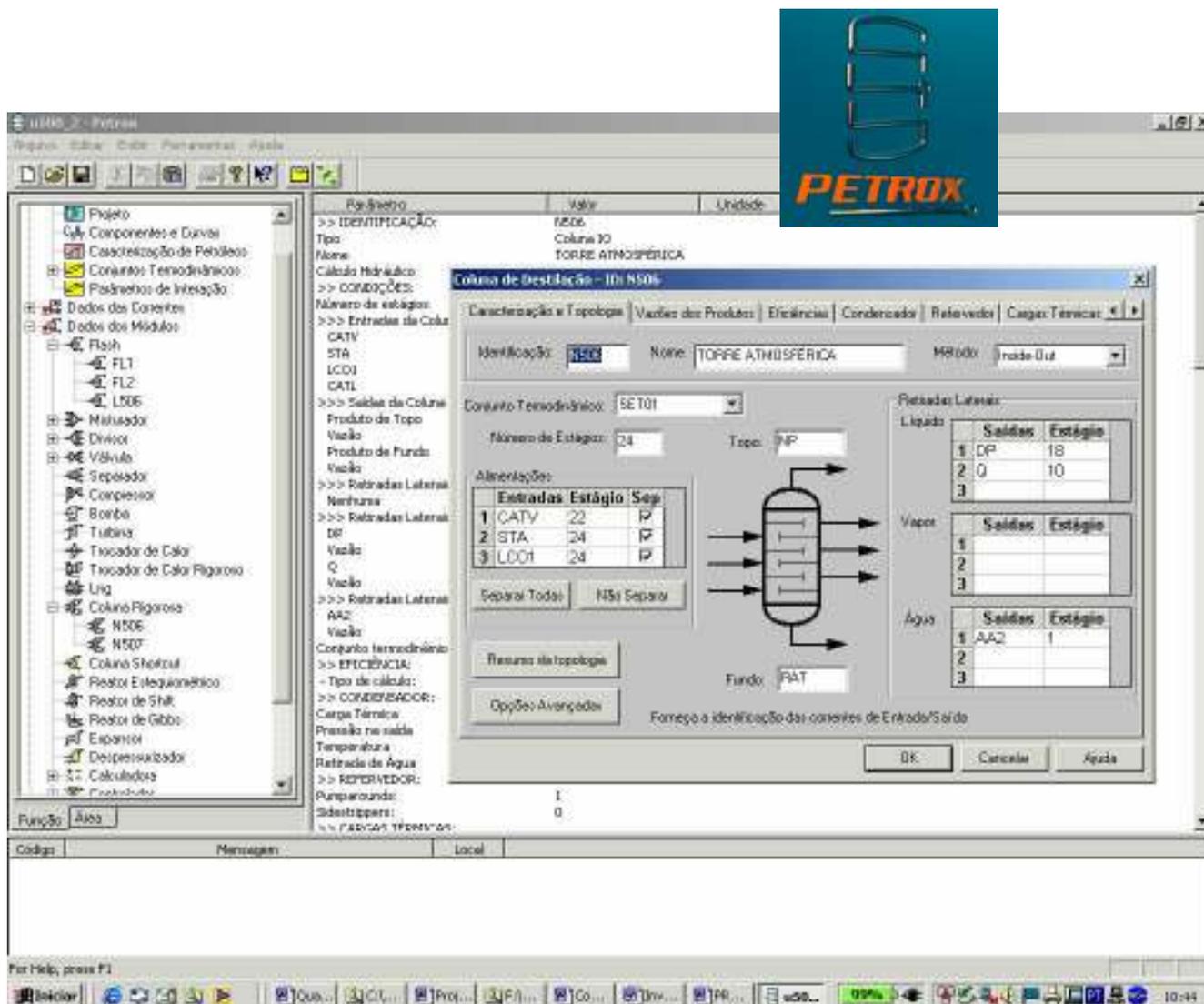


Figura AI-1 - Interface do simulador PETROX.

O PETROX é um simulador baseado na arquitetura seqüencial-modular. A configuração da simulação de um processo químico é feita através da seleção de módulos representativos das operações unitárias desejadas e interligação dos mesmos através de correntes de processo, em uma seqüência similar à do fluxo de massa na unidade de processo real. Dentre os principais módulos e funções pode-se citar:

- *Flash* (isotérmico, adiabático, etc...)
- Colunas de destilação baseadas em diferentes algoritmos
- Reatores
- Módulos auxiliares para controle de fluxo como misturadores e divisores;
- Calculadora (cálculos definidos pelo usuário);
- Controlador

Estão disponíveis ainda diversas opções para cálculo de propriedades termodinâmicas, caracterização do equilíbrio de fases e cálculo de propriedades de transporte. Como sua utilização é principalmente voltada para a indústria do petróleo e petroquímica, estão disponíveis ainda o cálculo de propriedades especiais (parâmetros de qualidade típicos dos seus produtos) e modelos de processo proprietários específicos para a simulação de unidades de processamento de petróleo como Unidades de Coqueamento Retardado e Unidades de Craqueamento Catalítico Fluido (FCC).

A-I.2. FERRAMENTAS EM TEMPO REAL BASEADAS NO SIMULADOR PETROX

Na década de 90, foi vislumbrada a possibilidade de novas formas de utilização do simulador PETROX, como por exemplo aplicações em tempo real de simulação e otimização. Para isto seria necessário que periodicamente dados de processo provenientes diretamente da planta pudessem ser alimentados ao simulador e, uma vez que este fosse executado, seus resultados pudessem ser também disponibilizados de forma contínua. Desde então, foram realizados desenvolvimentos que culminaram no desenvolvimento de uma biblioteca de funções (FORTRAN/C/C++) que permitem o acesso de um programa externo ao PETROX. As funções disponíveis permitem :

- Estabelecer conexão entre variáveis do programa externo e variáveis / dados disponíveis no PETROX ;

- Escrever valores em variáveis de entrada de uma simulação do PETROX;
- Executar uma simulação do PETROX.
- Ler valores de variáveis de saída de uma simulação do PETROX;

Embora esta biblioteca ainda esteja em desenvolvimento, já foi aplicada em atividades de simulação e otimização. Algumas das funções já são efetivamente utilizadas em unidades de processo da PETROBRAS.

Para criar um novo programa que acesse o simulador PETROX, o usuário deve configurar a simulação desejada do processo através de sua interface gráfica e construir a aplicação computacional acoplada à sua biblioteca de acesso.

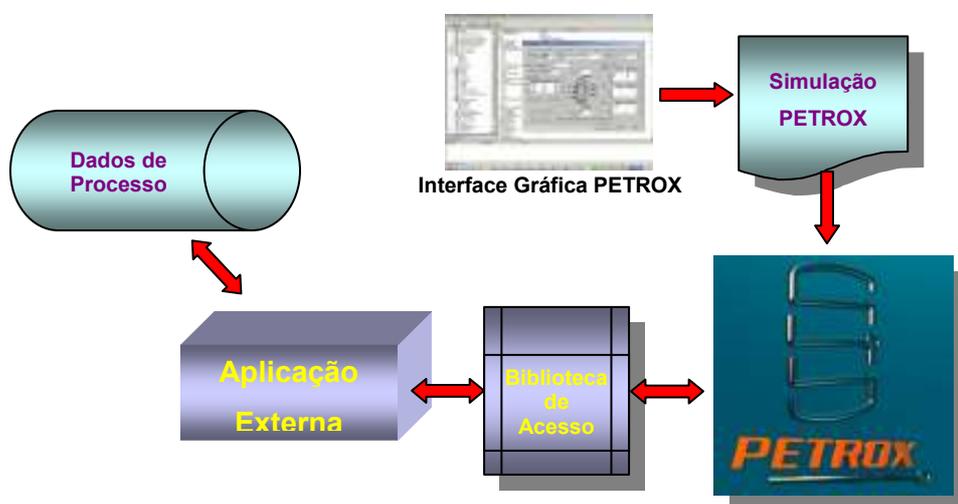


Figura AI-2- Acesso em tempo real ao simulador PETROX.

ANEXO II - METODOLOGIA PARA SOLUÇÃO DOS PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

O programa genérico de otimização visa à solução de problemas de otimização baseados nos modelos do simulador PETROX ou outros modelos implementados em código-fonte. A implementação foi feita de forma que diferentes problemas de otimização possam ser estudados com pouca ou nenhuma necessidade de novas implementações computacionais por parte do usuário. Os problemas de otimização podem ser configurados através da interface e lidos pelo programa, que gera como resultado relatórios padronizados com a configuração e a solução do problema em estudo.

Toda a implementação foi realizada através do ambiente/linguagem Visual FORTRAN 6.0, com código desenvolvido baseado nas funcionalidades disponíveis no padrão FORTRAN 90, à exceção das rotinas NPSOL (codificadas em FORTRAN 77). Todos os problemas aqui implementados foram executados em um PC baseado no sistema operacional Windows 2000/Windows XP.

Os problemas de otimização abordados neste trabalho podem ser classificados como de programação não-linear (NLP) e baseados em modelos estáticos. A seguir apresenta-se a forma geral destes problemas e aspectos da sua formulação. Por fim, são descritas as características gerais do programa de otimização utilizado e alguns detalhes de implementação.

A-II.1. O PROGRAMA NPSOL

A implementação do problema de otimização foi feita utilizando o pacote NPSOL versão 5.0 (GILL *et al.*, 1998). O NPSOL é um conjunto de rotinas FORTRAN cujo objetivo é resolver um problema genérico de Programação Não-linear na seguinte forma genérica:

$$\begin{aligned} \min_{x \in \mathbb{R}^n} & f(x) \\ \text{s.a.:} & \underline{l} \leq r(x) \leq \underline{u} \quad (\text{AII-1}) \\ r(x) & \equiv \begin{pmatrix} x \\ Ax \\ c(x) \end{pmatrix} \end{aligned}$$

onde:

- $f(\underline{x})$ - Função objetivo não-linear
- \underline{x} - Vetor de variáveis de decisão
- $\underline{l}, \underline{u}$ - Limites de mínimo e máximo das restrições
- \underline{A} - Matriz de coeficientes das restrições lineares
- $\underline{c}(\underline{x})$ - Vetor de funções não-lineares

O NPSOL se baseia no algoritmo SQP (Programação Seqüencial Quadrática), largamente utilizado na solução de problemas de otimização convexos.

A implementação de um problema de otimização no NPSOL é feita definindo-se os valores de \underline{l} , \underline{u} e \underline{A} (constantes) antes da chamada da sub-rotina NPSOL. O usuário deve também criar funções padronizadas para o cálculo da função objetivo e das restrições não-lineares $c(x)$. O Gradiente da função objetivo e a matriz Jacobiana das restrições podem ser total ou parcialmente fornecidos pelo usuário (computados em funções padronizadas). Valores não fornecidos são calculados numericamente pelo próprio algoritmo. O cálculo de derivadas numéricas pode ser realizado de diferentes formas, havendo ainda procedimentos para verificação da consistência dos valores computados.

Há uma grande quantidade de parâmetros de configuração do NPSOL disponíveis para o usuário, que regem o processo de convergência, tolerâncias, informações apresentadas em relatórios, etc. Estes valores podem ser definidos através de arquivos de entrada ou definidos diretamente no código-fonte. Um arquivo padronizado de saída com os resultados também é disponibilizado, embora a rotina NPSOL também retorne os resultados através da sua lista de argumentos, permitindo ao usuário fazer uso de todas as informações de acordo com seu interesse. Há ainda uma funcionalidade de interesse que permite reiniciar um problema de otimização do ponto final com alterações desejadas pelo usuário (partida a quente).

A-II.2. A FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

II.2.1.1 A função objetivo

A função objetivo implementada no programa prevê a estrutura necessária para o cálculo do lucro operacional de uma unidade de processo:

$$L = \sum_{i=1}^{NP} P_i \times \$_i^P \times \phi_i^P - \sum_{j=1}^{NF} F_j \times \$_j^F \times \phi_j^F - \sum_{k=1}^{NU} U_k \times \$_k^U \times \phi_k^U \quad (\text{AII-2})$$

onde:

- L - Lucro operacional
- P_i - Produto i do processo em estudo
- F_j - Carga j do processo em estudo
- U_k - Utilidade k
- $\$_i$ - Preço unitário do insumo i
- ϕ_i - Fator auxiliar do insumo i
- NP - Número de Produtos
- NF - Número de Cargas
- NU - Número de Utilidades

Como o lucro deve ser maximizado e o NPSOL por definição minimiza a função objetivo, internamente o programa multiplica a função lucro por -1 . Caso o usuário deseje utilizar uma função que não possa ser expressa pela equação acima, ele deverá implementar função específica.

Há quatro tipos de variáveis de processo utilizadas (ver a definição na seção A-V.1.1): Variáveis fixas (p), Variáveis de decisão (x), Restrições (y) e Variáveis gerais (w). Todas podem estar entre as parcelas da função objetivo.

Em muitas aplicações, as equações do modelo matemático do processo estarão totalmente implícitas ao simulador PETROX. Nestes casos, não haverá restrições lineares a serem implementadas (a matriz A será nula), e os valores da função $c(x)$ serão dados por variáveis calculadas pelo simulador (y).

II.2.1.2 Implementação do problema de otimização – caso SM

Neste caso, a implementação do problema de otimização para um modelo com a estrutura SM no NPSOL toma a seguinte forma:

$$\begin{aligned} & \min_{x \in \mathcal{R}^n} L(\underline{x}) \\ \text{s.a. : } & \underline{l} \leq \underline{r}(\underline{x}) \leq \underline{u} \end{aligned} \quad (\text{AII-3})$$

$$\underline{r}(\underline{x}) \equiv \begin{pmatrix} x_i, i = 1, n\text{Idc} \\ y_j(\underline{x}), j = 1, n\text{Drt} \end{pmatrix}$$

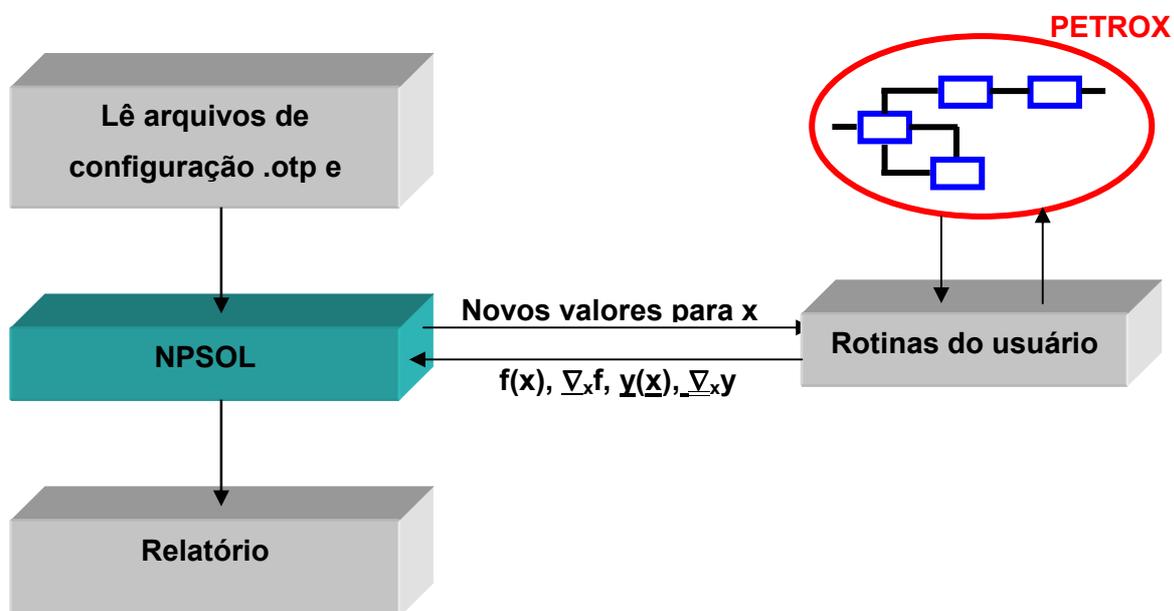
onde:

- $L(\underline{x})$ - Função Objetivo
- $\underline{y}(\underline{x})$ - Vetor de restrições não-lineares computadas pelo simulador PETROX
- nIdc - Número de variáveis de decisão
- nDrt - Número de restrições

A-II.3. ASPECTOS GERAIS

A-II.3.1. Implementação e uso

O programa utilizado para solução dos problemas de otimização deste trabalho baseia-se no programa NPSOL. O programa foi construído de forma que toda a configuração do problema possa ser feita sem a necessidade de alteração de códigos-fonte, quando o modelo a ser utilizado baseia-se no simulador PETROX. Modelos matemáticos baseados em códigos-fonte específicos ou outros simuladores



necessitam apenas da incorporação dos referidos códigos ao programa ou integração do simulador em questão através de um mecanismo apropriado de comunicação.

A-II.3.2. Configuração de variáveis

Tipos de Variáveis

A configuração do problema faz uso de quatro tipos de variáveis, que representam as variáveis de processo e seu papel em relação ao modelo do processo em estudo e ao problema de otimização. São elas:

- **Fixas (IFX)** – São variáveis independentes em relação ao modelo matemático que permanecem constantes ao longo de todo o problema de otimização.
- **Decisão (IDC)** – São variáveis independentes em relação ao modelo matemático que são variáveis de decisão para o problema de otimização, isto é, podem ser manipuladas pelo algoritmo de otimização na busca da solução.

- **Restrições (DRT)** – São variáveis dependentes em relação ao modelo matemático que representam restrições do problema de otimização. Assim, seu valor final deve estar dentro de limites estabelecidos para que a solução do problema possa ser considerada satisfatória.
- **Saídas Gerais (DGR)** – São variáveis dependentes em relação ao modelo matemático que não se constituem em restrições do problema de otimização, ou seja, seu valor final é livre.

Configuração de variáveis de processo

A configuração das variáveis de processo consiste em definir determinados valores, parâmetros e características. A primeira etapa da configuração de uma variável é classificá-la em um dos quatro tipos descritos acima. Em seguida, os seguintes atributos devem ser definidos:

Tabela AII-1 – ATRIBUTOS DE CONFIGURAÇÃO DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO

Atributo	Descrição	IFX	IDC	DRT	DGR
Tag		✓	✓	✓	✓
Descrição	Função da variável no processo	✓	✓	✓	✓
Unidade		✓	✓	✓	✓
Descriptor PETROX	String para interligação ao PETROX	✓	✓	✓	✓
Limite inferior de validação	Valor mínimo aceitável para execução do modelo	✓	✓	✓	✓
Limite superior de validação	Valor máximo aceitável para execução do modelo	✓	✓	✓	✓
Limite inferior de escalonamento	Parâmetro para escalonamento		✓	✓	
Limite superior de escalonamento	Parâmetro para escalonamento		✓	✓	
Limite inferior de operação	Valor mínimo admissível para a variável no problema de otimização		✓	✓	
Limite superior de operação	Valor máximo admissível para a variável no problema de otimização		✓	✓	
Valor inicial	Estimativa inicial para variáveis IDC; Valor fixo para variáveis IFX	✓	✓		
Bias	Valor fixo a ser adicionado ao valor de uma variável DRT ou DGR após execução do modelo			✓	✓
Flag de função econômica	Se 0, a variável não tem influência na função econômica; Se 1, tem influência	✓	✓	✓	✓
Preço	Valor, em unidades monetárias, associado a uma variável de processo	✓	✓	✓	✓
Fator de função econômica	Fator multiplicativo da variável na função econômica	✓	✓	✓	✓
Descrição do Fator de função econômica		✓	✓	✓	✓

A-II.3.3. Escalonamento de variáveis

O escalonamento de variáveis de decisão e restrições do problema de otimização é feito de forma que internamente as variáveis estejam preferencialmente dentro do intervalo [-1,1]. Para isto utiliza-se a transformação recomendada por GILL *et al.* (1998):

$$z = \frac{2 \cdot x - (x_{\min} + x_{\max})}{x_{\max} - x_{\min}} \quad \text{(AII-4)}$$

onde:

- x - Variável na escala original
- \underline{z} - Variável escalonada
- x_{\min} - Limite mínimo de escalonamento
- x_{\max} - Limite máximo de escalonamento

ANEXO III - MODELOS *KRIGING*

A-III.1. IMPLEMENTAÇÃO DO EXEMPLO DE SASENA (2002)

Apresenta-se a seguir o código MATLAB utilizado para implementar o exemplo proposto por SASENA (2002), baseado no *toolbox* DACE.

```

% Reprodução do estudo de caso de SASENA(2002), pg 51.
% Este exemplo reproduz o teste de Sasena, utilizando contudo a função
% correlação de Gauss
% >>> Graficos em separado
clc
clear all
close all

% Dados de entrada

% Parametros da funcao DACE - geracao do modelo

lb = [ 0.01]'; % Limite mínimo de theta
ub = [100 ]'; % Limite máximo de theta
t0(1) = 5 % Estimativa inicial de theta

corr = 'corrGauss'; % Modelo selecionado da funcao correlacao

% Sites de projeto
sA = [0:10/6:10]'; % Modelo Kriging A
sB = [0 2 4 5 6 8 10]'; % Modelo Kriging B

% Gráfico das Predições
axY = [0 10 7.5 10]; % Vetor para dimensionamento dos eixos
Yt1X = 4.5; Yt1Y = 10.1; % Coordenadas txt1 dos graficos de Predicao
fntsz = 10; fntsz2 = 10;
t1 = 'Y(x) = -seno(x)-exp(x/100)+10';
t2 = 'Estimacao c\ modelo kriging';
t3 = 'Kriging nos pontos de projeto';

% Calculo da função objetivo
X=0; % Valor de X em que a função será avaliada
thetamax = 30;
theta=[0.01:0.01:0.1 0.1:0.1:1 1:1:thetamax]; % Valores de theta em que a
%função será avaliada

fmax = 1.0d1 % Limite máximo/mínimo do gráfico
axfob = [0 thetamax 0 fmax]; % Vetor para dimensionamento do gráfico
Ft1X = 13; Ft1Y = 10.5; % Coordenadas txt1 do grafico da Funcao Objetivo
Ftxt1 = [ ' x = { ' num2str(X) ' } '];
Ft2X = 1.5; Ft2Y = 1.55; % Coordenadas txt 2 do grafico da Funcao Objetivo
Ftxt2 = [ '(3.97,0.97)'];
Ft3X = 1.5; Ft3Y = 1.3; % Coordenadas txt 3 do grafico da Funcao Objetivo
Ftxt3 = [ '(3.97,0.67)'];
Ft4X = 27.6; Ft4Y = 1.5; % Coordenadas txt 4 do grafico da Funcao Objetivo
Ftxt4 = [ '(30.0,0.83)'];

```

```

% Cálculo com a função real
x0 = [0:0.1:10]'; % Coordenadas de avaliação

[Yrig] = fSasena(x0);
figure
plot(x0,Yrig)

% Nas coordenadas de projeto
[Y_A] = fSasena(sA);
[Y_B] = fSasena(sB);

% Modelo Kriging A

% Geração

S = sA; Y = Y_A; [dmodel, perf] = dacefit(S,Y, @regpoly0, corr, t0, lb, ub);
dmodelA = dmodel; perfA = perf;

% Predição
Xprd = sort([x0; S]); % Combina sites de projeto com sites de predição
YprdA = predictor(Xprd, dmodelA);

% Grafico Predição
figure;
plot(x0,Yrig,'--',Xprd,YprdA,'-',S,Y_A,'o',
'LineWidth',2,'MarkerSize',10)
axis(axY) ; legend({t1;t2;t3},'Location','South','FontSize',fntsz2)
Ytxt1 = [ '\theta = { ' num2str(dmodel.theta) ' } '];
text(Yt1X,Yt1Y,{Ytxt1;''},'FontSize',fntsz)
xlabel({' x';''},'FontSize',fntsz)
ylabel({'Y(x, ' '\theta' ' ) 'j','Rotation',0,'FontSize',fntsz)

% Grafico função objetivo
szt = length(theta);
for ind=1:szt
    [dm, perf] = dacefit(S,Y, @regpoly0, corr, theta(ind));
    fi(ind) = perf.perf(2);
end

grid on
% subplot(2,2,2); plot(theta,fi); axis(axfob)
figure; plot(theta,fi,4,0.97,'ro',30,0.83,'ro',...
'LineWidth',2,'MarkerSize',10); axis(axfob)
text(Ft1X,Ft1Y,{Ftxt1;''},'FontSize',fntsz)
text(Ft2X,Ft2Y,{Ftxt2;' \downarrow'},...
'FontSize',fntsz2, 'FontWeight','bold')
text(Ft4X,Ft4Y,{Ftxt4;' \downarrow'},...
'FontSize',fntsz2, 'FontWeight','bold')
xlabel({' \theta';''},'FontSize',fntsz)
ylabel({'\psi' '(x, ' '\theta' ' ) 'j','Rotation',0,'FontSize',fntsz)
grid on
% Modelo Kriging B

% Geração
S = sB; Y = Y_B; [dmodel, perf] = dacefit(S,Y, @regpoly0, corr, t0, lb, ub);
dmodelB = dmodel; perfB = perf;

```

```

% Prediçao
Xprd = sort([x0; S]); % Combina sites de projeto com sites de prediçao
[YprdB] = predictor(Xprd, dmodelB);

% Grafico prediçao
figure;
plot(x0,Yrig,'--',Xprd,YprdB,'-',S,Y_B,'o', 'LineWidth',2,'MarkerSize',10)
axis(axY) ; legend({t1;t2;t3},'Location','South','FontSize',fntsz2)
Ytxt1 = [ '\theta = { ' num2str(dmodel.theta) ' } '];
text(Yt1X,Yt1Y,{Ytxt1;''},'FontSize',fntsz)
xlabel({' x';''},'FontSize',fntsz)
ylabel(['Y(x, ' '\theta' ' )          '], 'Rotation',0,'FontSize',fntsz)
grid on

% Grafico funçao objetivo
for ind=1:sz
    [dm, perf] = dacefit(S,Y, @regpoly0, corr, theta(ind));
    fi(ind) = perf.perf(2);
end

figure;
plot(theta,fi,4,0.675,'ro',30,0.83,'ro','LineWidth',2,'MarkerSize',10);
axis(axfob)
text(Ft1X,Ft1Y,{Ftxt1;''},'FontSize',fntsz)
text(Ft3X,Ft3Y,{Ftxt3;''          \downarrow'},...
     'FontSize',fntsz2, 'FontWeight','bold')
text(Ft4X,Ft4Y,{Ftxt4;''          \downarrow'},...
     'FontSize',fntsz2, 'FontWeight','bold')
xlabel({' \theta';''},'FontSize',fntsz)
ylabel(['\psi' '(x, ' '\theta' ' )          '], 'Rotation',0,'FontSize',fntsz)
grid on

```

```

% Função do estudo de caso de SASENA(2002), pg 51.

```

```

function [f] = fSasena(x)

```

```

f = -sin(x)-exp(x/100)+10;

```

```

% -----

```

ANEXO IV - REDES NEURONAIS

As ferramentas para geração de redes neuronais e simulação utilizadas neste trabalho utilizam um grupo de funções desenvolvidas no toolbox MATLAB em projeto de desenvolvimento entre a PUC do Rio de Janeiro e a PETROBRAS para treinamento de redes neuronais (BARBOSA, 2002). Este grupo de funções baseia-se no toolbox MATLAB de redes neuronais, a partir do qual foi implementado procedimento para obtenção de redes a partir de dados de processo.

Os códigos-fonte a seguir são os procedimentos desenvolvidos neste trabalho para adaptar este procedimento, tornando-o adequado para a utilização de redes neuronais como metamodelos.

Simulação com redes neuronais

```
function [Ycalc] = calc_rn(Xvalid, Yvalid, rg_in, rg_out, net)  
[Xn, Yn] = normaliza(Xvalid, Yvalid, rg_in, rg_out);  
Yn = sim(net, Xn');  
% desnormaliza  
[X, Ycalc] = desnormaliza(Xn, Yn', rg_in, rg_out);
```



```

function [best_net, MAPE_TR, MAPE_VA, MAPE_TR_med, MAPE_VA_med,
ranges_in, ranges_out] =...

gera_rn(nXsel, Xtr, Ytr, Xvalid, Yvalid, tipomedia, window, fun_transf, Nhidden, Nredes)

% Esta funcao encapsula o procedimento gerado pela PUC para a
% PETROBRAS. Ele treina uma rede a partir de dados estaticos obtidos do simulador,
% e portanto sem necessidade de pré-tratamento.

% Entradas

% nXsel - No de variaveis independentes na rede

% Xtr - Matriz de dados de variáveis independentes para treinamento

% Ytr - Vetor de dados de variável dependente para treinamento

% Xvalid - Matriz de dados de variáveis independentes para validação

% Yvalid - Vetor de dados de variável dependente para validação

% tipomedia - Tipo de média: Aritmetica ("MA") ou Ponderada ("MP")

% window - Janela de correspondencia - neste caso é sempre 1

% Nhidden - numero de neuronios da camada escondida da rede

% Nredes - No de redes a serem treinadas durante o processo de seleção

% fun_transf(1:2) - Função de transferencia nas camadas de entrada e saida

%

% Saídas

%

% best_net - Estrutura MATLAB com a rede

% MAPE_TR - Erro de predição com dados de treinamento para cada rede

% MAPE_VA - Erro de predição com dados de validação para cada rede

% MAPE_TR_med - Erro de predição médio com dados de treinamento para cada rede

% MAPE_VA_med - Erro de predição médio com dados de validação para cada

% ranges_in - Matriz 2 x nXsel com limites de escalonamento de variáveis
independentes

% ranges_out - Matriz 2 x 1 com limites de escalonamento de variáveis independentes

janela = 0;

[Xc, Yc, n_lab] = limpa_extrai(Xtr, Ytr, janela);

%>> Atribui diretamente as variaveis de entrada

[Xf, Yf] = junta_tudo(Xc, Yc);

```



```
% Deleta arquivos MAT auxiliares  
  
delete(strcat('padroes_',tipomedia,num2str(window),'.mat'))  
  
delete(strcat('padroese_',tipomedia,num2str(window),'.mat'))
```

ANEXO V - FERRAMENTAS DESENVOLVIDAS PARA EXECUÇÃO DO TRABALHO

Diversas ferramentas foram implementadas para viabilizar o desenvolvimento deste trabalho. A seguir é apresentada uma breve descrição destas ferramentas e o procedimento para seu uso.

Os seguintes procedimentos foram implementados:

- Configuração de problemas de otimização
- Geração de dados para treinamento de metamodelos baseado no planejamento LHD (SANTNER *et al.*, 2003).
- Geração de dados para mapeamento de funções
- Estimativa de parâmetros de modelos *kriging*
- Estimativa de parâmetros de redes neuronais
- Computar previsões com metamodelos
- Otimização baseada no pacote NPSOL
- Otimização sequencial por aproximações (SAO)

A-V.1. CONFIGURAÇÃO DE PROBLEMAS DE OTIMIZAÇÃO

A interface de configuração foi implementada utilizando a plataforma Microsoft Visual Basic versão 6.0. Sua finalidade é permitir a entrada das informações necessárias à configuração de um problema de otimização de forma simples, minimizando a ocorrência de erros de configuração. O problema de otimização configurado através da interface é registrado em um arquivo ASCII que poderá ser posteriormente lido através do programa de otimização:

Arquivos .OTP – Contém a configuração básica do problema de otimização.

Outras informações de configuração além das disponíveis na interface seriam necessárias para a implementação de um sistema de otimização em uma unidade de processo em tempo real. Estas informações não foram consideradas por não serem relevantes na realização deste trabalho.

A-V.1.1. Configuração Básica

Operações básicas

As operações básicas de manuseio dos arquivos de configuração .OTP podem ser realizadas através da tela inicial (ver figura), como criar, abrir, salvar e imprimir. O procedimento para a execução destas operações é similar ao utilizado em *softwares* típicos do ambiente **Microsoft Windows**.

As informações gerais de configuração são também informadas nesta tela, porém sem acesso ao usuário.

No *frame* **Configuração**, estão disponíveis quatro botões utilizados para chamar as quatro telas de configuração complementares: **Geral, Variáveis e Algoritmo**.

O *frame* **Serviços** apresenta dois botões. O botão *Executa Cálculo* dispara o programa de otimização, enquanto o botão *Leitura de Resultados* permite a leitura do arquivo de resultados através de um editor de texto.

The screenshot displays the IHM_OT v8.0 application window. The title bar reads 'IHM_OT v8.0' and the menu bar includes 'File', 'Edit', 'Tools', and 'Help'. Below the menu bar is a toolbar with icons for file operations. The main area contains several input fields for configuration: 'Projeto', 'Problema', 'Caso', 'Arq. Configuração', 'Arquivo da simulação', 'Simulação alternativa' (with '(desabilitada)' next to it), 'Arquivo Executável', 'Arquivo de Saída', 'Arq. Conexões', and 'Sim. PTX desacoplado'. A 'Comentários' field is located at the bottom left of the configuration section. At the bottom, there are two panels: 'Configuração' with a checkbox for 'Problema desacoplado' and buttons for 'Geral', 'Variáveis', 'Algoritmo' (highlighted with a dashed border), and 'Conexões'; and 'Serviços' with buttons for 'Executa Cálculo', 'Leitura de Resultados', and 'Opções PETROX TR'. The status bar at the bottom shows 'Status', the date '14/05/2007', and the time '22:09'.

Informações Gerais

Ao selecionar o botão **Geral** na tela inicial, é ativada a tela Configuração – Dados Gerais (ver figura), onde as seguintes informações podem ser definidas:

- **Projeto** – Descrição do projeto ou estudo a que pertence o problema de otimização em configuração;
- **Caso** – Descrição do problema específico em configuração;
- **Arquivo de configuração** – Nome e endereço do arquivo .OTP em questão

Configuração - Dados Gerais

Projeto : RECAP_5 - Estudo de otimização p/ as U500 & U750/RECAP

Caso : RECAP_5_CDSxx

Problema : Reconciliação de Dados Otimização

Arquivo de Configuração : C:\PETROX_OT\RECAP_5\RECAP_DCS17_v3.otp

Arquivo PETROX : C:\PETROX_OT\RECAP_5\recap_5_DCS17.px

Utilizar simulação alternativa

Simulação alternativa

Arquivo PETROX :

Arquivo Executável : C:\Marcos\PETROX_Ot_1\Debug\PETROX_Ot_1.exe

Arquivo de Saída : Ot.rel

Arquivo de Conexões : Não se aplica

Sim. PTX desacoplada : Não se aplica

Comentários : Associado ao RECAP_DCS15.px: Influencia PPA na T.carga da N507; 2a. restricao de igualdade; Bias na

- **Arquivo PETROX** - Nome e endereço do arquivo de entrada do simulador PETROX para a simulação seqüencial do processo em estudo.
- **Arquivo Executável** - Nome e endereço do arquivo executável do programa de otimização;

- **Arquivo de saída** - Nome e endereço do arquivo de saída do programa de otimização
- **Sim. PTX desacoplada** – Nome e endereço do arquivo de entrada do simulador PETROX para a simulação desacoplada.
- **Comentários** – Informações adicionais de interesse do usuário.

Configuração de variáveis

O botão **Variáveis** na tela inicial dá acesso à tela **Configuração de Variáveis** (ver figura), onde são definidas as variáveis que tomarão parte no problema de otimização. Cada variável tem um conjunto de atributos que ficam armazenados sob a forma de **registros**. A criação ou manuseio dos registros podem ser feitos através dos botões **Atualiza**, **Inserir**, **Edita**, **Exclui**. Os atributos comuns a todas as variáveis são:

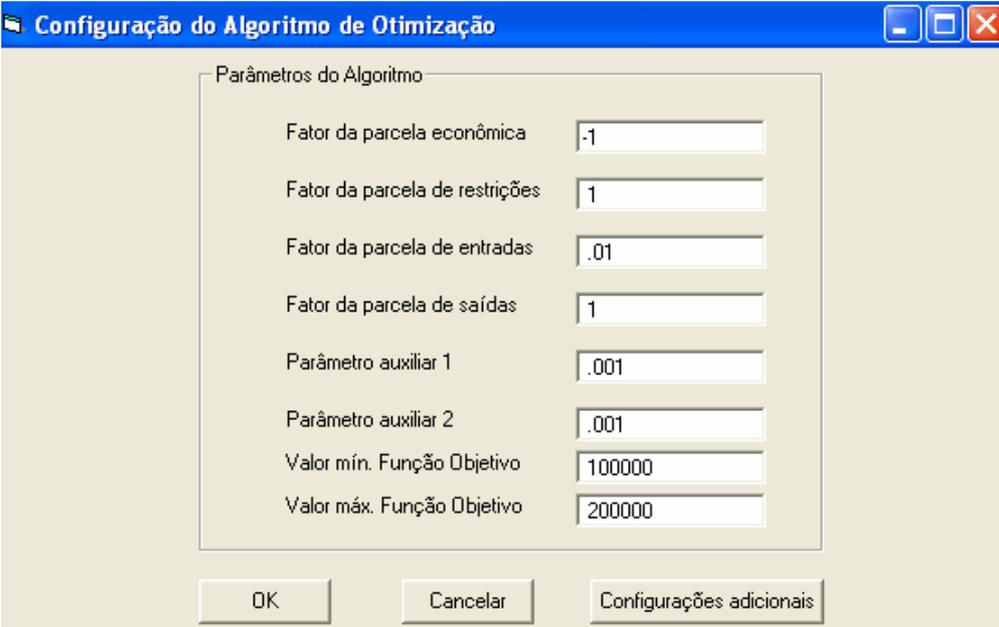
- **Tag**
- **Unidade**
- **Descrição**
- **String PETROX** – String que contém as informações necessárias para acesso à variável correspondente na simulação PETROX, quando necessário.

Em seguida, são definidos parâmetros para a função objetivo. A seguir, pode-se definir o tipo de variável a ser configurado. Existem quatro tipos possíveis de variáveis:

- **Entradas fixas (Ifx)** – Variáveis de entrada do modelo cujo valor é definido inicialmente e mantido constante ao longo da solução do problema de otimização. Através da interface pode-se definir o valor que a variável deverá adotar;
- **Variáveis de Decisão (Idc)** – Variáveis de decisão do problema de otimização. Para estas variáveis o usuário deverá fornecer os limites operacionais, limites de escalonamento e estimativa inicial;
- **Restrições (Drt)** – Variáveis dependentes do modelo do processo cujo valor deve estar sujeito a limites. Para estas variáveis o usuário deverá fornecer os limites operacionais, e os limites de escalonamento;
- **Saídas gerais (Dgr)** – Variáveis dependentes quaisquer do modelo do processo cujo valor se deseja computar ao longo da solução do problema de otimização. Nenhum atributo adicional pode ser definido para esta variável.

Configuração do Algoritmo

O botão **Algoritmo** aciona a tela **Configuração do Algoritmo de Otimização** (ver figura). Nela podem ser definidos parâmetros auxiliares utilizados pelo programa para o controle de convergência, entre outros. Os limites de escalonamento da função objetivo são essenciais para a utilização bem-sucedida do programa NPSOL.



A imagem mostra a janela de configuração do algoritmo de otimização. O título da janela é "Configuração do Algoritmo de Otimização". O conteúdo principal é um formulário com o título "Parâmetros do Algoritmo" que contém os seguintes campos de entrada:

Parâmetro	Valor
Fator da parcela econômica	-1
Fator da parcela de restrições	1
Fator da parcela de entradas	.01
Fator da parcela de saídas	1
Parâmetro auxiliar 1	.001
Parâmetro auxiliar 2	.001
Valor mín. Função Objetivo	100000
Valor máx. Função Objetivo	200000

Na base da janela, há três botões: "OK", "Cancelar" e "Configurações adicionais".

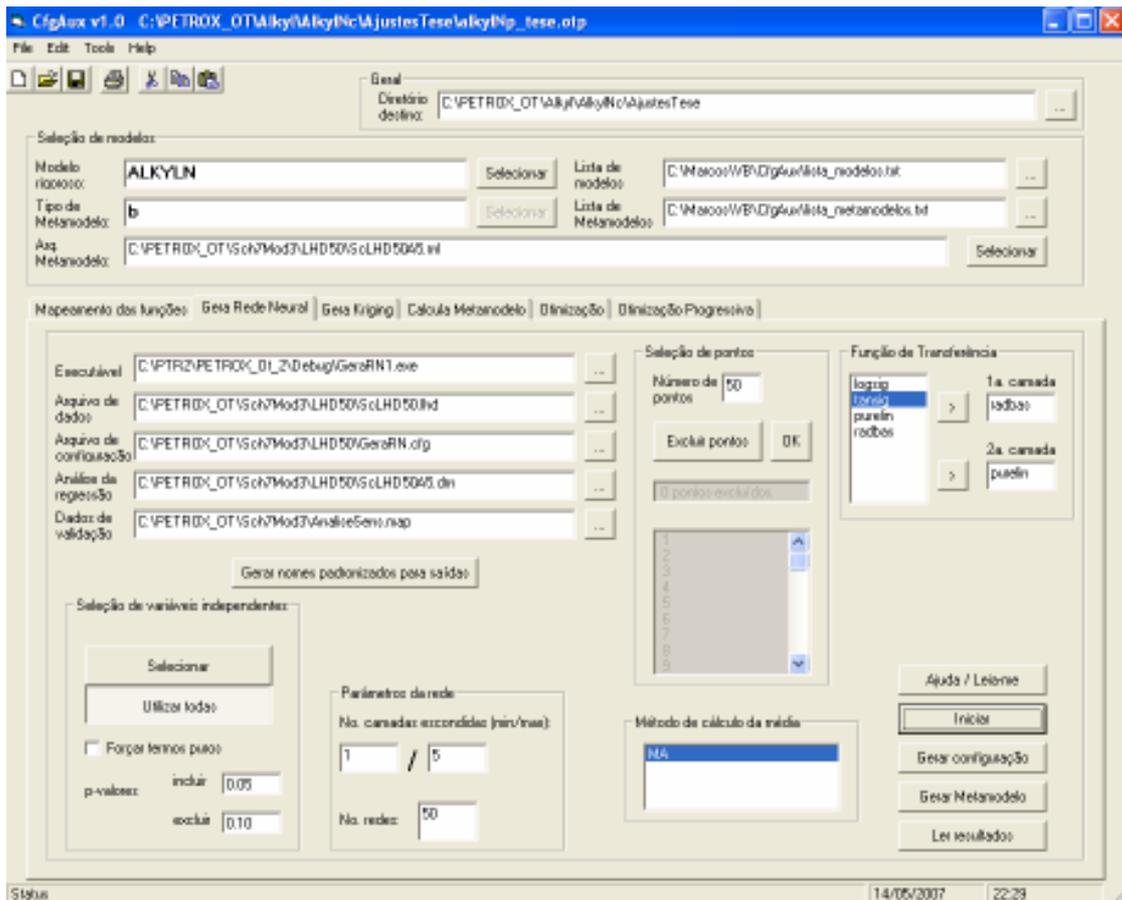
A-V.2. EXECUÇÃO DOS PROCEDIMENTOS DE CÁLCULO

Através da interface **CfgAux** é possível executar todos os procedimentos de cálculo desenvolvidos neste trabalho. Para isso, deve-se inicialmente seguir os seguintes passos:

- (i) Carregar o arquivo **OTP** criado com a interface IHM_Ot, na opção **File** do menu.
- (ii) Definir o diretório destino no campo superior à esquerda. Arquivos de configuração, e relatórios serão gerados neste diretório.
- (iii) Se o procedimento a ser executado necessita executar um modelo rigoroso, ele deverá ser selecionado da lista disponibilizada ao usuário através do botão **SELECIONAR** no frame **Seleção de modelos**.
- (iv) Se o procedimento a ser executado necessita executar um metamodelo, o nome do arquivo (com o caminho) que contém os dados do modelo deverá ser preenchido no campo **Arquivo do Metamodelo** no frame **Seleção de modelos**.
- (v) Selecionar o procedimento desejado através das abas.

Gera rede neuronal

- (i) Preencher os campos com os nomes de arquivos solicitados;
- (ii) Selecionar através do botão se todas as variáveis independentes disponíveis serão utilizadas ou se o procedimento Forward stepwise regression para seleção de variáveis deverá ser utilizado. Os p-valores para inclusão ou exclusão podem ser alterados dos valores default se desejado.
- (iii) No frame **parâmetros da rede** deve-se fornecer os valores mínimo e máximo de neurônios na camada intermediária, a ser definido pelo procedimento de estimação; Forneça também o número de redes a ser gerado para posterior seleção.

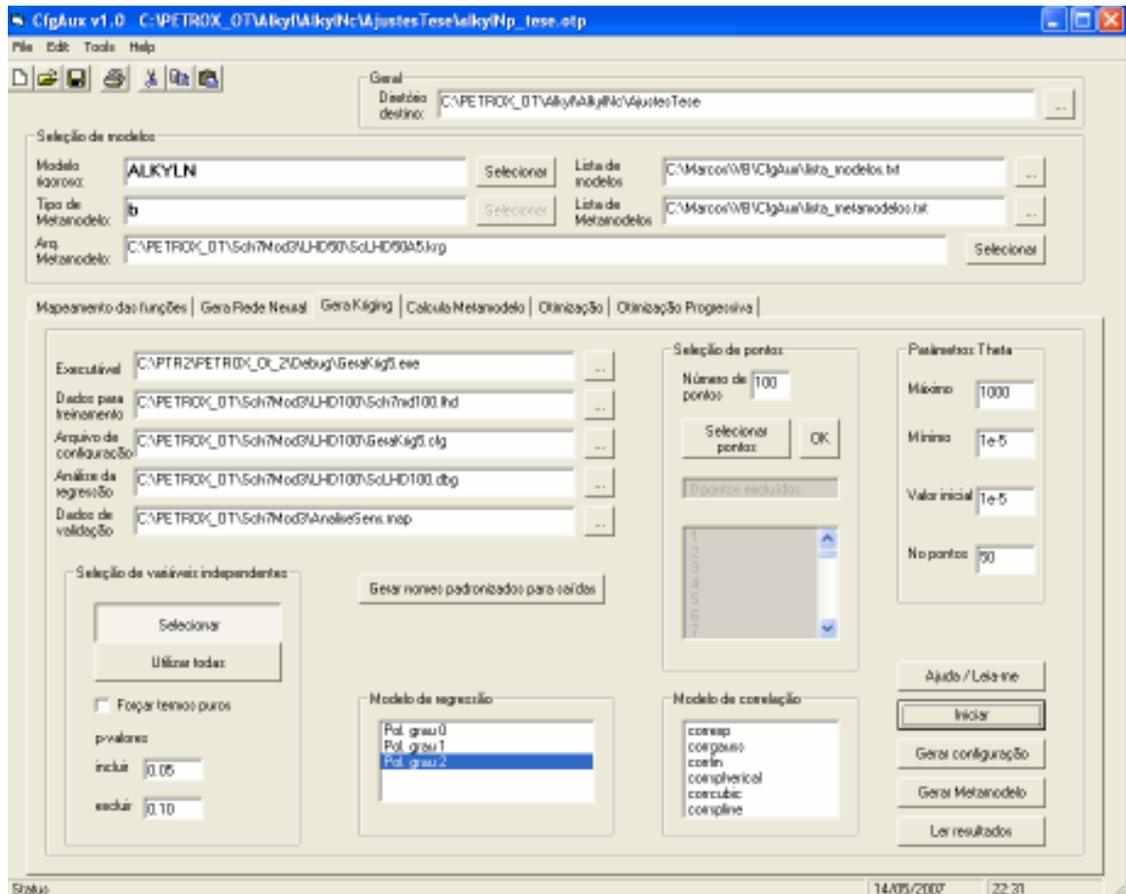


- (iv) Acione o botão **iniciar**. O número de pontos disponíveis no arquivo de treinamento surgirá no campo **Número de pontos**. Se for necessário excluir algum ponto do arquivo, acione o botão **Excluir pontos** e faça a seleção.
- (v) Selecione as funções de ativação da camada intermediária (1ª camada) e da camada de saída (2ª camada).
- (vi) Acione o botão **Gerar Configuração** para salvar o arquivo de configuração.
- (vii) Acione o botão **Gerar Metamodelo** para executar o programa.
- (viii) Acione o botão **Ler resultados** para visualizar o arquivo de configuração do modelo.

Gera kriging

- (i) Preencher os campos com os nomes de arquivos solicitados;
- (ii) Selecionar através do botão se todas as variáveis independentes disponíveis serão utilizadas ou se o procedimento Forward stepwise regression para seleção de variáveis deverá ser utilizado. Os p-valores para inclusão ou exclusão podem ser alterados dos valores default se desejado.

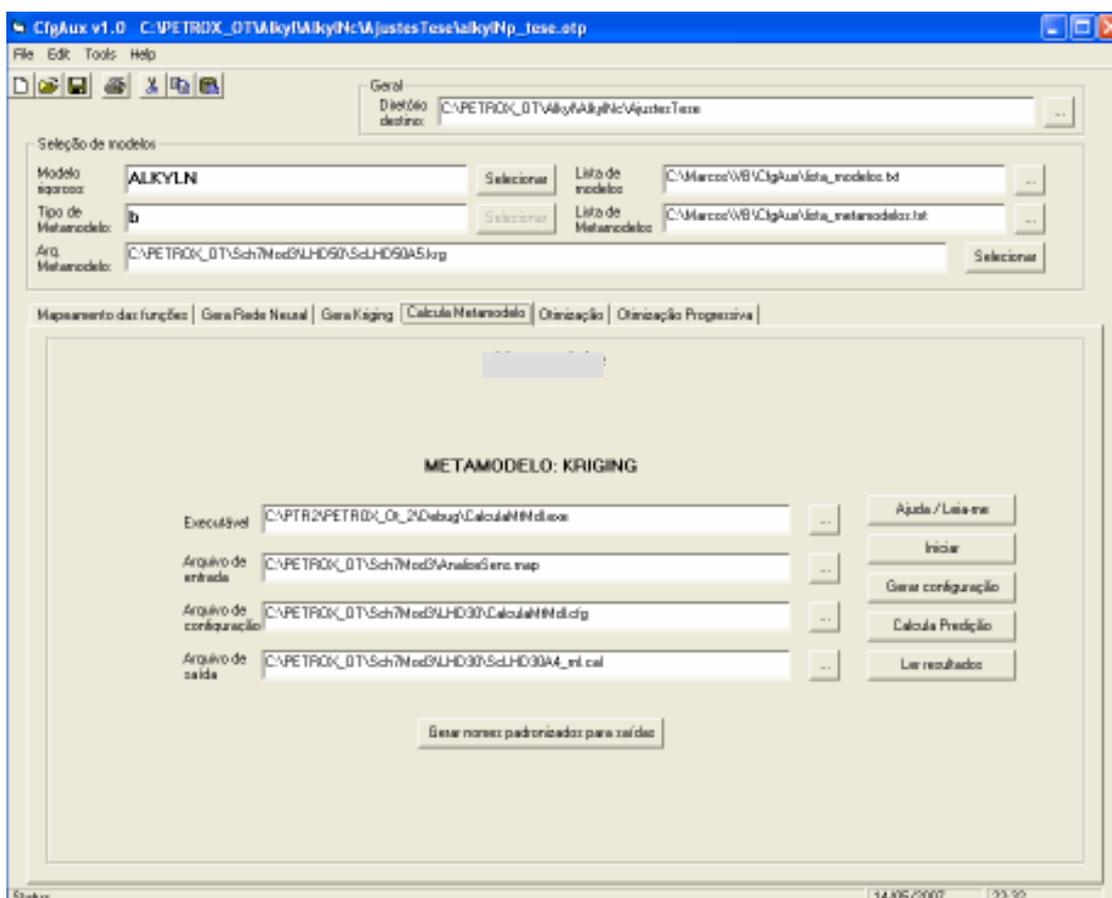
- (iii) No frame **modelo de regressão** deve-se selecionar a ordem do modelo de regressão. Se a opção **Selecionar variáveis** estiver habilitada, o programa irá selecionar as variáveis independentes a partir do modelo quadrático.
- (iv) No frame **modelo de correlação** deve-se selecionar os modelos que o procedimento irá considerar como candidatos a compor os modelos *kriging* a serem gerados.



- (v) No frame **Parâmetros theta**, deve-se fornecer os limites máximo, mínimo e uma estimativa inicial para os parâmetros θ . Forneça também o número de modelos *kriging* a ser gerado para posterior seleção.
- (vi) Acione o botão **iniciar**. O número de pontos disponíveis no arquivo de treinamento surgirá no campo **Número de pontos**. Se for necessário excluir algum ponto do arquivo, acione o botão **Excluir pontos** e faça a seleção.
- (vii) Acione o botão **Gerar Configuração** para salvar o arquivo de configuração.
- (viii) Acione o botão **Gerar Metamodelo** para executar o programa.
- (ix) Acione o botão **Ler resultados** para visualizar o arquivo de configuração do modelo.

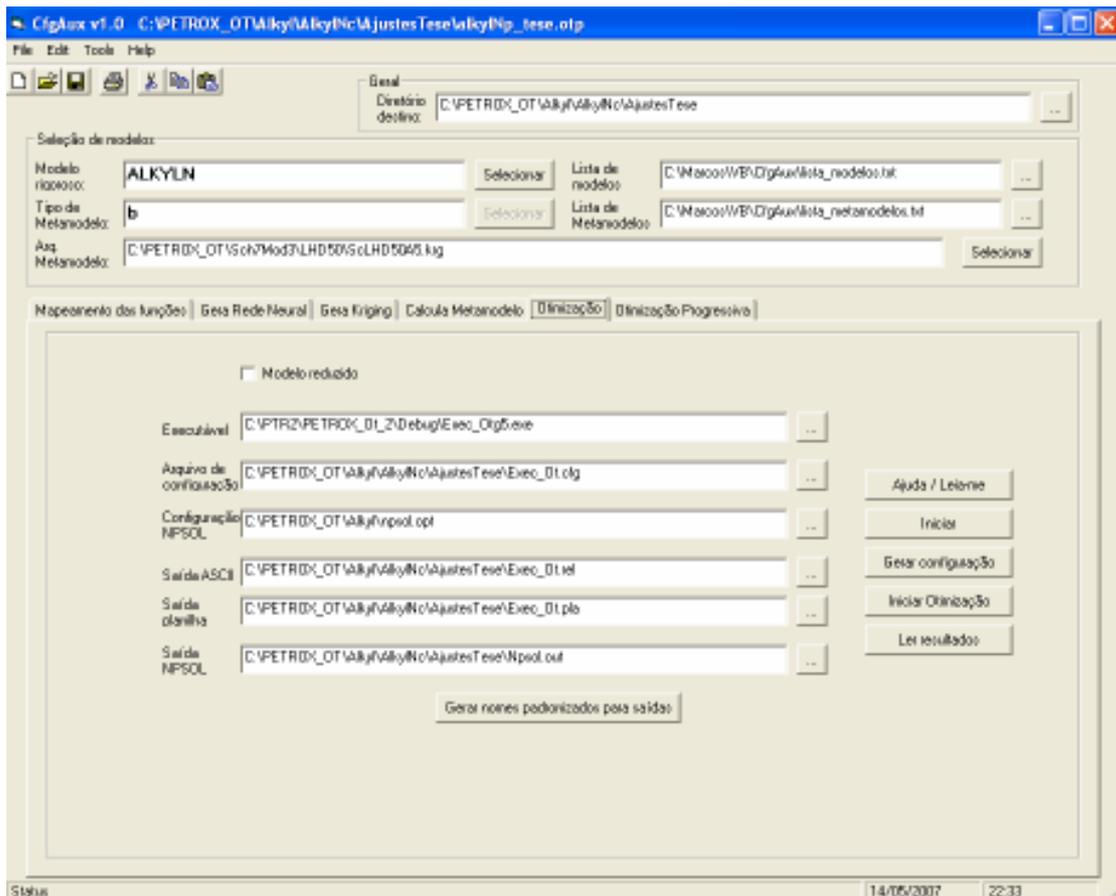
Gera kriging

- (i) Preencher os campos com os nomes de arquivos solicitados;
- (ii) Acione o botão **Gerar Configuração** para salvar o arquivo de configuração.
- (iii) Acione o botão **Calcula Predição** para executar o programa.
- (iv) Acione o botão **Ler resultados** para visualizar o arquivo de saída



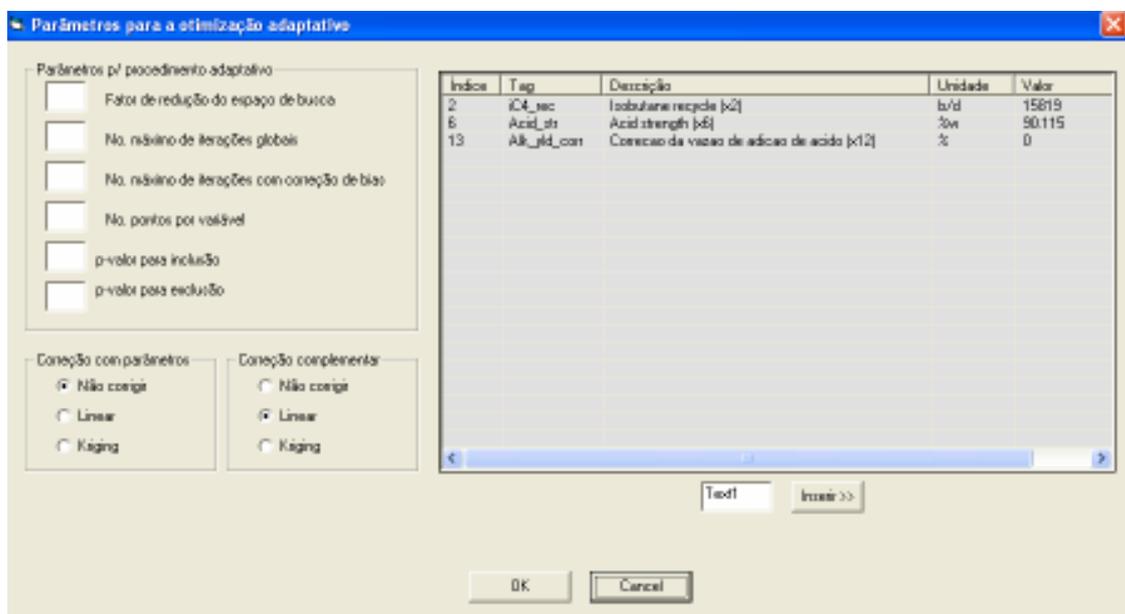
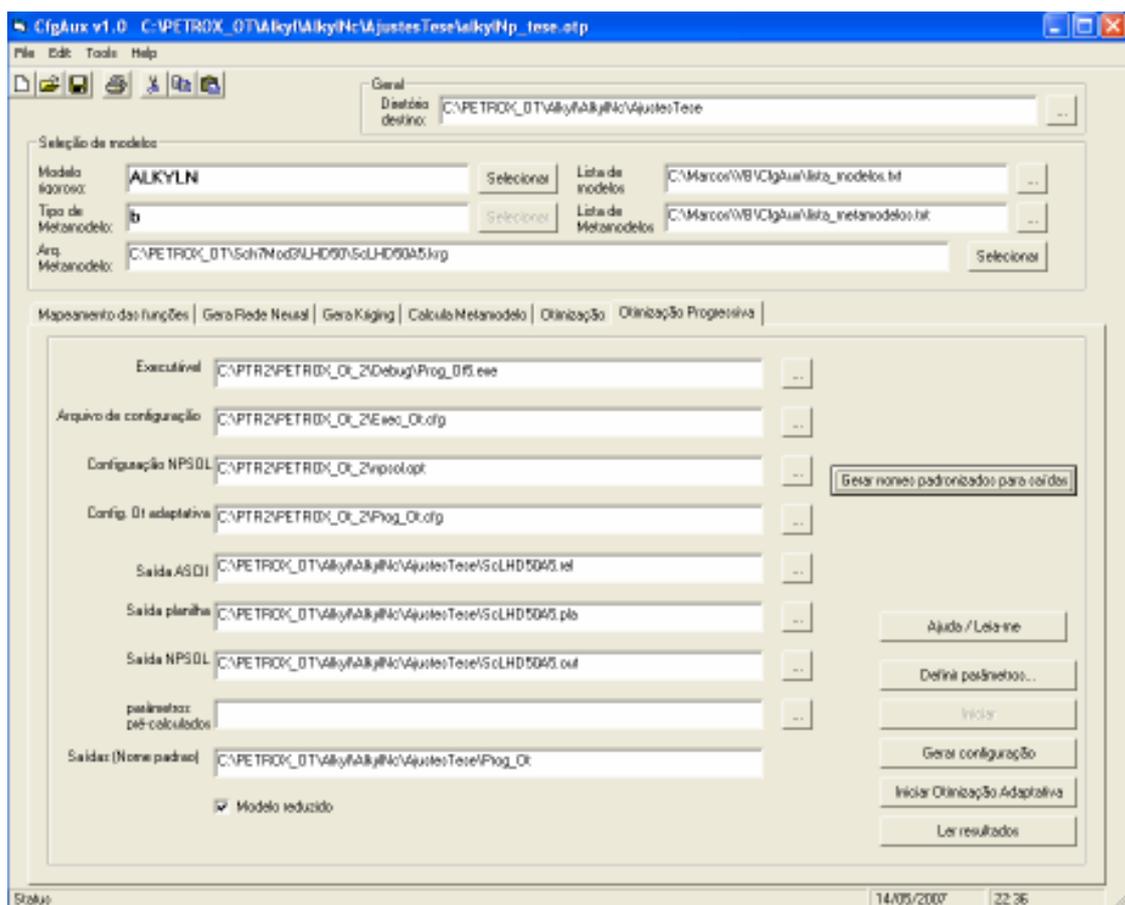
Otimização

- (i) Preencher os campos com os nomes de arquivos solicitados;
- (ii) Selecione a opção **Modelo reduzido**, se for desejado computar predições com metamodelos;
- (iii) Acione o botão **Gerar nomes padronizados para saídas** se desejado
- (iv) Acione o botão **Gerar Configuração** para salvar o arquivo de configuração.
- (v) Acione o botão **Iniciar Otimização** para executar o programa.
- (vi) Acione o botão **Ler resultados** para visualizar o arquivo de saída



Otimização Seqüencial por Aproximações (SAO)

- (i) Preencher os campos com os nomes de arquivos solicitados;
- (ii) A opção **Modelo reduzido** não pode ser alterada;
- (iii) Acione o botão **Gerar nomes padronizados para saídas** se desejado
- (iv) Acione o botão **Definir parâmetros** para acionar a janela **“Parâmetros para otimização adaptativa”**. Nesta janela pode-se alterar parâmetros do procedimento SAO ou valores de variáveis IFX da configuração.
- (v) Acione o botão **Gerar Configuração** para salvar o arquivo de configuração.
- (vi) Acione o botão **Iniciar Otimização** para executar o programa.
- (vii) Acione o botão **Ler resultados** para visualizar o arquivo de saída



ANEXO VI - INFORMAÇÕES COMPLEMENTARES PARA O EXEMPLO P1

A-VI.1. OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE

A seguir é apresentado em detalhes a solução do problema de otimização para o exemplo P1.

>>> Resultado final

<<<

Projeto : Versão modificada do Test case no. 7 de Schittkowski

Exemplo : Base - Clone do Sch7mod para otimização c/ diferentes parâmetros

Data: 11/ 1/2007 23:30:00

Arquivo de configuração :	C:\PETROX_OT\Sch7Mod3\Sch7mod.otp
Arquivo de simulação :	
Arquivo de simulação alt. :	
No. de variáveis de decisão :	2
No. de restrições de desigualdade:	1
No. de restrições de igualdade:	0
Function Precision:	1.00E-10
Feasibility Tolerance:	1.00E-10
Fator mult. da Função Obj.:	1
Fator das var. dec. de cnx.:	1
Fator restrições desigualdade.:	1
Fator restrições de conex.:	1
Valor Mínimo Função Obj.:	-1
Valor Maximo Função Obj.:	1

RESULTADOS

Função Objetivo - valor inicial :	-0.707106781
Função Objetivo (modelo reduzido) :	0.00E+00
Função Objetivo (modelo rigoroso) :	-0.229164352
Status de término :	0
No. de iterações :	0
No. de cálculos da função :	74
No. de cálculos do gradiente :	72
No. de cálculos das restrições :	0
No. de cálculos do Jacobiano :	0

No. de simulações : 56

Tempo de execução (min) : 0

VARIÁVEIS DE DECISÃO

	Descrição	TAG	Unidade	ScalMin	ScalMax	Xpass	Xinic	X_min	X*	X_max	At	X_Lag
1	Var. x1	x1	adimensional	-1	1	0	0	-0.4	0.671513	1	---	0
2	Var. x2	x2	adimensional	-1	1	0	0	-0.4	0.374513	1	---	0

RESTRIÇÕES

	Descrição	Tag	Unidade	ScalMin	ScalMax	Bias	Ginic	G_min	G*	ĝ*	G_max	At	G_Lag
1	Eq. constraint	h(x1:x2)	adimensional	-1	1	0	-0.957007	0	8.80E-11	0	0	AHL	0.288

VARIÁVEIS DE ENTRADA COM VALOR FIXO

	Descrição	Tag	Unidade	Valor
1	Parâmetro w	w	adimensional	6
2	parâmetro alfa	alfa	adimensional	1
3	Parâmetro fi	fi	adimensional	1

VARIÁVEIS DE SAÍDA GERAIS

	Descrição	Tag	Unidade	Bias	Val.Inic.	Val.Final	Val.Final Aprox.
1	Função objetivo	f(x1:x2)	adimensional	0	-0.707107	-0.229164	0

ANÁLISE DA FUNÇÃO OBJETIVO

	Descrição	TAG	Unidade	Preço	Fator Aux.	ParcAbs Fobj	%Rel Fobj	Valor Inic	Valor Final	At	X_Lag
1	Var. x1	x1	adimensional	0	0	0	0	0	0.671513	---	0
2	Var. x2	x2	adimensional	0	0	0	0	0	0.374513	---	0
1	Eq. constraint	h(x1:x2)	adimensional	0	0	0	0	-0.957007	8.80E-11	AHL	0.2881
1	Parâmetro w	w	adimensional	0	0	0	0	6	0		0
2	parâmetro alfa	alfa	adimensional	0	0	0	0	1	0		0
3	Parâmetro fi	fi	adimensional	0	0	0	0	1	0		0
1	Função objetivo	f(x1:x2)	adimensional	1	1	-0.2292	100	-0.707107	-0.229164		0

ANEXO VII - INFORMAÇÕES COMPLEMENTARES PARA O EXEMPLO P2

A-VII.1. A CONFIGURAÇÃO DA SIMULAÇÃO

A seguir apresenta-se em detalhe a simulação PETROX utilizada para descrever as unidades de destilação e Solventes da RECAP, considerando os seguintes aspectos:

- Caracterização de correntes de hidrocarbonetos
- Composição da carga
- Estrutura da simulação, módulos e seqüência de cálculo
- Estratégias de simulação
- Cálculos específicos

A-VII.1.1. Caracterização de correntes de petróleo

As correntes de petróleo e derivados utilizadas foram definidas por um único grupo de corte (Tabela AVII-1), que utiliza 35 pseudocomponentes. Os dados experimentais dos petróleos *Albacora* e *Sahara Blend* oriundos do **Banco de Dados de Avaliação de Petróleos** da PETROBRAS foram então utilizados pelo simulador PETROX para gerar o conjunto de pseudo-componentes a ser utilizado (ver propriedades que os definem na Tabela AVII-2. Além disto, foram utilizados 18 componentes puros, apresentados na Tabela AVII-3.

Tabela AVII-1 – GRUPO DE CORTES UTILIZADO NA SIMULAÇÃO PETROX

Temperatura (°C)	Nº de pseudo-componentes
100	4
200	6
220	5
230	5
300	5
400	5
500	2
800	3

**Tabela AVII-2 – PROPRIEDADES DOS PSEUDO-COMPONENTES DA SIMULAÇÃO
PETROX**

	NOME	TEMP. NORMAL DE EBULIÇÃO (°C)	PESO MOLECULAR	DENSIDADE @20/4 °C
1	NBP_3_75	75.2511	89.0639	0.7072
2	NBP_3_82	82.2128	92.3229	0.7192
3	NBP_3_89	89.1783	95.6834	0.7241
4	NBP_3_96	96.1359	99.0682	0.7310
5	NBP_3_108	107.5013	104.7234	0.7416
6	NBP_3_124	124.1513	113.5812	0.7489
7	NBP_3_141	140.7875	122.6105	0.7629
8	NBP_3_157	157.4407	132.0989	0.7754
9	NBP_3_174	174.0924	142.0645	0.7870
10	NBP_3_191	190.7386	152.3661	0.7997
11	NBP_3_202	201.7593	159.2098	0.8101
12	NBP_3_206	205.7593	161.8381	0.8129
13	NBP_3_210	209.7604	164.6046	0.8146
14	NBP_3_214	213.7590	167.4329	0.8161
15	NBP_3_218	218.0000	170.4441	0.8179
16	NBP_3_221	221.0000	172.6120	0.8191
17	NBP_3_223	223.0000	174.0057	0.8204
18	NBP_3_225	225.0000	175.4001	0.8218
19	NBP_3_227	227.0000	176.8565	0.8227
20	NBP_3_229	229.0000	178.1861	0.8247
21	NBP_3_236	236.1843	183.6621	0.8269
22	NBP_3_250	250.1782	193.7399	0.8379
23	NBP_3_264	264.1701	204.9032	0.8441
24	NBP_3_278	278.1665	216.9520	0.8478
25	NBP_3_292	292.1640	229.8272	0.8500
26	NBP_3_309	308.8040	245.0889	0.8571
27	NBP_3_329	328.7940	262.5609	0.8747
28	NBP_3_349	348.7820	282.3205	0.8858
29	NBP_3_369	368.7706	304.7744	0.8911
30	NBP_3_389	388.7611	327.6150	0.9002
31	NBP_3_461	461.4940	425.6226	0.9269
32	NBP_3_603	603.4253	687.7701	0.9888
33	NBP_3_713	713.3923	1001.5079	1.0186
34	NBP_3_746	746.2474	868.7012	1.2319
35	NBP_3_783	783.1872	998.2919	1.2373

Tabela AVII-3 – COMPONENTES PUROS UTILIZADOS NA SIMULAÇÃO PETROX

	COMPONENTE
1	ÁGUA
2	NITROGÊNIO
3	METANO
4	ETANO
5	PROPANO
6	ISOBUTANO
7	N-BUTANO
8	ISOPENTANO
9	N-PENTANO
10	N-HEXANO
11	DIÓXIDO DE CARBONO
12	N-NONANO
13	AR
14	MONÓXIDO DE CARBONO
15	ETENO
16	HIDROGÊNIO
17	OXIGÊNIO
18	PROPENO

A-VII.1.2. Configuração da simulação

A configuração da simulação PETROX utilizada neste trabalho é representada graficamente pelas figuras Figura AVIII-1 a Figura AVIII-5. A seguir são apresentadas informações complementares da configuração.

Correntes de carga e utilidades

Definiu-se, para este trabalho, representar a carga da unidade através de uma mistura dos petróleos **Albacora** e **Sahara Blend**, cuja proporção poderia ser alterada para modificar as características da carga (ver Figura AVIII-3a). Para alterar esta proporção, deve-se alterar o parâmetro set-point do módulo controlador **CAPI**, que altera a vazão de petróleo ALBACORA de forma que o valor do grau API especificado para a mistura seja obtido.

As principais utilidades consumidas no processo são vapor saturado de baixa pressão (~5 Kgf/cm² man), vapor saturado de alta pressão (~30 Kgf/cm² man), água de

resfriamento e o gás combustível consumido no forno atmosférico. O consumo de gás é avaliado como consumo de energia.

Módulos e seqüência de cálculo

Os módulos utilizados para a construção da simulação são apresentados nas figuras a seguir e são ainda explicitamente descritos na Tabela AVII-IV. A seqüência de cálculo utiliza o algoritmo de WEGSTEIN para convergir a corrente de reciclo SD51.

Estratégia de simulação

Muitos dos módulos oferecem múltiplas opções de alternativas para simulação, de acordo com as variáveis especificadas e definidas como variáveis. Em alguns casos, a escolha destas variáveis influencia de forma significativa à sensibilidade da simulação a problemas de convergência e/ou a velocidade do cálculo. Um grande esforço foi feito durante a concepção da simulação para buscar as estratégias mais eficientes para o exemplo em questão. A seguir, são apresentados os aspectos mais importantes da estratégia de simulação.

- **Definição da vazão e composição de carga** – São definidas correntes de petróleo com vazões de valor superior ao efetivamente praticado como carga da unidade. A vazão desejada para a corrente de carga CRW1 é fornecida como especificação para o módulo divisor DIV1. Assim, a corrente CRW1 assume o valor desejado de vazão, sendo o excedente atribuído à corrente alternativa LIXO.

● **Torre de Preflash**

Especificações

- Temperatura do condensador
- Temperatura do topo (estágio #2 - prato de controle)
- vazão de retirada de DEL

Variáveis

- Carga térmica do condensador de topo
- Vazão da corrente de Nafta Leve não estabilizada (NLI).

● **Torre Atmosférica**

Especificações

- Vazão de reciclo de Diesel
- Vazão de Querosene
- Vazão de Nafta Pesada
- Vazão de Refluxo Circulante (RCI)

Variáveis

- Vazão de Diesel Pesado
- Vazão da corrente de Nafta Leve não estabilizada (NLI).
- Carga térmica do condensador de topo
- Carga térmica do Refluxo Circulante

● **Torre N-701**

Especificações

- Temperatura do estágio #22
- Razão vazão de topo / vazão de carga

Variáveis

- Carga térmica do condensador de topo
- Carga térmica do refeedor

● **Torre N-703**

Especificações

- Razão vazão de topo / vazão de carga

Variáveis

- Carga térmica do refeedor

● **Torre N-752**

Especificações

- Temperatura do estágio #28
- Razão vazão de topo / vazão de carga

Variáveis

- Carga térmica do condensador de topo
- Carga térmica do refeedor

● **Torre N-753**

Especificações

- Temperatura do estágio #22

Variáveis

- Carga térmica do refeedor

● **Torre N-751**

Especificações

- Temperatura da corrente de fundo

Variáveis

- Carga térmica do refeedor

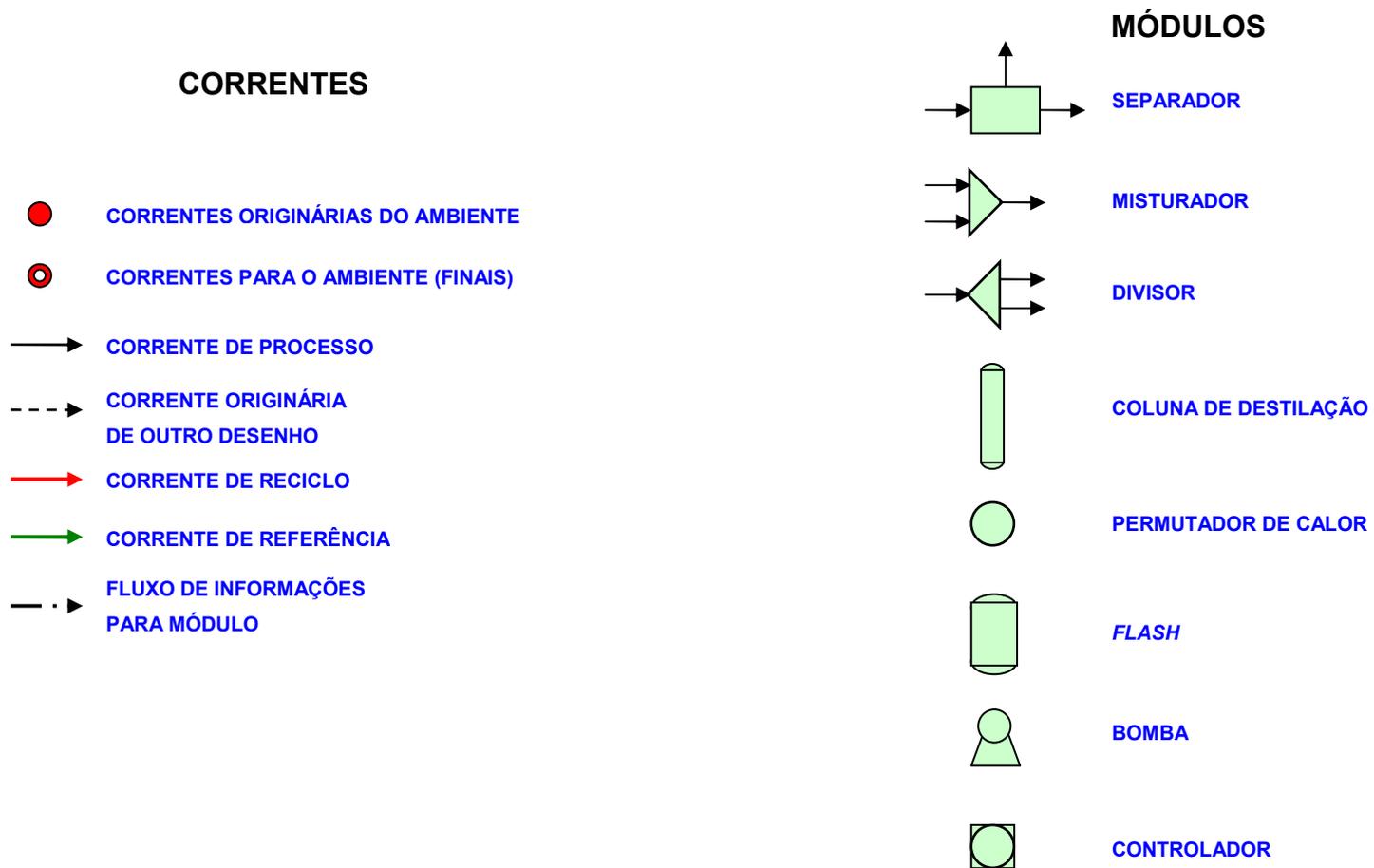


Figura AVIII-1 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. Legendas para a representação de

correntes e módulos.

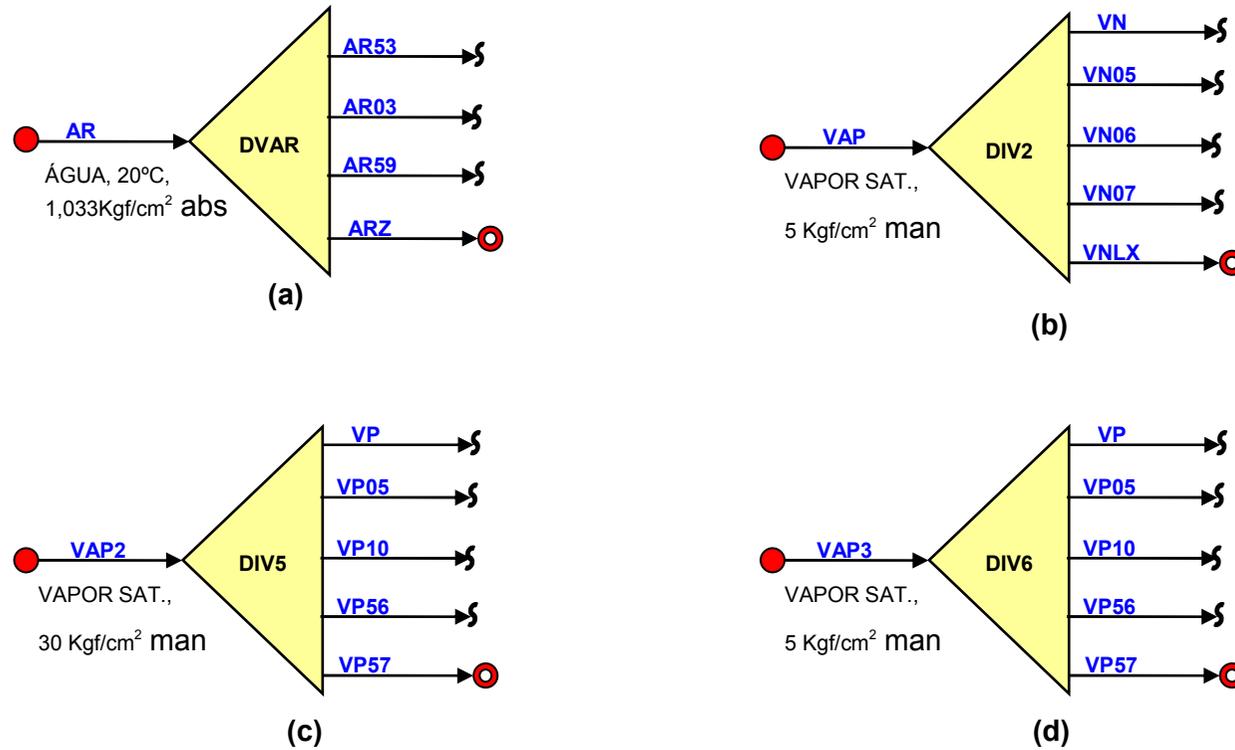


Figura AVIII-2 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. (a) Formação da carga da torre de Pre-Flash; (b-e) Formação de correntes de utilidades.

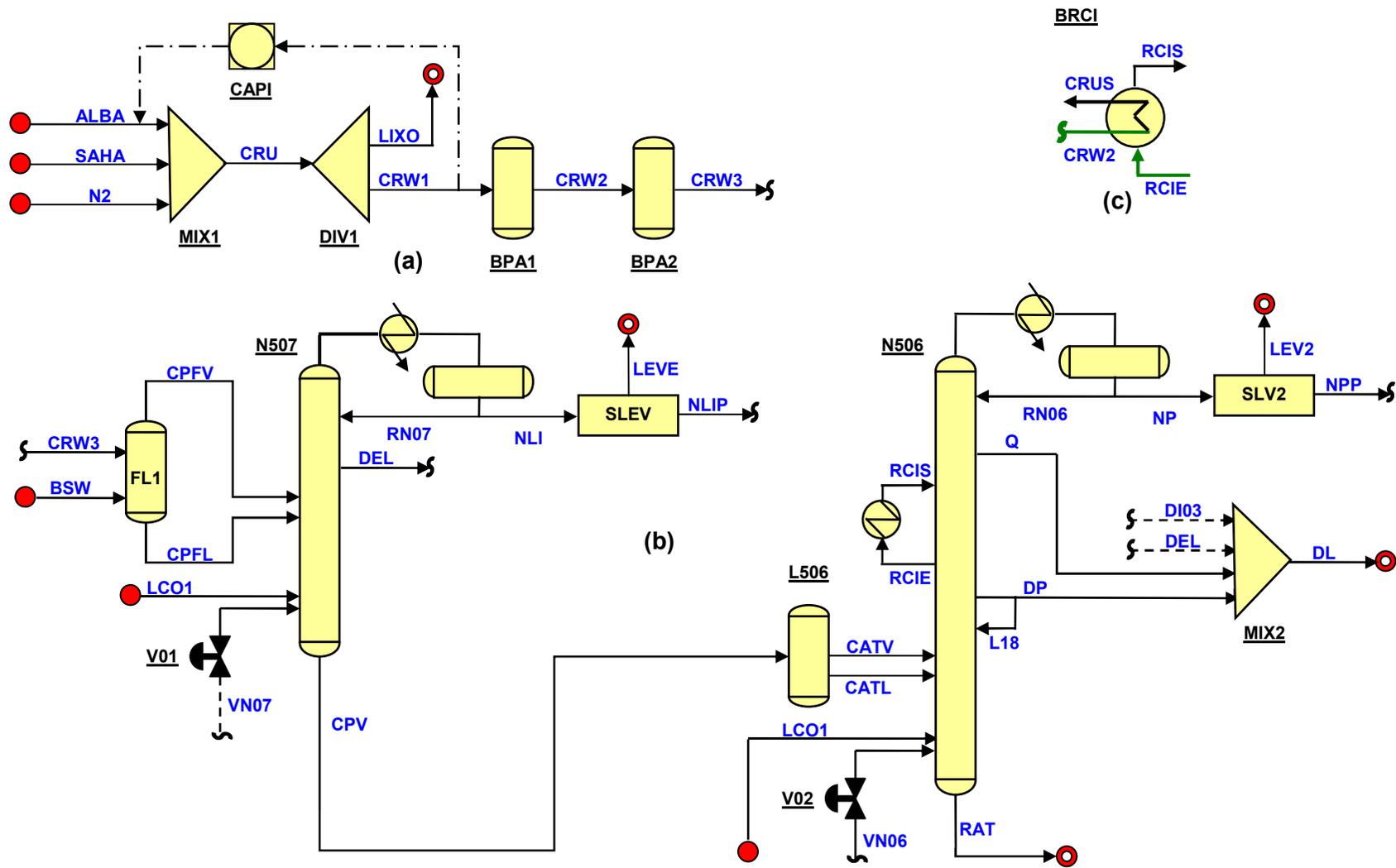


Figura AVIII-3 - Representação gráfica do trecho da simulação PETROX da Unidade de Destilação da RECAP. (a) Composição da carga e bateria de preaquecimento; (b) Processamento do petróleo; (c) Integração energética entre o *pumparound* da Torre Atmosférica e a Bateria de preaquecimento (flash BPA1).

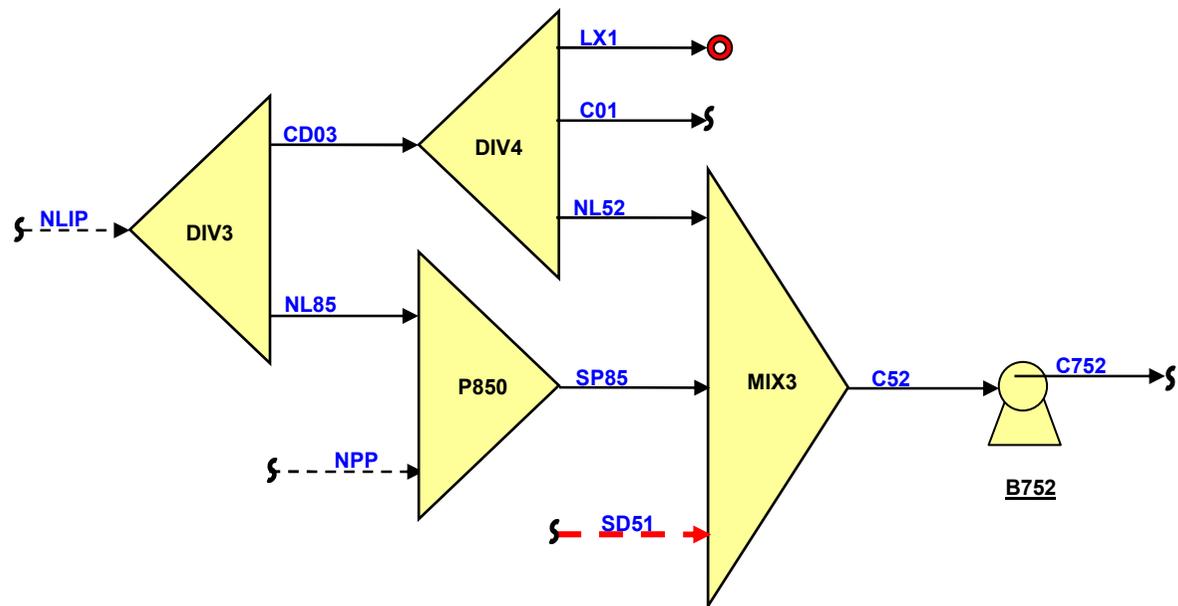


Figura AVIII-4 - Representação gráfica da simulação PETROX da formação das correntes de carga da Unidade de Solventes da RECAP.

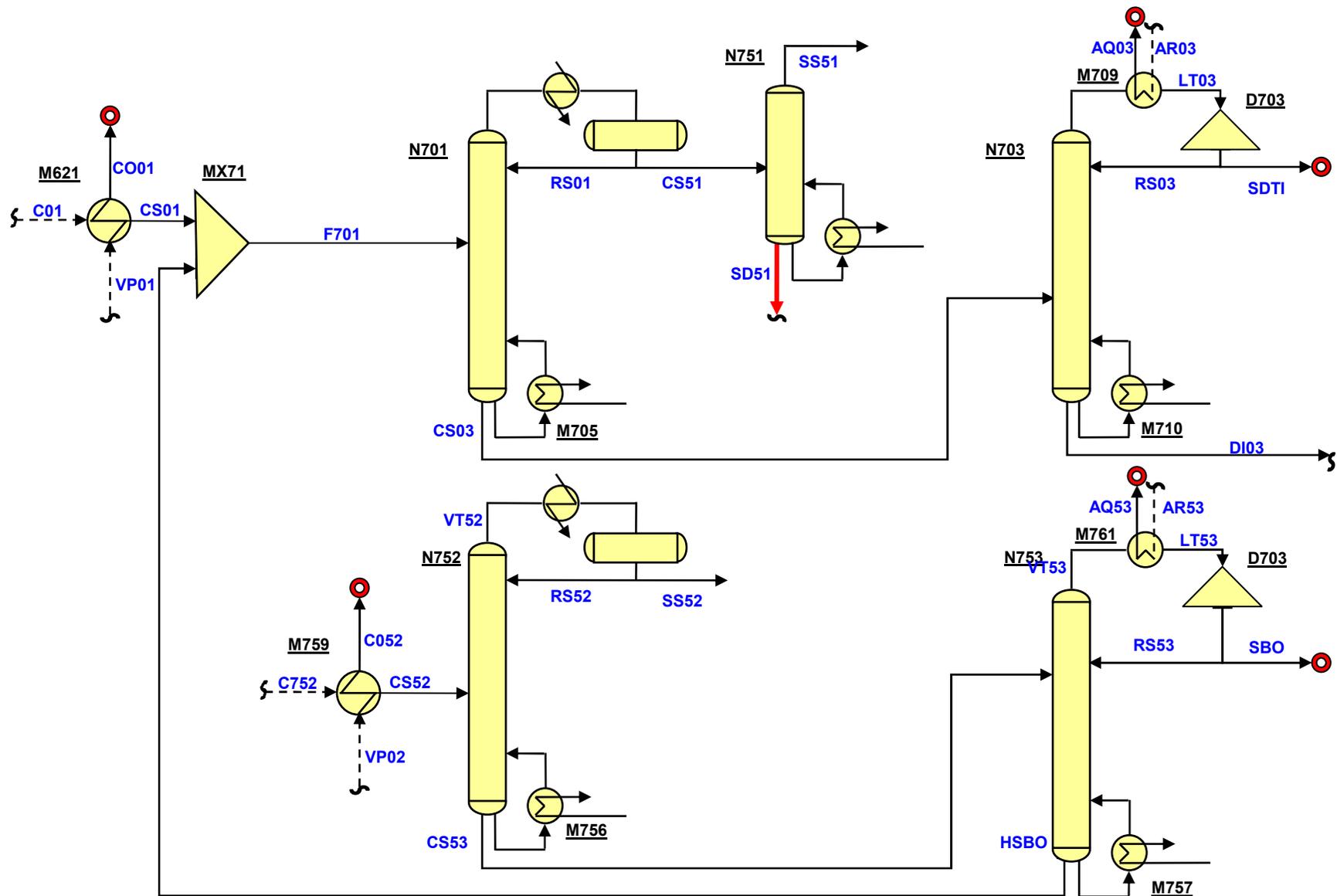


Figura AVIII-5 - Representação gráfica da simulação PETROX da Unidade de Solventes da RECAP.

Tabela AVII- 4 - LISTA DE MÓDULOS DA SIMULAÇÃO PETROX

MÓDULO	TIPO	MÓDULO	TIPO	MÓDULO	TIPO
B752	BOMBA	DIV1	DIVISOR	MX71	MISTURADOR
BPA1	FLASH ADIAB	DIV2	DIVISOR	N506	COLUNA IO
BPA2	FLASH ADIAB	DIV3	DIVISOR	N507	COLUNA IO
BRCI	TROCADOR	DIV4	DIVISOR	N701	COLUNA IO
C56	CALCULADORA	DIV5	DIVISOR	N703	COLUNA IO
C57	CALCULADORA	DIV6	DIVISOR	N751	COLUNA IO
CAL1	CALCULADORA	DVAR	DIVISOR	N752	COLUNA IO
CALU	CALCULADORA	FL1	FLASH ADIAB	N753	COLUNA IO
CAPI	CONTROLADOR	FL2	FLASH ISOTE	P850	MISTURADOR
CBPA	CALCULADORA	L506	FLASH ISOTE	R03C	CORR.REF.
CBSW	CALCULADORA	LCO1	CORR.REF.	RCIC	CORR.REF.RCIE
CFED	CALCULADORA	M621	TROCADOR	S85R	CORR.REF.
CL01	CALCULADORA	M705	TROCADOR	SLEV	SEPARADOR
CL03	CALCULADORA	M709	TROCADOR	SLV2	SEPARADOR
CL51	CALCULADORA	M710	TROCADOR	T01C	CORR.REF.
CL52	CALCULADORA	M756	TROCADOR	T52C	CORR.REF.
CL53	CALCULADORA	M757	TROCADOR	T53C	CORR.REF.
CPRO	CALCULADORA	M759	TROCADOR	V01	VALVULA
CRUC	CORR.REF.CRW2	M761	TROCADOR	V02	VALVULA
CVAP	CALCULADORA	MIX1	MISTURADOR	V03	VALVULA
D703	DIVISOR	MIX2	MISTURADOR		
D753	DIVISOR	MIX3	MISTURADOR		

A-VII.2. OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE

A seguir são apresentadas tabelas contendo os dados gerais de configuração do problema de otimização no caso base e respectiva solução do problema de otimização. Os valores de parâmetros e variáveis de processo definidos como fixas (IFX) são constantes em todo o trabalho, salvo onde houver indicação específica de alterações.

A-VII.2.1. Configuração do problema de otimização

A tabela a seguir contém os dados de configuração de todas as variáveis integrantes do problema de otimização. Mais detalhes sobre aspectos de configuração das variáveis estão disponíveis no ANEXO II

FUNÇÃO	Papel da variável no modelo matemático e no problema de otimização: Fixa, Decisão, Restrição, Dependente geral
SCAL MIN, SCAL MAX	Limites de escalonamento das variáveis
OP MIN, OP MAX	Limites de operação das variáveis de processo
BIAS	Parcela aditiva a variáveis dependentes do modelo matemático
X0	Valor inicial de variáveis de processo; constante para variáveis fixas
FAT \$	Fator de inclusão de variável na função objetivo
PREÇO	Parâmetro multiplicativo de valores de variáveis de processo na função econômica

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRITOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
.IFX	P_#1_N701	Pressão no condensador N701	Kgf/cm2	M.N701.PRES_COND{15,kgf/cm2}	2.7	3.1	2.7	3.1	0	3.033	0	0
.IFX	V_M621	Vapor preaquec. carga N701, M621	kg/h	M.DIV6.ESPEC[2]{20,kg/h}	850	965	850	965	0	964.4	1	-4
.IFX	P_#2_N703	Pressão no topo N703	Kgf/cm2	M.N703.PRES_TOPO{15,kgf/cm2}	1	2	1.4	1.6	0	1.593	0	0
.IFX	P_#1_N752	Pressão no condensador N752	Kgf/cm2	M.N752.PRES_COND{15,kgf/cm2}	5	5.2	5	5.2	0	5.093	0	0
.IFX	V_M759	Vapor preaquec. carga N752, M759	kg/h	M.DIV6.ESPEC[3]{20,kg/h}	50	200	50	200	0	162	1	-4
.IFX	P_#2_N753	Pressão no topo N753	Kgf/cm2	M.N753.PRES_TOPO{15,kgf/cm2}	1.5	1.7	1.5	1.7	0	1.683	0	0
.IFX	P_HEADERU500	Pressão de vapor retificação U500	Kgf/cm2	M.DIV2.PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	5.593	0	0
.IFX	V_N505	Vazão de vapor para N505	Kg/h	M.DIV2.ESPEC[2]{20,kg/h}	0	0	0	0	0	0.01	0	0

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
.IFX	API_CRU	API cru	adimensional	M.CAPI.ESPEC[1]{0,}	0	0	31.5	34.5	0	33	0	0
.IFX	DP_M517	Dif pressao M505+M517	Kgf/cm2	M.FL2 .DPRES{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0	0	0
.IFX	T_ENT_L506	Temperatura carga L506	Celsius	M.FL2 .TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	274.2	0	0
.IFX	P_L506	Pressão L506	Kgf/cm2	M.L506.PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	1.68	0	0
.IFX	P_#1_N506	Pressão no condensador N506	Kgf/cm2	M.N506.PRES_COND{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	1.103	0	0
.IFX	P_#2_N506	Pressão no topo N506	Kgf/cm2	M.N506.PRES_TOPO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	1.343	0	0
.IFX	DP_EST_N506	DP por estágio na N506	Kgf/cm2	M.N506.DPRES_EST{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.012	0	0
.IFX	T#1_N507	Temp. #1 N507	Celsius	M.N507.ESPEC[1]{17,Celsius}	0	0	0	0	0	44.8	0	0
.IFX	P_CARGA_N507	Pressão carga da N507	Kgf/cm2	M.FL1 .PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	2.923	0	0
.IFX	P_V01	Pressão saída válvula V01	Kgf/cm2	M.V01 .PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	2.983	0	0
.IFX	P_V02	Pressão saída válvula V02	Kgf/cm2	M.V02 .PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	2.733	0	0
.IFX	P_#1_N507	Pressão no condensador N507	Kgf/cm2	M.N507.PRES_COND{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	2.483	0	0
.IFX	DP_EST_N507	DP por estágio na N507	Kgf/cm2	M.N507.DPRES_EST{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.012	0	0
.IFX	P_HEADERU750	Pressao de vapor refervedores U750	Kgf/cm2	M.DIV5.PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	29.843	0	0
.IFX	P_HDRU750_V5	Pressao de vapor preaquecimento U750	Kgf/cm2	M.DIV6.PRESSAO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	5.593	0	0
.IFX	F_CD03	Desvio da carga da N701	m3/d	M.DIV3.ESPEC[1]{25,m3/d}	0	0	0	0	0	730	0	0
.IFX	DP_N701	DP na N701	Kgf/cm2	M.N701.DPRES_COL{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.3	0	0
.IFX	V_TSIF_N701	Vazao de recirculação do termosifao da N701	Kmol/h	M.N701.TSIF_VAZMOL{33,kgmol/h}	0	0	0	0	0	600	0	0
.IFX	DP_COND_N703	DP COND N703	Kgf/cm2	M.M709.DPQUENTE{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.35	0	0
.IFX	DP_N703	DP total na N703	Kgf/cm2	M.N703.DPRES_COL{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.2	0	0
.IFX	V_TSIF_N703	Vazão de recirculação do termosifão da N703	Celsius	M.N703.TSIF_VAZMOL{33,kgmol/h}	0	0	0	0	0	80	0	0

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
.IFX	P_#1_N751	Pressão no topo N751	Kgf/cm2	M.N751.PRES_TOPO{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	3.033	0	0
.IFX	T_CONT_N751	Temperatura fundo N751	Celsius	M.N751.ESPEC[1]{17,Celsius}	0	0	0	0	0	106	0	0
.IFX	DP_N752	DP total na N752	Kgf/cm2	M.N752.DPRES_COL{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.01	0	0
.IFX	V_TSIF_N752	Vazão de recirculação do termosifao N752	Kmol/h	M.N752.TSIF_VAZMOL{33,kgmol/h}	0	0	0	0	0	400	0	0
.IFX	DP_COND_N753	DP COND N753	Kgf/cm2	M.M761.DPQUENTE{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.35	0	0
.IFX	DP_N753	DP total na N753	Kgf/cm2	M.N753.DPRES_COL{15,kgf/cm2}	0	0	0	0	0	0.01	0	0
.IFX	V_TSIF_N753	Vazão de recirculação do termosifao N753	Celsius	M.N753.TSIF_VAZMOL{33,kgmol/h}	0	0	0	0	0	230	0	0
.IFX	U_BRCI	Coef global troca term BRCI	Kcalm2/hC	S.DEFU.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	850	1150	0	967	0	0
.IFX	U_M709	Coef global troca term M709 (cond N703)	Kcalm2/hC	S.U709.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	215	0	0
.IFX	U_M761	Coef global troca term M761 (cond N753)	Kcalm2/hC	S.U761.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	750	0	0
.IFX	U_M621	Coef global troca term M621 (pre aq carga N701)	Kcalm2/hC	S.U621.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	70	0	0
.IFX	U_M759	Coef global troca term M759 (pre aq carga N752)	Kcalm2/hC	S.U759.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	40.93	0	0
.IFX	Q_BPA1	Carga Term 1o estagio preaquecimento da carga	Gcal/h	M.BPA1.CALOR{34,MMkcal/h}	0	0	0	0	0	6.63	0	0
.IFX	Q_BPA3	Carga term Ultimo estagio da bateria PA	Celsius	M.FL1 .CALOR{34,MMkcal/h}	0	0	0	0	0	14.3	0	0
.IFX	V/F_N701	Razao Vtopo/Carga da N701	Kmol/Kmol	M.N701.ESPEC[2]{0,}	1	2	1	2	0	1.518	0	0
.IFX	V/F_N752	Razao Vtopo/Carga da N752	Kmol/Kmol	M.N752.ESPEC[2]{0,}	0	1	0	1	0	0.443	0	0
.IDC	F_CRU	Vazao total de cru	M3/D	M.DIV1.ESPEC[1]{25,m3/d}	7400	7800	7400	7800	0	7630	1	-100
.IDC	VN507	Vazao de vapor	t/h	M.DIV2.ESPEC[4]{20,ton/h}	0.5	1.5	0.8	1.8	0	1	1	-4

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
		para a N507										
.IDC	VN506	Vazão de vapor para a N506	t/h	M.DIV2.ESPEC[3]{20,ton/h}	1	2.5	1.5	2.5	0	1.7	1	-4
.IDC	F_RCI	Vazao do refluxo circulante	m3/d	M.N506.ESPEC[4]{25,m3/d}	0	10000	4000	5000	0	4622.2	0	0
.IDC	TFAT	Temp. saída do forno atmosferico	Celsius	M.L506.TEMPERATURA{17,Celsius}	365	382	365	382	0	379.6	0	0
.IDC	F_Q	Vazao de querosene	m3/d	M.N506.ESPEC[3]{25,m3/d}	500	2500	1000	1500	0	1311	0	0
.IDC	F_Rdiesel	Refluxo de Diesel para N506	m3/d	M.N506.ESPEC[1]{25,m3/d}	800	1800	1000	1700	0	1249	0	0
.IDC	M_NP	Vazao molar de nafta pesada	kgmol/h	M.N506.ESPEC[2]{33,kgmol/h}	50	70	50	70	0	55.76	0	0
.IDC	F_DEL	Vazão de retirada de DEL da N507	m3/d	M.N507.ESPEC[3]{25,m3/d}	0	300	1	300	0	199.9	1	130
.IDC	T#2_N507	Temp. #2 N507	Celsius	M.N507.ESPEC[2]{17,Celsius}	105	125	105	125	0	121.2	0	0
.IDC	F_C01	Carga de nafta da N701	m3/d	M.DIV4.ESPEC[2]{25,m3/d}	360	500	360	550	0	415	0	0
.IDC	T_CONT_N701	Temperatura de controle N701	Celsius	M.N701.ESPEC[1]{17,Celsius}	130	180	143	150	0	145	0	0
.IDC	T_CONT_N703	Temperatura de controle N703	Celsius	M.N703.ESPEC[1]{17,Celsius}	120	170	137	145	0	139	0	0
.IDC	R_N703	Refluxo topo N703	M3/D	S.R703.VAZ_MOL{33,kgmol/h}	0	10	2	20	0	6.24	0	0
.IDC	T_CONT_N752	Temperatura controle N752	Celsius	M.N752.ESPEC[1]{17,Celsius}	115	125	117	122	0	118.1	0	0
.IDC	R_N753	Refluxo topo N753	m3/d	S.R753.VAZ_MOL{33,kgmol/h}	5	30	5	20	0	14.12	0	0
.IDC	T_ENT_RCI	Temperatura de retorno RCI	Celsius	M.N506.PUMPA_TEMP[1]{17,Celsius}	120	170	130	150	0	138.2	0	0
.IDC	V/F_N753	Razao Vtopo/Carga da N753	Kmol/Kmol	M.N753.ESPEC[1]{0,}	0.8	1	0.9	0.985	0	0.9805	0	0
.IDC	Q_BPA2	Carga Térmica PPA/ RCI (lado da bateria)	Gcal/h	M.BPA2.CALOR{34,MMkcal/h}	7	10	7	10	0	8.5	0	0
.DRT	T_CONT_N753	Temperatura controle N753	Celsius	M.N753.TEMPERATURA[27]{17,Celsius}	140	160	145	152	0	147	0	0
.DRT	DL_85	ASTMD86 T85% do Diesel Linha	adimensional	S.DL .ASTM-D86[85]{17,Celsius}	320	400	354	357	0	0	0	0
.DRT	L#10_N506	N506 - Vazao molar estagio 10	kgmol/h	M.N506.VAZMOL_L_EST[10]{33,kgmol/h}	20	1000	20	1000	0	0	0	0
.DRT	F_NLI	Vazao da Nafta	M3/D	S.NLI .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	800	1200	800	1200	0	0	0	0

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
		Leve Inst										
.DRT	L#10_N507	N507 - Vazao molar estagio 10	Kmol/h	M.N507.VAZMOL_L_EST[10]{33,kgmol/h}	20	700	20	700	0	0	0	0
.DRT	DTI_PSECO	Diluyente de Tintas - Ponto Seco	Celsius	S.SDTI.ASTM-D86[100]{17,Celsius}	100	200	137	143	1	0	0	0
.DRT	DTI_PIE	Diluyente de Tintas - Ponto Inicial de ebulição ASTM D86	Celsius	S.SDTI.ASTM-D86[0]{17,Celsius}	70	170	110	116	18	0	0	0
.DRT	V_N703	Vapor refervedor N703, M710	t/h	M.CVAP.RESULTADO[2]{0,}	0	3	0.5	0.75	0	0	1	-8
.DRT	SBO_PSECO	Solvente de borracha - Pto Seco	Celsius	M.CL53.RESULTADO[8]{0,}	122	146	122	128	-5	0	0	0
.DRT	SBO_PIE	Solvente de borracha - Ponto Inicial de ebulição ASTM D86	Celsius	M.CL53.RESULTADO[7]{0,}	0	100	52	58	20	0	0	0
.DRT	V_N753	Vapor refervedor N753, M757	t/h	M.CVAP.RESULTADO[4]{0,}	0	10	0.5	3	0	0	1	-8
.DRT	RC1xBPA	Diferença Q(RCI)-Q(BPA)	Gcal/h	M.CBPA.RESULTADO[3]{0,}	-10	10	0	0	0	0	0	0
.DRT	F_SD51	Vazao reciclo de nafta	m3/d	S.SD51.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	20	700	20	700	0	0	0	0
.DRT	F_HSBO	Vazao fundo N753> para N701	m3/d	S.HSBO.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	100	10	100	0	0	0	0
.DRT	T#2_N506	Temp #2 N506	Celsius	M.N506.TEMPERATURA[2]{17,Celsius}	102	120	102	120	0	0	0	0
.DRT	L#17_N701	N701 - Vazao molar estagio 17	kgmol/h	M.N701.VAZMOL_L_EST[17]{33,kgmol/h}	50	700	50	700	0	0	0	0
.DRT	L#3_N703	N703 - Vazao molar estagio 3	kgmol/h	M.N703.VAZMOL_L_EST[3]{33,kgmol/h}	5	700	5	700	0	0	0	0
.DRT	L#8_N752	N752 - Vazao molar estagio 8	kgmol/h	M.N752.VAZMOL_L_EST[8]{33,kgmol/h}	20	700	30	700	0	0	0	0
.DRT	L#14_N753	N753 - Vazao molar estagio 14	kgmol/h	M.N753.VAZMOL_L_EST[14]{33,kgmol/h}	10	700	10	700	0	0	0	0
.DRT	L#22_N506	N506 - Vazao molar estagio 22	kgmol/h	M.N506.VAZMOL_L_EST[22]{33,kgmol/h}	0	100	5	100	0	0	0	0
.DRT	RC1xBPA2	Diferença Q(RCI)-Q(BPA2) - lado da bateria	Gcal/h	M.CBPA.RESULTADO[4]{0,}	-10	10	0	0	0	0	0	0
.DGR	V_N701	Vapor refervedor N701, M705	t/h	M.CVAP.RESULTADO[1]{0,}	3	5	3	5	0	0	1	-8

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
.DGR	V_N752	Vapor refeedor N752, M756	t/h	M.CVAP.RESULTADO{3}{0,}	1	4	3.3	4	0	0	1	-8
.DGR	DL_CET	Índice de Cetano do Diesel Linha	adimensional	S.DL .CETANO{0,}	40	50	40	50	0	0	0	0
.DGR	DL_FULG	Pt. fulgor Diesel Linha	Celsius	S.DL .FULGOR{17,Celsius}	46	100	46	100	0	0	0	0
.DGR	NP_PFE	ASTMD86 PFE da Nafta Pesada	adimensional	S.NP .ASTM-D86[100]{17,Celsius}	140	220	140	220	0	0	0	0
.DGR	Q_PFE	ASTMD86 PFE do querosene	Celsius	S.Q .ASTM-D86[100]{17,Celsius}	250	252	250	252	0	0	0	0
.DGR	Q_CN506	Carga térmica condensador N506	Gcal/h	M.N506.CALOR[1]{34,MMkcal/h}	15	-5	15	-5	0	0	0	0
.DGR	Q_RCI	Carga térmica do RCI	Gcal/h	M.N506.PUMPA_CALOR[1]{34,MMkcal/h}	-9	-5	-9	-5	0	0	1	7
.DGR	FAT_Q	Carga térmica no forno atmosférico	MMKcal/h	M.L506.CALOR{34,MMkcal/h}	0	50	15	22.4	0	0	1	-7
.DGR	F_RAT	Vazão de RAT	M3/D	S.RAT .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	2500	3000	2500	3000	0	0	1	105
.DGR	NLI_PFE	ASTMD86 PFE da Nafta Leve Inst	adimensional	S.NLI .ASTM-D86[100]{17,Celsius}	140	220	140	220	0	0	0	0
.DGR	Q_CN507	Carga térmica condensador N507	Gcal/h	M.N507.CALOR[1]{34,MMkcal/h}	-8	-4	-8	-4	0	0	0	0
.DGR	QC_N701	Carga Térmica do condensador de topo da N701	Gcal/h	M.N701.CALOR[1]{34,MMkcal/h}	-3	-0.5	-3	-0.5	0	0	0	0
.DGR	F_N701	Carga da N701	M3/D	S.F701.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	450	650	450	650	0	0	0	0
.DGR	QC_N703	Carga Térmica do condensador de topo da N703	Gcal/h	M.M709.CALOR{34,MMkcal/h}	-2	-0.1	-2	-0.1	0	0	0	0
.DGR	QC_N752	Carga Térmica do condensador de topo da N752	Gcal/h	M.N752.CALOR[1]{34,MMkcal/h}	2	-0.5	2	-0.5	0	0	0	0
.DGR	F_CS52	Carga da N752	M3/D	S.CS52.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	450	800	450	800	0	0	0	0
.DGR	QC_N753	Carga Térmica do condensador de topo da N753	Gcal/h	M.M761.CALOR{34,MMkcal/h}	-3	-0.5	-3	-0.5	0	0	0	0
.DGR	F_DL	Vazão de Diesel Linha	M3/D	S.DL .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_ALBA	Vazão de Albacora na carga	M3/D	S.ALBA.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_SAHA	Vazão de Sahara	M3/D	S.SAHA.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0

FUNÇÃO	TAG	DESCRIÇÃO	UNIDADE	DESCRIPTOR PTX	SCAL MIN	SCAL MAX	OP MIN	OP MAX	BIAS	X0	FAT \$	PREÇO
		Blending na carga										
.DGR	F_NP	Vazao da Nafta Pesada	M3/D	S.NP .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_DP	Vazao de diesel pesado	m3/d	S.DP .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	1	130
.DGR	F_Q	Vazao de querosene	m3/d	S.Q .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	1	130
.DGR	T_#1_N507	Temp saída condensador N506	Celsius	M.N506.TEMPERATURA[1]{17,Celsius}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_CPV	Vazao de cru reduzido	m3/d	S.CPV .VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_CS51	Prod topo N701	m3/d	S.CS51.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_RS01	Vazao refluxo N701	m3/d	M.CL01.RESULTADO[5]{0,}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_CS03	Vazao fundo N701	m3/d	S.CS03.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_DTI	Diluyente de tintas	m3/d	S.SDTI.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	1	180
.DGR	F_RS03	Vazao refluxo N703	m3/d	S.RS03.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	5	700	5	700	0	0	0	0
.DGR	F_DI03	Vazao fundo N703> para DL	m3/d	S.DI03.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	1	130
.DGR	F_SS52	Vazao topo N752	m3/d	S.SS52.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_RS52	Vazao refluxo N752	m3/d	M.CL52.RESULTADO[4]{0,}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_CS53	Vazao fundo N752	m3/d	S.CS53.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	F_SBO	Solvente de Borracha	m3/d	M.CL53.RESULTADO[6]{0,}	20	1000	20	1000	0	0	1	160
.DGR	F_RS53	Vazao refluxo N753	m3/d	S.RS53.VAZ_VOL_L60F{25,m3/d}	5	700	5	700	0	0	0	0
.DGR	Q_BPA	Carga Térm permutadores trocam calor c/ RCI (entrada do UA)	Gcal/h	M.BRCI.CALOR{34,MMkcal/h}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	T_CARGA_N507	Temperatura carga N507	Celsius	M.FL1 .TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	T_RCBP	Temp saída bateria	Celsius	S.RCBP.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	T_COND_N703	Temp cond N703 (M709)	Celsius	S.LT03.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	0	0	0
.DGR	T_COND_N753	Temp cond N753 (M761)	Celsius	S.LT53.TEMPERATURA{17,Celsius}	0	0	0	0	0	0	0	0

A-VII.2.2. Solução do problema de otimização no caso base

>>> RESULTADO FINAL <<<

Projeto : RECAP_5 - Estudo de otimização p/ as U500 & U750/RECAP

Caso : RECAP_5_CDSxx

Data: 16/ 8/2006 11:43:55

CONFIGURAÇÃO

Arquivo de configuração :	C:\PETROX_OT\RECAP_5\RECAP_DCS17_base.otp
Tipo de Modelo :	rigoroso
Modelo rigoroso associado :	PETROX
Arquivo de simulação :	C:\PETROX_OT\RECAP_5\recap_5_DCS17.px
Arquivo de simulação alt. :	
No. de variáveis de decisão :	19
No. de restrições de desigualdade:	21
No. de variáveis fixas :	45
No. de saidas gerais :	42
Function Precision:	1.00E-03
Feasibility Tolerance:	1.00E-03
Fator mult. da Função Obj.:	-1
Fator das var. dec. de cnx.:	1.00E-02
Fator restrições desigualdade.:	1
Fator restrições de conex.:	1
Valor Mínimo Função Obj.:	100000
Valor Maximo Função Obj.:	200000

RESULTADOS

Funcao Objetivo - valor inicial : 150512.6279
 Funcao Objetivo (modelo reduzido) : 0.00E+00
 Funcao Objetivo (modelo rigoroso) : 165746.8948
 Status de término : 0
 No. de iteracoes : 6
 No. de calculos da funcao : 310
 No. de calculos do gradiente : 310
 No. de calculos das restricoes : 0
 No. de calculos do Jacobiano : 0
 No. de simulações : 299
 Tempo de execução (min) : 26.56

VARIÁVEIS DE DECISÃO

	Descrição	TAG	Unidade	ScalMin	ScalMax	Xpass	Xinic	X_min	X*	X_max	At	X_Lag
1	Vazao total de cru	F_CRU	M3/D	7400	7800	50	7630	7400	7799.99	7800	AHI	16.1
2	Vazao de vapor para a N507	VN507	t/h	0.5	1.5	5.00E-02	1	0.8	1.8	1.8	AHI	744
3	Vazão de vapor para a N506	VN506	t/h	1	2.5	5.00E-02	1.7	1.5	2.5	2.5	AHI	642
4	Vazao do refluxo circulante	F_RCI	m3/d	0	10000	5.00E-02	4622.2	4000	5000	5000	AHI	0.269
5	Temp. saída do forno atmosferico	TFAT	Celsius	365	382	2	379.6	365	382	382	AHI	40
6	Vazao de querosene	F_Q	m3/d	500	2500	50	1311	1000	1500	1500	AHI	1.56
7	Refluxo de Diesel para N506	F_Rdiesel	m3/d	800	1800	50	1249	1000	1251.09	1700	---	0
8	Vazao molar de nafta pesada	M_NP	kgmol/h	50	70	0.1	55.76	50	70	70	AHI	10.6
9	Vazão de retirada de DEL da N507	F_DEL	m3/d	0	300	10	199.9	1	1	300	ALO	-4.89
10	Temp. #2 N507	T#2_N507	Celsius	105	125	1.00E-03	121.2	105	114.505	125	---	0
11	Carga de nafta da N701	F_C01	m3/d	360	500	10	415	360	360.003	550	ALO	-11
12	Temperatura de controle N701	T_CONT_N701	Celsius	130	180	0.3	145	143	149.995	150	AHI	245
13	Temperatura de controle N703	T_CONT_N703	Celsius	120	170	0.3	139	137	145	145	AHI	119
14	Refluxo topo N703	R_N703	M3/D	0	10	5	6.24	2	3.102	20	---	0
15	Temperatura controle N752	T_CONT_N752	Celsius	115	125	0.3	118.1	117	117	122	ALO	-137
16	Refluxo topo N753	R_N753	m3/d	5	30	5	14.12	5	7.25308	20	---	0
17	Temperatura de retorno RCI	T_ENT_RCI	Celsius	120	170	5.00E-03	138.2	130	142.198	150	---	0
18	Razao Vtopo/Carga da N753	V/F_N753	Kmol/Kmol	0.8	1	0	0.9805	0.9	0.970281	0.985	---	0
19	Carga Térmica PPA/ RCI (lado da bateria)	Q_BPA2	Gcal/h	7	10	0	8.5	7	8.30862	10	---	0

RESTRICÕES

	Descrição	Tag	Unidade	ScalMin	ScalMax	Bias	Ginic	G_min	g*	ĝ*	G_max	At	G_Lag
1	Temperatura controle N753	T_CONT_N753	Celsius	140	160	0	146.675	145	149.138	0	152	---	0
2	ASTMD86 T85% do Diesel Linha	DL_85	adimensional	320	400	0	341.715	354	357	0	357	AHI	301
3	N506 - Vazao molar estagio 10	L#10_N506	kgmol/h	20	1000	0	465.977	20	649.214	0	1000	---	0
4	Vazao da Nafta Leve Inst	F_NLI	M3/D	800	1200	0	969.394	800	987.209	0	1200	---	0
5	N507 - Vazao molar estagio 10	L#10_N507	Kmol/h	20	700	0	76.9451	20	173.883	0	700	---	0
6	Diluyente de Tintas - Ponto Seco	DTI_PSECO	Celsius	100	200	1	145.986	137	142.975	0	143	AHI	98.9
7	Diluyente de Tintas - Ponto Inicial de ebulição AST	DTI_PIE	Celsius	70	170	18	95.0223	110	113.205	0	116	---	0
8	Vapor refervedor N703, M710	V_N703	t/h	0	3	0	0.62094	0.5	0.581415	0	0.75	---	0
9	Solvente de borracha - Pto Seco	SBO_PSECO	Celsius	122	146	-5	127.053	122	126.913	0	128	---	0
10	Solvente de borracha - Ponto Inicial de ebulição A	SBO_PIE	Celsius	0	100	20	53.3825	52	53.5458	0	58	---	0
11	Vapor refervedor N753, M757	V_N753	t/h	0	10	0	2.5438	0.5	3.00013	0	3	AHI	4.10E+03
12	Diferença Q(RCI)-Q(BPA)	RCIxBPA	Gcal/h	-10	10	0	8.85E-03	0	1.47E-05	0	0	AHL	4.86E+03
13	Vazao reciclo de nafta	F_SD51	m3/d	20	700	0	63.996	20	94.9748	0	700	---	0
14	Vazao fundo N753> para N701	F_HSBO	m3/d	0	100	0	68.9945	10	56.4401	0	100	---	0
15	Temp #2 N506	T#2_N506	Celsius	102	120	0	107.011	102	115.962	0	120	---	0
16	N701 - Vazao molar estagio 17	L#17_N701	kgmol/h	50	700	0	194.624	50	160.757	0	700	---	0
17	N703 - Vazao molar estagio 3	L#3_N703	kgmol/h	5	700	0	9.52891	5	4.99969	0	700	ALO	-43.8
18	N752 - Vazao molar estagio 8	L#8_N752	kgmol/h	20	700	0	57.8878	30	70.9967	0	700	---	0
19	N753 - Vazao molar estagio 14	L#14_N753	kgmol/h	10	700	0	19.1557	10	9.99975	0	700	ALO	-83.2
20	N506 - Vazao molar estagio 22	L#22_N506	kgmol/h	0	100	0	34.8252	5	31.0073	0	100	---	0
21	Diferença Q(RCI)-Q(BPA2) - lado da bateria	RCIxBPA2	Gcal/h	-10	10	0	-2.47E-02	0	2.10E-05	0	0	AHL	3.62E+03

VARIÁVEIS DE ENTRADA COM VALOR FIXO

	Descrição	Tag	Unidade	Valor
1	Pressão no condensador N701	P_#1_N701	Kgf/cm2	3.033
2	Vapor preaquec. carga N701, M621	V_M621	kg/h	964.4
3	Pressão no topo N703	P_#2_N703	Kgf/cm2	1.593
4	Pressão no condensador N752	P_#1_N752	Kgf/cm2	5.093
5	Vapor preaquec. carga N752, M759	V_M759	kg/h	162
6	Pressão no topo N753	P_#2_N753	Kgf/cm2	1.683
7	Pressao de vapor retificação U500	P_HEADERU500	Kgf/cm2	5.593
8	Vazão de vapor para N505	V_N505	Kg/h	1.00E-02
9	API cru	API_CRU	adimensional	33
10	Dif pressao M505+M517	DP_M517	Kgf/cm2	0
11	Temperatura carga L506	T_ENT_L506	Celsius	274.2
12	Pressão L506	P_L506	Kgf/cm2	1.68
13	Pressão no condensador N506	P_#1_N506	Kgf/cm2	1.103
14	Pressão no topo N506	P_#2_N506	Kgf/cm2	1.343
15	DP por estágio na N506	DP_EST_N506	Kgf/cm2	1.20E-02
16	Temp. #1 N507	T#1_N507	Celsius	44.8
17	Pressão carga da N507	P_CARGA_N507	Kgf/cm2	2.923
18	Pressão saída válvula V01	P_V01	Kgf/cm2	2.983
19	Pressão saída válvula V02	P_V02	Kgf/cm2	2.733
20	Pressão no condensador N507	P_#1_N507	Kgf/cm2	2.483
21	DP por estágio na N507	DP_EST_N507	Kgf/cm2	1.20E-02
22	Pressao de vapor refeedores U750	P_HEADERU750	Kgf/cm2	29.843
23	Pressao de vapor preaquecimento U750	P_HDRU750_V5	Kgf/cm2	5.593
24	Desvio da carga da N701	F_CD03	m3/d	730
25	DP na N701	DP_N701	Kgf/cm2	0.3
26	Vazao de recirculação do termosifao da N701	V_TSIF_N701	Kmol/h	270
27	DP COND N703	DP_COND_N703	Kgf/cm2	0.35
28	DP total na N703	DP_N703	Kgf/cm2	0.2
29	Vazão de recirculação do termosifão da N703	V_TSIF_N703	Celsius	49.26
30	Pressão no topo N751	P_#1_N751	Kgf/cm2	3.033
31	Temperatura fundo N751	T_CONT_N751	Celsius	106
32	DP total na N752	DP_N752	Kgf/cm2	1.00E-02

33	Vazão de recirculação do termosifao N752	V_TSIF_N752	Kmol/h	300
34	DP COND N753	DP_COND_N753	Kgf/cm2	0.35
35	DP total na N753	DP_N753	Kgf/cm2	1.00E-02
36	Vazão de recirculação do termosifao N753	V_TSIF_N753	Celsius	230
37	Coef global troca term BRCI	U_BRCI	Kcalm2/hC	967
38	Coef global troca term M709 (cond N703)	U_M709	Kcalm2/hC	215
39	Coef global troca term M761 (cond N753)	U_M761	Kcalm2/hC	750
40	Coef global troca term M621 (pre aq carga N701)	U_M621	Kcalm2/hC	70
41	Coef global troca term M759 (pre aq carga N752)	U_M759	Kcalm2/hC	40.93
42	Carga Term 1o estagio preaquecimento da carga	Q_BPA1	Gcal/h	6.63
43	Carga term Ultimo estagio da bateria PA	Q_BPA3	Celsius	14.3
44	Razao Vtopo/Carga da N701	V/F_N701	Kmol/Kmol	1.518
45	Razao Vtopo/Carga da N752	V/F_N752	Kmol/Kmol	0.443

VARIÁVEIS DE SAÍDA GERAIS

	Descrição	Tag	Unidade	Bias	Val.Inic.	Val.Final	Val.Final Aprox.
1	Vapor refervedor N701, M705	V_N701	t/h	0	4.30662	3.60786	0
2	Vapor refervedor N752, M756	V_N752	t/h	0	3.6154	4.3863	0
3	Indice de Cetano do Diesel Linha	DL_CET	adimensional	0	47.2952	46.9267	0
4	Pt. fulgor Diesel Linha	DL_FULG	Celsius	0	48.8077	55.251	0
5	ASTMD86 PFE da Nafta Pesada	NP_PFE	adimensional	0	133.936	142.592	0
6	ASTMD86 PFE do querosene	Q_PFE	Celsius	0	254.194	252.427	0
7	Carga termica condensador N506	Q_CN506	Gcal/h	0	-10.8584	-14.0607	0
8	Carga termica do RCI	Q_RCI	Gcal/h	0	-8.29033	-8.30879	0
9	Carga termica no forno atmosferico	FAT_Q	MMKcal/h	0	21.408	22.8983	0
10	Vazao de RAT	F_RAT	M3/D	0	2932.52	2800.19	0
11	ASTMD86 PFE da Nafta Leve Inst	NLI_PFE	adimensional	0	145.159	132.827	0
12	Carga termica condensador N507	Q_CN507	Gcal/h	0	-6.84703	-7.84085	0
13	Carga Térmica do condensador de topo da N701	QC_N701	Gcal/h	0	-1.97872	-1.78567	0
14	Carga da N701	F_N701	M3/D	0	483.994	416.443	0
15	Carga Térmica do condensador de topo da N703	QC_N703	Gcal/h	0	0.649709	0.615019	0
16	Carga Térmica do condensador de topo da N752	QC_N752	Gcal/h	0	-0.52235	-0.622169	0
17	Carga da N752	F_CS52	M3/D	0	758.559	916.184	0
18	Carga Térmica do condensador de topo da N753	QC_N753	Gcal/h	0	2.32965	2.78967	0
19	Vazao de Diesel Linha	F_DL	M3/D	0	3712.7	3870.92	0

20	Vazao de Albacora na carga	F_ALBA	M3/D	0	12450	12450	0
21	Vazao de Sahara Blending na carga	F_SAHA	M3/D	0	6969.74	6969.74	0
22	Vazao da Nafta Pesada	F_NP	M3/D	0	183.495	238.152	0
23	Vazao de diesel pesado	F_DP	m3/d	0	2066.49	2302.69	0
24	Vazao de querosene	F_Q	m3/d	0	1311	1500	0
25	Temp saida condensador N506	T_#1_N507	Celsius	0	41.5	41.5	0
26	Vazao de cru reduzido	F_CPV	m3/d	0	6390.75	6738.13	0
27	Prod topo N701	F_CS51	m3/d	0	200.531	203.05	0
28	Vazao refluxo N701	F_RS01	m3/d	0	454.912	372.501	0
29	Vazao fundo N701	F_CS03	m3/d	0	283.463	213.393	0
30	Diluyente de tintas	F_DTI	m3/d	0	148.159	146.165	0
31	Vazao refluxo N703	F_RS03	m3/d	0	20.9912	10.6017	0
32	Vazao fundo N703> para DL	F_DI03	m3/d	0	135.304	67.2288	0
33	Vazao topo N752	F_SS52	m3/d	0	62.1209	68.111	0
34	Vazao refluxo N752	F_RS52	m3/d	0	196.9	243.124	0
35	Vazao fundo N752	F_CS53	m3/d	0	696.438	848.073	0
36	Solvente de Borracha	F_SBO	m3/d	0	631.119	796.198	0
37	Vazao refluxo N753	F_RS53	m3/d	0	45.0079	23.2567	0
38	Carga Térm permutadores trocam calor c/ RCI (entra	Q_BPA	Gcal/h	0	-8.21757	-8.30867	0
39	Temperatura carga N507	T_CARGA_N507	Celsius	0	205.971	201.776	0
40	Temp saida bateria	T_RCBP	Celsius	0	139.011	142.198	0
41	Temp cond N703 (M709)	T_COND_N703	Celsius	0	24.8241	23.5426	0
42	Temp cond N753 (M761)	T_COND_N753	Celsius	0	28.009	33.4035	0

ANEXO VIII - OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE ALQUILAÇÃO

A seguir apresenta-se o trabalho publicado em GOMES ET AL. (2005). Este estudo preliminar foi utilizado para implementação de parte das metodologias propostas neste trabalho.

O problema do processo de alquilação é um problema de otimização de processos químicos da literatura (EDGAR et al., 2001, baseado em referência anterior), ainda de baixo esforço computacional. O processo, típico da indústria do petróleo (BABU E CHATURVEDI, 2000), consiste na reação de isobutano com olefinas leves em presença de ácido, visando a produção de gasolina de alta octanagem que em seguida é purificada por destilação (ver Figura AVIII-1).

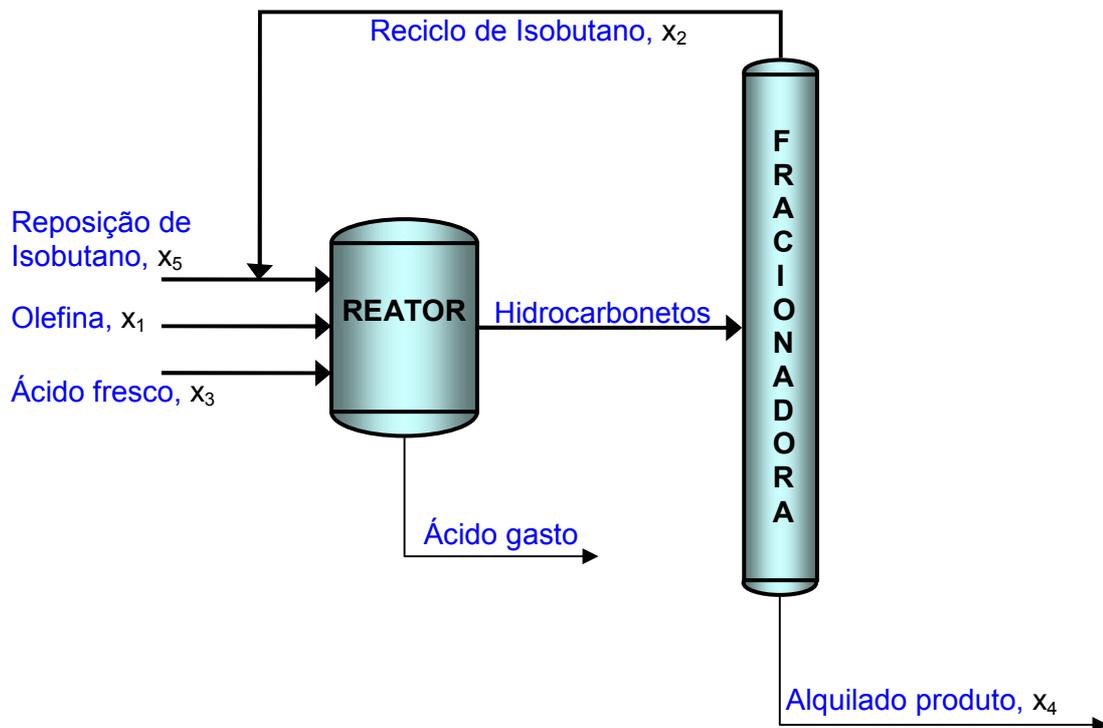


Figura AVIII-1 - O processo de alquilação (EDGAR et al., 2001)

O problema de otimização tem como objetivo determinar as condições ótimas de operação do processo. As variáveis de processo integrantes do problema são apresentadas na Tabela AVIII-I, e o problema em sua forma original é descrito através das equações em (AVIII-1). A equação (AVIII-1a) é a função objetivo, representando o lucro em unidades monetárias por dia. As equações (AVIII-1b) a (AVIII-1h) são restrições de igualdade do problema. O conjunto de inequações em (AVIII-1i)

representam as restrições de desigualdade que definem os limites operacionais (Tabela AVIII-1).

Para atender aos objetivos deste trabalho, o problema de otimização foi modificado, de forma que apenas duas variáveis de decisão são utilizadas: x_1 e x_8 . Para isto, o modelo foi redefinido de forma que, dado o valor das variáveis x_1 e x_8 e especificando-se os valores das variáveis x_2 e x_6 , todas as demais variáveis podem ser computadas através da sequência definida na Tabela AVIII-2. É introduzida a variável δ na equação (AVIII-1b) como um termo aditivo que pode alterar o valor da vazão de alquilado produto e que passa a ser um terceiro parâmetro do modelo. A última etapa do procedimento de cálculo, determina o valor do resíduo da equação (AVIII-1h), que passa a ser a única restrição de igualdade do problema reformulado, cuja forma final é apresentada em (AVIII-2).

Tabela AVIII-1 - Variáveis do modelo matemático do exemplo P2

Símbolo	Variável	Limite inferior	Limite superior
x_1	Vazão de olefina, barris/dia	0	2000
x_2	Reciclo de isobutano, barris/dia	0	16000
x_3	Vazão de adição de ácido, 1000 lb/dia	0	120
x_4	Produção de alquilado, barris/dia	0	5000
x_5	Reposição de isobutano, barris/dia	0	2000
x_6	Força do ácido, % em massa	85	93
x_7	Número de octanas	90	95
x_8	Razão Isobutano / Olefina	3	12
x_9	Fator de diluição do ácido	0,01	4
x_{10}	<i>F4 performance number</i>	145	162

$$\min_{\mathbf{x}} f(\mathbf{x}) = C_1 x_4 x_7 - C_2 x_1 - C_3 x_2 - C_4 x_3 - C_5 x_5 \quad (\text{a})$$

$$x_1(1.12 + 0.13167 x_8 - 0.0067 x_8^2) - x_4 = 0 \quad (\text{b})$$

$$86.35 + 1.098 x_8 - 0.038 x_8^2 + 0.325(x_6 - 89) - x_7 = 0 \quad (\text{c})$$

$$35.82 - 0.222 x_{10} - x_9 = 0 \quad (\text{d})$$

$$-133 + 3 x_7 - x_{10} = 0 \quad (\text{e})$$

$$1.22 x_4 - x_1 - x_5 = 0 \quad (\text{f})$$

$$\frac{98000 x_3}{x_4 x_9 + 1000 x_3} - x_6 = 0 \quad (\text{g})$$

$$x_1 x_8 - (x_2 + x_5) = 0 \quad (\text{h})$$

$$\mathbf{x}^{\min} \leq \mathbf{x} \leq \mathbf{x}^{\max} \quad (\text{i})$$

(AVIII-1)

Tabela AVIII-2 - Seqüência de cálculo no procedimento utilizado neste trabalho para solução do problema P2

Seqüência	1	2	3	4	5	6	7
Equação	V-4(b)	V-4 (c)	V-4 (e)	V-4 (d)	V-4 (g)	V-4 (f)	V-4 (h)
Variável calculada	x_4	x_7	x_{10}	x_9	x_3	x_5	Resíduo da eq. (h)

$$\min_{x_1, x_8} f(x_1, x_8, x_2, x_6, \delta) = C_1 x_4 x_7 - C_2 x_1 - C_3 x_2 - C_4 x_3 - C_5 x_5 \quad (a)$$

$$\text{sujeito a: } h(x_1, x_8, x_2, x_6, \delta) = x_1 x_8 - (x_2 + x_5) = 0 \quad (b) \quad \text{(AVIII-2)}$$

$$x_i^{\min} \leq x_i \leq x_i^{\max}, i = 1, 3, 4, 5, 7, 8, 9, 10 \quad (c)$$

onde : x_2, x_6 e δ são especificados

A solução deste problema através do algoritmo NPSOL (ANEXO II) para os valores-base de x_2, x_6 e δ pode ser observada na TABELA AVIII-4. Os valores obtidos como solução do problema diferem da solução apresentada por EDGAR et al. (2001) pelo fato de que estes autores implementaram as restrições (AVIII-1b-e) sob a forma de inequações (desigualdades), introduzindo termos de tolerância ponderados por variáveis do problema. Com isto, permitiu-se que os resíduos obtidos para as restrições (AVIII-1b-e) fossem suficientemente diferentes de zero para provocar diferenças perceptíveis na solução do problema de otimização quando comparado a soluções em que estes resíduos são nulos ou mais próximos de zero. Na solução obtida neste trabalho, com tolerância mais rígida para a restrição de igualdade e sem introduzir folgas nas demais equações do problema (em função do cálculo sequencial), os valores finais das variáveis, do resíduo da restrição de igualdade e da função objetivo tornam-se diferentes. Apenas uma restrição de desigualdade fica ativa, referente ao limite máximo da vazão de reposição de isobutano (x_5).

Módulos e seqüência de cálculo

Inicialmente, foi gerado um conjunto de metamodelos *kriging* base, a partir do qual seriam realizados estudos de otimização. Para a geração destes, 15 simulações com o modelo rigoroso geradas a partir de um projeto LHD foram utilizadas. Para simular uma situação em tempo real, cada parâmetro do modelo (δ, x_2 e x_6) recebeu um valor inicial e um valor alterado. As oito combinações possíveis (ver TABELA AVIII-3) destes valores foram utilizadas como casos para os quais foi realizada a otimização com o modelo rigoroso e com o procedimento adaptativo baseado no modelo *kriging* e modelo de correção como em (VI-5), porém considerando apenas o termo

independente e os termos lineares.

A avaliação dos resultados é apresentada na Figura AVIII-2. A comparação dos resultados obtidos é feita através de: (1) diferença relativa entre as funções objetivo computadas com o modelo rigoroso e o metamodelo; (2) Norma quadrática escalonada entre os pontos ótimos obtidos; (3) O percentual de redução no número de simulações com o modelo rigoroso em relação à solução rigorosa. Os resultados obtidos mostram que as soluções baseadas nos metamodelos são bastante precisas e foram obtidas com menos de 30% do esforço computacional requerido para a solução rigorosa.

Tabela AVIII-3 - CASOS DE ESTUDO PARA O EXEMPLO P2

CASO	x_2	x_6	δ
BASE	15819	90.115	0
C100	15000	90.115	0
C010	15819	86.200	0
C001	15819	90.115	100
C110	15000	86.200	0
C101	15000	90.115	100
C011	15819	86.200	100
C111	15000	86.200	100

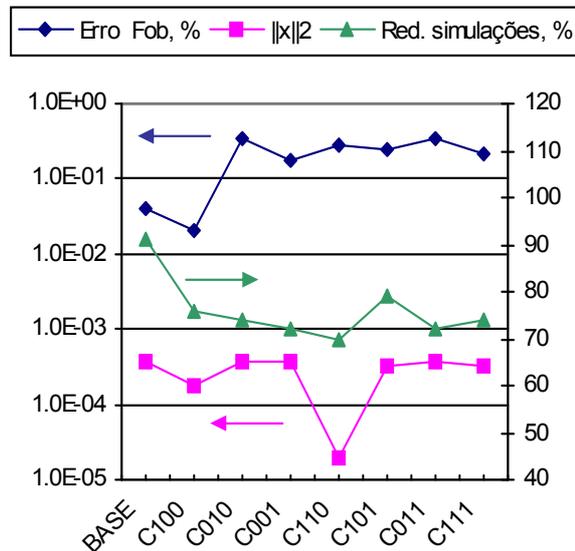


Figura AVIII-2 - Resultados obtidos com os estudos de caso para o processo de alquilação.

Tabela AVIII-4 - EXEMPLO DO PROCESSO DE ALQUILAÇÃO – OTIMIZAÇÃO NO CASO BASE.

>>> Resultado final

<<<

Projeto : Versao modificada do proj ALKYL1, com o novo parametro Alk_yld_corr

CONFIGURAÇÃO

No. de variaveis de decisao :	2
No. de restricoes de desigualdade:	7
No. de restricoes de igualdade:	0
Function Precision:	1.00E-08
Feasibility Tolerance:	1.00E-08
Fator mult. da Funcao Obj.:	-1
Fator das var. dec. de cnx.:	1
Fator restricoes desiguald.:	1
Fator restricoes de conex.:	1
Valor Minimo Funcao Obj.:	500
Valor Maximo Funcao Obj.:	2500

RESULTADOS

Funcao Objetivo - valor inicial :	718.1982158
Funcao Objetivo (modelo reduzido) :	0.00E+00
Funcao Objetivo (modelo rigoroso) :	1153.506928
Status de término :	0
No. de iteracoes :	4
No. de simulações :	34

VARIÁVEIS DE DECISÃO

	Descrição	TAG	Unidade	ScalMin	ScalMax	Xpass	Xinic	X_min	X_otm	X_max	At	X_Lag
1	Olefin feed (x1)	Oln_fd	b/d	1.00E-06	2000	0	1745	1.00E-06	1727.75	2000	---	0
2	External isobutane-to-olefin ratio (x8)	iC4_rat	adimensional	3	12	0	8	3	10.3134	12	---	0

RESTRIÇÕES

	Descrição	Tag	Unidade	ScalMin	ScalMax	Ginic	G_min	G_otm	G_ot_apx	G_max	At	G_Lag
1	Acid addition rate (x3)	Acid_add	1000lb/d	0	120	117.208	0	95.8787	0	120	---	0
2	Alkylate yield (x4)	Alkyl_yld	b/d	0	5000	3047.61	0	3055.53	0	5000	---	0
3	Isobutane make-up (x5)	iC4_mkp	b/d	0	2000	1973.08	0	2000	0	2000	AHI	-0.3
4	Motor octane number (x7)	Oct_nmbr	adimensional	90	95	93.0644	90	93.9946	0	95	---	0
5	Acid dilution factor (x9)	Acid_dil	adimensional	1.00E-02	4	3.36513	1.00E-02	2.74562	0	4	---	0
6	F4 performance number (x10)	F4	adimensional	145	162	146.193	145	148.984	0	162	---	0
7	constraint = x1*x8-x2-x5 = 0	constr	b/d	-20000	5000	-3832.08	0	-1.70E-08	0	0	AHL	-7.00E-02

VARIÁVEIS DE ENTRADA COM VALOR FIXO

	Descrição	Tag	Unidade	Valor
1	Isobutane recycle (x2)	iC4_rec	b/d	15819
2	Acid strength (x6)	Acid_str	%w	90.115
3	Correcao da vazao de adicao de acido (δ)	Alk_yld_corr	%	0

VARIÁVEIS DE SAÍDA GERAIS

	Descrição	Tag	Unidade	Val.Inic.	Val.Final	Val.Final Aprox.
1	Produto x4*x7	x4x7	-	283624	287180	0

ANÁLISE DA FUNÇÃO OBJETIVO

	Descrição	TAG	Unidade	Preço	Fator Aux.	ParcAbs Fobj	%Rel Fobj	Valor Inic	Valor Final	At	X_Lag
1	Olefin feed (x1)	Oln_fdn	b/d	-5.04	1	-8707.8717	-766.279	1745	1727.75	---	0
2	External isobutane-to-olefin ratio (x8)	iC4_rat	adimensional	0	0	0	0	8	10.3134	---	0
1	Acid addition rate (x3)	Acid_add	1000lb/d	-10	1	-969.5218	-85.3163	117.208	95.8787	---	0
2	Alkylate yield (x4)	Alkyl_yld	b/d	0	0	0	0	3047.61	3055.53	---	0
3	Isobutane make-up (x5)	iC4_mkp	b/d	-3.36	1	-6724.9163	-591.782	1973.08	2000	AHI	-0.2996
4	Motor octane number (x7)	Oct_nmbr	adimensional	0	0	0	0	93.0644	93.9946	---	0
5	Acid dilution factor (x9)	Acid_dil	adimensional	0	0	0	0	3.36513	2.74562	---	0
6	F4 performance number (x10)	F4	adimensional	0	0	0	0	146.193	148.984	---	0
7	constraint = x1*x8-x2-x5 = 0	constr	b/d	0	0	0	0	-3832.08	-1.70E-08	AHL	-7.00E-02
1	Isobutane recycle (x2)	iC4_rec	b/d	-3.50E-02	1	-553.665	-48.7216	15819	0		0
2	Acid strength (x6)	Acid_str	%w	0	0	0	0	90.115	0		0
3	Correcao da vazao de adicao de acido (x12)	Alk_yld_corr	%	0	0	0	0	0	0		0
1	Produto x4*x7	x4x7	-	6.30E-02	1	18092.3595	1592.1	283624	287180		0