

RECONCILIAÇÃO DE DADOS CLÁSSICA EM UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO

Pedro Henrique Siscato (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Esdras Penêdo de Carvalho
(Orientador). E-mail: epcarvalho@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Ciências Exatas, Maringá, PR.

Matemática aplicada

Palavras-chave: Otimização; erros aleatórios; mínimos quadrados ponderados.

RESUMO

O presente trabalho tem como objetivo obter dados confiáveis da planta de uma coluna de destilação BTX (Benzeno, Tolueno e Xileno) de 34 estágios, através da técnica da reconciliação de dados aplicada ao modelo de restrição (balanços de massa e relação termodinâmica). O enfoque foi na reconciliação de dados clássica, onde permite eliminar os erros aleatórios, que são aqueles que estão presentes em qualquer medição de processo, através do método dos mínimos quadrados ponderados. O *software* para modelagem da coluna e reconciliação dos dados utilizado foi o *MATLab(R2023a)*. O processo consistiu, primeiramente, em simular a coluna de destilação para obter os parâmetros iniciais; após, foram geradas flutuações nas correntes de entrada e saída (F , U e B) e nas composições da corrente de alimentação (x_B , x_T , x_X) e então foi aplicada a função objetivo da reconciliação clássica. Foram analisadas duas situações e suas influências na reconciliação de dados clássica: a primeira relacionada à variabilidade da variância e a segunda, a influência do número de dados de medições.

INTRODUÇÃO

Para o aprimoramento dos processos químicos em geral, são imprescindíveis medições de processos precisas e confiáveis, para que seja possível monitorar, controlar e prever os processos corretamente. Todavia, os dados brutos coletados em plantas de processos possuem erros e imprecisões associadas, os quais são causados por equipamentos imperfeitos, descalibrados, flutuações de energia etc. Devido à natureza inerente destes erros, eles podem se acumular e espalhar-se por todas as variáveis, causando graves incoerências (BASCUR; LINARES, 2006). Neste sentido, a proposta da reconciliação de dados é minimizar os erros associados pelo tratamento matemático e estatístico, respeitando as leis de conservação de massa e energia. Este processo melhora a confiabilidade das variáveis do processo, identifica problemas, como por exemplo: equipamentos que podem estar com mau funcionamento, vazamentos, acúmulo de minerais que prejudicam o escoamento etc.

MATERIAIS E MÉTODOS

Implementação da reconciliação de dados

Os erros aleatórios são descritos com média zero e variância conhecida em torno do valor correto, que resulta no estimador de mínimos quadrados ponderados (MPQ), que será nossa função objetivo, representado por:

$$\min_{x_r} \sum_{r=1}^m \frac{(\bar{x} - x_r)^2}{\sigma_i^2} \quad (1)$$

sujeita a:

$$g(x) \geq 0$$

$$h(x) = 0$$

Na Equação 1, \bar{x} representa a média das medições de processo, x_r o valor da variável reconciliada, que é um subconjunto do vetor de variáveis de decisão x , e a diferença quadrática entre elas é ponderada pelo inverso da variância das medidas (σ_i^2) (ZANI, 2016). As restrições de desigualdade são limites impostos sobre as correntes de processo e as frações molares e as restrições de igualdade são dadas pelas equações de balanço de massa e a relação de equilíbrio termodinâmico. O trabalho em questão envolve a simulação no *software MATLAB (R2023a)*, do modelo simplificado da coluna de destilação do trabalho de Vacaro (2019) multicomponente e multiestágios, operando em regime permanente. As simplificações aplicadas ao modelo são: equilíbrio termodinâmico líquido-vapor; perdas térmicas desprezíveis; vazões internas constantes por seção da coluna; estágios da coluna 100 % eficientes.

Aplicadas as simplificações às restrições do processo (balanços de massa), foram obtidos os dados nominais da coluna de destilação através da função *fsolve*, a qual resolve as equações do processo pelo método de *Levenberg-Marquardt*. Para isso, foram usadas as mesmas estimativas iniciais de Vacaro (2019). A fim de simular os dados reais coletados de uma planta industrial com erros aleatórios, foi utilizada a função *randn* no *MATLAB* para gerar perturbações em torno dos valores nominais das correntes F , U e L e das composições da alimentação x_B , x_T e x_X . Então, foram analisadas duas situações e sua influência na reconciliação dos dados:

1) Variabilidade da variância: foram escolhidos arbitrariamente os seguintes desvios padrões para as vazões e composições, respectivamente: $\sigma_V = [0.01, 0.05, 0.10, 0.15, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5]$ e $\sigma_C = [0.001, 0.005, 0.01, 0.015, 0.03, 0.05, 0.1, 0.2]$. O número de medições foi fixado em $NP_V = NP_C = 50$.

2) Influência do número de medições: foram utilizados os mesmos números de dados gerados em cada simulação, para as vazões, como para as correntes: $NP_V = NP_C = [2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 25, 35, 40, 50, 75, 100]$.

Ambas as situações foram simuladas com o número de corridas fixado: $N_{run} = 50$. Cada corrida gera um novo conjunto de dados considerando-se sua respectiva

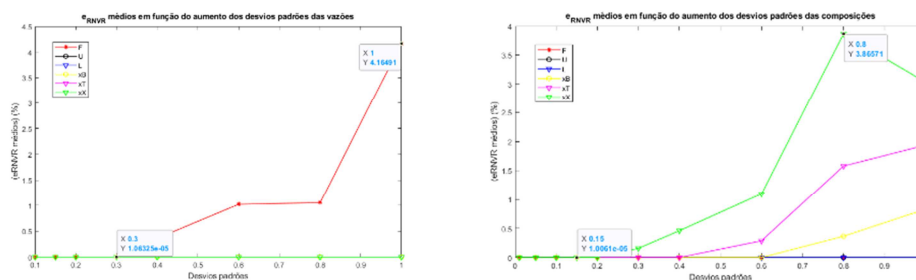
variância. Não foram considerados os erros grosseiros, pelo foco do trabalho ser a aplicação da reconciliação de dados clássica, uma vez que a minimização destes é feita pela reconciliação robusta, que trata de funções objetivos mais complexas. Eles serão objetos de estudo de um futuro trabalho.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para a aplicação da reconciliação de dados, a função para minimização utilizada foi a *fmincon* e o algoritmo escolhido foi o *SQP* (*Sequential Quadratic Programming*).

Situação 1: variabilidade na variância na reconciliação

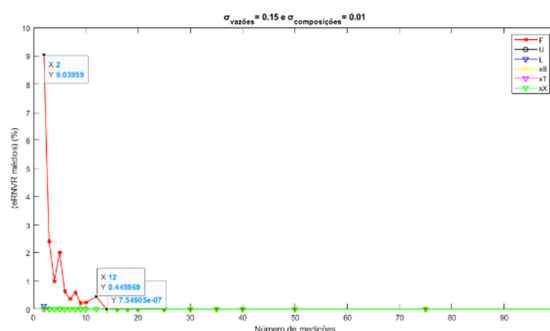
No primeiro caso, deixamos σ_C constante em 0,01 e variamos σ_V de 0,01 a 1 e no segundo, deixamos σ_V constante em 0,15 e variamos σ_C de 0,01 a 1:



Farias (2009), cita que os erros aleatórios são pequenos e podem ser representados pela distribuição gaussiana desde que o desvio da variável real e medida seja de 30 %. Pelos resultados obtidos, percebemos que essa afirmação é verdadeira, uma vez que à medida que aumentamos o valor dos desvios padrões, os erros tendem a aumentar significativamente após o desvio padrão ficar maior do que 0,3.

Situação 2: influência do número de medições na reconciliação

Neste momento, foram fixados os desvios padrões das vazões e composições, respectivamente em $\sigma_V = 0,15$ e $\sigma_C = 0,01$ para investigar a influência do número de medições de processo.



De modo geral, podemos perceber que à medida que o número de medições aumenta, os erros médios tendem a diminuir, tendendo a zero após 14 medições. Também foi notado que a corrente de alimentação tem uma sensibilidade maior do que as outras correntes, caso a reconciliação não seja satisfatória, fazendo os erros se manifestarem sobre ela. No gráfico, seu máximo aconteceu nas corridas contendo 2 medições de processo, com erro de 9,04 %, enquanto as demais variáveis ficaram com seus erros na casa de 10^{-6} %.

CONCLUSÕES

No primeiro caso de estudo, é reafirmado pela simulação, a teoria de que os erros aleatórios são bem representados dentro de uma região gaussiana viável para a reconciliação clássica dos dados ($\sigma = 0,3$). À medida que esses dados contêm desvios maiores, ela não é suficiente. Já na segunda situação, percebe-se que é necessário um número de medições suficiente para que haja significância estatística (no nosso caso, a partir de 14 medições). Se existem poucas medições, a variância tende a deslocar a distribuição gaussiana para um local distante da média real do processo e a reconciliação se torna menos precisa.

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao CNPq e à Fundação Araucária pela bolsa do PIBIC para a produção científica em questão, é de enorme incentivo e nos motiva a continuar neste meio.

REFERÊNCIAS

BASCUR, O. A.; LINARES, R. Grade recovery optimization using data unification and real time gross error detection. **Minerals Engineering**, v. 19, p. 696-702. 2006.

FARIAS, A. C. **Avaliação de Estratégias para Reconciliação de Dados e Detecção de Erros Grosseiros**. 2009. Dissertação (Mestrado em Engenharia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.

FONTOURA, G. B. **Reconciliação de Dados com Discrepância de Modelo Aplicada a uma Coluna de Destilação**. 2009. Trabalho de Diplomação (Bacharel em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, jan. 2018.

VACARO, B. B. **Reconciliação Robusta de Dados de Coluna de Destilação com Erro de Modelo**. 2019. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharel em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2019.

ZANI, J. B. **Reconciliação de Dados em Colunas de Destilação Aplicada à Estimação da Composição da Alimentação**. 2016. Trabalho de Diplomação (Bacharel em Engenharia Química) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, dez. 2016.