



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO NORTE
CENTRO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
ELÉTRICA E DE COMPUTAÇÃO



Sistema Híbrido de Inferência Baseado em Análise de Componentes Principais e Redes Neurais Artificiais Aplicado a Plantas de Processamento de Gás Natural

Leandro Luttiane da Silva Linhares

Orientador: Prof. Dr. Fábio Meneghetti Ugulino de Araújo

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação da UFRN (área de concentração: Automação e Sistemas) como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Ciências.

Natal, RN, março de 2010

Divisão de Serviços Técnicos

Catálogo da Publicação na Fonte. UFRN / Biblioteca Central Zila Mamede

Linhares, Leandro Luttiane da Silva.

Sistema híbrido de inferência baseado em análise de componentes principais e redes neurais aplicado a plantas de processamento de gás natural / Leandro Luttiane da Silva Linhares. – Natal, RN, 2010.

100 f.

Orientador: Fábio Meneghetti Ugulino de Araújo

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte. Centro de Tecnologia. Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação.

1. Redes neurais artificiais – Dissertação. 2. Sistema de inferência – Dissertação. 3. Análise de componentes principais – Dissertação. 4. Colunas de destilação – Dissertação. I. Araújo, Fábio Meneghetti Ugulino de. II. Universidade Federal do Rio Grande do Norte. III. Título.

RN/UF/BCZM

CDU 004.03.26(043.3)

Sistema Híbrido de Inferência Baseado em Análise de Componentes Principais e Redes Neurais Artificiais Aplicado à Plantas de Processamento de Gás Natural

Leandro Luttiane da Silva Linhares

Dissertação de Mestrado aprovada em 19 de março de 2010 pela banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Dr. Fábio Meneghetti Ugulino de Araújo (Orientador) DCA/UFRN

Prof. Dr. André Laurindo Maitelli DCA/UFRN

Dr. Vicente Delgado Moreira PETROBRAS/UN-RNCE

*“A mente que se abre a uma nova idéia jamais
voltará ao seu tamanho original.”*

Albert Einstein

Agradecimentos

A Deus que sempre esteve ao meu lado e me confortou nos momentos mais difíceis deste trabalho e de minha vida. A fé realmente move montanhas, acreditem!

Aos meus pais, pela compreensão, incentivo, apoio e dedicação. Foram a educação e os ensinamentos que eles me proporcionaram que fizeram de mim o que sou hoje como pessoa, estudante e profissional.

Ao meu orientador, Fábio Meneghetti Ugulino de Araújo, por estar sempre presente e disposto a ajudar-me no desenvolvimento deste trabalho. Agradeço-o, também, por ter sido compreensivo diante dos problemas particulares pelos quais passei.

A minha namorada, Jaciara, que com seu amor, carinho e compreensão incentiva-me, ainda mais, a lutar pelos meus sonhos.

Aos colegas e amigos do Laboratório de Controle de Processos do LECA que, através do companheirismo e convivência sempre agradável, tornaram esta jornada menos árdua. Em especial a José Medeiros de Araújo Júnior, por, antes de tudo, ser um grande amigo.

Aos professores e funcionários do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica e de Computação, pelo aprendizado e pela ajuda.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro.

A todos aqueles que de alguma forma me ajudaram a concluir este trabalho e que por injustiça minha não foram citados.

Para sempre grato.

Resumo

Nos dias atuais, em que a concorrência de mercado exige produtos de melhor qualidade e a busca constante pela redução de custos e pelo melhor aproveitamento das matérias-primas, a utilização de estratégias de controle mais eficientes torna-se fundamental. Nas Unidades de Processamento de Gás Natural (UPGNs), assim como na maioria dos processos químicos, o controle de qualidade é realizado a partir da composição de seus produtos. Entretanto, a análise de composições químicas, mesmo quando realizada por equipamentos como os cromatógrafos a gás, apresenta longos intervalos de medição. Esse fato dificulta a elaboração de estratégias de controle que proporcionem um melhor rendimento do processo.

Geralmente, o principal produto econômico de uma UPGN é o GLP (Gás Liquefeito de Petróleo). Outros produtos comumente obtidos nessas unidades são a gasolina natural e o gás residual. O GLP é formado idealmente por propano e butano. Entretanto, na prática, apresenta em sua composição contaminantes, tais como o etano e o pentano. Neste trabalho é proposto um sistema de inferência utilizando redes neurais para estimar as frações molares de etano e pentano no GLP e a fração molar de propano no gás residual. O objetivo é estimar essas variáveis a cada minuto com uma única rede neural de múltiplas camadas, permitindo a aplicação de técnicas de controle inferencial visando a controlar a qualidade do GLP e reduzir a perda de propano no processo.

No desenvolvimento deste trabalho, é simulada no *software* HYSYS® uma UPGN formada por uma coluna de destilação deetanizadora e outra debutanizadora. A inferência é realizada a partir das variáveis de processo de alguns controladores PID presentes na instrumentação das colunas citadas. Com o intuito de reduzir a complexidade da rede neural de inferência, é utilizada a técnica estatística de análise de componentes principais (ACP) para diminuir o número de entradas da rede. Tem-se, portanto, um sistema híbrido de inferência. Também é proposta neste trabalho, uma estratégia simples para a correção em tempo real do sistema de inferência, tendo como base as medições dos possíveis cromatógrafos de linha presentes no processo em estudo.

Palavras-chave: Sistema de Inferência, Redes Neurais Artificiais, Análise de Componentes Principais, Colunas de Destilação.

Abstract

Nowadays, where the market competition requires products with better quality and a constant search for cost savings and a better use of raw materials, the research for more efficient control strategies becomes vital. In Natural Gas Processing Units (NGPUs), as in the most chemical processes, the quality control is accomplished through their products composition. However, the chemical composition analysis has a long measurement time, even when performed by instruments such as gas chromatographs. This fact hinders the development of control strategies to provide a better process yield.

The natural gas processing is one of the most important activities in the petroleum industry. The main economic product of a NGPU is the liquefied petroleum gas (LPG). The LPG is ideally composed by propane and butane, however, in practice, its composition has some contaminants, such as ethane and pentane. In this work is proposed an inferential system using neural networks to estimate the ethane and pentane mole fractions in LPG and the propane mole fraction in residual gas. The goal is to provide the values of these estimated variables in every minute using a single multilayer neural network, making it possible to apply inferential control techniques in order to monitor the LPG quality and to reduce the propane loss in the process.

To develop this work a NGPU was simulated in HYSYS[®] software, composed by two distillation columns: deethanizer and debutanizer. The inference is performed through the process variables of the PID controllers present in the instrumentation of these columns. To reduce the complexity of the inferential neural network is used the statistical technique of principal component analysis to decrease the number of network inputs, thus forming a hybrid inferential system. It is also proposed in this work a simple strategy to correct the inferential system in real-time, based on measurements of the chromatographs which may exist in process under study.

Keywords: Inferential System, Artificial Neural Network, Principal Component Analysis, Distillation Column.

Sumário

Sumário	i
Lista de Figuras	iii
Lista de Tabelas	vii
Lista de Símbolos e Abreviaturas	ix
1 Introdução	1
2 Processamento de gás natural	11
2.1 Gás natural	11
2.2 A indústria do gás	12
2.3 Unidade de Processamento de Gás Natural	12
2.3.1 Colunas de destilação	13
2.3.2 Coluna deetanizadora	15
2.3.3 Coluna debutanizadora	17
3 Fundamentos teóricos	21
3.1 Redes neurais artificiais (RNAs)	21
3.1.1 Processo de aprendizagem	24
3.1.2 Projetos utilizando redes neurais	25
3.2 Identificação de sistemas dinâmicos	26
3.2.1 Modelos neurais de identificação	29
3.3 Análise de componentes principais (ACP)	31
3.3.1 Componentes principais	33
3.3.2 Seleção das componentes principais	34
4 Sistema de inferência proposto	39
4.1 Módulo ACP	40
4.2 Módulo RNA	42

4.3	Módulo de correção	44
4.4	Estruturas de inferência ACP-RNA	46
4.4.1	Estrutura de inferência ACP-RNA 1	47
4.4.2	Estrutura de inferência ACP-RNA 2	48
4.4.3	Estrutura de inferência ACP-RNA 3	48
4.4.4	Estrutura de inferência ACP-RNA 4	49
4.4.5	Estrutura de inferência puramente neural	50
4.5	Metodologia de implementação	50
5	Resultados	53
5.1	Coleta de dados	53
5.2	Seleção da ordem dos modelos de inferência	54
5.3	Critérios de avaliação das estruturas ACP-RNA	55
5.3.1	Razão de redução - R_r	55
5.3.2	Número de conexões sinápticas - N_{cs}	56
5.3.3	Erro médio quadrático - EMQ	56
5.4	Análise de componentes principais	57
5.5	Treinamento e validação das RNAs de inferência	59
5.6	Análise comparativa das estruturas	61
5.6.1	Análise da estrutura de inferência puramente neural	61
5.6.2	Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 1	63
5.6.3	Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 2	65
5.6.4	Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 3	67
5.6.5	Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 4	69
5.7	Seleção da estrutura de inferência ACP-RNA	72
5.7.1	Acoplamento da estrutura ao processo	74
5.8	Inserção do módulo de correção	78
5.8.1	O problema da realimentação	78
5.8.2	Módulo de correção com o processo em regime permanente	81
5.8.3	Módulo de correção aplicando estímulos ao processo	85
6	Conclusões	91
	Referências bibliográficas	95

Lista de Figuras

2.1	Esquema típico da destilação fracionada industrial.	14
2.2	Coluna deetanizadora simulada.	16
2.3	Coluna debutanizadora simulada.	17
3.1	PMC totalmente conectada de duas camadas.	22
3.2	Esquema de aprendizagem supervisionada.	24
3.3	Procedimento básico de identificação caixa preta.	27
3.4	Estrutura do modelo NNARX.	30
3.5	Estrutura do modelo NNOE.	31
3.6	Gráfico <i>scree</i> do exemplo de ACP.	36
4.1	Diagrama esquemático do módulo ACP da proposta original.	42
4.2	Diagrama esquemático do módulo RNA da proposta original.	42
4.3	Diagrama esquemático da estrutura ACP-RNA da proposta original.	43
4.4	Diagrama esquemático do módulo de correção.	44
4.5	Exemplo de esquema de ciclo de medição.	45
4.6	Diagrama esquemático do sistema de inferência híbrido proposto.	46
4.7	Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 1.	47
4.8	Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 2.	48
4.9	Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 3.	49
4.10	Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 4.	49
4.11	Diagrama esquemático da estrutura de inferência puramente neural.	50
5.1	Estrutura puramente neural - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).	62
5.2	Estrutura puramente neural - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).	63
5.3	Estrutura puramente neural - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).	63
5.4	Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).	64
5.5	Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).	65
5.6	Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).	65
5.7	Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).	66

5.8	Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).	66
5.9	Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).	67
5.10	Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).	68
5.11	Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).	68
5.12	Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).	69
5.13	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de propano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$). 70	
5.14	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de etano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$). 70	
5.15	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de pentano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$). 70	
5.16	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de propano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$). 71	
5.17	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de etano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$). 71	
5.18	Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de pentano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$). 72	
5.19	Validação de propano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	74
5.20	Validação de etano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	75
5.21	Validação de pentano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	76
5.22	Validação de propano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	77
5.23	Validação de etano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	77
5.24	Validação de pentano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).	77
5.25	Processo estável com o sistema de referência realimentado (ACP-RNA 3, $n = 4$, $N_{No} = 20$).	79
5.26	Processo estável com o sistema de inferência realimentado (ACP-RNA 3, $n = 2$, $N_{No} = 16$).	80
5.27	Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 14min$).	82
5.28	Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 30min$).	83
5.29	Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 60min$).	84
5.30	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 1</i> - $\tau_c = 14min$). 85	
5.31	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 1</i> - $\tau_c = 30min$). 86	
5.32	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 1</i> - $\tau_c = 60min$). 87	

5.33	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 2</i> - $\tau_c = 14\text{min}$).	88
5.34	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 2</i> - $\tau_c = 30\text{min}$).	89
5.35	Sistema de inferência com módulo de correção (<i>Estímulo 2</i> - $\tau_c = 60\text{min}$).	90

Lista de Tabelas

2.1	Composição de uma amostra do gás natural em Guamaré-RN.	13
3.1	Exemplo de resultados de análise de componentes principais.	35
3.2	Análise através da formulação de Catell.	36
4.1	Variáveis secundárias do processo.	40
4.2	Variáveis primárias do processo.	43
5.1	Comparação dos módulos ACP das estruturas ACP-RNA propostas. . . .	57
5.2	Números relativos ao treinamento e validação das redes neurais.	61
5.3	EMQs médios de validação da estrutura de inferência puramente neural. .	62
5.4	EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 1. . . .	64
5.5	EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 2. . . .	66
5.6	EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 3. . . .	67
5.7	EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 4 ($n = 4$). .	69
5.8	Resultados das melhores redes neurais treinadas ($n = 4$).	72
5.9	Resumo das características das RNAs ($n = 4$).	73
5.10	Sistema realimentado e sem correção (processo estável).	81
5.11	Características dos módulos RNA das estruturas ACP-RNA 3.	81

Lista de Símbolos e Abreviaturas

E_{et}	Erro médio de validação de etano em porcentagem
E_{pe}	Erro médio de validação de pentano em porcentagem
E_{pr}	Erro médio de validação de propano em porcentagem
MQP	Mínimos Quadrados Parciais
N_{CS}	Número de conexões sinápticas
N_{No}	Número de neurônios na camada oculta
O_k	Valor k de <i>offset</i> do módulo de correção
R_r	Razão de redução
$S_{p \times p}$	Matriz de covariância ou correlação amostral de ordem p
V_p	Número de variáveis primárias na entrada do módulo ACP
V_s	Número de variáveis secundárias na entrada do módulo ACP
δ_i	Saída i de uma rede neural
γ	Porcentagem da variância total utilizada como ponto de corte na seleção do número de componentes principais
λ_i	Autovalor i da matriz de correlação ou de covariância
$\mathbf{C}$	Vetor de variáveis primárias
$\mathbf{PV}$	Vetor de variáveis de processo
$\overline{\mathbf{C}}$	Vetor de variáveis primárias fornecido pelo sistema de inferência
θ	Vetor de parâmetros ajustáveis de uma rede neural
φ	Vetor de entradas de uma rede neural

$\hat{\mathbf{C}}$	Vetor de variáveis primárias estimadas pela rede neural
$\hat{\mathbf{Y}}$	Vetor de componentes principais
$\overline{C2}_{GLP}$	Fração molar de C2 no GLP fornecida pelo sistema de inferência
$\overline{C3}_{GR}$	Fração molar de C3 no gás residual fornecida pelo sistema de inferência
$\overline{C5}_{GLP}$	Fração molar de C5 no GLP fornecida pelo sistema de inferência
$\Sigma_{p \times p}$	Matriz de covariância de ordem p
τ_c	Intervalo de correção
φ_i	Entrada i de uma rede neural
$\widehat{C2}_{GLP}$	Fração molar de C2 no GLP estimada pela rede neural
$\widehat{C3}_{GR}$	Fração molar de C3 no gás residual estimada pela rede neural
$\widehat{C5}_{GLP}$	Fração molar de C5 no GLP estimada pela rede neural
$\hat{y}$	Estimativa da variável de saída da planta
am	Número de amostras
c	Número de camadas da rede
d	Atraso de transporte da planta
e_r	Erro percentual de regime em módulo
f_i, F_i	Funções de ativação dos neurônios i das camadas ocultas e de saída
f_l	Função de ativação linear
f_s	Função de ativação sigmoidal
f_t	Função de ativação tangente hiperbólica
l_j	Variância total da j -ésima componente principal amostral
n	Ordem do modelo de inferência
nC_i	Número de neurônios contidos na camada i

n_{ϕ}	Número de entradas de uma rede neural
n_h	Número de neurônios de uma camada escondida
u	Variável de entrada da planta
w_{ij}, W_{ij}	Pesos sinápticos que saem do neurônio j e chegam ao neurônio i
y	Variável de saída da planta
$\mathbf{O}$	Matriz ortogonal formada pelos autovetores normalizados de $\Sigma_{p \times p}$
$\hat{\mathbf{Y}}_i$	Componente principal amostral i
$\mathbf{e}_i$	Autovetor i normalizado da matriz $\Sigma_{p \times p}$
ACP	Análise de Componentes Principais
ACP-RNA	Modelo de inferência formado por módulos ACP e RNA
ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
ANFIS	<i>Adaptive Neuro-Fuzzy Inference Systems</i>
ANP	Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis
ARMAX	Estrutura de modelagem <i>Autoregressive, Moving Average, eXogenous input</i>
ARX	Estrutura de modelagem <i>AutoRegressive, eXogenous input</i>
C_2H_6	Fórmula química do etano
C_3H_8	Fórmula química do propano
C_4H_{10}	Fórmula química do butano
C_5H_{12}	Fórmula química do pentano
C1	Representação simplificada do metano (CH_4)
C1+	Conjunto de hidrocarbonetos que contém um ou mais átomos de carbono
C2	Representação simplificada do etano (C_2H_6)
C2_{GLP}	Fração molar de C2 no GLP fornecida por cromatógrafo

C3	Representação simplificada do propano (C ₃ H ₈)
C3 _{GR}	Fração molar de C3 no gás residual fornecida por cromatógrafo
C3+	Conjunto de hidrocarbonetos que contém três ou mais átomos de carbono
C4	Representação simplificada do butano (C ₄ H ₁₀)
C5	Representação simplificada do pentano (C ₅ H ₁₂)
C5 _{GLP}	Fração molar de C5 no GLP fornecida por cromatógrafo
C5+	Gasolina Natural
CH ₄	Fórmula química do metano
CO ₂	Dióxido de Carbono
CP	Componente Principal
CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
EMQ	Erro Médio Quadrático
ETO	Estação de Tratamento de Óleo
FIC	Controlador Indicador de Vazão
FIR	Estrutura de modelagem <i>Finite Impulse Response</i>
FKE	Filtro de Kalman Extendido
GLP	Gás Liquefeito de Petróleo
GMR	Município de Guamaré-RN
GR	Gás Residual
H ₂ O	Água
H ₂ S	Sulfeto de Hidrogênio
HCl	Ácido Clorídrico
LGN	Líquido de Gás Natural

LIC	Controlador Indicador de Nível
MLR	<i>Multiple Linear Regression</i>
MPIC	<i>Model Predictive Inferential Control</i>
N ₂	Nitrogênio
NA	Não aplicável
NIR	Analizador <i>Near-InfraRed</i>
NNARMAX	<i>Neural Network Autoregressive, Moving Average, eXogenous input</i>
NNARX	<i>Neural Network Autoregressive with eXogenous inputs</i>
NNFIR	<i>Neural Network Finite Impulse Response</i>
NNOE	<i>Neural Network Output Error</i>
NNOE	<i>Neural Network Output Error</i>
NNSSIF	<i>Neural Network State Space Innovations Form</i>
OE	Estrutura de modelagem <i>Output Error</i>
PCR	<i>Principal Component Regression</i>
PI	Controlador Proporcional Integrativo
PIC	Controlador Indicador de Pressão
PID	Controlador Proporcional, Integrativo e Derivativo
PLS	<i>Partial Least Squares</i>
PMC	Rede Neural Perceptron de Múltiplas Camadas
PRBS	<i>Pseudo Random Binary Signal</i>
PRS	<i>Pseudo Random Signal</i>
PV	Variável de Processo - <i>Process Variable</i>
RNA	Rede Neural Artificial

SPLT	Controlador <i>Split Range</i>
SSIF	Estrutura de modelagem <i>State Space Innovations Form</i>
T_{tr}	Número total de treinamentos realizados em uma estrutura ACP-RNA
T_{val}	Número total de validações realizadas em uma estrutura ACP-RNA
TIC	Controlador Indicador de Temperatura
UPGN	Unidade de Processamento de Gás Natural
UTPF	Unidade de Tratamento e Processamento de Fluidos
VLV	Válvula
VP_i	Variável Primária i do processo
VS_i	Variável Secundária i do processo

Capítulo 1

Introdução

O custo crescente das matérias-primas energéticas e a elevada concorrência econômica em nível mundial exigem que a operação e o controle das plantas industriais sejam conduzidos de forma otimizada à produtividade e lucratividade, atendendo às exigências cada vez maiores de qualidade dos produtos finais (Nascimento et al., 1990). Por essa razão, de uma forma geral, as indústrias que almejam atingir destaque em suas respectivas áreas de atuação buscam, constantemente, a aplicação de técnicas mais eficientes para o monitoramento e controle de seus processos.

Thomas et al. (2001) definem a indústria do petróleo como sendo a atividade produtiva mais notável desenvolvida pelo ser humano. Entre as atividades presentes neste tipo de indústria, pode-se dizer que a destilação é uma das mais importantes, uma vez que é responsável por separar a alimentação de um determinado processo em dois ou mais produtos de diferentes composições.

A indústria do petróleo pode ser caracterizada pela sua grande variedade de processos complexos. Por isso, os seus parques industriais são devidamente equipados com diversos sistemas de controle modernos. As técnicas de controle avançado, por exemplo, têm sido vastamente utilizadas neste ramo da indústria com os objetivos de otimizar a operação de seus processos e obter produtos finais dentro de padrões de qualidade especificados por normas (Wang et al., 2006). O sucesso de qualquer estratégia de controle por realimentação depende da confiabilidade e do nível de exatidão das medições das variáveis controladas do processo. Entretanto, existe um grande número de processos, não somente da indústria do petróleo, cujas variáveis primárias a serem controladas não são facilmente mensuráveis e/ou apresentam longos intervalos de medição (Joseph, 1999).

De acordo com Luyben (1987), a destilação é uma das mais importantes técnicas de separação de compostos químicos, sendo amplamente utilizada na indústria do petróleo. Segundo ele, as colunas de destilação são unidades complexas que apresentam um comportamento não linear devido às relações de equilíbrio dos vapores/líquidos, às

complexas condições de processamento (como por exemplo, refracionadores e múltiplas alimentações) e à necessidade de uma alta pureza do produto final.

Abdullah et al. (2007) afirmam que o controle efetivo das colunas de destilação pode melhorar a qualidade de seus produtos finais, diminuir o consumo de energia, aumentar a capacidade de produção e a segurança do processo. Segundo Pullis (2007), a separação de compostos químicos através das colunas de destilação requer uma grande quantidade de energia, chegando a representar, em muitas plantas industriais, de 30% a 40% do total de investimentos e de custos energéticos. A energia requerida por esses sistemas pode ser reduzida significativamente através de uma otimização durante a fase de projeto, ou, com as colunas já em funcionamento, por meio de sistemas de controle capazes de manter as colunas de destilação próximas de suas condições ótimas de operação. Entretanto, para realizar o controle/supervisão desse tipo de processo com maior eficiência, é ideal obter medições em tempo real das variáveis, normalmente composições químicas que estão diretamente relacionadas com a qualidade do produto final. Devido a isso, essas variáveis são de grande interesse econômico.

O controle da composição de produtos de colunas de destilação é um exemplo em que raramente as variáveis mais importantes do processo, denominadas variáveis primárias, são utilizadas diretamente como variáveis controladas, pois as composições químicas são variáveis de difícil mensuração. De acordo com Warne et al. (2004a), as medições destes importantes indicadores de desempenho, muitas vezes, são obtidas através de análises em laboratório de amostras coletadas ao longo do tempo. Essa metodologia implica em algumas horas de atraso de medição, tanto devido à coleta de amostras, quanto ao processamento das análises. Apesar de após um longo período a qualidade do produto ser determinada, essa informação pode ser muito tardia para que sejam efetuados os devidos ajustes para manter a boa operação do processo. Assim, pode-se chegar a uma situação em que o produto final esteja fora de especificação, ocasionando, dependendo do processo, grande perda econômica.

Kano et al. (2000) afirmam que mesmo quando são realizados investimentos em equipamentos para realizar a análise de composição na própria linha de produção, tais como os cromatógrafos a gás e os analisadores NIR (*Near-InfraRed*), esses possuem alto custo de aquisição e manutenção, além de apresentarem intervalos de tempo significativos entre as medições. Esta última característica é uma das principais limitações para a implementação de estratégias de controle mais eficientes em plantas de colunas de destilação.

De acordo com Zamproga et al. (2005), os sistemas de inferência representam uma forma atrativa de abordar o problema da medição de variáveis primárias de um processo, particularmente quando os sensores físicos para a medição dessas variáveis não

são disponíveis, ou quando os altos custos, e/ou as limitações técnicas dos sensores impedem o seu uso em tempo real. Nestes sistemas, as variáveis primárias são estimadas a partir de variáveis secundárias de fácil medição, tais como: temperaturas, pressões, níveis, vazões, entre outras. Segundo Fortuna et al. (2007b), os sistemas de inferência podem ser ferramentas valiosas para diferentes tipos de aplicações, como por exemplo em: refinarias, plantas químicas, usinas nucleares, processamento de alimentos, controle de poluição industrial, entre outros.

Em seu trabalho de dissertação, Zanata (2005) apresenta outras denominações utilizadas para os sistemas de inferência. Entre as mais frequentemente encontradas no meio industrial e acadêmico, ele cita as seguintes: analisador virtual, sensor virtual, *soft sensor*, estimador virtual e medidor inferencial. James et al. (2000) definem esses sistemas como algoritmos matemáticos (modelos inferenciais) que possuem a capacidade de estimar em tempo real variáveis de interesse de difícil medição a partir de outras variáveis disponíveis, medidas em intervalos de amostragem pequenos. Quando essas variáveis estimadas são utilizadas em alguma estratégia de controle, tem-se, então, a técnica de controle conhecida como inferencial.

No final da década de 70 foi apresentado um dos primeiros estudos realizados na área de inferência de variáveis. Joseph e Brosilow (1978a, 1978b) desenvolveram métodos de construção de estimadores ótimos e subótimos e compararam esses métodos aplicando-os ao controle inferencial da composição de produtos em uma coluna simulada de destilação multicomponentes. Desde então, diversas técnicas foram desenvolvidas e vêm sendo utilizadas com o intuito de estimar variáveis de difícil medição com maior exatidão e confiabilidade. De acordo com Warne et al. (2004b), apesar da inferência ser amplamente utilizada nas indústrias, apenas uma pequena quantidade de técnicas são discutidas na literatura. De uma forma geral, são três os principais tipos de abordagens empregados para a implementação de sistemas de inferência: a modelagem fenomenológica, os métodos estatísticos, como os de regressão, e a modelagem a partir de alguma técnica de inteligência artificial. Essa classificação não é tão rigorosa, uma vez que, por exemplo, é possível unir as vantagens de algumas dessas abordagens para o desenvolvimento de sistemas de inferência híbridos.

A modelagem fenomenológica se baseia nas leis da física que caracterizam um processo em particular, como as leis de conservação de massa, energia e momento. O modelo obtido por esse tipo de abordagem é geralmente expresso através de equações diferenciais ou algébricas. Essa metodologia apresenta ótimo desempenho quando os fenômenos físicos envolvidos no processo são bastante claros, ou quando se possui um conhecimento profundo dos mecanismos do processo. Entretanto, em muitas aplicações práticas, os

processos possuem características complexas de não linearidades e incertezas que tornam a modelagem fenomenológica impraticável (Warne et al., 2004a). Isso faz com que os sistemas de inferência utilizados em processos complexos sejam baseados, geralmente, em inteligência artificial ou em métodos de regressão estatística. Esses métodos não exigem um profundo conhecimento da física do processo, sendo capazes de extrair modelos dinâmicos a partir de dados experimentais de fácil obtenção.

Na literatura científica são encontrados diversos trabalhos que demonstram a aplicabilidade dos sistemas de inferência. Entre esses trabalhos pode-se citar alguns como exemplos. Baratti et al. (1998) utilizam um filtro de Kalman estendido (FKE) para estimar as frações molares de etanol, butanol e água resultantes de uma coluna de destilação ternária. A confiabilidade do sistema inferencial proposto é testada inserindo perturbações no vapor d'água e nas vazões de alimentação e refluxo da coluna. O desempenho do sistema é analisado comparando as estimativas obtidas pelo sensor virtual com as composições reais extraídas de uma planta piloto.

Joseph (1999) propõe um tutorial de controle inferencial. Ele apresenta alguns esquemas de sistemas de controle inferencial que podem ser utilizados a partir da estratégia de controle por realimentação tradicional (controlador *feedback*) e da estratégia em cascata. Além disso, o autor apresenta um controlador inferencial denominado MPIC (*Model Predictive Inferential Control*), tendo como base técnicas de controle preditivo. Os controladores citados são testados e comparados através de dois estudos de caso, incluindo uma coluna de destilação. Os resultados demonstraram o melhor desempenho do controlador MPIC proposto em relação às demais técnicas apresentadas.

No trabalho de Zhang (2001), são estimadas as frações molares de metanol nos produtos de topo e de fundo de uma coluna de destilação binária metano-água a partir de sensores virtuais baseados nos métodos de regressão estatísticas PCR (*Principal Component Regression*) e PLS (*Partial Least Squares*). Ambos os sistemas possuem como variáveis secundárias algumas das temperaturas dos pratos da coluna de destilação. Os sistemas de inferência são então utilizados para realimentar controladores PI tradicionais, formando, assim, controladores inferenciais. Estes foram comparados com dois outros controladores PI: um deles realimentado por medições obtidas de um analisador de composição e o outro pela temperatura do prato sensível da coluna. Os resultados encontrados demonstraram a superioridade de desempenho dos controladores inferenciais, tendo o método estatístico PCR apresentado um desempenho ligeiramente melhor.

No trabalho de Evangelista et al. (2001), é realizada uma comparação entre três sistemas de inferência baseados nos métodos estatísticos de regressão MLR (*Multiple Linear Regression*), PLS e PCR aplicados em uma coluna debutanizadora com o objetivo

de estimar as frações molares de pentano e butano, respectivamente, em seus produtos de fundo e de topo. As variáveis secundárias utilizadas foram algumas temperaturas de prato, temperatura de topo da coluna, vazão de refluxo, pressão no vaso de condensado e temperatura no refeedor. Foi observado que os sistemas de inferência PLS e PCR apresentaram desempenhos similares e melhores que a obtida pelo sensor virtual MLR.

Lima (2001) propõe o desenvolvimento de um sistema de inferência baseado em uma simples rede neural perceptron de múltiplas camadas (PMC) com o objetivo de estimar a fração molar de pentano no gás liquefeito de petróleo (GLP), produto de topo de uma coluna debutanizadora. O sistema foi desenvolvido a partir de dados reais coletados da unidade de processamento de gás natural UPGN-I GMR da empresa Petrobras, localizada no município de Guamaré-RN. As variáveis secundárias utilizadas na inferência foram a razão de refluxo (relação entre a vazão de refluxo e o GLP produzido), as temperaturas de topo e de fundo da coluna e a sua vazão de refluxo. Essas variáveis foram selecionadas a partir de um estudo estatístico, utilizando análise de correlação. Segundo o autor, a falta de dados mais abrangentes do processo justificam os resultados não satisfatórios que foram encontrados. Nesse trabalho, as medições fornecidas pelo cromatógrafo presente no processo não são utilizadas como parte da entrada da rede neural artificial (RNA) utilizada na inferência.

Saindo um pouco da indústria do petróleo, Warne et al. (2004b) realizam uma comparação entre um sistema inferencial ANFIS e um outro sistema de inferência utilizando um modelo ACP-ANFIS. Neste último, a análise de componentes principais (ACP) é aplicada para selecionar as entradas do modelo ANFIS. Das onze variáveis presentes no processo e utilizadas no sistema ANFIS, a ACP foi capaz de reduzir este número para apenas três componentes principais. O modelo híbrido ACP-ANFIS, formado por três entradas, apresentou um melhor desempenho, com menores erro de estimativa e tempo de treinamento, além de ser composto por uma estrutura de menor complexidade.

Em Fortuna et al. (2005), é apresentado o projeto de um sistema de inferência com o objetivo de aprimorar o monitoramento e controle de qualidade de alguns produtos de uma refinaria, estimando a concentração em regime permanente da gasolina natural e do butano, no topo e no fundo, respectivamente, de uma coluna debutanizadora. É implementado nesse trabalho um modelo dinâmico preditivo de três passos, formado por três redes neurais dinâmicas. O sistema proposto consegue fornecer estimativas em um intervalo de tempo bem inferior aos proporcionados pelos cromatógrafos a gás, permitindo melhor controle e monitoramento do processo.

Em Corrêa (2005), é apresentado um sistema híbrido para inferir a qualidade de produtos de destilação, reunindo as características das redes neurais com as do filtro de Kalman

estendido. Segundo o autor, apesar do bom resultado que a estrutura neural possa vir a apresentar, ela possui a desvantagem de precisar ser retreinada quando o ponto de operação do processo é alterado. Em termos práticos, no sistema híbrido proposto, o FKE atua sobre os pesos sinápticos da rede neural, atualizando-os em tempo real, permitindo, dessa forma, que o sistema se adapte constantemente às variações do ponto de operação do processo. Os resultados apresentados demonstraram um acréscimo de desempenho da estrutura híbrida em relação ao sensor formado apenas pela técnica de redes neurais.

Warne et al. (2004a) apresentam um trabalho aplicado à indústria de revestimento, tendo como proposta um sistema de inferência híbrido ACP-RNA. O trabalho descreve fundamentos teóricos e práticos importantes quanto a seleção das componentes principais a serem utilizadas como entradas da rede neural, assim como a possibilidade de também utilizar essa técnica estatística para a detecção e eliminação de *outliers* dos dados experimentais coletados do processo. Nos resultados, é realizada uma comparação entre o sistema proposto e um sistema de inferência formado apenas por uma rede neural PMC, demonstrando que o sistema proposto apresenta as seguintes vantagens: aumento significativo de desempenho, o modelo torna-se mais robusto, pois os efeitos de colinearidade são incorporadas pelo algoritmo ACP, e, finalmente, a complexidade do modelo é reduzida consideravelmente, assim como o tempo de treinamento da RNA.

Neste trabalho é proposto o desenvolvimento de um sistema de inferência baseado em redes neurais artificiais, tendo como ferramenta auxiliar a análise de componentes principais. O objetivo é estimar algumas das importantes variáveis de uma unidade de processamento de gás natural (UPGN), minuto a minuto, esperando que o sensor virtual obtido possa vir a ser utilizado em conjunto com alguma proposta de controle inferencial, seja ela monovariável ou multivariável.

Nas UPGNs, tradicionalmente, a qualidade de seus produtos é controlada de maneira indireta, controlando-se pressões, vazões e temperaturas ao invés de se controlar diretamente a composição desses produtos. Essa estratégia deve-se aos fatos anteriormente apresentados relativos às limitações de medições realizadas através de cromatógrafos e análises laboratoriais. Neste último, muitas vezes, somente é possível avaliar a qualidade do produto a ser comercializado no parque de estocagem, o que eventualmente acarreta a sua rejeição e consequente reprocessamento.

O processamento de gás natural é uma das principais atividades da indústria do petróleo, devido ao potencial financeiro de seu principal produto final: o GLP. Nas UPGNs, o gás *in natura* proveniente dos campos de produção passa por uma etapa de pré-processamento. É nesta etapa inicial que são removidos a água e os elementos oxidantes. Após esse processo, o gás é encaminhado para as colunas de destilação fracionada, onde ele

é decomposto em diversos produtos. Entre esses, podemos citar como exemplos: o gás residual (GR), a gasolina natural (C5+) e o gás liquefeito de petróleo.

Uma UPGN é formada por diversos elementos, variando de unidade para unidade. O sistema simulado a ser utilizado no desenvolvimento deste trabalho baseia-se na unidade de processamento da Petrobras UPGN-II GMR, localizada no município de Guamaré-RN, e é implementado no *software* de processos químicos HYSYS®. A planta simulada é formada por duas colunas de destilação fracionada: uma coluna deetanizadora em série com uma coluna debutanizadora. Resumidamente, a coluna deetanizadora recebe como carga o gás natural pré-processado e, por meio de destilação, obtém em seu topo o gás residual, formado por metano (CH_4 , ou simplesmente C1), etano (C_2H_6 , ou simplesmente C2) e traços de propano (C_3H_8 , ou simplesmente C3). O produto de fundo dessa coluna, o líquido de gás natural (LGN), formado por C3+ e C2, alimenta o próximo estágio: a coluna debutanizadora. Nessa última etapa são obtidos a gasolina natural e o GLP, produtos de fundo e de topo da coluna debutanizadora, respectivamente.

Geralmente, o GLP corresponde ao produto de maior importância econômica em uma UPGN, sendo formado idealmente por propano e butano (C_4H_{10} , ou simplesmente C4). Entretanto, na prática, o GLP produzido apresenta também em sua composição alguns contaminantes, como o etano e o pentano. Esses componentes são, respectivamente, resultados da não vaporização do etano na coluna deetanizadora e da vaporização de pentano na coluna debutanizadora. O sistema de inferência aqui proposto tem como objetivo estimar as frações molares dos contaminantes etano e pentano no GLP e um indicador de parte da perda do processo, a fração molar de propano no gás residual.

As redes neurais artificiais são poderosas ferramentas para a identificação de dinâmicas não lineares complexas, como em uma UPGN. Segundo Wang et al. (2006), podem ser citados alguns benefícios da utilização dessas estruturas quando aplicadas na modelagem inferencial. Elas podem representar facilmente as relações dinâmicas não lineares existentes entre as variáveis primárias e secundárias de um determinado processo, assim como um modelo dinâmico pode ser obtido sem nenhum conhecimento anterior detalhado do comportamento do processo. Essas características são bastante vantajosas, uma vez que em casos onde o fenômeno envolvido é de grande complexidade, a modelagem física consome bastante tempo e alguns parâmetros significativos do processo são geralmente desconhecidos. Por outro lado, a grande quantidade de dados históricos, usualmente adquiridos para fins de monitoramento em plantas industriais, permite a aplicação da identificação de modelos dos tipos caixa preta e caixa cinza, metodologias onde as redes neurais classicamente se enquadram (Park e Han, 2000).

Um dos problemas que envolve o projeto de um sistema de inferência é a seleção das

variáveis secundárias a serem utilizadas. Consiste em uma prática comum adotar várias medições de temperaturas de prato das colunas de destilação para representar ou estimar a composição dos produtos dessas colunas (Ahmed e Zhang, 2003; Zhang, 2001), além de outras variáveis, tais como a vazão de refluxo, a pressão no vaso de condensado e a temperatura do refeedor. A planta escolhida como objeto de estudo neste trabalho é dotada de diversos instrumentos, como será mostrado na sequência deste trabalho. Optou-se por utilizar as variáveis de processo (PVs - *Process Variables*) dos controladores PID presentes nas malhas regulatórias de controle das colunas de destilação como variáveis secundárias deste projeto.

No decorrer deste trabalho serão apresentadas as estruturas NNARX (*Neural Network Autoregressive with eXogenous inputs*) e NNOE (*Neural Network Output Error*), redes neurais dinâmicas tomadas como base para a realização da inferência do sistema aqui proposto. Essas estruturas possuem em suas entradas valores passados das variáveis secundárias e primárias do processo. Como consequência natural desse fato, dependendo do número dessas variáveis no sistema de inferência e da ordem do modelo necessária para se obter estimativas satisfatórias, um sistema de inferência formado unicamente por uma rede neural pode apresentar uma configuração bastante complexa em relação ao número de entradas da rede, neurônios e pesos sinápticos. Por essa razão, propõe-se adicionar ao sistema de inferência deste trabalho a técnica estatística de análise de componentes principais com o objetivo de reduzir a complexidade da rede neural, através do decréscimo do número de suas entradas. Segundo Warne et al. (2004a), a ideia principal da ACP é reduzir a dimensionalidade de um conjunto de dados composto por uma grande quantidade de variáveis interrelacionadas. Isso é alcançado transformando as variáveis originais em um novo conjunto de variáveis descorrelacionadas denominadas componentes principais.

A estratégia proposta apresenta, entretanto, um problema que deve ser levado em consideração. Como foi dito anteriormente, o sistema de inferência utiliza-se de medições passadas das variáveis primárias do processo. Entretanto, essas variáveis, composições químicas, não estão sempre disponíveis, pois existe um grande intervalo entre as suas medições. Portanto, faz-se necessário, na ausência dessas medições, que o sistema de inferência seja realimentado pelos valores estimados dessas variáveis. Com o passar do tempo, isso ocasiona um “acúmulo” de erros de estimativa que pode levar o sistema a um percentual de erro inaceitável para os propósitos de controle/monitoramento do processo, ou até mesmo à instabilidade das medições. Para tentar solucionar esse problema é proposta uma metodologia de correção do sistema de inferência a partir das medições periódicas realizadas por possíveis cromatógrafos a gás presentes no processo.

O próximo capítulo descreve o processo simulado a ser utilizado no desenvolvimento

do trabalho, fornecendo maiores detalhes sobre o funcionamento das colunas deetanizadora e debutanizadora. O Capítulo 3 apresenta conhecimentos teóricos que fundamentam o desenvolvimento deste trabalho. No Capítulo 4 são expostas as estruturas dos sistemas de inferência que serão analisadas, apresentando também, em maiores detalhes, a proposta de correção do sensor virtual e a metodologia utilizada no decorrer do trabalho. O Capítulo 5 mostra os resultados obtidos, apresentando a melhor estrutura de inferência encontradas e as análises realizadas referentes à proposta de correção do erro. Por fim, no Capítulo 6 são feitas algumas considerações finais, propondo melhorias para o sistema desenvolvido, apresentando perspectivas futuras para o trabalho e incluindo comentários sobre uma possível implementação em uma UPGN real.

Capítulo 2

Processamento de gás natural

Neste capítulo são apresentadas informações relativas ao processamento de gás natural. Inicialmente, são descritas algumas características desse gás e sobre a sua produção no país. Em seguida, é dada uma visão geral sobre as UPGNs, onde são apresentados o esquema básico de um sistema de destilação fracionada e maiores detalhes sobre o sistema simulado utilizado neste trabalho.

2.1 Gás natural

O gás natural é encontrado no subsolo, acumulado em rochas porosas, associado ou não a depósitos petrolíferos. De modo similar aos demais combustíveis fósseis, o gás natural é uma mistura de hidrocarbonetos originados da decomposição de matéria orgânica fossilizada ao longo de milhões de anos.

Em seu estado bruto, o gás natural é composto principalmente por metano, com proporções variadas de etano, propano, butano, hidrocarbonetos mais pesados e também dióxido de carbono (CO_2), nitrogênio (N_2), sulfeto de hidrogênio (H_2S), água (H_2O), ácido clorídrico (HCl), metanol e outras impurezas. A presença e proporção desses elementos depende fundamentalmente das características do reservatório de onde é extraído o gás natural: se localizado em terra ou em mar, se associado ou não ao petróleo, do tipo da matéria orgânica ou mistura da qual se originou, da geologia do solo onde se encontra o reservatório, etc.

Embora o gás natural seja altamente competitivo em relação a quase todos os combustíveis, é na indústria do petróleo que ele encontra sua mais nobre aplicação. Devido às suas características químicas, o gás natural é um insumo altamente qualificado para uso como matéria prima, sendo utilizado na produção de uma série de compostos.

2.2 A indústria do gás

A indústria do gás natural vem apresentando um crescimento significativo ao longo dos anos, o que reforça cada vez mais a posição desse produto como fonte de energia. Segundo a Agência Internacional de Energia, em 2003, a participação do gás natural no consumo mundial de energia era da ordem de 16,3%.

A Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL) informa que em 2005 as reservas provadas do Brasil eram da ordem de 230 bilhões de m³, dos quais 48% estavam localizados no Estado do Rio de Janeiro, 20% no Amazonas, 9,6% na Bahia e 8% no Rio Grande do Norte. Para a ANEEL, a participação do gás natural na matriz energética brasileira ainda era pouco expressiva, da ordem de 5,6% do consumo final.

Para a Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), as reservas provadas saltaram de 227,7 bilhões de m³ em 2007 para 364,2 bilhões de m³ em 2008. No mesmo período a produção de gás natural mais que duplicou, passando de 26,5 para 59 milhões de m³/dia.

2.3 Unidade de Processamento de Gás Natural

A unidade de processamento de gás natural estudada faz parte de um grupo de três UPGNs localizadas na unidade de tratamento e processamento de fluidos (UTPF) da Petrobras em Guamaré-RN. As UTPFs recebem petróleo e gás natural provenientes dos campos de extração marítimos (*offshore*) e terrestres (*onshore*), transformando-os em produtos de consumo para o mercado.

O petróleo recebido em uma UTPF é enviado para uma estação de tratamento de óleo (ETO), onde a água e as impurezas são retiradas. O petróleo especificado é, então, encaminhado às refinarias para a obtenção de produtos pesados (óleos lubrificantes, parafina e vaselina), intermediários (óleo diesel) e leves (gasolina e querosene). O gás natural recebido por uma UTPF é levado para uma estação de compressores. Após a sua compressão, o gás natural constituirá a carga a ser processada nas UPGNs (Araújo Jr., 2007).

De uma forma geral, em uma UPGN, o gás natural passa inicialmente por processos visando à remoção de água e de elementos oxidantes. Em seguida, é direcionado para uma série de colunas ou torres de destilação fracionada, onde ele é decomposto em diversos subprodutos, tais como o gás residual, a gasolina natural e o gás liquefeito de petróleo.

A composição apresentada na Tabela 2.1 é resultado da análise de uma amostra do gás natural que chega para ser processado na UTPF de Guamaré (Lima, 2001). Essa compo-

sição é influenciada pela entrada de novos campos de produção e pelo fechamento de poços, o que pode causar alterações na proporção dos compostos na mistura total.

Tabela 2.1: Composição de uma amostra do gás natural em Guamaré-RN.

Componente	Fórmula química	Simplificação	% em mol
Metano	CH_4	C1	76,15
Etano	C_2H_6	C2	10,64
Propano	C_3H_8	C3	5,88
Butano	C_4H_{10}	C4	2,44
Dióxido de carbono	CO_2	–	2,32
Nitrogênio	N_2	–	1,38
Pentano	C_5H_{12}	C5	0,87
Hexano	C_6H_{14}	C6	0,30
Heptano	C_7H_{16}	C7	0,10
Octano	C_8H_{18}	C8	0,01

2.3.1 Colunas de destilação

Segundo Luyben (1990), depois do CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*), as colunas de destilação são provavelmente o processo mais importante e popular na área de processos químicos. Mesmo tendo o seu comportamento extensivamente estudado durante várias décadas, o interesse em desenvolver pesquisas relacionadas com essas estruturas ainda permanece ativo, principalmente por pesquisadores da área de controle de processos. A explicação para isso decorre do fato da destilação ser a técnica de separação mais comumente empregada pelas indústrias químicas e petroquímicas.

A destilação é um processo de separação de uma mistura em seus componentes, onde é adicionado ou subtraído calor à mistura em função das diferentes temperaturas de ebulição dos seus elementos constituintes. Na indústria do petróleo, a destilação é comumente realizada em grandes estruturas cilíndricas verticais denominadas colunas ou torres de destilação fracionada.

A Figura 2.1 apresenta um desenho esquemático de um sistema de destilação fracionada. Esses sistemas são formados normalmente por três elementos principais: a coluna de destilação, o reboiler (*reboiler*) e o condensador. A coluna de destilação possui estrutura tubular cilíndrica, apresentando diâmetro que pode variar de alguns centímetros até alguns metros e com a altura variando de 6 até mais de 60 metros. O seu interior é preenchido por pratos perfurados, ou estágios, onde ocorre o contato entre líquidos e vapores. A coluna é alimentada, geralmente, em algum estágio próximo de sua metade.

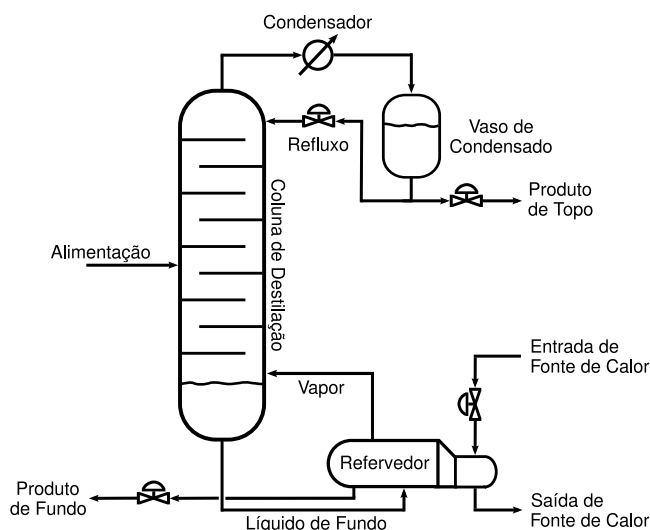


Figura 2.1: Esquema típico da destilação fracionada industrial.

O refrervador é responsável por vaporizar o líquido de fundo através de troca de calor. Desse elemento sai um fluxo na forma de vapor que retorna à coluna e outro na forma líquida que é retirado do sistema. Este último é denominado produto de fundo da coluna de destilação, composto pelas frações mais pesadas da mistura de carga ou alimentação.

Os componentes mais leves que chegam ao topo da coluna na forma de vapor são resfriados pelo condensador através de troca de calor, geralmente utilizando água fria ou ar, e armazenados no vaso de condensado. O líquido presente nesse reservatório dá origem a dois fluxos: uma parte do líquido é retirada do sistema como produto de topo da coluna, contendo os componentes mais leves da mistura de carga, e a outra parte retorna para a coluna. Este último é conhecido como refluxo e é de fundamental importância para a eficiência da destilação, aumentando sobremaneira o rendimento do processo.

No interior da coluna de destilação, os vapores originados pelo refrervador fluem através dos pratos ascendentemente, tornando-se mais ricos em componentes leves após entrarem em contato, em cada estágio, com o líquido que flui em direção ao fundo da coluna. Em contrapartida, o refluxo, em seu sentido descendente, torna-se, a cada estágio, mais rico em componentes pesados. De acordo com Lima (2001), esses fenômenos ocorrem devido ao equilíbrio líquido-vapor, como reflexo das diferentes temperaturas nos estágios existentes entre o topo e ao fundo da torre.

As colunas demetanizadora, deetanizadora, depropanizadora e debutanizadora são alguns exemplos de colunas de destilação fracionada que podem ser encontradas em unidades de processamento de gás natural. As UPGNs são sistemas complexos, onde suas estruturas variam de unidade para unidade dependendo das características do gás na-

tural e dos objetivos de produção específicos de cada unidade. A UPGN-II GMR, adotada como base neste trabalho, é constituída por uma coluna deetanizadora em série com uma coluna debutanizadora. A unidade contém ainda uma coluna depropanizadora que não faz parte da operação rotineira da UPGN, entrando em operação eventualmente, apenas quando é necessário corrigir o nível de propano no ciclo de refrigeração da UTPF. Por essa razão, será desconsiderada neste estudo. As duas colunas de interesse, colunas deetanizadora e debutanizadora, foram simuladas computacionalmente no *software* de processos químicos HYSYS® e serão detalhadas nas duas próximas seções.

Os modelos dinâmicos são bastante utilizados tanto na etapa de projeto, quanto durante o funcionamento efetivo das colunas de destilação. Eles têm provado que são ferramentas muito eficientes para uma variedade de estudos: avaliar alterações do processo e das estruturas de controle, ajuste de parâmetros de controladores, determinar o efeito dinâmico de distúrbios, explorar os procedimentos de inicialização e desativação do processo e otimizar a operação da planta. Geralmente, os modelos dinâmicos das colunas de destilação são de alta ordem e fortemente não lineares, devido ao elevado número de estágios e componentes que podem existir em uma coluna industrial. A simulação dinâmica desse tipo de sistema envolve integrações numéricas e uma grande quantidade de equações diferenciais não lineares resultantes do balanço de massa e energia existente em cada prato da coluna (Pullis, 2007).

As colunas de destilação a serem apresentadas são do tipo contínuas, pois o processo é alimentado continuamente. Nesse tipo de destilação, ao contrário da destilação em batelada, o processo está ativo todo o tempo, possuindo melhor rendimento (Araújo Jr., 2007).

2.3.2 Coluna deetanizadora

A coluna deetanizadora é o primeiro estágio de destilação do sistema simulado neste trabalho. Dessa coluna são esperados como produtos de topo e de fundo, respectivamente, o gás residual de qualidade industrial e o líquido de gás natural (LGN).

A Figura 2.2 apresenta o diagrama esquemático da coluna deetanizadora implementada, bem como os controladores PID e demais instrumentos presentes no processo simulado. Os rótulos, ou *tags*, estão definidos de acordo com a maneira como os instrumentos são identificados na planta real em Guamaré-RN. Deve-se destacar que a coluna deetanizadora possui mais de um ponto de alimentação: as linhas 10, 15, 27 e 28 fornecem ao processo um gás composto de hidrocarbonetos variados (C1+).

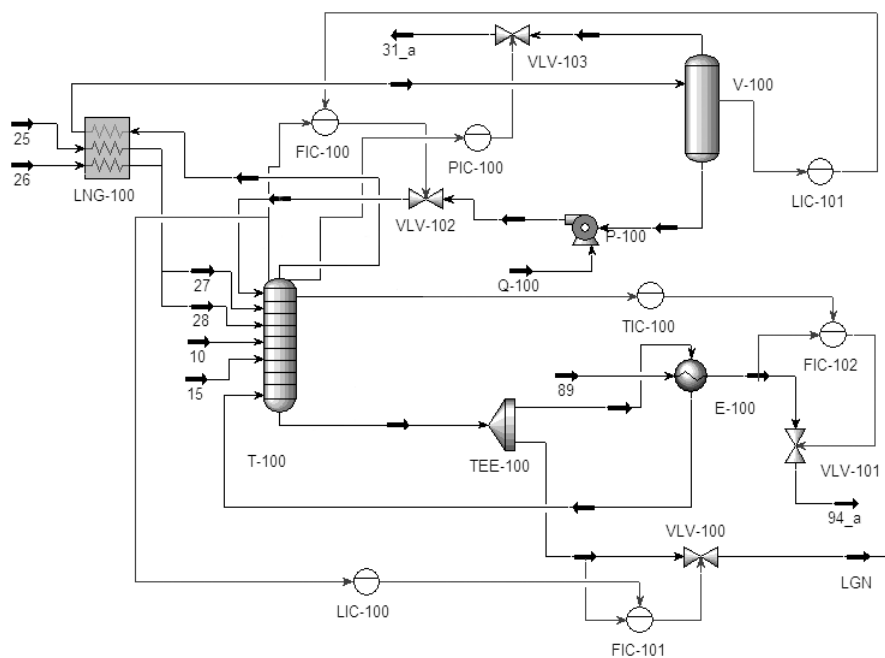


Figura 2.2: Coluna de destilação simulada.

No topo da coluna encontram-se, na forma de vapor, os componentes mais leves do gás de carga, formando o produto de topo. Este, após passar pelo trocador de calor LNG-100, é depositado, predominantemente, em sua forma líquida no vaso de condensado V-100. Parte do líquido presente no V-100 retorna à coluna. Essa vazão de refluxo é regulada pelo controlador em cascata formado pelos controladores de nível LIC-101 (mestre) e de vazão FIC-100 (escravo). De acordo com o valor de pressão registrado no topo da coluna, o controlador de pressão PIC-100 atua ajustando a abertura da válvula VLV-103, fato que determina a quantidade de gás residual liberado do vaso de condensado para ser comercializado ou utilizado em alguma etapa de produção da UPGN. O gás residual obtido como produto de topo da coluna de destilação é formado predominantemente por metano (C1) e etano (C2), contendo também traços de propano (C3).

Na Seção 2.3.3 será visto que o C3 é um dos principais componentes do GLP, produto economicamente importante em uma UPGN. Minimizar a perda de C3 no gás residual resulta em um aumento na concentração de C3 no LGN. Como consequência, o próximo estágio de destilação apresentará como produto um GLP mais rico em C3.

No fundo da coluna, parte dos componentes mais pesados do gás de carga, na forma líquida, são encaminhados para o aquecimento no reator E-100. A troca de calor realizada no E-100 é efetuada utilizando óleo térmico. A vazão desse óleo é regulada pela válvula VLV-101, cuja abertura é ajustada pelo controlador de vazão FIC-102, escravo do

controlador de temperatura TIC-100. O vapor resultante desse aquecimento retorna à coluna de destilação. A outra parte do produto de fundo da coluna, o LGN, é encaminhada para a coluna debutanizadora, próximo estágio de destilação. A vazão de LGN que flui para a próxima coluna depende do nível de líquido presente no fundo da coluna deetanizadora. Essa vazão é ajustada pelo controlador em cascata formado pelos controladores de nível LIC-100 (mestre) e de vazão FIC-101 (escravo). O LGN obtido é composto essencialmente por C3+ e pelo C2 que acabou não sendo vaporizado no processo de destilação efetuado pela coluna.

2.3.3 Coluna debutanizadora

Assim como na UPGN-II GMR, a coluna debutanizadora corresponde ao último estágio de destilação no sistema simulado utilizado neste trabalho. O GLP e o C5+ são, respectivamente, os produtos de topo e de fundo dessa coluna.

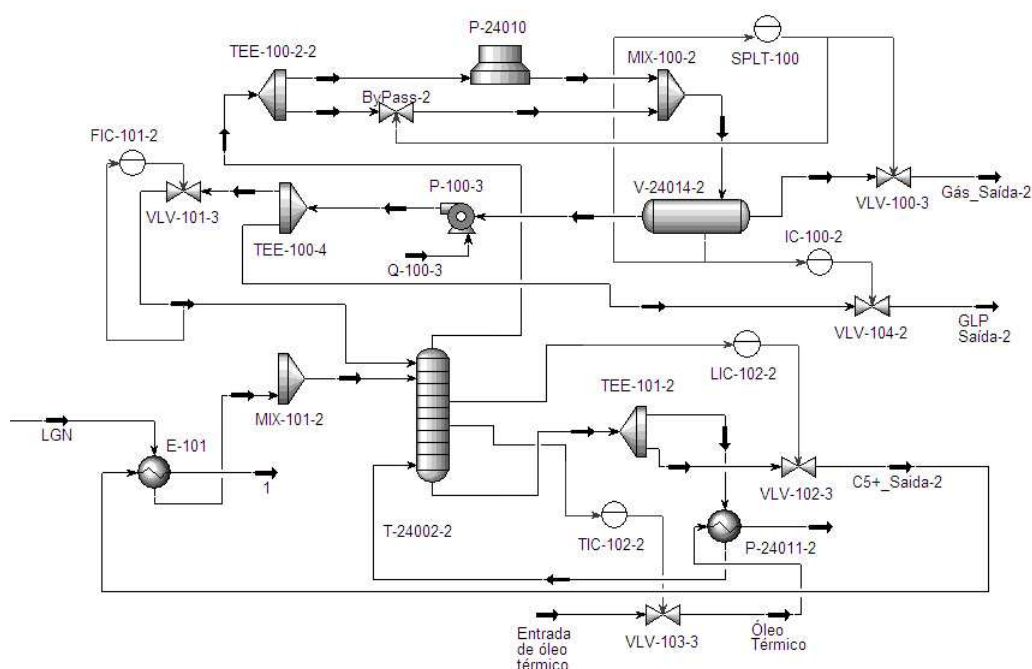


Figura 2.3: Coluna debutanizadora simulada.

A Figura 2.3 apresenta o diagrama esquemático da coluna debutanizadora, bem como os controladores PID e demais instrumentos presentes no processo simulado. Os rótulos foram definidos de acordo com a planta real em Guararé-RN. A alimentação da coluna debutanizadora é realizada pelo LGN obtido na etapa anterior.

No fundo da coluna, parte dos componentes mais pesados do LGN são encaminhados para o retervedor P-24011-2. A vazão do óleo térmico utilizado pelo P-24011-2 na troca de calor é regulada pela válvula VLV-103-3, cuja abertura é ajustada de acordo com a temperatura interna da coluna através do controlador TIC-102-2. O vapor, então obtido, retorna à coluna de destilação. A outra parte do produto de fundo é conhecida como gasolina natural, sendo o seu fluxo ajustado pelo controlador LIC-102-2. A gasolina natural é composta essencialmente por C5+, possuindo também pequena quantidade de butano (C4) que não foi vaporizado no processo de destilação efetuado pela coluna.

Na parte superior da coluna, o produto de topo é conduzido ao vaso de condensado V-24014-2 através de dois possíveis caminhos, podendo passar ou não pelo condensador a ar (*air-cooler*) P-24010. O produto que segue diretamente para o vaso de condensado, sem passar pelo *air-cooler*, depende da atuação do controlador de pressão em *split range* SPLT-100 sobre a válvula *ByPass*-2. Do vaso de condensado, parte do GLP obtido é extraído da planta através da linha de saída GLP-Saída-2, outra parte retorna à coluna de destilação. Essa vazão de refluxo é regulada pelo controlador de vazão FIC-101-2, o qual ajusta a abertura da válvula VLV-101-3. Caso a pressão interna no vaso de condensado se eleve demasiadamente, parte do GLP pode ser aliviado, como medida de segurança, para queima no *flare* através da linha de saída Gas_Saída-2. A vazão do GLP que sai para queima é regulada pela abertura da válvula de alívio VLV-100-3, ajustada pelo SPLT-100.

O GLP é constituído idealmente por C3 e C4, entretanto, apresenta em sua composição alguns contaminantes, como o pentano e o etano. A destilação que é realizada pela coluna debutanizadora tem como um de seus objetivos formar em seu topo um produto formado pelos componentes mais leves de sua carga. Porém, com o aquecimento da coluna, uma pequena parte dos componentes mais pesados, principalmente o pentano, evapora e contamina o GLP.

Em contrapartida, de acordo com Araújo Jr. (2007), se a coluna for resfriada em demasia, os produtos leves podem não ser totalmente evaporados, sendo depositados junto ao produto de fundo, superespecificando o GLP. Este acontecimento representaria uma perda econômica, uma vez que o valor de mercado do C5+ é geralmente menor que o valor do GLP.

O pentano presente na composição do GLP do processo simulado é formado pela soma das frações molares do i-pentano e n-pentano. Esses compostos apresentam a mesma tendência de variação em função das condições de operação. Além disso, para a carga aplicada ao processo neste trabalho, o i-pentano está presente no GLP em maior porcentagem que o n-pentano. O pentano estimado pelo sistema de inferência, aqui proposto, corresponde à soma das frações molares de i-pentano e n-pentano.

O etano é um composto bastante leve e devido a isso os traços desse elemento presentes no LGN evaporam totalmente devido ao aquecimento que ocorre na coluna debutanizadora. Como consequência natural, o etano presente na carga dessa coluna é completamente retirado do processo como elemento contaminante do GLP.

Para que o GLP não saia de suas especificações, as frações molares dos contaminantes citados devem ser mantidas entre pequenas faixas da composição total do GLP. Devido a isso, ter acesso às frações molares desses compostos com pequenos intervalos de medição é de grande importância para contribuir com o aumento da eficiência das estratégias de supervisão e de controle da qualidade do GLP em unidades de processamento de gás natural.

Capítulo 3

Fundamentos teóricos

Neste capítulo são descritos os princípios teóricos que estão envolvidos no desenvolvimento deste trabalho. Inicialmente são apresentados alguns dos principais conceitos das redes neurais artificiais. Após descrever a sua definição, são relatadas as características que tornam essas estruturas uma das alternativas mais utilizadas para o estudo e implementação de sistemas de inferência. É apresentada, em especial, a rede neural perceptron de múltiplas camadas, por ser essa a estrutura utilizada no sistema de inferência proposto.

Em seguida, a atenção volta-se para a identificação de sistemas dinâmicos. São apresentados os principais passos do procedimento de identificação utilizado pela modelagem do tipo caixa preta. Esse procedimento será aplicado para identificar as dinâmicas do processo em estudo que possibilitam a inferência das frações molares de propano no gás residual e de etano e pentano no GLP. Também é descrito o modelo neural de inferência adotado neste trabalho, relatando os problemas que surgem a partir dessa escolha.

No final do capítulo é feita uma breve introdução à análise de componentes principais, descrevendo de forma sucinta como essa técnica estatística é utilizada para a redução dimensional de dados. Através desse método, é possível realizar uma redução no número de variáveis secundárias utilizadas pelo sistema de inferência através de uma transformação de dados. Isso, consequentemente, permite a simplificação da configuração da rede neural a ser implementada.

3.1 Redes neurais artificiais (RNAs)

De acordo com Haykin (2001), as redes neurais artificiais são estruturas paralelas, maciçamente distribuídas, constituídas por unidades simples de processamento conhecidas como neurônios. As RNAs se assemelham ao cérebro humano devido a sua capacidade de adquirir conhecimento a partir do ambiente. Isso ocorre através de um processo de aprendizagem que ajusta a força das conexões, ou pesos sinápticos, existentes entre os

neurônios. Nessas conexões são armazenados os conhecimentos adquiridos pela rede.

As RNAs são utilizadas em diversos tipos de aplicações. Pode-se citar, como exemplos, a classificação de padrões, a filtragem de sinais, a análise de imagens e o controle e identificação de sistemas dinâmicos. Entre as propriedades citadas por Haykin (2001) que justificam a utilização de tais estruturas, destacam-se a sua característica intrínseca de não linearidade, as capacidades de generalização e adaptabilidade, a tolerância à falhas e a sua capacidade de aproximação universal.

Uma aplicação em potencial para a utilização das redes neurais é a identificação de sistemas dinâmicos. Muitos dos sistemas físicos reais são muito complexos, o que dificulta, e as vezes impossibilita, o desenvolvimento de modelos matemáticos que representem as suas dinâmicas satisfatoriamente. As redes neurais artificiais, através de seu processo de aprendizagem e de sua capacidade de aproximação universal, conseguem representar a função dinâmica correspondente ao sistema a ser identificado com relativa simplicidade (Linhares et al., 2008a).

A capacidade das redes neurais de poderem ser aplicadas na identificação de dinâmicas é de grande importância para este trabalho, uma vez que um sistema de inferência nada mais é do que um modelo capaz de reproduzir as relações dinâmicas entre variáveis secundárias e primárias de um processo.

Diversas são as arquiteturas de redes neurais existentes, tais como: redes de funções de base radial, redes de Kohonen, máquinas de vetor de suporte, entre outras. Neste trabalho, a arquitetura a ser utilizada é a perceptron de múltiplas camadas. A aplicação com sucesso dessa estrutura pode ser encontrada em diversos trabalhos realizados na área de inferência, como os de Bawazeer e Zilouchian (1997), Bo et al. (2003) e Fortuna et al. (2005). A Figura 3.1 apresenta um exemplo desse tipo de arquitetura.

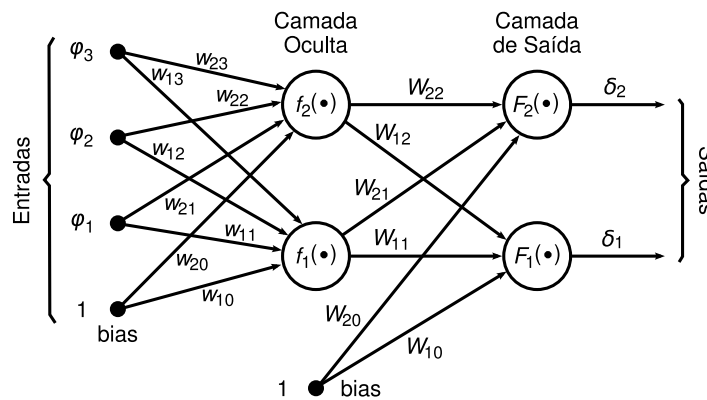


Figura 3.1: PMC totalmente conectada de duas camadas.

A arquitetura básica de uma rede PMC possui os seus neurônios dispostos em camadas, onde cada neurônio de uma camada recebe como entrada apenas as saídas de neurônios da camada imediatamente anterior ou das entradas da rede. Devido a essa configuração, essas redes neurais também são conhecidas como redes *feedforward* (Nørgaard et al., 2001).

Na Figura 3.1, a segunda camada é conhecida como camada de saída, pois fornece as saídas da rede neural. A primeira camada é conhecida como camada oculta, intermediária ou escondida, por estar, de certa forma, escondida entre as entradas externas da rede (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) e a camada de saída. A rede apresentada é totalmente conectada, pois todas as entradas e neurônios das camadas estão conectados com todos os neurônios da camada seguinte. A Equação 3.1 expressa matematicamente o funcionamento de uma rede neural PMC, onde δ_i é a saída i da rede.

$$\delta_i(t) = g_i[\phi, \theta] = F_i \left[\sum_{j=1}^{n_h} W_{i,j} f_j \left(\sum_{l=1}^{n_\phi} w_{j,l} \phi_l + w_{j,0} \right) + W_{i,0} \right] \quad (3.1)$$

O vetor de parâmetros θ contém todos os parâmetros ajustáveis da rede: pesos sinápticos e *biases* $\{w_{j,l}, W_{i,j}\}$. Nesse caso, o *bias* pode ser interpretado como um peso sendo aplicado à uma entrada fixa de valor unitário. O número de neurônios da camada escondida e o número de entradas da rede são, respectivamente, n_h e n_ϕ , enquanto F_i e f_j são as funções de ativação dos neurônios das camadas de saída e escondida. As funções de ativação mais comumente utilizadas são a linear, a sigmóide ou logística, e a tangente hiperbólica. Essas funções são dadas pelas Equações 3.2, 3.3 e 3.4, respectivamente.

$$f_l(x) = x \quad (3.2)$$

$$f_s(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3.3)$$

$$f_t(x) = \tanh(x) = \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}} \quad (3.4)$$

Cybenko (1989) demonstra que qualquer função contínua pode ser aproximada por uma rede PMC contendo uma camada oculta com neurônios de funções de ativação sigmoidais, ou tangentes hiperbólicas, e uma camada de saída formada por neurônios com funções de ativação lineares. Entretanto, em seu trabalho, não é explicado quantos neurônios devem ser incluídos nessa única camada oculta. Pelo resultado citado, é normal

concluir que não existe a necessidade de se utilizar mais de uma camada oculta e/ou uma mistura de diferentes tipos de funções de ativação. Entretanto, a utilização de estruturas mais sofisticadas pode ser mais adequada em casos onde a complexidade de mapeamento é elevada.

A escolha quanto aos números de camadas e de neurônios que devem compor uma RNA pode ser vista como uma área de estudo bastante promissora, já que ainda não foram obtidos resultados muito conclusivos quanto a isso.

3.1.1 Processo de aprendizagem

Uma das principais propriedades das redes neurais, provavelmente a mais importante, é a sua habilidade em aprender a partir de seu ambiente e de melhorar o seu desempenho através da aprendizagem. Pode-se definir o aprendizado ou treinamento de uma rede neural como o processo pelo qual os parâmetros adaptáveis (pesos sinápticos e *biases*) da rede são ajustados. Existem diversos métodos de aprendizado de redes neurais, tais como as aprendizagens: hebbiana, competitiva, por reforço, supervisionada e não-supervisionada.

O principal método de aprendizado utilizado em redes PMCs é o supervisionado. Esse método se caracteriza pela disponibilidade de conhecimento ou informação sobre um sistema ou ambiente na forma de padrões entrada-saída (Haykin, 2001). Para uma dada entrada, a saída da rede neural é comparada com a saída correspondente do conjunto de treinamento. Dessa forma, os parâmetros livres da rede podem ser ajustados tendo como base o sinal de erro e os padrões de treinamento. Os ajustes são feitos de forma iterativa, prosseguindo até que o erro seja pequeno o suficiente. A Figura 3.2 apresenta o esquema de funcionamento do aprendizado supervisionado.

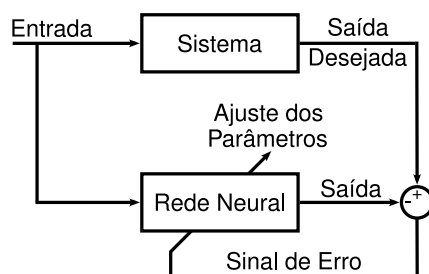


Figura 3.2: Esquema de aprendizagem supervisionada.

Um conjunto preestabelecido de regras bem definidas para a solução de um problema de aprendizagem é denominado algoritmo de aprendizagem ou de treinamento. Não existe

um algoritmo de treinamento único para o projeto de redes neurais. Ao invés disso, há uma grande variedade de algoritmos que se diferenciam, basicamente, pela forma como é formulado o ajuste dos parâmetros livres da rede neural. O algoritmo da retropropagação do erro (*error backpropagation*) é a mais usual técnica de aprendizado supervisionado utilizada com as redes perceptron de múltiplas camadas. Um estudo detalhado sobre esse algoritmo pode ser encontrado em Haykin (2001).

3.1.2 Projetos utilizando redes neurais

Um conjunto de passos básicos deve ser seguido quando se deseja utilizar as redes PMC para projetar um sistema capaz de solucionar um determinado problema, são eles: coleta de dados, configuração da rede, treinamento, validação e aplicação.

No primeiro momento, são coletados dados relativos ao problema a ser resolvido. O objetivo é formar os conjuntos de dados de treinamento e validação, que serão utilizados em passos seguintes do projeto. Os dados coletados devem ser significativos e cobrir amplamente o domínio do problema. Além disso, pode ser necessário pré-processar estes dados, através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato para torná-los mais apropriados à sua utilização na rede (Tatibana e Kaetsu, 2008).

A definição da configuração ideal de uma rede neural é uma tarefa bastante difícil. Não existem regras precisas para a escolha do número de camadas ocultas e o número de neurônios por camadas. Sabe-se apenas que uma rede com mais de duas camadas ocultas não introduz grandes vantagens em termos de desempenho e apresenta um tempo de treinamento muito grande (Lima, 2001). Geralmente, essas escolhas são realizadas de forma empírica, na base da tentativa e erro, ou seja, através de comparações dos resultados obtidos por cada uma das configurações testadas.

Na fase de treinamento da rede neural, os parâmetros livres da rede são ajustados visando a transferir os conhecimentos presentes no conjunto de dados de treinamento à rede neural. O processo é realizado pelo algoritmo de treinamento escolhido. Nessa etapa algumas escolhas devem ser feitas, tais como o modo de treinamento (por lote ou sequencial), a inicialização dos pesos sinápticos e os critérios de parada. O treinamento deve ser interrompido quando a taxa de erro for suficientemente pequena e a rede neural apresentar uma boa capacidade de generalização (Tatibana e Kaetsu, 2008).

Na etapa de validação, o conjunto de dados de validação é apresentado à rede neural já treinada. O objetivo é verificar o funcionamento da rede com valores de entrada desconhecidos. Dessa forma, é possível ter indicativas do desempenho da rede quando for executar a função para a qual foi projetada. Caso a rede treinada atenda às expectativas

do(s) projetista(s) na etapa de validação, ela é então integrada ao sistema no ambiente operacional da aplicação, fornecendo, dessa forma, a solução para o problema proposto.

3.2 Identificação de sistemas dinâmicos

Segundo Nørgaard et al. (2001), identificar um sistema é a tarefa de inferir um modelo que represente a sua dinâmica a partir de uma série de medições de suas variáveis. A simulação, predição, detecção de falhas e o desenvolvimento de sistemas de inferência e controle são aplicações típicas da identificação de sistemas dinâmicos.

Há varias formas de classificar as técnicas de modelagem. Levando-se em conta o nível de conhecimento do sistema que se deseja identificar, pode-se agrupar os métodos em três grupos: modelagem caixa branca, modelagem caixa preta e modelagem caixa cinza (Aguirre, 2004).

Se a identificação baseia-se exclusivamente em dados obtidos do sistema, assumindo nenhum ou pouco conhecimento sobre os princípios físicos do sistema, o processo de identificação é conhecido como modelagem caixa preta. Em contrapartida, o termo modelagem caixa branca é aplicado quando é realizada uma modelagem puramente física do sistema. Segundo Aguirre (2004), a modelagem caixa cinza é um conjunto de técnicas que poderia ser classificado como estando entre a modelagem caixa branca e a caixa preta. As técnicas desse grupo caracterizam-se por usar informação auxiliar, que não se encontra no conjunto de dados utilizados durante a identificação. O tipo de informação auxiliar e a forma com que ela é usada varia muito entre as diversas técnicas disponíveis. O desenvolvimento de técnicas caixa cinza é um dos grandes desafios atuais em identificação de sistemas.

Neste trabalho é utilizada a modelagem caixa preta. São utilizados dados experimentais coletados do sistema simulado formado pelas colunas de destilação deetanizadora e debutanizadora com o objetivo de obter um modelo neural capaz de representar as dinâmicas existentes entre as variáveis primárias e secundárias do sistema.

O procedimento básico para a realização da identificação do tipo caixa preta assemelha-se bastante aos passos a serem seguidos no desenvolvimento de projetos utilizando redes neurais. As características das redes neurais e essa semelhança fazem das RNAs uma das técnicas mais utilizadas nesse tipo de identificação.

Segundo Fortuna et al. (2007b), o primeiro passo em qualquer processo de identificação de modelos dinâmicos é a realização de uma análise crítica dos dados disponíveis das variáveis do processo. Dessa forma, por exemplo, é possível obter informações importantes que auxiliem no projeto de sensores virtuais, permitindo tanto selecionar as

variáveis secundárias candidatas a serem utilizadas pelo sistema de inferência, quanto identificar eventos que forneçam informações importantes sobre a dinâmica do processo. Essa tarefa exige a cooperação do projetista do modelo e dos especialistas ou operadores do processo.

A Figura 3.3 ilustra, através de diagrama, o procedimento básico da modelagem do tipo caixa preta. Na etapa de coleta de dados são realizadas intervenções no sistema com o objetivo de obter conjuntos de dados que descrevam o comportamento do sistema dentro de sua amplitude de operação. A ideia consiste em variar os sinais de entrada do sistema e observar a influência dessa variação em suas saídas. Os conjuntos de dados obtidos serão posteriormente utilizados para inferir o modelo do sistema. Em muitos casos, para intervir no processo e coletar os dados necessários da identificação, são aplicados ao sistema sinais de entrada ou de excitação ricos em frequências. Os sinais PRS (*Pseudo Random Signal*) e PRBS (*Pseudo Random Binary Signal*) são muito utilizados na prática, por possuírem essa característica.

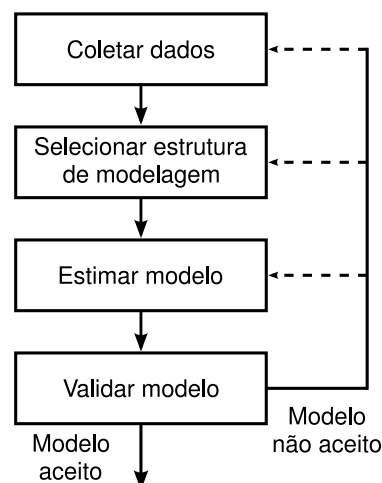


Figura 3.3: Procedimento básico de identificação caixa preta.

Alguns cuidados importantes devem ser levados em consideração na coleta de dados, principalmente quando estamos tratando com processos reais. Geralmente, as variáveis de um processo possuem diferentes magnitudes, dependendo das unidades de medida adotadas e da natureza do processo. Isso pode fazer com que as variáveis de maiores magnitudes tornem-se dominantes sobre as variáveis de menores magnitudes durante o processo de identificação. Portanto, nesses casos, faz-se necessária a normalização dos dados coletados. De acordo com Fortuna et al. (2007b), as normalizações *min-max* e *z-score* são os métodos mais comumente utilizados.

Os dados coletados do processo também podem conter algumas amostras que demonstrem ser inconsistentes em relação às características estatísticas, bem como em relação às características dinâmicas, da maioria dos dados obtidos. Essas amostras são denominadas *outliers*. Segundo Keller e Warrack (2003), um *outlier* pode ter como causas a transposição de dígitos no momento de gravação da medição, a leitura incorreta de um instrumento de medição, ou ainda devido ao defeito físico de algum equipamento. A detecção de *outliers* é muito importante para qualquer análise preliminar dos conjuntos de dados, uma vez que essas amostras podem influenciar de forma indesejável na qualidade do modelo que se deseja encontrar. Além disso, em sistemas reais, deve-se ter o cuidado de procurar remover ruídos de alta frequência, *offsets* e efeitos sazonais através, por exemplo, da filtragem digital dos dados.

Diversas são as estruturas de modelagem existentes, cada uma com as suas vantagens e desvantagens em relação a determinados tipos de problemas. De acordo com Nørgaard et al. (2001), de uma forma geral, o problema de seleção dessas estruturas pode ser dividido em duas partes:

1. Selecionar uma “família” de estruturas de modelagem apropriada para descrever o sistema, por exemplo, estruturas de modelos lineares, redes perceptron de múltiplas camadas, redes de funções de base radial, *wavelets*, etc.
2. Selecionar um subconjunto da família selecionada de estruturas de modelagem.

Após selecionar a estrutura de modelagem, o próximo passo é selecionar um modelo específico dessa estrutura que possa melhor representar o sistema de acordo com algum critério, como o erro médio quadrático (EMQ). Esse processo é conhecido na literatura estatística como estimação. Entretanto, esse mesmo processo quando envolve modelos neurais é usualmente chamado de treinamento ou aprendizado. É nessa etapa que são utilizados os conjuntos de dados obtidos na etapa inicial do processo de identificação. Através dos dados experimentais e do algoritmo de treinamento, uma rede neural tem os seus parâmetros livres ajustados de forma a melhor representar a dinâmica do sistema a ser identificado.

Depois de o modelo ter sido estimado ou treinado, ele deve ser avaliado com o objetivo de analisar a sua capacidade de representar o sistema em estudo. Se o modelo satisfazer os requisitos do projeto, ele é aceito e estará pronto para ser utilizado para os fins a que foi desenvolvido. Em caso contrário, deve-se retornar para alguma das etapas anteriores buscando aprimorar o modelo.

3.2.1 Modelos neurais de identificação

A realização de inferência utilizando RNAs pode ser vista como um problema de identificação, uma vez que a rede neural treinada deve ser capaz de representar com eficiência a dinâmica existente entre as variáveis secundárias e primárias do processo em estudo. Uma das principais vantagens de se utilizar estruturas neurais para a identificação de sistemas é a sua capacidade de representar, ou aprender, características não lineares desses sistemas.

Segundo Aguirre (2004), os sistemas dinâmicos encontrados na prática são, em última análise, não lineares. Apesar disso, vê-se que em alguns casos as aproximações lineares são suficientes em aplicações práticas. Entretanto, em algumas situações, os modelos lineares não serão satisfatórios e representações não lineares deverão ser usadas. A opção pelos modelos não lineares, entretanto, traz consigo um inevitável aumento na complexidade dos algoritmos a serem utilizados.

Em face à escolha de que tipo de modelo usar, se lineares ou não lineares, é importante considerar o seguinte: ao contrário do que possa parecer, melhorar a exatidão dos modelos não é a principal motivação para se usar modelos não lineares. De fato, há razões mais fortes para, em uma dada aplicação, optar por modelos não lineares, como por exemplo o fato dos modelos não lineares produzirem certos regimes dinâmicos que modelos lineares não conseguem representar (Aguirre, 2004).

As estruturas de modelagem baseadas em redes neurais, apropriadas para identificação de sistemas não lineares, são generalizações das estruturas de modelagem linear. Elas são caracterizadas pelo seu vetor de regressão, ou seja, pelo vetor que contém os valores passados das variáveis usadas para se estimar a saída do sistema. Algumas estruturas de modelagem linear são: FIR (*Finite Impulse Response*), ARX (*AutoRegressive, eXogenous input*), ARMAX (*AutoRegressive, Moving Average, eXogenous input*), OE (*Output Error*) e SSIF (*State Space Innovations Form*). Dependendo da escolha do vetor de regressão, diferentes estruturas de modelo neural emergem. Se o vetor de regressão for selecionado de forma similar a utilizada pelo modelo ARX, a estrutura de modelagem neural é chamada NNARX (*Neural Network ARX*). Do mesmo modo, temos as estruturas NNFIR, NNARMAX, NNOE e NNSSIF (Lucena, 2005).

As estruturas neurais citadas são muito bem descritas por Nørgaard et al. (2001), apresentando as vantagens e desvantagens de cada uma delas. Pode-se descrever resumidamente cada uma de suas estruturas de acordo com seus vetores de regressão. No modelo NNFIR, o vetor de regressão é formado apenas por medições passadas das variáveis de entrada do processo. No modelo NNARX, é acrescentado ao vetor de regressão valo-

res de medições passadas das variáveis de saída do processo. Segundo Nørgaard et al. (2001), esses dois modelos são sempre estáveis, pois representam puramente relações algébricas entre as variáveis do modelo. O mesmo não pode ser dito das demais estruturas de modelagem neurais.

A estrutura de modelagem NNARMAX adiciona ao vetor de regressão do modelo NNARX, informações sobre o erro de predição do modelo. Portanto, exige uma comparação entre o valor estimado e o valor real da variável de saída do modelo. O modelo NNSSIF utiliza uma abordagem um pouco diferente dos demais, adicionando ao modelo informações relativas ao espaço de estados do sistema. Portanto, esse modelo é de potencial interesse no projeto de controladores em espaço de estados. Um outro detalhe a se destacar é que, de acordo com Sørensen (1993), o modelo NNSSIF pode ser considerado equivalente a um filtro de Kalman estendido para sistemas não lineares.

Anteriormente, neste trabalho, foram apontadas as dificuldades de medição das variáveis primárias da UPGN, que se pretende estimar. As medições dessas variáveis não estão sempre disponíveis, pois apresentam um longo intervalo de medição. Isso dificulta, por exemplo, que essas variáveis sejam estimadas em intervalos menores utilizando a estrutura NNARMAX, uma vez que essa necessita realizar comparações entre as variáveis estimadas pelo modelo e os seus valores reais para a obtenção do valor de erro utilizado por essa estrutura. Também não é objetivo deste projeto trabalhar com a noção de espaço de estados, descartando, assim, a estrutura NNSSIF.

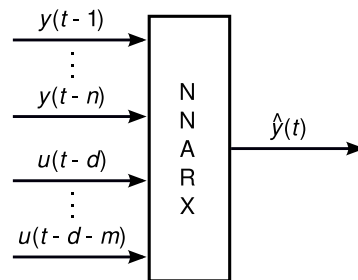


Figura 3.4: Estrutura do modelo NNARX.

O modelo de identificação adotado como base para ser utilizado no sistema de inferência proposto por este trabalho é o modelo NNARX. A Figura 3.4 apresenta o diagrama dessa estrutura, onde $\hat{y}$ é a saída estimada da planta, d é o atraso de transporte da planta, n é a ordem da saída da planta, m é a ordem da entrada da planta, y é a saída da planta e u a entrada da planta. Pode-se notar a aplicação de regressores nesse modelo, fazendo com que a saída presente da rede neural esteja relacionada com valores passados de en-

trada e saída do sistema a ser identificado. A utilização de regressores é de fundamental importância, uma vez que a estrutura é projetada com o intuito de identificar a dinâmica existente em um sistema físico.

Devido aos intervalos de medição das variáveis primárias do sistema de inferência proposto, mantendo-se a estrutura NNARX original, o sistema de inferência não seria capaz de reduzir o período de medição dos cromatógrafos, uma vez que esse modelo necessita das medições reais das variáveis primárias. Para contornar esse empecilho, são utilizados neste trabalho, como parte das entradas da RNA, os valores passados estimados pelo próprio modelo do sistema de inferência, criando assim uma realimentação a partir das saídas estimadas. O modelo NNARX alterado dessa maneira, tendo como parte de sua entrada variáveis estimadas, é conhecido como NNOE. A Figura 3.5 apresenta o diagrama esquemático dessa estrutura de modelagem neural.

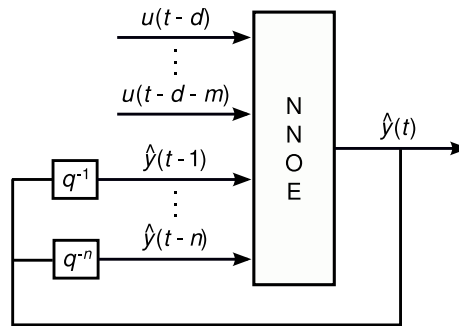


Figura 3.5: Estrutura do modelo NNOE.

Nessa estrutura, a expressão matemática do modelo não linear pode ser descrita pela Equação 3.5:

$$\hat{y}(t) = f(\hat{y}(t-1), \dots, \hat{y}(t-n), u(t-d), \dots, u(t-d-m)) \quad (3.5)$$

onde $\hat{y}$ é a saída estimada da planta, d é o atraso de transporte da planta, n é a ordem da saída da planta, m é a ordem da entrada da planta, $f(\cdot)$ é uma função não linear mapeada pela rede neural e u a entrada da planta.

3.3 Análise de componentes principais (ACP)

A análise de componentes principais, segundo Jolliffe (2002), é provavelmente a mais antiga e conhecida técnica de análise de dados multivariáveis, tendo sido introduzida por

Pearson (1901) e desenvolvida independentemente por Hotelling (1933). Entretanto, somente com o advento dos computadores essa técnica começou a ser amplamente utilizada, possuindo uma grande variedade de aplicações, tais como: compressão de dados, processamento de imagens, reconhecimento de padrões, predição de séries temporais, entre outras.

Segundo Kano et al. (2001), as técnicas de ACP e mínimos quadrados parciais (MQP) vem sendo largamente utilizadas na modelagem, monitoramento e controle de processos quimiométricos, uma vez que podem lidar, sem problemas, com variáveis de entrada correlacionadas.

A ideia principal da análise de componentes principais é reduzir a dimensionalidade de um conjunto de dados formado por um grande número de variáveis interrelacionadas, retendo o tanto quanto possível das informações presentes no conjunto de dados. A redução é obtida transformando as variáveis originais em um novo conjunto de variáveis, componentes principais (CPs), as quais são descorrelacionadas e ordenadas de tal forma que as primeiras retenham a maior parte das variações presentes em todas as variáveis originais (Jolliffe, 2002).

De acordo com Mingoti (2005), a análise de componentes principais tem por objetivo mapear um sistema composto por p variáveis em k combinações lineares ($k < p$) não correlacionadas, chamadas de componentes principais. Através da realização desse mapeamento, o sistema de variabilidade do vetor aleatório composto das p variáveis originais pode ser aproximado pelo sistema de variabilidade do vetor aleatório que contém as k componentes principais.

As k componentes principais que representarão o sistema podem ser obtidas através da matriz de covariância ou de correlação dos dados obtidos do sistema. Quando extraídas a partir da matriz de covariância, as componentes principais são mais influenciadas pelas variáveis de maior variância, sendo, portanto, de pouca utilidade nos casos em que existe uma discrepância muito acentuada entre essas variâncias. Essa discrepância é geralmente causada pelas diferentes unidades de medidas das variáveis do processo. Nos casos em que esse problema ocorre, ele pode ser amenizado utilizando a matriz de correlação. No entanto, o procedimento para obter as CPs é semelhante em ambos os casos.

Em geral, quando as componentes principais são extraídas da matriz de correlação, necessita-se de um número maior de componentes para se alcançar o objetivo desejado para uma aplicação específica, em comparação com o número requerido quando as componentes são extraídas da matriz de covariância.

3.3.1 Componentes principais

Seja $\mathbf{X} = (X_1, X_2, \dots, X_p)'$ um vetor aleatório com vetor de médias expresso por $\mu = (\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p)'$ e matriz de covariância $\Sigma_{p \times p}$, com respectivos autovetores normalizados $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_p$, isto é, os autovetores $\mathbf{e}_i$ satisfazem as seguintes condições:

1. $\mathbf{e}_i' \mathbf{e}_j = 0$ para todo $i \neq j$
2. $\mathbf{e}_i' \mathbf{e}_i = 1$ para todo $i = 1, 2, \dots, p$
3. $\Sigma_{p \times p} \mathbf{e}_i = \lambda_i \mathbf{e}_i$ para todo $i = 1, 2, \dots, p$

sendo cada autovetor $\mathbf{e}_i$ denotado por $\mathbf{e}_i = (e_{i1}, e_{i2}, \dots, e_{ip})'$ e λ_i seu respectivo autovalor. Considere o vetor aleatório $\mathbf{Y} = \mathbf{O}'\mathbf{X}$, em que $\mathbf{O}$ é a matriz ortogonal de ordem p , constituída dos autovetores normalizados da matriz $\Sigma_{p \times p}$, isto é,

$$\mathbf{O}_{p \times p} = \begin{bmatrix} e_{11} & e_{21} & \dots & e_{p1} \\ e_{12} & e_{22} & \dots & e_{p2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ e_{1p} & e_{2p} & \dots & e_{pp} \end{bmatrix} \quad (3.6)$$

Portanto, pode-se afirmar que o vetor $\mathbf{Y}$ é composto por p combinações lineares das variáveis aleatórias do vetor $\mathbf{X}$, que possui vetor de médias $\mu_y = \mathbf{O}'\mu$ e matriz de covariância $\Lambda_{p \times p}$, tal que,

$$\Lambda_{p \times p} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda_2 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & \lambda_p \end{bmatrix} \quad (3.7)$$

Dessa forma, as variáveis aleatórias que compõem $\mathbf{Y}$ são não correlacionadas entre si. Assim, surge a ideia de se utilizar combinações lineares em $\mathbf{Y}$, como uma forma alternativa de se representar o vetor $\mathbf{X}$, reduzindo-se o espaço de variáveis.

As k combinações lineares (componentes principais) escolhidas para representar o vetor $\mathbf{X}$ estão diretamente relacionadas com a variância total do sistema e são escolhidas de acordo com os autovalores $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$.

Na prática, a matriz $\Sigma_{p \times p}$ é desconhecida e precisa ser estimada através dos dados amostrais coletados. Em geral, a matriz $\Sigma_{p \times p}$ é estimada pela matriz de covariância ou correlação amostral $\mathbf{S}_{p \times p}$. Considerando então $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_p$ como sendo os autovalores

da matriz $S_{p \times p}$, e $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \dots, \hat{\mathbf{e}}_p$, os respectivos autovetores normalizados, a j -ésima componente principal amostral estimada é definida por:

$$\hat{\mathbf{Y}}_j = \hat{\mathbf{e}}_j' X = \hat{e}_{j1} X_1 + \hat{e}_{j2} X_2 + \dots + \hat{e}_{jp} X_p \quad (3.8)$$

com $j = 1, 2, \dots, p$, sendo a variância total da j -ésima componente principal amostral dada por:

$$l_j = \frac{\hat{\lambda}_j}{\sum_{i=1}^p \hat{\lambda}_i} \quad (3.9)$$

3.3.2 Seleção das componentes principais

Quando se tem como objetivo a redução dimensional, sumarizando a informação das p variáveis originais em k componentes principais, ($k < p$), é necessário adotar algum critério de escolha para selecionar o número de componentes que serão mantidas no sistema.

Segundo Jolliffe (2002), muitas das regras de seleção do número k de componentes principais a serem retidas não são rigorosamente exatas. Esse fato justifica-se por elas serem intuitivamente plausíveis e por funcionarem na prática. Devido a esta característica da maioria das regras de seleção, é necessário, geralmente, um julgamento adicional do projetista quanto ao melhor número de componentes a serem utilizadas na aplicação em desenvolvimento.

Um critério bastante utilizado consiste em selecionar um número de componentes k que somadas representem uma porcentagem γ da variância total do problema (Mingoti, 2005). Dessa forma, busca-se o menor valor inteiro de k tal que:

$$\frac{\sum_{i=1}^k \hat{\lambda}_i}{\sum_{j=1}^p \hat{\lambda}_j} \geq \gamma \quad (3.10)$$

De acordo com Jolliffe (2002), γ corresponde a um ponto de corte, sendo usualmente selecionado de uma região compreendida entre 70% e 95%, de acordo com as exigências da aplicação. De uma forma geral, o melhor valor para γ irá tornar-se menor, quanto maior for o número de p , ou do número de observações da aplicação em estudo.

Uma outra regra disponível para a seleção das componentes principais foi discutida e nomeada por Catell (1966) como gráfico *scree*. A ideia de Catell consiste em plotar a variância total de cada componente principal, ou dos autovalores correspondentes de cada componente principal, e observar o ponto no gráfico *scree* em que se inicia uma linha reta, não precisamente horizontal. O primeiro ponto dessa linha é então escolhido para ser a última componente principal a ser retida. A formulação de Catell, onde procura-se por um ponto em que $l_{j-1} - l_j$ torna-se aproximadamente constante, é menos subjetiva que o método apresentado anteriormente, entretanto, ainda requer um certo grau de julgamento do projetista.

A Tabela 3.1 apresenta resultados obtidos a partir da aplicação da análise de componentes principais. Esses resultados, utilizados aqui como exemplo, foram retirados do trabalho de Warne et al. (2004a), apenas com o intuito de ilustrar a utilização do gráfico *scree*. Inicialmente, nota-se que os autovalores estão ordenados de maneira decrescente, de acordo com o exigido pela técnica ACP.

Tabela 3.1: Exemplo de resultados de análise de componentes principais.

CP No.	Autovalor	Variância (%)	Variância total (%)
1	8,2970	75,431	75,431
2	1,9350	17,591	93,022
3	0,3490	3,181	96,203
4	0,2160	1,963	98,167
5	0,0930	0,843	99,010
6	0,0570	0,523	99,533
7	0,0270	0,253	99,786
8	0,0110	0,096	99,883
9	0,0070	0,063	99,946
10	0,0050	0,049	99,996
11	0,0004	0,044	100,000

Através das informações listadas, pode-se plotar o gráfico *scree* tendo no eixo das abscissas o número de componentes e no das ordenadas os autovalores. A Figura 3.6 apresenta o gráfico *scree* correspondente à Tabela 3.1. Após observar rapidamente o gráfico, nota-se que a partir da quarta componente principal tem-se uma linha quase horizontal.

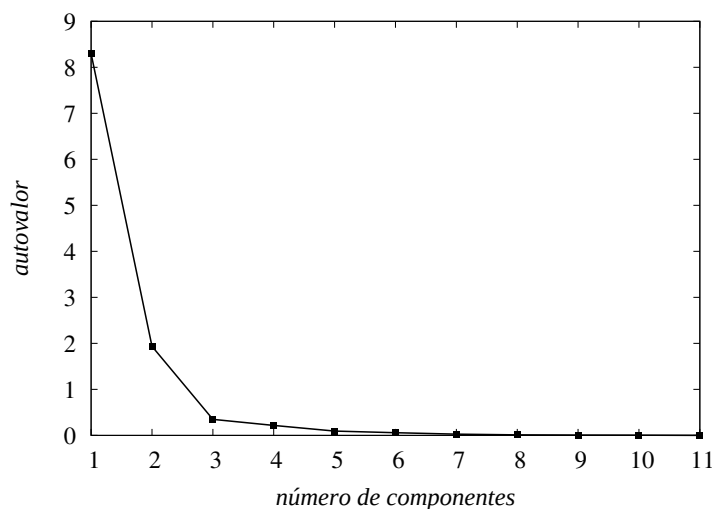


Figura 3.6: Gráfico scree do exemplo de ACP.

A Tabela 3.2 apresenta somente as seis primeiras componentes principais. Os demais dados relativos às variâncias dessas CPs demonstram que após quatro CPs, $(l_{k-1} - l_k)$ torna-se praticamente constante para os valores subsequentes de k . Dessa forma, a seleção das quatro primeiras componentes principais é uma escolha adequada de acordo com a formulação de Catell.

Tabela 3.2: Análise através da formulação de Catell.

CP No. k	1	2	3	4	5	6
Autovalor $\hat{\lambda}_k$	8,297	1,935	0,349	0,216	0,093	0,057
l_k	75,431	93,022	96,203	98,167	99,010	99,533
$l_{k-1} - l_k$	6,362	1,583	0,133	0,123	0,036	0,030

Ainda tendo como base as informações apresentadas pela Tabela 3.2, se for utilizada a metodologia do ponto de corte, sendo $\gamma = 80\%$ e $\gamma = 95\%$, o número de componentes principais selecionadas é de, respectivamente, dois (variância total de 93,022) e três (variância total de 96,203).

Em Warne et al. (2004a), a análise de componentes principais é utilizada para o desenvolvimento de um sistema de inferência, também composto por uma rede neural. Nesse trabalho, ele descreve um outro critério utilizando uma abordagem similar à validação cruzada. O número de termos utilizados para inferir a variável primária do sistema corresponde ao número k de CPs, o qual é sucessivamente escolhido e testado no sistema de inferência 1 ($k = 1$), no sistema de inferência 2 ($k = 2$), ..., e assim por diante, até que

a estimativa obtida não apresente melhora significativa com a adição de mais uma componente principal. O número de CPs selecionado corresponde, então, ao menor número necessário para uma predição de boa qualidade.

Capítulo 4

Sistema de inferência proposto

Inúmeros são os processos das indústrias química e petroquímica onde as variáveis primárias associadas com a qualidade de seus produtos são de difícil mensuração e/ou apresentam longos intervalos de medição. Em processos de destilação, essas variáveis correspondem às composições químicas de seus produtos, geralmente medidas através de análise em laboratório ou por cromatógrafos a gás. Estes últimos são geralmente caros, de difícil manutenção e calibração, e introduzem significativos atrasos de medição. Em seu trabalho de dissertação, por exemplo, Lima (2001) utilizou medições da fração molar de pentano no GLP de um cromatógrafo de linha a cada quatorze minutos. Quando um único cromatógrafo de linha é utilizado para medir a composição de mais de uma linha de produção, esse intervalo de medição é ainda mais elevado, impossibilitando a elaboração de estratégias de controle mais eficientes. Uma alternativa bastante utilizada para tratar esse problema é inferir as variáveis primárias do processo a partir de variáveis secundárias de fácil medição.

Neste capítulo é apresentado o sistema de inferência proposto neste trabalho. Serão descritos os três módulos que o compõe, são eles: módulo ACP, módulo RNA e módulo de correção. O objetivo do sistema é estimar, a partir de variáveis secundárias, as frações molares de C3 no gás residual e de C2 e C5 no GLP em uma UPGN simulada, utilizando redes neurais PMC em conjunto com a técnica de análise de componentes principais. O sistema é projetado para estimar as variáveis citadas de minuto em minuto, tempo considerado suficiente para a implementação de controladores inferenciais eficientes. Espera-se que o sistema de inferência projetado seja capaz de operar satisfatoriamente por tempo suficiente para que as medições dos cromatógrafos em linha estejam disponíveis para a realização da correção dos valores inferidos pelo sistema por meio do módulo de correção.

4.1 Módulo ACP

Um dos pontos principais do projeto de um sistema de inferência é a seleção das variáveis secundárias que serão utilizadas para estimar as variáveis primárias do processo. O número empregado dessas variáveis irá influenciar na qualidade da inferência, assim como no tamanho e complexidade do sistema projetado. Visando à implementação de sensores virtuais de menor complexidade e de bom desempenho, diversas técnicas estatísticas vêm sendo desenvolvidas e utilizadas para identificar um subconjunto de variáveis secundárias a partir do conjunto original dessas variáveis. Dessa forma, apenas as variáveis presentes nesse subconjunto são utilizadas no procedimento de inferência. Em alguns casos, essas variáveis podem ser parcialmente selecionadas por meio do conhecimento de profissionais que operam diretamente com o processo. Em sistemas aplicados às colunas de destilação, é bastante comum selecionar uma certa quantidade de medições de temperaturas de diferentes pratos perfurados, vazão de refluxo, pressão de coluna e temperaturas do refeedor e condensador.

Tabela 4.1: Variáveis secundárias do processo.

p	Variável Secundária (PV_p)	Controlador	Coluna de Destilação
1	Pressão de topo	PIC-100	Deetanizadora
2	Vazão de refluxo	FIC-100	Deetanizadora
3	Temperatura do estágio 40	TIC-100	Deetanizadora
4	Vazão de LGN	FIC-101	Deetanizadora
5	Temperatura do estágio 16	TIC-102-2	Debutanizadora
6	Volume líquido do estágio 28	LIC-102-2	Debutanizadora
7	Vazão de refluxo	FIC-101-2	Debutanizadora
8	Nível do condensado	LIC-100-2	Debutanizadora

Neste trabalho, o sistema simulado apresenta em sua instrumentação poucos sensores de temperatura. Isso decorre do fato da simulação implementada procurar manter as características reais da UPGN-II GMR. Apesar do *software* HYSYS[®] fornecer todo o perfil de temperatura das colunas deetanizadora e debutanizadora, apenas serão levadas em consideração os valores de temperatura que podem ser obtidos através de sensores físicos reais presentes na planta. O objetivo é que no final do trabalho seja encontrado um sistema de inferência eficiente sem que haja a necessidade de instalar novos instrumentos na planta. Analisando as instrumentações das colunas deetanizadora e debutanizadora apresentadas no Capítulo 2, pode-se notar que as possíveis variáveis secundárias a serem utilizadas restringem-se às variáveis de processo dos controladores presentes no processo simulado. A Tabela 4.1 apresenta a listagem dessas variáveis.

Pode-se observar que nem todos os controladores PID presentes no sistema simulado foram listados. Isso é explicado pelo fato de existirem estratégias de controle em cascata na planta, envolvendo um controlador PID mestre e outro escravo. Portanto, somente um desses controladores foi escolhido, já que os controladores presentes em um controle em cascata são fortemente correlacionados. No processo simulado, esse tipo de estratégia é encontrada apenas na coluna deetanizadora: TIC-100 (mestre) e FIC-102 (escravo), e LIC-100 (mestre) e FIC-101 (escravo). No primeiro controle em cascata, optou-se por escolher a PV do controlador TIC-100, pois a dinâmica mais lenta desse controlador é predominante no comportamento dinâmico do sistema. No segundo controle em cascata, o critério utilizado foi diferente: apesar da predominância da dinâmica do controlador LIC-100, optou-se por selecionar a PV do controlador FIC-101, vazão de LGN, pois esta variável é de grande importância na inferência das variáveis primárias da coluna debutanizadora, já que corresponde à alimentação/carga dessa coluna. Dessa forma, foram pré-selecionadas, ao todo, quatro PVs pertencentes ao processo da coluna deetanizadora e outras quatro pertencentes ao processo da coluna debutanizadora.

Neste trabalho, pretende-se obter um modelo de inferência híbrido, aplicando a análise de componentes principais às variáveis secundárias já citadas e/ou às variáveis primárias do processo simulado, respeitando as características dos modelos de identificação neural NNARX, quando o modelo for não realimentado, e NNOE, quando realimentado.

O objetivo do módulo ACP é reduzir o número de entradas da rede neural de inferência e, conseqüentemente, a sua complexidade quanto ao número de neurônios e conexões sinápticas. Isso é realizado através da transformação das variáveis do processo para o espaço das componentes principais, e em seguida selecionando somente as componentes mais representativas que irão fazer parte das entradas do módulo RNA. Dessa forma, deve ser escolhido o menor número de componentes principais que represente significativamente as informações contidas nas medições das PVs listadas na Tabela 4.1 e/ou nas variáveis primárias do processo.

Uma das partes mais importantes deste trabalho é o estudo e análise de algumas estruturas de modelos de inferência ACP-RNA, modelos obtidos a partir da junção dos módulos ACP e RNA. Cada uma dessas estruturas, que serão apresentadas ainda neste capítulo, possuem características próprias não somente quanto ao módulo ACP, mas também quanto aos demais módulos do sistema de inferência. Inicialmente, optou-se por apresentar em maiores detalhes os módulos que compõem a proposta originalmente idealizada para o desenvolvimento deste trabalho. Assim, pretende-se descrever de maneira mais didática uma das estruturas ACP-RNA analisadas, de tal maneira que isso venha a simplificar a compreensão e a descrição das demais estruturas.

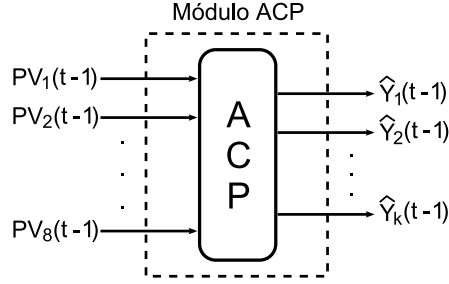


Figura 4.1: Diagrama esquemático do módulo ACP da proposta original.

A Figura 4.1 apresenta o módulo ACP da proposta original. O módulo recebe como entrada as oito PVs ($p = 8$) listadas pela Tabela 4.1 e realiza a redução dessa informação em $\hat{Y}_k$ componentes principais, onde $k < p$. Na próxima seção é apresentado como essas componentes são utilizadas pela rede neural.

4.2 Módulo RNA

A rede neural do sistema de inferência proposto tem como objetivo modelar as relações dinâmicas entre as variáveis secundárias e primárias do processo em estudo, tendo como ferramenta auxiliar a análise de componentes principais. A arquitetura a ser utilizada é a perceptron de múltiplas camadas configurada de acordo com a estrutura de identificação NNOE ou NNARX, dependendo se o sistema estiver sendo realimentado ou não pelas suas próprias estimativas.

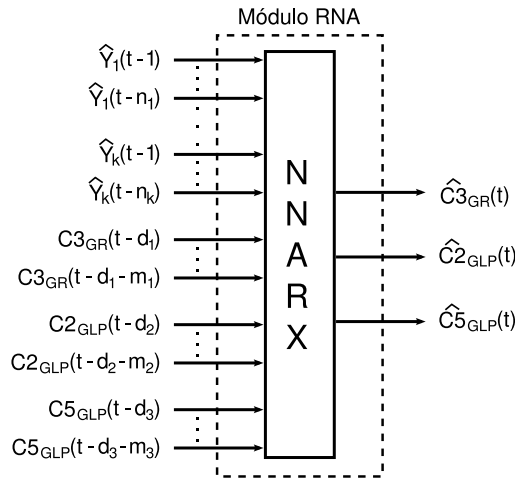


Figura 4.2: Diagrama esquemático do módulo RNA da proposta original.

Na Seção 4.1, viu-se que as saídas do módulo ACP são utilizadas como parte das entradas da RNA de inferência. Essa informação é reafirmada observando-se o diagrama esquemático do módulo RNA do sistema de inferência originalmente proposto que é apresentado na Figura 4.2. De acordo com o ilustrado pode-se dizer que a relação dinâmica entre as variáveis secundárias e primárias do processo será obtida indiretamente, uma vez que as variáveis secundárias propriamente ditas não fazem parte das entradas da rede, e sim uma representação dessas variáveis através das componentes principais selecionadas.

A Figura 4.3 apresenta de maneira simplificada o módulo ACP em conjunto com o módulo RNA, formando o que é denominado neste trabalho por modelo ou estrutura de inferência ACP-RNA. É dessa forma que os demais modelos ACP-RNA serão ilustrados.

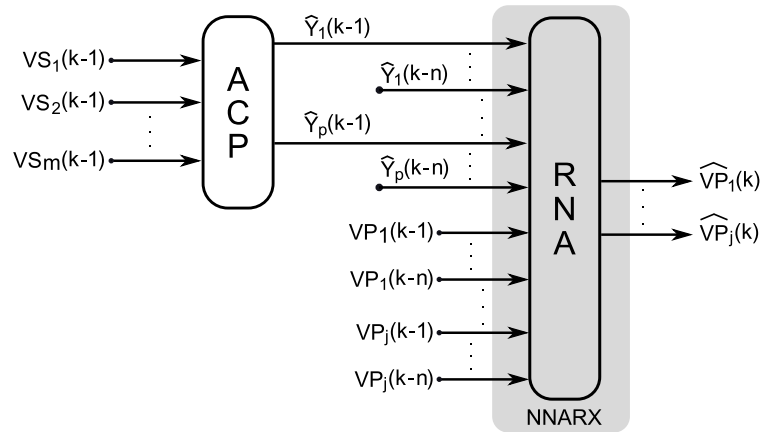


Figura 4.3: Diagrama esquemático da estrutura ACP-RNA da proposta original.

Na Figura 4.3, VP_j e $\widehat{VP}_j$ correspondem, respectivamente, à j -ésima variável primária do processo, de acordo com a Tabela 4.2, e à j -ésima variável primária estimada pelo sistema de inferência. Os índices GR e GLP, correspondem, respectivamente, ao gás residual e ao gás liquefeito de petróleo.

Tabela 4.2: Variáveis primárias do processo.

j	Variável Primária (VP_j)
1	Fração molar de C3 no GR
2	Fração molar de C2 no GLP
3	Fração molar de C5 no GLP

Observa-se na Figura 4.3 que as VPs que alimentam a rede neural são fornecidas pelo processo simulado, não sendo, portanto, a rede neural de inferência realimentada por suas

próprias estimativas. A representação das estruturas ACP-RNA é feita dessa maneira, pois os testes realizados para definir a melhor estrutura de modelagem ACP-RNA entre as estruturas propostas são realizados sem a utilização da realimentação. Maiores detalhes serão vistos no próximo capítulo.

4.3 Módulo de correção

Em seções anteriores foi comentado sobre o problema que pode ocorrer ao utilizar as variáveis primárias estimadas como entrada do sistema de inferência, tornando-o realimentado. Como consequência, há um aumento na possibilidade do sistema de inferência tornar-se instável e/ou divergir de forma acentuada dos valores das variáveis primárias fornecidos pela simulação. Devido a isso, é proposta a inserção de um módulo de correção ao sistema com o objetivo de tratar esse possível problema.

O módulo de correção se baseia na utilização das medições das variáveis primárias realizadas por cromatógrafos de linha. A ideia consiste em corrigir o sistema de inferência realizando uma espécie de ajuste nas saídas da RNA, como pode ser visto na Figura 4.4.

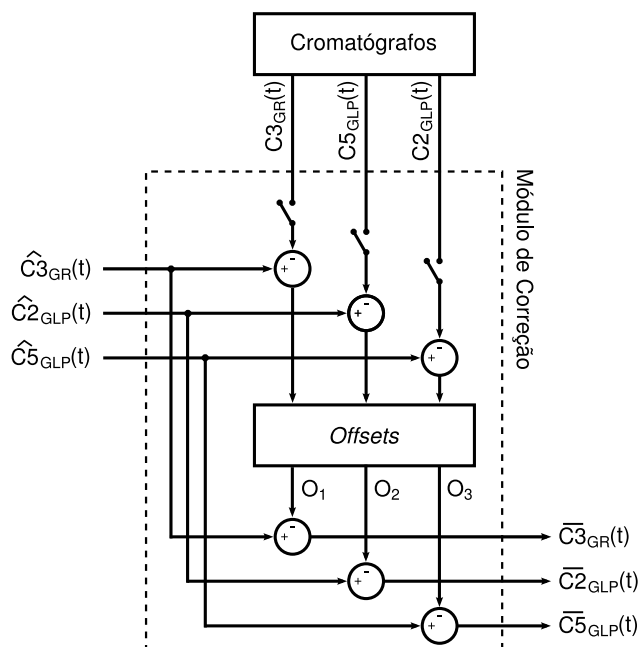


Figura 4.4: Diagrama esquemático do módulo de correção.

No instante em que as medições reais das frações molares das variáveis primárias ($C3_{GR}$, $C2_{GLP}$ e $C5_{GLP}$) são disponibilizadas pelos cromatógrafos, é calculada a diferença

entre os valores reais dessas variáveis e os seus valores estimados pela rede neural. Em seguida, tomando como base essa diferença, é feito o ajuste momentâneo dos valores de *offset* (O_1 , O_2 e O_3) aplicados às saídas do módulo RNA. Após o devido ajuste, o módulo de correção fornece para a rede neural os valores estimados corrigidos ($\overline{C3}_{GR}$, $\overline{C2}_{GLP}$ e $\overline{C5}_{GLP}$) das variáveis primárias do processo. Quando as medições reais das variáveis primárias não estão disponíveis, o módulo de correção fornece para as saídas do sistema de inferência os valores das frações molares ($\widehat{C3}_{GR}$, $\widehat{C2}_{GLP}$ e $\widehat{C5}_{GLP}$) estimadas pela RNA, ou seja, os valores dos *offsets* são nulos durante esse período. Uma forma alternativa é imaginar que os valores de *offset* funcionam como mais uma entrada dos neurônios lineares de saída da rede neural, apresentando pesos sinápticos fixos e de valor unitário. Deve-se ter o cuidado de não confundir este conceito com a definição de *bias*. Os *biases* são pesos sinápticos ajustáveis durante o processo de treinamento da rede neural aplicados à uma entrada fixa, geralmente de valor + ou -1.

Neste trabalho assume-se que o período de medição dos possíveis cromatógrafos de linha presentes no processo é de 14 minutos, do mesmo modo que em Lima (2001). Na UPGN-II GMR, a composição da carga da planta, as composições dos produtos de topo e de fundo da coluna deetanizadora, e a composição do GLP são medições de grande interesse. Entretanto, um único cromatógrafo não é capaz de fornecer todas essas composições simultaneamente. É necessário que ele realize uma espécie de chaveamento entre as linhas de processo, seguindo alguma ordenação ou estratégia pré-estabelecida. Nesse caso, o período de medição do cromatógrafo é de 14 minutos, mas o intervalo entre medições de cada uma das composições individualmente irá depender da sequência de medições realizadas por esse único cromatógrafo.

A Figura 4.5 apresenta um exemplo de esquema de ciclo de medição. É utilizado apenas um cromatógrafo que chaveia entre três linhas do processo, medindo as composições da carga da planta, do gás residual (GR) e do GLP. Pode-se notar que os intervalos de medição do GR e do GLP são de 56 minutos, enquanto a da carga é de 28 minutos. Neste exemplo, foi dada a preferência de medição à composição da carga do sistema.

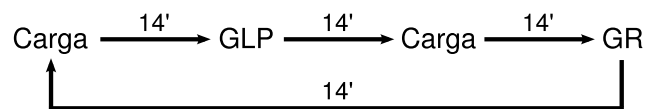


Figura 4.5: Exemplo de esquema de ciclo de medição.

Pode-se afirmar que um dos objetivos deste trabalho é obter uma rede neural bem treinada ao ponto de manter o sistema de inferência funcionando independentemente de

maneira estável, apresentando erros de estimativa dentro do tolerável, até que o módulo de correção possa ser acionado. Dessa forma, espera-se que seja possível encontrar um período de autonomia que satisfaça às características de medição dos cromatógrafos.

Depois de descrever os três módulos que compõem o sistema de inferência originalmente idealizado, pode-se apresentá-lo por completo através do diagrama simplificado ilustrado pela Figura 4.6.

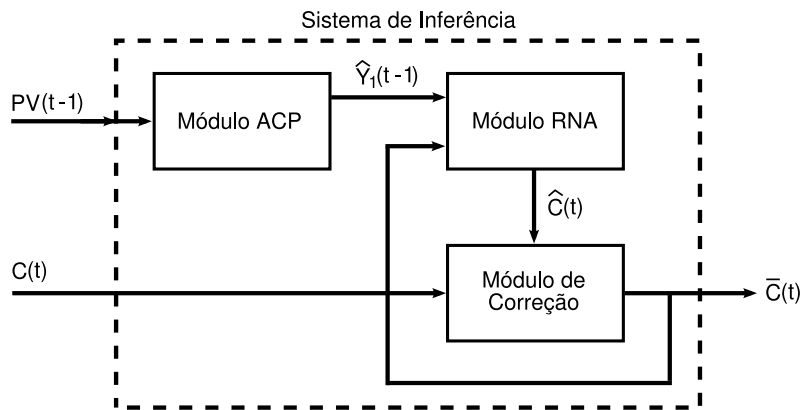


Figura 4.6: Diagrama esquemático do sistema de inferência híbrido proposto.

Na Figura 4.6, $\mathbf{PV}$, $\hat{\mathbf{Y}}$, $\mathbf{C}$, $\hat{\mathbf{C}}$ e $\bar{\mathbf{C}}$ são vetores e correspondem, respectivamente, às variáveis de processo dos controladores da UPGN, às componentes principais, às medições fornecidas pelos cromatógrafos, às variáveis estimadas pela rede neural e às variáveis primárias corrigidas ou não pelo módulo de correção, dependendo do instante de funcionamento do sistema. Dessa forma, $\bar{\mathbf{C}}$ corresponde à saída final do sistema de inferência; e, enquanto este sistema funciona independentemente, $\bar{\mathbf{C}}$ é igual à $\hat{\mathbf{C}}$.

4.4 Estruturas de inferência ACP-RNA

Anteriormente, neste capítulo, foram apresentados os módulos que compõem o sistema de inferência proposto, sendo também realizada uma descrição detalhada da proposta original idealizada para este trabalho. Entretanto, no decorrer do processo de desenvolvimento do trabalho, optou-se por realizar a análise de outras possíveis estruturas, alterando-se apenas a configuração dos módulos ACP e RNA, formando modelos ou estruturas que foram denominadas estruturas de inferência ACP-RNA.

Uma vez explicado o funcionamento dos módulos ACP e RNA, é fácil perceber que a agregação desses módulos proporciona uma diminuição na complexidade da rede neu-

ral de inferência. Essa rede, configurada como uma estrutura de identificação NNARX ou NNOE, deverá modelar as dinâmicas entre as variáveis secundárias e primárias do processo, realizando estimativas confiáveis a cada minuto.

Neste trabalho, são propostas quatro estruturas de agregação dos módulos ACP e RNA com o intuito de avaliar o desempenho dos diferentes sistemas de inferência formados por essas estruturas. Deve-se destacar que existem diversas outras combinações entre esses módulos que não serão analisadas neste trabalho. A avaliação dos resultados para cada uma dessas propostas será feita ao longo do Capítulo 5.

4.4.1 Estrutura de inferência ACP-RNA 1

A primeira estrutura ACP-RNA é composta por um módulo ACP que possui como entrada valores passados das variáveis primárias e secundárias do processo. Dessa forma, pretende-se que a complexidade do módulo RNA seja reduzida ao máximo. O diagrama esquemático dessa estrutura é apresentado na Figura 4.7.

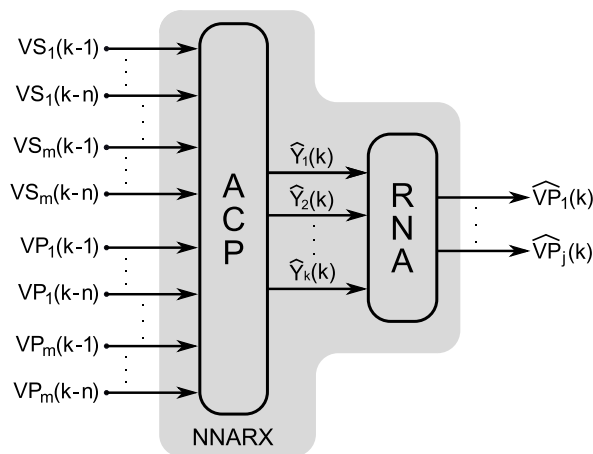


Figura 4.7: Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 1.

Dependendo da capacidade de redução do módulo ACP e da qualidade da inferência realizada, essa estrutura permitirá que o sistema seja utilizado/testado com modelos de ordem bastante elevada, uma vez que a entrada do módulo RNA é composta apenas pelas k componentes principais selecionadas.

Deseja-se, portanto, investigar se o módulo ACP que compõe essa estrutura tem a capacidade de filtrar as informações necessárias dos valores passados das variáveis do processo, uma vez que esses são de fundamental importância para a identificação da dinâmica do sistema.

4.4.2 Estrutura de inferência ACP-RNA 2

Assim como na estrutura anterior, buscou-se nessa estrutura ACP-RNA uma elevada redução da complexidade do módulo RNA. Entretanto, com essa estrutura é possível realizar uma análise da capacidade dissociativa do módulo ACP.

A Figura 4.8 apresenta o diagrama esquemático da estrutura ACP-RNA 2. Como pode-se notar, a estrutura é constituída por dois módulos ACP distintos. O módulo representado na parte superior do diagrama é responsável por filtrar as informações relativas às variáveis secundárias do processo, enquanto o módulo representado na parte inferior filtra as informações das variáveis primárias do processo.

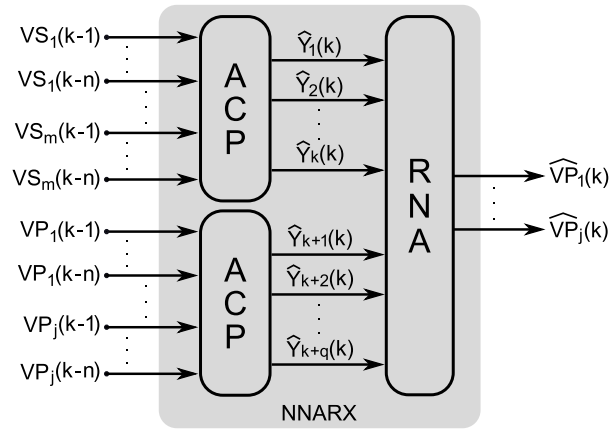


Figura 4.8: Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 2.

4.4.3 Estrutura de inferência ACP-RNA 3

Esta estrutura foi idealizada com o intuito de avaliar a importância das informações dos valores passados das variáveis primárias para a rede neural de inferência. Segundo Nørgaard et al. (2001), essas informações são de fundamental importância para que a rede assimile a dinâmica do processo e realize estimativas compatíveis com os valores reais.

Para que fosse possível realizar essa avaliação, a estrutura ACP-RNA 3 foi formada por um único módulo ACP, tendo como entrada os valores passados das variáveis secundárias. Em relação à estrutura anterior, é removido o módulo responsável por filtrar as informações relativas às variáveis primárias do processo. Os valores passados dessas variáveis são utilizados diretamente como entradas da rede neural de inferência, fazendo com que a complexidade do módulo RNA aumente. A Figura 4.9 apresenta o diagrama esquemático desta estrutura.

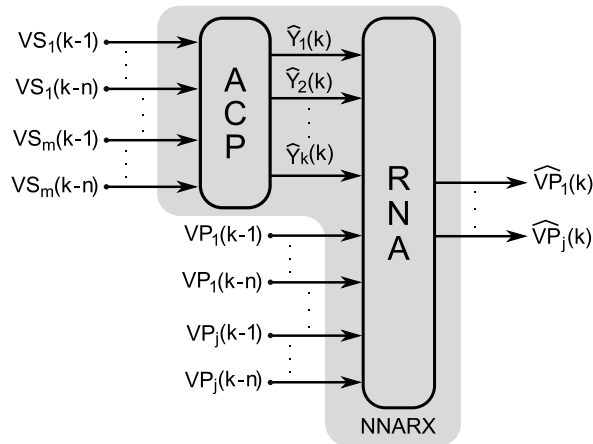


Figura 4.9: Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 3.

4.4.4 Estrutura de inferência ACP-RNA 4

Diferentemente das estruturas anteriores, esta proposta permite que o módulo RNA permaneça o mais próximo possível da estrutura NNARX, na qual os valores passados das componentes principais extraídas das variáveis secundárias e os valores passados das variáveis primárias do processo são conectados diretamente ao módulo RNA. Esta estrutura já foi apresentada anteriormente neste capítulo, uma vez que ela representa a estrutura idealizada originalmente para o desenvolvimento deste trabalho.

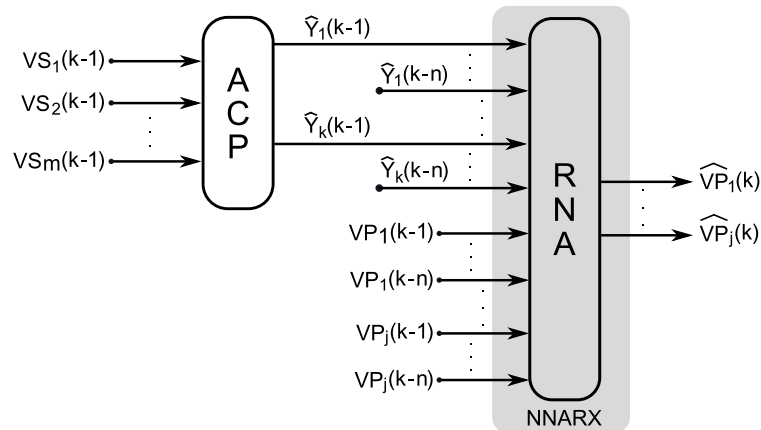


Figura 4.10: Diagrama esquemático da estrutura de inferência ACP-RNA 4.

Nesta estrutura o módulo ACP realiza a redução somente das informações das variáveis secundárias atuais, e não mais de seus valores passados. Pode-se notar que a RNA apresenta a estrutura do modelo de inferência neural NNARX. Em teoria, isso fará com

que as informações das variáveis primárias e secundárias sejam assimiladas mais facilmente pela rede, diminuindo o erro médio de estimativa. Por outro lado, a complexidade do módulo RNA aumentará significativamente.

4.4.5 Estrutura de inferência puramente neural

Também é importante analisar a estrutura NNARX tradicional, realizando um estudo comparativo entre as estruturas propostas contendo a ferramenta estatística ACP e a estrutura de inferência puramente neural. A Figura 4.11 apresenta o esquema dessa estrutura.

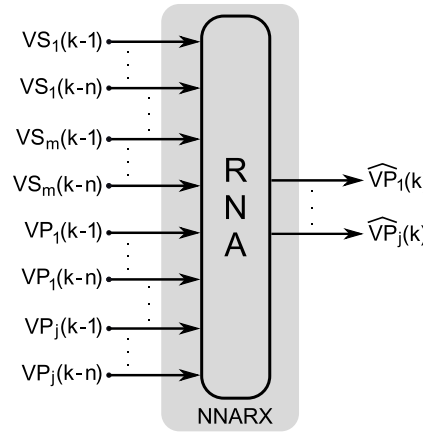


Figura 4.11: Diagrama esquemático da estrutura de inferência puramente neural.

4.5 Metodologia de implementação

Nesta seção é descrita sucintamente a metodologia que foi empregada durante o desenvolvimento do sistema de inferência proposto por este trabalho. Dessa forma, pretende-se apresentar previamente os passos que foram tomados para a implementação do sistema e obtenção dos resultados. Cada um dos itens abaixo será descrito em maiores detalhes no próximo capítulo.

- **Coleta de dados:** nesta etapa é realizada a coleta dos dados necessários para a realização da análise de componentes principais e o treinamento e validação da rede neural do sistema de inferência. Para isso são aplicados sinais PRS aos *set points* de alguns dos controladores do sistema simulado.

- **Definição da estrutura de inferência ACP-RNA:** após a coleta de dados, são analisadas as diferentes configurações de estruturas ACP-RNA. Para isso é necessária a realização da análise de componentes principais e o treinamento da rede neural de acordo com a configuração em análise, sendo avaliadas estruturas de inferência de segunda, terceira e quarta ordem. Dessa forma, pretende-se observar a capacidade de redução de complexidade que a utilização do módulo ACP pode proporcionar e a melhor ordem de modelo a ser utilizada. Depois de realizada a validação das estruturas de inferência ACP-RNA, a melhor das estruturas é selecionada para ser utilizada no sistema de inferência a ser implementado.
- **Realimentação do sistema:** até este ponto, os modelos dos sistemas de inferência analisados utilizaram, a cada minuto, os valores das variáveis primárias disponibilizadas pela simulação no *software* HYSYS®. Nesta etapa, o sistema passa a ser realimentado pelas suas próprias estimativas. Inicialmente é verificado o comportamento do sistema sem a presença do módulo de correção, com o intuito de observar até que momento as medições fornecidas pelo sistema ainda são válidas para o propósito do trabalho. Logo após, é inserido o módulo de correção ao sensor virtual, sendo testados e analisados diferentes intervalos/períodos de atuação desse módulo no sistema. Nesta etapa, também é analisada a possibilidade de reduzir a ordem do modelo do sistema de inferência, sem que isso venha a trazer grande prejuízo à qualidade das estimativas.

Capítulo 5

Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos neste trabalho. São descritos detalhes adicionais quanto à coleta de dados do sistema simulado e ao treinamento das estruturas de inferência. Em seguida, é feita uma análise comparativa entre as estruturas de inferência ACP-RNA apresentadas no Capítulo 4. O objetivo é selecionar a estrutura que melhor represente a dinâmica do processo, fornecendo a inferência satisfatória das frações molares de propano no gás residual, bem como das frações molares de etano e pentano no GLP. Logo em seguida, utilizando a estrutura ACP-RNA selecionada, é apresentado um estudo do sistema de inferência completo, ou seja, com a presença do módulo de correção do erro. Nesse momento, o sistema passa a ser realimentado por suas próprias estimativas das variáveis principais do processo.

5.1 Coleta de dados

A metodologia caixa preta de identificação, a análise de componentes principais, assim como o treinamento supervisionado de uma rede neural, exigem, como primeiro passo prático, a obtenção de amostras experimentais do processo em estudo, de tal forma que seja possível realizar a adequada caracterização de sua dinâmica e a seleção das componentes principais.

Os dados coletados para a aplicação da análise de componentes principais e posterior treinamento da rede neural de inferência foram obtidos estimulando o processo simulado (colunas deetanizadora e debutanizadora) através da aplicação de sinais PRS aos *set points* dos controladores PID relacionados com as variáveis secundárias selecionadas para a realização da inferência. Esses controladores e variáveis encontram-se listados na Tabela 4.1. Seguindo esse procedimento, é possível proporcionar variações nas PVs desses controladores e, conseqüentemente, nas frações molares de C3 no gás residual, e de C2 e C5 no GLP. A aplicação desses sinais de excitação no processo deve obedecer a

requisitos de amplitude, para sobrepor o ruído, mas não tirar o processo demasiadamente de seu ponto de operação, e de período, para não colocar o sistema em oscilação excessiva e permitir a observação do efeito da excitação em um tempo adequado.

Em todas as simulações foram mantidas as condições de segurança do processo, principalmente quanto aos limites de pressão e temperatura. Aplicando essa metodologia, obteve-se um grupo de dados de 6.000 amostras e outros pequenos grupos de 400 amostras para serem utilizados durante o processo de validação do sensor virtual.

Os dados coletados são aplicados ao módulo ACP, determinando, dessa maneira, as componentes principais que fazem parte do vetor de entrada dos módulos RNA dos modelos de inferência ACP-RNA. Na próxima seção, é feito um breve comentário sobre a escolha da ordem desses modelos.

5.2 Seleção da ordem dos modelos de inferência

A ordem n adotada para o modelo do processo tem grande influência nas estimativas de um sistema de inferência. A escolha adequada dessa ordem permite que a rede neural do sistema de inferência assimile o comportamento dinâmico do processo, de tal forma que seja possível obter estimativas confiáveis das variáveis primárias do processo.

Na prática, é bastante comum determinar a ordem do modelo a partir de testes experimentais. Apesar de ser uma metodologia simples, apresenta, na maioria das vezes, resultados satisfatórios. Neste caso, pode-se adotar uma das seguintes alternativas: iniciar os testes com uma ordem baixa ou com uma ordem alta, e em seguida ir aumentando ou diminuindo a ordem do modelo ao longo dos testes até que seja encontrado um modelo que represente adequadamente um determinado processo, de acordo com as expectativas e necessidades do projeto.

Neste trabalho optou-se por iniciar os testes a partir de modelos de segunda ordem ($n = 2$) e ir aumentando a ordem dos modelos gradativamente, até a obtenção de modelos de quarta ordem. Dessa forma, é possível analisar a capacidade de redução da análise de componentes principais e realizar uma seleção adequada da melhor combinação ACP-RNA que será utilizada em conjunto com o módulo de correção de erro.

De acordo com os diagramas esquemáticos das estruturas neurais de identificação NNARX (Figura 3.4) e NNOE (Figura 3.5) apresentadas no Capítulo 3, pode-se observar que estas permitem a utilização de ordens diferentes para as variáveis primárias e secundárias, assim como a inserção de informações referentes aos atrasos de transporte do processo. Para reduzir a quantidade de testes experimentais necessários para encontrar

a melhor combinação de ordens das variáveis primárias e secundárias, decidiu-se simplificar o processo de testes adotando a mesma ordem de modelo para essas variáveis.

O atraso de transporte do processo não foi inserido nos modelos, pois, no sistema simulado, o valor dessa informação é inferior ao período de estimação proposto, ou seja, menor que um minuto. É importante frisar que no processo real o atraso de transporte é bem mais elevado. Isso faz com que seja necessária a adição dessa informação aos modelos de identificação para garantir que esses apresentem um funcionamento adequado.

5.3 Critérios de avaliação das estruturas ACP-RNA

Antes de iniciar a apresentação dos resultados das análises de componentes principais, dos treinamentos das redes neurais e da seleção da melhor estrutura de inferência ACP-RNA, é preciso definir alguns critérios de avaliação para a realização da análise dos resultados que serão apresentados na sequência deste trabalho.

A comparação das estruturas será realizada quanto à capacidade de redução do módulo ACP, à complexidade da rede neural e à qualidade da inferência das frações molares de C2 e C5 no GLP e C3 no gás residual. Essas análises serão realizadas, respectivamente, de acordo com os seguintes critérios: razão de redução, número de conexões sinápticas da rede neural e erro médio quadrático.

5.3.1 Razão de redução - R_r

A razão de redução será utilizada como uma forma de comparar a eficiência do módulo ACP quanto à sua capacidade de redução de acordo com o aumento da ordem do modelo. Tendo apresentado anteriormente as estruturas que serão analisadas neste trabalho, a partir da ordem do modelo e do número de entradas e saídas (componentes principais) do(s) módulo(s) ACP, pode-se definir a razão de redução como sendo:

$$R_r = 1 - \frac{k}{n(V_s + V_p)} \quad (5.1)$$

Nessa equação k representa o número de componentes principais, n a ordem do modelo, e V_s e V_p correspondem, respectivamente, aos números de variáveis secundárias e primárias do processo que estão presentes na entrada do módulo ACP.

A razão de redução expressa a porcentagem de redução do número de variáveis originais na entrada do módulo ACP para o número de componentes principais selecionadas.

5.3.2 Número de conexões sinápticas - N_{cs}

Através do número de conexões sinápticas presentes no módulo RNA do sistema de inferência, é possível analisar quantitativamente a complexidade da estrutura da rede neural de inferência. O número de conexões sinápticas de uma rede neural PMC totalmente conectada pode ser facilmente obtida através do uso da Equação 5.2.

$$N_{cs} = (n_{\phi} + 1) nC_{(1)} + \sum_{i=1}^{c-1} (nC_{(i)} + 1) nC_{(i+1)} \quad (5.2)$$

Onde N_{cs} é o número de conexões sinápticas da rede, n_{ϕ} e $nC_{(i)}$, são, respectivamente, o número de entradas da rede e o número de neurônios contidos na camada i da rede neural e, finalmente, c corresponde ao número de camadas da rede. Se considerarmos as entradas de uma rede neural como sendo a sua camada de número zero, pode-se ainda simplificar a Equação 5.2 da seguinte maneira:

$$N_{cs} = \sum_{i=0}^{c-1} (nC_{(i)} + 1) nC_{(i+1)} \quad (5.3)$$

5.3.3 Erro médio quadrático - EMQ

O erro médio quadrático (EMQ) é um dos índices mais utilizados no controle do treinamento supervisionado de uma rede neural. Segundo Haykin (2001), o EMQ é uma função média de todos os parâmetros livres (i.e. pesos sinápticos e níveis de bias) da rede. Além disso, este índice corresponde à função de custo utilizada na etapa de treinamento da rede neural, sendo utilizada como uma medida do desempenho de aprendizagem.

O EMQ também pode ser utilizado para avaliar a capacidade de generalização da rede neural após o treinamento. Nesse caso, o erro médio quadrático é calculado utilizando dados diferentes dos utilizados durante o treinamento, ou seja, os dados presentes nos conjuntos de validação. Neste trabalho, a avaliação das estruturas será realizada através do EMQ de validação. A Equação 5.4 demonstra como o EMQ é obtido.

$$EMQ = \frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \sum_{j \in C} (y_j(n) - \hat{y}_j(n))^2 \quad (5.4)$$

Onde N é o número de amostras de treinamento ou validação, C é a camada de saída da rede, e $y_j(n)$ e $\hat{y}_j(n)$ são, respectivamente, o valor da saída j do processo e o valor de saída j estimado pela rede, dada a amostra n .

5.4 Análise de componentes principais

Depois de efetuada a coleta de dados é possível obter as matrizes de correlação amostral $\mathbf{S}_{p \times p}$, onde p é o número de entradas dos módulos ACP das estruturas ACP-RNA a serem analisadas. Dessas matrizes são então extraídos os autovalores $\hat{\lambda}_1, \hat{\lambda}_2, \dots, \hat{\lambda}_p$ e os seus respectivos autovetores normalizados $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2, \dots, \hat{\mathbf{e}}_p$. De posse dessas informações são selecionadas as k componentes principais (saídas dos módulos ACPs), a partir do ponto de corte γ (Equação 3.10).

O trabalho de Warne et al. (2004b) é mais um exemplo de que a escolha do valor de γ , geralmente, é feita heurísticamente. Ao utilizar esse método de seleção de componentes principais, a porcentagem de variância ou covariância total pode variar de 70% a 95%, estando esse valor diretamente relacionado com a quantidade de informação que irá ser retida pelas componentes principais. A Tabela 5.1 apresenta um resumo das análises de componentes principais realizadas para cada uma das estruturas ACP-RNA propostas neste trabalho.

Tabela 5.1: Comparação dos módulos ACP das estruturas ACP-RNA propostas.

ACP-RNA	γ	Ordem (n)	$n(V_s + V_p)$	k	n_ϕ	R_r
1	95%	4	44	10	10	0,77
		3	33	9	9	0,73
		2	22	9	9	0,59
2	95%	4	32 e 12	9 e 3	12	0,72 e 0,75
		3	24 e 9	8 e 3	11	0,67 e 0,67
		2	16 e 6	7 e 3	10	0,56 e 0,50
3	95%	4	32	8	20	0,75
		3	24	8	17	0,67
		2	16	7	13	0,56
4	95%	1	8	7	40	0,12
	84%	1	8	5	32	0,37
	75%	1	8	4	28	0,50

Os dados utilizados para a aplicação da ACP foram obtidos a partir do conjunto de dados experimentais de 6.000 amostras coletados anteriormente. A Tabela 5.1 exhibe, para cada uma das estruturas propostas, o ponto de corte γ , a ordem dos modelos, número de entradas dos módulos ACP - $n(V_s + V_p)$ -; o número k de componentes principais selecionadas (saídas dos módulos ACP) e a razão de redução.

É importante lembrar que a estrutura de inferência ACP-RNA 2 possui dois módulos ACP. Dessa forma, para essa estrutura, na Tabela 5.1, nas colunas do número de entradas dos módulos ACP e do número de CPs selecionadas (k), o primeiro valor apresentado é

referente ao módulo ACP responsável por reduzir as informações relativas às variáveis secundárias; e o segundo valor é referente ao módulo ACP responsável pela redução de informações relativas às variáveis primárias.

A estrutura ACP-RNA 4 é diferenciada quanto a ordem do modelo, pois isso não influi na entrada de seu módulo ACP, uma vez que os regressores são aplicados apenas às componentes principais selecionadas e não às variáveis secundárias do processo. A entrada do módulo ACP da estrutura de inferência ACP-RNA 4 é constituída pelos valores imediatamente passados das variáveis secundárias, assim, considera-se o “modelo” formado pelo módulo ACP de primeira ordem ($n = 1$).

A partir do apresentado, percebe-se facilmente que quanto maior a ordem do modelo, maior será a razão de redução por parte do módulo ACP. Ou seja, o aumento da ordem do modelo faz com que a eficiência do módulo ACP também aumente, filtrando as informações mais importantes dos dados apresentados através de suas componentes principais, o que, conseqüentemente, ocasionará uma maior diminuição relativa da complexidade do módulo RNA.

Pode-se notar também que o número de componentes principais selecionadas para as três primeiras estruturas, apesar da variação da ordem, são iguais ou bem próximas. Isso é um indício de que a utilização de elevadas ordens para a representação da dinâmica do processo é desnecessária.

Inicialmente, o ponto de corte γ adotado foi de 95%, com o objetivo de extrair uma grande quantidade de informações dos dados originais. Com esse valor é possível notar que foi obtida uma boa redução dos dados para as 3 primeiras estruturas ACP-RNA. Entretanto, o mesmo não ocorreu para a quarta estrutura. Devido a isso, para a estrutura ACP-RNA 4, o valor de γ foi reduzido até 75%. De certa forma, esse acontecimento já era esperado, uma vez que essa estrutura apresenta apenas 8 entradas em seu módulo ACP, imaginava-se que a análise de componentes principais não realizasse uma redução substancial.

A redução dos dados originais é realizada a partir dos autovetores da matriz de correlação, que realizam uma transformação espacial sobre os dados amostrais. O conjunto de dados transformado é utilizado, então, como parte do conjunto de treinamento da rede do módulo RNA. Nas próximas seções, serão apresentados maiores detalhes sobre a etapa de treinamento das redes neurais de cada uma das estruturas propostas.

5.5 Treinamento e validação das RNAs de inferência

As redes neurais que formam os módulos RNA são compostas por três neurônios lineares de saída que irão fornecer os valores estimados das variáveis primárias. Os neurônios da única camada intermediária são do tipo sigmoidais, sendo o número de neurônios dessa camada obtido experimentalmente.

Existem diversos algoritmos para o treinamento supervisionado de uma rede neural PMC, tais como o da retropropagação do erro com coeficiente de aprendizado adaptativo e momento, Delta-Bar-Delta (Rezende e Maitelli, 1999), Levenberg-Marquardt (Nocedal e Wright, 1999), algoritmos de gradiente conjugado (Hagan et al., 1996), entre outros.

Um dos problemas que podem ocorrer durante o treinamento de uma rede neural é o sobreajuste ou *overfitting*. Nesse tipo de problema, o erro médio quadrático de treinamento final obtido é baixo, dando a impressão de que o treinamento da rede foi bem sucedido. Entretanto, quando novos dados, diferentes dos utilizados durante a etapa de treinamento, são apresentados para a rede, os valores de erros encontrados em suas saídas são elevados. Ou seja, a rede memorizou os exemplos de treinamento e não adquiriu o conhecimento necessário para realizar a generalização do problema diante de novas situações que lhe são apresentadas.

Segundo Demuth et al. (2009), se o número de parâmetros da rede neural é muito menor do que o número de pontos do conjunto de treinamento, então a chance de ocorrer o sobreajuste é bastante pequena. Dessa forma, se for possível coletar uma grande quantidade de dados, aumentando o tamanho do conjunto de treinamento, não há a necessidade de se preocupar excessivamente com a utilização de técnicas de prevenção contra o sobreajuste, tais como a regularização e a parada antecipada ou validação cruzada.

Apesar de ser possível, através do sistema simulado, a coleta de um grande número de dados, optou-se por utilizar a técnica de validação cruzada ou parada antecipada como forma de prevenção contra qualquer possibilidade de sobreajuste. Nessa técnica, os dados coletados são divididos em dois subconjuntos. O primeiro deles é o subconjunto de treinamento, o qual é utilizado para o cálculo do gradiente e para o ajuste dos pesos sinápticos e *biases* da rede; o segundo subconjunto é o de validação. Durante o treinamento, as redes que vão sendo obtidas são testadas utilizando o conjunto de validação. O erro de validação geralmente decresce durante a fase inicial do treinamento, assim como o erro de treinamento. Entretanto, quando inicia-se o processo de sobreajuste da rede, o erro de validação, geralmente, começa a crescer. Quando isso acontece por uma quantidade de iterações do algoritmo determinada pelo projetista, o treinamento é finalizado, evitando-se o sobreajuste.

Deve-se ter o cuidado de não utilizar um algoritmo de treinamento de convergência muito rápida em conjunto com a técnica de parada antecipada. Algoritmos rápidos como o *Levenberg-Marquardt* devem ter os seus parâmetros ajustados de forma a tornar a sua convergência mais lenta. Os algoritmos de treinamento que geralmente funcionam bem com a parada antecipada são o do gradiente conjugado escalonado e o da retropropagação do erro residual (Demuth et al., 2009).

Neste trabalho é adotado o algoritmo do gradiente conjugado escalonado em conjunto com a parada antecipada. Os algoritmos de gradiente conjugado, em geral, requerem uma busca linear a cada iteração. Esse tipo de busca, em um treinamento de uma rede neural, é bastante custoso computacionalmente. O algoritmo do gradiente conjugado escalonado desenvolvido por Møller (1993) foi projetado para evitar o tempo consumido pela busca linear, eliminando-a. Para isso, Møller combinou características do *Levenberg-Marquardt* com a abordagem do gradiente conjugado.

Os treinamentos das redes neurais dos módulos RNA foram realizados em *offline* no *toolbox* de redes neurais do *software* matemático MATLAB®. As redes foram treinadas utilizando o algoritmo de treinamento do gradiente conjugado escalonado, em conjunto com a validação cruzada e parada antecipada.

Após cada treinamento, a rede neural obtida foi submetida a 5 conjuntos de dados de validação com o objetivo de avaliar a sua capacidade de generalização. A partir dos primeiros treinamentos realizados, pode-se perceber que as redes neurais totalmente conectadas formadas por apenas uma camada oculta de neurônios sigmoidais eram o suficiente para bem representar a dinâmica do processo em estudo. Devido a isso, a análise limitou-se a esse tipo de arquitetura neural.

O processo de busca por uma rede neural de melhor desempenho para ser utilizada em uma dada aplicação pode ser bastante exaustivo, uma vez que não existe uma técnica que defina com exatidão o número de neurônios, e mesmo de camadas, que a rede deve possuir. Neste trabalho foram realizados diversos treinamentos com redes formadas por diferentes números de neurônios, uma vez que o número de camadas intermediárias já fora fixado em apenas um.

A Tabela 5.2 exibe informações quanto ao número de ordens de modelos analisados para cada uma das estruturas propostas, ao número de configurações de redes analisadas para cada uma das ordens de modelos, ao número de treinamentos realizados por configuração de rede e ao número de validações para cada uma das redes treinadas. T_{tr} e T_{val} representam, respectivamente, os números totais de treinamentos e validações realizados para cada estrutura ACP-RNA. Os resultados obtidos para algumas das redes treinadas serão expostos nas seções seguintes.

Tabela 5.2: Números relativos ao treinamento e validação das redes neurais.

ACP-RNA	Número de ordens	Número de redes	Número de treinamentos	Número de validações	T_{tr}	T_{val}
1	3	3	3	5	27	135
2	3	5	3	5	45	225
3	3	3	3	5	27	135
4 (95%)	1	3	3	5	9	45
4 (84%)	1	3	3	5	9	45
4 (75%)	1	3	3	5	9	45
Total					126	630

5.6 Análise comparativa das estruturas

Nesta etapa do trabalho são apresentados, através de tabelas e gráficos, os resultados obtidos para cada uma das estruturas de inferência ACP-RNA expostas no Capítulo 4. Além disso, também é exibida a inferência realizada por um sistema contendo apenas uma rede neural, sem o auxílio da técnica estatística ACP. O objetivo é fazer uma análise comparativa entre as estruturas quanto ao desempenho e à complexidade da rede neural de inferência, permitindo que seja realizada a seleção da melhor estrutura a ser utilizada em conjunto com o módulo de correção. Deve-se ressaltar que, nesse primeiro instante, as estruturas de inferência não são realimentadas por suas próprias estimativas.

De acordo com a Tabela 5.2, foram realizadas 5 validações para cada rede treinada. Em cada uma das 630 validações, as três variáveis de interesse eram estimadas, gerando, assim, $3 \times 630 = 1.890$ gráficos distintos a serem analisados. Devido a isso, foi adotado o EMQ como critério de seleção da melhor rede treinada para cada estrutura. Assim, é possível avaliar cada uma das variáveis de interesse em separado.

As tabelas que virão a seguir apresentam informações, tais como: número de neurônios na camada oculta (N_{No}), a média dos erros médios quadráticos das validações realizadas e o erros médios de validação de etano, propano e pentano em porcentagem; respectivamente representados por E_{et} , E_{pr} e E_{pe} .

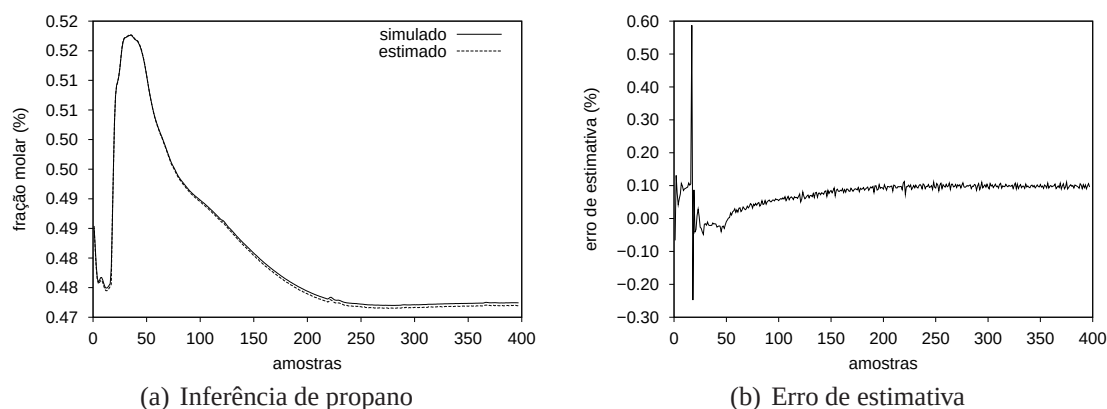
5.6.1 Análise da estrutura de inferência puramente neural

A Tabela 5.3 exibe as médias dos EMQs das 5 validações realizadas nas melhores redes neurais treinadas de um sistema de inferência sem a presença da técnica estatística ACP, de acordo com a estrutura de identificação NNARX.

Tabela 5.3: EMQs médios de validação da estrutura de inferência puramente neural.

Ordem	N_{No}	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ da rede	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
2	16	3,25e-08	1,92e-11	2,24e-09	3,47e-08	-0,04	0,02	-0,04
2	20	2,47e-08	3,36e-11	1,91e-09	2,67e-08	-0,00	0,07	0,06
2	24	2,66e-08	2,28e-11	2,38e-09	2,90e-08	-0,04	0,05	0,08
3	30	2,09e-08	2,10e-11	1,67e-09	2,26e-08	-0,00	0,08	-0,06
3	35	1,80e-08	2,54e-11	3,13e-09	2,12e-08	-0,00	0,10	-0,13
3	40	1,54e-08	1,80e-11	1,27e-09	1,67e-08	0,02	0,06	-0,05
4	42	4,32e-08	3,04e-11	1,85e-09	4,51e-08	-0,08	0,10	-0,02
4	46	1,31e-08	1,80e-11	7,56e-10	1,38e-08	-0,02	0,08	0,03
4	48	2,18e-08	3,20e-11	4,96e-09	2,68e-08	-0,00	0,13	-0,019

A partir da análise da Tabela 5.3, a melhor estrutura puramente neural adotada representa um modelo de quarta ordem ($n = 4$) e possui em sua camada oculta 46 neurônios. As Figuras 5.1 a 5.3 mostram a inferência realizada por essa rede, assim como o erro de estimativa em porcentagem.

Figura 5.1: Estrutura puramente neural - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).

É importante ressaltar que durante o processo de validação foram utilizados 5 conjuntos de dados, gerando uma grande quantidade de resultados e gráficos a serem analisados. Para simplificar a exibição gráfica desses resultados, optou-se por apresentar somente os resultados referentes a um desses conjuntos de validação. Decidiu-se então demonstrar os resultados da melhor estrutura de inferência referentes ao conjunto de validação em que esta teve maior dificuldade em acompanhar a dinâmica do processo, ou seja, apresentou o pior desempenho, maior EMQ. Dessa forma, as análises dos modelos de inferência serão apresentadas de acordo com a mais adversa situação de validação testada.

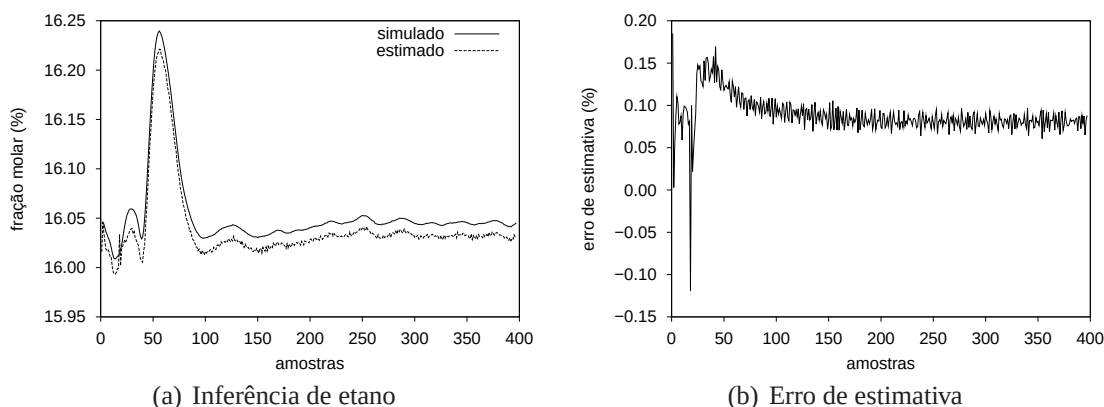


Figura 5.2: Estrutura puramente neural - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).

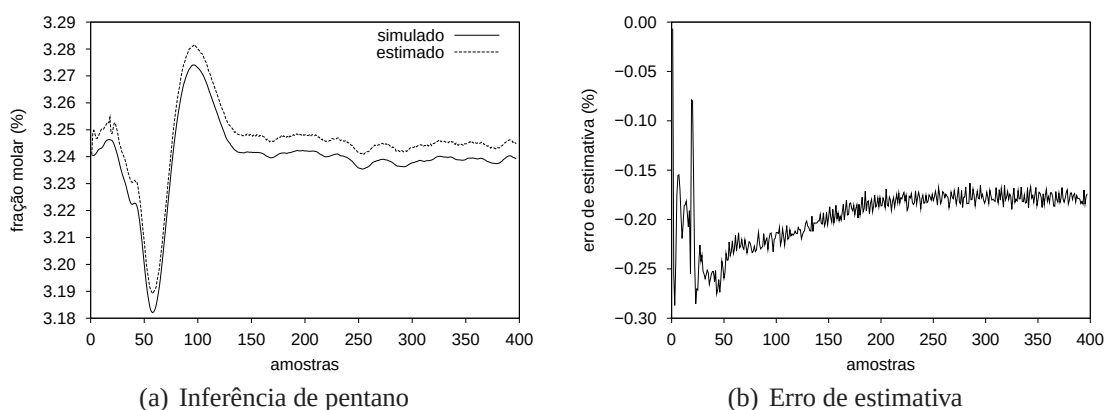


Figura 5.3: Estrutura puramente neural - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 46$).

Através dos gráficos citados e da tabela de resultados, é possível observar que a estrutura puramente neural fornece estimativas das variáveis primárias muito próximas dos valores fornecidos pelo processo simulado no HYSYS®. O modelo de inferência neural apresentou melhor estimativa da fração molar de propano no gás residual.

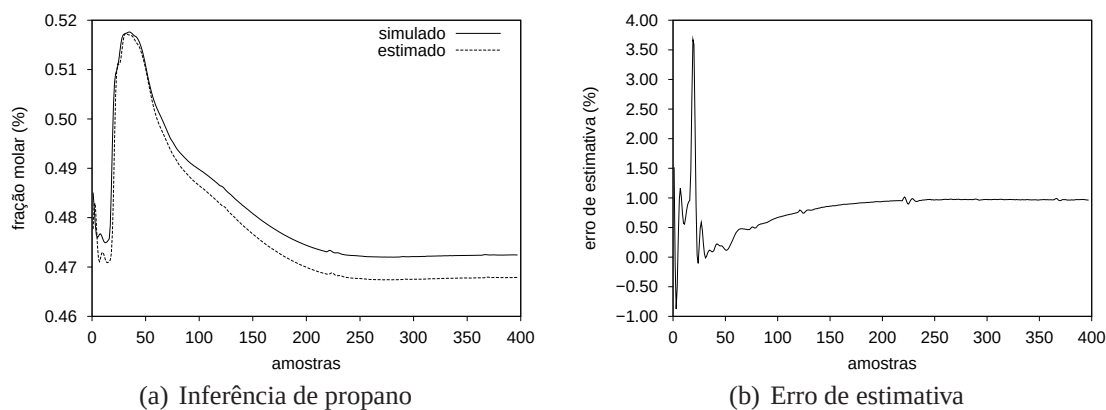
5.6.2 Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 1

A Tabela 5.4 exibe as médias dos EMQs das 5 validações realizadas nas melhores redes neurais treinadas da estrutura ACP-RNA 1. A partir da análise dessa tabela, percebe-se que a melhor estrutura de inferência ACP-RNA 1 obtida representa um modelo de quarta ordem ($n = 4$) e possui em seu módulo RNA uma rede com 10 neurônios em sua camada oculta.

Tabela 5.4: EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 1.

Ordem	N_{No}	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ da rede	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
2	5	6,91e-06	3,16e-10	5,06e-07	7,42e-06	-1,47	0,33	-0,48
2	10	6,54e-06	3,17e-10	4,55e-07	7,00e-06	-1,51	0,32	-1,15
2	15	6,60e-06	4,86e-10	4,46e-07	7,04e-06	-1,26	0,43	-0,07
3	5	6,39e-06	9,21e-10	5,15e-07	6,90e-06	-1,29	0,73	-0,13
3	10	8,61e-06	6,59e-10	4,57e-07	9,07e-06	-1,82	0,57	-0,27
3	15	7,79e-06	6,02e-10	6,14e-07	8,40e-06	-1,66	0,55	-0,06
4	5	3,21e-06	1,21e-09	5,75e-07	3,79e-06	-0,95	0,77	0,60
4	10	2,57e-06	1,30e-09	4,37e-07	3,01e-06	-0,39	0,84	0,24
4	15	2,90e-06	1,10e-09	5,19e-07	3,43e-06	-0,40	0,76	0,81

As Figuras 5.4 a 5.6 mostram a inferência realizada por essa rede, assim como o erro de estimativa em porcentagem, para o conjunto de dados de validação em que a melhor estrutura apresentou pior desempenho de validação, ou seja, maior EMQ. Pode-se notar que o desempenho dessa estrutura é bem abaixo do desempenho apresentado pela estrutura puramente neural.

Figura 5.4: Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).

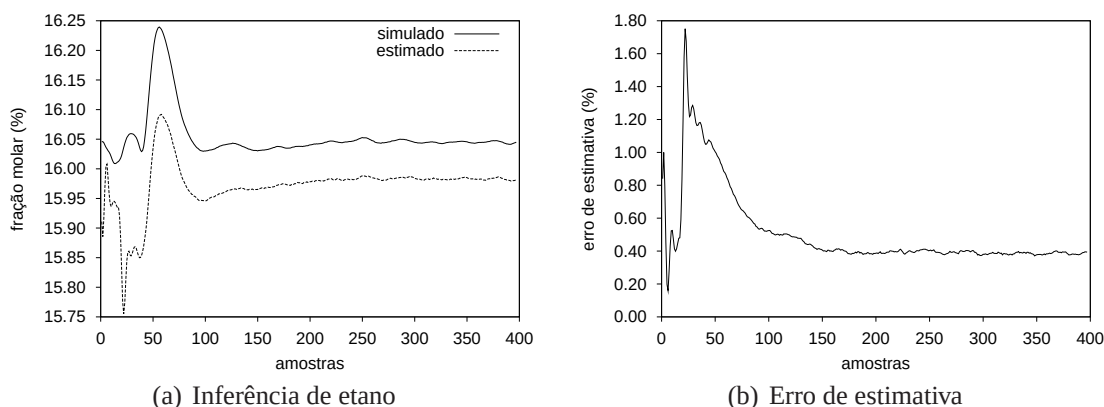


Figura 5.5: Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).

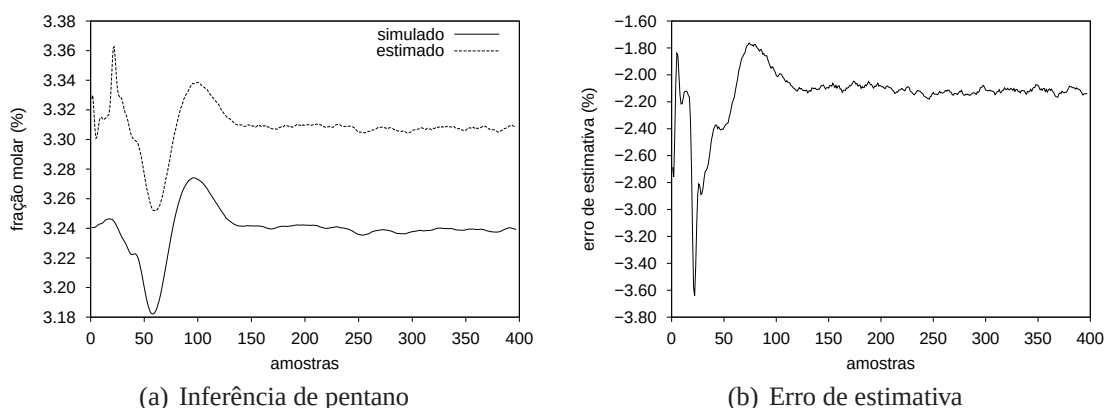


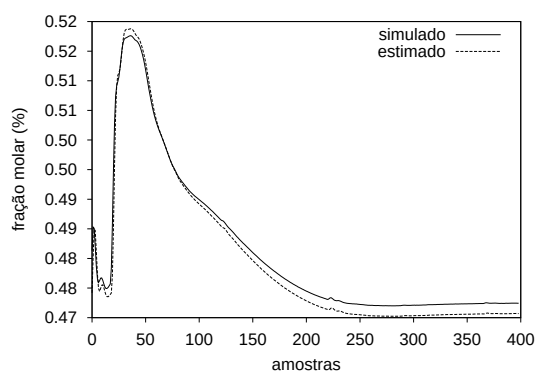
Figura 5.6: Estrutura ACP-RNA 1 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 10$).

5.6.3 Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 2

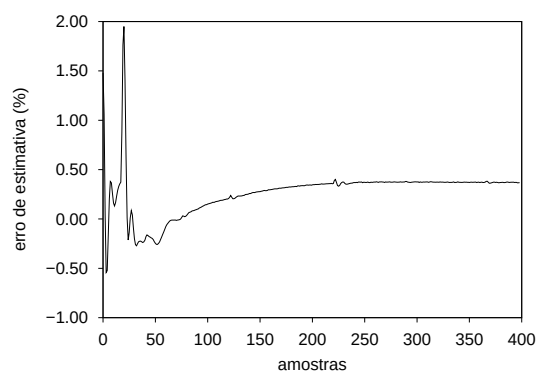
A Tabela 5.5 exibe as médias dos EMQs das 5 validações realizadas nas melhores redes neurais treinadas da estrutura de inferência ACP-RNA 2. A partir dessa tabela, percebe-se que a melhor estrutura ACP-RNA 2 obtida representa um modelo de quarta ordem ($n = 4$) e possui em seu módulo RNA uma rede com 16 neurônios em sua camada oculta. As Figuras 5.7 a 5.9 mostram a inferência realizada por essa rede, assim como o erro de estimativa em porcentagem, para o conjunto de dados de validação em que a melhor estrutura apresentou pior desempenho de validação, ou seja, maior EMQ.

Tabela 5.5: EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 2.

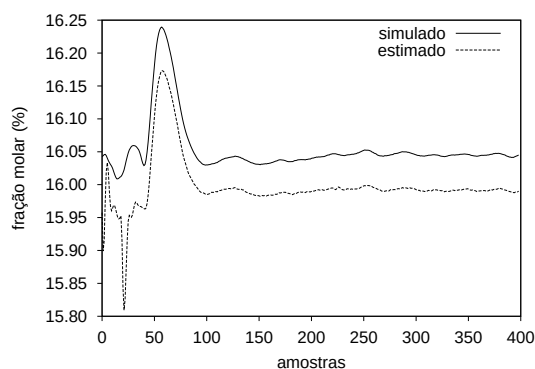
Ordem	N_{No}	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ da rede	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
2	8	3,47e-06	8,49e-10	2,38e-07	3,71e-06	-0,61	0,70	0,49
2	10	3,37e-06	1,03e-09	2,29e-07	3,60e-06	-0,57	0,82	0,30
2	15	2,45e-06	1,00e-09	2,39e-07	2,69e-06	-0,32	0,80	0,93
3	9	2,10e-06	1,21e-09	3,19e-07	2,42e-06	-0,56	0,80	0,69
3	12	1,98e-06	8,13e-10	2,69e-07	2,25e-06	-0,56	0,58	0,56
3	15	2,13e-06	1,40e-09	3,51e-07	2,49e-06	-0,37	0,86	0,84
4	8	1,14e-06	3,55e-10	1,38e-07	1,28e-06	-0,28	0,31	0,44
4	12	1,03e-06	3,90e-10	1,61e-07	1,19e-06	-0,18	0,46	0,48
4	16	1,33e-06	3,48e-10	1,57e-07	1,49e-06	-0,07	0,35	0,43



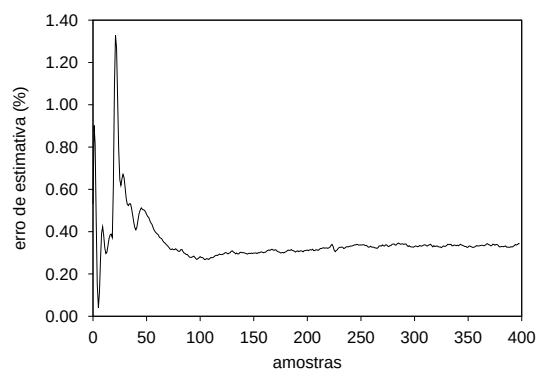
(a) Inferência de propano



(b) Erro de estimativa

Figura 5.7: Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).

(a) Inferência de etano



(b) Erro de estimativa

Figura 5.8: Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).

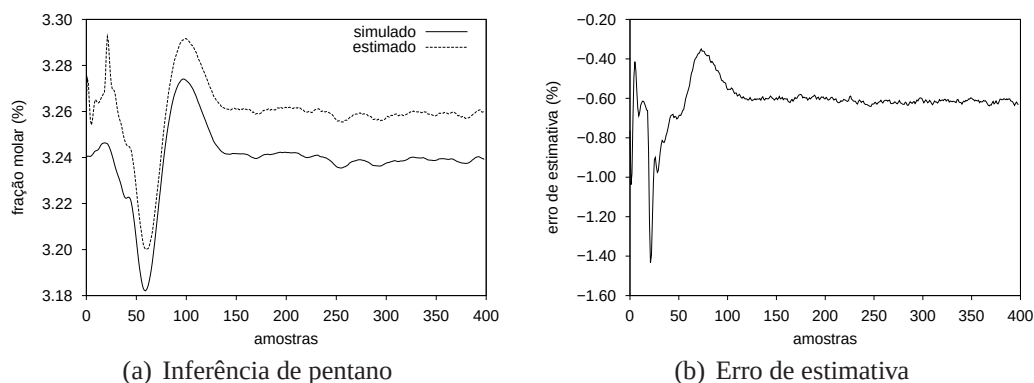


Figura 5.9: Estrutura ACP-RNA 2 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 16$).

Os resultados apresentados demonstram que a estrutura ACP-RNA 2 possui melhor desempenho que a estrutura ACP-RNA 1, entretanto, ainda pior que a estrutura puramente neural. Observando o número de componentes selecionadas por essas estruturas, pode-se questionar a validade dessa comparação, uma vez que a estrutura ACP-RNA 1 possui uma quantidade menor de CPs. Isso pode levar a crer que esta estrutura utiliza uma menor quantidade de informações do que a estrutura ACP-RNA 2. Entretanto, deve-se lembrar que o ponto de corte γ , para os dois casos, é idêntico e igual a 95%.

5.6.4 Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 3

A Tabela 5.6 exibe as médias dos EMQs das 5 validações realizadas nas melhores redes neurais treinadas da estrutura ACP-RNA 3.

Tabela 5.6: EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 3.

Ordem	N_{No}	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ da rede	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
2	10	3,73e-08	6,70e-11	5,57e-09	4,29e-08	-0,04	0,18	-0,05
2	13	5,95e-08	3,88e-11	3,48e-09	6,30e-08	-0,06	0,09	0,00
2	16	5,56e-08	3,48e-11	4,17e-09	5,98e-08	-0,07	0,01	-0,05
3	14	3,72e-08	3,94e-11	3,77e-09	4,11e-08	-0,07	0,09	0,08
3	18	5,74e-08	3,48e-11	6,04e-09	6,35e-08	-0,03	0,07	0,10
3	22	3,47e-08	3,44e-11	1,80e-09	3,65e-08	0,00	0,06	0,02
4	15	3,47e-08	2,70e-11	2,94e-09	3,77e-08	0,02	0,06	-0,09
4	20	2,64e-08	2,82e-11	3,42e-09	2,98e-08	-0,02	0,04	-0,07
4	25	2,48e-08	2,16e-11	8,79e-09	3,36e-08	-0,02	0,00	0,11

A partir da análise da Tabela 5.6, percebe-se que a melhor estrutura ACP-RNA 3 obtida representa um modelo de quarta ordem ($n = 4$) e possui em seu módulo RNA uma rede com 20 neurônios em sua camada oculta. As Figuras 5.10 a 5.12 mostram a inferência realizada por essa rede, assim como o erro de estimativa em porcentagem, para o conjunto de dados de validação em que a melhor estrutura apresentou pior desempenho de validação, ou seja, maior EMQ.

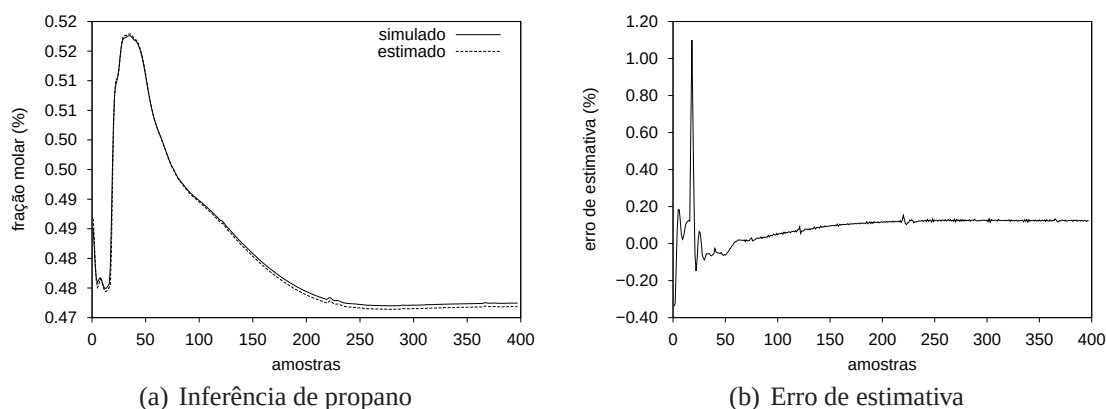


Figura 5.10: Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de propano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).

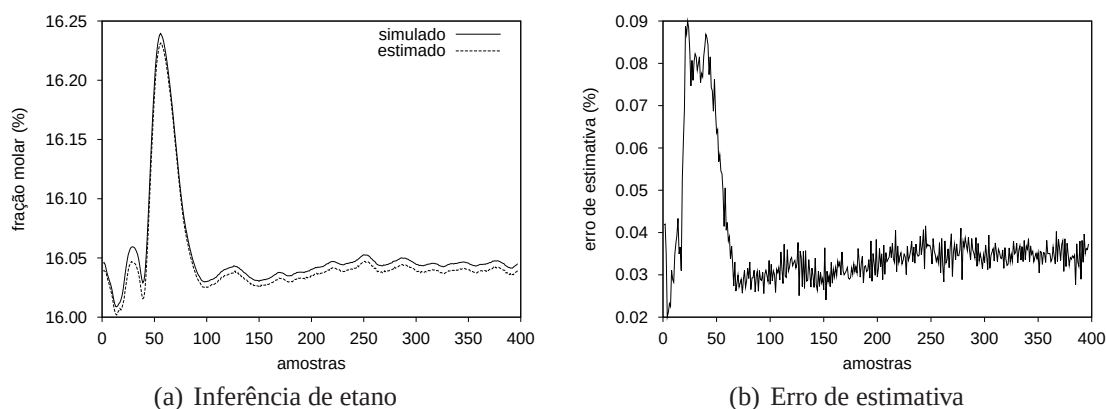


Figura 5.11: Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de etano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).

Das estruturas apresentadas até o momento, a estrutura ACP-RNA 3 foi a que apresentou o melhor desempenho. Além disso, o seu desempenho é bem similar ao desempenho da estrutura puramente neural.

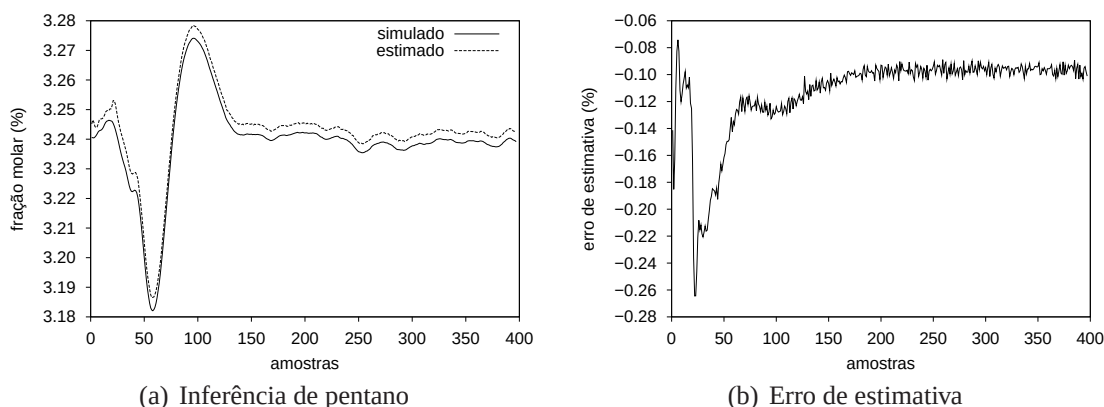


Figura 5.12: Estrutura ACP-RNA 3 - Validação de pentano ($n = 4$ e $N_{No} = 20$).

5.6.5 Análise da estrutura de inferência ACP-RNA 4

Os resultados apresentados na Tabela 5.7 foram obtidos de redes neurais contidas nos módulos RNAs de estruturas de inferência ACP-RNA 4. Para essa estrutura, foram analisados apenas modelos de quarta ordem. Através das estruturas ACP-RNA anteriormente estudadas, foi possível notar que essa ordem de modelo é a que melhor representa o processo. A tabela citada mostra os EMQs de validação para as melhores redes neurais treinadas dessa estrutura com $\gamma = 84\%$ e $\gamma = 75\%$.

Tabela 5.7: EMQs médios de validação da estrutura de inferência ACP-RNA 4 ($n = 4$).

γ	N_{No}	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ validação	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
84%	28	1,76e-08	1,54e-11	1,53e-09	1,91e-08	0,01	0,03	-0,08
84%	32	1,48e-08	1,92e-11	9,05e-10	1,57e-08	0,02	0,07	0,03
84%	36	3,32e-08	1,80e-11	3,78e-09	3,70e-08	0,04	0,06	-0,06
75%	24	3,08e-08	1,26e-11	2,43e-09	3,32e-08	-0,01	0,02	-0,01
75%	28	3,38e-08	1,78e-11	2,63e-09	3,64e-08	0,02	0,03	0,01
75%	32	5,27e-08	1,34e-11	2,18e-09	5,49e-08	0,04	-0,02	-0,04

A partir da análise da tabela percebe-se que para $\gamma = 84\%$ a melhor estrutura ACP-RNA 4 obtida possui em seu módulo RNA uma rede com 28 neurônios em sua camada oculta. Para $\gamma = 75\%$ a melhor estrutura possui uma rede neural com 24 neurônios em sua camada oculta. As Figuras 5.13 a 5.15 mostram a inferência realizada para a rede com $\gamma = 84\%$.

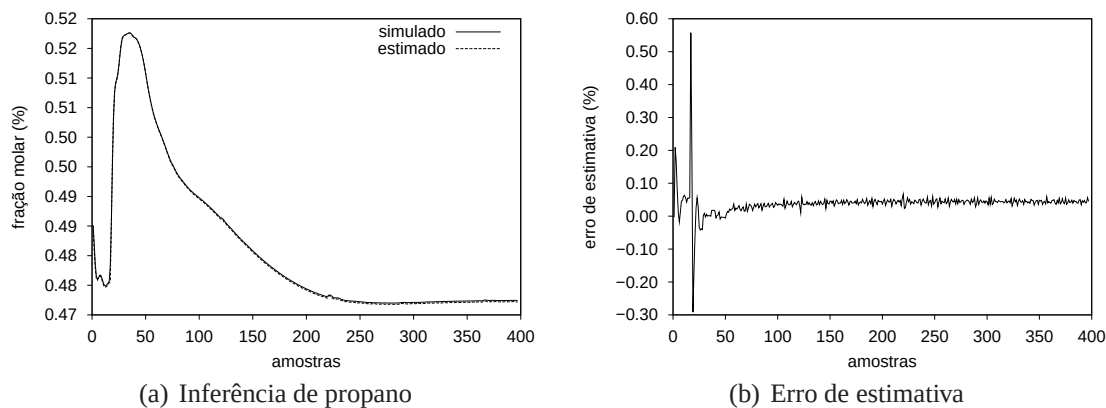


Figura 5.13: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de propano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$).

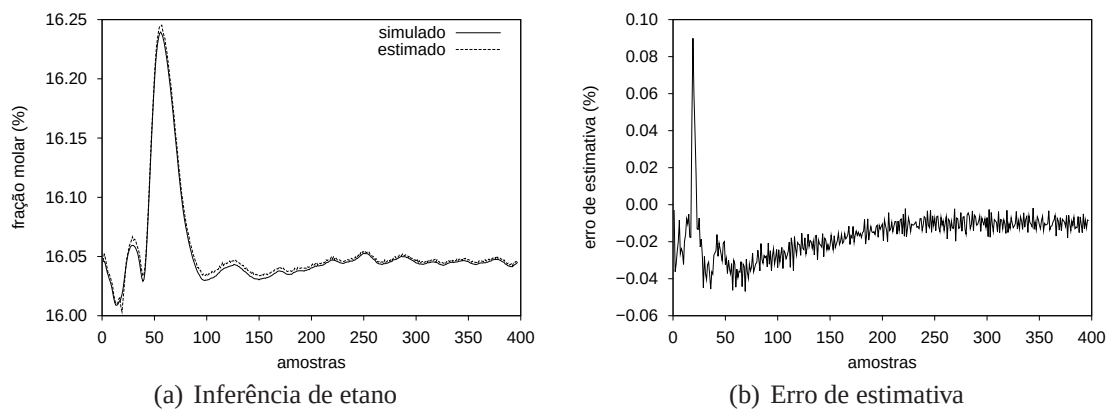


Figura 5.14: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de etano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$).

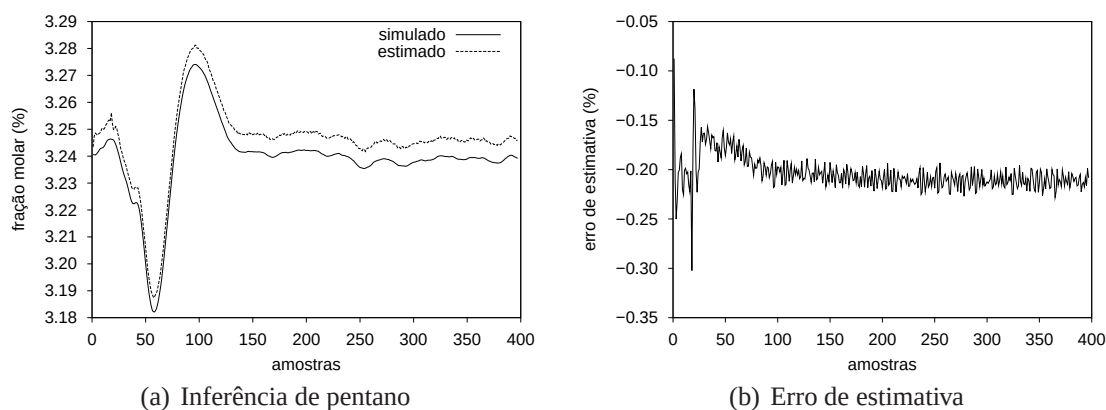


Figura 5.15: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de pentano ($n = 4$, $\gamma = 84\%$ e $N_{No} = 28$).

A estrutura ACP-RNA 4 com $\gamma = 84\%$ apresenta excelentes resultados de estimativa das frações molares de propano no gás residual e etano no gás liquefeito de petróleo.

As figuras 5.16 a 5.18 mostram a inferência realizada pela estrutura ACP-RNA 4 com $\gamma = 75\%$. Ao reduzir o ponto de corte para 75%, a estrutura ACP-RNA 4 continuou apresentando um bom desempenho. Entretanto, é fácil notar que essa estrutura com $\gamma = 84\%$ fornece melhores estimativas das variáveis primárias do processo em estudo. Isso, de certa forma, já era esperado, pois, nesse último caso, as componentes principais selecionadas preservam uma maior quantidade de informação dos dados originais.

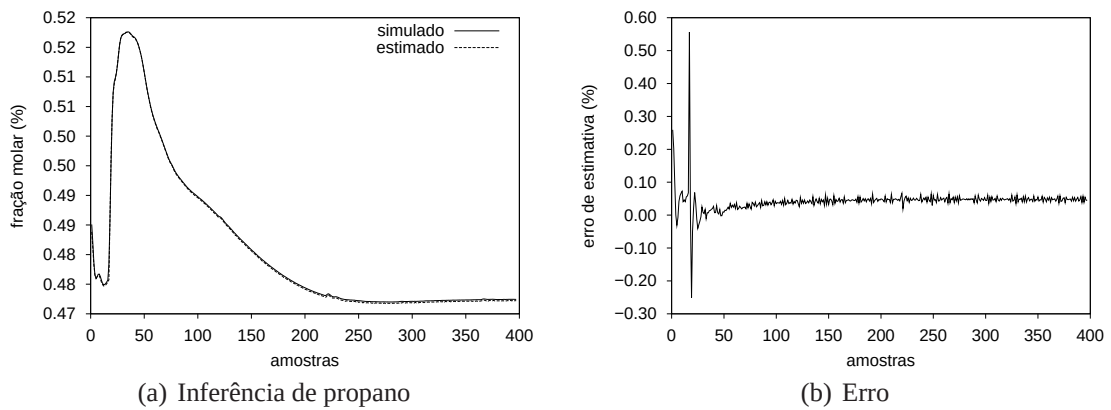


Figura 5.16: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de propano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$).

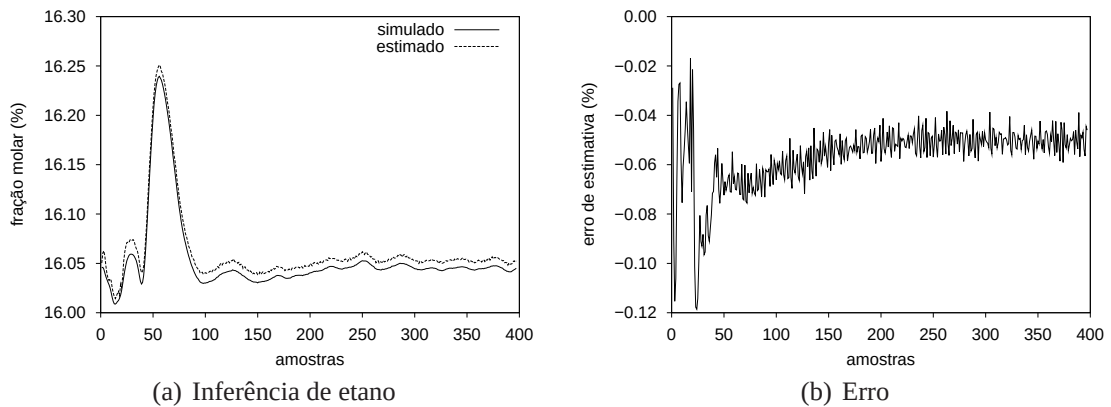


Figura 5.17: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de etano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$).

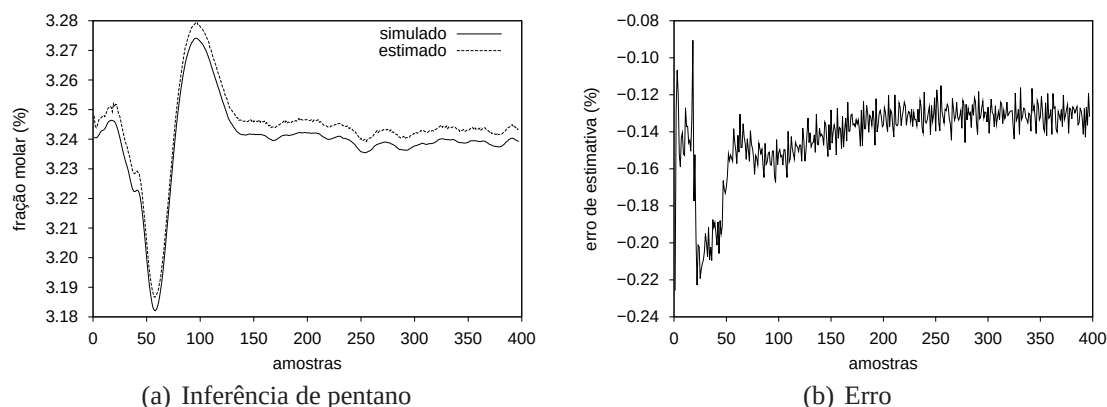


Figura 5.18: Estrutura ACP-RNA 4 - Validação de pentano ($n = 4$, $\gamma = 75\%$ e $N_{No} = 24$).

Após demonstrar alguns dos resultados obtidos por cada uma das estruturas de inferência propostas, a próxima seção irá apresentar a estrutura selecionada para ser utilizada junto ao módulo de correção. Formando assim, o sistema completo de inferência proposto neste trabalho.

5.7 Seleção da estrutura de inferência ACP-RNA

De acordo com o apresentado nas Tabelas 5.4 a 5.7, pode-se concluir que dentre os testes realizados as melhores representações da dinâmica do processo foram obtidas por modelos ACP-RNA de quarta ordem.

Tabela 5.8: Resultados das melhores redes neurais treinadas ($n = 4$).

ACP-RNA	EMQ etano	EMQ propano	EMQ pentano	EMQ validação	E_{et}	E_{pr}	E_{pe}
Neural	1,31e-08	1,80e-11	7,56e-10	1,38e-08	-0,02	0,08	0,03
1 (95%)	2,57e-06	1,30e-09	4,37e-07	3,01e-06	-0,39	0,84	0,24
2 (95%)	1,98e-06	8,13e-10	2,69e-07	2,25e-06	-0,56	0,58	0,56
3 (95%)	3,47e-08	3,44e-11	1,80e-09	3,65e-08	0,00	0,06	0,02
4 (84%)	1,76e-08	1,54e-11	1,53e-09	1,91e-08	0,00	0,03	-0,08
4 (75%)	3,08e-08	1,26e-11	2,43e-09	3,32e-08	-0,01	0,02	-0,01

A Tabela 5.8 mostra as melhores redes treinadas dos modelos de inferência de quarta ordem analisados. Nessa tabela, o valor entre parênteses representa o ponto de corte utilizado na aplicação da técnica de análise de componentes principais.

Na Tabela 5.9 é exposto um resumo das características da RNA de cada uma das estruturas ACP-RNA e da estrutura puramente neural apresentadas na tabela anterior. Nessa

tabela, k representa o número de componentes principais selecionadas pelo módulo ACP, N_{N_o} o número de neurônios da camada oculta da rede neural e T_t o tempo de treinamento da rede em segundos. Para garantir a credibilidade da comparação dos T_t , os treinamentos foram realizados em um único computador, nas mesmas condições de processamento.

Tabela 5.9: Resumo das características das RNAs ($n = 4$).

Modelo	k	Número de entradas	N_{N_o}	N_{CS}	T_t (s)	EMQ validação
Neural	NA	44	46	2162	106,80	1,38e-08
ACP-RNA 1 (95%)	10	10	10	130	9,70	3,01e-06
ACP-RNA 2 (95%)	9 e 3	12	12	150	13,03	2,25e-06
ACP-RNA 3 (95%)	8	20	20	460	28,80	2,25e-06
ACP-RNA 4 (84%)	5	32	28	980	60,96	1,91e-08
ACP-RNA 4 (75%)	4	28	24	744	42,88	3,32e-08

A partir da análise das Tabelas 5.8 e 5.9 pode-se tirar importantes conclusões. De uma forma geral, nota-se que todas as estruturas ACP-RNA proporcionaram uma redução da complexidade da rede neural de inferência quando comparada com o sistema de inferência formado por uma única rede neural. Através do T_t , observa-se que quanto maior a complexidade da rede, maior é o seu tempo de treinamento.

As estruturas ACP-RNA 1 e 2 apresentam redes neurais bem menos complexas do que a rede do sistema puramente neural. Entretanto, o desempenho de estimação dessas estruturas fica bem abaixo do esperado. As duas melhores estruturas ACP-RNA propostas foram as estruturas 3 e 4. Essas estruturas apresentaram resultados próximos aos do sistema de inferência formado apenas por uma rede neural NNARX.

Fazendo-se um análise comparativa apenas entre as estruturas ACP-RNA 3 e 4, ao considerar apenas os EMQs expostos pela Tabela 5.8, pode-se concluir que a estrutura ACP-RNA 4 com ponto de corte de 84% apresenta desempenho um pouco melhor. Entretanto, como neste trabalho pretende-se encontrar um sistema de inferência que alie eficiência com simplicidade, a complexidade do módulo RNA também é levado em consideração.

O aumento de 60% no número de entradas e de 40% no número de neurônios da camada oculta da estrutura ACP-RNA 4 ($\gamma = 84\%$) com relação à estrutura ACP-RNA 3 refletiram em um aumento de 113,04% no número de conexões e, conseqüentemente, de 111,67% do tempo de treinamento. Dessa forma, o diferencial entre essas estruturas encontra-se em seus números de conexões sinápticas, uma vez que os desempenhos das

estruturas ACP-RNA 3 e 4 são próximos. Sendo assim, a estrutura ACP-RNA 3 foi a estrutura selecionada para ser utilizada nas etapas restantes deste trabalho.

5.7.1 Acoplamento da estrutura ao processo

Para confirmar a funcionalidade da estrutura selecionada é necessário acoplá-la ao sistema simulado, formado pelas colunas deetanizadora e debutanizadora, e comparar as frações molares das variáveis primárias fornecidas pelo *software* de simulação e pelo sistema de inferência proposto, simultaneamente, e, em tempo real.

Na primeira análise realizada, optou-se por alterar os valores dos *set points* dos controladores de temperatura TIC-100 e TIC-102-2, localizados, respectivamente, nas colunas deetanizadora e debutanizadora. Essa operação pode ser considerada rotineira por ser realizada por operadores humanos, ou por alguma estratégia de controle, uma vez que esses controladores influenciam diretamente em todo o funcionamento do processo.

Os valores de referência dos controladores citados foram mantidos em seus valores padrão de operação até a centésima amostra, quando, então, foram alterados por meio da aplicação de degraus negativos em seus valores. Na ducentésima quinquagésima amostra foram aplicados degraus positivos aos *set points* dos controladores TIC-100 e TIC-102-2. As Figuras 5.19 a 5.21 apresentam uma comparação entre as variáveis primárias estimadas e as variáveis primárias fornecidas pela simulação executada no *software* HYSYS®.

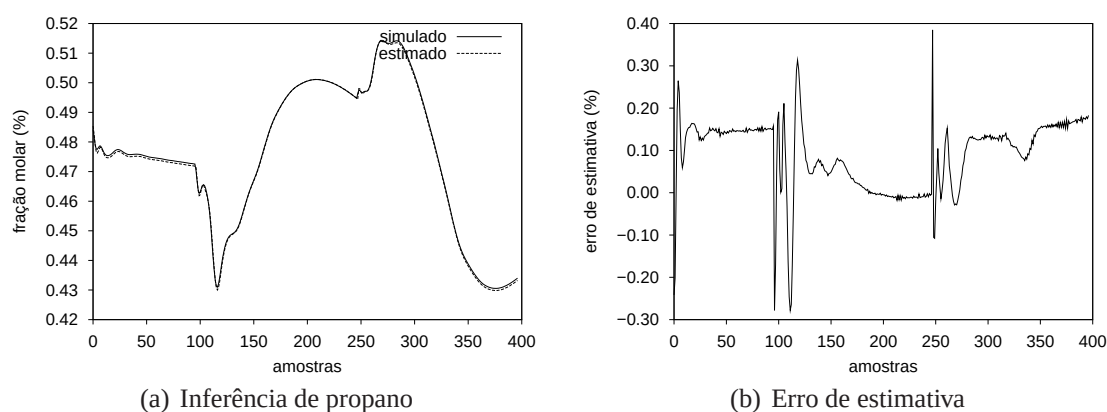


Figura 5.19: Validação de propano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

A fração molar de propano no gás residual apenas sofre influência dos degraus aplicados no valor de referência do controlador TIC-100, por ser este localizado na coluna deetanizadora. Na Figura 5.19 percebe-se que, ao aplicar o degrau negativo, a fração molar de propano diminui rapidamente e em seguida sofre um lento aumento em seu

valor. Em contrapartida, com a aplicação do degrau positivo no *set point* do controlador TIC-100, o inverso acontece. Isso ocorre devido à diminuição e, em seguida, ao aumento da vazão do óleo térmico ocasionada pela porcentagem de abertura da válvula VLV-101, que é controlada pelos controladores em cascata TIC-100 (mestre) e FIC-102 (escravo).

A aplicação do degrau negativo no *set point* do controlador TIC-100 faz com que a temperatura diminua no interior da coluna deetanizadora. Dessa forma, uma menor quantidade de propano sai junto ao gás residual no topo dessa coluna. Entretanto, o etano, como pode ser visto na Figura 5.20, apresenta uma grande queda em sua vaporização. Portanto, mesmo com a diminuição da quantidade absoluta de propano no gás residual, a grande diminuição de etano na composição desse produto faz com que a fração molar de propano aumente no gás residual. Em seguida, quando se aumenta a temperatura da coluna, tem-se uma maior vaporização de propano. Mas em contrapartida, ocorre uma grande vaporização de etano nessa coluna. Por essa razão, a fração molar de propano no gás residual diminui.

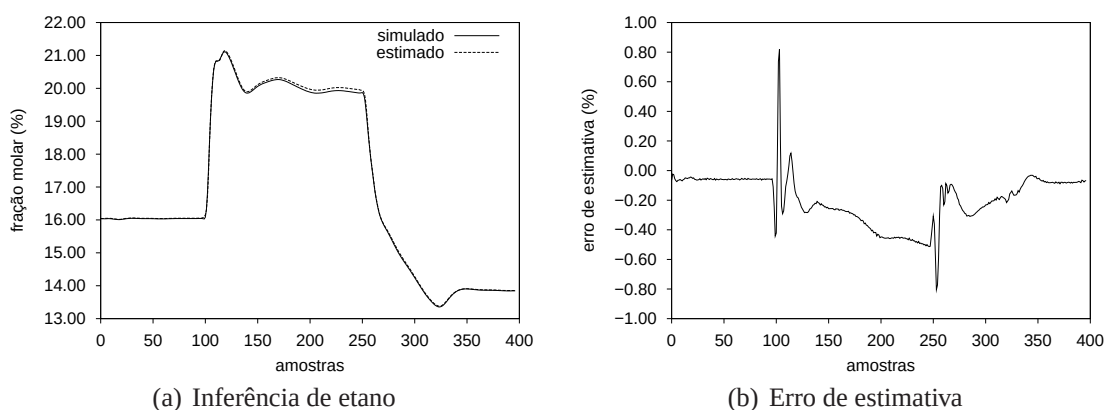


Figura 5.20: Validação de etano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

Na Figura 5.20 nota-se o aumento da quantidade de etano no GLP quando é aplicado o degrau negativo aos *set points* dos controladores TIC-100 e TIC-102-2. Quando o degrau positivo é aplicado, o inverso ocorre, diminuindo a fração molar de C2 no GLP. Nesse teste, a quantidade de etano no GLP é influenciada essencialmente pelo controlador TIC-100. Quando a temperatura da coluna deetanizadora aumenta, menor quantidade de etano chega à coluna debutanizadora por meio do LGN. Quando a temperatura dessa coluna diminui, uma maior quantidade de etano deixa de ser vaporizado, causando um excesso desse composto no LGN que irá alimentar a coluna debutanizadora. A temperatura interna da coluna debutanizadora, bem maior do que a da coluna deetanizadora, faz com que o C2 que chega àquela coluna seja completamente vaporizado, contaminando o

GLP.

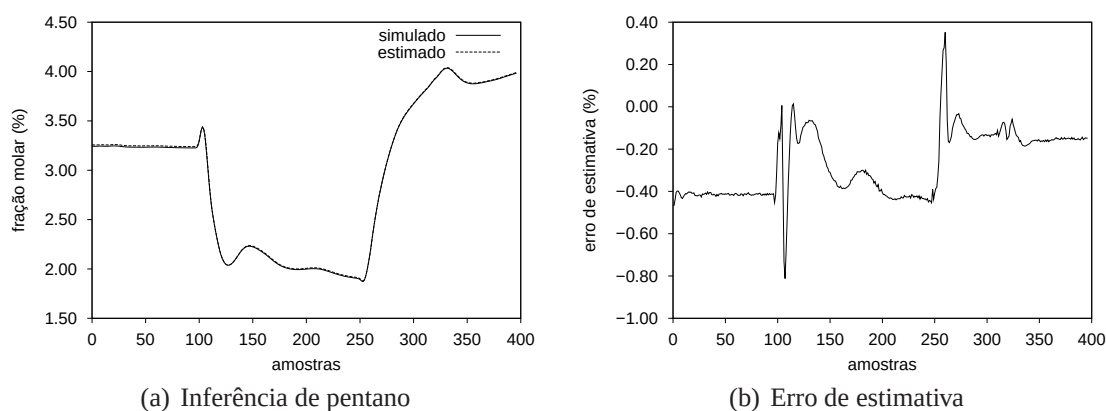


Figura 5.21: Validação de pentano acoplando a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (Degraus, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

Na Figura 5.21 nota-se que com o degrau negativo aplicado no controlador TIC-102-2, ocorre uma diminuição da temperatura no interior da coluna debutanizadora, reduzindo a vaporização de pentano contaminante no GLP. Aplicando-se o degrau positivo nesse controlador, o aumento de temperatura no interior da coluna debutanizadora faz com que maior quantidade de pentano vaporize, aumentando a contaminação do GLP.

Percebe-se que nos três casos o sistema de inferência conseguiu acompanhar satisfatoriamente a dinâmica do processo simulado. O erro de estimativa, em valores absolutos, não chega a ultrapassar 0,9% para a inferência de etano e 0,4% para as inferências de propano e pentano.

Na segunda análise, buscou-se testar a eficiência da estrutura ACP-RNA 3 aplicando-se sinais PRS em todos os *set points* dos controladores da Tabela 4.1. Esse caso, apesar de representar uma situação improvável de ocorrer em um estado normal de operação das colunas, é bastante válido para avaliar o desempenho da estrutura de inferência em situações anormais. Deve-se comentar que os sinais PRS aplicados nesta validação são bem mais suaves do que os sinais utilizados para a coleta de dados experimentais utilizadas no treinamento das redes neurais dos módulos RNA. As Figuras 5.22 a 5.24 apresentam uma comparação entre as variáveis primárias estimadas e as variáveis primárias fornecidas pelo *software* HYSYS®.

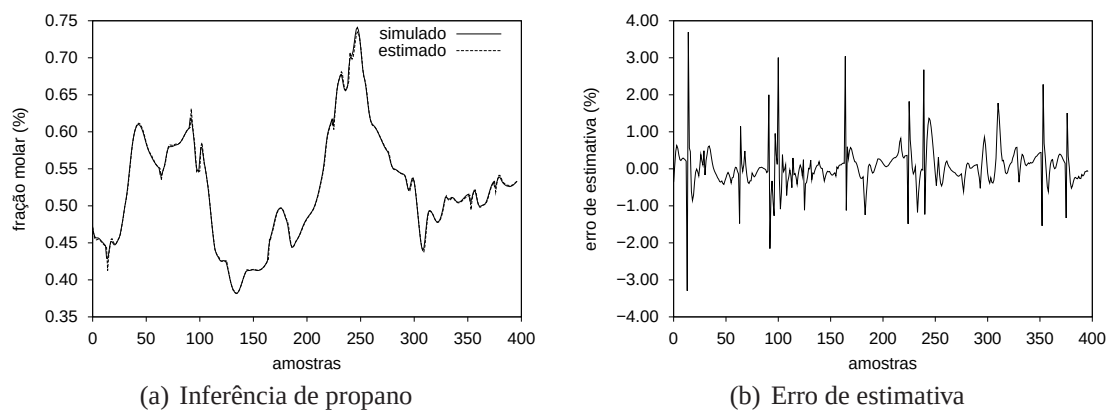


Figura 5.22: Validação de propano acoplado a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

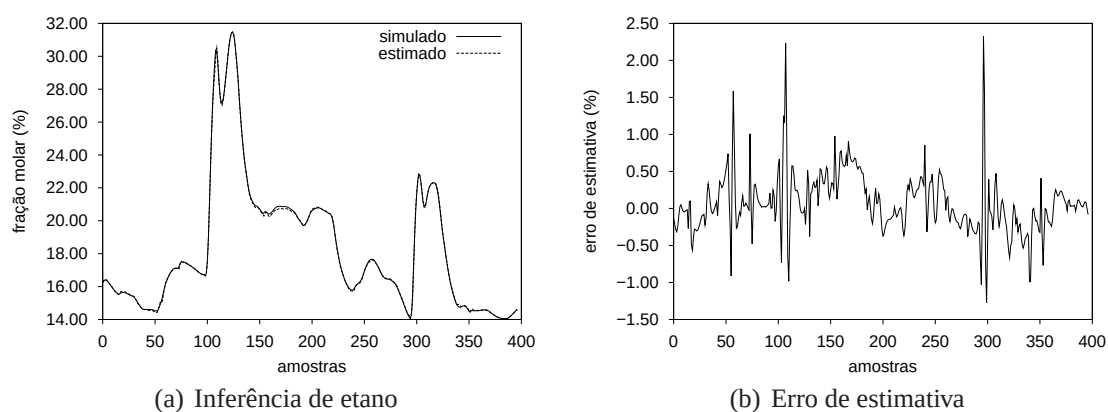


Figura 5.23: Validação de etano acoplado a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

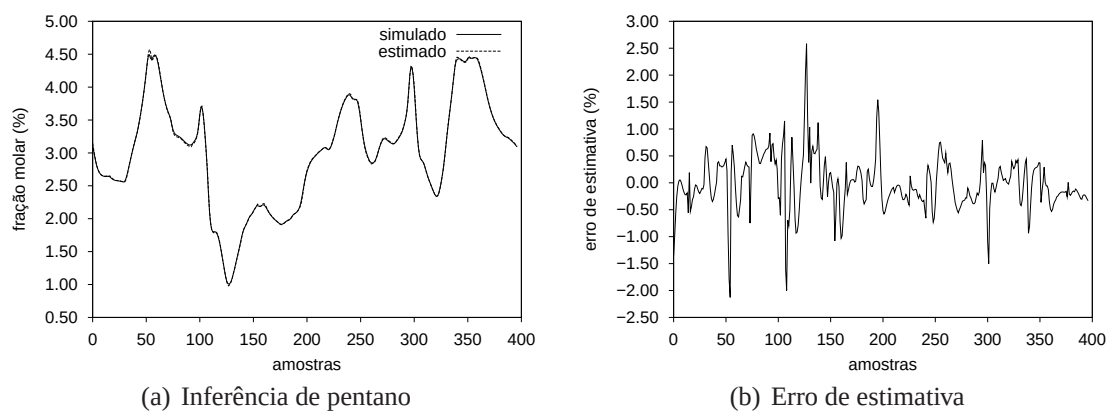


Figura 5.24: Validação de pentano acoplado a estrutura ACP-RNA 3 ao processo simulado (PRS, $n = 4$ e $N_{No} = 20$).

Observa-se que as variações mais bruscas nos *set points* dos controladores do processo simulado fizeram com que o erro de estimativa da estrutura ACP-RNA 3 apresentasse um aumento quando comparado com o resultado anterior. Entretanto, de maneira similar aos casos das Figuras 5.19 a 5.21, pode-se notar que a estrutura inferencial selecionada é capaz de acompanhar a dinâmica do processo simulado. Apesar de se tratar de uma situação incomum na prática, os erros de estimativa não ultrapassam 4% para o propano, 2,5% para o etano e 3% para o pentano.

5.8 Inserção do módulo de correção

A partir deste ponto do trabalho, serão apresentados os resultados encontrados após a inserção do módulo de correção à estrutura ACP-RNA anteriormente selecionada. Antes disso, é importante compreender o problema que ocorre quando o sistema de inferência trabalha utilizando em suas entradas estimativas das variáveis primárias do processo.

5.8.1 O problema da realimentação

A Figura 5.25 apresenta as estimativas realizadas pelo sistema de inferência realimentado, estando o processo em regime permanente. Essa figura apresenta as curvas das variáveis primárias adicionando-lhes -20%, -15%, -10%, -5%, 5%, 10%, 15% de seus valores. Isso permite analisar numericamente o quanto as inferências estão se distanciando do valor das variáveis primárias fornecidas pelo processo simulado.

Até a tricentésima amostra o sistema utiliza em suas entradas informações somente do sistema simulado, tem-se portanto o sistema não realimentado. Devido a isso, as estimativas da estrutura de inferência ACP-RNA 3 acompanham com bastante eficiência as variáveis primárias fornecidas pelo processo simulado.

Depois da tricentésima amostra, o sistema de inferência torna-se realimentado, utilizando informações das variáveis primárias estimadas como entrada do sistema. Nota-se que a partir desse ponto, as estimativas da estrutura ACP-RNA 3 começam a divergir dos valores fornecidos pelo processo simulado. Apesar disso, o sistema de inferência não entra em estado de instabilidade, por volta da milésima ducentésima amostra as estimativas da estrutura ACP-RNA 3 encontram-se praticamente estabilizadas.

É interessante observar o comportamento do sistema de inferência quando inicia-se a realimentação. Nota-se que a estimativa da fração molar de pentano sofre uma acentuada “perturbação”. Isso pode ser decorrente da natureza não linear da rede neural, que reage dessa forma ao chaveamento do sistema de não realimentado para realimentado.

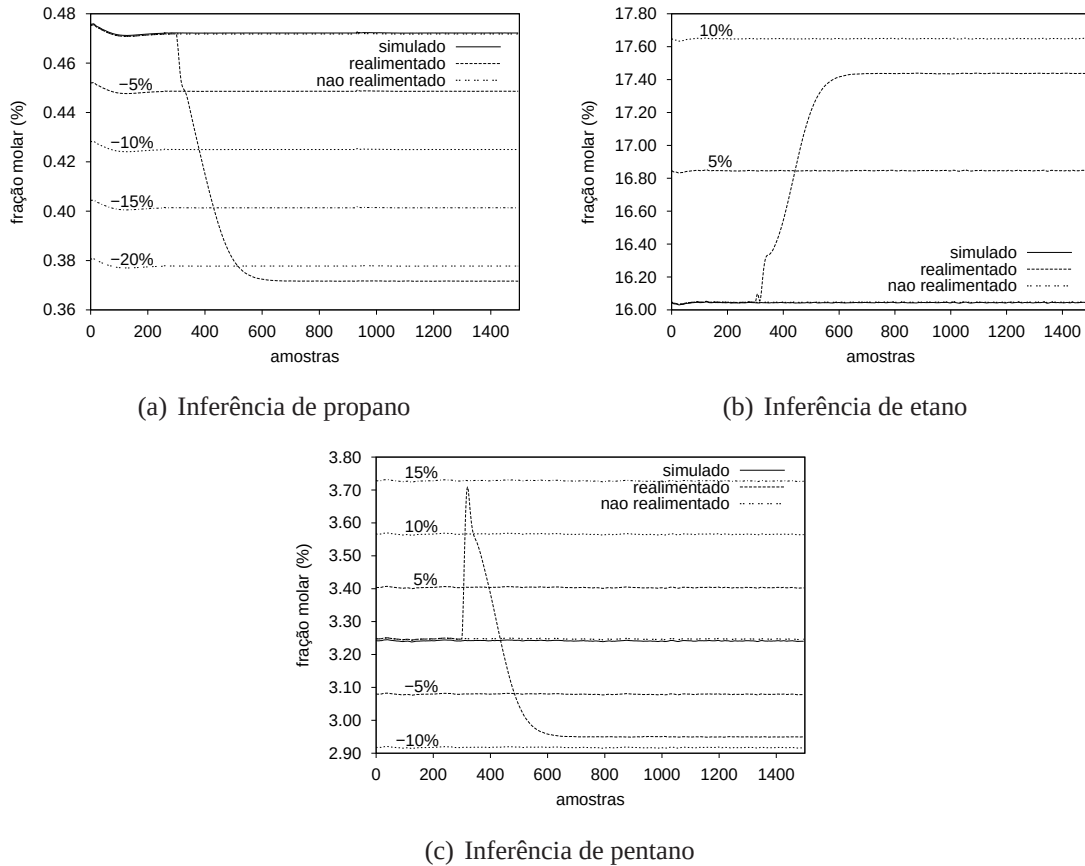


Figura 5.25: Processo estável com o sistema de referência realimentado (ACP-RNA 3, $n = 4$, $N_{No} = 20$).

Analisando a Tabela 5.6, pode-se notar que a diferença nas estimativas da estrutura ACP-RNA 3 de quarta e de segunda ordem não é tão significativa. Apesar da estrutura de quarta ordem apresentar melhor desempenho, é interessante também analisar o comportamento da estrutura de segunda ordem estando o sistema de inferência realimentado. Dessa forma, é possível verificar a influência do número de regressores utilizados no sistema de inferência quando este utiliza como parte de suas entradas os valores das variáveis primárias por ele inferido. Devido a isso, decidiu-se fazer a mesma análise quanto à realimentação da estrutura de inferência ACP-RNA 3 de segunda ordem, contendo 16 neurônios na camada oculta de sua rede neural. A Figura 5.26 exibe os resultados obtidos.

A partir da tricentésima amostra, a estrutura ACP-RNA passa a funcionar de maneira realimentada. Como no sistema de quarta ordem, as estimativas do sistema de inferência começam a divergir dos valores fornecidos pelo processo simulado até o momento em que atinge seu ponto de estabilização.

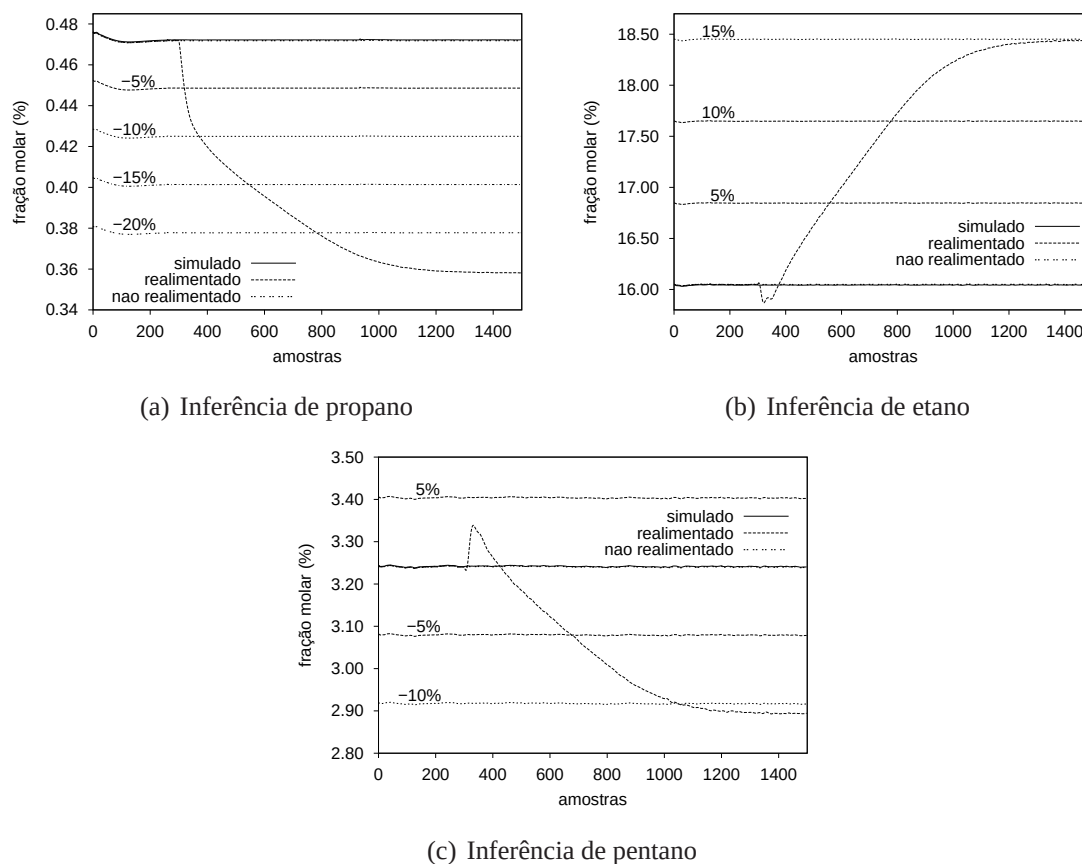


Figura 5.26: Processo estável com o sistema de inferência realimentado (ACP-RNA 3, $n = 2$, $N_{No} = 16$).

A diferença entre os sistemas de segunda e quarta ordem são facilmente notadas. O sistema de segunda ordem diverge mais lentamente, entretanto, quando estável, apresenta maior erro de estimativa. Outro fato observado é que a estimativa do pentano pelo sistema de segunda ordem não apresenta uma “perturbação” tão acentuada como a apresentada pelo sistema de quarta ordem. Pode-se dizer que o sistema de segunda ordem, por possuir em suas entradas menor quantidade de informações passadas relativas às variáveis primárias do processo, é atingido mais lentamente pelo erro de estimativa que vai se “acumulando” com o passar do tempo. Por esse mesmo motivo, o sistema de segunda ordem apresenta menor perturbação durante o chaveamento do sistema de não realimentado para realimentado. Em contrapartida, o modelo de quarta ordem melhor representa o processo, portanto, quando estabilizado apresenta menores erros de estimativa.

A Tabela 5.10 apresenta informações adicionais às Figuras 5.25 e 5.26, indicando o número de amostras (am) que os sistemas de inferência de quarta e segunda ordem levam para atingir pela primeira vez as curvas 5%, -5%, 10%, -10% e assim por diante; e o erro

percentual de regime em módulo e_r . É importante comentar que a contagem do número de amostras inicia-se a partir da tricentésima amostra e que as amostras são fornecidas pelo sistema de inferência de minuto a minuto.

Tabela 5.10: Sistema realimentado e sem correção (processo estável).

Sistema de Segunda Ordem					
Propano	-5%	-10%	-15%	-20%	e_r
	21 am	73 am	246 am	484 am	24.16%
Etano	5%	10%	-	-	e_r
	260 am	478 am	-	-	14.93%
Pentano	-5%	-10%	-	-	e_r
	378 am	750 am	-	-	10.68%
Sistema de Quarta Ordem					
Propano	-5%	-10%	-15%	-20%	e_r
	32 am	81 am	132 am	217 am	21.30%
Etano	5%	-	-	-	e_r
	143 am	-	-	-	8.68%
Pentano	5%	10%	-5%	-	e_r
	8 am	12 am	186 am	-	8.97%

5.8.2 Módulo de correção com o processo em regime permanente

Considerando o que foi apresentado nas Figuras 5.25 e 5.26 e na Tabela 5.10, optou-se por utilizar a estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem em conjunto com o módulo de correção. A dinâmica do erro dessa estrutura, quando realimentada, é mais lenta do que a da estrutura de quarta ordem. Isso favorece a sua utilização, já que permite que essa estrutura tenha maior autonomia de funcionamento sem a necessidade de informações de cromatógrafos. Em contrapartida, a estrutura de segunda ordem apresenta um maior erro de regime, mas ambos os modelos, de segunda e quarta ordem, levam bastante tempo para atingir a estabilidade, tempo maior do que o sugerido para a atuação do módulo de correção.

Tabela 5.11: Características dos módulos RNA das estruturas ACP-RNA 3.

ACP-RNA	Ordem	k	Número de entradas	N_{No}	Número de conexões
3	4	8	20	20	460
3	2	7	13	10	140

Outro fator que pesa positivamente para a escolha da estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem é que a redução efetuada na ordem do modelo do sistema de inferência faz com que esse venha a necessitar de uma rede neural de menor complexidade, de acordo com o ilustrado pela Tabela 5.11.

Intervalo de correção de 14 minutos

Nesta seção o módulo de correção é adicionado à estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem, tendo como intervalo de correção τ_c igual a 14 minutos. Dessa forma, o módulo de correção atua de 14 em 14 minutos, procurando manter a qualidade das estimativas realizadas pelo sistema de inferência. A Figura 5.27 apresenta os resultados que foram obtidos.

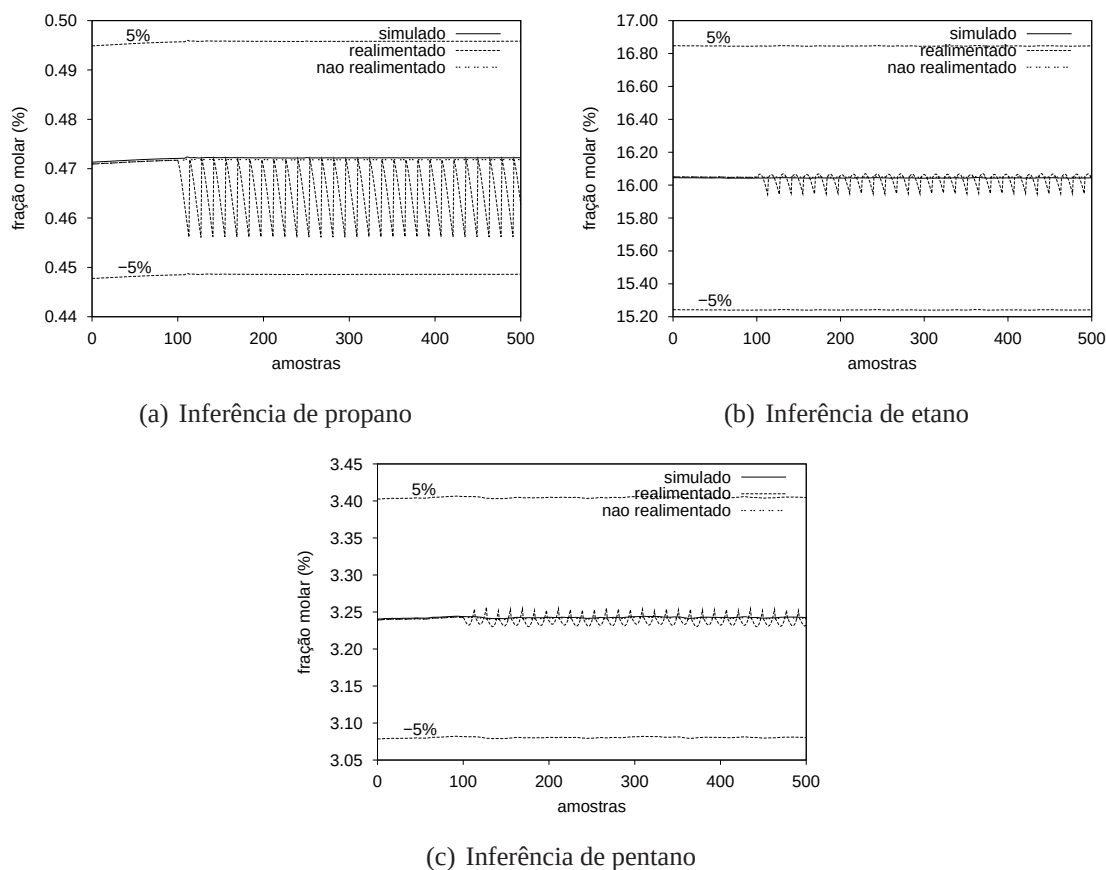


Figura 5.27: Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 14min$).

Na Seção 5.8.1 foi visto que a inferência da fração molar de propano no gás residual, estando o processo simulado em regime permanente, é a que se afasta mais rapidamente do valor fornecido pelo processo simulado. Devido a isso, já era de se esperar que o

erro de estimativa dessa variável fosse o que necessitasse de uma maior correção. Apesar disso, pode-se notar que tanto para essa variável, quanto para as demais variáveis primárias do processo, utilizando-se $\tau_c = 14$ minutos, o erro de estimativa não ultrapassa a 4%. Mais precisamente, os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual, C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 3,48%, 0,63% e 0,46%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 1,62%, 0,19% e 0,20%. Outra observação que pode ser feita é que quando o módulo de correção é acionado, o sistema é corrigido quase que automaticamente.

Intervalo de correção de 30 minutos

Nesta seção o módulo de correção é adicionado à estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem, tendo como intervalo de correção τ_c igual a 30 minutos. A Figura 5.28 apresenta os resultados obtidos com o processo simulado em regime permanente.

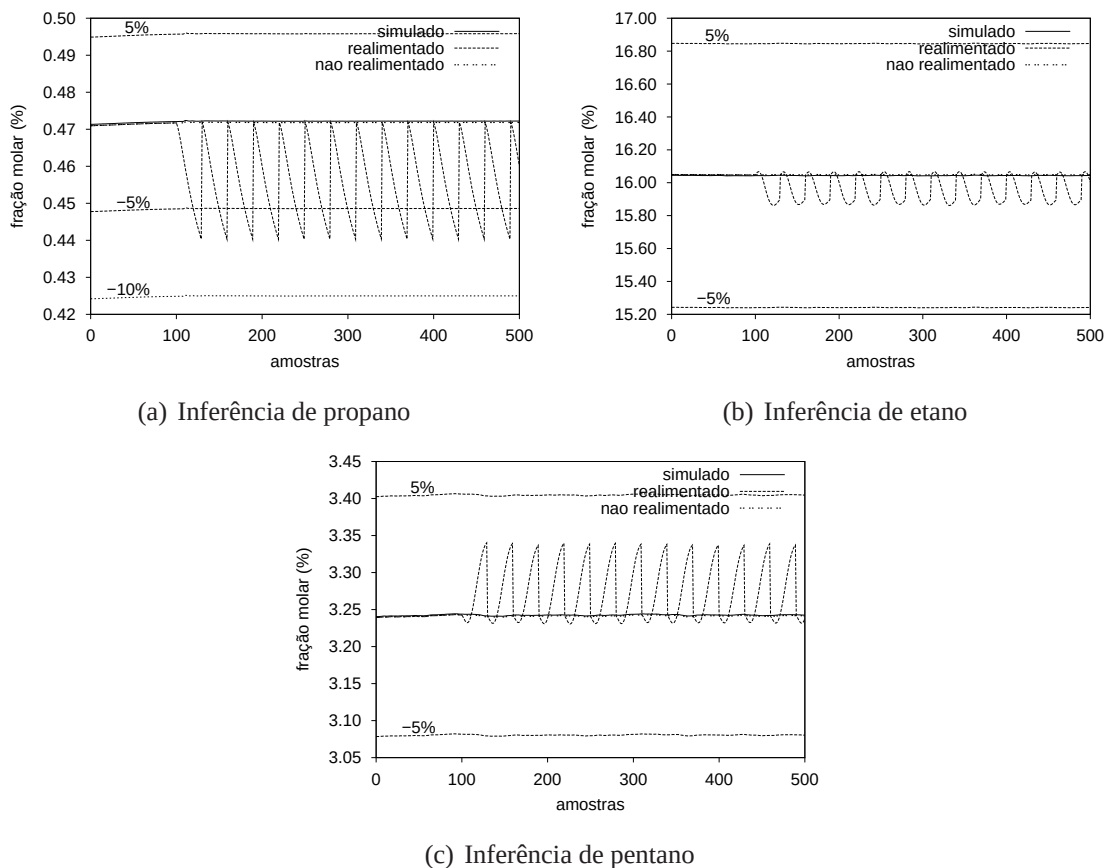


Figura 5.28: Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 30\text{min}$).

O aumento do intervalo de correção, como já era esperado, ocasionou um aumento no erro de estimativa das variáveis primárias do processo. Entretanto, as inferências das frações molares de etano e pentano no GLP ainda permaneceram abaixo do 5% de erro. A exceção foi a fração molar de propano no gás residual. Nos instantes em que o módulo de correção atua, o erro de estimativa dessa variável já ultrapassa a 5%. Mais precisamente, os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual, C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 6,78%, 1,13% e 3,09%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 3,58%, 0,60% e 1,14%.

Intervalo de correção de 60 minutos

Nesta seção o módulo de correção é adicionado à estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem, tendo como intervalo de correção τ_c igual a 60 minutos. Atuando, portanto, a cada 60 amostras ou 1 hora. A Figura 5.29 apresenta os resultados obtidos com o processo simulado em regime permanente.

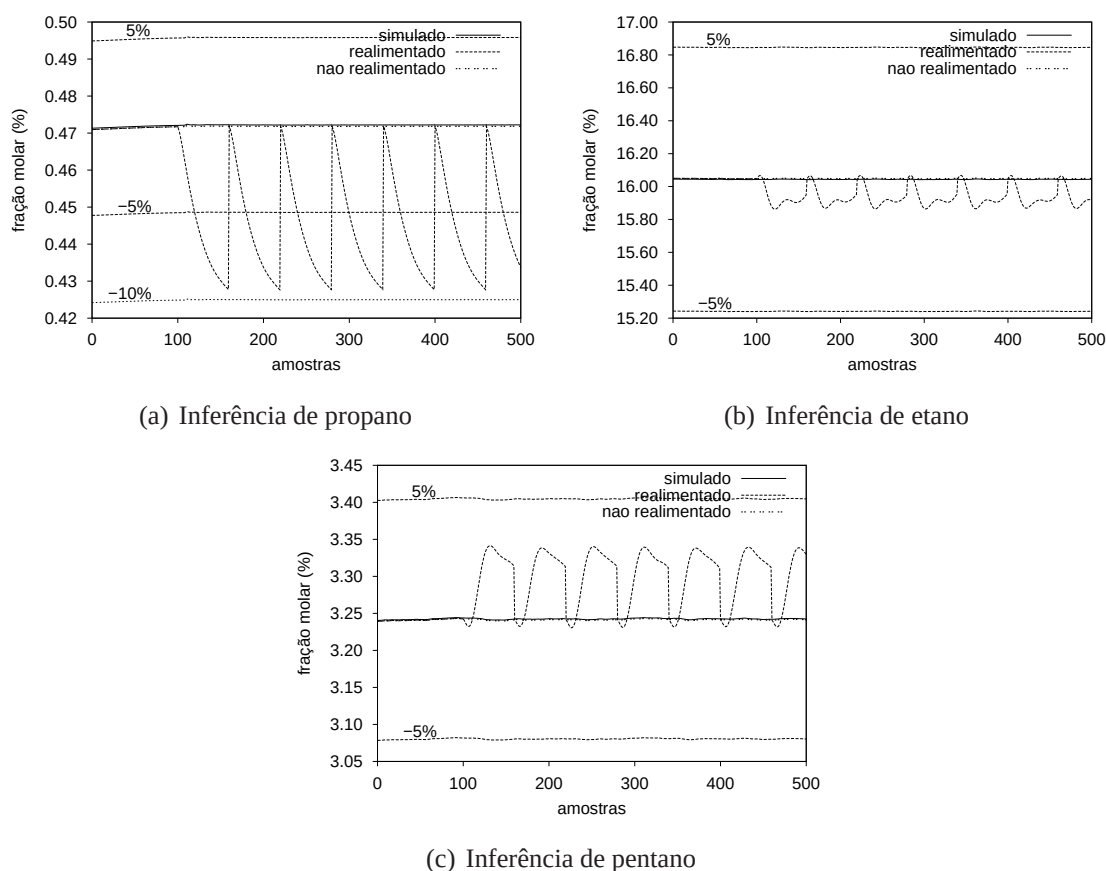


Figura 5.29: Sistema de inferência com módulo de correção (processo em regime permanente, $\tau_c = 60\text{min}$).

Mesmo aumentando o intervalo de correção para uma hora, o sistema de inferência com o módulo de correção ainda apresenta um bom desempenho; mais uma vez as frações molares de etano e pentano no GLP ficam abaixo da faixa de 5% de erro de estimativa. Entretanto, o erro de estimativa da fração molar de propano no gás residual aproxima-se de 10%, o que na prática pode ser considerado um bom resultado, já que o valor dessa variável é de baixa magnitude. Mais precisamente, os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual, C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 9,43%, 1,14% e 3,15%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 5,97%, 0,70% e 1,89%.

5.8.3 Módulo de correção aplicando estímulos ao processo

Nesta seção o sistema de inferência proposto, incluindo o módulo de correção, é novamente acoplado ao processo simulado. Desta vez, são aplicados alguns estímulos ao processo com o intuito de observar o comportamento do sistema de inferência realimentado e com correção quando o processo não se encontra em regime permanente.

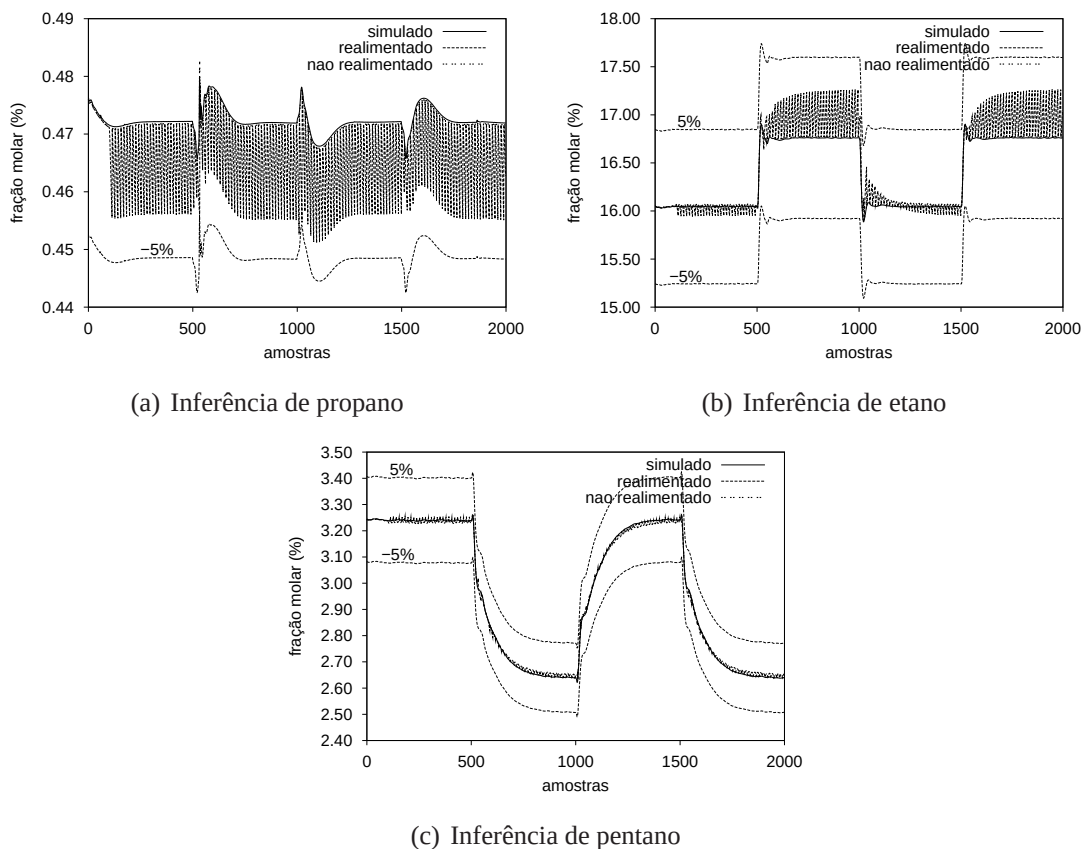


Figura 5.30: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 1* - $\tau_c = 14\text{min}$).

Para analisar o sistema de inferência foram realizados dois experimentos com o processo simulado. Em cada um desses experimentos foram utilizados estímulos diferentes. Em ambos os experimentos, foram alterados os *set points* dos controladores TIC-100 e TIC-102-2. No *Estímulo 1*, a alteração dos *set points* dos controladores citados foi mais cautelosa, de tal maneira que viesse a representar o funcionamento normal do processo, sem variações acentuadas. No *Estímulo 2*, os valores de referência dos controladores TIC-100 e TIC-102-2 foram alterados de forma que representasse variações mais acentuadas no funcionamento do processo. As Figuras 5.30 a 5.32 apresentam os resultados referentes ao primeiro estímulo. Ao observar essas figuras, pode-se notar, a partir da variação do C3, C2 e C5 que os valores dos *set points* foram alterados em três instantes: na quingentésima, milésima e milésima quingentésima amostra.

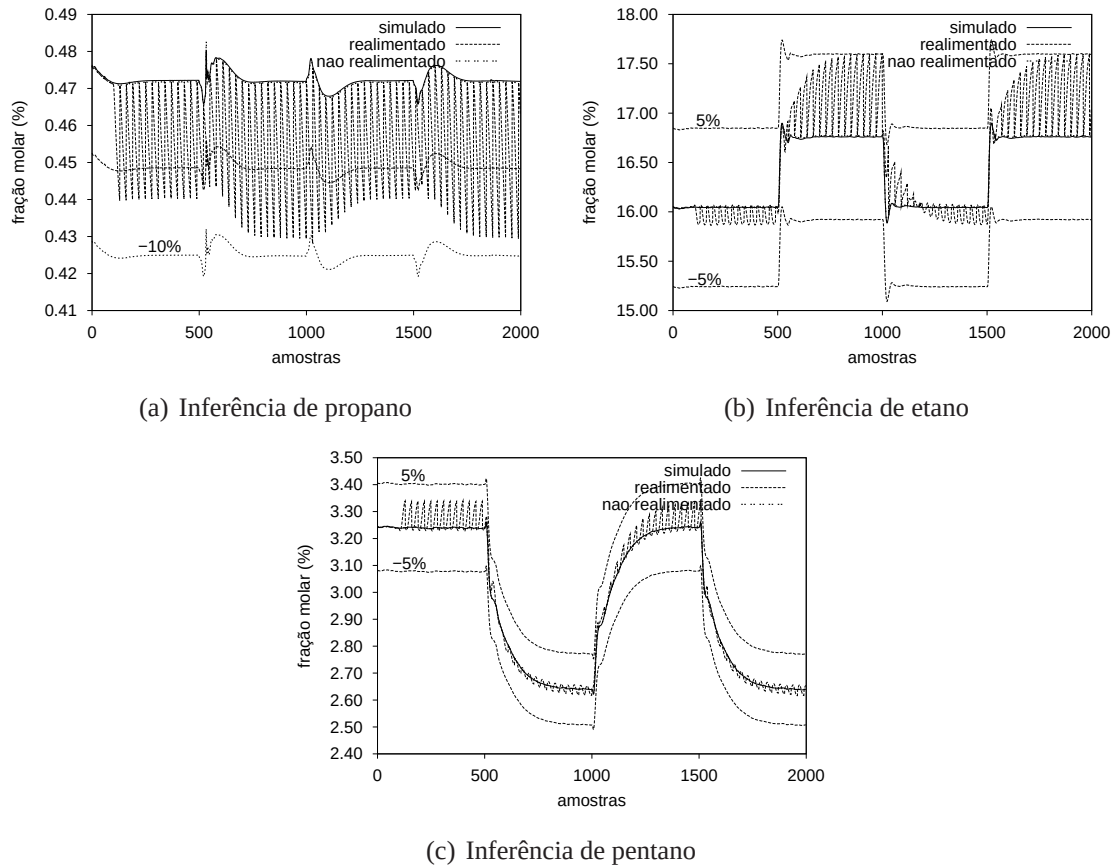


Figura 5.31: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 1* - $\tau_c = 30\text{min}$).

Na Figura 5.30, onde $\tau_c = 14\text{min}$, nota-se que a variável primária que necessita de maior correção é a fração molar de propano no gás residual, pois essa variável afasta-se do valor simulado mais rapidamente que as demais variáveis. Apesar disso, assim como as frações molares de etano e pentano, o erro de estimativa do propano não chega

a ultrapassar a faixa de 5%. Mais precisamente, os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 4,93%, 3,00% e 1,77%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 1,57%, 0,76% e 0,27%.

Na Figura 5.31, onde $\tau_c = 30\text{min}$, nota-se um comportamento bastante parecido com o da Figura 5.30. A fração molar de propano necessita de uma atuação mais acentuada do módulo de correção. Entretanto, com o aumento do intervalo de correção, o erro de estimativa aumenta visivelmente. Na inferência do etano, a primeira e a terceira variação dos *set points* dos controladores TIC-100 e TIC-102-2 levam o processo a um estado, onde o sistema de inferência passa a se afastar mais rapidamente do valor simulado do etano. Uma possível causa para isso pode ser a falta de informação apresentada à rede neural durante o seu treinamento que bem representasse essa faixa de operação do processo.

Os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 10,09%, 5,05% e 3,10%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 3,81%, 1,57% e 0,71%.

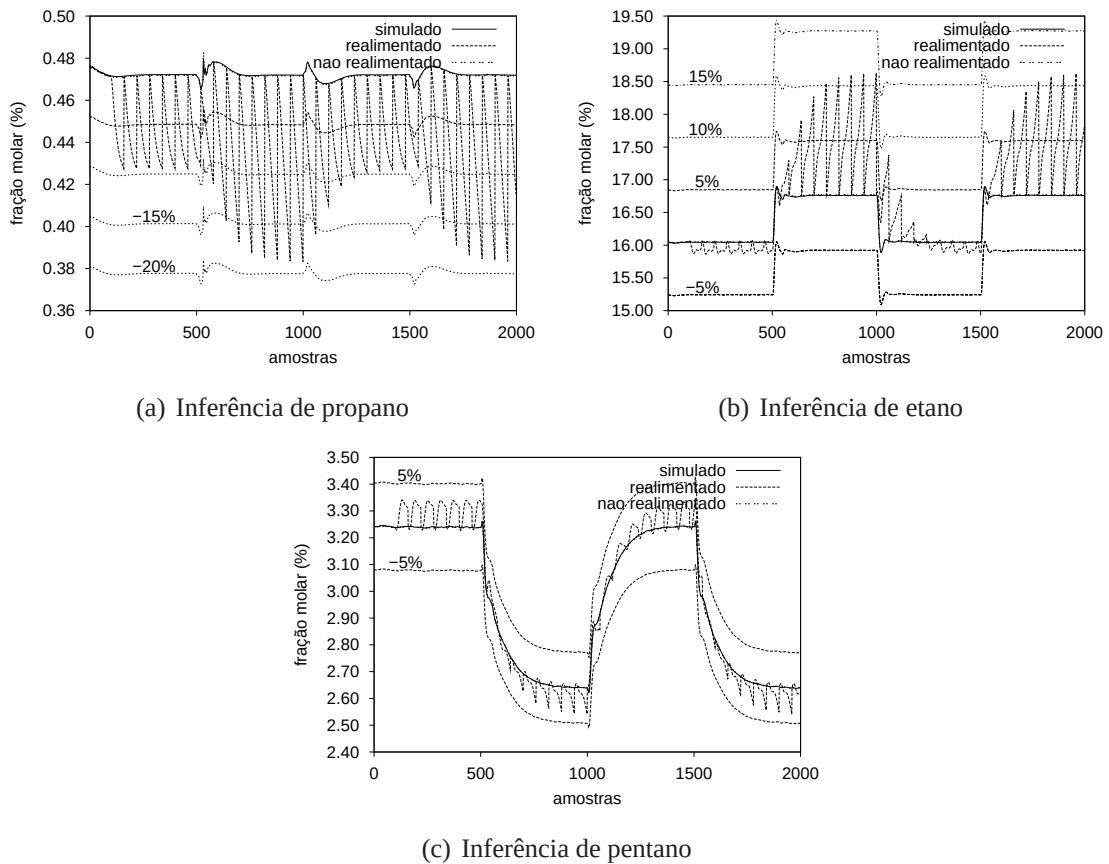


Figura 5.32: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 1* - $\tau_c = 60\text{min}$).

Na Figura 5.32, observa-se o já esperado aumento do erro de estimativa, uma vez que o intervalo de correção foi aumentado para 1 hora. O erro de estimativa chega a ser superior, em certos momentos a 15%. Entretanto, a estimativa da fração molar de pentano no GLP apresenta um excelente resultado, mantendo o erro abaixo da faixa de 5%.

Os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 18,81%, 11,17% e 3,72%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 7,32%, 2,65% e 1,22%.

As Figuras 5.33 a 5.35 apresentam os resultados referentes ao segundo estímulo. Ao observar essas figuras, pode-se notar, a partir da variação do C3, C2 e C5 que os valores dos *set points* dos controladores TIC-100 e TIC-102-2 foram alterados em dois instantes: na centésima e ducentésima quinquagésima amostra.

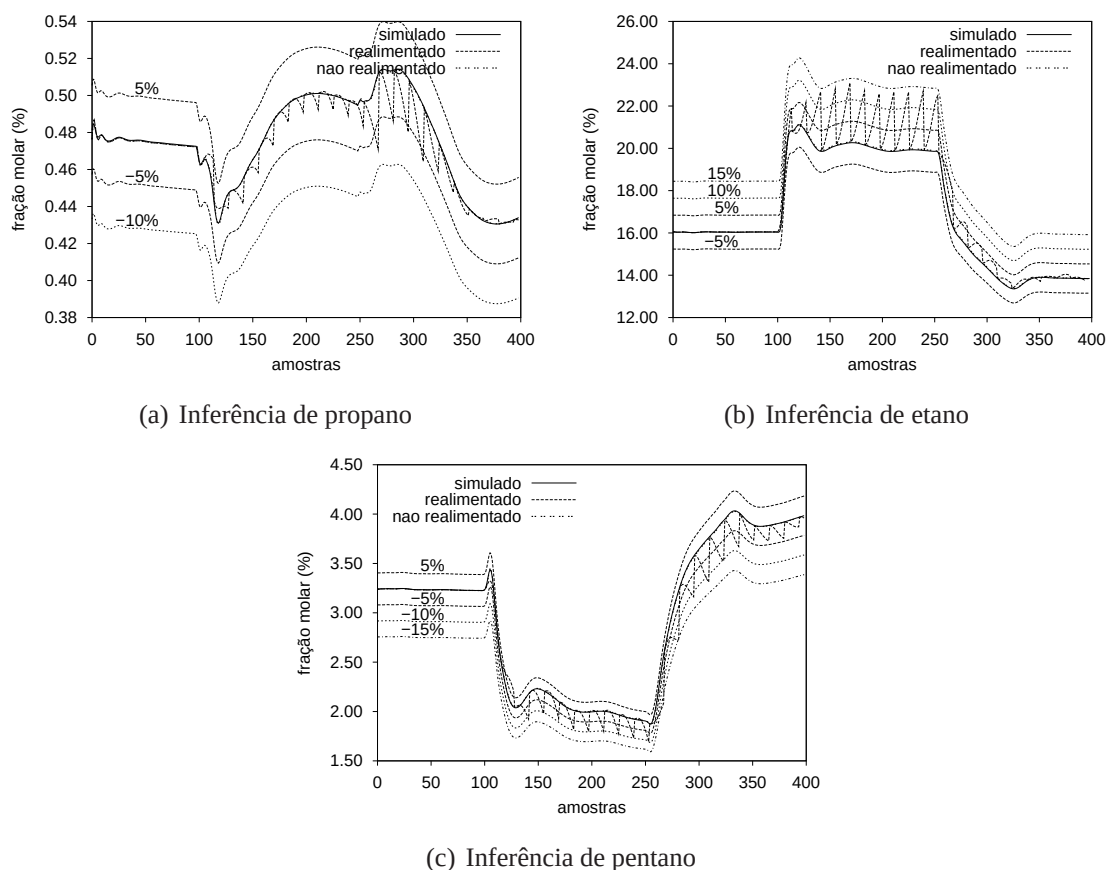


Figura 5.33: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 2* - $\tau_c = 14\text{min}$).

Observando a Figura 5.33, onde $\tau_c = 14\text{ min}$, nota-se que no *Estímulo 2*, as alterações dos valores de referência dos controladores TIC-100 e TIC-102-2 ocasionam no sistema uma maior variação nas variáveis primárias do processo. Vê-se também que as variáveis primárias não chegam a atingir um estado de estabilidade durante o teste.

Curiosamente, para este estímulo ($\tau_c = 14\text{min}$) aplicado, o erro de estimativa do propano não é tão acentuado quanto o erro de estimativa da fração molar de etano quando este se aproxima de um quadro de estabilidade. Os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 7,97%, 14,18% e 18,74%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 1,04%, 3,81% e 3,68%.

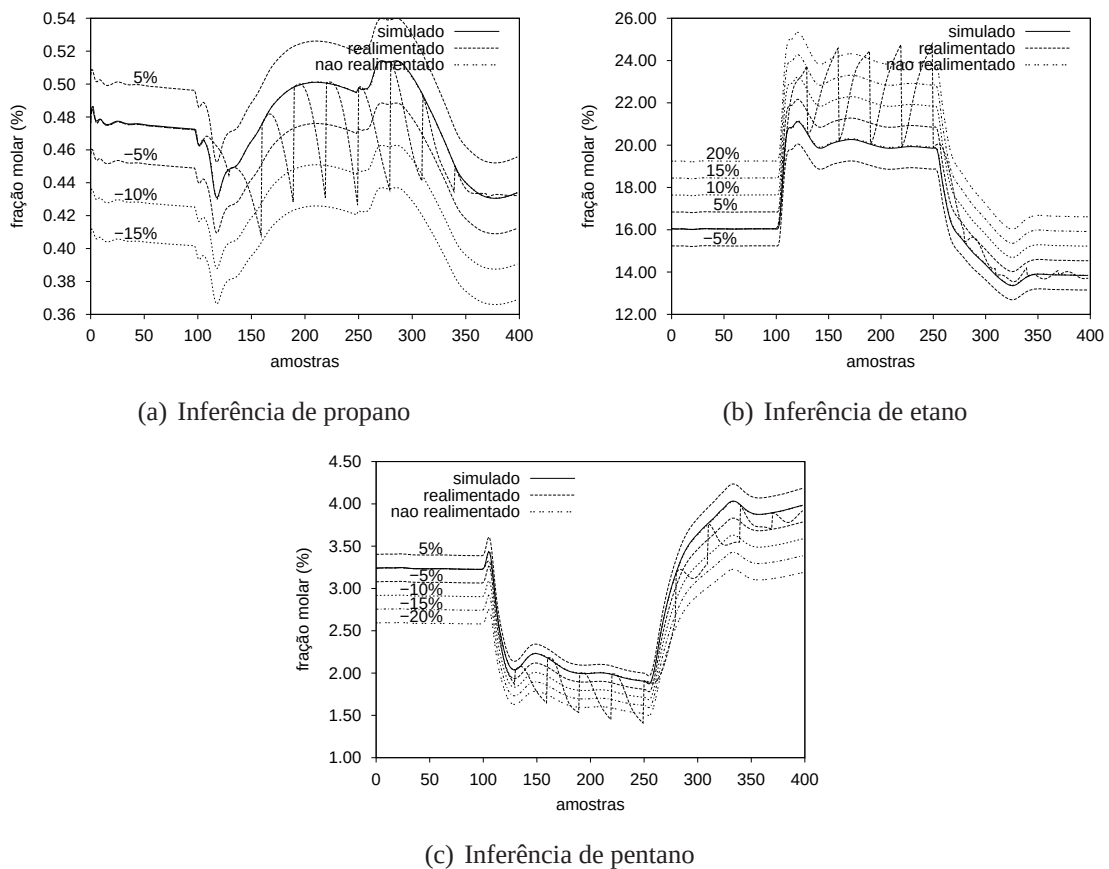


Figura 5.34: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 2* - $\tau_c = 30\text{min}$).

Alterando-se o intervalo de correção para 30 minutos quando aplicado o *Estímulo 2* ao processo, os erros de estimativas começam a elevar-se de maneira considerável, como pode ser notado através da Figura 5.34. Os erros de estimativa do etano e pentano ultrapassam a faixa de 20% em certos momentos, enquanto o erro de estimativa do propano aproxima-se de 15%. Os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 15,09%, 24,84% e 26,95%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 3,71%, 7,28% e 8,82%.

Na Figura 5.35, nota-se que o desempenho do sistema de inferência cai bruscamente quando o $\tau_c = 60$ minutos. O erro de estimativa ultrapassa a faixa de 20% para todas as variáveis primárias inferidas. A fração molar de propano no gás residual é a variável que apresenta pior estimativa.

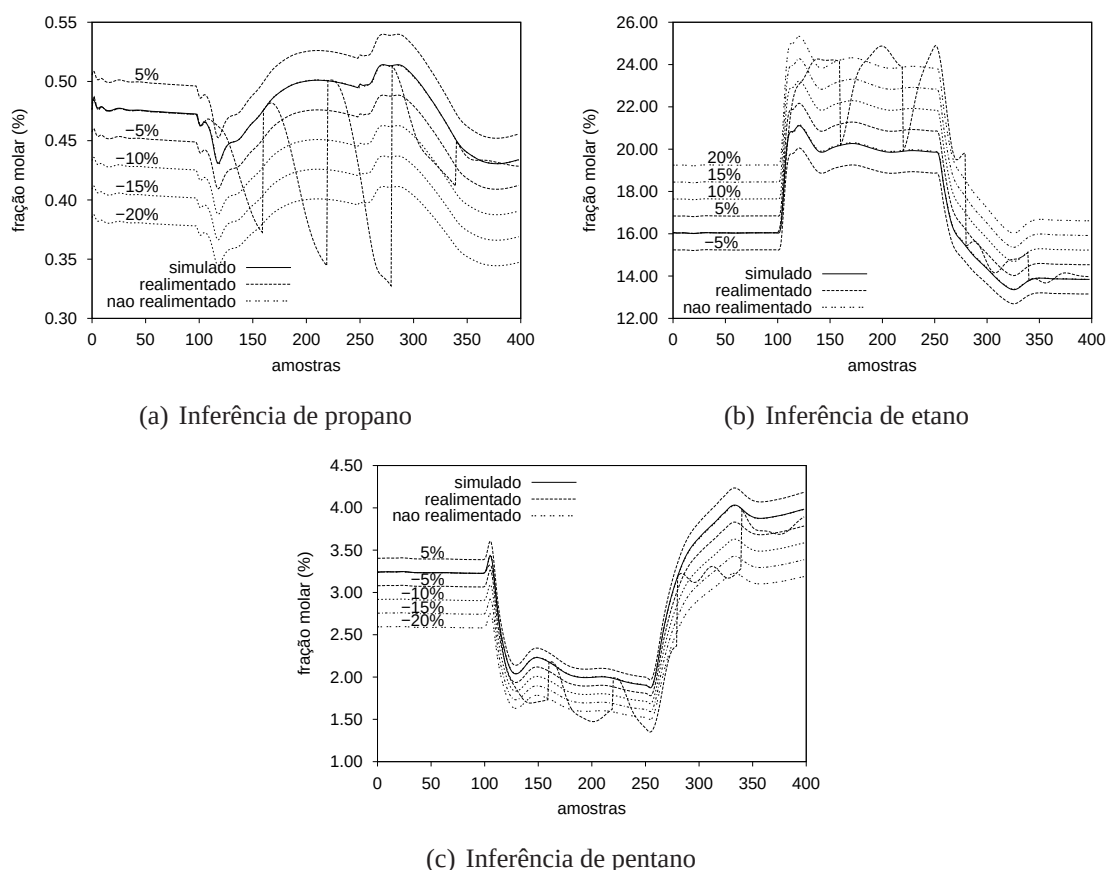


Figura 5.35: Sistema de inferência com módulo de correção (*Estímulo 2* - $\tau_c = 60\text{min}$).

Os erros máximos de estimativa para as frações molares de C3 no gás residual e C2 e C5 no GLP são, respectivamente, de 36,20%, 28,17% e 28,25%; enquanto o erro médio de estimativa para essas mesmas variáveis, respectivamente, são 9,46%, 11,47% e 13,10%.

Capítulo 6

Conclusões

Uma das partes mais importantes do estudo realizado foi a análise feita quanto às estruturas de inferência ACP-RNA propostas. A partir dos resultados, pode-se constatar que é possível a união dessas duas técnicas, formando um modelo híbrido bastante eficiente. O grande benefício observado dessas estruturas foi a grande capacidade de redução de complexidade que elas possuem decorrente da técnica estatística de análise de componentes principais. Pode-se, por exemplo, concluir que quanto maior for o número de entradas de um módulo ACP maior é a chance de ocorrer uma grande redução de complexidade.

Notou-se, no decorrer do trabalho, que as estruturas de inferência ACP-RNA 1 e 2, apesar de terem exibido uma grande redução de complexidade comparado com o sistema puramente neural, não apresentaram bom desempenho. Entretanto, as estruturas de inferência ACP-RNA 3 e 4 demonstraram bons resultados, estimando adequadamente as variáveis primárias do processo com um desempenho próximo ao da estrutura puramente neural. Observando os diagramas esquemáticos dessas estruturas e as suas características individuais, podemos concluir que para que a rede neural de inferência forneça boas estimativas é necessário que ela possua informações passadas das variáveis primárias a serem estimadas utilizadas diretamente em suas entradas.

Os módulos ACP, tanto na estrutura ACP-RNA 1, quanto na estrutura ACP-RNA 2, desempenham bem a sua função de redução. Entretanto, na primeira das estruturas, o seu único módulo ACP recebe como entrada as variáveis primárias e secundárias do processo e fornece como saída componentes principais descorrelacionadas. Ou seja, as informações referentes às relações dinâmicas existentes entre as variáveis primárias e secundárias são prejudicadas. Na estrutura ACP-RNA 2, ao tentar filtrar informações relativas às variáveis primárias do processo, o módulo ACP interfere negativamente no desempenho da rede neural de inferência.

As estruturas ACP-RNA 3 e 4 apresentaram desempenhos parecidos quando não realimentadas por suas próprias estimativas. Os melhores modelos encontrados para estas

estruturas foram de quarta ordem. Nestas condições, viu-se que a rede neural da estrutura ACP-RNA 3 apresenta menor complexidade, devido a isso, essa foi a estrutura selecionada para ser avaliada junto ao processo em funcionamento. Neste processo de validação, foram aplicados degraus e sinais PRS aos *set points* de alguns dos controladores do processo simulado. Nessas duas situações, os resultados encontrados foram de excelente qualidade, apresentando pequenos erros de estimativa.

No momento em que se começa a pensar em utilizar o sistema de inferência proposto em uma aplicação real, deve-se lembrar que os valores das variáveis primárias do processo não estão sempre disponíveis. Durante o trabalho foi apresentado o problema que ocorre devido à ausência de medições das variáveis primárias do processo para o sistema de inferência. Para suprir essa ausência, e permitir a possível utilização do sistema em um processo real, o sistema é realimentado por suas próprias estimativas. Como consequência as inferências obtidas passam a divergir dos valores “reais” fornecidos pelo processo simulado pelo HYSYS®. Entretanto, o sistema de inferência projetado, utilizando o módulo de correção, não entra em instabilidade, mas pode assumir valores de erros elevados, dependendo do estado do processo.

Ao estudar o comportamento da estrutura ACP-RNA 3 realimentada, foi observado que os modelos de segunda ordem divergem mais lentamente dos valores reais por serem menos “dependentes” dos valores passados das variáveis primárias do processo, entretanto apresentam maior erro de regime. A dinâmica mais lenta do erro dos modelos de segunda ordem favorece a sua utilização, uma vez que permite que o sistema de inferência tenha maior autonomia de funcionamento. Por essa razão, preferiu-se adotar a estrutura de inferência ACP-RNA 3 de segunda ordem no restante das avaliações.

Diante dessa divergência existente entre os valores das estimativas e os valores fornecidos pelo processo simulado, foi adicionado ao sistema de inferência uma simples metodologia de correção de erro, baseada em possíveis medições de cromatógrafos a gás presentes no processo. Dessa forma, foi inserido o módulo de correção à estrutura ACP-RNA 3 de segunda ordem com o intuito de minimizar o problema citado. A lógica de funcionamento é fazer com que o sistema de inferência atue de forma independente e com uma razoável eficiência por um determinado período, utilizando suas próprias estimativas como parte da entrada da rede, até que o módulo de correção possa atuar.

Para analisar o desempenho do sistema de inferência com o módulo de correção, foram realizados dois testes: um com o processo em regime permanente e outro aplicando estímulos ao processo. Foram analisados intervalos de correção (τ_c) de 14, 30 e 60 minutos. Estando o processo em regime permanente, o módulo de correção atuou de maneira bastante eficiente para os três intervalos de correção citados. Ao aplicar estímulos

ao processo, os erros de estimativa aumentaram, principalmente quando as variações nas variáveis primárias foram bastante acentuadas. Entretanto, para os intervalos de correção mais curtos, como os de 14 e 30 minutos, os resultados ainda foram satisfatórios. Para o intervalo de uma hora, os erros de estimativa aumentaram acentuadamente em termos percentuais, entretanto, os resultados ainda podem ser considerados bons, uma vez que as magnitudes das variáveis estimadas são de baixa ordem.

Diante do apresentado, pode-se concluir que o sistema de inferência proposto demonstrou desempenho satisfatório, tendo funcionalidade para estimar as variáveis definidas como primárias do processo.

Como perspectiva futura, pode-se estudar a utilização dessa estrutura em conjunto com alguma técnica de controle mono ou multivariável, tais como o controle preditivo, bastante difundido na indústria de petróleo, ou o controle *fuzzy*. Também é interessante avaliar novas formas de correção, ou até mesmo de implementação do sistema de inferência que venham a aprimorar o seu desempenho quando realimentado. Apenas como sugestão, pode-se treinar a rede neural para fornecer variações dos valores da fração molar de C3 no gás residual e das frações molares de C2 e C5 no GLP e verificar a consequência dessa alteração no comportamento do novo sistema de inferência.

Deve-se salientar que o sistema de inferência proposto fornece estimativas de minuto a minuto, o que talvez para determinadas aplicações seja um intervalo bem menor do que o necessário para uma determinada técnica de controle avançado inferencial a ser desenvolvida. Aumentando-se esse intervalo, é de se esperar que o sistema de inferência passe a apresentar um maior período de autonomia entre as correções, o que o tornaria ainda mais útil.

Durante o desenvolvimento deste trabalho, pode-se notar a simplicidade de implementação dessa técnica. A coleta de dados, realização da análise de componentes principais, e o treinamento de redes neurais são tarefas relativamente simples. Esse fato incentiva o prosseguimento no estudo de tais modelos híbridos, podendo vir a serem utilizados até mesmo em processos reais.

É importante salientar que em um processo real de destilação podem existir, ou serem inseridos, instrumentos de medição que forneçam os valores de algumas variáveis secundárias, tais como, pressões de topo, temperaturas de fundo e topo e medidas de nível, que venham a contribuir significativamente com a qualidade da inferência das variáveis primárias do processo, mas que não estão implementados no processo simulado neste trabalho. Isto não é considerado um problema, pois o sistema de inferência proposto pode ser facilmente ajustado para a adição de novas variáveis secundárias e/ou primárias.

Logicamente, a implementação real exige maiores cuidados. Existem outros fatores

que influenciam no desenvolvimento do sistema. Como já foi observado no decorrer deste trabalho, é de grande importância o cuidado na coleta e tratamento de dados em um processo real. Outro problema é excitar o processo em funcionamento sem que isso venha a interferir na produção. Entretanto, isso não impede a sua utilização prática se o procedimento for realizado de maneira cautelosa. Dessa forma, é possível obter os dados necessários para o desenvolvimento do sistema de inferência.

Outra questão que pode ser levantada, caso deseje-se implementar o sistema de inferência fornecendo estimativas a cada minuto é: como treinar a rede neural do sistema para fornecer inferências de minuto a minuto, sendo que os dados de cromatógrafos são obtidos com intervalos de medição de vários minutos? Existem algumas alternativas para tentar contornar esse problema que podem ser avaliadas. Considerando o sistema de inferência funcionando próximo do ponto de operação do processo, pode-se, por exemplo, realizar interpolações entre os instantes de medição dos cromatógrafos, ou até mesmo manter os valores das variáveis primárias sem variações entre os instantes de medição, alterando-se esses valores somente quando as medições dos cromatógrafos estejam disponíveis.

Uma vez tendo a estrutura do sistema montada, é possível implementá-la com certa facilidade nos atuais CLPs existentes no mercado e largamente presentes nos processos industriais.

Referências Bibliográficas

- Abdullah, Z., Aziz, N. e Ahmad, Z. (2007). Nonlinear modelling application in distillation column, *Chemical Product and Process Modeling* **2**(3). Article 12.
- Aguirre, L. A. (2004). *Introdução à identificação de sistemas: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais*, 2 ed., Editora UFMG, Belo Horizonte - MG, Brasil.
- Ahmed, M. H. e Zhang, J. (2003). Multivariable inferential feedback control of distillation compositions using dynamic principal component regressions models, *Proceedins of the American Control Conference* **3**: 1974–1979. Denver, Colorado, EUA.
- Araújo Jr., J. M. (2007). *Técnicas de inteligência artificial para a geração dinâmica de set points para uma coluna de destilação.*, Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, UFRN, Natal - RN, Brasil.
- Baratti, R., Bertucco, A., Rold, A. D. e Morbidelli, M. (1998). A composition estimator for multicomponent distillation columns - development and experimental test on ternary mixtures, *Chemical Engineering Science* **53**(20): 3601–3612.
- Bawazeer, K. e Zilouchian, A. (1997). Prediction of products quality parameters of a crude fractionation section of an oil refinery using neural networks, *International Conference on Neural Networks* **1**: 157–162. Texas, EUA.
- Bhartiya, S. e Whiteley, R. J. (2001). Development of inferential measurements using neural networks, *ISA Transactions* **40**(4): 307–323(17).
- Bo, C. M., Li, J., Zhang, S., Sun, C. Y. e Wang, Y. R. (2003). The application of neural network soft sensor technology to an advanced control system of distillation operation, *Proceedings of the International Joint Conference on Neural Networks* **2**: 1054–1058.
- Catell, R. B. (1966). *The scientific use of factor analysis in behavioral and life sciences*, Plenum Press, Nova York, EUA.

- Corrêa, L. G. C. (2005). *Inferência da qualidade de produtos de destilação utilizando redes neurais e filtro de Kalman extendido*, Master's thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, PUC-Rio, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
- Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function, *Mathematics of Control Signals, and Systems* **2**(4): 303–314.
- Demuth, H., Beale, M. e Hagan, M. (2009). *Neural Network ToolboxTM 6 User's Guide*, Mathworks, Inc., Natick - MA, EUA.
- Evangelista, M. A., Júnior, F. N., Arruda, L. V. R. e Ramos, A. E. M. (2001). Development of inferential distillation models using multivariate statistical methods, *Proceedings of the 40th IEEE Conference on Decision and Control* **4**: 3722–3727. Orlando, Flórida, EUA.
- Fortuna, L., Graziani, S. e Xibilia, M. G. (2005). Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns, *Control Engineering Practice* **13**(4): 499–508.
- Fortuna, L., Giannone, P., Graziani, S. e Xibilia, M. G. (2007a). Virtual instruments based on stacked neural networks to improve product quality monitoring in a refinery, *IEEE Transactions on Instrumentation and Measurement* **56**(1): 95–101.
- Fortuna, L., Graziani S., Rizzo, A. e Xibilia, M. G. (2007b). *Soft sensors for monitoring and control of industrial processes*, Springer Verlag, Londres, Inglaterra.
- Hagan, M. T., Demuth, B. e Beale, M. H. (1996). *Neural Network Design*, PWS Publishing, Boston - MA, EUA.
- Haykin, S. (2001). *Redes neurais: princípios e prática*, 2 ed., Bookman, Porto Alegre - RS, Brasil.
- Hotelling, H. (1933). Analysis of a complex of statistical variables into principal components, *Journal of Educational Psychology* **24**: 417–441, 498–520.
- James, S. C., Legge, R. L. e Budman, H. (2000). On-line estimation in bioreactors: A review., *Reviews in Chemical Engineering* **16**(4): 311–340.
- Jolliffe, I. T. (2002). *Principal Component Analysis*, 2 ed., Springer-Verlag, Nova York, EUA.

- Joseph, B. (1999). A tutorial on inferential control and its applications, *Proceedins of the American Control Conference* **5**: 3106–3118. San Diego, California, EUA.
- Joseph, B. e Brosilow, C. B. (1978a). Inferential control of processes: construction of optimal and suboptimal dynamic estimators., *AIChE* **24**(3): 500–509.
- Joseph, B. e Brosilow, C. B. (1978b). Inferential control of processes: Steady-state analysis and design., *AIChE J.* **24**(3): 485–492.
- Kano, M., Showchaiya, N., Hasebe, S. e Hashimoto, I. (2001). Inferential control of distillation compositions: selection of model and control configuration, *Proceedings of 6th IFAC Symposium on Dynamics and Control of Process Systems* pp. 347–352. Cheju, Coréia do Sul.
- Kano, M., Miyazaki, K., Hasebe, S. e Hashimoto, I. (2000). Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression, *Journal of Process Control* **10**(2): 156–166.
- Keller, G. e Warrack, B. (2003). *Statistics for management and economics*, 2 ed., Duxbury Press, Brooks Cole.
- Lima, M. F. (2001). *Projeto e implementação de um sistema baseado em redes neurais para inferência da composição de pentano em uma torre de destilação.*, Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, UFRN, Natal - RN, Brasil.
- Linhares, L. L. S., Rebouças, D. L., Araújo, F. M. U. e Maitelli, A. L. (2008a). Estimação da fração molar de etano no produto de fundo de uma coluna deetanizadora a partir de um sistema neural de inferência, *Anais do V Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (CONEM)* . Salvador - BA, Brasil.
- Linhares, L. L. S., Rebouças, D. L., Araújo, F. M. U. e Maitelli, A. L. (2008b). Sistema de inferência baseado em redes neurais artificiais aplicado em plantas de processamento de gás natural, *Anais do XVII Congresso Brasileiro de Automática (CBA)* . Juiz de Fora - MG, Brasil
- Linhares, L. L. S., Araújo Jr, J. M. e Araújo, F. M. U. (2007). Redes neurais artificiais para identificação da fração molar de pentano na composição do GLP, *Anais do VIII Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente (SBAI)* . Florianópolis - SC, Brasil.

- Lucena, P. B. (2005). *Análise de um controlador baseado no jacobiano estimado da planta através de uma rede neural.*, Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, UFRN, Natal - RN, Brasil.
- Luyben, W. L. (1990). *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*, 2 ed., McGraw-Hill, Nova York, EUA.
- Luyben, W. L. (1987). Derivation of transfer functions for highly nonlinear distillation columns, *Industrial and Engineering Chemistry Research* **26**: 2490–2495.
- Mingoti, S. A. (2005). *Análise de dados através de métodos de estatística multivariada: uma abordagem aplicada*, UFMG, Belo Horizonte - MG, Brasil.
- Møller, M. F. (1993). A scaled conjugate gradient algorithm for fast supervised learning, *Neural Networks* **6**(4): 525–533.
- Nascimento, C. A. O., Odloak, D., Zanin, A. C., Guedes, L. R. S., Tiuman, L. M., Matsuda, M. M. e Karasawa, W. Y. (1990). Simulação modular dinâmica de uma coluna de destilação multicomponente. *Seminário sobre aplicações e desenvolvimentos em simuladores de processos*. Rio de Janeiro - RJ. Rio de Janeiro: Petrobras.
- Nascimento Jr, C. L. N. e Yoneyama, T. (2000). *Inteligência artificial em controle e automação*, Edgard Blücher, São Paulo - SP, Brasil.
- Nocedal, J. e Wright, S. J. (1999). *Numerical optimization*, Springer-Verlag, Nova York, EUA.
- Nørgaard, M., Ravn, O., Poulsen, N. K. e Hansen, L. K. (2001). *Neural networks for modelling and control of dynamic systems*, Springer-Verlag London Limited, Londres, Inglaterra.
- Park, S. e Han, C. (2000). A non linear soft sensor based on multivariate smoothing procedure for quality estimation in distillation columns, *Computers and Chemical Engineering* **44**(2): 871–877(7).
- Pearson, K. (1901). On lines planes of closest fit to systems of points in space, *Philosophical Magazine* **2**(11): 559–572.
- Pullis, A. M. (2007). *Soft sensor design for distillation columns*, PhD thesis, Università degli Studi di Cagliari, Cagliari, Itália.

- Rebouças, D. L. (2009). Sistema de inferência neural e processamento estatístico multi-variável aplicado à indústria do petróleo. Trabalho de conclusão de curso, Universidade Federal do Rio Grande do Norte, UFRN. Natal - RN, Brasil.
- Rezende, J. A. D. e Maitelli, A. L. (1999). Um estudo comparativo entre diferentes técnicas de otimização do treinamento de neurocontroladores, *ISA Transactions* pp. 209–214. ITA - São José dos Campos - SP, Brasil.
- Sørensen, O. (1993). Neural networks performing system identification for control applications, *3rd International Conference on Artificial Neural Networks* pp. 172–176. Brighton, UK.
- Tatibana, C. Y. e Kaetsu, D. Y. (2008). Uma introdução às redes neurais. Disponível em <http://www.din.uem.br/ia/neurais>. Último acesso em: 13 de agosto de 2008.
- Thomas, J. E., Triggia, A. A., Correia, C. A., Filho, C. V., Xavier, J. A. D., Machado, J. C. V., de Souza Filho, J. E., de Paula, J. L., Rossi, N. C. M., Pitombo, N. E. S., de Melo Gouveia, P. C. V., de Souza Carvalho, R. e Barragan, R. V. (2001). *Fundamentos de Engenharia de Petróleo*, Editora Interciência – 2ª Edição, Rio de Janeiro - RJ, Brasil.
- Wang, D., Srinivasa, R., Liu, J., Guru, P. N. S. e Leong, K. M. (2006). Data-driven soft sensor approach for quality prediction in a refinery process, *2006 IEEE International Conference on Industrial informatics* pp. 230–235.
- Warne, K., Prasad G., Rezvani, S. e Maguire, L. (2004a). Statistical and computational techniques for inferential model development: a comparative evaluation and a novel proposition for fusion, *Engineering Applications of Artificial Intelligence* **17**(8): 871–875.
- Warne, K., Prasad, G., Siddique, N. H. e Maguire, L. P. (2004b). Development of a hybrid PCA-ANFIS measurement system for monitoring product quality in the coating industry, *IEEE International Conference on Systems, Man and Cybernetics* **4**: 3519–3524.
- Zamprogna, E., Barolo, M. e Seborg, D. (2005). Optimal selection of soft sensor inputs for batch distillation columns using principal component analysis, *Journal of Process Control* **15**(1): 39–52.

- Zanata, D. R. P. (2005). *Desenvolvimento de sensor virtual empregando redes neurais para medição da composição em uma coluna de destilação*, Master's thesis, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, EPUSP, São Paulo - SP, Brasil.
- Zhang, J. (2001). Inferential feedback control of distillation composition based on PCR and PLS, *Proceedings of the American Control Conference* 2: 1196–1021. Arlington, VA, EUA.