

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
UNIDADE ACADÊMICA CENTRO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ARIOSTON ARAÚJO DE MORAIS JÚNIOR

**ELABORAÇÃO DE UM ANALISADOR VIRTUAL UTILIZANDO SISTEMA
HÍBRIDO NEURO-FUZZY PARA INFERIR A COMPOSIÇÃO NUM PROCESSO DE
DESTILAÇÃO**

Maceió
2011

ARIOSTON ARAÚJO DE MORAIS JÚNIOR

**ELABORAÇÃO DE UM ANALISADOR VIRTUAL UTILIZANDO SISTEMA
HÍBRIDO NEURO-FUZZY PARA INFERIR A COMPOSIÇÃO NUM PROCESSO DE
DESTILAÇÃO**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de Concentração: Desenvolvimento e Pesquisa de Processos Regionais.

Linha de Pesquisa I: Modelagem, Simulação, Otimização e Controle de Processos.

Orientadora: Prof^ª. PhD. Cristiane Holanda Sodré

Co-orientador: Prof. DSc. William Gonçalves Vieira

Maceió

2011

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico

Bibliotecária Responsável: Helena Cristina Pimentel do Vale

M827e Morais Júnior, Arioston Araújo.
 Elaboração de um analisador virtual utilizando sistema híbrido neuro fuzzy para inferir a composição num processo de destilação / Arioston Araújo Morais Júnior. – 2011.
 159 f. : il., tabs., grafs.

Orientadora: Cristiane Holanda Sodré.
Dissertação (mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2011.

Bibliografia: f. 128-135.
Anexos: f. 136-159.

1. Analisador virtual. 2. Planta piloto de destilação. 3. Sistema Neuro-Fuzzy. 4. Análise de sensibilidade. I. Título.

CDU: 66.03

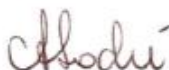
Arioston Araújo de Moraes Júnior

**ELABORAÇÃO DE UM ANALISADOR VIRTUAL UTILIZANDO SISTEMA
HÍBRIDO NEURO FUZZY PARA INFERIR A COMPOSIÇÃO EM UM
PROCESSO DE DESTILAÇÃO**

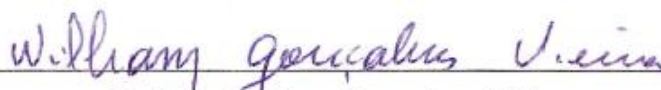
Dissertação apresentada à Universidade Federal de Alagoas, como requisito para a obtenção do Título de Mestre em Engenharia Química

Aprovada em: Maceió, 30 de Março de 2011.

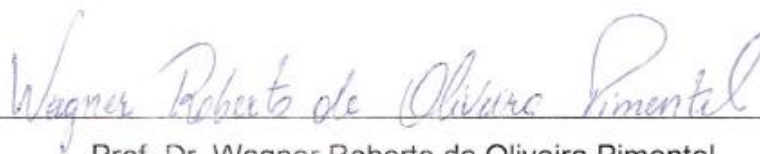
BANCA EXAMINADORA



Prof^a. Dr^a. Cristiane Holanda Sodré
(Orientadora)



Prof. Dr. William Gonçalves Vieira
(Co-orientador)



Prof. Dr. Wagner Roberto de Oliveira Pimentel
(PPGEQ/UFAL)



Prof. Dr. Mauricio Bezerra de Souza Júnior
(UFRJ - Membro Externo)

AGRADECIMENTOS

Justifico a DEUS o sentido de exibir em meu coração o mais puro prazer de amar e sorrir.

Em especial à professora Cristiane Sodré, que lançou em mim a vontade de continuar durante a graduação, possibilitando conhecimento desde a pesquisa de iniciação científica na graduação até a concretização desta dissertação de mestrado. Obrigado por acreditar em mim durante estes últimos cinco anos.

A CAPES-REUNI pela bolsa de Mestrado concedida, a qual contribui com a formação de recursos humanos deste país.

A todos do LASIC (Laboratório de Simulação e Controle da UFAL), em especial: ao amigo engenheiro eletricitista Alex. Durante o tempo em que convivemos, o aprendizado sobre controle de processos foi avançado, já nos momentos em que silenciáramos, buscávamos soluções com os problemas propostos, no entanto quando vibrávamos é porque nossos objetivos foram alcançados. Ao Prof^o DSc. William Gonçalves Vieira “WGV”, com seus ensinamentos, a busca pela conquista parece se tornar breve e a metodologia tem como etapa final a força para prosseguir. Ao bolsista IC Raphael Cruz, pelos passos iniciais nas técnicas de sistemas inteligentes e pela sua amizade construtiva.

Meus notórios agradecimentos aos meus amigo(a)s: Isya Cristine, Paulo Aliberto Pucú, Soraya Almeida, Ramiro Batinga, Joseilton Ferreira, Dr. Géu Henrique, Charles Patrick, Klebson “Kel” e ao mais novo pesquisador Embrapa Dr. Sc. Dheyne Melo “Ceará” em Maceió será sempre bem-vindo e a amizade será sempre a mesma.

Aos meus alunos das disciplinas de Modelagem e Simulação de Processos Químicos e Tecnologia de Cloro Soda; com vocês aprendi que ser docente é a forma mais prática e concisa de aprendizado, e ser discente é respeitar o conhecimento.

Por último e de suma importância: a minha família, com carinho aos meus pais Arioston Araújo de Moraes e Neide dos Santos. Também registrando meu agradecimento a família Pantaleão e Bernardo: Selma, Lella, Sarah e Robson, que sempre acreditaram na minha decência e capacidade. A meu amor, minha noiva Isabelle, que jamais me permitiu desistir e até entendeu os momentos afastados, sem você meu mundo não é mais mundo.

“Depois de uma primeira vitória, não esmoreça nem dê à tuas tropas um repouso precipitado. Empunha tua espada com a rapidez de torrente que se precipita de um despenhadeiro. Que seu inimigo não tenha tempo sequer de perceber o que está acontecendo e somente recolher os louros da vitória quando o inimigo estiver aniquilado, dando-lhe assim, condição de fazê-lo com segurança e tranquilidade.”

Sun Tzu.

RESUMO

Este trabalho descreve um procedimento para o desenvolvimento de um analisador virtual, para predição da composição de topo de uma coluna destilação metanol-água em uma planta piloto. Analisador virtual é um modelo matemático que é usado para estimar variáveis de interesse a partir de variáveis secundárias de fácil medição. Esta tecnologia surge de uma real dificuldade operacional ou do alto custo de obtenção da variável desejada. O modelo utilizado nesta abordagem de construção do analisador virtual utiliza técnicas de sistemas inteligentes, tipo caixa preta, através da técnica híbrida *neuro-fuzzy*. A aquisição dos dados para treinar e validar o analisador virtual foi feita através de um modelo matemático validado a partir de dados experimentais da planta piloto. Uma das limitações do sistema *neuro-fuzzy* é que ele trabalha com um número limitado de entradas, dependendo da explosão combinatória das regras *fuzzy*. Para minimizar estes efeitos e conseguir reduzir o número de regras nos conjuntos de treinamento da rede *neuro-fuzzy*, foi utilizada a técnica de agrupamento de dados, denominada agrupamento substrativo. Com a intenção de se obter um melhor desempenho do analisador virtual no processo dinâmico, que é a coluna de destilação, foi empregada uma regressão de um tempo de amostragem nas variáveis de entrada selecionadas, alterando o número de entradas de 9 para 18, sendo 9 variáveis no tempo de amostragem atual e 9 variáveis em um tempo de amostragem anterior. O processo de destilação mostrou-se adequado para o presente estudo, pois as medições de composições são de difíceis obtenções. A estratégia computacional para um projeto de analisador virtual produziu bons resultados, de forma a estimar a composição do topo da coluna de destilação binária metanol-água.

Palavras-chave: Analisador virtual. Planta piloto de destilação. Análise de sensibilidade de variáveis. Sistema *Neuro-Fuzzy*.

ABSTRACT

This work describes a procedure for a soft sensor design to predict the top composition of a methanol-water distillation column. Soft sensor is a mathematical model that is used to estimate variables of interest from secondary variables easy to measure. This technique comes from an operational difficulty or high cost obtaining the desired variable. The approach to build a soft sensor was an artificial intelligence modeling, a black-box type, using a hybrid neuro-fuzzy technique. The data acquisition to train and validate the soft sensor comes from a mathematical model validated from pilot plant data. One of the limitations of neuro-fuzzy system is that it works with a limited number of inputs, depending on the combinatorial explosion of fuzzy rules. To minimize these effects and to reduce the number of rules in the training data sets of virtual analyzer, a data clustering technique called subtractive clustering was used. To obtain a better performance of soft sensor for the dynamic process, distillation column, a regression of lone sampling time in selected variables was used, changing the number of entries from 9 to 18 variables, nine variables at actual sampling time and nine variables at previous sampling time. The distillation column is a good process for the present study because composition measurements are the main objective of this process and are difficult to obtain. The computational strategy for a soft sensor design produced good results in estimating the top composition of the methanol-water distillation column.

Keywords: Soft Sensor. Pilot plant distillation. Sensitivity analysis variables. Neuro-Fuzzy system.

LISTA DE FIGURAS

- Figura 1.1 Metodologia empregada na construção do analisador virtual.
- Figura 2.1 Fluxograma de um Analisador virtual desenvolvido com entradas diretas de medidores físicos.
- Figura 2.2 Fluxograma de uma AV que utiliza como entradas os resultados obtidos do laboratório.
- Figura 2.3 Fluxograma de um AV que pode ser utilizado para a correção da Variável inferida.
- Figura 2.4 Analisador Virtual cujas entradas são fornecidas por um Modelo matemático do processo, para estimativa de uma variável.
- Figura 2.5 Fluxograma de técnicas de modelagem caixa preta empregadas para construção de analisador virtual.
- Figura 2.6 Diagrama de Blocos da Técnica *Forward Selection*.
- Figura 2.7 Algoritmo da Técnica *Backward Elimination*.
- Figura 2.8 Algoritmo da técnica *Stepwise Regression*.
- Figura 2.9 Algoritmo de Etapas da técnica *Regressão por Etapas nas Predições do Modelo (SRMP)*.
- Figura 2.10 Algoritmo de etapas de seleção de variáveis por Algoritmo Genético (AG).
- Figura 3.1 Medição de Composição por instrumento automático de qualidade (Analisador em Linha).
- Figura 3.2 – Infraestrutura montada para analisadores. Em a) casa de analisador em uma refinaria, em b) interior de uma casa e em b) detalhe do equipamento.
- Figura 3.3 - Foto da Planta Piloto de Destilação em estudo.
- Figura 3.4 Fluxograma da Coluna de Destilação Contínua.
- Figura 3.5 Fluxo interno de líquido de vapor em cada bandeja da Coluna;
- Figura 3.6 Variação de grau na Razão de Refluxo e Vazão de Vapor do refeedor;
- Figura 3.7 Variação de grau na Composição e na Vazão de Alimentação.
- Figura 4.1 Neurônio Artificial
- Figura 4.2 Alguns tipos de funções de Transferências ou Ativação.
- Figura 4.3 Arquitetura de rede *Feedforward*.
- Figura 4.4 - Rede MLP multicamadas.
- Figura 4.5 Arquitetura de uma RNA recorrente, de Elman.
- Figura 4.6 Diagrama de blocos de aprendizagem supervisionada.
- Figura 4.7 Diagrama: (a) dos conjuntos A e B; (b) da união dos conjuntos A U B.

Figura 4.8 Diagrama: (a) dos conjuntos A e B . (b) da intersecção $A \cap B$.

Figura 4.9 Funções de pertinência para a variável “Pressão”.

Figura 4.10 Tipos de funções pertinência mais comuns.

Figura 4.11 Variável lingüística “PRESSÃO” e um conjunto fuzzy de valores discretos.

Figura 4.12 Funções de Pertinência para variável lingüística (P).

Figura 4.13 Diagrama de Blocos Funcionais num Sistema de Inferência Fuzzy.

Figura 4.14 Ambiente ANFIS, detalhamento do toolbox ANFIS do Matlab®.

Figura 4.15. Classificação do sistema *neuro-fuzzy* quanto às características fuzzy do sistema.

Figura 4.16. Arquitetura típica de um modelo ANFIS.

Figura 4.17 Mecanismo de inferência - ANFIS.

Figura 5.1 Perturbação degrau de +10% no Fluxo de líquido de Alimentação.

Figura 5.2 Perturbação degrau de +5% na composição de líquido de Alimentação.

Figura 5.3 Perturbação degrau de +5% na Razão de refluxo.

Figura 5.4 Perturbação degrau de -10% na composição em Q_R .

Figura 5.5 Curva Comparativa da composição após degrau nas MV's do processo.

Figura 5.6 Menor constante de tempo do sistema.

Figura 5.7 Detalhe Variação da composição do componente metanol na fase líquida no topo (condensador).

Figura 5.8 Auto-Covariância das Composições $x_{1,1}$ com Atraso.

Figura 5.9 – Perfil de temperaturas da coluna durante a excitação aleatória.

Figura 5.10 Temperaturas da Seção de Esgotamento da coluna.

Figura 5.11 Covariância Cruzada dos vetores de entrada e saída, respectivamente temperatura nos estágios T_i e a composição $x_{1,1}$.

Figura 5.12 Covariância Cruzada dos vetores de entrada e saída, respectivamente temperatura nos estágios T_i e a composição $x_{1,1}$.

Figura 5.13 Covariância Cruzadas das temperaturas dos estágios e $X_{1,1}$ atrasadas em 250 (T).

Figura 5.14 Covariância Cruzadas das temperaturas dos estágios e $X_{1,1}$ atrasadas em 50 (T).

Figura 5.15 AV para inferir a composição de metanol no topo da coluna ($x_{1,1}$).

Figura 5.16 Ajuste dos Parâmetros na técnica de agrupamento substrativo. Fonte: Ambiente ANFIS, Matlab®.

Figura 5.17 Arquitetura do Analisador Virtual gerado pela rede neuro-fuzzy.

Figura 5.18 Comparação do valor estimado da composição feita pelo analisador virtual.

Figura 5.19 Regressão dos Dados de Treino.

Figura 5.20 Erro Percentual de todo o conjuntos de dados (882 pontos).

Figura A.1 Diagrama de Blocos para bandejas não interagindo.

Figura A.3 Bandejas da Coluna n_2 , n_F , n_{11} e n .

Figura A.3 Rotina de programação do modelo da coluna de destilação em estudo.

Figura 7.4 de a) a q), Funções pertinências das 18 entradas e única saída (composição) do sistema *neuro-fuzzy* gerado.

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 Modelos Possíveis para 4 variáveis candidatas numa busca exaustiva.

Tabela 3.1 Dimensões da bandeja de Coluna.

Tabela 3.2 Dimensões do Condensador.

Tabela 3.3 Dimensões do Refervedor.

Tabela 3.4 Condições da Coluna de Destilação Metanol-Água.

Tabela 4.1 Parâmetros da lógica fuzzy e da rede neural artificial.

Tabela 5.1 Variáveis Manipuladas (MV) e Saídas Seleccionadas.

Tabela 5.2 Entradas e Saídas Seleccionadas Para o Modelo.

Tabela 5.3 Índices de desempenho do analisador virtual.

Tabela A.1 é mostrada os valores dos parâmetros A_L e B_L .

Tabela A.2 Constantes de Antoine para mistura Metanol e água.

LISTA DE EQUAÇÕES

- Equação (1) Exemplo de um modelo fenomenológico não-linear.
- Equação (2) Relação termodinâmica da variável composição, temperatura e pressão de uma mistura em ebulição.
- Equação (3) Equilíbrio líquido-vapor para o componente i , que descreve o comportamento do pelos coeficientes de fugacidade e de atividade.
- Equação (4) Somatório das composições da fase líquida.
- Equação (5) Somatório das Composições da fase vapor.
- Equação (6) Fração entre as composições x_i e y_i .
- Equação (7) Relação entre as composições e a onstante de equilíbrio para o componente i .
- Equação (8) Relação entre a composição da fase líquida x_i e da fase vapor y_i com a constante de equilíbrio para o componente i .
- Equação (9) Somatórios da composição da fase líquida numa mistura binária.
- Equação (10) Variação da composição numa equação, uma função de T e P
- Equação (11) Diferenciação de x_1 uma função de T e P
- Equação (12) Relação termodinâmica para um variação de temperatura (ΔT) e da pressão (ΔP), para inferir a mudança correspondente na concentração.
- Equação (13) Função de covariância cruzada ou autocorrelação.
- Equação (14) Resposta da composição ao degrau.
- Equação (15) Função de ativação linear
- Equação (16) Equação da função de ativação Sigmóide
- Equação (17) Equação da função de ativação Hiperbólica
- Equação (18) Equação da Função de ativação tangente Hiperbólica.
- Equação (19) Equação da Função Logística.
- Equação (20) Derivada da rede_{pi} do algoritmo backpropagtion.
- Equação (21) Cálculo do erro de uma unidade de saída do algoritmo backpropagation.
- Equação (22) Erro em uma unidade interna da rede.
- Equação (23) Função pertinência de um conjunto Fuzzy
- Equação (24) Pares ordenados de um conjunto Fuzzy.
- Equação (25) Equação do conjunto fuzzy A quando o universo X for discreto e finito.
- Equação (26) Equação do conjunto fuzzy A quando o universo X for contínuo.
- Equação (27) Equação do *complemento* A' de um conjunto fuzzy A .
- Equação (28) Função característica dos conjuntos resultantes, interseção.

Equação (29) Função característica dos conjuntos resultantes, união.

Equação (30) União de conjuntos fuzzy representada com os operadores *max* e *min*.

Equação (31) Intersecção de conjuntos fuzzy representada com os operadores *max* e *min*.

Equação (32) Valor do valor inferido pela regra *modus ponens generalizada*.

Equação (33) Função de pertinência para a regra *modus ponens generalizada*.

Equação (34) Modelo neuro-fuzzy com base no modelo do tipo de Takagi-Sugeno.

Equação (35) Camada de fuzzyficação do modelo ANFIS.

Equação (36) Disparo das regras do modelo ANFIS.

Equação (37) Normalização do disparo das regras.

Equação (38) Linearização da saída de cada regra modelo ANFIS.

Cálculo da saída de cada regra modelo ANFIS.

Equação (39) Cálculo da defuzzyficação no modelo ANFIS.

Equação (40) Potencial de atração *cluster* inicial.

Equação (41) Potencial de atração *cluster*, para cada ponto x_i revisado.

Equação (42) Potencial do *K-ésimo* centro de agrupamento de cada ponto.

Equação (43) Diferença entre os estados estacionários do sistema.

Equação (44) Cálculo do Tempo de acomodação do metanol na fase líquida no último estágio da coluna.

Equação (45) Função de autocovariâncias linear

Equação (46) Função de autocovariâncias não linear

Equação (47) Erro médio quadrático.

Equação (48) Média do erro absoluto em percentual.

Equação (49) Relação de Francis que fornecer a vazão para cima do vertedouro do prato em escoamentos com vertedouros retangulares;

Equação (50) Relação de FRANKS para descrever o fluxo de líquido em cada bandeja;

Equação (51) Função de transferência para bandejas, relação de entrada e saída do fluxo de líquido;

Equação (52) Resposta para o caso de quatro bandejas em série, se ocorrer uma mudança de grau de tamanho AA na variável de entrada $L_o(s)$, a resposta no domínio do tempo $L_n(t)$ para cada de interação;

Equação (53) Fluxo ao longo do refeedor;

Equação (54) A lei de Raoult;

Equação (55) Cálculo do coeficiente de atividade para o metanol;

Equação (56) Cálculo do coeficiente de atividade para a água;

Equação (57) Equação de Antoine cálculo da pressão de vapor do metanol;

Equação (58) Equação de Antoine cálculo da pressão de vapor do água;

Equação (59) Cálculo da eficiência de Murphree;

Equação (60) Composição real deixando a bandeja em qualquer instante;

Equação (61) Balanço de massa no tambor de refluxo;

Equação (62) Balanço de massa componente no tambor de refluxo;

Equação (63) Diferenciando do balanço de massa componente em relação a M_1 e a x_1 ;

Equação (64) Variação da composição x_1 com o tempo;

Equação (65) Vapor que deixa a bandeja superior $n=2$;

Equação (66) Calor específico da mistura metanol e água;

Equação (67) Balanço de massa na bandeja de topo $n=2$;

Equação (68) Balanço componente na bandeja de topo $n=2$;

Equação (69) Diferenciando do balanço de massa componente em relação a M_2 e a x_2 ;

Equação (70) Variação do componente com o tempo na bandeja n_2 ;

Equação (71) Fluxo de líquido que deixa a bandeja de topo;

Equação (72) Vapor que deixa a bandeja de alimentação $n=7$;

Equação (73) Balanço de massa na bandeja $n=7$;

Equação (74) Balanço componente na bandeja $n=7$;

Equação (75) Diferenciando da Equação (74);

Equação (76) Variação do componente x_7 com o tempo;

Equação (77) Fluxo de Líquido que sai da bandeja de alimentação;

Equação (78) Variação no hold-up molar na seção de retificação;

Equação (79) Balanço componente da seção de retificação;

Equação (80) A diferenciação das variáveis x_n e M_n ;

Equação (81) Variação do componente x_n com o tempo na seção de retificação;

Equação (82) Fluxo de líquido da seção de retificação;

Equação (83) Balanço de massa na seção de esgotamento;

Equação (84) Balanço de massa componente transiente na seção de esgotamento;

Equação (85) Diferenciação da Equação (84);

Equação (86) Balanço componente da seção de esgotamento;

Equação (87) Dinâmica de fluxo de líquido da seção de esgotamento;

Equação (88) Balanço de massa na bandeja de base $n=11$;

Equação (89) balanço de massa componente na bandeja de base $n=11$;

Equação (90) Diferenciação da Equação (89), em relação a ambas variáveis x_{11} e M_{11} ;

Equação (91) Balanço componente final na bandeja de base $n=11$ da coluna;

Equação (92) Fluxo de líquido que deixa a bandeja $n=11$;

Equação (93) Calor para o refeedor;

Equação (94) Fluxo de vapor que deixa o refeedor;

Equação (95) Balanço de massa no refeedor;

Equação (96) Balanço componente no refeedor;

Equação (97) Diferenciação de ambas as variáveis na Equação (96);

Equação (98) Balanço componente resultante do refeedor;

Equação (99) Balanço de massa no *overflow*;

Equação (100) Balanço de massa componente no *overflow*;

Equação (101) Diferenciando ambas as variáveis da Equação (100);

Equação (102) Variação do componente x_{13} no *overflow* com o tempo;

Equação (103) Cálculo para a densidade da mistura, metanol e água;

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	18
1.1 Contexto	18
1.2 Motivação para o trabalho	21
1.3 Objetivo geral	22
1.4 Estrutura da dissertação	23
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	24
2.1 Introdução	24
2.2 Entradas do analisador virtual	25
2.3 Modelos aplicados	27
2.4 Seleção de variáveis	33
2.4.1 Métodos de busca exaustiva.....	34
2.4.2 Métodos evolutivos.....	35
2.4.2.1 Adição sequencial (Forward Selection (FS)).....	36
2.4.2.2 Seleção por eliminação (Backward Elimination (BE)).....	37
2.4.2.3 Regressão por etapas (Stepwise Regression (SR)).....	38
2.4.2.4 Regressão por etapas nas predições do modelo (Stepwise Regression on Model Predictions (SRMP)).....	39
2.4.3 Métodos de busca aleatória.....	40
2.4.4 Outras técnicas.....	41
2.4.5 Análise de sensibilidade.....	42
3 COLUNAS DE DESTILAÇÃO	44
3.1 Introdução	44
3.2 Métodos de medição de composição	45
3.3 Equipamento experimental	47
3.3.1 Descrição física do equipamento.....	48
3.4 Modelo dinâmico utilizado	51
3.4.1 Modelo da coluna de destilação.....	52
3.4.2 Planejamento experimental.....	54

4 MATERIAIS MÉTODOS.....	57
4.1 Escolha das variáveis.....	57
4.1.1 Relação termodinâmica da variável composição.....	57
4.2 Análise das variáveis de saída e de entrada do modelo.....	60
4.2.1 Variáveis de saída.....	61
4.2.2 Variáveis de entrada (variáveis manipuladas).....	62
4.2.3 Variáveis de entrada(não - diretamente manipuladas).....	62
4.2.4 Estudo de sensibilidade das temperaturas.....	62
4.2.5 Escolha do período ou tempo de amostragem.....	63
4.3 Modelo do analisador virtual.....	64
4.3.1 Redes neurais artificiais (RNA).....	66
4.3.1.1 Neurônios artificiais.....	66
4.3.1.2 Tipos de funções de ativação.....	68
4.3.1.3 Arquiteturas de RNA.....	69
4.3.1.4 Aprendizagem da RNA.....	72
4.3.1.5 Algoritmo de treinamento.....	74
4.3.1.5.1 Algoritmo de retropropagação (backpropagation).....	74
4.3.1.5.2 Critério de parada.....	76
4.3.2 Lógica fuzzy (nebulosa).....	77
4.3.2.1 Fundamentos dos conjuntos e da lógica fuzzy.....	78
4.3.2.2 Definições e operações dos conjuntos fuzzy.....	80
4.3.2.3 Variáveis lingüísticas.....	82
4.3.2.4 Funções de pertinência.....	84
4.3.2.5 Regras se... então e sistemas de inferência nebulosa.....	87
4.3.3 Sistema híbrido neuro-fuzzy.....	92
4.3.3.1 Sistema inferência neuro-fuzzy adaptativo (ANFIS).....	94
4.3.3.2 Arquitetura do modelo ANFIS.....	95
4.3.3.3 Treinamento do sistema ANFIS.....	99
4.3.3.5 Agrupamento dos dados (remoção de erros grosseiros “outliers”).....	100
5 RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	104
5.1 Seleção das entradas do analisador virtual.....	104
5.1.1 Variáveis não-diretamente manipuladas selecionadas.....	107

5.1.1.1 Cálculo de t pela constante de tempo () do sistema.....	107
5.1.1.2 Cálculo de t pelo menor tempo de acomodação.....	110
5.1.1.3 Cálculo de t pelas análises de autocovariância.....	111
5.1.1.4 Escolha do sinal de excitação.....	113
5.1.1.5 Aquisição dos dados.....	114
5.2 Construção do analisador virtual.....	119
5.3 Redução de dimensionalidade.....	120
5.4 Arquitetura da rede neuro-fuzzy.....	121
5.5 Treinamento do analisador virtual de composição.....	122
5.6 Validação do analisador virtual.....	122
5.7 Conclusões.....	126
5.8 Sugestões para trabalhos futuros.....	127
REFERÊNCIAS.....	128
APÊNCIDE A.....	136
APÊNDICE B.....	154

1 INTRODUÇÃO

1.1 Contexto

A cada dia as indústrias modificam e melhoram suas tecnologias quando são requeridas em aumentar sua produção, condições de segurança e seus índices de eficiência.

Neste contexto, a importância de um acompanhamento de um grande conjunto de variáveis de processo utilizando dispositivos de medição adequados é evidente. No entanto, uma série de obstáculos para o controle e o acompanhamento em linha de algumas variáveis importantes nos processos industriais pode tornar este objetivo impraticável. Seja por razões nas quais o sensor de medição adequado não existe, quando este sensor é exorbitantemente caro e, ainda, quando este tem uma difícil manutenção.

A medição de variáveis físicas é garantida satisfatoriamente com o uso de inúmeros sensores físicos, como exemplos, se destacam os termômetros e termopares na medição de temperatura, o tubo de Bourdon na medição de pressão, a placa de orifício e rotâmetros para medição de vazão, e também sensores de pressão diferencial e flutuantes para medição nível, dentre outros.

Já quando se deseja medir variáveis químicas e bioquímicas não facilmente mensuráveis, tais como composição de produtos, biomassa e pH em tempo real, então surge o problema de como fazer tais medições.

Outro problema é associado quando na previsão de falha de um sensor físico, seja pela sua quebra ou pela sua retirada do processo para manutenção e calibração. Segundo FORTUNA *et al.* (2007), para resolver estas e outras dificuldades foi que surgiram então os analisadores Virtuais (AV), também conhecido como *SoftSensors* (SS), Modelo Inferencial (MI) ou ainda Sensor Virtual (SV).

Analisador virtual consiste em um modelo matemático que é utilizado para estimar variáveis de interesse em função de variáveis de entrada, ditas secundárias, de fácil medição, esta alternativa surge de uma dificuldade operacional ou do alto custo na obtenção da variável desejada.

A necessidade de implantação de um AV surge dos reais tipos de problemas a serem enfrentados, (LOTUFO e GARCIA, 2008), tais como:

- ❖ Inferência de variáveis;
- ❖ Detecção de falhas;

- ❖ Previsão de desempenho;
- ❖ Aproximação de funções não-lineares;
- ❖ Identificação de padrões de processos os quais são requeridos.

Nestes casos, o AV pode ser uma boa alternativa em relação às medições tradicionais, desde que as variáveis de entrada (secundárias) possam ser medidas sem problemas e quando a simulação do processo, geralmente responsável pelo fornecimento dos dados para a geração do modelo do analisador implementado em *software*, seja capaz de fornecer a variável desejada.

Devido à natureza dos processos químicos e sistemas de engenharia de processo, os estados de muitas das variáveis secundárias refletem nos estados de variáveis complexas (JERBIC *et al.*, 2007).

Uma das maiores aplicações no meio industrial dos analisadores virtuais é para inferir a composição de compostos químicos, principalmente no processo de destilação, haja vista algumas características inerentes a tal processo químico.

Neste trabalho foi proposta uma estratégia de construção de um analisador virtual, que engloba desde a aquisição de dados de um modelo dinâmico num processo de destilação binária, a seleção das variáveis de entrada, construção de um modelo caixa-preta, utilizando sistema *neuro-fuzzy*, até a validação do modelo inferencial.

A aquisição dos dados usados para construção do analisador virtual foi feita através de um modelo dinâmico de uma planta piloto, num processo contínuo de destilação binária projetado para separar a mistura metanol e água. O modelo dinâmico utilizado foi inicialmente validado experimentalmente por SODRÉ (1999).

A etapa de seleção de variáveis é quem vai viabilizar ou não a construção do modelo inferencial, uma vez que esta garante a confiabilidade da estrutura do modelo e possibilita a validação do analisador virtual.

Neste trabalho foi utilizada a técnica de seleção de variáveis secundárias por meio da análise de sensibilidade. Esta técnica fornece informações sobre as respostas do processo frente às modificações em variáveis manipuladas (SECCHI *et al.*, 2006). Também foi utilizada a função de covariância cruzada, com a finalidade de fazer uma análise dinâmica de quais temperaturas dos pratos tinham maior influência na composição de metanol, por conseguinte indicá-las como entradas no modelo inferencial.

Outras técnicas de seleção de variáveis podem ser utilizadas em uma análise dinâmica, como por exemplo, a Decomposição de Valores Singulares (SVD) utilizada por BOYD

(1975), quando a composição é estimada medindo apenas as temperaturas em alguns pratos, e também a Análise Dinâmica de Componentes Principais (DPCA), utilizada por SALVATORE (2007).

Das metodologias usuais mais empregadas na construção do modelo inferencial, destacam-se a modelagem fenomenológica ou caixa branca, os modelos de identificação de sistemas ou caixa preta, e a união destas que é a dita modelagem caixa cinza.

A modelagem caixa preta foi o tipo de modelagem utilizada neste trabalho, ela aplica técnicas de sistemas inteligentes ou técnicas estatísticas na geração do analisador. A identificação de sistemas é uma ferramenta matemática bastante empregada na construção de analisador virtual, devido ao fato de não requerer um conhecimento fenomenológico de um dado processo.

As técnicas de sistemas inteligentes, por possuírem características de não-linearidade, têm grandes aplicações na construção dos sensores, dentre elas destacam-se a Rede Neural Artificial (RNA) e a Lógica *Fuzzy* ou Nebulosa.

O emprego da RNA para construção de sensores se justifica pela sua habilidade de aprendizado adaptativo, suas propriedades de generalização e a capacidade de processamento paralelo. No entanto, os valores das conexões (pesos) os quais caracterizam uma RNA são difíceis de entender e explicar, conferindo pouca interpretabilidade ao modelo gerado (ARRUDA *et al.*, 2007).

Já os sistemas de inferência *fuzzy* são implementações computacionais baseadas nos conceitos da teoria de conjuntos nebulosos, nas regras “Se... Então” nebulosas e na inferência nebulosa, JANG e SUN (1995). Estes são adequados para criação de modelos a partir de um conhecimento explícito de um conjunto de dados, originário de especialistas humanos.

Recentemente, com a publicação do trabalho de JANG (1993), surgiram muitas aplicações de sistemas híbridos, cujo termo híbrido significa cruzamento de espécies diferentes, que utiliza duas ou mais técnicas de modelagem, assim proporciona um sistema heterogêneo com características inteligentes.

A técnica de sistema inteligente híbrida mais aplicada é aquela que combina em sua arquitetura as redes neurais artificiais e a lógica *fuzzy*, gerando uma modelagem *Neuro-Fuzzy*, cuja associação permite integrar as vantagens de cada abordagem e minimizar as deficiências de ambas.

O Sistema de Inferência *Neuro-Fuzzy* Adaptativo (ANFIS), difundido por JANG (1993), é a técnica empregada neste trabalho, por ser o meio mais fácil de inserir conhecimento a priori dentro de um analisador virtual.

Nos sistemas *neuro-fuzzy* podem ocorrer problemas devido ao aumento da dimensão na entrada, ou seja, quando se tem um grande conjunto dados de entrada isso faz com que a base de regras *fuzzy* promova um aumento exponencial, proporcionando um elevado custo computacional, na memória do sensor e na quantidade de dados necessários para treinamento do analisador virtual. Tendo em vista estes problemas e para garantir a viabilidade do AV, é utilizada uma técnica baseada no agrupamento de dados “Clusterização”, por meio do agrupamento substrativo do inglês *Subtractive Clustering*. Com essa técnica é possível obter uma estrutura do modelo que represente bem a dinâmica da aplicação, com um menor número de parâmetros livres que represente adequadamente o sistema e contenha uma maior precisão trabalhando em diferentes faixas de operação.

Torna-se então viável, medirem tempo real variáveis de interesse para o processo, já que uma das grandes características de muitas plantas industriais é a relação de interdependência entre suas variáveis, o que tem levado ao desenvolvimento de técnicas que permitam a estimativa de algumas delas, através de informações adquiridas por meio de outras variáveis facilmente mensuráveis, tais como temperatura, pressão, vazão, nível e outras.

1.2 Motivação para o trabalho

As colunas de destilação, junto com o Reator de Mistura Perfeita (“CSTR” do inglês *Continuous Stirred Tank Reactor*) são provavelmente os processos mais importantes e populares da engenharia química (LUYBEN, 1999).

Devido as características inerentes e às limitações operacionais típicas, comuns em todo processo químico, as colunas de destilação apresentam algumas restrições hidráulicas, na separação e de transferência de calor.

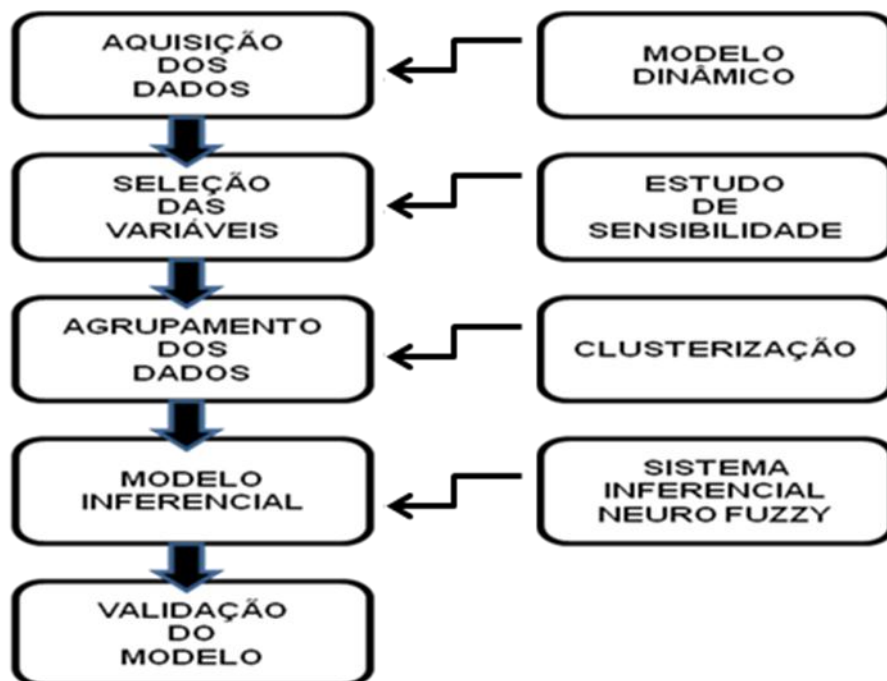
Pode-se dizer que a maior dificuldade no processo de destilação está ligada ao controle e na forma de obtenção dos valores das composições dos produtos. A variável composição, devido a sua dificuldade de obtenção, pode ser considerada uma grandeza não diretamente mensurável que sofre constantes modificações no processo quando submetida a diferentes condições de operação.

Assim, o processo de destilação mostrou-se interessante para o presente estudo, uma vez que apresenta dificuldades na obtenção desta variável de interesse. O analisador virtual é uma boa alternativa na inferência ou estimativa desta variável, desde que a sua metodologia de construção seja capaz de fornecer o objetivo final que é a medição da composição, em comparação com a composição do produto gerada pelo modelo da coluna.

1.3 Objetivo geral

Este trabalho tem como principal objetivo desenvolver um analisador virtual, utilizando uma abordagem híbrida de sistemas inteligentes *neuro-fuzzy*, para estimar em tempo real a composição do composto metanol no topo de uma coluna de destilação, em uma planta piloto. Para que a estratégia desenvolvida seja alcançada satisfatoriamente foi proposta a seguinte metodologia, conforme descrita na Figura 1.1.

Figura 1.1 Metodologia empregada na construção do analisador virtual.



Fonte: AUTOR (2010).

Cada uma das etapas da estratégia desenvolvida foi seguida conforme a metodologia apresentada na Figura 1.1. Além disso, nos capítulos seguintes desta dissertação serão descritas, de forma com que cada etapa destaca o assunto específico citando suas principais referências bibliográficas e o todo desenvolvimento da metodologia proposta.

1.4 Estrutura da dissertação

No Capítulo 2 é abordada a revisão bibliográfica necessária para a construção do analisador virtual, suas principais fontes de entrada utilizadas na estimativa de inferência, os principais tipos de modelos utilizados para construção do sensor, além de uma ampla revisão das técnicas de seleção de variáveis, o conceito de analisador virtual, a importância de sua construção nos processos industriais, as principais fontes das entradas utilizadas na estimativa de inferência e os modelos utilizados para construção do sensor, assim como a metodologia aplicada neste trabalho, a estratégia de construção do analisador.

No Capítulo 3 é apresentada a Planta Piloto da Coluna de Destilação metanol-água, bem como o modelo dinâmico utilizado para a aquisição de dados. As técnicas tradicionais de medição de composição como a cromatografia gasosa em análise laboratorial e também em linha “*online*” são também apresentadas.

No Capítulo 4 é mostrada a metodologia utilizada na construção do analisador virtual, abrangendo uma ampla revisão das técnicas de seleção de variáveis, desde as técnicas de análise multivariáveis, como a adição Sequencial (*Forward Selection*), dentre outras técnicas, e também a apresentação do método de análise de sensibilidade de variáveis. Também é apresentada a função de covariância cruzada, que permitiu selecionar o perfil de variáveis não-diretamente manipuladas (temperaturas) por alta correlação com a composição do produto. Foram analisados os pratos mais sensíveis às perturbações efetuadas com relação à composição. Ainda é apresentada a união das técnicas de sistemas inteligentes como a RNA e lógica *Fuzzy* formando uma abordagem híbrida caixa-preta, denominada sistema de inferência *Neuro-Fuzzy*, que cada vez mais vêm sendo aplicada em sistemas em que há ausência de recursos da saída.

No Capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos com a técnica de seleção de variáveis e do analisador virtual de composição utilizando o modelo *neuro-fuzzy* ANFIS.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Introdução

Analisador virtual (AV) consiste em um modelo matemático que é utilizado para estimar variáveis de interesse em função de variáveis de entrada, ditas secundárias, que podem ser variáveis de fácil medição (tais como Temperaturas “T”, Pressões “P”, Níveis “L”, Vazões “F”, e outras)

Segundo NAGAY e ARRUDA (2004) o AV se apresenta como uma abordagem alternativa para a estimativa de variáveis do processo nos casos onde sensores físicos não estão disponíveis, devido ao seu alto custo de instalação ou devido a limitações técnicas. Sendo assim, os modelos matemáticos de processos destinados a estimativa de variáveis, podem ajudar a reduzir a necessidade de dispositivos de medição, melhorar a confiabilidade do sistema e desenvolver políticas avançadas de controle (FORTUNA *et al.*, 2007).

Os analisadores ou sensores virtuais do inglês “*Soft Sensors*” são uma valiosa ferramenta em diversos campos de aplicações industriais. Aqui destacamos alguns exemplos como: refinarias de indústrias químicas e petroquímicas, fornos de cimento, usinas nucleares, indústrias de papel e celulose, de transformação de produtos alimentícios, acompanhamento da poluição urbana e industrial, dentre outras.

Nestas e em outras aplicações, a importância do acompanhamento de um grande conjunto de variáveis do processo e uso adequado de sistemas de medição é, portanto, claro. Infelizmente, algumas limitações nos processos tornam o objetivo de medir algumas variáveis em tempo real, muitas vezes uma tarefa impraticável.

Com isso, segundo LAHIRI e KHALFE (2009), para alcançar a melhoria da qualidade do produto, é preciso desenvolver um sistema com pelo menos uma das seguintes características:

- ❖ Capaz de prever a qualidade do produto a partir de condições de funcionamento;
- ❖ Obter as melhores condições operacionais que possam melhorar a qualidade do produto;
- ❖ Detectar falhas ou mau funcionamento para evitar uma operação indesejada.

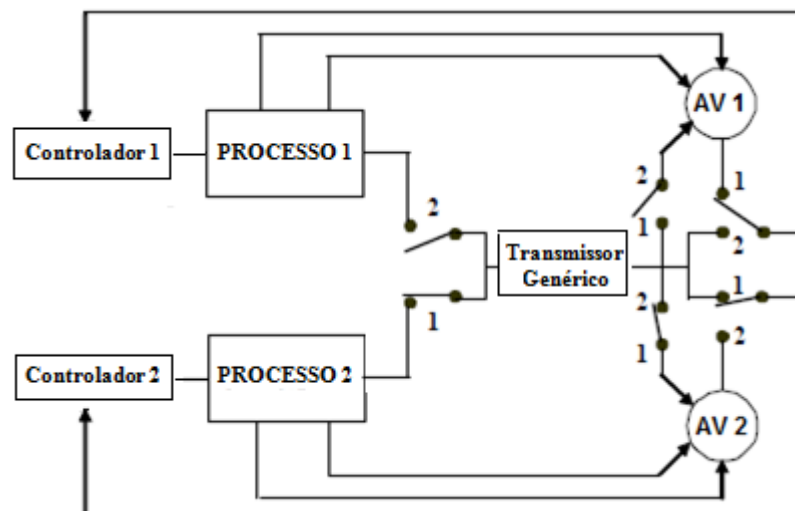
Logo, o que se quer é construir um modelo matemático que seja capaz de fornecer a variável desejada através de entradas facilmente disponíveis, assim o Analisador Virtual é capaz de superar as dificuldades de medições que são geralmente encontradas na indústria, principalmente quando se trata da qualidade final dos produtos.

2.2 Entradas do analisador virtual

Nos analisadores virtuais, o que garante uma boa estimativa de inferência da variável desejada são as entradas, muitas vezes, como as utilizadas nesta dissertação, as entradas são provenientes de um modelo matemático do processo, em outros casos as entradas são obtidas de dados oriundos de análises laboratoriais, e ainda podem ser provenientes de sensores físicos diretamente instalados na planta.

A Figura 2.1 mostra o fluxograma de um analisador virtual que utiliza dados amostrados de uma planta industrial. Neste caso, os dados são diretamente medidos por sensores físicos como medidores de vazão, temperatura, pressão e outros.

Figura 2.1 – Fluxograma de um Analisador Virtual desenvolvido com entradas diretas de medidores físicos, onde AV 1 é o primeiro analisador e AV 2 é o segundo analisador.



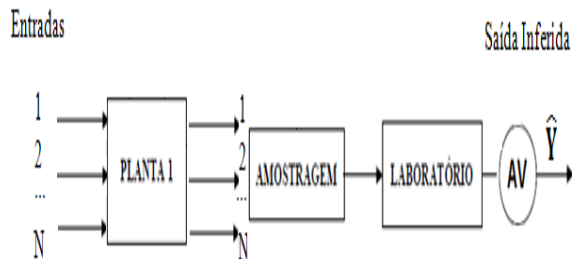
Fonte: Adaptada de LOTUFO e GARCIA (2008).

Este tipo de configuração não é muito aceita no campo industrial, uma vez que problemas com as medições das variáveis físicas, como por exemplo, descalibração ou até a perda do instrumento pode comprometer fatalmente a estimativa de inferência da variável desejada. Esta abordagem foi utilizada no trabalho de GONZALEZ (1994), que tinha como objetivo estimar a distribuição do tamanho de partículas em uma planta de moagem.

É possível também utilizar na configuração do analisador virtual entradas oriundas de resultados de análises em laboratório, fluxograma da Figura 2.2. Em outros casos, como o da Figura 2.3, as análises de laboratório servem como calibração do AV. Estes casos também não

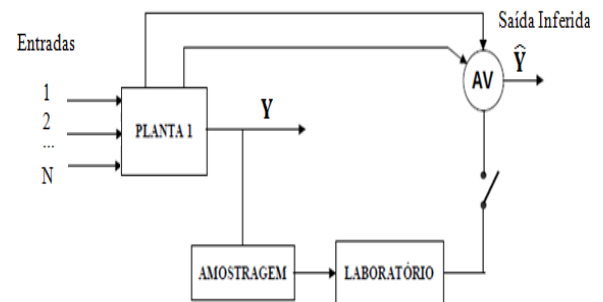
condiz uma boa alternativa para inferir variáveis, porque há uma grande indisponibilidade de resultados, além dos problemas enfrentados ao tempo real de amostragens.

Figura 2.2 – Fluxograma de um Analisador Virtual que utiliza como entradas as análises de laboratório.



Fonte: Adaptada de LOTUFO e GARCA (2008).

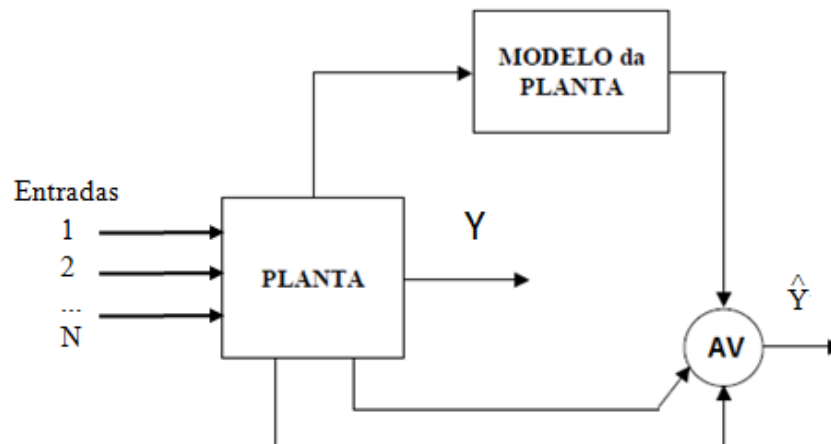
Figura 2.3 – Fluxograma de um AV que pode ser utilizado para a correção da Variável inferida.



Fonte: Adaptada de LOTUFO e GARCA (2008)

Em geral o AV é utilizado com um modelo matemático de uma parte da planta ou processo, conforme Figura 2.4. As entradas para este modelo são outras variáveis de controle medidas, saídas da planta e distúrbios.

Figura 2.4 – Analisador Virtual cujas entradas são fornecidas por um Modelo matemático do processo, para estimativa de uma variável.



Fonte: Adaptada de LOTUFO e GARCIA (2008).

No caso de utilização da simulação do modelo da planta para geração das entradas, estes podem ser do tipo entrada-saída ou na forma de equações de estado e saída, conforme a explanação que será feita na seção 2.3 deste Capítulo. Com isso, técnicas de modelagem específicas para *soft-sensors* usando redes neurais, conjuntos e agrupamentos “*clustering*”,

lógica *fuzzy* e modelagem por sistemas *neuro-fuzzy*, constituem um interessante desenvolvimento como proposto neste trabalho.

Muitas vezes, é necessário utilizar uma técnica de filtragem para evitar o uso redundante de alguns dados de entradas, isso é o que FORTUNA et al. (2007) chama de remoção de “*outliers*” ou erros grosseiros, isso permite que o modelo seja capaz de inferir valores com erros mínimos e com igual precisão em todas as faixas de operação do sistema, mesmo em presença de perturbações.

O analisador virtual combina o conhecimento teórico de um sistema por meio de um modelo matemático com o conhecimento prático de seu funcionamento real através de medidas. Se as entradas agindo no sistema são conhecidas satisfazendo as condições teóricas, e se, além disso, o modelo é uma aproximação adequada do sistema real, então o sensor virtual estima o completo estado do sistema. Por isso, se o modelo desempenhar as chamadas propriedades de observabilidade, o AV fornece estimativas em tempo real das variáveis chaves do processo (SIEGEL, 2001).

Em muitos trabalhos, como o de ZANATA (2005), TAKAHASHI (2006), KANO et al. (2000) e PIANG (2005), a confiabilidade do sensor é expressa medindo o Erro Médio Quadrático (MSE), entre o valor estimado pelo sensor e o valor esperado.

Segundo LOTUFO e GARCIA (2008), os analisadores virtuais trabalham para fazer análises de difíceis medições, ou seja, utiliza a metodologia de medir tudo que afeta a variável do processo, aplica experiências e regras, e calcula o valor da variável sem obter medida física, em termos os sensores virtuais deduzem o valor da variável desejada.

O processo de destilação mostra-se bastante interessante na estratégia de construção de um AV, uma vez que apresenta dificuldades no controle e na obtenção das composições dos produtos, com isso espera-se que a estratégia computacional se torne adequada e produza bons resultados.

2.3 Modelos aplicados

Na literatura diversas técnicas são empregadas para identificação de modelos utilizados pelos Analisadores Virtuais. Assim como, diversos problemas além daqueles tradicionais na identificação de sistemas surgem no desenvolvimento do analisador virtual, dentre estes se destacam:

- ❖ Seleção de um modelo para o analisador virtual;
- ❖ Escolha dos parâmetros do modelo;
- ❖ Estimação da confiabilidade do analisador como uma função do tempo decorrido desde que ele foi colocado em operação;
- ❖ Problemas causados na malha de controle pela substituição do AV quando ele substituiu o sensor real.

A princípio os modelos usados como estimadores do processo são formas de algumas funções matemáticas, que são capazes de representar a relação entre as variáveis primárias e secundárias. Estas funções podem ser formuladas pelas teorias das equações de balanço de massa e energia, chamadas de modelagem caixa branca ou *white-box*, pelas abordagens empíricas através de identificações caixa preta ou modelos *black-box*, ou ainda utilizando os modelos por analogia caixa cinza ou *green-box*.

Muitas das técnicas, para a construção de modelos de estimativa inferencial das variáveis do processo, estão amplamente disponíveis e a seleção de métodos adequados é dependente do comportamento dinâmico do processo específico e adequação do modelo de aplicação prática (PIANG, 2005).

Desde o desenvolvimento do controle inferencial em 1970, várias abordagens utilizadas na construção de um estimador de variáveis de processo vêm sendo amplamente estudadas por diversos pesquisadores.

A modelagem fenomenológica ou caixa branca, descrita em (SEBORG *et al.*, 1989), usa as leis físicas e correlações para descrever os estados do sistema. A relação entre os estados é determinada usando-se balanços (princípios de conservação) de momento, massa, energia e também outras equações constitutivas de correlações. O problema passa a ser encontrar estes estados, que são caracterizados pelas variáveis de estado que descrevem a quantidade de massa, energia e momento linear do sistema. As variáveis típicas escolhidas são: níveis e vazões (sistemas hidráulicos), temperaturas, pressões e concentrações dos sistemas químicos e reacionais.

Normalmente estes modelos necessitam ser linearizados no ponto de operação, de forma a utilizar-se as teorias de controle de sistemas lineares. Como exemplo, é apresentado um modelo fenomenológico não-linear com suas variáveis representadas por uma equação diferencial ordinária, desenvolvido por SMITH e CORRIPIO (2008), que é resultante de um balanço de massa componente em um reator de mistura perfeita (CSTR), descrita pela equação (1) abaixo:

$$\frac{dC_A(t)}{dt} = g[f(t), C_{Ai}(t), T(t), C_A(t)] = \frac{F(t)}{V} [C_{Ai}(t) - C_A(t)] - KC_A^2(t) \quad (1)$$

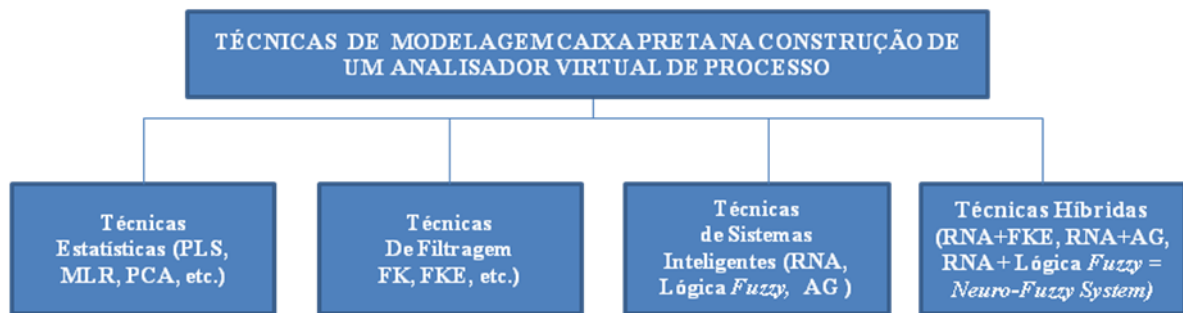
Onde: $K[T(t)]$ é a dependência de Arrhenius da velocidade de reação com a temperatura; V é o volume do reator; $F(t)$ é o fluxo dos reagentes em função do tempo; $C_{Ai}(t)$ é a Concentração dos reagentes na entrada; $T(t)$ é a temperatura de saída do reator e $C_A(t)$ é concentração do reagente na saída.

Segundo SÖDERSTRÖM e STOICA (1989), os modelos fenomenológicos apresentam a vantagem de possuírem uma faixa de validade mais ampla do que outros modelos. Assim, em casos de processos não-lineares os modelos teóricos frequentemente podem ser extrapolados sobre uma faixa maior de condições operacionais, além de permitir inferir o valor de variáveis de processos não-medidas ou comensuráveis.

No entanto, apesar dos modelos fenomenológicos poderem operar numa faixa de validade mais ampla pode ser difícil construir modelos dinâmicos de processos complexos, como certas colunas de destilação, ou então se geram modelos extremamente complexos e de pouco valor prático, pois não se conhecem com precisão os parâmetros destes modelos. Deve-se tomar cuidado também com o tempo necessário para o desenvolvimento destes modelos, onde sua aplicação é frequentemente limitada aos processos com menos complicação ou como estimador para algumas variáveis intermediárias.

Já a modelagem empírica ou identificação de sistemas têm por objetivo construir modelos matemáticos de processos dinâmicos a partir de dados experimentais observados na planta. Estes modelos são do tipo “caixa preta” e tem grande aplicabilidade na construção de AV, pois apresenta a vantagem de não requerer conhecimento fenomenológico do processo, apenas se está interessado nas relações entre as entradas e saídas do processo, e não nos mecanismos internos do mesmo. É possível observar na literatura que diversas técnicas caixa preta veem sendo empregadas para a identificação de sistemas utilizadas pelos analisadores virtuais, a Figura 2.5 mostra as principais técnicas de identificação de sistemas empregadas na construção de um AV.

Figura 2.5 – Fluxograma de técnicas de modelagem caixa preta empregadas para construção de analisador virtual.



Fonte: AUTOR (2011).

Segundo CONZ (2005), o modelo empírico mais simples é o de Regressão Linear Múltipla (MLR), que justamente por ser uma regressão linear simples pelo método de mínimos quadrados apresenta muitas limitações e desta forma não é comumente empregado.

A técnica empírica denominada Filtro de Kalman (FK) é um estimador otimizado de estados para sistemas lineares, quando um modelo do sistema e o conhecimento de certas propriedades estocásticas estão disponíveis. Quando se conhecerem a média e a covariância dos erros cometidos por um observador, é possível a utilização de técnicas de filtragem para se alcançar maior precisão.

Emprega-se ainda o Filtro de Kalman Estendido (FKE), que é uma extensão da abordagem do Filtro de Kalman linear para equações diferenciais ordinárias lineares. Muitas vezes, utiliza-se esta técnica associada a uma técnica não-linear, como é o caso da Rede Neural Artificial, isto pode ser visto nos trabalhos de ZYNGIER *et al.* (2001), CORRÊA (2005) e MOHR (2004).

Modelos de identificação, que são do tipo entrada-saída, tais como, o Modelo auto-regressivo com entradas externas (ARX do inglês *Auto regressive with exogenous inputs*), auto-regressivo com média móvel e entradas exógenas (ARMAX do inglês *Auto regressive Moving Average with exogenous inputs*), auto-regressivo não-linear com entradas exógenas (NARX do inglês *Nonlinear Auto-Regressive with eXogenous inputs*), e o Modelo neural auto-regressivo não-linear com média móvel e entradas exógenas (NARMAX do inglês *Nonlinear AutoRegressive Moving Average Model with Exogenous inputs*), também são empregados na construção de analisadores virtuais. Quando são utilizados modelos do tipo espaços de estados, é dado o nome de estimador ou observador de estados. O observador pode ser exato quando fornece o estado diretamente, ou assintótico quando seu limite tende ao estado exato para tempo infinito. Estes tipos de modelo são mais usados quando lineares, pois em casos não lineares se tornam muito complexos (LOTUFO e GARCIA, 2008).

Já os modelos que utilizam Sistemas Inteligentes ou Especialistas são um conjunto de técnicas e metodologias de programação, que são usadas para tentar resolver os problemas de forma mais eficiente que soluções algorítmicas, e fazendo isso o mais próximo possível do ser humano. Dessa forma, elas vêm sendo muito empregadas na obtenção do modelo do AV.

Muitas vezes a informação para a identificação do sistema não está em dados de ensaio e sim no conhecimento que um determinado especialista tem sobre o assunto. Sistemas inteligentes são concebidos de maneira a conter este conhecimento.

O fato de que humanos são frequentemente aptos a conduzir tarefas complexas sob significativa incerteza tem estimulado a pesquisa por padrões alternativos de modelagem. Têm sido introduzidas assim as chamadas metodologias de modelagem "inteligentes", que empregam técnicas motivadas por sistemas biológicos e inteligência humana para desenvolver modelos para sistemas dinâmicos, a união destas técnicas forma uma abordagem híbrida como, por exemplo, *neuro-fuzzy*.

Um dos métodos mais populares caixapreta é a rede neural artificial (RNA), ela é amplamente utilizada na modelagem de processos dinâmicos não-lineares. A aplicação de RNA na modelagem dinâmica e controle de processos químicos teve início no final de 1980 e entre os pioneiros na pesquisa estão BHAT *et al.* (1990). Eles propuseram o uso das RNA's para estimativa de pH em um reator CSTR. Os resultados mostraram que a rede tem a capacidade de prever o pH neste reator, que possui características não-lineares, e este modelo apresentou uma maior confiabilidade em comparação com um modelo ARMA tradicional.

Justifica-se o uso da RNA, como por exemplo, nos trabalhos de REBOUÇAS (2009), JERBIĆ *et al.* (2007) e PEDROSA (1998), por ser a RNA um processador paralelamente distribuído constituído por unidades de processamento simples, nós ou neurônios, que têm a tendência natural de armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para uso (HAYKIN, 2000).

ZANATA (2005) desenvolveu um sensor virtual empregando redes neurais para estimativa da composição em uma coluna de destilação. O objetivo maior do trabalho é estimar instantaneamente a composição dos produtos no topo de uma coluna de destilação multicomponente com condensador parcial, empregando redes neurais artificiais. Para aquisição dos dados de entrada do sensor foi desenvolvido um simulador dinâmico baseado em um modelo não-linear da coluna. A grande contribuição do trabalho está relacionada ao estudo de sensibilidade das variáveis secundárias, dando ao leitor uma idéia de como as variáveis de entrada do sensor podem influenciar na variável desejada, a ser inferida. Outro grande diferencial do trabalho foi a inclusão de um estudo sobre a influência do treinamento

parcial no desempenho do sensor e o estudo realizado sobre os principais erros que podem ocorrer nestes tipos de sensores, estudo este que é raramente tratado em outras publicações.

Assim como, JERBIĆ *et al.* (2007) descrevem como foi projetado um *softsensor* para monitorar a qualidade do produto e controlar o processo de uma coluna debutanizadora. A principal contribuição deste trabalho foi que ao invés de apenas ser desenvolvido um analisador virtual para inferir um parâmetro, dois sensores virtuais foram desenvolvidos, conseguindo medir em tempo real dois parâmetros do processo. Dois modelos de *softsensors* baseados em redes neurais foram desenvolvidos, um para estimar a fração do pentano no produto Gás Liquefeito do Petróleo (GLP) e outro para estimar a Pressão de Vapor Reid (RVP) da gasolina UFCC (Unidade de Craqueamento Catalítico de Fluido). Com a implementação dos dois sensores foi possível manter a fração do pentano abaixo de 2% em massa no GLP e a RVP no valor de 50 kPa, como era desejado. No trabalho, também foi possível comparar os valores validados no *softsensor* com os dados experimentais e com os resultados das análises laboratoriais

A modelagem especialista pela lógica *fuzzy* ou nebulosa é um típico exemplo de técnicas que fazem uso do conhecimento humano e de processos dedutivos. Os Sistemas de inferência *fuzzy* são baseados na teoria da lógica *fuzzy* e dos conjuntos *fuzzy*, propostos por ZADEH (1965). A lógica booleana define as variáveis como sendo verdadeiras ou falsas, 1 ou 0 respectivamente, enquanto na lógica *fuzzy*, as variáveis são mapeadas em graus de pertinência que variam de 0 a 1.

Diversos trabalhos, como o PAGLIOSA (2003) e ARRUDA *et al.* (2007), utilizam os sistemas de inferência *fuzzy*, haja vista que estes podem ser obtidos da descrição linguística do sistema, que é dada pelo especialista.

Vem surgindo com grandes aplicabilidades a união de técnicas de sistemas inteligentes, assim formando uma metodologia híbrida de inferência. O interesse que tais sistemas têm despertado na comunidade científica deve-se à sinergia obtida pela combinação de duas ou mais técnicas de modelagem (PAGLIOSA, 2003).

Uma técnica híbrida que é bastante empregada é a *neuro-fuzzy*, que utiliza o sistema adaptativo rede neural permitindo que este seja interpretado através de regras da lógica *fuzzy*. Os modelos adaptativos são assim chamados por possuírem um algoritmo de aprendizado, que é capaz de ajustar os seus parâmetros e/ou sua estrutura a partir dos dados da entrada real.

O sistema *neuro-fuzzy* é a técnica empregada neste trabalho, através do modelo Sistema de Inferência *Neuro-Fuzzy* Adaptativo (ANFIS do inglês *Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System*), para construção do analisador virtual, por ser o meio mais fácil de inserir

conhecimento a priori dentro de um *softsensor*. A idéia básica de um sistema *neuro-fuzzy* é implementar um *Sistema de inferência Fuzzy*, numa arquitetura paralela distribuída de tal forma que os paradigmas de aprendizado comuns às RNA's possam ser aproveitados nesta arquitetura híbrida. Isso motivou vários autores que justificaram seu uso, como no trabalho de ARRUDA *et al.* (2007).

Na metodologia caixa preta baseada em sistemas inteligentes também podem ser encontrados métodos inspirados na natureza como, por exemplo, o Algoritmo Genético baseado na seleção natural e nas leis de Darwin.

Outra abordagem, que também vem sendo bastante usada para identificação de sistemas, quando estes apresentam alta dimensionalidade e boa correlação linear entre suas variáveis, são as técnicas estatísticas, dentre estas, as mais comuns incluem a Análise de Componentes Principais (PCA), regressão de componentes principais (PCR) e a técnica de regressão por mínimos quadrados parciais (PLS).

2.4 Seleção de variáveis

Um dos grandes desafios de um sistema não-linear, como no caso no processo de destilação, é a correlação entre as variáveis de entrada e saída.

Na prática, a retirada de algumas variáveis de modelos menores é uma abordagem popular, no entanto, isso diminui o desempenho de previsão do modelo. Por outro lado, incluir todas as variáveis em um modelo aumentará a complexidade deste, como consequência ocorreria problemas de sobre-ajuste (PIANG, 2005).

De fato, a presença de variáveis irrelevantes representa uma fonte de perturbação e ruído, e pode conduzir a um sistema com deficiência na sua representação (ZAMPROGNA *et al.*, 2001).

Devido à natureza dos processos químicos e sistemas de engenharia de processo, os estados de muitas das variáveis de entradas refletem nos estados de variáveis complexas, (JERBIC *et al.*, 2007). As entradas do modelo inferencial podem ser, por exemplo, temperaturas, fluxos e pressões, também chamadas de variáveis secundárias, uma vez que estas são facilmente medidas em linha.

O sucesso ou não do modelo inferencial depende diretamente da seleção ou escolha das variáveis, entradas e saídas, pois esta vai garantir uma boa confiabilidade e manter a características de predição no modelo.

O analisador virtual pode ser uma boa alternativa em relação ao sensor tradicional de medição, desde que as variáveis de entrada (secundárias) possam ser medidas sem problemas (LOTUFO e GARCIA, 2008). Quando a simulação é escolhida como fonte de geração de dados de entradas, esta deve ser capaz de fornecer a variável de resposta desejada.

A seguir serão descritas algumas técnicas de seleção variáveis para a escolha das entradas ideais do analisador virtual, de modo que estas possuam uma alta correlação com a saída.

2.4.1 Métodos de busca exaustiva

Os métodos de busca exaustiva consistem na elaboração de modelos com todas as combinações possíveis entre as variáveis.

Eles são recomendados em sistemas que possuem poucas variáveis de entradas, haja vista que testar todas as possíveis combinações entre um conjunto de variáveis candidatas a compor um modelo traria como consequência um alto custo computacional e um tempo de convergência elevado.

O emprego da técnica consiste em gerar os modelos para cada um dos subconjuntos de variáveis daí então, utilizando algum critério, é escolhido o modelo que mais se adapta aos dados.

MONTGOMERY e PECK (1982) dizem que apesar de que com o método seja possível identificar o melhor subconjunto de variáveis, quando se tem um grande número de variáveis candidatas o que ocorre é um custo computacional extremamente elevado.

Para que possamos entender como seria feito a seleção de entradas numa metodologia exaustiva, supomos que exista um número de variáveis candidatas a compor um modelo definido por N elementos, o número de modelos necessários para se avaliar cresce na potência 2^N e com isso deverá existir um termo constante β_0 entre todos os modelos.

Podemos então avaliar um modelo que possua cinco variáveis candidatas em sua composição $N=4$, então seria necessário se avaliar 16 modelos. A Tabela 2.1 mostra os possíveis modelos existentes para o caso de 4 variáveis candidatas.

Tabela 2.1 – Modelos Possíveis para 4 variáveis candidatas numa busca.

NÚMERO DE VARIÁVEIS [K]	ESTRUTURAS DO MODELO
0	β_0
1	[X1], [X2], [X3], [X4]
2	[X1 X2], [X1 X3], [X1 X4] [X2 X3], [X2 X4], [X3 X4]
3	[X1 X2 X3], [X1 X2 X4] [X1 X3 X4], [X2 X3 X4]
4	[X1 X2 X3 X4]

Fonte: AUTOR (2010).

Em um processo de destilação que possua, por exemplo, 20 conjuntos de variáveis candidatas seriam necessários avaliar 1024 modelos, sendo que o número de modelos dobraria a cada nova variável introduzida no conjunto de variáveis candidatas a compor o modelo.

Esse método não condiz com a realidade do nosso trabalho e por isso não foi usado, já que pela característica do processo de destilação e com um conhecimento prévio do processo, descartaremos algumas variáveis de entrada como, por exemplo, a pressão que é constante, ou outras que possuam pouca relação de dependência com a resposta composição.

Com isso, uma análise combinatória entre todas as variáveis suspeitas de serem as nossas entradas seria desnecessária e levaria às consequências definidas neste tópico.

2.4.2 Métodos evolutivos

Os métodos evolutivos são considerados clássicos por serem bastante conhecidos e explorados (MONTGOMERY *et al.*, 2001).

A maioria destes métodos consiste em propor um modelo dividido em etapas e a cada etapa é introduzida uma nova variável, as etapas acabam quando não ocorre mais melhora significativa no modelo ou quando todas as variáveis já foram inclusas.

Alguns modelos utilizam a remoção de variáveis ao invés de adição e outros combinam as duas técnicas. Podemos citar como métodos clássicos ou evolutivos de seleção de variáveis: Adição sequencial ou *Forward Selection (FS)*, Seleção por Eliminação ou *Backward Elimination (BE)*, Regressão Por Etapas ou *Stepwise Regression (SR)* e a Regressão por etapas nas predições modelo *Stepwise Regression on Model Predictions (SRMP)*. Cada uma destas técnicas serão descritas nas próximas seções.

2.4.2.1 Adição sequencial (*Forward Selection, FS*)

A técnica de adição sequencial de variáveis se inicia com um pressuposto de um modelo, o qual não existe nenhuma variável. A construção do modelo se dá em etapas e a cada etapa uma variável é introduzida (CARLEY *et al.*, 2004).

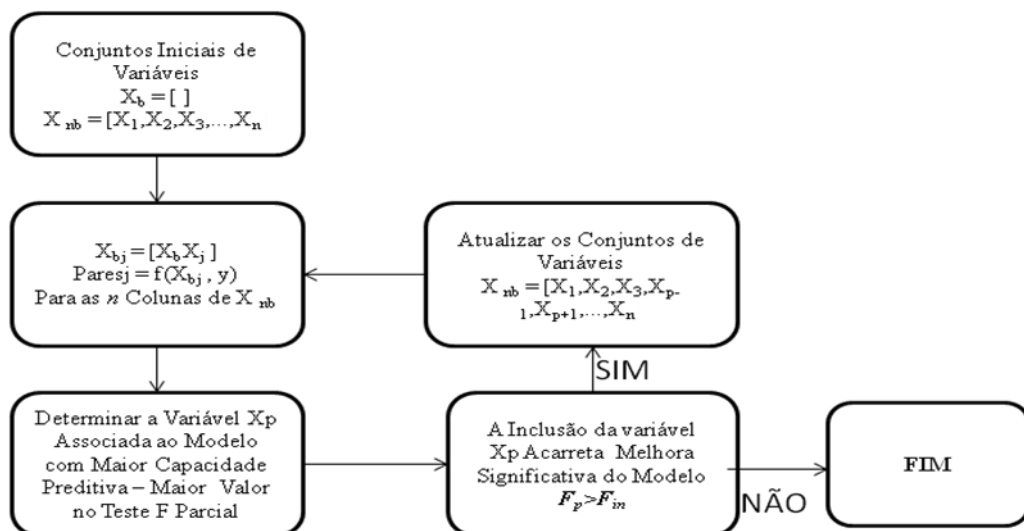
Na primeira etapa criam-se modelos com cada uma das variáveis candidatas e a variável que apresentar melhor desempenho, determinado por um índice de desempenho (que geralmente é o índice de correlação simples com a variável resposta y), é adicionada ao conjunto de variáveis que irão compor o modelo.

Na etapa seguinte de seleção são criados modelos contendo combinações da variável previamente incluída, por exemplo, X_1 , e cada uma das variáveis não selecionadas anteriormente. A variável que gerar o melhor modelo em combinação com aquela introduzida na etapa anterior é pré-selecionada para compor o modelo.

A variável pré-selecionada é então submetida a um teste F , com o intuito de verificar se a sua adição acarreta melhora significativa ao modelo dentro de uma margem de confiança.

Se a variável pré-selecionada adicionada ao modelo propõe uma melhora neste, ela é adicionada automaticamente ao conjunto que irá fazer parte do modelo e repete-se o procedimento para as demais variáveis. Isso é repetido até que a adição de uma nova variável não traga melhoria significativa ao modelo ou quando todas as variáveis tiverem sido incluídas. As etapas da técnica de Adição Sequencial ou *Forward Selection* (FS) estão representadas no diagrama de blocos contido na Figura 2.6.

Figura 2.6 – Diagrama de Blocos da Técnica *Forward Selection*.



Fonte: Adaptada de FACHIN (2005).

2.4.2.2 Seleção por eliminação (*Backward Elimination, BE*)

A técnica *Forward Selection*, vista na seção 2.4.2.1, inicia-se sem variáveis no modelo e tenta inseri-las até que o modelo adequado seja obtido.

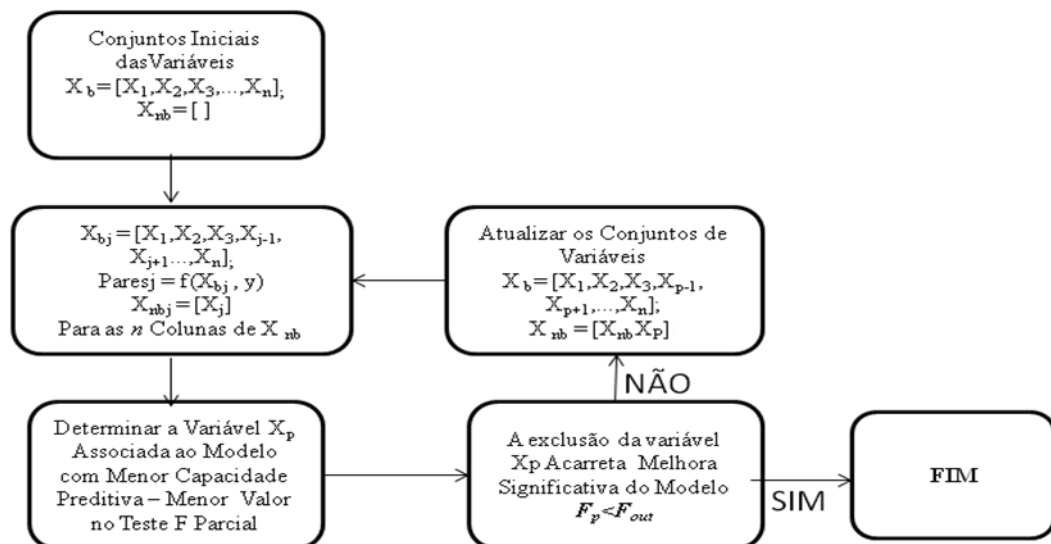
Já na seleção por eliminação (do inglês *Backward Elimination*) tenta encontrar um bom modelo no qual todas as variáveis estão inseridas, ou seja, começamos com um modelo que inclui todas as variáveis candidatas K (CARLEY *et al.*, 2004).

A idéia do método de seleção por eliminação “*Backward Elimination*” é obter o melhor subconjunto de variáveis através da sucessiva remoção das variáveis do modelo, as técnicas *Backward Elimination e Forward Selection* foram comparadas e avaliadas no trabalho de SUTTER e KALIVAS (1993).

O procedimento se inicia pela construção de um modelo contendo todas as k variáveis candidatas. A segunda etapa consiste em gerar modelos com $(k - 1)$ variáveis. Então, verifica-se entre os modelos gerados qual não apresentou piora significativa nos resultados, através de um teste F , por exemplo. A variável que foi excluída do modelo pré-selecionado é removida do modelo.

O procedimento é repetido até que a remoção de uma variável piore significativamente o modelo ou até que todas as variáveis tenham sido eliminadas. MONTGOMERY e PECK (1982) argumentam que se costuma preferir esse método ao *Forward Selection*, em função da possibilidade de se verificar o efeito produzido por um modelo com todas as variáveis. As etapas da técnica de Seleção Por Eliminação são descritas no diagrama de blocos da Figura 2.7.

Figura 2.7 – Algoritmo da Técnica *Backward Elimination*.



Fonte: Adaptada de FACHIN (2005).

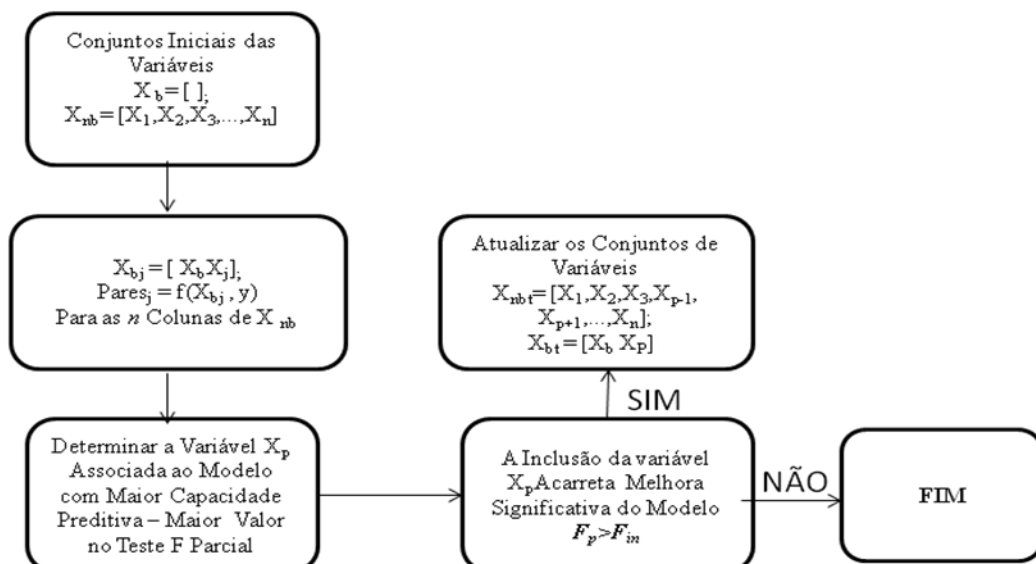
2.4.2.3 Regressão por etapas (*Stepwise Regression* (SR))

Na seleção de variáveis chave por técnicas estatísticas, talvez a *Regressão Por Etapas* ou *Stepwise Regression* (SR) seja o procedimento mais difundido, como demonstrado nos trabalhos de BILLINGS e VOON (1986b) e MING-DA MA *et al.* (2009). Neste último, foi construído um *softsensor* para prever a composição num processo industrial de purificação de O-xileno, onde as variáveis de entradas são selecionadas pela técnica de regressão por etapas.

A técnica consiste em uma combinação dos métodos anteriores, já que os dois processos descritos anteriormente sugerem uma série de combinações possíveis. A cada adição de variável é realizada uma etapa de verificação para eliminação de variáveis redundantes, ou seja, uma variável que entrou nas primeiras etapas de seleção pode ser eliminada nas últimas etapas (CARLEY *et al.*, 2004).

O procedimento inicia-se como um *Forward Selection*, construindo modelos com cada uma das variáveis candidatas e selecionando-se aquela que resultar no melhor modelo. A diferença é que a partir da segunda etapa, a cada inclusão de variável é realizado o procedimento *Backward Elimination* para verificar se a variável adicionada não é redundante a outra previamente adicionada. A Figura 2.8 apresenta o algoritmo dessa metodologia.

Figura 2.8 – Algoritmo da técnica *Stepwise Regression*.



Fonte: Adaptada de FINKLER (2003).

2.4.2.4 Regressão por etapas nas predições modelo (*Stepwise Regression on Model Predictions* (SRMP))

O método de regressão por etapas nas predições do modelo, como qualquer procedimento *Stepwise*, constrói o modelo de forma gradual, de forma a analisar as importâncias de cada uma das variáveis explicativas individualmente (FINKLER, 2003).

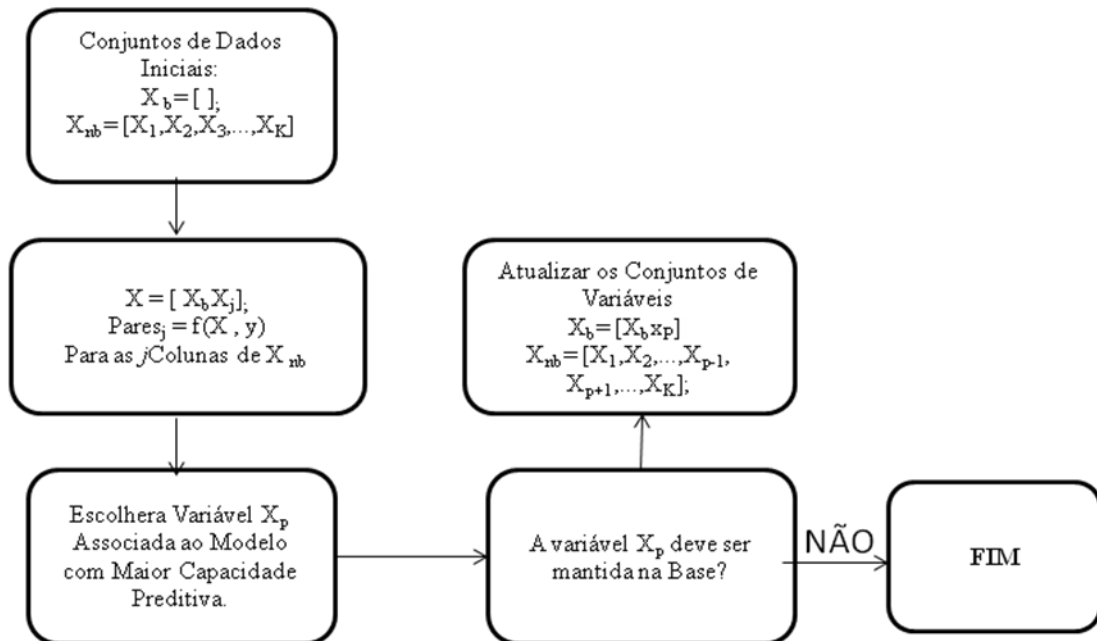
Inicialmente consideramos a situação onde dispomos de uma matriz $X(n,K)$, cujas colunas contém n medidas para cada uma das K “variáveis candidatas”, e o vetor de saídas $y(n,1)$ que contém as n medidas da variável de resposta em questão. As variáveis são então divididas em dois conjuntos: um conjunto básico A_B e um conjunto não básico A_{NB} . Como a técnica têm início com o Adição Sequencial no conjunto A_B , esta não possui nenhum elemento a princípio, e no conjunto A_{NB} inicia-se como na seleção por eliminação, já que este modelo (conjunto) possui todas as variáveis candidatas.

O conjunto A_B é aquele que comportará as variáveis que irão compor o modelo final e A_{NB} é aquele não comportará no final as variáveis selecionadas para o modelo final. O procedimento ocorre de etapa a etapa, sendo que em cada etapa uma variável sai de A_{NB} para A_B . Para selecionar qual variável irá deslocar-se de um conjunto para outro é avaliado o efeito exercido pelas mesmas na capacidade preditiva do modelo final.

Na primeira etapa do procedimento, é gerado um modelo para cada uma das k variáveis explicativas presentes no conjunto não básico e a variável que fornecer o modelo com melhor capacidade de predição é selecionada para ingressar na base.

Na segunda etapa, são gerados $(k - 1)$ novos modelos, combinando-se cada uma das variáveis presentes no conjunto não básico com a variável selecionada na etapa anterior e, novamente, a variável que fornecer o modelo com melhor capacidade preditiva é selecionada para ingressar na base. É notório que, ao contrário do método *Stepwise Regression*, os dados não são ajustados em relação às variáveis selecionadas para entrar na base. O procedimento é repetido até que todas as variáveis no conjunto não básico forneçam um modelo com uma capacidade preditiva inferior à do modelo obtido na etapa anterior. Na Figura 2.9 é mostrado o algoritmo de procedimentos da técnica de seleção SRMP.

Figura 2.9 – Algoritmo de Etapas da técnica *Regressão por Etapas nas Predições do Modelo* (SRMP).



Fonte: Adaptado de FINKLER (2003).

2.4.3 Métodos de busca aleatória

Dentre os métodos de busca aleatória um dos mais conhecidos é o Algoritmo Genético (AG), que é uma técnica baseada nos mecanismos genéticos da evolução natural e na genética, ele foi estudado e introduzido por HOLLAND (1975).

O algoritmo genético em sua utilização mais abrangente é qualquer modelo baseado em população que utiliza operadores de seleção e recombinação para gerar novos pontos amostrais em um espaço de busca.

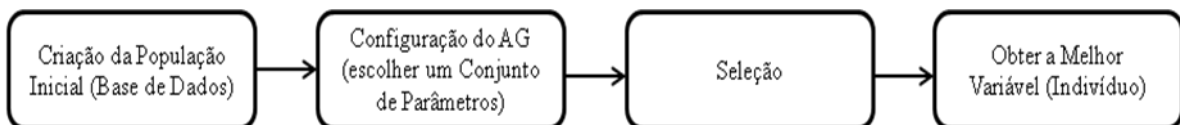
Este método é útil quando a busca exaustiva torna-se impraticável, isto é, quando existe um grande número de atributos para serem selecionados. A seleção de características de uma base de dados é um problema de otimização que envolve a busca no espaço de possíveis subconjuntos de características, de soluções que maximizem a precisão do resultado e identificando uma solução ótima ou perto da ótima em relação à medida de desempenho utilizada (ROXANA, 2005).

No campo de seleção de variáveis o algoritmo genético representa uma importante ferramenta de seleção de variáveis, especialmente quando o número de variáveis independentes possíveis de comporem o modelo é elevado (FACHIN, 2005).

Um dos modelos mais utilizados de AG consiste na criação aleatória de uma população de subconjuntos, cada subconjunto possui uma combinação das N variáveis candidatas a serem selecionadas. Os subconjuntos no AG são chamados de cromossomos, sendo que cada um dos genes que compõem o cromossomo é uma das variáveis. Os genes são a codificação binária para representar se a variável i está ou não presente no subconjunto, ou seja, se a posição i do cromossomo apresentar o número 1 significa que a variável i está presente nesse subconjunto, a presença do zero implica na inexistência da variável nesse conjunto.

Para o caso de processos complexos, como o de destilação, a técnica de seleção de variáveis de entrada por métodos evolutivos pode não ser a ideal, por causa da não-linearidade e o grande número de variáveis elementares. Isto pode ser justificado, pelo fato de que entre os principais fatores que tem feito AG ser uma técnica bem sucedida, pode-se destacar a simplicidade das operações e a facilidade de implementação, eficácia na busca da região onde provavelmente encontra-se o máximo ou mínimo global e um bom desempenho em sua execução. A Figura 2.10 mostra as etapas a serem seguidas para utilização do algoritmo genético na seleção de variáveis.

Figura 2.10 – Algoritmo de etapas de seleção de variáveis por Algoritmo. Genético



Fonte: AUTOR (2010).

2.4.4 Outras técnicas

Existem outras técnicas de seleção de variáveis que podem ser verificadas. Uma delas é a Análise de Componentes Principais (PCA, do inglês *Principal Component Analysis*), que supõe a inexistência de relação temporal entre as variáveis, fato este que pode inviabilizar sua utilização quando se trabalha com dados oriundos de sistemas dinâmicos.

Em processos químicos as variáveis são constantemente perturbadas, assim o PCA não poderia ser aplicado. Para contornar a situação, KU *et al.* (1995) desenvolveram uma versão dinâmica do PCA, chamada de Análise de Componentes Principais Dinâmica (DPCA), onde os valores atuais das variáveis dependem de valores passados. Aplicações de PCA e DPCA em processos químicos podem ser verificadas, respectivamente, nos trabalhos de ZAMBROGNA *et al.* (2005) e SALVATORE (2007).

Já a técnica de mínimos quadrados parciais (PLS, do inglês *Partial Least Squares*) que é bastante aplicada, visa procurar a variável latente dos dados, descrever a direção de máxima variância e realizar combinações lineares das componentes principais calculadas pelo método PCA. Demonstrações de aplicações da técnica PLS podem ser vistas nos trabalhos de KOMULAINEN *et al.* (2004), NUNES (2008) e KANO (2000).

A Decomposição de Valores Singulares (SVD) fornece informações sobre o efeito de cada parâmetro nas variáveis de saída do modelo. Por este método, é possível descobrir qual é a saída mais sensível a determinada entrada (ÖZBEK, 2006). Isto é possível se conhecermos a matriz de sensibilidade da variável medida em relação às variáveis manipuladas (KALID, 2006).

LUYBEN (2006) comparou quantitativamente a efetividade de cinco diferentes critérios para selecionar as bandejas de controle de temperatura em uma coluna de destilação. A eficácia das técnicas foi testada em sistemas binários ideais até destilação azeotrópica multicomponentes. Os resultados mostraram que entre os critérios analisados, a análise de SVD fornece um método simples e eficaz para a seleção das temperaturas ideais das bandejas de uma coluna de destilação.

Diversos outros métodos podem ser aplicados na seleção de variáveis e construção do sensor virtual, nesta dissertação destacamos alguns e será dada maior ênfase na técnica de análise de sensibilidade utilizada neste trabalho, que será descrito na próxima seção.

2.4.5 Análise de sensibilidade

Neste trabalho foi utilizada a técnica de seleção de variáveis por meio da análise de sensibilidade das variáveis de entrada em influência na saída. Esta técnica fornece informações sobre as respostas do processo frente às modificações em variáveis manipuladas (SECCHI *et al.*, 2006).

A análise de sensibilidade também pode ser definida de acordo com SALTELLI *et al.* (2004), da seguinte forma: “o estudo de como a incerteza presente na predição (variáveis dependentes - \mathbf{y}) pode ser ocasionada por diferentes fontes de incerteza presentes nos fatores de entrada (variáveis independentes - \mathbf{x} e parâmetros - $\boldsymbol{\theta}$) do modelo”.

Muitas vezes, pode se tornar fácil obter a resposta de algumas variáveis e, assim, conseguir avaliar o comportamento da saída diante as diferentes condições operacionais no processo, como na operação de destilação.

No entanto, algumas variáveis que em muitos casos são também consideradas imensuráveis apresentam grandes influências na saída. Evidentemente, que se não houver nenhuma relação de causa efeito de uma entrada $x_i(k)$ em uma saída $y_i(k)$ a busca de um modelo inferencial que as relacione torna-se injustificada.

No processo de destilação algumas indisponibilidades de medições, principalmente de alguns distúrbios imensuráveis, como por exemplo, as temperaturas e as composições dos estágios, necessitam de uma forma de avaliação para saber se realmente apresentam relação com qualidade dos produtos.

Para avaliar o quanto as temperaturas dos estágios influenciam na composição, foi utilizada a correlação das temperaturas com a composição, a correlação foi medida e gerada por meio de covariância cruzada, dessa forma foi possível saber quais são as variáveis secundárias que possuem maior influência na saída.

Nos trabalhos de ZANATA (2005) e CRUZ (2001) são apresentadas técnicas essenciais para obter êxito na seleção das variáveis de entrada, num tempo ou período de amostragem especificado e utilizando a equação de covariância cruzada, também definida por AGUIRRE (2004) como Função de Correlação Cruzada (FCC), a fim de reduzir o número de variáveis selecionadas.

Isto pode ser entendido, por exemplo, no tratamento de quais temperaturas serão utilizadas no modelo de inferência, evitando o uso redundante de todas as temperaturas dos estágios de uma coluna de destilação. De fato, a presença de variáveis irrelevantes representa uma fonte de perturbação e ruído, e pode conduzir a um sistema com deficiência na sua representação (ZAMPROGNA *et al.*, 2001).

Assim, foram utilizadas como entradas no modelo de inferência os dados das variáveis que foram mais sensíveis na composição, quando estas foram submetidas a perturbações realizadas na coluna de destilação e, também, foi selecionado um perfil de temperaturas que apresentaram maior correlação com a saída composição, baseada na função de covariância cruzada que será definida no Capítulo 4.

3 COLUNAS DESTILAÇÃO

3.1 Introdução

A separação de misturas de líquidos nos seus constituintes é uma das principais operações das indústrias químicas e petrolíferas, e a destilação é o método mais utilizado para conseguir este objetivo (COULSON e RICHARDSON, 1987)

Apesar da sua larga utilização, é pequena a atenção dispensada ao sistema de controle de colunas de destilação. Isto não deveria ocorrer, pois, na maioria das indústrias de transformação 80% do custo operacional energético é devido a essa operação unitária (KALID, 2007).

A operação unitária de destilação consiste num método onde a separação dos constituintes está baseada na diferença de volatilidade, uma maior abordagem do processo de destilação pode ser vista em FOUST (2000).

Na destilação, uma fase vapor entra em contato com uma fase líquida, e há transferência de massa tanto do líquido para o vapor, quanto do vapor para o líquido. O líquido e o vapor contêm, em geral, os mesmos componentes, mas em quantidades relativas diferentes sabendo que o líquido está em seu ponto de bolha e o vapor em equilíbrio, no seu ponto de orvalho.

Há transferência simultânea de massa do líquido por vaporização, e do vapor por condensação, como efeito final obtêm-se um aumento de concentração do componente mais volátil no vapor e do componente menos volátil no líquido. A vaporização e a condensação envolvem os calores latentes de vaporização dos componentes, e os efeitos térmicos devem, por isso, entrar nos cálculos de destilação.

As restrições operacionais da operação de destilação estão ligadas as variáveis como, por exemplo, vazão, temperatura e/ou pressão máxima. Temperatura e pressão não podem se aproximar das condições críticas, pois o fluxo hidráulico depende da diferença entre a massa específica da fase líquida e gasosa. Além disso, algumas substâncias são termicamente sensíveis (KALID, 2007).

Segundo BLACKADDER E NEDDERMAN (2004), as restrições hidráulicas do processo de destilação estão ligadas ao escoamento dos fluidos no interior da torre, de forma que o equipamento de separação deve promover um íntimo contato entre as fases, para tanto são instalados anteparos (pratos ou recheio) que provocam uma maior turbulência e dispersão das fases, melhorando o contato entre as mesmas.

Uma coluna de destilação é um complexo sistema de escoamento, onde na base da coluna, vapor com uma pressão suficientemente elevada, tem que ser gerado para poder vencer o peso da coluna de líquido em cada prato da base até o topo da coluna.

Pode-se dizer que a maior dificuldade no processo de destilação está ligada ao controle e na forma de obtenção dos valores das composições dos produtos. A variável composição, devido a sua dificuldade de obtenção, pode ser considerada uma grandeza não diretamente mensurável e sofre constantes modificações no processo quando submetida a diferentes condições de operação.

Na próxima seção vamos tratar das formas tradicionais de medição desta grandeza de suma importância nas industriais químicas e petroquímicas, isto é requerido desde processos complexos, como a destilação atmosférica multicomponente do petróleo até misturas binárias mais simples, como é o caso do processo em estudo de destilação metanol-água.

3.2 Métodos de medição de composição

Entre os métodos tradicionais para medir composição de produtos destacam-se a cromatografia gasosa, que apresenta grandes atrasos de medição em ensaios realizados no laboratório e os sistemas cromatográficos em linha, este último quando inseridos nos processos requerem elevados custos de aquisição e manutenção.

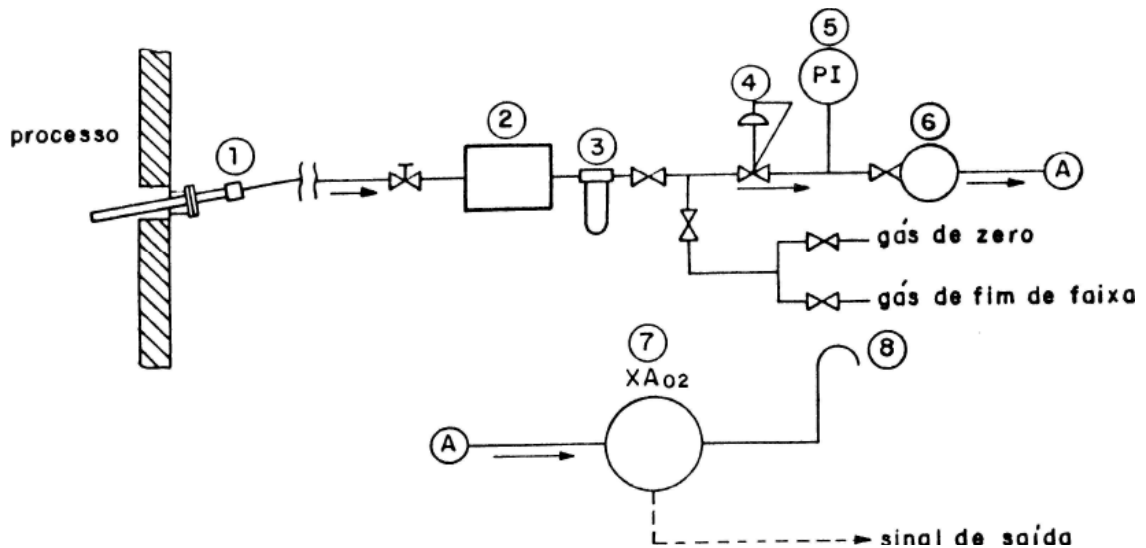
A técnica de medição da composição por cromatografia gasosa (GC) baseia-se na adsorção e/ou na dessorção seletiva de gases em determinados adsorventes sólidos (fase estacionária) e, historicamente, é utilizada no monitoramento de muitos processos, como o de colunas recheadas (TREVISAN e POPPI, 2006).

As desvantagens destas técnicas, quando realizada em laboratório, estão diretamente ligadas aos grandes atrasos de medição, disponibilidade de resultados e alto custo da análise.

O elevado tempo entre a retirada da amostra, análise e a disponibilidade de resultados inviabiliza o método, pois para controle direto da composição tem que haver sincronismo entre o tempo real da coleta com o supervisor da planta industrial.

Já os analisadores em linha (cromatografia em linha) ou instrumentos automáticos de medição de qualidade, são equipamentos de funcionamento automático que medem uma variável analítica desejada. Estes foram desenvolvidos inicialmente para substituir ou complementar as análises de laboratório. A Figura 3.1 representa um exemplo de um esquema de um analisador em linha para medição de concentração de oxigênio em um dado processo.

Figura 3.1 – Medição de Composição por instrumento automático de qualidade (Analisador em Linha), onde X_{AO_2} é composição do oxigênio lida pelo instrumento.



Fonte: Apostila Petrobrás (2006).

Na Figura 3.1 o sistema de amostragem, de acordo com o tipo de processo, pode desempenhar as funções:

- 1- Captação da amostra, geralmente feita por uma sonda com filtro;
- 2 - Transporte da amostra;
- 3 - Filtragem;
- 4 - Regulagem de pressão;
- 5 - Indicador de Pressão, manômetro;
- 6 - Medidor de fluxo, rotâmetro.
- 7 - Analisador em linha de concentração de oxigênio;
- 8 - Descarga da amostra ou exaustão.

Em COHN (2004), é mostrada toda a infraestrutura necessária para implantação de um analisador em linha. O autor mostra uma casa de um analisador em uma refinaria, assim como

dois interiores do analisador em linha instalado em uma planta industrial. É possível perceber a necessidade de grandes aparatos para receber os analisadores.

Figuras 3.2 – Infraestrutura montada para analisadores em linha. a) casa de analisador em uma refinaria; b) interior de uma casa; c) detalhe do equipamento.



a)



b)



c)

Fonte: MENEGUELO (2007).

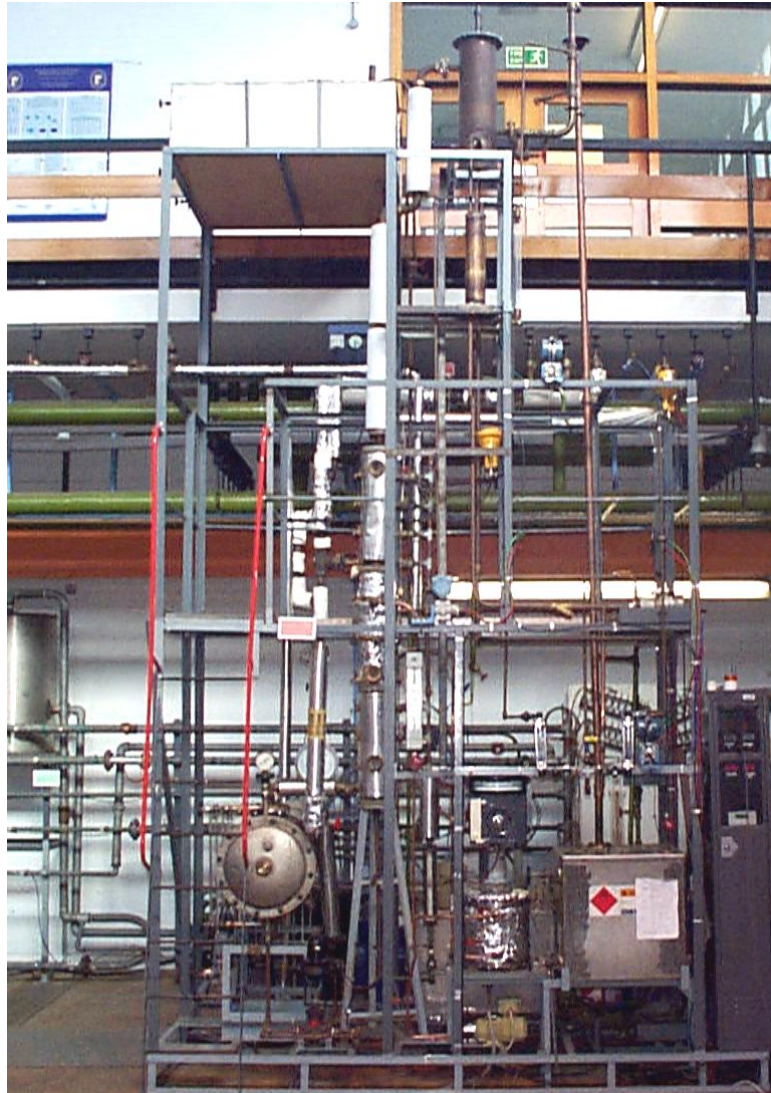
Para atingir uma disponibilidade aceitável de um analisador em linha (acima de 95% para a maioria das aplicações), é necessário que haja técnicos capacitados e disponíveis para a manutenção do sistema, previsão de materiais de consumo e peças de reposição. Isso requer um alto custo de investimento inicial e manutenção nestas medições.

3.3 Equipamento experimental

Os estudos apresentados nesta dissertação foram realizados utilizando um modelo matemático dinâmico de uma unidade piloto de destilação metanol-água, localizada na Escola

de Engenharia Química, Ambiental e de Minas da Universidade de Nottingham na Inglaterra. A coluna é mostrada na Figura 3.3 e todos os dados utilizados para construção do analisador virtual foram obtidos a partir do modelo matemático deste equipamento.

Figura 3.3 – Foto da Planta Piloto de Destilação em estudo.



Fonte: SODRÉ (1999).

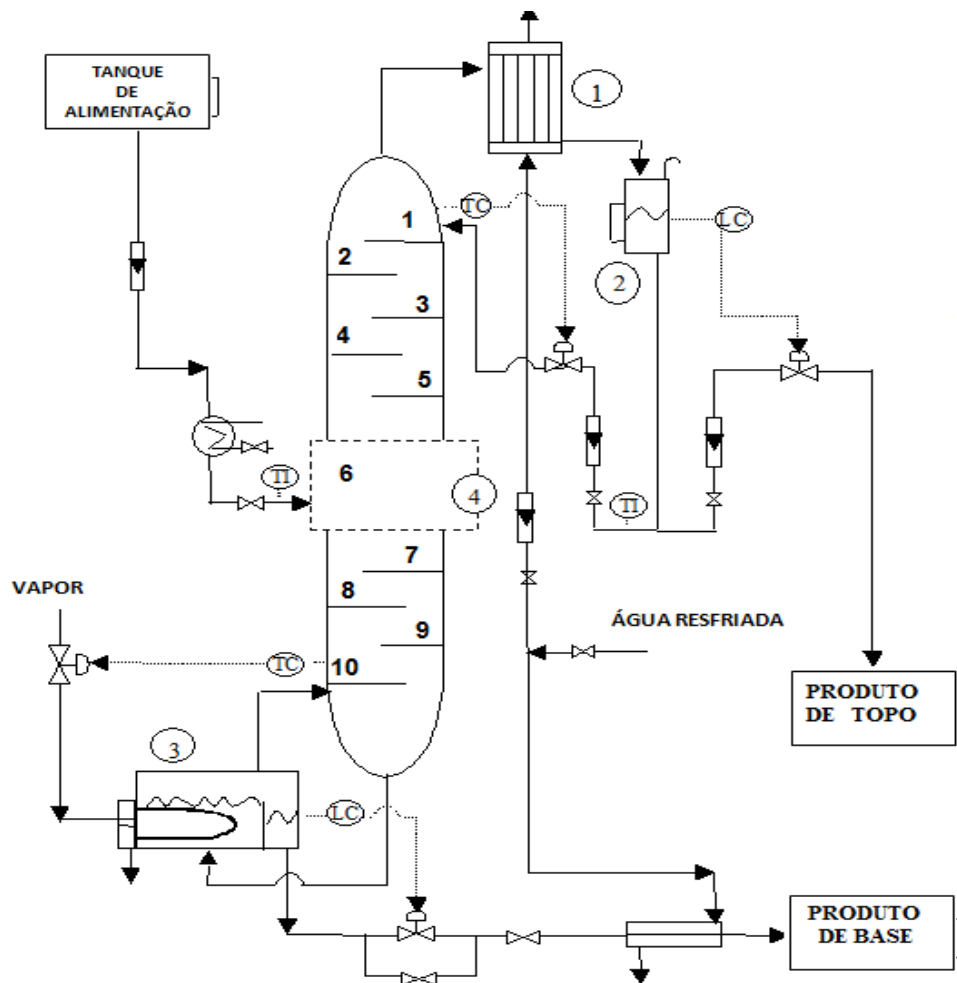
3.3.1 Descrição física do equipamento

Em uma coluna de destilação contínua, a mistura de fases é alimentada no processo continuamente. Para efeito de modelagem deste trabalho será utilizado um equipamento que opera nesta condição.

Para que aconteça a transferência dos componentes leves para a fase vapor e dos pesados para a fase líquida, o equipamento de separação deve promover um íntimo contato entre as fases, para tanto são instalados anteparos (pratos ou recheios) que provocam uma maior turbulência e dispersão das fases, melhorando o contato entre as mesmas.

A coluna de destilação utilizada é formada por 10 pratos ou bandejas numeradas de forma descendente, contendo dois borbulhadores cada uma, exceto a bandeja de alimentação que possui quatro. A Figura 3.4 mostra a instalação da planta piloto.

Figura 3.4 – Fluxograma da Coluna de Destilação Contínua. 1-Condensador; 2-Tambor de Refluxo; 3-Refervedor; e 4-Bandeja de Alimentação.



Fonte: Adaptada de SODRÉ (2001).

A coluna também é equipada com pontos de amostras de líquido, rotâmetros, termopares, controladores para controle de temperatura, quando necessário, e controle de nível. A alimentação da coluna é feita em um único ponto, na sexta bandeja.

A alimentação é fornecida por um dos dois tanques de alimentação com capacidade de 282 litros cada um. Tendo dois tanques de alimentação oferece a possibilidade de produzir mudanças na composição de alimentação, durante a operação da coluna.

As bandejas da coluna têm as mesmas dimensões, conforme Tabela 3.1, exceto a bandeja de alimentação.

Tabela 3.1–Dimensões da bandeja da Coluna.

DIMENSÕES DAS BANDEJAS DA COLUNA	
Área de Prato total	126,67 cm ²
Altura de Represa/Vertedoro	3,8 cm
Área de <i>Downcomer</i>	11,34 cm ²
Diâmetro de espelho	1,65 cm
Área de espelho Total	17,10 cm ²
Nível de Líquido " <i>Hold-up</i> "	400,6 cm ³

Fonte: SODRÉ (1999).

Na coluna de destilação também é utilizado um condensador parcial, cujas dimensões encontram-se na Tabela 3.2, esse equipamento é responsável por condensar o vapor que chega ao topo da coluna, o vapor então flui pelos tubos e é condensado pelo contato indireto com água fria, que flui pelo casco do trocador.

Tabela 3.2 – Dimensões do Condensador.

CONDENSADOR	
Diâmetro do Casco	21,00 cm
Comprimento do Casco	66,00 cm
Volume total do Casco	23.870,00 cm ³
Número de Tubos	37
Diâmetro do Tubo	2,7 cm
Comprimento do Tubo	65 cm
Volume Total Deslocado dos Tubos	9.289,00 cm ³

Fonte: SODRÉ (1999).

A coluna também é dotada de um refeedor total, que fica localizado na base da coluna, nele existe uma retirada do chamado produto de base, que é a fração mais pesada do que resta na coluna. Este é constituído também de dois visualizadores para indicar o nível de líquido, um termopar para indicar a temperatura do líquido e um indicador de pressão na linha de

vapor para indicar a pressão de vapor nos tubos do refeedor. A Tabela 3.3 dá as dimensões do refeedor.

Tabela 3.3 – Dimensões do Refeedor.

REFERVEDOR	
Diâmetro da Casco	40,50 cm
Comprimento do Casco	72,40 cm
Volume total do Casco	83.440,00 cm ³
Número de Tubos	28
Diâmetro do Tubo	2,5 cm
Comprimento do Tubo	65 cm
Volume Total dos Tubos	9.289,00 cm ³
<i>Hold-up</i> no Refeedor	2.9840,00 cm ³

Fonte: SODRÉ (1999).

3.4 Modelo dinâmico utilizado

O principal obstáculo para o estudo dinâmico e o controle da coluna é a complexidade física do processo de destilação, que compreende a resolução de um grande número de equações complexas, que só podem ser descritas por um número correspondente de equações não-linear diferenciais. Além disso, o aumento do número de equações diferenciais é proporcional ao aumento do número de bandejas e número de componentes.

Os estudos no estado estacionário como, por exemplo, através de métodos gráficos tradicionais da engenharia química, como os de MCCABE E THIELE (1925), não representam a necessidade operacional da planta onde estados transientes tendem a ocorrer. Com o uso de inúmeras ferramentas de linguagens de programação e simuladores comerciais, que estão facilmente acessíveis hoje em dia como, por exemplo, o Fortran®, Matlab/Simulink®, Aspen-Hysis® etc., a modelagem no estado dinâmico vem, cada vez mais, sendo estudada.

O modelo dinâmico, inicialmente proposto e validado em linguagem Fortran® por SODRÉ (1999), foi usado para gerar os dados e posteriormente utilizá-los no treinamento da rede *neuro-fuzzy*. Este modelo foi obtido de tal forma que o balanço de massa total e por componente foi resolvido em cada intervalo de tempo em cada bandeja, todas equações do

modelo matemático utilizado e a rotina de simulação estão descritas no **APÊNDICE A** desta dissertação.

O conhecimento das características e considerações feitas neste modelo, cuja finalidade é ser incluído um analisador virtual, é necessário já que o não conhecimento da robustez do modelo do processo e de suas limitações pode comprometer a qualidade das inferências das composições (MENEGUELO, 2007). A confiabilidade do modelo é diretamente proporcional a qualidade dos dados obtidos, levando em conta fatores como tempo de amostragem, sinais de excitação e ruídos.

Uma vez que, o modelo de SODRE (1999) foi validado experimentalmente ele será utilizado para geração dos dados de entrada e a implementação do analisador virtual de composição, em *software* Matlab®, dentro da faixa de validação.

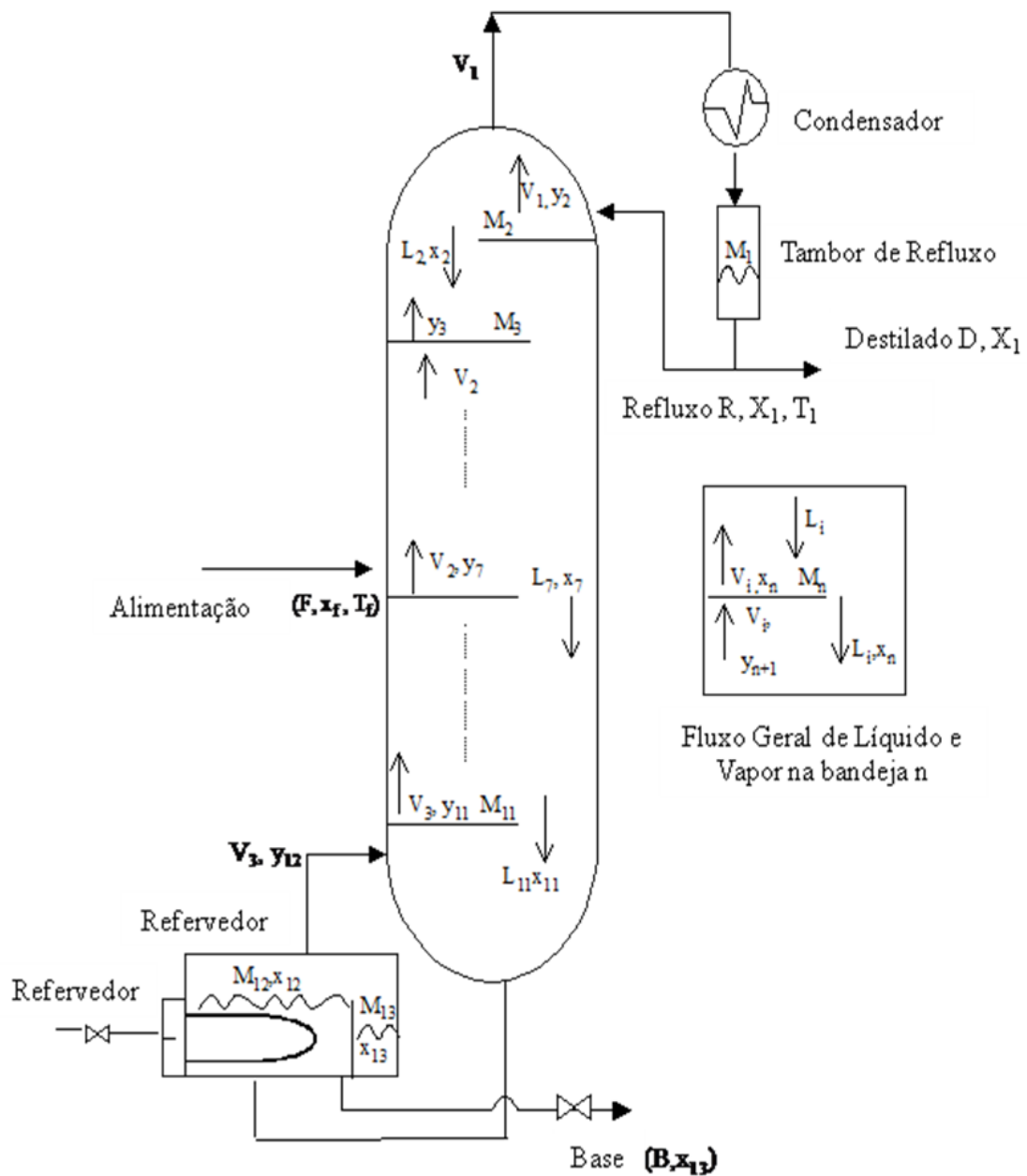
3.4.1 Modelo da coluna de destilação

O modelo dinâmico utilizado é composto por um conjunto de equações algébricas e diferenciais não-lineares, maiores detalhes no modelo **APÊNDICE A**, leva em conta as seguintes considerações:

- ❖ Pressão Constante;
- ❖ Transbordamento molar constante;
- ❖ Dinâmica rápida de fluxo de vapor
- ❖ Retido de vapor desprezível;
- ❖ Equilíbrio líquido-vapor não-ideal;

Foram usadas ainda, a fórmula de Francis para descrever o retido de líquido no refeedor (M_{12}) e a fórmula de Franks para o retido de líquido em cada estágio/bandeja (M_n), conforme sugere LUYBEN (1999). A coluna tem dez bandejas reais e uma eficiência de Murphree de 85% em cada estágio. A corrente de alimentação é feita em um único ponto com uma mistura metanol e água, com a corrente líquida (F_L) de alimentação em seu ponto de bolha, com isso não temos fluxo de vapor na alimentação (F_V). A dinâmica interna de fluxo interno de líquido e vapor dos componentes é mostrada na Figura 3.5.

Figura 3.5 – Fluxo interno de líquido de vapor em cada bandeja da Coluna.



Fonte: Adaptada de SODRÉ (1999).

A modelagem da coluna no estado estacionário nos dá os seguintes valores, mostrados conforme a Tabela 3.4.

Tabela 3.4 – Condições da Coluna de Destilação Metanol-Água.

CONDIÇÕES DA COLUNA NO ESTADO ESTACIONÁRIO E DADOS DE PROJETO			
COMPOSIÇÕES (f.m.)	RETIDO (gmol)	VAZÕES (mol/s)	PRESSÃO (mmHg)
$X_1 = 0.987$	$M_1 = 94.0$ (Tambor de Refluxo)	$V_3 = 0.2785$	$P = 760$
$X_2 = 0.973$	$M_2 = 14.7$	$R = 0.1654$	
$X_3 = 0.951$	$M_3 = 15.0$	$F = 0.2610$	
$X_4 = 0.917$	$M_4 = 15.0$	$D = 0.0800$	
$X_5 = 0.862$	$M_5 = 15.4$		
$X_6 = 0.779$	$M_6 = 15.6$		
$X_7 = 0.621$	$M_7 = 61.5$ (Alimentação)		
$X_8 = 0.613$	$M_8 = 18.5$		
$X_9 = 0.592$	$M_9 = 18.9$		
$X_{10} = 0.536$	$M_{10} = 20.2$		
$X_{11} = 0.403$	$M_{11} = 20.8$		
$X_{12} = 0.1198$	$M_{12} = 1240.0$ (Refervedor)		
$X_{13} = 0.1198$			
$X_F = 0.5$			

Fonte: AUTOR (2010).

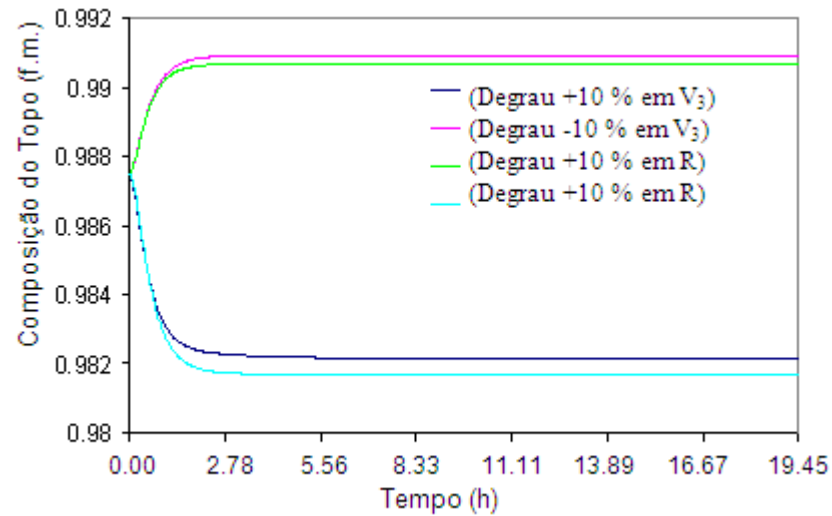
Este modelo foi desenvolvido processado em software MATLAB®, dos dados dos arquivos inicialmente desenvolvidos em linguagem Fortran®, e validado com dados reais da planta piloto.

3.4.2 Planejamento experimental

Neste trabalho, a fim de avaliar o comportamento da coluna mediante as diversas condições de operação, foram feitas algumas excitações no sistema. Com isso, foi possível avaliar o comportamento da resposta composição de topo ($x_{1,1}$) em fração molar quando excitadas as variáveis manipuladas do processo, pois esta será a variável a ser inferida pelo analisador virtual.

Inicialmente foi introduzido um degrau de + 10 e de -10 % na Razão de Refluxo (R) da coluna, até que o sistema voltasse ao estado estacionário. Assim como, foi efetuado um degrau de + 10 e -10 % na Vazão de Vapor do refervedor (V_3) da coluna, até que o sistema voltasse ao estado estacionário. As perturbações degrau podem ser vistas na Figura 3.6.

Figura 3.6 – Variação degrau na Razão de Refluxo e Vazão de Vapor do refeedor.

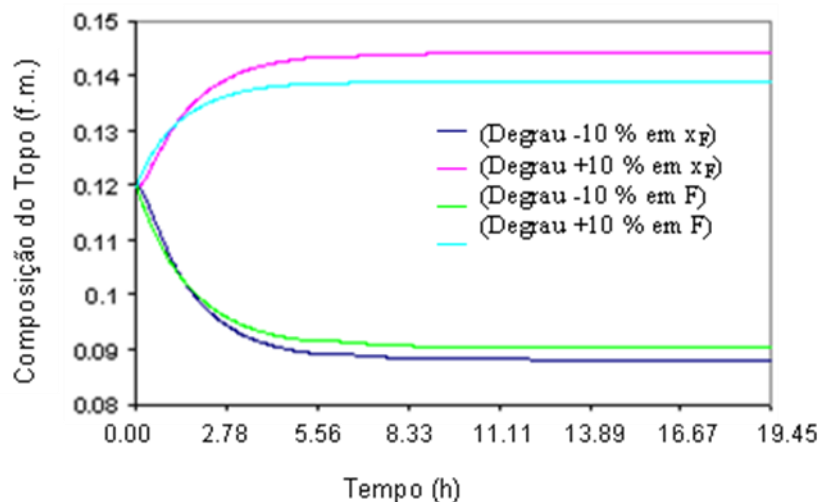


Fonte: AUTOR (2011).

Conforme o gráfico da Figura 3.6, pode-se perceber que com o aumento da vazão de vapor da coluna ocorre uma diminuição na composição de topo, bem como uma diminuição da vazão de vapor proporciona um aumento na composição de destilado/topo. Verifica-se neste gráfico que ao diminuir a razão de refluxo da coluna ocorre uma diminuição na composição de topo, no entanto se o refluxo aumenta a composição de topo também aumenta.

No segundo caso foi feita uma perturbação degrau de -10 e de +10 % na variável composição de alimentação (x_F) da coluna, até que o sistema voltasse ao estado estacionário. Assim como, foi efetuado um degrau de - 10 e +10 % na vazão de alimentação (F) da coluna, até que o sistema voltasse ao estado estacionário. As perturbações degrau podem ser vistas na Figura 3.7.

Figura 3.7 Variação degrau na Composição e na Vazão de Alimentação.



Fonte: AUTOR (2011).

Conforme o gráfico da Figura 3.7, pode-se perceber que com a diminuição da composição de alimentação ocorre uma diminuição na composição de topo, bem como um aumento da composição de alimentação proporciona um aumento na composição de topo. Verifica-se também neste gráfico, que ao diminuir a fluxo de alimentação da coluna ocorre uma diminuição na composição de topo, no entanto se o fluxo de alimentação aumenta a composição de topo também aumenta.

Os experimentos realizados neste tópico foram importantes, haja vista a necessidade de revalidar o modelo proposto inicialmente em SODRÉ (1999), com isto o modelo dinâmico da coluna torna-se confiável. Isto irá garantir satisfatoriamente a etapa de seleção de variáveis e construção do analisador virtual de composição, descrita nos próximos Capítulos.

4 MATERIAIS E MÉTODOS

4.1 Escolha das variáveis

Neste capítulo, será descrito como foi feita a seleção das entradas e saída do analisador virtual proposto, cujos resultados serão apresentados no capítulo 5.

Uma vez que, foram apresentadas as técnicas de seleção de variáveis devem-se escolher quais serão as variáveis adequadas para a construção do modelo que as relacionem com a variável a ser inferida.

É sabido que aumentar o número de variáveis de entradas numa equação de regressão melhora o ajuste dos dados de treino (usados na construção do modelo), mas a inclusão de muitas variáveis frequentemente causa uma redução substancial na habilidade preditiva do modelo em relação aos dados de teste (validação).

Então, é necessário selecionar um conjunto de variáveis que produza o melhor modelo preditivo. No caso da coluna de destilação metanol-água, objeto de estudo, o modelo construído permite avaliar as variáveis secundárias.

As variáveis podem ser temperaturas, níveis, vazões ou fluxos, pressões, composições, dentre outras. Em muitos trabalhos de inferência de composições são utilizadas temperaturas e pressões com múltiplas medições como entradas do analisador como os de KANO *et al.* (2000), ZAMPROGNA *et al.* (2005) e ZHANG (2001).

4.1.1 Relação termodinâmica da variável composição

O uso destas variáveis justifica-se na teoria e é proveniente da relação física de transição das fases líquido-vapor presentes em misturas de hidrocarbonetos. A relação termodinâmica das variáveis composição, temperatura e pressão de uma mistura em ebulição é indicada conforme a expressão abaixo denotada em LUYBEN (1999) por:

$$T_e = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k, P_v) \quad (2)$$

Sabendo que:

T_e = Temperatura de ebulição;

x_k = composição de um componente k em uma mistura de n componentes;

P_v = é a pressão de vapor da mistura em ebulição;

A complexidade da relação termodinâmica acima é que vai definir a efetividade de um sistema de controle baseado nestas variáveis.

Embora, num sistema binário sabemos que à pressão constante, como foi considerado o nosso modelo, pela regra da fase de Gibbs ($F = 2 - \pi + N$); onde π é o número de fases do sistema e N é o número de espécies químicas envolvidas. Logo, pode-se definir o estado deste sistema com duas fases, por apenas uma propriedade específica, ou seja, há uma relação direta entre a composição e a temperatura de equilíbrio, logo a temperatura de cada extremo da coluna seria um indicador exato das correspondentes composições dos produtos.

Assim, uma equação termodinâmica poderia ser empregada para correlacionar a temperatura, por exemplo, a temperatura do prato do topo da coluna serviria para inferenciar a composição de topo.

A termodinâmica define como equilíbrio líquido-vapor (ELV) ao processo físico que descreve a coexistência de duas fases, uma líquida e outra vapor. Num modelo de uma coluna de destilação para um sistema que foge da idealidade, foram desenvolvidas equações de correção que utilizam o coeficiente de fugacidade e de atividade para descrever o comportamento do sistema.

A Equação (3) descreve o equilíbrio líquido-vapor para o componente i :

$$P\Phi_i y_i = P_i \gamma_i x_i \quad (3)$$

Onde:

P = é a pressão total do sistema;

P_i = é a pressão de vapor do componente i

Φ = é o coeficiente de fugacidade do componente i

y_i = composição do componente i na fase vapor

x_i = composição do componente i na fase líquida

γ_i = é o coeficiente de atividade do componente i

Sabendo que os parâmetros são funções de: $\Phi = f(T, P, x, y)$; $\gamma_i = g(T, P, x, y)$; e $P_i = h(T)$.

O somatório das composições da fase líquida, Equação (4), e vapor, Equação (5), são respectivamente:

$$\sum_{i=1}^{nc} x_i = 1 \quad (4)$$

$$\sum_{i=1}^{nc} y_i = 1 \quad (5)$$

Para uma mistura binária (*número de componentes*, $NC= 2$), como no caso da destilação metanol-água, o equilíbrio líquido-vapor é descrito, por exemplo, com 10 equações onde aparecem 12 variáveis. Portanto temos 2 graus de liberdade, ou seja, conhecendo a pressão (P) e a temperatura (T) do sistema, a composição da fase líquida e vapor podem ser calculadas.

Então, rearranjando a Equação (3):

$$\frac{y_i}{x_i} \equiv K(T, P, x, y) = \frac{P_i \gamma_i}{P \Phi_i} \quad (6)$$

Ou seja, a composição da fase líquida (y_i) pode ser determinada a partir do conhecimento da composição da fase vapor (x_i):

$$y_i = K_i x_i \quad (7)$$

Onde K_i é a constante de distribuição no equilíbrio.

Substituindo a equação (7) na Equação (5), obtemos a Equação (8):

$$\sum_{i=1}^{nc} K_i x_i = 1 \quad (8)$$

Para uma mistura binária, explicitando x_2 em função de x_1 , na Equação (4) encontra-se:

$$x_1 = 1 - x_2 \quad (9)$$

Agora substituindo a Equação (9) na Equação (8) é encontrada a seguinte relação termodinâmica:

$$x_1(T, P) = \frac{1 - K_2(T, P)}{K_1(T, P) - K_2(T, P)} \quad (10)$$

Diferenciando a Equação (10) com x_1 em relação a T e P , maiores detalhes deste modelo consultar LUYBEN (1999), assim, resulta:

$$dx_1(T, P) = \frac{\partial x_1(T, P)}{\partial T} \Big|_P \cdot dT + \frac{\partial x_1(T, P)}{\partial P} \Big|_T \cdot dP \quad (11)$$

Logo, medindo a variação de temperatura (ΔT) e da pressão (ΔP), podemos inferir a mudança correspondente na concentração, numa mistura binária por uma relação termodinâmica do tipo:

$$\Delta x_1 = \beta_T \cdot \Delta T + \beta_P \cdot \Delta P \quad (12)$$

Se a pressão for constante, a inferência baseada apenas em temperaturas é mais simples e pode ser então mais efetiva. No entanto, considerando uma torre destilação, deve ser levada em consideração a existência de um perfil de temperaturas, e não somente medições isoladas. Afinal, se o perfil de temperatura variar pouco, a efetividade da inferência de composição pode estar comprometida (CONZ, 2005).

Geralmente, este problema acontece em sistemas multicomponentes de pontos de ebulição próximos, caso em que a separação é difícil, e, portanto o perfil de temperatura apresenta uma variação mínima. Dessa forma, antes de iniciar a seleção de variáveis, é importante levar-se em conta o ponto de ebulição dos componentes da coluna, bem como suas volatilidades relativas e observar o comportamento do perfil de temperaturas e da pressão do sistema.

4.2 Análise das variáveis de saída e de entrada do modelo

Nesta seção serão dados os procedimentos iniciais para selecionar as variáveis candidatas a compor o modelo de inferência (analisador virtual), de modo que estas possam ser avaliadas no estudo de análise de sensibilidade, confirmando assim as possíveis entradas e saídas do sistema.

A saída nessa identificação são as variáveis não facilmente mensuráveis, que podem ser a composição dos componentes no estado líquido ou vapor em cada estágio, e principalmente a composição do componente mais volátil no destilado (topo) e na base (fundo) da coluna.

A seleção das variáveis de entrada foi feita utilizando o método de análise de sensibilidade, que permitiu avaliar as entradas da coluna de destilação metanol-água. Também foram analisados os pratos mais sensíveis as perturbações efetuadas com relação à composição.

Em identificação de sistemas ou modelagem caixa preta, há tipicamente três tipos de variáveis de entradas que inferem a saída, todas elas independentes entre si, são elas: Variáveis Manipuladas (MV); Perturbações Medidas (MP); e Perturbações Não-Medidas (MNP).

Em regra, cada uma destas deve ser avaliada para compor a identificação de construção do analisador virtual.

4.2.1 Variáveis de saída

Uma vez que, a técnica empregada na construção do analisador virtual tem como fonte de dados o modelo dinâmico da coluna, as saídas são as respostas deste modelo.

Um pressuposto comum ao se escolher variáveis de entrada $u(k)$ e saída $y(k)$ de um modelo, é que o sinal $u(k)$ é, na realidade, uma causa de $y(k)$ e pode-se, assim, verificar a relação de causa efeito destas variáveis. Se tais variáveis forem invertidas, o modelo resultante precisaria ser não causal para satisfazer as restrições impostas pelos dados (AGUIRRE, 2004).

As respostas de interesse não mensuráveis na coluna em estudo podem ser: a composição de cada componente da mistura no estado líquido em cada estágio $x_{i,j}$ e a composição da mistura no estado vapor em cada estágio $y_{i,j}$.

Serão inferidos apenas os valores da composição de metanol no topo da coluna, ou simplesmente ($x_{1,1}$ ou simplesmente x_D). Esta variável será fornecida durante o treinamento da rede *neuro-fuzzy*.

4.2.2 Variáveis de entrada (variáveis manipuladas)

As variáveis manipuladas de uma coluna de destilação são aquelas que quando perturbadas por um sinal na entrada levam a planta a diferentes condições de operação.

Com isso, podemos avaliar algumas MV do processo, são elas: vazão de líquido na alimentação (F_L), vazão de vapor na alimentação (F_V), temperatura de alimentação (T_F), composição de líquido (x_f) e de vapor (y_f) na alimentação, razão de refluxo ($R=L/D$) e a quantidade de calor do refeedor (Q_R). O comportamento da saída a ser estimada, ou seja, a composição do topo da coluna será avaliada mediante perturbações efetuadas nestas variáveis, e os resultados serão mostrados no Capítulo 5.

4.2.3 Variáveis de entrada (não - diretamente manipuladas)

As variáveis não-diretamente manipuladas (MNV) são aquelas que sofrem alteração quando as variáveis manipuladas são perturbadas. As MNV's geralmente não podem ser medidas facilmente.

Estas variáveis refletem alterações oriundas das variáveis manipuladas e possuem grande influência na saída composição. Destacam-se como (MNV): as temperaturas (T_i) e pressões (P_i) nos estágios, fluxo interno de líquidos e vapor nos estágios, respectivamente, (L_i) e (V_i) e a composição de líquido (x_i) e vapor (y_i) em cada estágio.

A coluna apresenta pressão constante durante todo o processo, por isso esta variável não será considerada na análise e seleção de entradas.

Os fluxos internos de líquidos e vapor, bem suas composições são variáveis de difícil medição, por esta razão, também não serão consideradas na análise e seleção de entradas.

A medição de temperatura é de fácil obtenção, econômica, confiável e praticamente sem tempo de retardo. A correlação da variável temperatura com a composição em sistemas binários, faz desta variável uma candidata importante para compor a entrada do modelo inferencial para a composição de topo.

Serão consideradas apenas as temperaturas internas dos dez estágios e a temperatura do refeedor da coluna para análise. Dentre as temperaturas dos estágios, serão escolhidas apenas aquelas que possuem maior influência na composição do topo da coluna. A variável temperatura do condensador não foi utilizada, conforme justificativa da próxima seção. Estas têm respectivamente, as seguintes notações $T_1, T_2, T_3, T_4, T_5, T_6, T_7, T_8, T_9, T_{10}$ e T_{referv} .

Dentre estas serão escolhidas apenas o perfil ideal de temperaturas dos estágios (T_i), para compor a entrada do analisador virtual, que possuem forte dependência com a composição de topo da coluna, conforme resultados e justificativas apresentadas no Capítulo 5.

4.2.4 Estudo de sensibilidade das temperaturas

Segundo AGUIRRE (2004), ao se buscar um modelo matemático que relacione dinamicamente duas variáveis de um sistema, parte-se do pressuposto de que há uma correlação significativa entre estas variáveis que justifique o modelo.

Intuitivamente, a função de correlação ou covariância cruzada apresenta-se como uma ferramenta capaz de determinar se há uma correlação significativa entre variáveis candidatas a

compor um modelo. Outras ferramentas também podem ser utilizadas, como discutido no Capítulo 3, tais como a decomposição de valores singulares (SVD), uma boa abordagem sobre esta técnica pode ser vista em LUYBEN (2006), assim como também a análise de componentes principal dinâmica (DPCA) que pode ser entendida no trabalho de KU *et al.* (1995).

A função de covariância cruzada, mostrada na Equação (13), vai permitir reduzir o número de entradas (temperaturas dos estágios da coluna) que serão utilizadas para o treinamento da rede neuro-fuzzy, logo evitando o uso redundante e demasiado de todas as temperaturas.

$$\text{Cov}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [(\mathbf{x}(k) - \bar{\mathbf{x}}) \cdot (\mathbf{y}(k - \xi) - \bar{\mathbf{y}})] \quad (13)$$

Onde: N é número de elementos (vetores de mesmo tamanho \mathbf{x} , \mathbf{y});

\mathbf{x} e \mathbf{y} são respectivamente os vetores de entrada e saída;

$\bar{\mathbf{x}}$ e $\bar{\mathbf{y}}$ são as médias de \mathbf{x} e \mathbf{y} ;

ξ é a defasagem temporal (número de atrasos analisados para o sinal).

Esta correlação também foi utilizada por KOMULAINEN *et al.* (2004), onde foram calculadas as funções de covariância cruzada em cada uma das supostas entradas e saídas, assim verificando quais das temperaturas apresentavam alta covariância com saída composição.

4.2.5 Escolha do período ou tempo de amostragem (T)

Outro fator importante para uma boa identificação de sistema, implementação do analisador virtual, é o tempo de amostragem dos dados.

A maioria dos sistemas reais são processos contínuos no tempo, ou seja, eles existem em qualquer instante. Em diversas aplicações científicas, principalmente na coleta de dados do processo de destilação, é necessário registrar variáveis contínuas de forma discreta no tempo.

Estas variáveis, portanto devem ser amostradas, e o período entre duas amostras é chamado de tempo ou período de amostragem (**T**). A fim de que um sinal amostrado retenha algumas das características fundamentais do sinal original, é necessário que o tempo de amostragem seja suficiente curto (AGUIRRE, 2004).

Uma das características das instalações industriais que possuem controladores distribuídos é que os cálculos de controle sejam executados em intervalos de tempo regulares, ou seja, em tempo de amostragem T .

O tempo de amostragem, que também é característica de cromatógrafos *in-line* (analisadores em linha), de controladores computadorizados variam de um terço a vários minutos dependendo do tipo de aplicação (SMITH e CORRIPIO, 2008).

No entanto, se o sinal for registrado com a utilização de um tempo de amostragem muito menor do que o necessário, diz-se geralmente que o sinal encontra-se superamostrado.

Neste trabalho o cálculo do tempo de amostragem foi feito com três abordagens distintas, mas apenas o método que apresentou o menor valor de T será utilizado neste trabalho, de forma que este valor será atribuído para inserir um ruído ao sistema na análise de seleção das temperaturas.

Fez-se necessário o cálculo desta variável (T) devido à necessidade de escolher um melhor tipo de sinal de excitação no sistema com uma frequência definida em torno do tempo de amostragem, as três técnicas empregadas e seus resultados serão apresentados no Capítulo 5.

4.3 Modelo do analisador virtual

A maioria dos processos químicos, como é o caso da destilação, apresentam comportamento não-linear proporcionando uma modelagem complexa quando são utilizadas técnicas clássicas de estimativa de variáveis.

Um dos métodos mais populares caixa-preta, baseado em sistemas inteligentes, é a rede neural artificial (RNA), que é amplamente utilizada na modelagem de processos dinâmicos não-lineares. A aplicação de RNA na modelagem dinâmica e controle de processos químicos teve início no final de 1980 e entre os pioneiros na pesquisa destaca-se o trabalho de BHAT *et al.* (1990).

Segundo PÁDUA (2000), a solução de problemas através de RNAs é bastante atrativa, já que a forma como estes são representados internamente pela rede e o paralelismo natural inerente à sua arquitetura criam a possibilidade de um desempenho superior ao dos modelos convencionais, por isso o uso da rede em diversos trabalhos como os de ZANATA (2005), JERBIĆ *et al.* (2007) e PEDROSA (1998),

Já a modelagem especialista, também uma técnica de sistema inteligente, através da lógica *fuzzy* ou nebulosa, é exemplo típico de técnicas que fazem uso do conhecimento humano e processos dedutivos. Os Sistemas de inferência *fuzzy* são baseados na teoria da lógica *fuzzy* e

dos conjuntos *fuzzy*, propostos por ZADEH (1965). A lógica booleana define as variáveis como sendo verdadeiras ou falsas, 1 ou 0 respectivamente, enquanto na lógica *fuzzy* as variáveis são mapeadas em graus de pertinência que variam de 0 a 1.

A união das técnicas de sistemas inteligentes, redes neurais artificiais e a lógica *fuzzy*, forma uma abordagem híbrida caixa preta denominada sistema de inferência *neuro-nuzzy*. Ela vem cada vez mais sendo aplicada em sistemas em que há ausência de recursos da saída e, principalmente, em modelos de múltiplas entradas e única saída (MISO) do Inglês *Multiple-Input-Single-Output*, como é caso da inferência de composição no processo de destilação, em destaque o trabalho pioneiro de JANG (1997).

O interesse que tais sistemas têm despertado na comunidade científica deve-se à sinergia obtida pela combinação de duas ou mais técnicas de modelagem, dessa forma aproveitando as vantagens de ambas.

As vantagens das redes neurais são a habilidade de aprendizado adaptativa, a capacidade de processamento paralelo e boas propriedades de generalização. Entretanto, os valores das conexões (pesos) os quais caracterizam uma rede neural são difíceis de entender e explicar, conferindo pouca interpretabilidade ao modelo obtido.

Neste trabalho o modelo de validação do analisador virtual para prever a composição do composto metanol no topo de uma coluna de destilação, foi construído com a combinação de redes neurais e sistemas *fuzzy*, gerando um sistema *neuro-fuzzy*. Este tipo de sistema parece ser o meio mais fácil de inserir conhecimento a priori dentro de um sensor virtual (ARRUDA *et al.*, 2007).

Um problema fundamental desta abordagem é o da dimensão do sistema final, haja vista que quando a dimensão do espaço de entradas aumenta, a base de regras *fuzzy* aumenta exponencialmente levando a um aumento no custo computacional, na memória do sensor e na quantidade de dados necessária para o treinamento ou calibração do sensor (LUO e SHAO, 2006).

Para que não ocorram os problemas relacionados ao número de entrada e para garantir a viabilidade do sensor é utilizada uma técnica baseada no agrupamento de dados “Clusterização”. Com esta, é possível que a estrutura do modelo represente a dinâmica da aplicação, tendo um menor número de parâmetros livres que representem adequadamente o sistema e contenha uma maior precisão quando o sistema é submetido a diferentes faixas de operação.

4.3.1 Redes neurais artificiais (RNA)

Sistemas de redes neurais artificiais têm sido amplamente utilizados na modelagem e controle de processos dinâmicos por causa de sua extrema e poderosa capacidade adaptativa em resposta ao comportamento não-linear dos processos (RALLO *et al.*, 2002).

A adaptabilidade é resultado de sua arquitetura (paralela ou com capacidade de classificação) e dos algoritmos de aprendizagem utilizados, que são inspirados biologicamente e incorporam aspectos de organização e funcionalidade dos neurônios das células do cérebro humano (HERTZ *et al.*, 1991).

Um bom conceito, definido por PÁDUA (2000), é que a RNA é uma forma de computação não-algorítmica caracterizada por sistemas, que em nível, relembram a estrutura do cérebro humano. Elas são sistemas paralelos distribuídos compostos por unidades (nós) que calculam determinadas funções matemáticas, essas são geralmente funções não-lineares.

A aplicabilidade das redes neurais tem crescido com sucesso nos mais diversos tipos de problemas, dentre os quais se destacam: controle de processos, classificação de padrões, aproximação de funções e predição.

Bons resultados são obtidos na inferência de variáveis químicas e bioquímicas, como nos trabalhos de DUWAISH *et al.* (2002) na inferência de concentração de oxigênio e o de ASCENCIO e HERRERA (2005) na estimativa da concentração de biomassa.

O interesse no estudo e aplicação das redes neurais pode em parte ser atribuídos às propriedades que nelas se encontram identificados, como a:

- ❖ Não-linearidade;
- ❖ Mapeamento de entrada-saída;
- ❖ Adaptabilidade;
- ❖ Generalização.

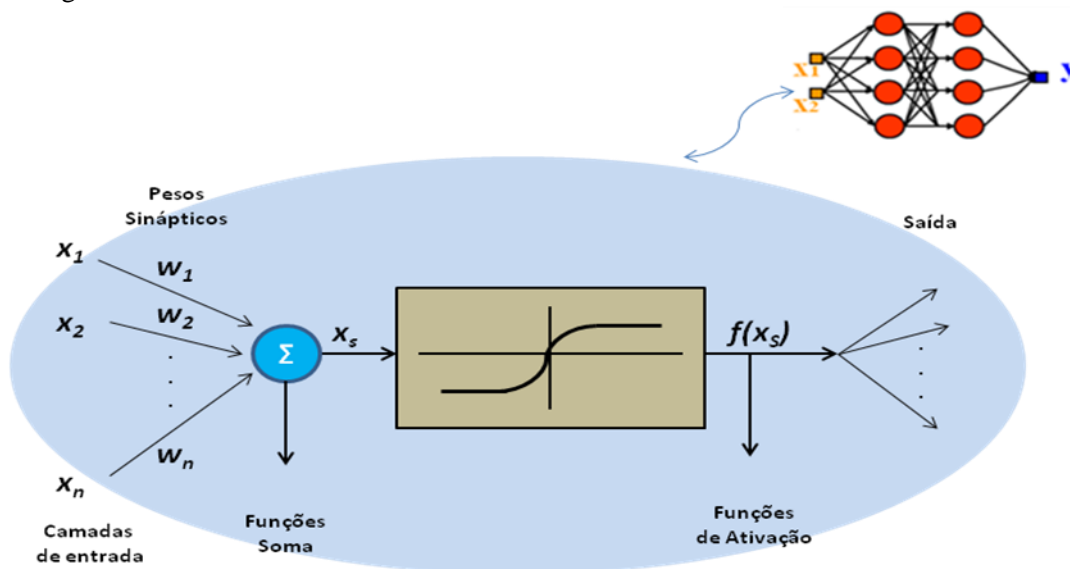
4.3.1.1 Neurônios artificiais

Uma rede neural consiste em um conjunto de neurônios artificiais interligados por conexões sinápticas. Um neurônio é uma unidade de processamento de informação que é fundamental para a operação de uma rede neural (HAYKIN, 2000).

O neurônio artificial é o elemento básico da RNA, ele pode ser chamado de nó ou nodo ou elemento processador, de tal forma que os padrões de conexões entre os neurônios artificiais determinarão como será feito o processamento de informações.

As RNA's consistem em uma estrutura formada pela interligação entre esses elementos processadores que se assemelham ao comportamento, forma e até mesmo às funções dos neurônios dos seres humanos. As forças de conexões entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido e a função de ativação processa os estímulos obtidos através das entradas (HAYKIN, 2000). A Figura 4.1 mostra a estrutura de um neurônio artificial.

Figura 4.1 – Neurônio Artificial.



Fonte: Adaptada de SAITO (2010).

Sabendo que $y = f(x_s)$ é a Função de Ativação e que x_s é igual a:

$$x_s = x_1 w_1 + x_2 w_2 + \dots + x_n w_n \quad (14)$$

Onde:

x_1 até $x_n \rightarrow$ Entradas

w_1 até $w_n \rightarrow$ Pesos

$y \rightarrow$ Saída

A seguir serão apresentados os tipos de funções de ativação de mais comum empregabilidade.

4.3.1.2 Tipos de funções de ativação

A função de ativação $f(x_s)$, também conhecida como função de transferência ou função soma, é responsável por definir a saída dos neurônios em termos do seu nível de ativação interna x_s (PÁDUA, 2000). Abaixo são enumeradas alguns tipos de função de ativação mais usadas:

- a) Função *Limiar*. Neste tipo de função a saída do neurônio é dada pela seguinte equação:

$$f(x_s) = \begin{cases} +1, & x_s \geq 0 \\ -1, & x_s < 0 \end{cases} \quad (15)$$

- b) Função *Linear*. É aquela cuja saída é dada pela equação:

$$f(x_s) = ax_s \quad (16)$$

Sendo a um número real que define a saída linear para os valores de x_s .

c) Função *Linear por Partes*. Nesta assume-se que o fator de ampliação dentro da região linear de operação é a unidade, ela pode ser vista como uma aproximação de um amplificador não-linear.

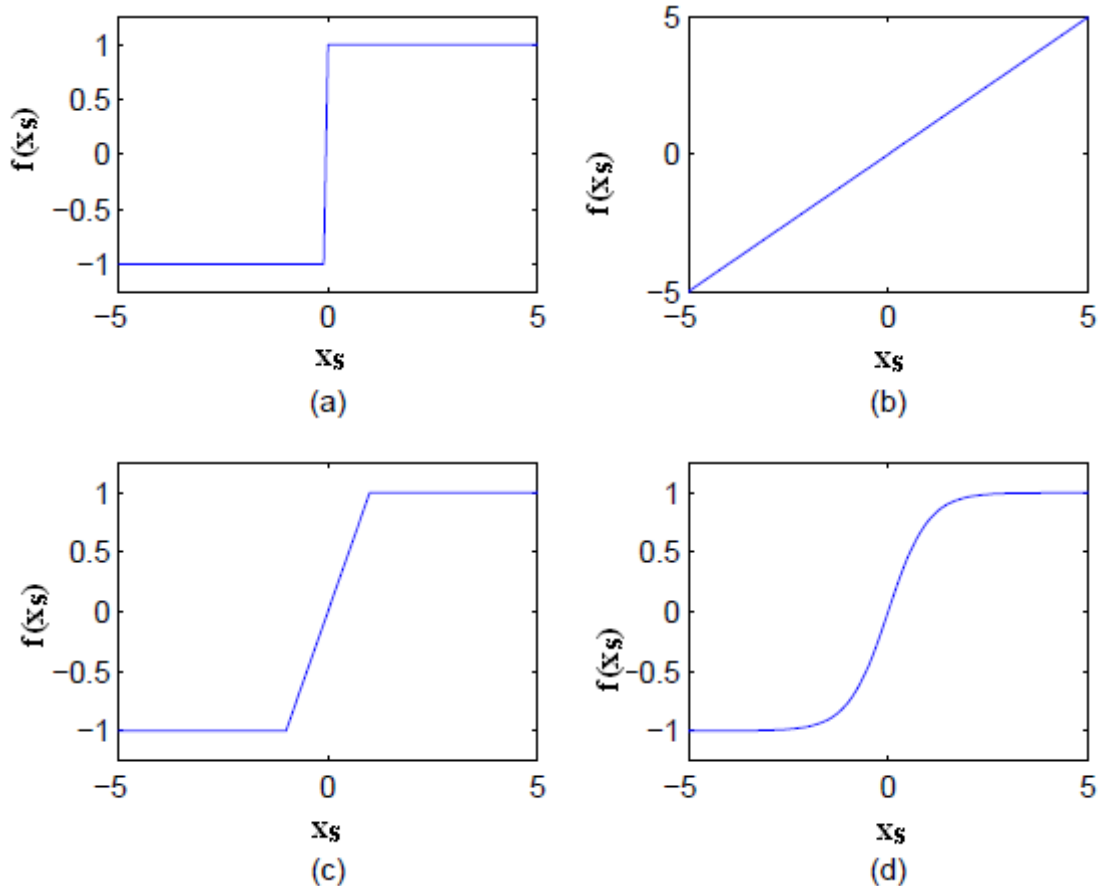
$$f(x_s) = \begin{cases} 1, & x_s \geq +\frac{1}{2} \\ x_s, & +\frac{1}{2} > x_s > -\frac{1}{2} \\ 0, & x_s \leq -\frac{1}{2} \end{cases} \quad (17)$$

d) Função *Tangente Sigmóide Hiperbólica*. Neste caso, apresentado na Figura 4.2 (d), a saída do neurônio é dada pela seguinte Equação:

$$f(x_s) = \frac{1 - e^{-2x_s}}{1 + e^{-2x_s}} \quad (18)$$

A Figura 4.2 mostra os gráficos de alguns tipos de funções transferências mais utilizadas. a) Limiar; b) Linear; c) Linear por Partes; d) Sigmoidal tangente hiperbólica.

Figura 4.2 – Alguns tipos de funções de Transferências ou Ativação.



Fonte: Adaptada de TAKAHASHI (2006).

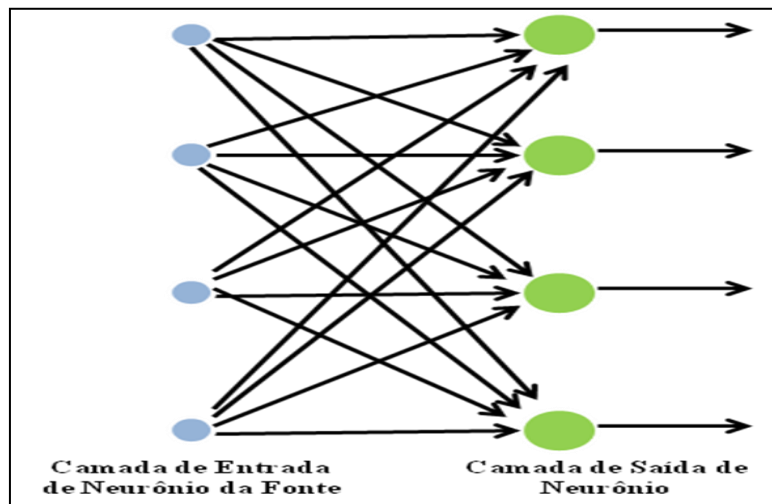
4.3.1.3 Arquiteturas de RNA

A arquitetura de uma RNA é a maneira pela qual os neurônios estão estruturados (HAYKIN, 2000). Geralmente os neurônios estão estruturados em três tipos de arquiteturas distintas, que são:

1. Redes alimentadas adiante (*Feedforward*) de uma única camada;
2. Redes alimentadas adiante com múltiplas camadas ou MLP (do inglês *Multilayer Feedforward Networks*);
3. Redes recorrentes de *Elman*.

As redes *Feedforward* possuem apenas uma camada de entrada, contendo os nós fonte, e uma camada de saída contendo os nós computacionais. A camada de entrada não é considerada na contagem do número de camadas porque os neurônios da camada de entrada são neurônios especiais, cujo papel é exclusivamente distribuir cada uma das entradas da rede (sem modificá-las) a todos os neurônios da camada seguinte (IYODA, 2000). A Figura 4.3 mostra a arquitetura de uma rede *feedforward* de uma camada.

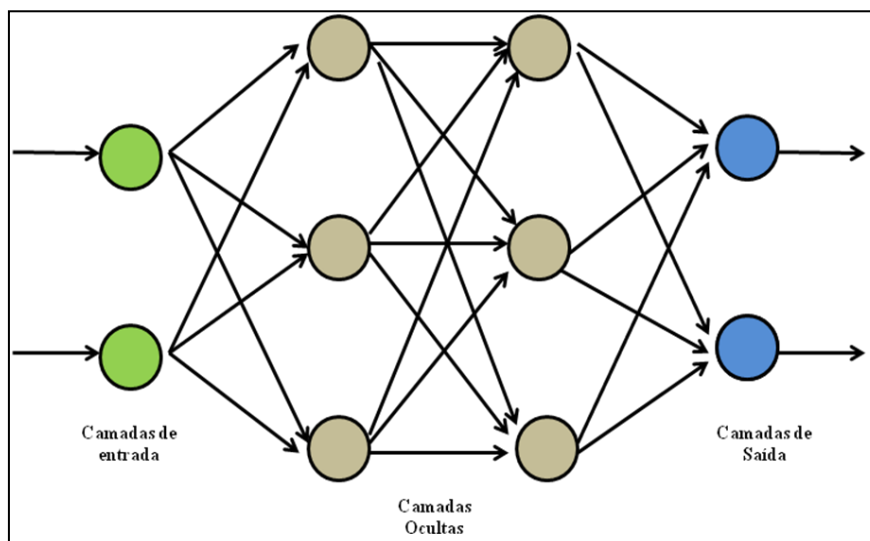
Figura 4.3– Arquitetura de rede *Feedforward*.



Fonte: Adaptado de (IYODA, 2000).

Já as RNA's alimentadas adiante com múltiplas camadas (*Multilayer Feedforward Networks*) são comumente chamadas de MLP (*Multilayer Perceptron*). As RNA's do tipo MLP são as mais difundidas na literatura, principalmente na inferência de variáveis, sua arquitetura pode ser vista na Figura 4.4.

Figura 4.4 – Rede MLP multicamadas.



Fonte: Adaptado de SAITO (2010).

As RNA's alimentadas adiante com múltiplas camadas distinguem-se pela presença de uma ou mais camadas intermediárias, cujos neurônios são chamados de neurônios escondidos com a função de extrair propriedades estatísticas de ordem elevada (HAYKIN, 2000).

Em uma rede multicamadas, o processamento realizado por cada neurônio é definido pela combinação dos processamentos realizados pelos neurônios da camada anterior que estão conectados a ele (PADUA, 2000).

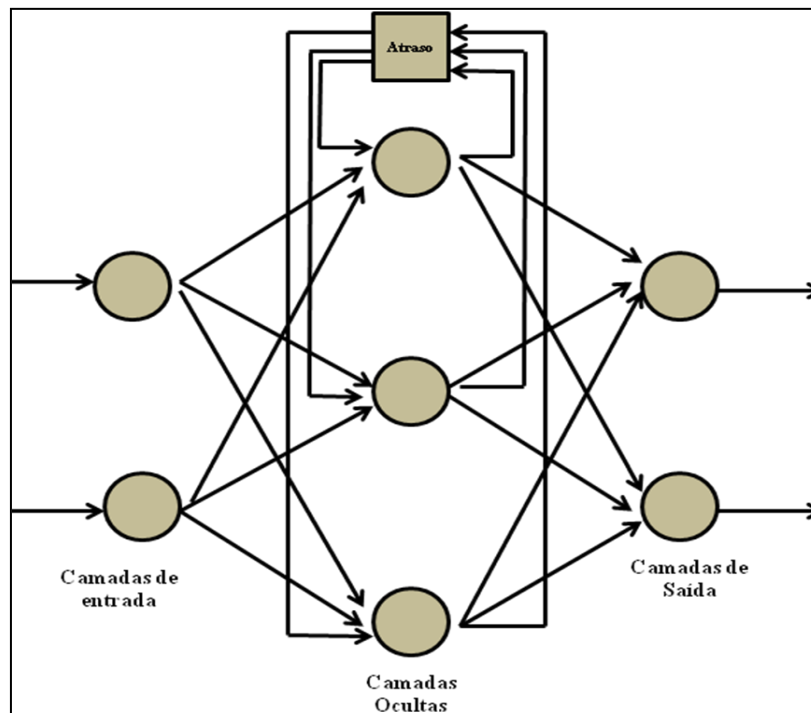
Quando se segue da primeira camada intermediária em direção à camada de saída, as funções implementadas se tornam cada vez mais complexas. Estas funções definem como é realizada a divisão do espaço de decisão e, por exemplo, para uma rede com pelo menos duas camadas intermediárias, como da Figura 4.4 mostrada anteriormente.

A função dos neurônios ocultos é intervir entre a entrada externa e a saída da rede de uma maneira útil. Adicionando-se uma ou mais camadas ocultas, tornamos a rede capaz de extrair estatísticas de ordem elevada, uma habilidade de suma importância quando o tamanho da camada de entrada é grande. Em um sentido livre, isto quer dizer que a rede adquire uma perspectiva *global* apesar de sua conectividade local, devido ao conjunto extra de conexões sinápticas e da dimensão extra de interações neurais (CHURCHLAND e SEJNOWKI, 1992).

Segundo CAMPOS e SAITO (2004), durante o processo de aprendizagem da rede de múltiplas camadas costuma-se dividir os dados disponíveis em dois conjuntos: um conjunto de treinamentos, 80-90% dos dados, e um conjunto para testes, 10-20% dos dados. O conjunto de treinamento permite observar a aprendizagem da rede e o conjunto de testes permite observar a capacidade de generalização da mesma.

Já as Redes Neurais Recorrentes são aquelas que apresentam “ciclos” nas suas conexões, ou seja, a saída de neurônios de uma camada i são entradas de neurônios de uma camada $i-j$, com $j \geq 0$. Neste tipo de rede a camada de entrada também não é considerada na contagem do número de camadas. A Figura 4.5 mostra em síntese o esquema de uma rede recorrente típica de Elman.

Figura 4.5– Arquitetura de uma RNA recorrente, de Elman.



Fonte: Adaptado de HAYKIN (2000).

O atraso na conexão e a alimentação dos valores internos em um passo seguinte fazem com que a rede recorrente seja capaz de armazenar informações do passo anterior e utilizá-las em um momento futuro. Devido a esta capacidade a rede é capaz de inferir e reconhecer padrões temporais e espaciais, sendo que pode ser treinada para responder a ambos os tipos de padrões (HAYKIN, 2000).

4.3.1.4 Aprendizagem da RNA

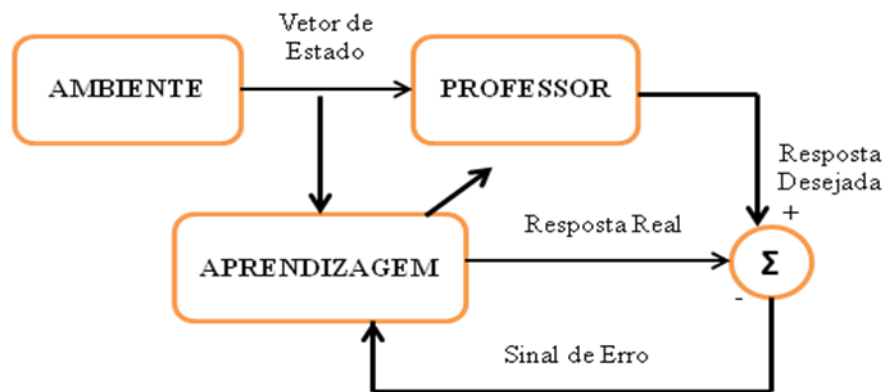
Segundo HAYKIN (2000), a propriedade que é importância primordial para uma rede neural é a sua habilidade de aprender a partir de seu ambiente e com isso melhorar seu desempenho através do processo de aprendizagem.

Isto é feito através de um processo iterativo de ajustes aplicado a seus pesos, o treinamento. O aprendizado ocorre quando a rede neural atinge uma solução generalizada para uma classe de problemas.

Já o algoritmo de aprendizagem é definido como o conjunto de regras bem definidas que leva ao aprendizado. Diversos métodos desenvolvidos para treinamento de RNA's podem ser agrupados em dois paradigmas principais: aprendizado supervisionado e aprendizado não-supervisionado (BRAGA *et al.*, 2000)

O aprendizado supervisionado, como o próprio nome sugere, é realizado sob a supervisão de um (professor) externo que tem a função de monitorar a resposta da rede, para cada entrada, conhecendo previamente a saída esperada. Exemplos típicos que utilizam o aprendizado supervisionado são problemas de aproximações de funções, de modelagem de sistemas e de classificação de dados. A Figura 4.6 mostra o digrama de blocos de uma rede treinada por aprendizado supervisionado.

Figura 4.6– Diagrama de blocos de aprendizagem supervisionada.



Fonte: Adaptada de HAYKIN (2000).

O aprendizado supervisionado tem atraído a atenção de muitos pesquisadores. Uma motivação talvez seja o fato que o aprendizado supervisionado pode ser encarado como um problema de otimização e também por usar ferramentas que já mostraram sua eficácia, tanto em programação linear quanto em não-linear (BARRETO, 2002).

Já o aprendizado não-supervisionado é baseado na auto-organização, dispensando a utilização, tanto do aprendizado “crítico” quanto do “professor”, não existindo o conhecimento das saídas desejadas para as entradas.

ROHN e MINE (2003) destacam que, para aprender, não é necessário conhecer detalhadamente as relações entre as variáveis envolvidas no problema; as redes, porém, necessitam de quantidade considerável de dados históricos, para conseguirem extrair satisfatoriamente as características relevantes, existentes no conjunto de dados. Se a rede for treinada corretamente, é capaz, não somente de aproximar qualquer função, mas também de generalizar, proporcionando saídas corretas para entradas não apresentadas antes.

Um modelo que tem boa generalização é o que responde corretamente aos exemplos contidos na base de aprendizado, mas também a outros exemplos, diferentes dos usados durante o processo de aprendizagem, estando contidos em uma base de teste.

Deste modo, a habilidade de generalizar é a principal capacidade, buscada nas tarefas que envolvem aprendizado; uma rede, porém, pode se especializar demasiadamente em relação aos exemplos contidos na base de aprendizado. Este tipo de comportamento gera um problema, conhecido como sobre-aprendizado ou sobre-ajuste (*over-training/over-fitting*). Outra situação que pode ocorrer é a rede não conseguir generalizar, gerando o problema chamado de sub-ajuste (*under-fitting*).

4.3.1.5 Algoritmo de treinamento

Pode-se dizer que o treinamento da rede neural é o ponto onde se obtém o sucesso ou o fracasso da rede, pois, neste procedimento, submete-se a rede ao aprendizado, onde alguns fatores relevantes devem ser levados em conta, dentre eles: o algoritmo de treinamento e o número de épocas (ciclos ou iterações).

Essencialmente o aprender de redes neurais consiste em colocar valores de conexões sinápticas e, em alguns casos, estes valores são colocados representando um certo conhecimento, como no caso usado em sistemas especialistas. Em outros se usa uma algoritmo para encontrá-los, chamado algoritmo de aprendizagem (BARRETO, 2002).

Entre os mais conhecidos algoritmos para aprendizado supervisionado se destacam a regra delta e a sua generalização para RNA's de múltiplas camadas, o algoritmo de retropropagação do erro (do inglês "*error back-propagation*"). Neste trabalho é dado ênfase na apresentação do algoritmo *back-propagation*, visto na próxima seção.

4.3.1.5.1 Algoritmo de retropropagação (*Backpropagation*)

A retropropagação (do inglês "*Backpropagation*") pode ser considerada como a generalização da Regra Delta para redes diretas com mais de duas camadas. Neste caso, ao menos uma camada de neurônios não está envolvida com a entrada ou saída e é, portanto, interna à rede.

Segundo HAYKIN (2000), a aprendizagem por retropropagação do erro consiste, basicamente, de dois passos através das diferentes camadas da rede: um passo para frente, a propagação, e um passo para trás, a retropropagação.

No passo para frente, submete-se a rede a uma entrada e seu efeito se propaga através da rede, camada por camada. Então, um conjunto de saídas é produzido como a resposta real da rede de tal forma que nesta etapa os pesos sinápticos sejam todos fixos.

Durante o passo para trás (retropropagação) os pesos sinápticos são todos ajustados de acordo com uma regra de correção de erro, a saída é comparada com o valor desejado e calcula-se o gradiente do erro (CAMPOS e SAITO, 2004). Este sinal de erro é então propagado para trás através da rede, contra a direção das conexões sinápticas, vindo daí o nome “retropropagação do erro”.

Esta foi a primeira regra inventada para efetuar treinamento supervisionado de redes diretas com mais de duas camadas e conseqüentemente não limitada a resolver problemas linearmente separáveis (RUMELHART *et al.*, 1986).

Ela apresenta ainda a vantagem de que, se a função de ativação for uma função analítica derivável, a derivada pode ser calculada explicitamente, evitando todos os problemas inerentes a derivação numérica. Como, por exemplo, temos o caso da função logística, Equação (19):

$$y_{pi} = f(x_s) = \frac{1}{1 + e^{-(\sum iw_{ji}y_{pj} + \theta_j)}} \quad (19)$$

Chamamos a expressão entre parênteses na Equação (19) de rede_{pi}, cuja derivada da função é:

$$y'_{pi} = \frac{\partial y_{pi}}{\partial rede_{pi}} = y_{pj}(1 - y_{pj}) \quad (20)$$

Conseqüentemente o erro em uma unidade de saída é dado por:

$$\delta_{pj} = (d_{pj} - y_{pj}) \cdot y_{pj} \cdot (1 - y_{pj}) \quad (21)$$

E em uma unidade interna temos:

$$\delta_{pi} = y_{pj}(1 - y_{pj}) \cdot \sum_k \delta_{pk} \cdot w_{kj} \quad (22)$$

O máximo da derivada y'_{pi} ocorre para $y_{pi}=0.5$ e o mínimo para $y_{pi}=0$ ou $y_{pi}=1$. Como na *retropropagação* a correção a cada passo é proporcional à derivada, os pesos mudam mais para as unidades que tem uma ativação de valor intermediário, isto contribui para a convergência do algoritmo.

Convêm ainda notar que a retropropagação pode ser usada (teoricamente) para neurônios onde as entradas são combinadas usando multiplicação, para redes com realimentação ou recorrentes. No primeiro caso, como observado por JANSON & FRENZEL (1993), a função erro pode apresentar muitos mínimos locais e não deve ser usada.

Por fim, vale salientar que nem toda rede direta pode ser treinada pela retropropagação, pois devido ao cálculo da derivada é necessário que a função de ativação seja derivável. Por outro lado é possível treinar redes com ciclos por retropropagação.

Como pode ser visto no desenvolvimento do algoritmo *backpropagation*, o treinamento de redes neurais multicamadas é um problema de otimização não-linear de uma função de custo, que mede o erro quadrático médio calculado pela saída da rede neural frente a uma saída desejada (HAYKIN, 2000).

4.3.1.5.2 Critério de parada

Uma das dificuldades do uso de RNA's consiste em identificar o melhor ponto de parada de treinamento, pois o erro de treinamento inicia como um alto valor decrescendo rapidamente, e continua diminuindo lentamente, tendendo a atingir um mínimo local na superfície de erro (HAYKIN, 2000).

Assim, para identificar um ponto de parada de aprendizado, buscando obter a melhor generalização da rede, uma alternativa é utilizar a técnica de parada antecipada, com base na validação cruzada. Ela é uma técnica estatística para validar o modelo obtido durante o treinamento da rede, utilizando um conjunto de dados diferentes dos usados, para estimar os parâmetros durante o treinamento.

O método consiste em acompanhar a evolução do aprendizado nas curvas correspondentes aos subconjuntos de dados de treinamento e de validação. Deste modo, o treinamento é interrompido, quando a curva de validação decresce a um erro mínimo e, antes de começar a crescer, conforme o treinamento continua.

Uma boa escolha dos valores iniciais dos pesos pode diminuir significativamente o tempo necessário para o treinamento. Normalmente, os valores iniciais dos pesos da rede são números aleatórios uniformemente distribuídos, em um intervalo definido.

4.3.2 Lógica *Fuzzy* (nebulosa)

A lógica *fuzzy* ou lógica nebulosa foi inicialmente introduzida com a publicação do *Journal Information and Control*, especificamente com o trabalho “*Fuzzy Sets*” com autoria de ZADEH (1965).

A teoria de subconjuntos nebulosos objetiva criar um sistema ou um ambiente que permita representar conhecimentos complexos, incertos, contraditórios e incompletos de maneira sistemática e lógica (BOUCHON-MEUNIER, 1995).

Além disso, a diversificação de tecnologias advindas da lógica *fuzzy* tem também permitido sua aplicação em diversas áreas do conhecimento. Com princípio de que seres humanos são capazes de lidar com processos bastante complexos, baseadas em informações imprecisas ou aproximadas, onde a estratégia adotada pelos operadores humanos é também de natureza imprecisa e geralmente possível de ser expressa em termos linguísticos.

A teoria de conjuntos *fuzzy* e os conceitos de lógica *fuzzy* podem ser utilizados para traduzir em termos matemáticos a informação imprecisa expressa por um conjunto de regras linguísticas. Se um operador humano for capaz de articular sua estratégia de ação como um conjunto de regras da forma “*Se... Então...*” um algoritmo passível de ser implementado em computador pode ser construído.

A inferência baseada em regras, proposta pela lógica nebulosa, proporciona resultados mais precisos, além de um desempenho estável e robusto. As técnicas de sistemas *fuzzy* são especialmente utilizadas nos casos onde não existem modelos matemáticos capazes de descrever precisamente o processo estudado. A definição de um modelo matemático para descrever um dado processo é o passo inicial para implantar a identificação de um sistema, oriundo das teorias de identificação clássica e moderna.

A transparência de um modelo *fuzzy* é um dos aspectos que distinguem a modelagem *fuzzy* dos demais métodos de modelagem tipo caixa preta e este tal aspecto permite uma melhor interpretação e análise do modelo obtido (BABUSKA *et al.*, 1998).

O desenvolvimento desse tipo de metodologia requer que se conheça detalhadamente o processo a ser identificado. Num processo como o de destilação, essa informação pode não está sempre disponível, ou ainda é muito complicado em situações onde um volume considerável de informações essenciais só é conhecido a priori de forma qualitativa, ou ainda quando critérios de desempenho só estão disponíveis em termos linguísticos.

Este panorama leva a falta de exatidão das técnicas tradicionais de inferência e, segundo TAKAHASHI (2006), a modelagem do processo é impraticável, por exemplo, em função do

volume de dados a ser manipulado ou no caso em que as informações disponíveis são variáveis qualitativas ou lingüísticas, estas situações inviabilizam a aplicação da maioria das teorias de controle convencionais. A grande simplicidade de implementação de sistemas de controle *fuzzy* pode reduzir a complexidade de um projeto, a um ponto em que problemas anteriormente intratáveis passam a ser solúveis.

A modelagem *fuzzy*, por outro lado, são técnicas para se manusear informações qualitativas de uma maneira rigorosa. Tais técnicas consideram o modo como a falta de exatidão e a incerteza são descritas e, por isso, tornam-se suficientemente poderosas para manipular de forma conveniente o conhecimento. A sua utilização em sistemas que operam em tempo real, em computadores ou micro-controladores, é também das mais convenientes, pois geralmente não envolvem nenhum problema computacional sério.

Para expressar conceitos ou ações *fuzzy* é muito comum o uso de elementos qualitativos ao invés de valores quantitativos. Elementos típicos incluem termos “alto”, “médio”, “pequeno”, “mais ou menos”, “em torno de”, etc. Estas idéias são capturadas pela definição de variável lingüística.

Uma variável lingüística *fuzzy*, que é outra definição muito importante na teoria dos conjuntos *fuzzy*, permite modelar os conhecimentos imprecisos e vagos sobre medições cujo valor preciso pode ser desconhecido (CAMPOS e SAITO, 2004).

A variável lingüística tem por característica assumir valores dentro de um conjunto de termos lingüísticos, ou seja, palavras ou frases. Assim, ao invés de assumir instâncias numéricas, uma variável lingüística assume instâncias lingüísticas. Por exemplo, uma variável lingüística “**Temperatura**” poderá assumir como valor um dos membros do conjunto de termos: {muito baixa, baixa, média, alta, muito alta}. Para se atribuir um significado aos termos lingüísticos, cada um destes é associado a um conjunto *fuzzy* definido sobre um universo de discurso comum que fornece a faixa de variação da variável lingüística.

Desde então, muitos paradigmas simbólicos de aprendizagem surgiram, e muitos se desenvolveram como métodos computacionais poderosos, incluindo aquisição indutiva de conceitos, sistemas classificadores e aprendizagem baseada em explicações.

4.3.2.1 Fundamentos dos conjuntos e da lógica *Fuzzy*

Na teoria clássica dos conjuntos, o conceito de pertinência de um elemento a um conjunto fica bem definido. Dado um conjunto A em um universo X , os elementos deste universo

simplesmente pertencem ou não pertencem àquele conjunto. Isto pode ser expresso pela função característica f_A :

$$f_A = \begin{cases} 1 & \text{seesomentesex} \in A \\ 0 & \text{seesomentesex} \notin A \end{cases}$$

Foi proposta então, por ZADEH (1965), uma caracterização mais ampla que generaliza a função característica de modo que ela pudesse assumir um número infinito de valores no intervalo $[0,1]$. Um conjunto *fuzzy* A em um universo X é definido por uma função de pertinência, expressa por:

$$\mu_A(x): X \rightarrow [0,1] \quad (23)$$

Onde A é representado por um conjunto de pares ordenados:

$$A = \left\{ \frac{\mu_A(x)}{x} \right\} x \in X \quad (24)$$

Onde $\mu_A(x)$, que é a função pertinência do conjunto *fuzzy*, indica o quanto x é compatível com o conjunto A . Um determinado elemento pode pertencer a mais de um conjunto *fuzzy*, com diferentes graus de pertinência.

O conjunto suporte de um conjunto *fuzzy* A é o conjunto de elementos no universo X para os quais $\mu_A(x) > 0$. Um conjunto *fuzzy* cujo suporte é um único ponto x' com $\mu_A(x') = 1$, onde A é chamado de conjunto unitário *fuzzy* ou “*singleton*”. Assim, um conjunto *fuzzy* também pode ser visto como o mapeamento do conjunto suporte no intervalo $[0,1]$, o que implica em expressar o conjunto *fuzzy* por sua função de pertinência.

ZADEH (1965) diz que se os conjuntos *fuzzy* podem ser definidos em universos contínuos ou discretos e, ainda o universo X for discreto e finito, o conjunto *fuzzy* A é normalmente representado por:

- ❖ Um vetor contendo os graus de pertinência no conjunto A dos elementos correspondentes de X ;
- ❖ Meio da seguinte notação (que não deve ser confundida com a soma algébrica):

$$\sum_{i=1}^n \frac{\mu_A(x_i)}{x_i} \quad (25)$$

Quando o universo X for contínuo, muitas vezes a seguinte notação é utilizada (sabendo que o símbolo de integral deve ser interpretado da mesma forma que o da soma no caso de um universo discreto):

$$\int_X \frac{\mu_A(x)}{x} \quad (26)$$

4.3.2.2 Definições e operações dos conjuntos *Fuzzy*

As regras de inferência constituem o núcleo de um sistema de inferência nebulosa (PAGLIOSA, 2003). Como nos conjuntos ordinários, há uma série de definições e operações envolvendo conjuntos *fuzzy*. Aqui são apresentadas as operações mais relevantes para uma abordagem inicial do assunto.

Um conjunto *fuzzy* A em X é *vazio* se e somente se sua função de pertinência é igual a zero sobre todo X :

$$A = \emptyset \text{ se e somente se } \mu_A(x) = 0 \quad \forall x \in X$$

O complemento A' de um conjunto *fuzzy* A é normalmente dado por:

$$\mu_{A'}(x) = 1 - \mu_A(x) \quad \forall x \in X \quad (27)$$

Dois conjuntos *fuzzy*'s A e B em X são *iguais* se suas funções de pertinência forem iguais sobre todo X :

$$A = B \text{ se e somente se } \mu_A(x) = \mu_B(x) \quad \forall x \in X$$

Um conjunto *fuzzy* A é um *subconjunto* de B se sua função de pertinência for menor ou igual à de B sobre todo X :

$$A \subset B \text{ se e somente se } \mu_A(x) \leq \mu_B(x) \quad \forall x \in X$$

Fazendo-se uso dos operadores minimum (*min* ou \wedge) e maximum (*max* ou \vee), as funções características dos conjuntos resultantes (interseção e união) podem ser representadas da seguinte forma:

$$f_{A \cap B}(x) = f_A(x) \wedge f_B(x) \quad \forall x \in X \quad (28)$$

$$f_{A \cup B}(x) = f_A(x) \vee f_B(x) \quad \forall x \in X \quad (29)$$

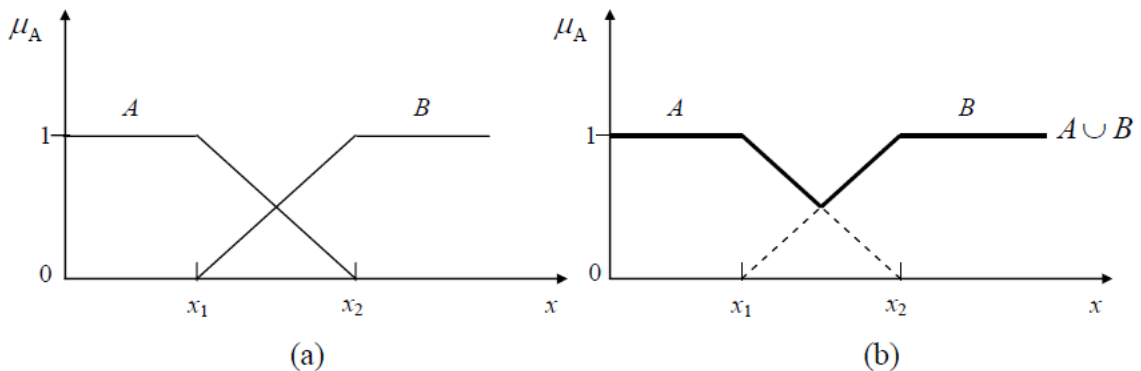
Embora a união e a intersecção possam ser descritas também por meio de outros operadores, ZADEH (1965) estendeu a descrição acima para os operadores $\max(\vee)$ e $\min(\wedge)$ na representação da União e da Intersecção, respectivamente Equações (30) e (31), de modo que:

$$\mu_{A \cup B}(x) = \mu_A(x) \vee \mu_B(x) = \max(\mu_A(x), \mu_B(x)) = (\mu_A(x) \cup \mu_B(x)).(x); \forall x \in X \quad (30)$$

$$\mu_{A \cap B}(x) = \mu_A(x) \wedge \mu_B(x) = \min(\mu_A(x), \mu_B(x)) = (\mu_A(x) \cap \mu_B(x)).(x); \forall x \in X \quad (31)$$

Como exemplo da união, considere que a união dois conjuntos *fuzzy* A e B, pertencentes a um mesmo universo de discurso X que é formado por todos os valores máximos entre $\mu_A(x)$ e $\mu_B(x)$, para todo $x \in X$, é representada na Figura 4.7.

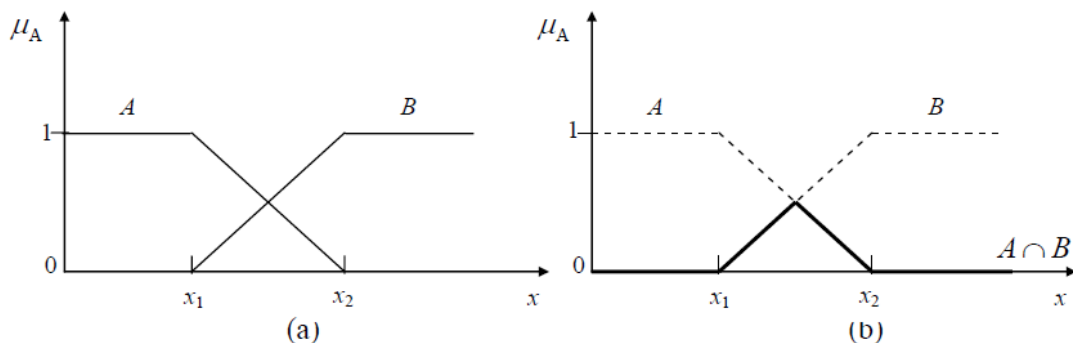
Figura 4.7 – Diagrama: (a) dos conjuntos A e B; (b) da união dos conjuntos A U B.



Fonte: Adaptado de JANG (1993).

Já como exemplo de intersecção, considere que a intersecção entre dois conjuntos *fuzzy* A e B, pertencentes a um mesmo universo de discurso X, é formado por todos os valores mínimos entre $\mu_A(x)$ e $\mu_B(x)$, para todo $x \in X$, representada na Figura 4.8.

Figura 4.8 – Diagrama: (a) dos conjuntos A e B. (b) da intersecção $A \cap B$.



Fonte: Adaptada de JANG. (1993).

Foi sugerida também, por ZADEH (1965), a soma algébrica $[\mu_{A \cup B}(x) = \mu_A(x) + \mu_B(x) - \mu_A(x) \mu_B(x)](x)$, para a união *fuzzy*, e o produto algébrico $[\mu_{A \cap B}(x) = \mu_A(x) \mu_B(x)](x)$, para a intersecção *fuzzy*. Posteriormente, com o objetivo de generalização, foram definidos os operadores de base axiomática, baseados nos conceitos das “*normas triangulares*” (*norma-t*) e nas normas duais, *co-norma* triangular ou *Conorma-t* ou, ainda, *Norma-s* (SANDRI e CORREA, 1999).

Uma *norma-t* é uma operação binária $t: [0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$, tal que, $\forall x, y, z \text{ e } w \in [0,1]$, as seguintes propriedades são satisfeitas:

- ❖ (I) Comutatividade: $x \ t \ y = y \ t \ x$
- ❖ (II) Associatividade: $(x \ t \ y) \ t \ z = x \ t \ (y \ t \ z)$
- ❖ (III) Monotonicidade: se $x \leq y$, $w \leq z$, então $x \ t \ w \leq y \ t \ z$
- ❖ (IV) Condições de Contorno $x \ t \ 0 = 0$ e $x \ t \ 1 = x$

Uma *norma-s* é uma função é operação binária $s: [0, 1] \times [0, 1] \rightarrow [0, 1]$, se e somente se satisfaz as seguintes propriedades:

- ❖ (I) Comutatividade: $x \ s \ y = y \ s \ x$
- ❖ (II) Associatividade: $x \ s \ (y \ s \ z) = (x \ s \ y) \ s \ z$
- ❖ (III) Monotonicidade: Se $x \leq y$ e $w \leq z$ então $x \ s \ w \leq y \ s \ z$
- ❖ (IV) Condições de contorno: $0 \ s \ x = x$, $1 \ s \ x = 1$

E além das propriedades de (I) a (IV), acima descritas, ainda uma função *norma-s* deve satisfazer:

$$x \ s \ 0 = x; \ x \ s \ 1 = 1$$

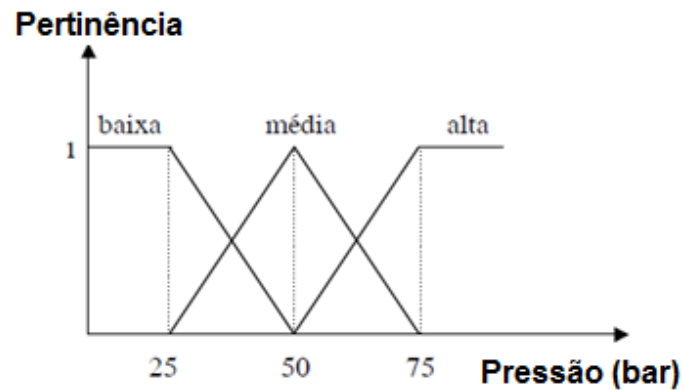
4.3.2.3 Variáveis linguísticas

Uma variável linguística, outra definição muito importante da teoria dos subconjuntos *fuzzy*, permite modelar os conhecimentos impreciso e vagos sobre as medições cujo valor preciso pode ser desconhecido (CAMPOS e SAITO, 2004).

A variável linguística é definida como uma variável cujos valores são nomes de conjuntos *fuzzy*, por exemplo, a pressão de um determinado processo pode ser uma variável linguística

assumindo valores de baixa, média e alta. Estes valores são descritos por intermédio de conjuntos *fuzzy*, representados por funções de pertinência, conforme mostrado na Figura 4.9.

Figura 4.9 – Funções de pertinência para a variável “Pressão”.



Fonte: Adaptado de JANG (1993).

Os valores de uma variável linguística podem ser generalizados por sentenças em uma linguagem especificada, construídas a partir de termos primários (*alto, baixo, pequeno, médio, grande, zero, por exemplo*), de conectivos lógicos (*negação não, conectivos “e” e “ou”*), de modificadores (*muito, pouco, levemente, extremamente*) e de delimitadores (*como parênteses etc.*).

Diz-se que a principal função das variáveis linguísticas é fornecer uma maneira sistemática para uma caracterização aproximada de fenômenos complexos ou mal definidos. Em essência, a utilização do tipo de descrição linguística empregada por seres humanos, e não de variáveis quantificadas, permite o tratamento de sistemas que são muito complexos para serem analisados através de termos matemáticos convencionais. Formalmente, uma variável linguística é caracterizada por uma quintupla $(N, T(N), U_X, G, M)$, onde:

N: nome da variável;

$T(N)$: conjunto de termos de N , ou seja, o conjunto de nomes dos valores linguísticos de N , é o conjunto de valores que a variável *fuzzy* pode tomar, (chamado também de termo primário);

U_X : universo de discurso;

G : regra sintática para gerar os *valores* de N como uma composição de termos de $T(N)$, conectivos lógicos, modificadores e delimitadores;

M : regra semântica, para associar a cada valor gerado por G um conjunto *fuzzy* em X .

No caso da variável “PRESSÃO” da Figura 4.9, ter-se-ia:

N : Pressão;

$T(N)$: {baixa, média, alta};

U_X : 0 a 100 Bar (por exemplo);

G : Pressão não baixa e não muito alta, por exemplo;

$M(x)$: associa o valor acima a um conjunto *fuzzy* cuja função de pertinência exprime o seu significado.

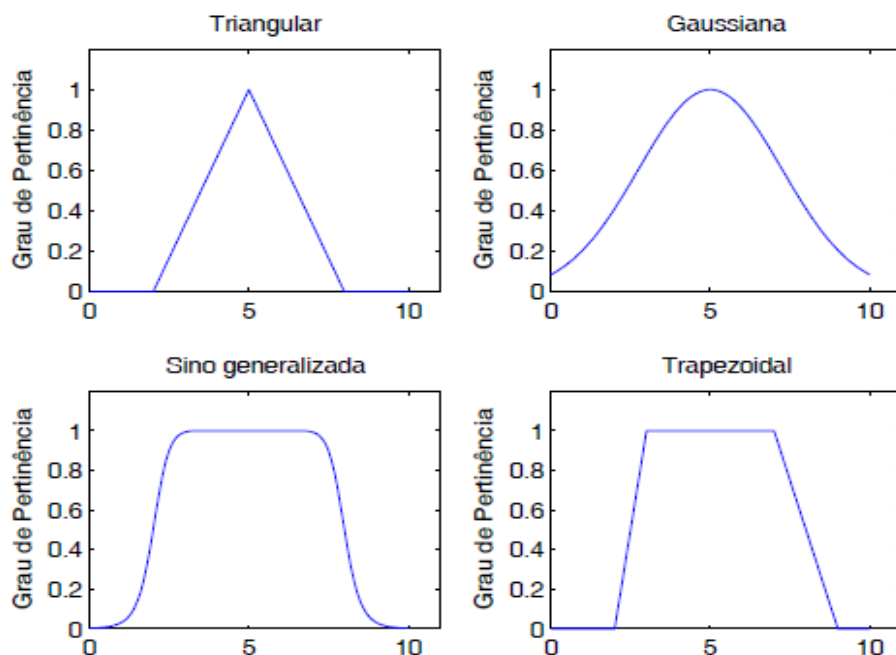
4.3.2.4 Funções de pertinência

Um conjunto *fuzzy* é um conjunto no qual a pertinência dos objetos não se resume a *sim* ou *não* (JANG *et al.*, 1997).

Em conjuntos *fuzzy* a transição entre “pertencer a um conjunto” ou “não pertencera um conjunto” é gradual, e essa transição suave é caracterizada pelas funções de pertinência que dão aos conjuntos nebulosos flexibilidade para modelagem de expressões linguísticas, tais como “a água está quente” ou “a temperatura está alta” (JANG *et al.*, 1997)

As funções de pertinência podem ter diferentes formas, dependendo do conceito que se deseja representar e do contexto em que serão utilizadas. A maioria das funções de pertinência comumente utilizada na literatura pode ser vistas no trabalho de PEDRYCZ & GOMIDE (1998), aqui são descritas algumas funções de pertinência conforme mostra a Figura 4.10.

Figura 4.10 – Tipos de funções pertinência mais comuns.



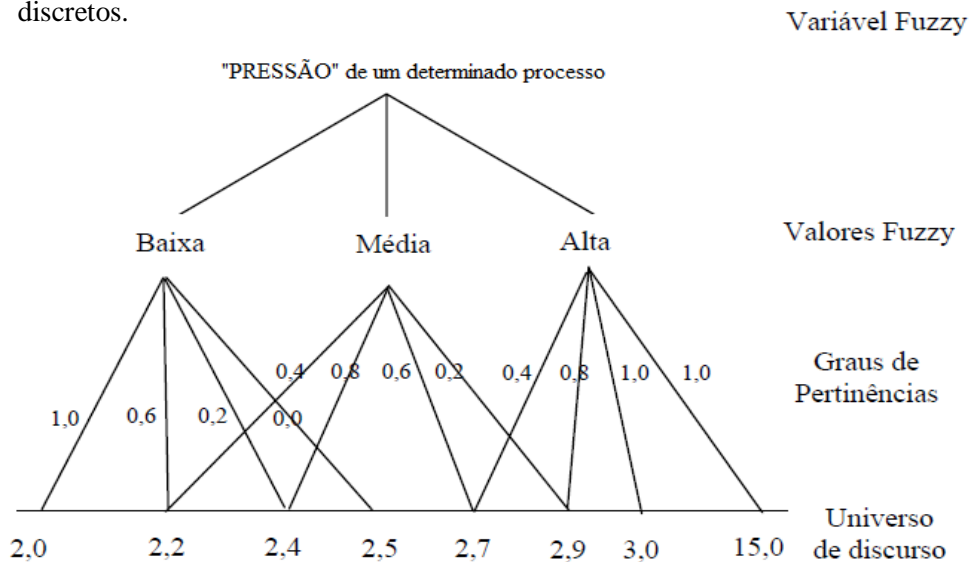
Fonte: TAKAHASHI (2006).

Para exemplificar o quanto o contexto é relevante na definição de funções de pertinência e de sua distribuição ao longo de um dado universo, considere-se novamente a variável linguística “PRESSÃO (P)”, constituída pelos termos: $T(P) = \{\text{baixa, média, alta}\}$, onde baixa, média e alta são os valores linguísticos.

Sabendo que cada um dos valores linguísticos admite valores numéricos num intervalo $[0, P_{\max}]$, e assim, se pode projetar os valores linguísticos sobre o intervalo $[0, P_{\max}]$ através de funções de pertinências. À atribuição de um significado para os termos linguísticos, é associado a cada um destes termos um conjunto fuzzy definido sobre um universo de discurso comum.

Logo, desde que uma variável linguística tem por característica assumir valores dentro de um conjunto de termos linguísticos (cada termo da variável “PRESSÃO”), cada valor *fuzzy* da “PRESSÃO”, que são elementos de $T(P)$, é caracterizado por um conjunto *fuzzy*, por exemplo, com termos: Baixa: $[0,0; 2,5]$, Média: $[2,6; 5,0]$ e Alta: $[5,1; 15,0]$, em um universo de discurso, por exemplo $[0,0, 15,0]$, medida em Kgf/cm^2 . Na Figura 4.11 é mostrado como os elementos da variável fuzzy “PRESSÃO” podem ser dispostos e implementados pela quintupla $\langle N, T(N), U_X, G, M \rangle$.

Figura 4.11 – Variável linguística “PRESSÃO” e um conjunto fuzzy de valores discretos.



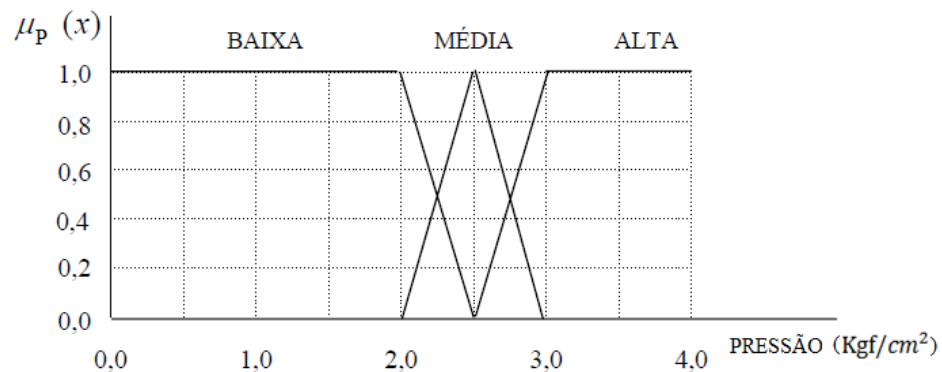
Fonte: Adaptada de JANG *et al.* (1997).

Pela Figura 4.11 pode-se citar a variável linguística com rótulo $X = \text{pressão}$, com um conjunto de termos $T(P) = \{\text{baixa, média, alta}\}$, universo de discurso $U = [0,0; 15,0]$ e um dos valores $M(x)$ escrito como:

$$\mathcal{M}(baixa) = \{(x, \mu_{baixa}(x)); x \in [0.0 \text{ Kgf/cm}^2, 1.5 \text{ Kgf/cm}^2]\}$$

Já na Figura 4.12 são ilustrados três possíveis termos linguísticos representados para a variável “PRESSÃO”, supondo uma medida do universo de discurso $M(x)$ e tendo em conta que foram definidas três funções: duas retangulares (baixa e alta) e uma triangular (média).

Figura 4.12– Funções de Pertinência para variável linguística (P).



Fonte: Adaptada de JANG *et al.* (1997).

Qualquer valor de pressão, por exemplo, $2,2 \text{ Kgf/cm}^2$, tem um único grau de pertinência a cada valor pressão:

$$\mu_{baixa}(2,2) = 0,6$$

$$\mu_{média}(2,2) = 0,4$$

$$\mu_{alta}(2,2) = 0,0$$

Pode ser observado ainda, na Figura 4.12, sobre o eixo $\mu_P(x)$ a *fuzzyficação* da medida, ou seja, a conversão da medida, de valor $2,2 \text{ Kgf/cm}^2$ do universo de discurso, em valores compreensíveis para *fuzzy*, é dada por:

$$2,2 \text{ Kgf/cm}^2 = 0,6 \text{ “Baixa”} + 0,4 \text{ “Média”} + 0,0 \text{ “Alta”}$$

Dessa forma, a lógica fuzzy admite uma variedade de quantificadores, por exemplo: pouco, vários, usualmente, freqüentemente, em torno de cinco, etc. (GOMIDE e GUDWIN, 1994). Esses problemas podem ser facilmente resolvidos pelo cérebro humano. Assim, verifica-se que os problemas da vida real são imprecisos e raramente podem ser resolvidos com um sim ou não.

4.3.2.5 Regras *se... então* e sistemas de inferência Fuzzy (nebulosa)

O processo de inferência *fuzzy* ou raciocínio aproximado permite que sistemas *fuzzy* sejam elaborados por um conjunto de regras *fuzzy* através de proposições condicionais, do tipo “Se (condição)... Então (ação)”, baseadas nas variáveis linguísticas para executar um processo de tomada de decisão.

Um bom exemplo para descrever o processo de inferência por um conjunto de regras fuzzy é usando mais uma vez, a variável “PRESSÃO”: *Se a pressão é alta, então o volume é baixo (pequeno)*, sendo a *pressão* e o *volume* variáveis linguísticas e *alta* e *pequeno* valores linguísticos caracterizados por funções de pertinência.

Segundo ORTEGA (2001), cada regra *fuzzy* é composta por uma parte antecedente ou premissa, parte “*Se*”, e uma parte consequente ou conclusão, parte “*Então*”, resultando em uma estrutura do tipo:

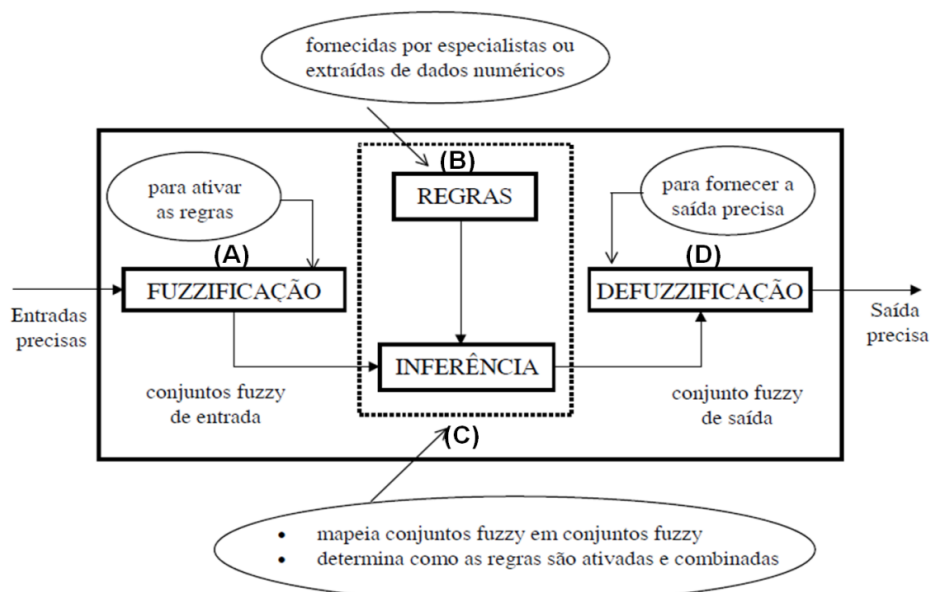
Se < proposição *fuzzy* antecedente > *Então* < proposição *fuzzy* consequente >.

É citada em JANG (1993), outra forma de representação das regras *Se-Então*, proposta por Takagi e Sugeno (1985), que consiste em usar conjuntos nebulosos apenas no antecedente da regra. Usando esta nova definição, pode-se descrever a variável *PRESSÃO* de um dado objeto sob área definida, determinando assim a força de atuação *F* sobre o objeto:

*Se a PRESSÃO é alta, então $F = A * (PRESSÃO)$*

As regras de inferência constituem o núcleo de um sistema de inferência nebulosa, que será detalhado a seguir. Um sistema de inferência nebulosa, representado na Figura 4.13, é composto por cinco blocos funcionais.

Figura 4.13– Diagrama de Blocos Funcionais num Sistema de Inferência Fuzzy.



Fonte: Adaptada de NOBRE e PALHARES (1997).

Conforme JANG *et al.*, (1997), a estrutura de um sistema de inferência *fuzzy* é baseada em um conjunto de regras *fuzzy* que inclui quatro componentes básicos principais, descrito nas etapas de (A) a (D), abaixo:

(A) Etapa de *fuzzyficação* ou *nebulização*: traduz a informação de entrada em conjuntos *fuzzy*. A cada variável de entrada são atribuídos termos linguísticos que são os estados da variável, e cada termo linguístico é associado a um conjunto *fuzzy* traduzido por uma função de pertinência;

(B) Etapa das regras ou base de conhecimento: consiste em um conjunto de regras *fuzzy* e de uma base de dados. No conjunto de regras *fuzzy* (conhecido como base de regras) estão as declarações linguísticas do tipo “Se...Então”, definidas por especialistas ou retiradas de um conjunto de dados numéricos. Na base de dados estão as variáveis linguísticas, as definições dos respectivos universos de discursos e o conjunto de funções de pertinências. Extrair regras de especialistas na forma de sentenças do tipo *se...então* pode não ser uma tarefa fácil, por mais conhecedores que eles sejam do problema em questão. Alternativamente, ao uso de especialistas para a definição da base de regras, existem métodos de extração de regras de dados numéricos. Estes métodos são particularmente úteis em problemas de classificação e previsão de séries temporais.

(C) Método de Inferência: aplica um raciocínio *fuzzy* para obter uma saída *fuzzy*. Aqui ocorrem as operações com conjuntos *fuzzy* propriamente ditas: combinação dos *antecedentes* das regras, *implicação* e *modus ponens generalizado* (obtenção do conjunto *fuzzy* de saída através do processo de inferência). Os conjuntos *fuzzy* de entrada, relativos aos antecedentes das regras, e o de saída, referente ao consequente, podem ser definidos previamente ou, alternativamente, gerados automaticamente a partir dos dados.

(D) Defuzzificador ou desnebulizador: traduz a saída por um valor numérico. Uma vez obtido o conjunto *fuzzy* de saída através do processo de inferência (regra *modus ponens* generalizada), no estágio de *defuzzificação* ou desnebulização é efetuada uma interpretação dessa informação. Isto é necessário, pois, em aplicações práticas, geralmente são requeridas saídas precisas. No caso de um sistema de controle, por exemplo, em que o controle é efetuado por um sistema de inferência *fuzzy* (ou controlador *fuzzy*), este deve fornecer à planta dados ou sinais precisos, já que a "apresentação" de um conjunto *fuzzy* à entrada da planta não teria significado algum.

Existem vários métodos de *defuzzificação* na literatura; dois dos mais empregados são o *centro de gravidade* e a *média dos máximos*. Neste, a saída precisa é obtida tomando-se a

média entre os dois elementos extremos no universo que correspondem aos maiores valores da função de pertinência do consequente. Com o *centro de gravidade*, a saída é o valor no universo que divide a área sob a curva da função de pertinência em duas partes iguais. Para um melhor entendimento destes e de outros métodos de inferência e de *defuzzificação*, sugere-se a leitura de PEDRYCZ *et al.* (1999).

Vale ressaltar, que outro aspecto importante é a definição dos conjuntos *fuzzy* correspondentes às variáveis de entrada (antecedentes) e à(s) de saída (consequente(s)), pois o desempenho do sistema de inferência, **Etapa (C)**, dependerá do número de conjuntos e de sua forma. Pode-se efetuar uma sintonia "manual" das funções de pertinência dos conjuntos, mas é comum empregar métodos automáticos.

Formalmente, dado um fato observável ($x \in A'$), o qual é representado por um conjunto *fuzzy* A' e uma base de regras dada por uma relação *fuzzy* R , um conjunto *fuzzy* induzido pelo fato $x \in A'$ e pela regra R , é dado por:

Fato: $x \in A'$;
 Regra 1: se $x \in A_1$, então $y \in B_1$;
 Regra 2: se $x \in A_2$, então $y \in B_2$;
 ⋮ ⋮ ⋮
Regra n : se $x \in A_n$ então $y \in B_n$;
 Consequência: $y \in B'$

O processo de inferência *fuzzy* aplicado nas regras acima é, em geral, baseado numa regra chamada de “*Modus Ponens generalizada*” usada para obter conclusões por meio de inferência para a frente “*forward*”, ela é mais utilizada em aplicações de controle de processos, onde existe uma relação para a frente entre causa e efeito (BROX *et al.*, 2010). A regra de inferência *Modus ponens* é explicitada da seguinte forma:

Fato: $x \in A'$
Regra: se $x \in A$ então $y \in B$
 Consequência: $y \in B'$

Onde: A , A' , B e B' são conjuntos *fuzzy* associados aos valores das variáveis linguísticas x e y . Simbolicamente:

Fato: A'
Regra: $A \rightarrow B$
 Conclusão: $B' = A' \circ (A \rightarrow B)$

Isto significa que a regra *modus ponens generalizada* permite inferir o valor *fuzzy* B' , dado um valor de entrada A' e uma relação de implicação $R_{A \rightarrow B}(x, y)$ relacionando ambas variáveis. O valor inferido é calculado através da composição do valor A' com a relação de implicação R , o que nos dá a seguinte fórmula:

$$B' = A' \circ R_{A \rightarrow B}(x, y) = A' \circ (A \rightarrow B) \quad (32)$$

Com a função de pertinência, ARNOULD E TANO (1995), dada por:

$$\mu_{B'}(y) = \sup_x \{ \min [\mu_{A'}(x); I(\mu_A(x), \mu_B(y))] \} \quad (33)$$

Onde: I é o operador de implicação, que é $I: [0,1] \times [0,1] \rightarrow [0,1]$.

Aqui é apresentado um exemplo aplicado da regra *modus ponens*, dado um fato observável (*Nº de Reynolds (R_e) é muito alto*) e uma base de regras (**se Reynolds é alto então o regime de operação do fluido é turbulento**), um conjunto *fuzzy* induzido pelo fato e pela regra, é dado por:

Fato: *Reynolds é muito alto*

Regra: **se Reynolds é alto então o regime é turbulento**

Consequência: *o regime de operação do fluido é turbulento*

As bases de regras *fuzzy* podem ser constituídas de várias formas, de acordo com o número de variáveis linguísticas apresentadas na entrada e na saída dos sistemas, oriunda da abordagem de modelagem de processos químicos e de sistemas de controle, determinando e classificando os modelos linguísticos como: modelo SISO (*Single Input/Single Output*), modelo MISO (*Multiple Input/Single Output*) e modelo MIMO (*Multiple Input/Multiple Output*).

No caso inferência de composição do processo de destilação, várias variáveis influenciam na composição, sejam elas temperaturas, pressões, vazões e composições internas, assim gerando um modelo MISO para inferência desta variável.

O modelo MISO (*Multiple Input/Single Output*) caracteriza-se por sistemas que consistem de múltiplas entradas e uma única saída. Uma base de regras para o modelo MISO de

inferência com m regras e n variáveis *fuzzy* de entradas e uma variável *fuzzy* de saída tem a seguinte forma:

Regra 1 : Se x_1 é $A_{1,1}$ e x_2 é $A_{2,1}$ e ... e x_n é $A_{n,1}$, **Então** y é B_1 ;

ou

Regra 2 : Se x_1 é $A_{1,2}$ e x_2 é $A_{2,2}$ e ... e x_n é $A_{n,2}$, **Então** y é B_2 ;

ou

⋮

ou

Regra m : Se x_1 é $A_{1,m}$ e x_2 é $A_{2,m}$ e ... e x_n é $A_{n,m}$, **Então** y é B_m .

Onde x_1, x_2, \dots, x_n são as variáveis linguísticas de entrada e y é a variável de saída e $A_{n,m}$, e B_m , subconjuntos de um universo de discurso U e V , respectivamente, os valores *fuzzy* de entrada e saída do modelo. Um exemplo para a base de regras possuindo a estrutura MISO é dado como, seja a composição de saída x_1 , temperatura e pressão sendo as variáveis de entrada com m regras dispostas:

Regra 1: Se (o fluxo de vapor é *alto*) e (a temperatura é *alta*) e (eficiência de separação é *média*)

Então: (a fração molar do componente mais volátil é *média*);

ou

Regra 2: Se (o fluxo de vapor é *médio*) e (a temperatura é *média*) e (eficiência de separação é *alta*)

Então: (a fração molar do componente mais volátil é *alta*)

As regra 1 e regra 2 formam um modelo *fuzzy* com três variáveis e dois valores linguísticos para cada variável, tendo então 12 regras, para se chegar à conclusão da fração molar do componente mais volátil, a partir dos atributos que são as variáveis linguísticas de entrada, *fluxo de vapor* (alta/baixa), *temperatura* (alta/média) e eficiência de separação (média/alta).

As variáveis de saída “*fração molar média*” e “*fração molar alta*” representam os conjuntos *fuzzy* da parte consequente do sistema de regras de dois tipos de classificação *fuzzy* adotada.

Neste trabalho foi empregada a integração entre sistemas de inferência *fuzzy* e redes neurais, originando os sistemas *neuro-fuzzy* que tem se mostrado adequada para a sintonia de funções de pertinência, assim como para a geração automática de regras. O sistema *neuro-fuzzy* é descrito na próxima seção e os resultados da estimativa da composição serão apresentados no Capítulo 5.

4.3.3 Sistema híbrido *neuro-fuzzy*

Os sistemas *neuro-fuzzy* têm atraído o interesse da comunidade científica nestes últimos anos, pois estes sistemas têm demonstrado um melhor desempenho em diferentes aplicações quando comparadas com sistemas puros (BUCKLEY & HAYASHI, 1994).

A idéia básica de um sistema híbrido *neuro-fuzzy* é implementar um Sistema de Inferência *Fuzzy* (FIS) em uma arquitetura paralelamente distribuída, de tal forma que os paradigmas de aprendizado comuns às RNA's possam ser aproveitadas nesta arquitetura híbrida.

Assim, os sistemas as *neuro-fuzzy* combinam a capacidade de aprendizagem das redes neurais com a capacidade de raciocínio dos sistemas *fuzzy*. Dessa forma, estes sistemas formam uma estrutura que atualiza seus parâmetros em função de uma relação entrada-saída desejada (CAMPOS e SAITO, 2004).

Conforme JANG (1993) e JANG e SUN (1995), sistemas *neuro-fuzzy* são usualmente representados como redes neurais de múltiplas camadas (MLP), vista na seção 4.3.1.3. No entanto, outras arquiteturas de redes neurais podem ser utilizadas, onde os pesos das conexões, das funções de ativação e propagação diferem das redes neurais mais comuns.

Tendo em vista, que as RNA's apresentam limitações, como por exemplo, a maneira pela qual o conhecimento é representado. Ou seja, as redes neurais se mostram deficientes para representar o conhecimento de forma explícita em sua estrutura, pois estes modelos não são capazes de definir automaticamente as regras utilizadas para as tomadas de decisões (FULLÉR, 1995).

O sistema de inferência *fuzzy* é capaz de utilizar o conhecimento especialista, armazenando informação na base de regras associada ao sistema e realizando o raciocínio aproximado para inferir o valor da resposta correspondente. Mas, apesar da técnica de modelagem *fuzzy* ser largamente aplicada em controle, predição e inferência, ela apresenta algumas desvantagens, citadas por JANG (1993):

1. Não existe uma maneira formal de se transformar o conhecimento de especialistas em uma base de regras de um sistema *fuzzy*;

2. Uma vez criadas às funções de pertinência do sistema *fuzzy*, não existem métodos efetivos para sintonia destas funções, de forma a se elevar o desempenho do sistema.

Se pode então utilizar as RNA's para aprender regras *fuzzy*, de tal forma com que as regras *fuzzy* possam ser utilizadas para inicializar a estrutura da RNA (grande problema da rede), a fim de acelerar o treinamento e melhorar sua generalização e, por fim, as RNA's podem ser usadas para refinar regras *fuzzy* e funções de pertinência.

Com a união destas duas técnicas (Rede Neural Artificial + Lógica Fuzzy) é possível minimizar as deficiências de ambas, unindo seus recursos e aliando suas vantagens. A Tabela 4.1 mostra o quadro comparativo entre a lógica *Fuzzy* e a RNA.

Tabela 4.1 – Parâmetros da lógica fuzzy e da rede neural artificial.

PARÂMETROS	SISTEMAS FUZZY	RNA
Base de Conhecimento	Especialistas Humanos	Dados Numéricos
Treinamento	Interativo/Indutivo	Algoritmo (Ajustes dos Pesos)
Tipos de Incerteza	Qualitativa/Quantitativa	Quantitativa
Raciocínio	Através de Busca Heurística	Computação Paralela
Interface Linguística	Explícita	Não Evidente
Tolerância a Falhas	Não Evidente	Alta
Robustez	Alta	Alta

Fonte: PAGLIOSA (2003) e TAKAHASHI (2006).

Os modelos adaptativos “*híbridos neuro-fuzzy*” são assim chamados por possuírem um algoritmo de aprendizado capaz de ajustar os seus parâmetros e sua estrutura a partir dos dados da entrada real. E segundo HUAMANÍ (2003), a capacidade de aprendizado é sem dúvida, a característica mais importante das redes neurais que os sistemas fuzzy herdam, gerando as redes *neuro-fuzzy*. É através da aprendizagem, que estes dois componentes da inteligência computacional, quando combinados, transformam-se em um único sistema *neuro-fuzzy* que supera as deficiências individuais.

Entre os modelos *neuro-fuzzy* adaptativos mais empregados na construção de inferência estão: o **ANFIS** ou Sistema de Inferência *Neuro-Fuzzy* Adaptativo (do inglês “*Adaptive Network Based Fuzzy Inference System*”), **NEFCLASS** (do inglês “*Neuro-Fuzzy Classification*”) e **FSOM** (do inglês “*Fuzzy Self-Organized Map*”). Todos os modelos são

sistemas adaptativos, como as redes neurais, e são interpretáveis através de regras da lógica *fuzzy*.

Dentre estes modelos destacam-se o modelo ANFIS criado de forma pioneira por JANG (1993), ele foi empregado neste trabalho para inferência da composição no processo de destilação metanol-água e será apresentado na próxima seção.

4.3.3.1 Sistema inferência *neuro-fuzzy* adaptativo (ANFIS)

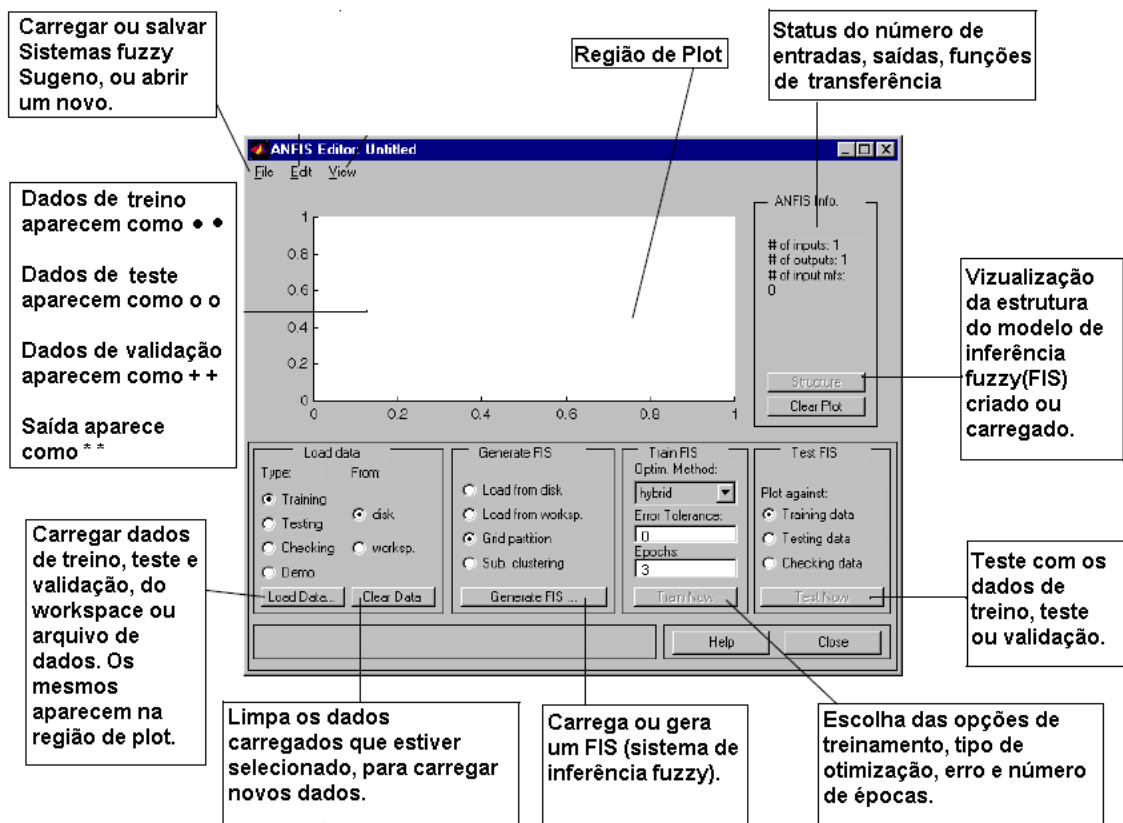
O sistema de inferência *neuro-fuzzy* adaptativo ANFIS (do inglês *Adaptive Neuro-Fuzzy Inference System*) é considerado um subconjunto especial das RNA's alimentadas adiante, com a capacidade de aprendizado supervisionado (JANG, 1993).

A arquitetura chamada ANFIS mantém as características básicas dos sistemas *fuzzy*, mas incorpora as propriedades de adaptação das RNA's. Nesta seção o sistema híbrido ANFIS será introduzido, uma vez que apenas este sistema foi aplicado neste trabalho.

O modelo ANFIS funciona de modo equivalente aos sistemas de inferência *fuzzy*, e suas capacidades adaptativas as fazem aplicáveis a uma grande quantidade de áreas de estudos como, por exemplo, em classificação de dados e extração de características a partir de modelos.

Uma propriedade do modelo ANFIS é que o conjunto de parâmetros pode ser decomposto para utilizar uma regra de aprendizagem híbrida mais eficiente que os mecanismos tradicionais encontrados na literatura. O modelo ANFIS é uma ferramenta disponível na caixa de ferramentas do programa MATLAB® e pode ser construído carregando o comando “*anfisedit*” no Matlab®, conforme Figura 4.14.

Figura 4.14 – Ambiente ANFIS, detalhamento do toolbox ANFIS do Matlab®.



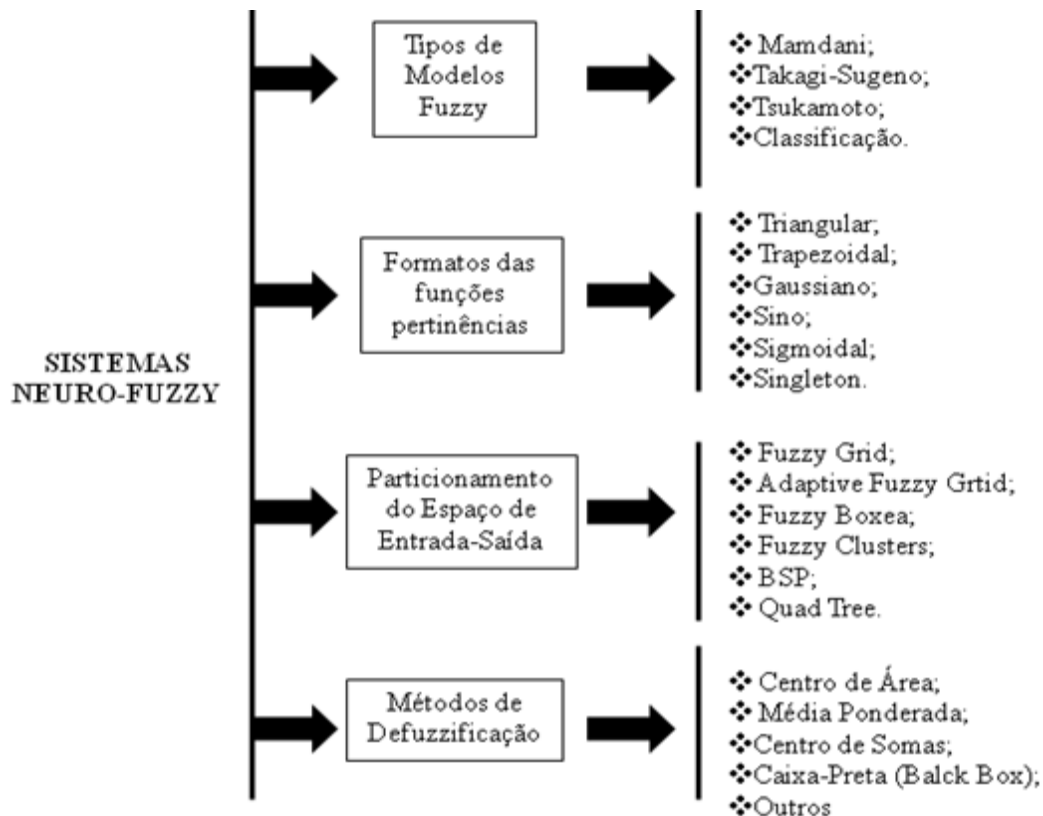
Fonte: Adaptada Matlab®, *Toolbox* (2008).

4.3.3.2 Arquitetura do modelo ANFIS

Os sistemas híbridos *neuro-fuzzy* são classificados de acordo com as características das redes neurais artificiais e dos sistemas *fuzzy*.

Foi proposta, segundo SOUZA (1999), uma classificação (taxonomia) dos sistemas *neuro-fuzzy* em duas categorias: a primeira voltada às características *fuzzy* do sistema (ver figura 4.15) e segunda relacionada às características da aprendizagem.

Figura 4.15 – Classificação do sistema *neuro-fuzzy* quanto às características fuzzy do sistema.



Fonte: Adaptada de SOUZA (1999).

Assim, diferentes sistemas de inferência *fuzzy* proporcionam diferentes arquiteturas para o modelo ANFIS. O sistema ANFIS constrói um sistema de inferência neural *fuzzy* equivalente, através de um dado conjunto de padrões de entrada e saída. Os parâmetros associados com as funções de pertinência são ajustados via um algoritmo de aprendizado, que pode ser o algoritmo de retropropagação “*backpropagation*” ou sua combinação com um algoritmo do tipo mínimo quadrados “*Least Squares*” (JANG, 1993; JANG *et al.* 1997).

TAKAGI & SUGENO (1985) propuseram implementar a estrutura ANFIS em sistemas do tipo Takagi-Sugeno, também conhecido na literatura como sistema de inferência tipo 3, que contém funções lineares ou constantes nos consequentes das regras que formam o sistema, tendo estas regras pesos unitários.

O modelo ANFIS de sistema de suporte Takagi-Sugeno tem ordem zero ou um, e permite várias variáveis de entrada, porém, somente uma variável de saída, dessa forma ele é identificado como um modelo de múltiplas entradas e única saída (MISO), onde os pesos entre as regras são iguais a uma unidade.

Neste trabalho o sistema de inferência *fuzzy* construído é do tipo TAKAGI-SUGENO (1985), que é definido por um conjunto de regras que apresenta a seguinte forma:

$$\text{Se } x \text{ é } A \text{ e } y \text{ é } B, \text{ Então } z = f(x,y)$$

Onde: x e y são variáveis *fuzzy*, A e B são conjuntos *fuzzy* e f é uma função de x e y que aproxima o valor de z . Usualmente a função f é uma combinação linear das variáveis de entradas, cujos coeficientes são estimados usando mínimos quadrados.

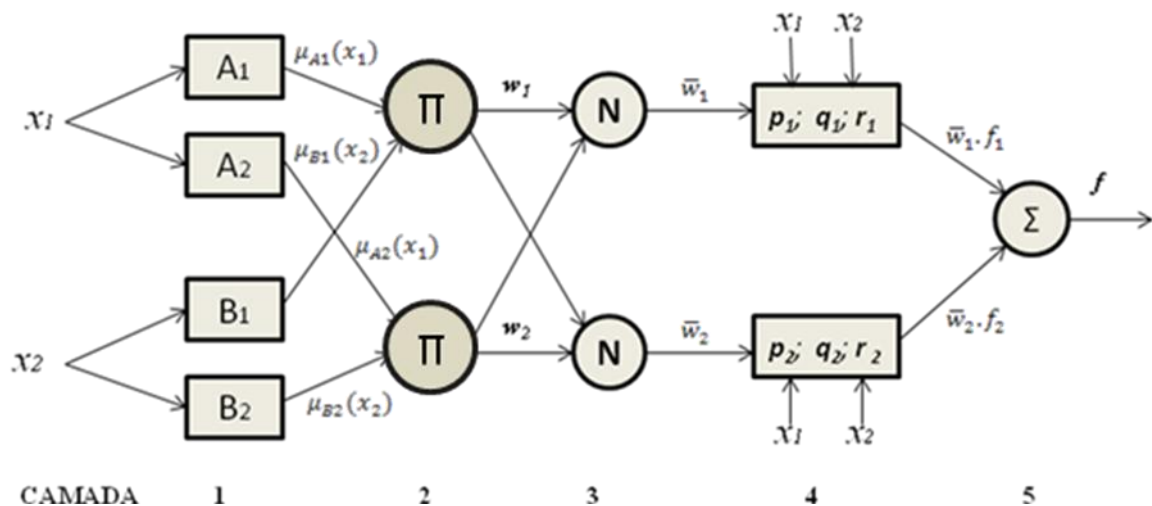
A funcionalidade do modelo *neuro-fuzzy* com base no modelo do tipo de Takagi-Sugeno de primeira ordem (combinações lineares das entradas) e no algoritmo ANFIS, considerando, por exemplo, um sistema de inferência *fuzzy* de duas entradas, x_1 e x_2 , uma saída, f , é composto por duas regras *fuzzy*:

$$\text{Regra 1: Se } x_1 \text{ é } \mathbf{A}_1 \text{ e } x_2 \text{ é } \mathbf{B}_1, \text{ então } f_1 = p_1 x_1 + q_1 x_2 + r_1 \quad (34)$$

$$\text{Regra 2: Se } x_1 \text{ é } \mathbf{A}_2 \text{ e } x_2 \text{ é } \mathbf{B}_2, \text{ então } f_2 = p_2 x_1 + q_2 x_2 + r_2$$

A arquitetura de um sistema *neuro-fuzzy* de inferência adaptativa é mostrado na Figura 4.16.

Figura 4.16– Arquitetura típica de um modelo ANFIS.



Fonte: Adaptada de TITO (2001).

Na Figura 4.16 a arquitetura do ANFIS é composta por 5 camadas, os nós da camada 1 e 4 são adaptativos sendo seus valores os parâmetros das partes antecedentes e consequentes da regra, respectivamente. A arquitetura ANFIS é equivalente ao mecanismo do raciocínio

utilizado para o modelo do tipo de Takagi-Sugeno, onde os nós situados na mesma camada desempenham tarefas similares.

Cada camada da rede realiza um processo específico na inferência da saída do sistema, com os nós das camadas adjacentes conectadas entre si conforme descrito a seguir.

Na camada 1: Camada de *Fuzzyficação* (Nós Adaptativos). Baseada nas funções de pertinência ($A_i = \text{alto}$ e $B_i = \text{baixo}$), onde os parâmetros que definem as curvas de pertinência são considerados como pesos *fuzzy*. Cada entrada tem apenas dois termos linguísticos (alto e baixo), porém, nada impede que este número seja maior.

$$O_{1,i} = \mu_{A_i}(x_1), \text{ para } i = 1, 2 \quad (35)$$

Sendo μ_A e μ_B as funções pertinência das entradas x_1 e x_2 .

Na camada 2: Camada de Disparo das Regras (Nós Fixos). Cada nó desta camada corresponde a uma regra e calcula com que grau de pertinência o consequente (*Então*) da regra está sendo atendido.

$$O_{2,i} = w_i = \mu_{A_i}(x_1) * \mu_{B_i}(x_2), \text{ para } i = 1, 2 \quad (36)$$

Na camada 3: Camada de Normalização dos disparo das regras (nós fixos). A saída deste nó é dita como a razão entre a intensidade de disparo da i -ésima regra e a soma dos disparos de todas as outras regras, denominada de intensidade de disparo normalizado, dada por:

$$O_{3,i} = \bar{w}_i = \frac{w_i}{w_1 + w_3} \quad (37)$$

Diz-se que a normalização é utilizada como um pré-processamento para a camada de *defuzzyficação* do sistema.

Na camada 4: Linearização. Cada nó desta camada é adaptativo e seus parâmetros (p_i , q_i , e r_i) para $i = 1, 2$, correspondem à parte do consequente de cada regra do modelo. As saídas são calculadas pelo produto entre os níveis de disparos normalizados e o valor do consequente da regra. Assim, a

$$O_{4,i} = \bar{w}_i f_i \quad (38)$$

$$O_{4,i} = \bar{w}_1(p_i x_1 + q_i x_1 + r_1), \text{ para } i = 1, 2$$

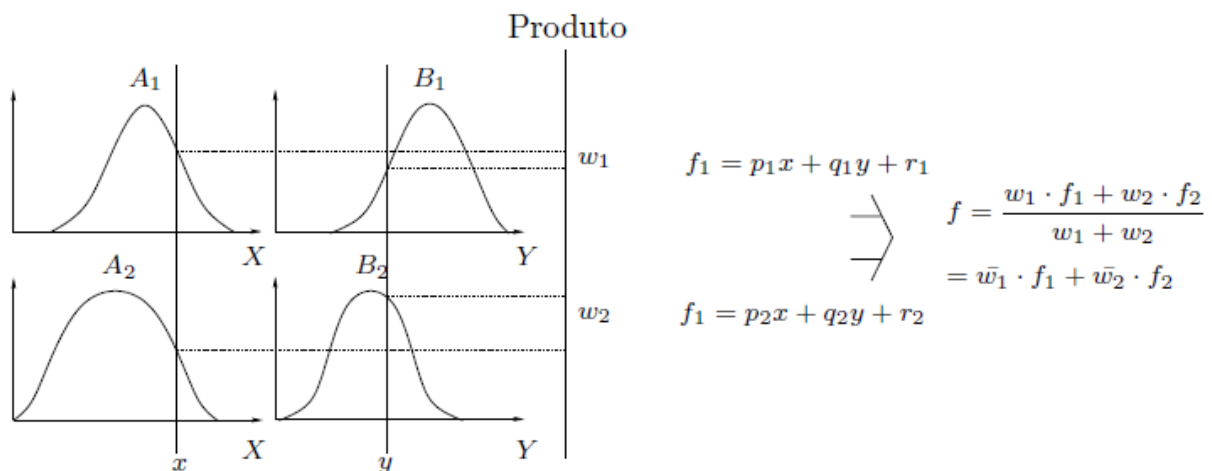
Onde p_i , q_i , e r_i são os parâmetros da função linear de saída, que correspondem aos consequentes “singletons” ou aos consequentes do modelo de Takagi-Sugeno de primeira ordem (combinações lineares das entradas). E onde, \bar{w}_i para $i = 1, 2$, é a saída da camada 3.

Na camada 5: Camada de *Defuzzificação* (Nós fixos). Após a avaliação das regras *fuzzy*, deve-se determinar o valor real da saída do sistema *fuzzy*, este processo chama-se de *defuzzificação* é dado por:

$$O_{5,i} = \sum \bar{w}_1 f_i = \frac{\sum_i w_i f_i}{\sum_i w_i}, \text{ para } i = 1, 2 \quad (39)$$

No sistema ANFIS, geralmente, as funções de pertinências são do tipo gaussiana, onde a idéia do sistema é implementar um modelo *fuzzy* numa rede neural. A Figura 4.17 mostra o mecanismo de inferência ANFIS.

Figura 4.17 – Mecanismo de inferência - ANFIS.



Fonte: HUAMANÍ (2003).

4.3.3.3 Treinamento do sistema ANFIS

O treinamento do sistema ANFIS pode ser um treinamento: híbrido ou utilizando o algoritmo backpropagation da rede neural MLP.

Neste trabalho o treinamento da rede foi feito pelo método híbrido, que difere do treinamento das RNA's, do tipo MLP usando o algoritmo *back-propagation*. Já que no treinamento híbrido o ajuste dos parâmetros da rede ocorre em dois sentidos ou duas etapas:

na etapa *forward* e na etapa *backward* (JANG *et al.*, 1997). Em ambos os sentidos, assim como para cada sentido do fluxo de sinal é usado um algoritmo diferente para o ajuste dos parâmetros (TAKAHASHI, 2006).

Segundo (JANG *et al.*, 1997), na primeira etapa (*forward*) os parâmetros dos antecedentes são fixos e os parâmetros dos consequentes são determinados via o algoritmo de mínimos quadrados. Na segunda etapa (*backward*), os sinais de erro são retropropagados e os parâmetros dos antecedentes são atualizados via o método do gradiente descendente (retropropagação). Maiores detalhes podem ser encontrados em (JANG *et al.* 1997).

A aprendizagem da estrutura ANFIS envolve a seleção de variáveis, a determinação do número de funções de pertinências por variável e a obtenção de um conjunto de regras fuzzy. As variáveis de entrada selecionadas serão apresentadas no Capítulo 5, onde foram selecionadas como entradas aquelas variáveis que possuem grande influência na saída a ser inferida, por meio da análise de sensibilidade.

Uma das limitações dos sistemas *neuro-fuzzy* é que eles trabalham com um número reduzido de entradas. Este fato ocorre em função da chamada explosão combinatória das regras devido ao particionamento em forma de grade (PAGLIOSA, 2003).

Segundo (LUO e SHAO, 2006), quando a dimensão do espaço de entrada aumenta, a base de regras *fuzzy* aumenta exponencialmente levando a um aumento no custo computacional, na memória do sensor e na quantidade de dados necessária para o treinamento ou calibração do analisador virtual.

Suponha uma rede neuro-fuzzy com nove variáveis de entrada e cada uma delas tenha em seu universo de discurso três conjuntos *fuzzy*. Com este sistema de particionamento pode-se chegar a um total de 19683 (3^9) regras *fuzzy*.

A fim de minimizar estes efeitos e conseguir reduzir o número de regras nos conjuntos de treinamento do analisador virtual de composição, foi utilizada uma técnica de agrupamento de dados, denominada agrupamento subtrativo (do Inglês “*subtractive clustering*”).

O objetivo de utilizar esta técnica é simplesmente obter um menor conjunto de regras fuzzy e, ela foi inicialmente proposta por CHIU (1996), é utilizada para particionar o espaço de entrada e saída de um conjunto de dados.

4.3.3.4 Agrupamento dos dados

A técnica de agrupamento de dados denominada clusterização é uma classificação não-supervisionada de dados, formando agrupamentos ou *clusters* (CHIU, 1996).

As técnicas de clusterização (do inglês “*clustering*”) frequentemente utilizadas para criação de agrupamentos, aplicadas na modelagem através de sistemas nebulosos ou *fuzzy* são: *K-means* ou *C-means*; *Fuzzy C-means clustering*; *Mountain clustering*; e a *Subtractive Clustering*. Cada uma destas técnicas e seu respectivos algoritmos é detalhada no trabalho de JANG *et al.* (1997).

O agrupamento de dados (do inglês “*data clustering*”) é uma técnica largamente empregada para organização, segregação e compressão de dados, também utilizada na construção de modelos (JANG *et al.*, 1997). Com a clusterização ocorre o particionamento de um conjunto de dados em vários grupos, de forma que a similaridade interna em um grupo seja maior que entre grupos (*clusters*), cuja similaridade é medida normalmente com base nos cálculos da distância entre *clusters*.

Quando não se conhece “a priori” quantos agrupamentos deve haver para um determinado conjunto de dados, o agrupamento subtrativo é um algoritmo rápido e robusto para saber este número. Ainda, esta técnica permite a localização do centro do agrupamento, sendo as funções de pertinências e as regras obtidas a partir destes centros de agrupamento e, portanto, com estas informações é possível gerar um sistema de inferência fuzzy do tipo Takagi-Sugeno que modela o comportamento dos dados.

Neste trabalho foi aplicada a técnica de agrupamento subtrativo (do Inglês “*subtractive clustering*”) para o agrupamento das variáveis na criação dos sistemas híbridos *neuro-fuzzy*, que é obtida pelo comando *genfis2* do MATLAB. Essa função é aplicada sobre o conjunto de entradas e saídas, para determinação dos centros dos agrupamentos, assim gerando o número de regras e de funções de pertinência das entradas do sistema *neuro-fuzzy*. Quando não se conhece “a priori” quantos agrupamentos deve haver para um determinado conjunto de dados, o agrupamento subtrativo é um algoritmo rápido e robusto para saber este número.

Esta técnica é utilizada para geração do sistema de inferência (FIS) do modelo de sistema adaptativo de inferência neuro-fuzzy (ANFIS), do tipo Takagi-Sugeno, que é conhecido como modelo *neuro-fuzzy* do tipo 3.

O procedimento de agrupamento subtrativo desenvolvido por CHIU (1996) considera um conjunto de N amostras (vetores de observações) de dados, x_1, x_2, \dots, x_N ; definidas em um espaço de dimensão $m + n$ (em um problema de identificação de sistema, m é o número de entradas e n é o número de saídas) e que são normalizados em cada uma das dimensões, de modo que os dados estejam limitados por um hipercubo unitário.

Cada uma das observações define um eventual candidato a centro de um agrupamento e uma medida potencial associada ao ponto x_i , com $i=1, 2, \dots, N$. O potencial é uma função que

define uma constante denominada de raio de vizinhança de cada centro de agrupamento, $r_a > 0$, e é descrito por:

$$p_i = \sum_{j=1}^N \exp \left\{ -\frac{4}{r_a^2} \cdot \|x_i - x_j\|^2 \right\} \quad (40)$$

Onde: $\| \cdot \|$ é a norma euclidiana.

CHIU (1996) também destaca que os pontos x_j localizados fora do raio de ação de x_i irão ter influência pequena no potencial do ponto p_i . Caso contrário, quanto mais próximo estiverem os pontos na vizinhança de x_i maior será a influência no potencial. Assim, o potencial associado a cada ponto vai depender de sua distância a todos os outros, o que faz com que pontos com uma vizinhança densa irão originar um potencial elevado para o seu centro.

Após o cálculo do potencial de cada um dos pontos, aquele com maior potencial é selecionado como o primeiro centro de agrupamento (x_1^*), e então um novo potencial dado por x_1^* , define um parâmetro $r_b > 0$, que é uma constante que define o raio de vizinhança de cada centro ou a distância onde os pontos serão afetados pela redução de potencial. Agora o potencial de cada ponto x_i revisado é:

$$p_i \leftarrow p_i - p_1^* \cdot \exp \left\{ -\frac{4}{r_b^2} \cdot \|x_i - x_1^*\|^2 \right\} \quad (41)$$

Deste modo, é feita uma subtração do potencial de cada ponto em função da distância do centro do primeiro agrupamento. Os pontos próximos ao centro do primeiro agrupamento têm potencial muito reduzido e, portanto, pouca possibilidade de serem escolhidos como o próximo centro de agrupamento. Em geral, o valor atribuído a r_b deve ser um pouco superior a r_a , para se obter grupos espaçados. De acordo com CHIU (1996) define-se o valor do raio de vizinhança r_b , como sendo $r_b = 1,25 r_a$.

Efetuada a redução de potencial de cada ponto, pela última expressão, aquele que apresentar o maior potencial é escolhido para ser o local do segundo centro de agrupamento e, assim sucessivamente (k -ésimo), efetuando-se a redução de potencial de maneira análogo para todos os pontos restantes. Estendendo a Equação (41) para o K -ésimo centro de agrupamento o potencial de cada ponto é reduzido por:

$$p_i \leftarrow p_i - p_k^* \cdot \exp \left\{ -\frac{4}{r_b^2} \cdot \|x_i - x_k^*\|^2 \right\} \quad (42)$$

Onde: x_i^* , $i = 1, 2, \dots, N$, é a localização do centro do k -ésimo agrupamento, p_k^* é o seu valor potencial e r_b é uma constante positiva que define o raio de vizinhança de cada centro.

O processo de seleção de novos centros e a redução de potencial se repete de modo iterativo até que todos os pontos estejam abaixo de uma fração de potencial do primeiro centro de agrupamento, o critério de parada do processo é: $p_k^* < 1,5 p_1^*$.

Esta fração de potencial é um parâmetro ε_a que especifica o limiar entre a aceitação ou rejeição do potencial ε_r de um ponto como centro de agrupamento, isto é, se a relação entre o potencial do ponto e o do primeiro centro é superior a ε , então ele é aceito como candidato a centro; em caso contrário, especifica o limiar oposto segundo o qual o ponto é rejeitado como candidato ao centro, pondo fim ao processo de procura. Recomenda-se o parâmetro $\varepsilon_a = 0,5$ um limiar para o qual o ponto é aceito e $\varepsilon_r = 0,15$ o limiar no qual o ponto é rejeitado.

Considerando estes fatores se consegue uma boa estimativa de treinamento com a redução dos números de regras. Pode-se também utilizar o método de tentativa e erro para se encontrar o melhor raio na geração dos sistemas híbridos *neuro-fuzzy*.

É importante notar que o parâmetro r_a , raio de vizinhança do agrupamento, está diretamente relacionado com o número de regras e/ou agrupamentos encontrados. Assim, um raio pequeno gera um número elevado de regras e/ou agrupamentos, o que, no caso de ser excessivo, pode redundar em problemas de sobre ajustamento, não dando boas generalizações. Por outro lado, um raio grande produz um número menor de regras e/ou agrupamentos, o que poderá gerar modelos com capacidades de aproximação reduzidas, no caso do número de regras se mostrar pequena.

Assim, em aplicações práticas é necessário o teste de diversos valores para r_a e selecionar o mais adequado em função dos resultados obtidos. Quanto ao parâmetro r_b , este tem uma relação constante com r_a , e por definição, r_b afeta igualmente o número de centros obtidos, sendo necessário também experimentar valores diferentes em algumas ocasiões.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

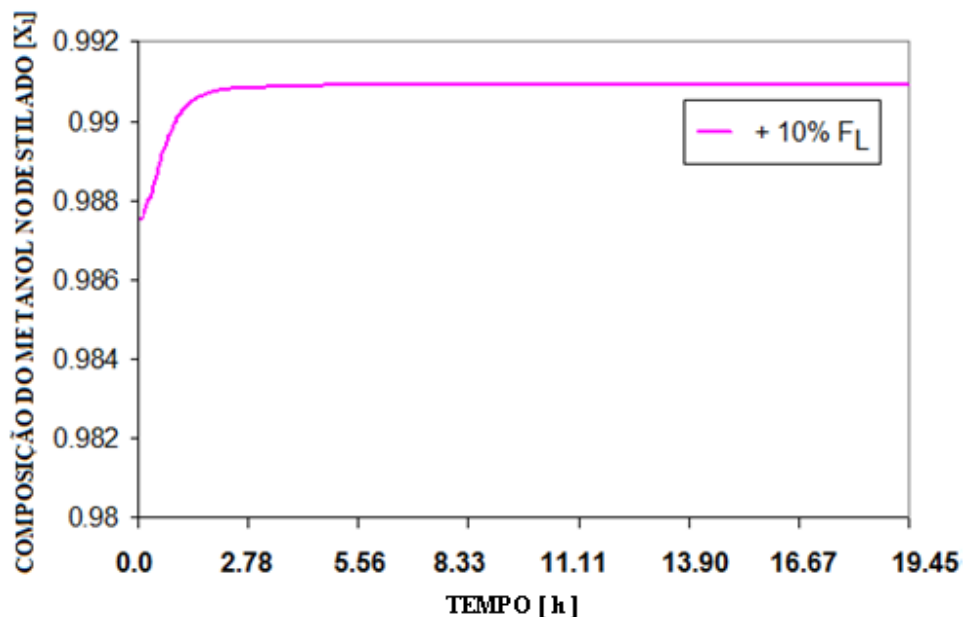
5.1 Seleção das entradas do analisador virtual

Nesta seção são mostrados todos os resultados referentes à seleção das variáveis que irão compor as entradas do analisador virtual de composição, proposto inicialmente neste trabalho.

Sabendo que a composição dos produtos no processo de destilação é sensível à variação de fluxo de líquido (F_L) e vapor (F_V) na alimentação, tendo em vista que essas diminuem ou aumentam a eficiência de separação, os efeitos destas variáveis na composição foram avaliados.

Neste trabalho não foi utilizado à vazão de vapor de alimentação (F_V), devido ao fato da alimentação da coluna ser feita só por líquido em seu ponto de bolha, assim como também foi descartada a temperatura de alimentação (T_f) que para o estudo apresentava pouca variação. A Figura 5.1 mostra que uma perturbação efetuada F_L modifica o valor da composição.

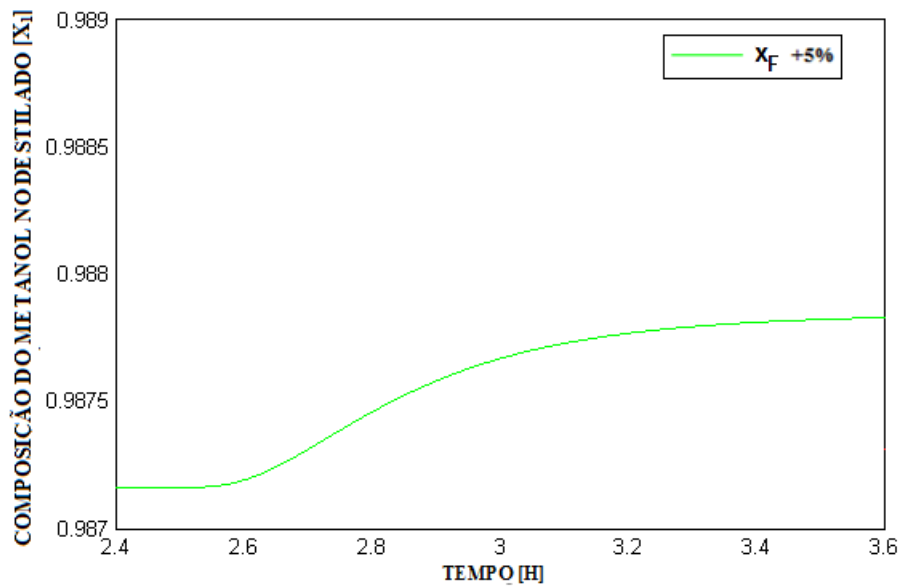
Figura 5.1 Perturbação degrau de +10% no Fluxo de líquido de Alimentação.



Fonte: Autor (2011).

Outra variável que tem relação direta na composição de destilado é a composição de alimentação (x_f), que também será utilizada para compor a entrada. Já a composição de vapor na alimentação (y_f) foi descartada, por também apresentar pouca variabilidade. O gráfico da Figura 5.2 mostra o comportamento da variável composição de metanol no topo da coluna, quando submetida a um degrau de +5% na composição da alimentação no tempo $t = 0$ hora.

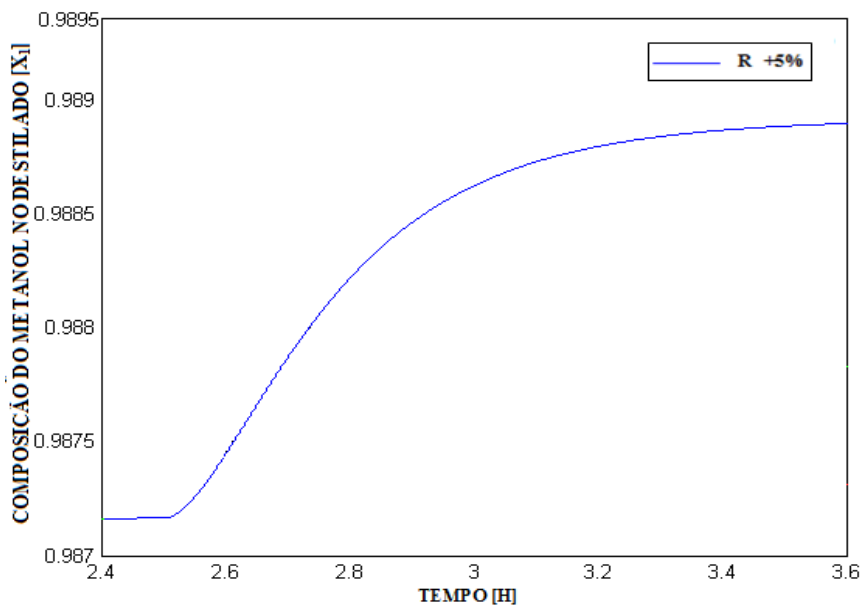
Figura 5.2 Perturbação degrau de +5% na composição de líquido de Alimentação.



Fonte: Autor (2011).

Outra variável manipulada de grande influência na composição de topo é a razão de refluxo (R), haja vista que ela possui efeito direto na pureza da composição do produto de destilado quando sofre alterações. Por esse motivo ela foi avaliada e utilizada neste trabalho como entrada do analisador e em outros, como o de FORTUNA *et al.* (2005) e KANO *et al.* (2003). A Figura 5.3 mostra a dinâmica de variação da composição do topo, quando (R) é submetida a uma perturbação degrau de + 5% no tempo $t = 0$ hora.

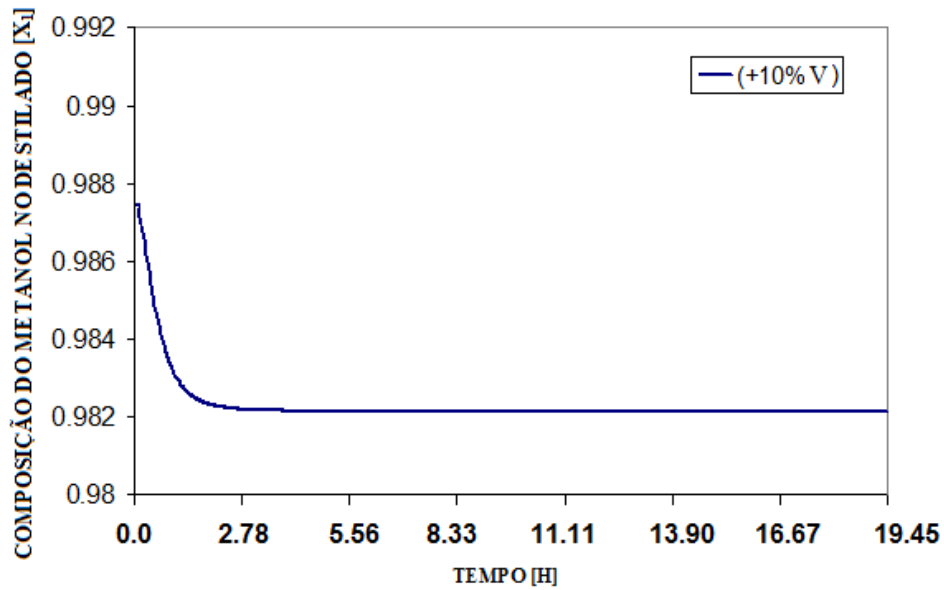
Figura 5.3 Perturbação degrau de +5% na Razão de refluxo.



Fonte: Autor (2011).

Existe outra variável que influencia na composição de topo, entretanto ela é não diretamente manipulada, que é a quantidade de calor fornecida ao refeedor Q_R . No entanto, Q_R é controlada pelo fluxo de vapor que entra no refeedor (V_3), que serve para introduzir o calor necessário para a formação do vapor no sistema. Neste caso consideramos $Q_R = V_3$ durante o processo. A Figura 5.4 mostra que quando V_3 é submetido a uma variação degrau de (+ 10%), no tempo igual $t = 0$, a composição de topo da coluna se modifica.

Figura 5.4 Perturbação degrau de -10% na composição em Q_R .



Fonte: Autor (2011).

Considere que após as análises feitas até agora, tem-se as seguintes entradas e saídas selecionadas para compor o analisador virtual, conforme a Tabela 5.1.

Tabela 5.1 Variáveis manipuladas (MV's), distúrbios e saída selecionados.

(MV's + Distúrbios)	ENTRADAS
F_L	Fluxo de líquido na Alimentação
x_f	Composição de líquido na Alimentação
R	Razão de Refluxo da coluna
V_3	Vazão de Vapor
Variáveis de Difícil Medição	SAÍDA
$X_{1,1}$	Composição de metanol no topo

Fonte: Autor (2011).

Após a seleção das entradas do AV, ainda torna-se necessário incluir na entrada do modelo de inferência as variáveis não-diretamente manipuladas ou outros distúrbios não-medidos, como por exemplo, as temperaturas dos estágios da coluna, conforme discutido no item 4.2 deste trabalho.

5.1.1 Variáveis não-diretamente manipuladas selecionadas

Em contraste ao uso redundante de todas as temperaturas do processo, aqui serão selecionadas aquelas que apresentam alta correlação com a composição final de topo da coluna de destilação em estudo.

Para isso, vale ressaltar a importância do cálculo do tempo de amostragem (T), feito em três diferentes tipos de abordagens (métodos), que se fez necessário devido à necessidade de escolher um melhor tipo de sinal de excitação (ruído). Este sinal deve ser semelhante ao ruído branco empregado em técnicas de identificação de sistemas não-lineares como é o caso da rede *neuro-fuzzy* empregada, assim tem-se uma frequência bem definida em torno do tempo de amostragem.

O primeiro método de estimativa considera T como sendo um décimo da constante de tempo da menor () do sistema. De forma que () é associada com a composição do componente 1 da coluna (metanol) na fase líquida no estágio de topo da coluna ($\mathbf{x}_{1,1}$), quando a planta é excitada por um degrau nas variáveis manipuladas da Tabela 5.1.

No segundo método T é calculado aplicando um degrau nas variáveis manipuladas R , F_L , x_F e Q_R . Assim, considera-se que o tempo de amostragem seja igual a um décimo do tempo de acomodação associado com a composição do componente 1 da coluna (metanol) na fase líquida no estágio de topo ($\mathbf{x}_{1,1}$).

A última abordagem é descrita por AGUIRRE (2004) como uma técnica heurística, que tem como proposta que o tempo de amostragem seja calculado através da análise das autocovariâncias linear e não-linear da saída $\mathbf{X}_{1,1}$. Cada um dos três métodos apresentados e seus resultados serão mostrados a seguir.

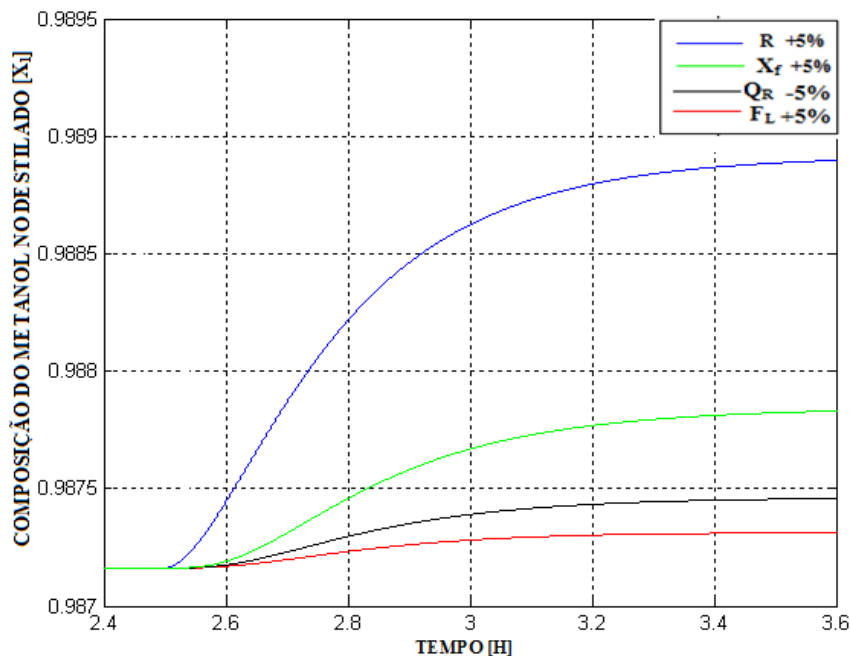
5.1.1.1 Cálculo de t pela constante de tempo () do sistema

Uma boa regra prática é que o tempo de amostragem deve ser de aproximadamente um décimo da constante de tempo efetiva do processo (), SMITH e CORRIPIO (2008).

Observando o fato que a constante de tempo de um sistema é igual a 63,2 % da resposta do processo, quando este é submetido a uma perturbação degrau na entrada.

Foi realizada uma perturbação degrau de (+) 5% ou (-) 5 % nas seguintes variáveis manipuladas: fluxo de líquido (FL) na alimentação, calor do refeedor (QR), vazão de refluxo (R) e a composição de alimentação (X_f), com o objetivo de se obter um aumento nas temperaturas nos pratos, ou seja, um aumento de composição do metanol no topo da coluna. As variáveis manipuladas foram excitadas individualmente e plotadas juntas no gráfico da Figura 5.5.

Figura 5.5 Curva Comparativa da composição após degrau nas MV's do processo.

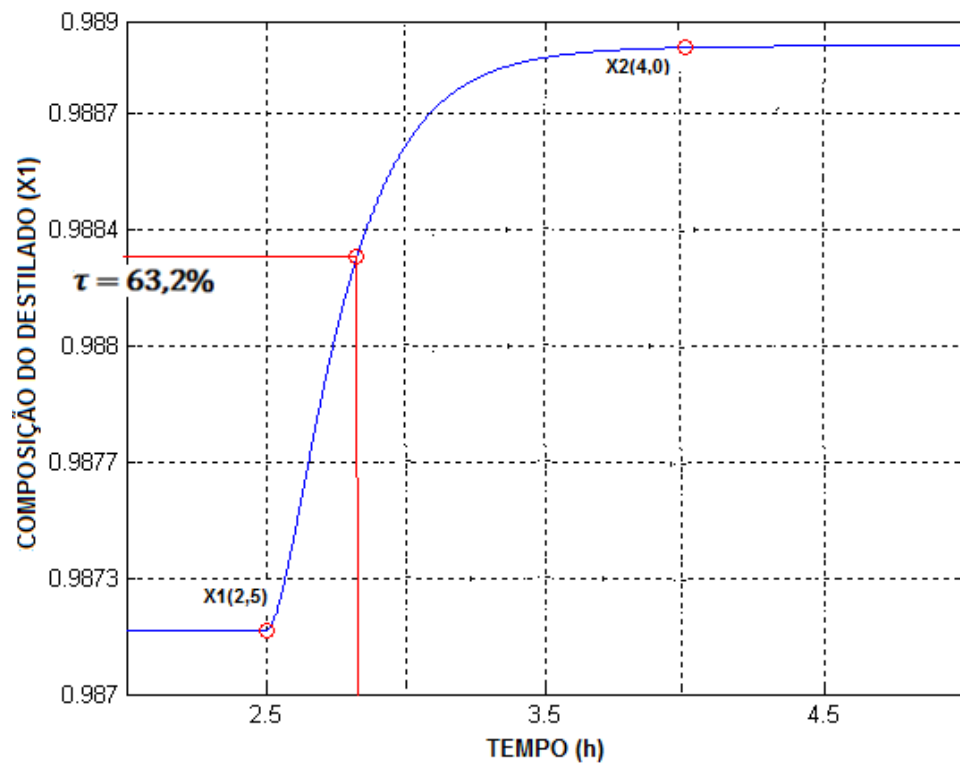


Fonte: Autor (2011).

A menor constante de tempo do sistema é dada pela curva que apresenta uma resposta mais rápida no gráfico da Figura 5.5, ou seja, a variável mais sensível a perturbação efetuada. A curva selecionada foi a da resposta a perturbação degrau de + 5 % aplicada na vazão de refluxo **R** coluna de destilação.

A variação da resposta fornecida pela curva selecionada é mostrada em detalhe na Figura 5.6, assim como os valores determinados para o cálculo do tempo de amostragem (do inglês “*sampling time*”).

Figura 5.6 Menor constante de tempo do sistema.



Fonte: Autor (2011).

Sabendo que X_1 é o valor da composição no instante de tempo $t_1 = 2,5$ h, que corresponde ao valor do estado estacionário 1, antes da perturbação. E que X_2 é o valor da composição no instante de tempo $t_2 = 4,0$ h, que corresponde ao valor do estado estacionário 2, ou seja, a estabilização do sistema após o degrau. Assim, calculamos T:

$$\Delta X = X_1(t_1) - X_1(t_2) \quad (43)$$

Onde: ΔX é a variação da composição ao degrau

$$X_1(2,5) = 0,9872$$

$$X_2(4,0) = 0,9889$$

$$\text{Então: } \Delta X = 0,0017$$

Sabemos que a constante de tempo do sistema é dada por:

63,2 % do valor da resposta composição, que é no instante $t_3 = X_1(2,5) + 63,21 \% \text{ de } \Delta X$

$$(\Delta X) = 0.9872 + 0.001074 = 0.9883$$

A composição 0.9883 está no instante $t = 2,85$, logo:

$$= t_3 - t_1 = 2,85 - 2,5 = 0,35 \text{ h}$$

$$= 1260 \text{ s}$$

Tomando um décimo deste valor obtemos o período de amostragem **T**:

$$\mathbf{T} = 0,1 \times$$

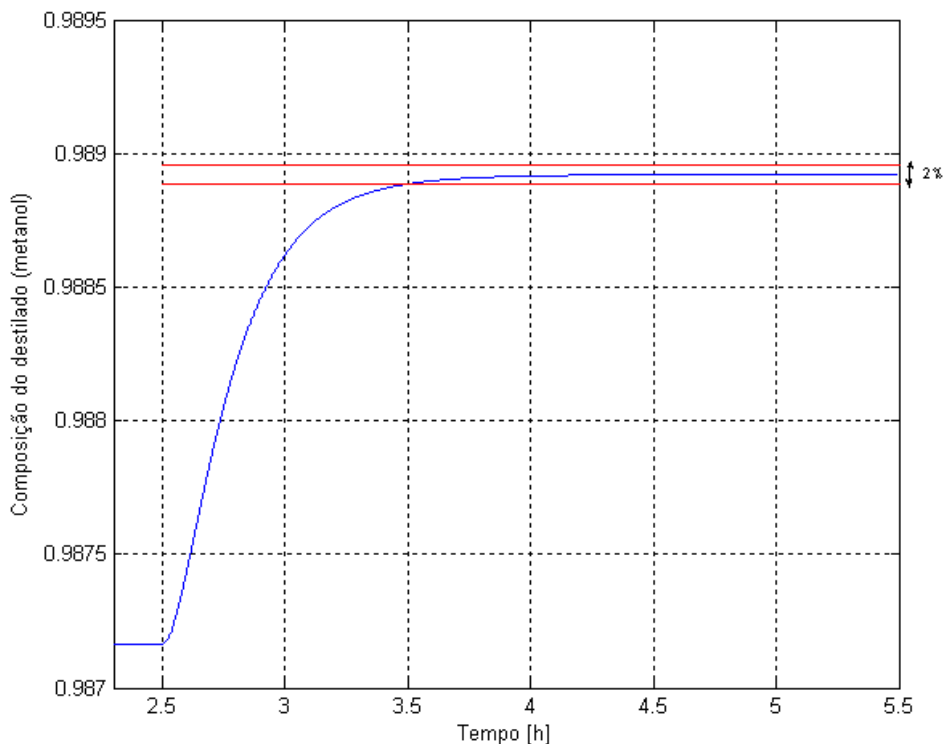
$$\mathbf{T} = 126 \text{ s}$$

5.1.1.2 Cálculo de t pelo menor tempo de acomodação

Segundo ZANATA (2005), considerar o período de amostragem como um décimo (10 %) do valor do menor tempo de acomodação é uma regra bastante prática e de fácil obtenção.

O menor tempo de acomodação é igual a 2 % da resposta final a uma perturbação degrau do sistema. Assim, o menor tempo de acomodação é obtido quando ocorre uma excitação degrau na variável com maior tempo de resposta. Para a variável em estudo, composição do topo da coluna ($x_{1,1}$), esta variável foi a razão de refluxo **R**. A Figura 5.7 mostra o detalhe da obtenção do menor tempo de acomodação do sistema.

Figura 5.7 Detalhe Variação da composição do componente metanol na fase líquida no topo (condensador).



Fonte: Autor (2011).

O instante $t_2 = 3,5$ h é o instante no qual o sinal entra na faixa de 2 % de variação, como o degrau foi aplicado em $t_1 = 2,5$ h, obtemos o valor do tempo de acomodação Δt_c , Equação 44, pela diferença entre estes instantes.

$$\Delta t_c = t_2 - t_1 = 1 \text{ h} \quad (44)$$

Tomando 10 % deste valor obtemos, por esta técnica, o tempo de amostragem:

$$\mathbf{T} = 0,1 \times 3600 \text{ s} = 360 \text{ s}$$

5.1.1.3 Cálculo de t pelas análises de autocovariância

AGUIRRE (2004) apresenta um método simples que fornece uma boa indicação do tempo de amostragem na identificação de sistemas. Segundo ele é uma técnica heurística que consiste em encontrar uma taxa (Ψ) na qual o sinal $y^*(t)$, saída ideal sem ruído, deva ser decimado.

Considerando que quanto mais superamostrado estiver o sinal $y^*(t)$, maior será a redundância entre duas observações consecutivas. Ou seja, escolher um tempo de amostragem menor do que o necessário (superamostrado) poderá tornar a estimativa dos parâmetros mal condicionada, a condição de $\mathbf{T} \rightarrow 0$ pode ser provada quando as colunas da matriz de regressores (Ψ) se tornam linearmente independentes (redundantes), maior abordagem em AGUIRRE (2004).

Aqui queremos encontrar uma saída $y(t)$, tal que $y(t) = y^*(\epsilon t)$, então verifica-se o grau de redundância (correlação) entre as observações adjacentes (mínimo). Para isso, considera-se que o sinal está superamostrado a uma taxa igual a $0.0001\text{h} = 0,36$ s, AGUIRRE (2004), assim faz-se a quantificação dos efeitos causados pela superamostragem do sinal $y^*(t)$ pelas funções de autocovariâncias linear e não linear, abaixo:

$$\text{Linear: } \mathbf{Cov}_{x,y}(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [(x(k) - \bar{x}) \cdot (y(k - \xi) - \bar{y})] \quad (45)$$

$$\text{NãoLinear: } \mathbf{Cov}^*_{x,y}(\xi) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N [(x^2(k) - \bar{x}^2) \cdot (y^2(k - \xi) - \bar{y}^2)] \quad (46)$$

Onde: N é número de elementos (vetores de mesmo tamanho \mathbf{x}, \mathbf{y});

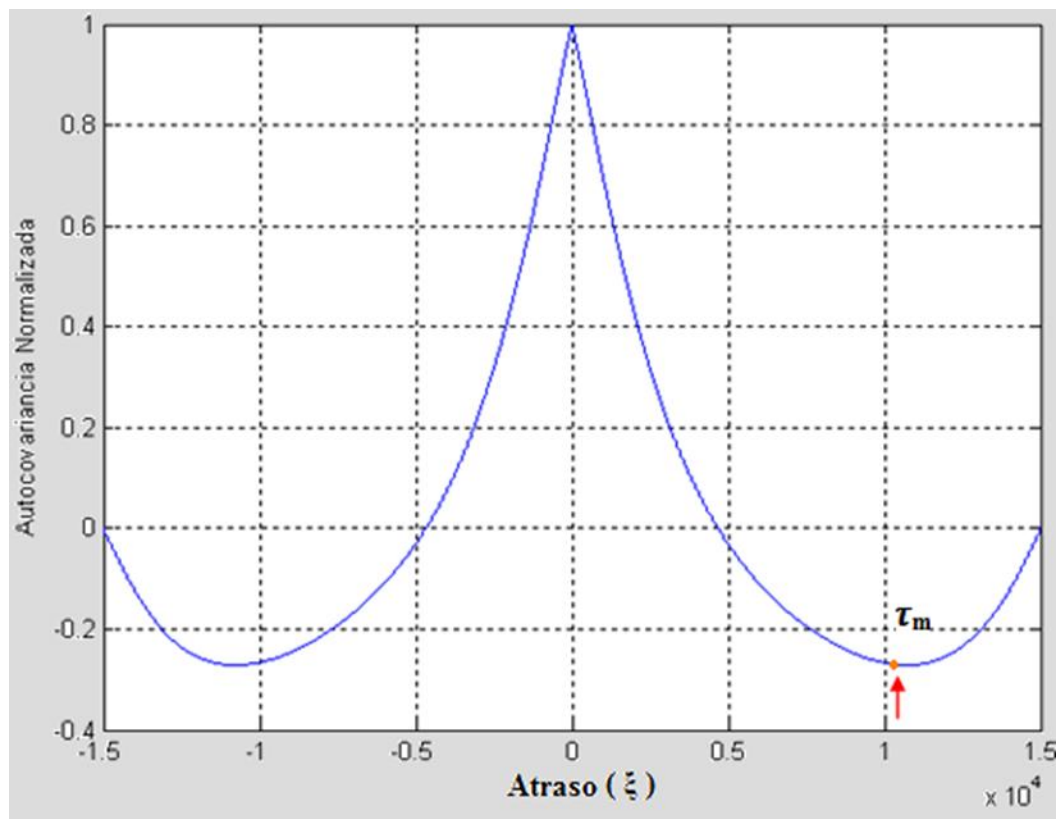
\mathbf{x} e \mathbf{y} são respectivamente os vetores de entrada e saída;

\bar{x} e \bar{y} são as médias de x e y ;

ξ é a defasagem temporal (número de atrasos analisados para o sinal).

O estudo das autocovariâncias na composição de destilado foi feito utilizando a função de correlação linear (*Crosscorrelation_Function XFC*) do software MATLAB[®], entre os instantes de tempo 2.5h e 4.0h, que é o período que houve variação de comportamento do sistema. A Figura 5.8 mostra a autocovariância normalizada da saída que é a composição com atraso.

Figura 5.8 Auto-Covariância das Composições $x_{1,1}$ com Atraso.



Fonte: Autor (2011).

O objetivo de utilizar as Equações (45) e (46) é detectar algumas correlações não-lineares que por ventura estejam nos dados. Agora devemos encontrar o primeiro mínimo da função de autocovariância, medidos em números de atrasos, logo, para o caso em estudo, conforme Figura 5.8, o primeiro mínimo ocorre para o atraso $1,0749 \times 10^4$, então:

$$m = 10749$$

Sabendo que as funções de autocovariância de $\mathbf{x}_{1,1} = \mathbf{x}_{1,1}^*(\epsilon t)$ devem satisfazer a condição de:

$$10.\epsilon \leq m \leq 20.\epsilon$$

Por manipulação algébrica obtemos a taxa de decimação: $538 \leq \epsilon \leq 1075$. Agora, obtendo as médias de seus limites laterais a taxa de decimação do sinal encontrada é: $\epsilon = 807$.

Inicialmente o sinal $y(t)$ estava “*superamostrado*” com um chute de tempo de amostragem $T^* = 0,0001$ h, agora calculamos novo valor de T, sabendo que:

$$\mathbf{T} = T.\epsilon = \mathbf{0,0807\ h = 290,52\ s}$$

5.1.1.4 Escolha do sinal de excitação

Após os devidos cálculos o valor do tempo de amostragem escolhido é o de $T = 126$ s, obtido através da técnica que considera T com um décimo da menor constante de tempo do sistema, pois das três abordagens apresentadas foi a que resultou em um menor valor T.

Em sistemas reais há um certo grau de incerteza nos valores dos parâmetros, de medições efetuadas, de entradas esperadas e de distúrbios/perturbações. Além disso, os distúrbios contêm componentes aleatórios (ruídos), que influenciam no comportamento do sistema. Na análise dinâmica é comum desprezar tais incertezas e ruídos, procedendo como se todas as quantidades tivessem valores bem definidos, conhecidos precisamente (GARCIA, 2005).

Em contra partida, também é desejado que os dados do analisador virtual representem uma amplitude, em que se espera que o analisador virtual venha operar nas situações reais. Esses dados também devem ser representados em quantidades suficientes, para que a rede *neuro-fuzzy* possa gerar um padrão de reconhecimento futuro.

Em identificação de sistemas não-lineares, como é caso da rede híbrida *neuro-fuzzy*, geralmente utiliza-se como sinal de excitação o sinal randômico ou ruído branco. Um ruído branco é um sinal que possui a mesma magnitude para todas as frequências, normalmente ele é originado de ruídos de instrumentos.

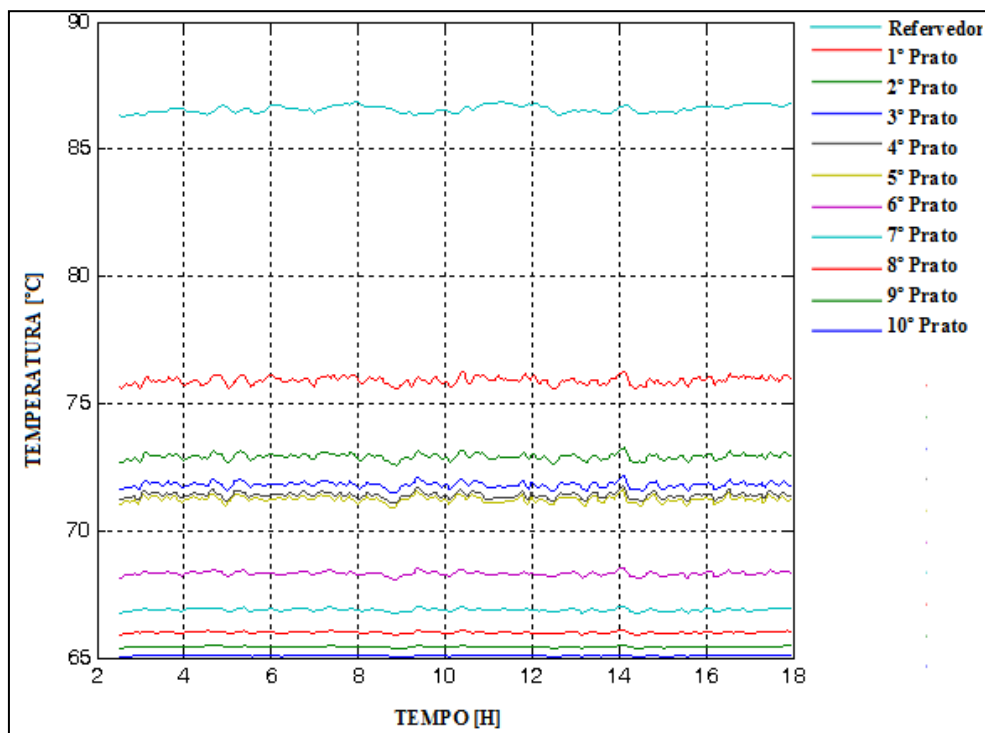
Para que esse efeito seja introduzido na simulação dinâmica, todas as variáveis manipuladas selecionadas foram perturbadas aleatoriamente numa faixa aceitável diante de um sistema de controle, degrau entre (\pm) 2 a 7%, cujo sinal aleatório é mantido constante de 3

a 5 tempos de amostragem. Além disso, o sistema real, a coluna de destilação em estudo, não suportava perturbações maiores do que a faixa de operação citada.

5.1.1.5 Aquisição dos dados

Satisfazendo as condições anteriores, faz-se necessário introduzir tal ruído nas variáveis manipuladas perturbando o regime de operação da coluna, as perturbações introduzidas foram de (+) ou (-) 5% nas MV, e na frequência de 3 em 3 tempos de amostragem, ou seja, 378s ou 0.105h para um regime de operação da coluna de 18 h, conforme a Figura 5.9.

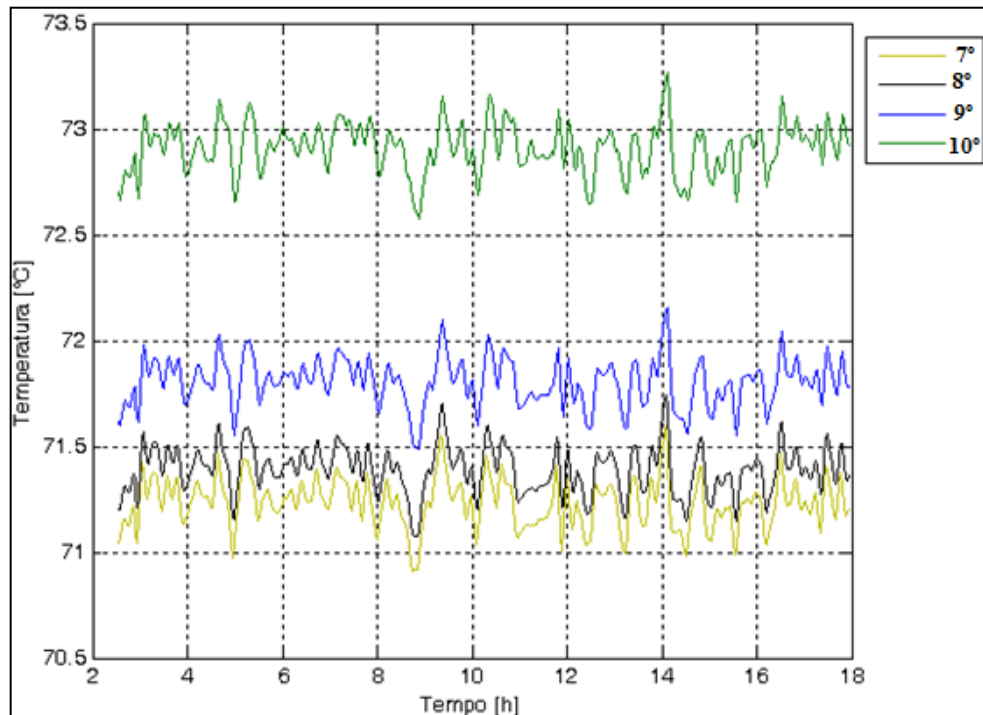
Figura 5.9 Perfil de temperaturas da coluna durante a excitação aleatória.



Fonte: Autor (2011).

Pela Figura 5.9 percebe-se que as temperaturas da seção de retificação, acima da alimentação, apresentam comportamento bem variado. Já o comportamento das temperaturas nos estágios da seção de esgotamento, abaixo do prato de alimentação da coluna, possuem valores muito próximos e apresentando assim pouca variação. A Figura 5.10 mostra em detalhe as temperaturas dos estágios inferiores da coluna (lembrando que a coluna é numerada de forma descendente), quando submetidas às mesmas condições da Figura 5.9.

Figura 5.10 Temperaturas da Seção de Esgotamento da coluna.

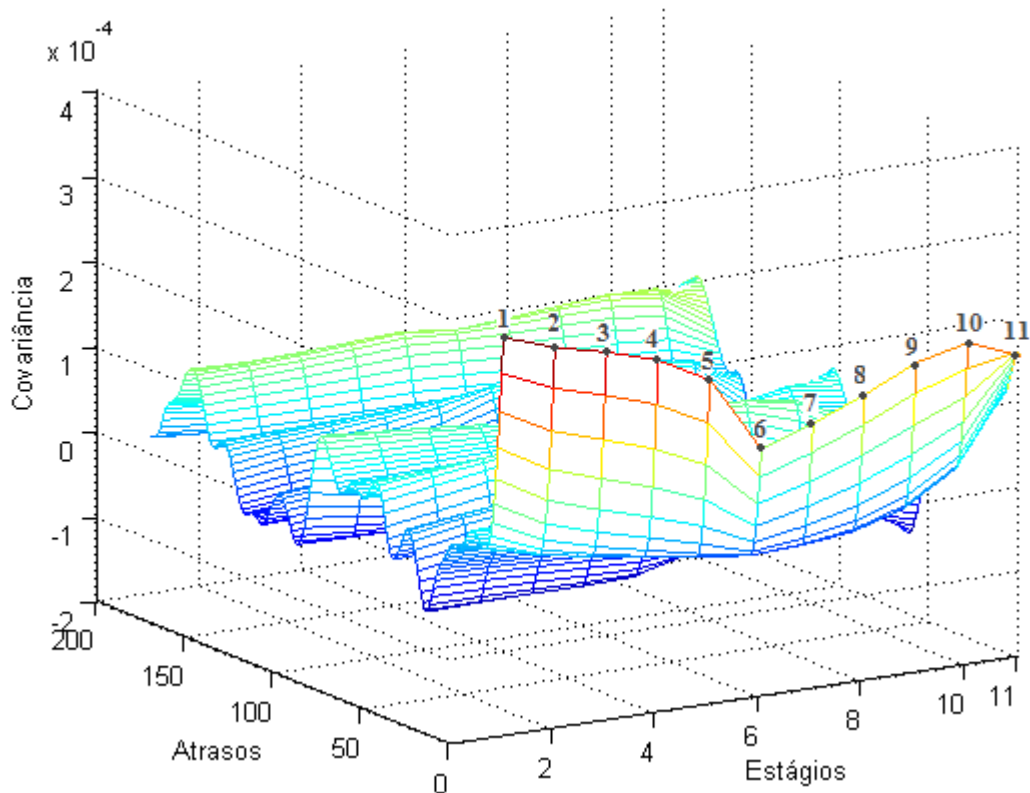


Fonte: Autor (2011).

No processo em estudo as variáveis temperaturas possuem num total 12 valores, temperaturas das 10 bandejas, mais a do refeedor e do condensador. Na análise de seleção de variáveis a temperatura do condensador apresentou pouca variação, desta forma, ela não foi considerada no estudo de sensibilidade.

A utilização dos valores de todas estas variáveis, as 11 temperaturas para entrada do AV, deixaria o conjunto de dados demasiadamente grande, assim será selecionado apenas as temperaturas de maior influência na composição de topo. Nesse estudo optou-se em utilizar a covariância cruzada, utilizando a Equação (13), para escolher quais temperaturas serviriam como entrada do analisador virtual. O gráfico da Figura 5.11, mostrar que as temperaturas dos primeiros estágios apresentam maior covariância e menor tempo de atraso, apresentando assim uma maior correlação da temperatura com a composição de destilado.

Figura 5.11 Covariância Cruzada dos vetores de entrada e saída, respectivamente temperatura nos estágios T_i e a composição $x_{1,1}$.



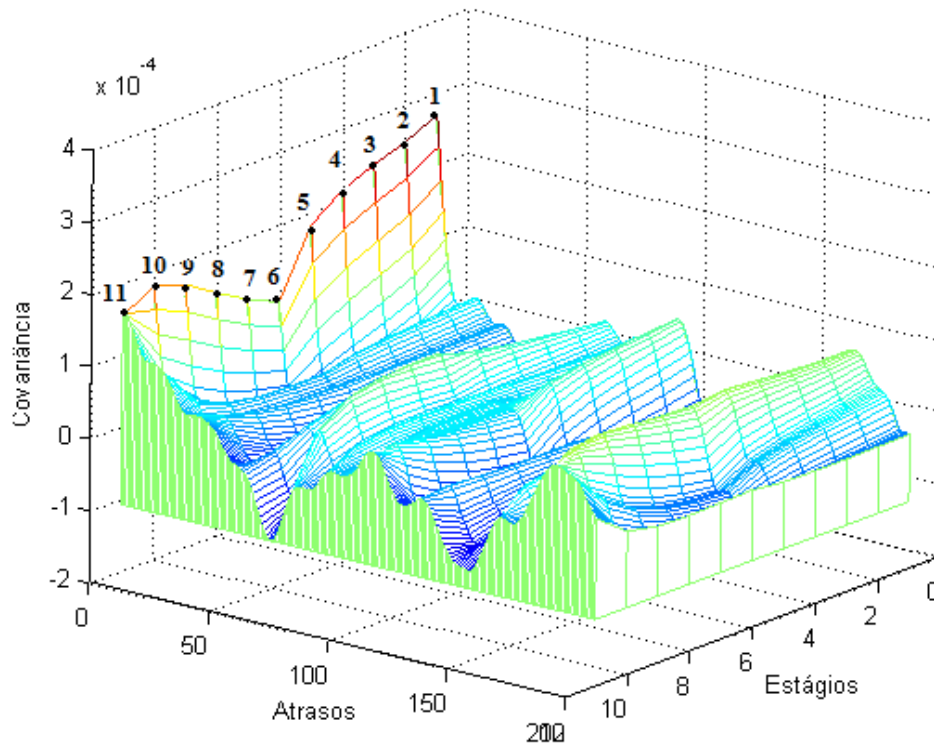
Fonte: Autor (2011).

Vale observar que se ao invés das covariâncias da temperatura fossem observadas as covariâncias das composições, os menores valores das covariâncias teriam que ser levados em conta, uma vez que o comportamento da composição é inversamente proporcional ao da temperatura.

Além disso, o gráfico da Figura 5.11 apresenta o negativo da covariância, pois, a covariância entre as temperaturas e a composição é negativa, porque são grandezas inversamente proporcionais, ou seja, quando as temperaturas aumentam a composição diminui. Então as covariâncias são negativas, para que os maiores valores sejam os que nos interessam. Vale ressaltar também que os dados foram normalizados, centrados na média, para fazer a análise de covariância.

O objetivo é selecionar o perfil ideal de temperatura, aqui recorreremos às cinco temperaturas dos cinco primeiros estágios da coluna T_1 , T_2 , T_3 , T_4 e T_5 , que podem ser vistos com mais detalhe na Figura 5.12. Em muitos trabalhos, como os de KANO *et al.* (2000) e ZAMBROGNA (2005), o perfil ideal de temperaturas é composto pelos cinco valores de temperatura de maior influência na composição.

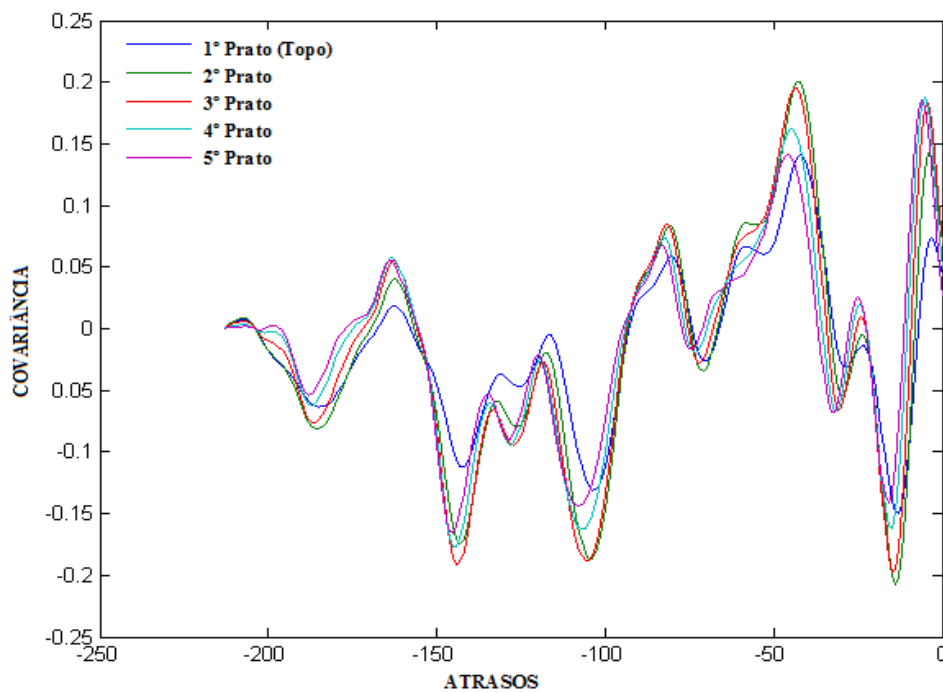
Figura 5.12 Covariância Cruzada dos vetores de entrada e saída, respectivamente temperatura nos estágios T_1 e a composição $x_{1,1}$.



Fonte: Autor (2011).

Uma vez selecionados os pratos mais sensíveis, o gráfico da Figura 5.13 mostra a covariância cruzada resultante entre as temperaturas nos cinco estágios selecionados, que possuem maior correlação, atrasadas em até 250 períodos de amostragem.

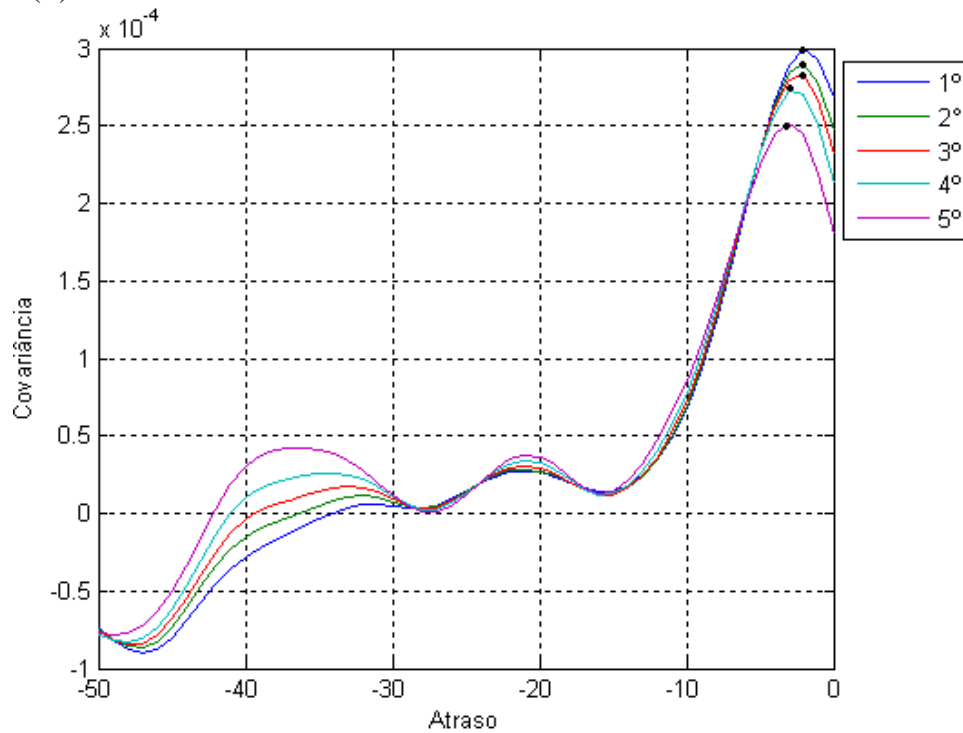
Figura 5.13 Covariância Cruzadas das temperaturas dos estágios e $X_{1,1}$ atrasadas em 250 (T).



Fonte: Autor (2011).

Já o gráfico da Figura 5.14 mostra os instantes atrasados em 50 tempos de amostragem, percebe-se que com estes atrasos é possível verificar a maior correlação entre as temperaturas e a composição de destilado.

Figura 5.14 Covariância Cruzadas das temperaturas dos estágios e $X_{1,1}$ atrasadas em 50 (T).



Fonte: Autor (2011).

No gráfico anterior, ainda perceber-se que a melhor relação entre as temperaturas 1, 2 e 3 em relação a composição do destilado, dá-se com um atraso de -2 tempos de amostragem, enquanto que para as temperaturas 4 e 5 dá-se para -3 tempos de amostragem.

Com base nas afirmações anteriores, logo selecionamos as variáveis de entrada e saída do analisador virtual de composição, como visto na tabela 5.2.

Tabela 5.2 Entradas e Saída Seleccionadas para o Modelo.

ENTRADAS	SAÍDA
F_L	$X_{1,1}$
x_F	
Q_R	
R	
T_1	
T_2	
T_3	
T_4	
T_5	

Fonte: Autor (2011).

A coleta dos dados foi feita quando foram excitadas as variáveis do processo de forma randômica, fluxo de líquido (F_L) e composição (X_F) na alimentação, fluxo de vapor (Q_R) e razão de refluxo (R), para cada umas destas os sinais aleatórios tem um valor específico e com um período de variação de 3 intervalos de amostragem, ou seja, 378 segundos.

Por fim, a aquisição de dados no modelo da coluna foi feita utilizando 882 pontos referentes a aproximadamente 31 horas de operação da planta piloto, tempo de simulação. Com isso, foram coletadas nove variáveis de entrada para treinamento e validação da rede *neuro-fuzzy*, que são: T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , Q_R , R , X_f e F_L e a variável de saída $X_{1,1}$ (composição do metanol no topo da coluna)

Todos os dados foram salvos em arquivo Matlab®, para posterior implementação do analisador, através das entradas da rede *neuro-fuzzy*.

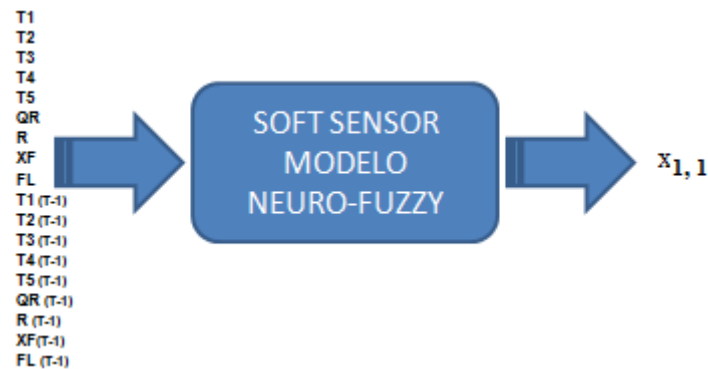
5.2 Construção do analisador virtual

O sistema adaptativo de inferência *neuro-fuzzy* ANFIS foi utilizado para a construção do sensor, pois a associação entre Rede neural e lógica *fuzzy* permite integrar as vantagens de cada abordagem e minimizar as deficiências de ambas durante o treinamento.

Após o estudo de seleção de variáveis, foram obtidas 9 variáveis de entrada para o modelo inferencial. No entanto, para se obter um melhor desempenho do analisador virtual na estimativa dinâmica da composição, optou-se por utilizar uma regressão de um tempo de amostragem nas variáveis seleccionadas, alterando o número de entradas de 9 variáveis para

18, sendo 9 variáveis instantâneas e 9 variáveis em um tempo de amostragem anterior. Conforme a Figura 5.15.

Figura 5.15 AV para inferir a composição de metanol no topo da coluna ($x_{1,1}$).



Fonte: Autor (2011).

5.3 Redução de dimensionalidade

Como discutido anteriormente, o número de entradas pode ser uma limitação no desempenho do sistema neuro-fuzzy. Utilizando a regressão houve um aumento do número de entradas para 18, proporcionando também um aumento no conjunto de dados. No entanto, isto não colocou em risco a viabilidade do analisador virtual, uma vez que foi utilizada a técnica de agrupamento de dados, denominada de agrupamento substrativo vista na seção 4.3.3.4 desta dissertação

A técnica de agrupamento substrativo “*subtractive clustering*” encontra-se embutida na função *genfis2* do MATLAB®. Ela é aplicada sobre o conjunto de entradas e saídas, para determinação dos centros dos agrupamentos, que serão em seguida usados na determinação do número de regras e de funções de pertinência das entradas do sistema *neuro-fuzzy*.

O algoritmo descrito por CHIU (1994) é utilizado na estimação do número de regras necessárias à definição de um modelo fuzzy baseado em um conjunto de dados, e não necessita de ser especificado previamente o número de agrupamentos no modelo. No entanto, é importante notar que o parâmetro r_a , raio de vizinhança do agrupamento, está diretamente relacionado com o número de regras e/ou agrupamentos encontrados.

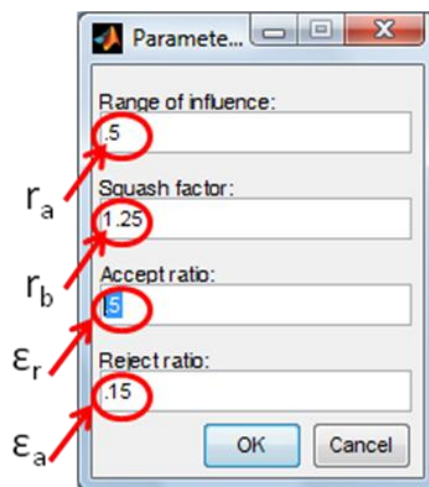
Assim, um raio pequeno gera um número elevado de regras e/ou agrupamentos, o que, no caso de ser excessivo, pode redundar em problemas de sobre ajustamento, não dando boas generalizações. Por outro lado, um raio grande produz um número menor de regras e/ou

agrupamentos, o que poderá gerar modelos com capacidades de aproximação reduzidas, no caso do número de regras se mostrar pequeno.

Deste modo, em aplicações práticas é necessário o teste de diversos valores para r_a e seleccionar o mais adequado em função dos resultados obtidos. Quanto ao parâmetro r_b , este tem uma relação constante com r_a , e por definição, r_b afeta igualmente o número de centros obtidos, sendo necessário também experimentar valores diferentes em algumas ocasiões.

Neste trabalho os parâmetros foram ajustados com base nas informações da seção 4.3.3.5 e utilizando o método de tentativa e erro, assim foi encontrado o melhor raio de vizinhança do agrupamento (r_a), já os parâmetro $\varepsilon_a = 0,5$ que é o limiar para o qual o ponto é aceito e $\varepsilon_r = 0,15$ o limiar no qual o ponto é rejeitado, foram mantidos nestes respectivos valores, conforme sugere CHIU (1996). A Figura 5.16 mostra o ambiente no qual estes parâmetros podem ser ajustados e seus respectivos valores.

Figura 5.16– Ajuste dos Parâmetros na técnica de agrupamento substrativo.

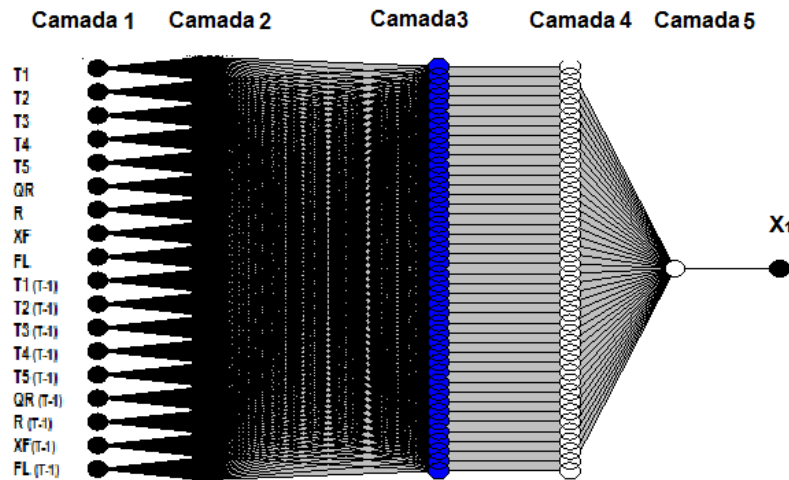


Fonte: Matlab® (2008).

5.4 Arquitetura da rede *neuro-fuzzy*

Na arquitetura para treinamento da rede neuro-fuzzy foram utilizados 882 pontos, estes foram divididos em dois grupos: treinamento 66% ou “582” dados e validação 34% ou “300” dados. Logo, foi formado um sistema *neuro-fuzzy* com 18 entradas e uma saída, formando uma arquitetura de rede ANFIS utilizando o comando *anfisedit* do MATLAB® versão 7.0, é mostrado conforme a Figura 5.17.

Figura 5.17 Arquitetura do Analisador Virtual gerado pela rede neuro-fuzzy.



Fonte: Autor (2011).

5.5 Treinamento do analisador virtual de composição

O treinamento do analisador virtual tem como objetivo a inferir a composição de metanol no topo da coluna de destilação $x_{1,1}$. A rede foi treinada com algoritmo híbrido *neuro-fuzzy*, inicialmente foram geradas 77 regras *fuzzy*, de forma com que os parâmetros do agrupamento dos dados fossem ajustados com intuito de manter um número reduzido de 42 regras *fuzzy*.

Ainda assim, foram formados 1656 parâmetros não lineares e 874 parâmetros lineares durante as 10 simulações ou épocas de treinamento com uma tolerância de 10^{-5} . As funções de pertinências das 18 entradas e única saída (composição) e a base de regras para o modelo MISO de inferência com m regras e n variáveis *fuzzy* de entradas e uma variável *fuzzy* de saída são apresentados no **APÊNDICE B** desta dissertação.

5.6 Validação do analisador virtual

A etapa de validação determina se o modelo identificado é bom o suficiente de acordo com um determinado critério de qualidade estabelecido a priori. Para modelos construídos a partir de dados, independente da metodologia utilizada, a sua validação é sempre feita com um conjunto de dados diferentes (dados de validação) do conjunto de dados utilizados para a obtenção do modelo (dados de treinamento).

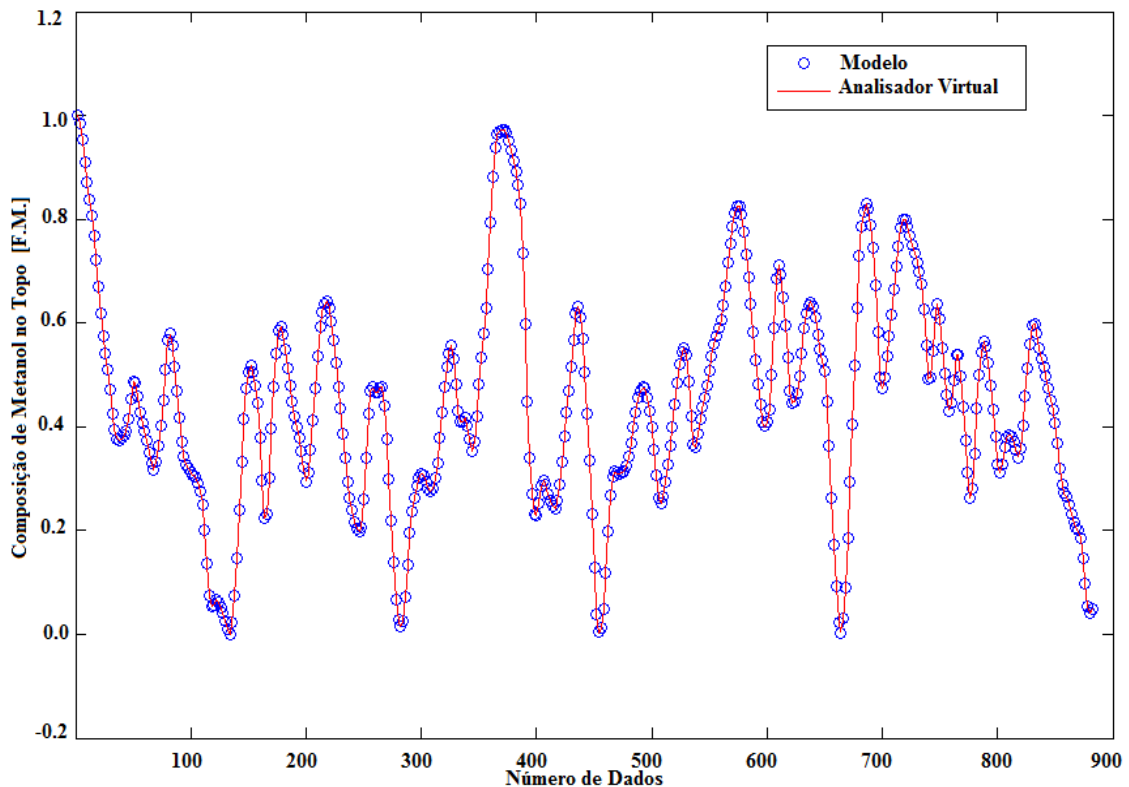
Neste trabalho, a validação do modelo *neuro-fuzzy* é realizada através da análise da estrutura do modelo gerado e do desempenho alcançado durante a aplicação dos dados de

validação. O compromisso entre a precisão do modelo, na geração das estimativas, e a sua capacidade de generalização é fator determinante na escolha do modelo final. Além disso, é necessário manter a interpretabilidade do modelo *neuro-fuzzy*, pois se trata de uma das principais vantagens e características deste tipo de modelo.

Para isto, quanto menor o número de funções de pertinência no universo de discurso de cada variável ou de regras descrevendo o comportamento do processo, maior é a interpretabilidade do modelo. Por outro lado, a precisão das estimativas pode ser comprometida pelo número reduzido de regras e funções de pertinência.

Os resultados obtidos no valor inferido da composição de topo feita pelo analisador virtual com todos os dados, comparado com os valores desejados. Conforme o gráfico em escala de composição da Figura 5.18, apresentado abaixo, o analisador virtual apresentou bons resultados para estimar a composição de topo do processo de destilação binária.

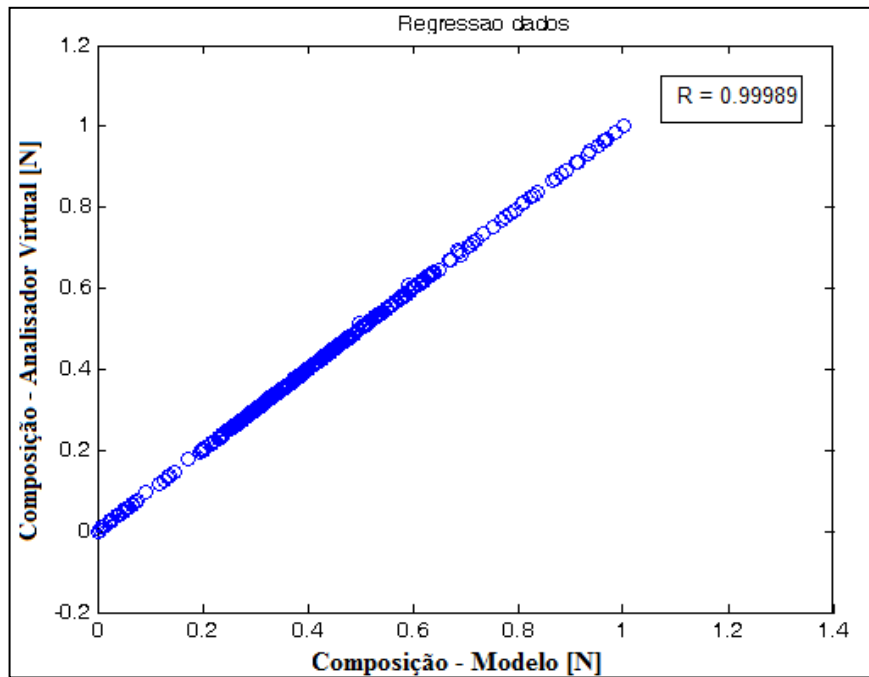
Figura 5.18 Comparação do valor estimado da composição feita pelo analisador virtual.



Fonte: Autor (2011).

A análise de regressão dos dados é uma técnica para modelagem do relacionamento entre duas ou mais variáveis. A análise de regressão pode ser vista como o estudo de correlação entre as variáveis, como na Figura 5.19.

Figura 5.19 Regressão dos Dados de Treino.



Fonte: Autor (2011).

Para melhor avaliar o analisador virtual construído, a partir do modelo *neuro-fuzzy*, foram empregados dois índices de desempenho: o erro quadrático médio (MSE) e a média do erro absoluto em percentual (MAPE).

O erro (MSE), Equação 44, é a média dos quadrados das diferenças entre o valor estimado pelo analisador e o valor esperado da composição, fornecido pelo simulador. Este valor é utilizado como medida do desempenho da rede durante o seu treinamento. Esta função pondera com maior peso (quadrático) os pontos em que o erro apresentado pela rede for maior.

Já o erro (MAPE), Equação 45, é o maior pico de erro apresentado pela rede após o treinamento, confrontado com os resultados obtidos com os esperados fornecidos pelo simulador. Este erro permite visualizar o quão fora da média está o ponto de maior erro na avaliação.

$$\text{Erro MSE} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (y(k) - yf(k))^2 \quad (47)$$

$$\text{Erro MAPE} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \left| \frac{y(k) - y_f(k)}{y(k)} \right| \quad (48)$$

Onde y é a saída medida, y_f é a saída inferida pelo modelo *neuro-fuzzy*, e N é o número de amostras do conjunto de treinamento e/ou validação. Os valores destes índices de desempenho devem ser inferiores a limites pré-estabelecidos (ξ_{mse} e ξ_{mape}) para aceitação do modelo. A Tabela 5.3 mostra os índices de desempenho do sensor *neuro-fuzzy*.

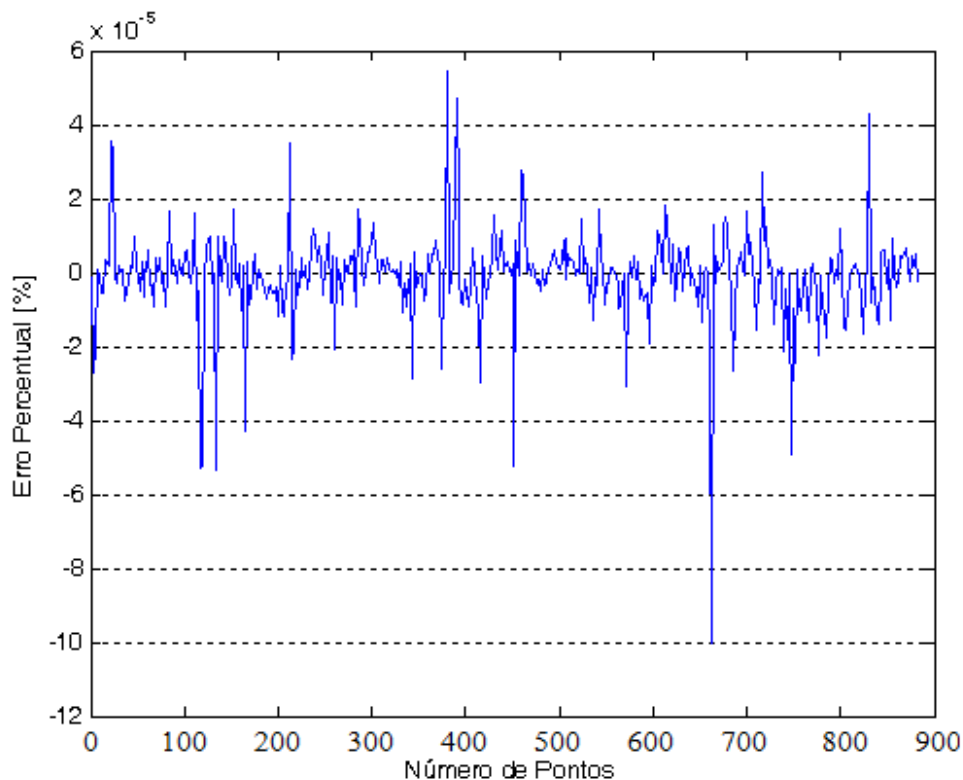
Tabela 5.3—Índices de desempenho do sensor *neuro-fuzzy*.

Treinamento	Validação
MSE = 1.83251×10^{-5}	MSE = 1.99673×10^{-5}
MAPE = 0.000249626	MAPE = 0.000299152

Fonte: Autor (2011).

Já o gráfico da Figura 5.20 mostra como a simulação do analisador virtual se mostrou próxima da real.

Figura 5.20 Erro Percentual de todo o conjuntos de dados (882 pontos).



Fonte: Autor (2011).

O gráfico do erro, ver Figura 5.20, mostra como a simulação se mostrou próxima da real, gerando um erro para todo o conjunto de dados da ordem de 10^{-5} .

5.7 Conclusões

Este trabalho descreveu o desenvolvimento de uma estratégia de construção de um analisador virtual, com o objetivo de estimar a composição num processo de destilação numa planta piloto. A estratégia computacional desenvolvida mostrou-se adequada para inferência da composição no processo de destilação.

Com a metodologia proposta, foi feita inicialmente a aquisição de dados de um modelo dinâmico, da planta piloto. Na segunda etapa foram selecionadas as variáveis de entrada, com base em uma análise de sensibilidade. A terceira etapa consistiu em construir um modelo inferencial utilizando modelagem com a técnica *neuro-fuzzy*, que associa rede neural artificial e lógica *fuzzy* permitindo integrar as vantagens de cada abordagem e minimizar as deficiências de ambas. Para utilização da técnica *neuro-fuzzy* foi introduzida a quarta etapa do trabalho, onde foi possível diminuir no número de regras da lógica *fuzzy* de 77 para 42, permitindo o uso do conjunto de dados das 18 variáveis de entrada. A quinta e última etapa permitiu validar o modelo inferencial e comparar seus resultados com a composição real do topo da coluna de destilação.

Um ponto importante é o fato de se ter utilizado neste trabalho a técnica de seleção de variáveis por meio de análise de sensibilidade das variáveis, isso foi possível com uso da função de covariância ou correlação cruzada permitindo fazer uma análise dinâmica de quais entradas seriam utilizadas na geração do modelo de inferência.

No trabalho também foi utilizado o sistema híbrido *neuro-fuzzy* que implementa um Sistema de Inferência *Fuzzy* (FIS), numa arquitetura paralela distribuída de tal forma que os paradigmas de aprendizado comuns às Redes Neurais Artificiais (RNA) possam ser aproveitadas nesta nova arquitetura híbrida. E com a ferramenta de redução de dimensionalidade por agrupamento substrativo, foi possível utilizar uma regressão nos dados de entrada sem que a qualidade de inferência fosse comprometida.

O analisador virtual (AV) construído mostrou bons resultados para inferir a composição de topo do processo. Assim, percebe-se a importância dessa ferramenta em substituição às metodologias tradicionais de medição, possibilitando a medição dessa variável e de outras variáveis de interesse, em tempo real. Com isso, a aplicação do AV torna-se viável diante das dificuldades operacionais a serem encontradas nos processos industriais.

5.8 Sugestões para trabalhos futuros

Em trabalhos futuros podem ser implementado um controle inferencial de composição por meio do desenvolvimento e sintonia de um controlador, que seja capaz de fornecer as correções necessárias para manter a estimativa de composição no valor desejado.

Também podem ser utilizadas outras técnicas para dimensionalizar o conjunto de dados das entradas, como por exemplo, a técnica de análise de componente principal dinâmica (DPCA), assim permita minimizar o erro de treinamento e validação da rede neuro-fuzzy.

Recomenda-se também o uso de filtros, como por exemplo, o Filtro de Kalman Estendido (FKE), para que o mesmo venha a atuar fazendo pré-processamentos específicos para eliminar ruídos dos instrumentos de leitura, erros de escalas e incompatibilidade entre os sinais de entrada e saída do sistema, já que além do modelo outras fontes de entradas como banco de dados das plantas industriais podem ser utilizadas.

REFERÊNCIAS

- AGUIRRE, L.A. **Introdução à identificação de sistemas: técnicas lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais.** Belo Horizonte: Editora UFMG, Cáp 4 e 11 da 2ª Ed. 2004.
- APOSTILA PETRÓBRAS. **Analísadores em linha princípios analíticos e instrumentais.** Universidade Petrobras, Rio de Janeiro, p.14, 2006.
- ARRUDA L. V. R. FLÁVIO N.JR.; ELAINE Y. NAGAI. **Um método neuro-fuzzy para construção de sensores virtuais.** Revista da Sociedade Brasileira de Redes Neurais (SBRN), Vol. 5, No.2, pp. 65-80, 2007.
- ARNOULD, T.; TANO, S. **Interval-valued fuzzy backward reasoning.** IEEE Transactions on Fuzzy Systems, v.3, n. 4, pp. 425-437, nov. 1995.
- ASCENCIO, R R. L.;HERRERA, E. **Sensores virtuales mediante redes neuronales artificiales, dos estudios de caso en biotecnología.**In: The 2000 IEEE International Symposium on Industrial Electronics, México. 2000. Disponível em: <<http://iteso.mx/~rleal/archivos/hardvirtual.pdf>>. Acesso em : 9 mar. 2010.
- BABUSKA, R., KAYMAK, U., VAN NAUTA, H. R., SETNES, M. **Similarity measures in fuzzy rule base simplification.** IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics – Part B, v. 28, n. 3, p. 376-386, 1998.
- BARRETO, J. M. **Indrodução as redes neurais artificiais.** Apostila apresentada a Escola de Computação da Região Sul, Florianópolis-SC, 4/2002.
- BHAT, N. V., P. A. MINDERMAN, T. J. MCAVOY, AND N. WANG. **Modeling Chemical Process systems via neural Computation.**IEEE Control Systems Magazine, pp. 24-30, 1990.
- BILLINGS, S. A., & VOON, W. S. F. (1986b). **A prediction-error and stepwise-regression estimation algorithm for non-linear systems.** International Journal of Control, 44(3), 803–822, 1986.
- BOYD, D.M. **Fractionation column control.** Chemical Engineering Progress. June, 1975.
- BOUCHON-MEUNIER, B. **La logique floue et ses application.** Ed.Addison-Wesley, France, 1995.
- BRAGA, A.P; LUDERMIR, T. B. e de LEON, A. C. P. **Redes neurais artificiais: teoria e aplicações.** Livros Técnicos e Científicos Editora, 2000.
- BROX, P.; BATURONE, I.; SÁNCHEZ-SOLANO, S. **Fuzzy logic based algorithms for video de-interlacing.** Studies in Fuzziness and Soft Computing, Editora Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2010.
- BUCKLEY, J. J. & HAYASHI, Y. **Fuzzy neural networks: a survey, fuzzy sets and systems.** pp.66: 1–13, 1994.

CAMPOS, M. M.; e SAITO, K. **Sistemas inteligentes em controle e automação de processos**. Rio de Janeiro, Editora Ciência Moderna Ltda, 2004.

CARLEY, K. M.; KAMNEVA, N. Y.; REMINGA, J. **Surface methodology**. CASOS (Computational Analysis of Social and Organizational Systems). Technical Report. Carnegie Mellon University, 2004.

CHIU, S.L. **Fuzzy model identification based on cluster estimation**. Journal of Intelligent and Fuzzy Systems, v.2, 267-278, 1994.

CHIU, S.L. **Selecting input variables for fuzzy models**. Journal of Intelligent and Fuzzy Systems, v.4, n.4, 243-256, 1996.

CHIU, S.L. **An efficient method for extracting fuzzy classification rules from high dimensional data**. Advanced Computational Intelligence. V.1, n.1, 1-7, 1997.

CHURCHLAND, P.S.; e SEJNOWKI, T.J. **The Computational Brain**. MIT Press., Cambridge, 1992.

COULSON, J. M., e RICHARDSON, J. F. **Tecnologia química**. Volume II. Operações Unitárias, 2ª edição, Fundação Calouste Gulbenkian, 1987.

CONZ V. **Desenvolvimentos de analisadores virtuais aplicados a colunas de destilação industriais**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre – RS, 2005.

CORRÊA, L. G. C. **Inferência da qualidade de produtos de destilação utilizando redes neurais artificiais e filtro de Kalman estendido**. Dissertação de Mestrado. Pontifícia Universidade PUC-Rio, Programa de Pós- Graduação em Engenharia Elétrica da PUC-RIO, 2005.

COHN, P. **Introdução aos analisadores de processo, ou analisadores contínuos**. In: Workshop nacional sobre analisadores de processos em linha, 2004, Salvador, Bahia: UFBA, 2004. 95p.

CRUZ, J.C.G. **Identificação de uma torre de retificação de águas ácidas usando redes neurais artificiais**. Dissertação de Mestrado do PPGEE, Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil, 2001.

DUWAISH, H., GHOUTI, L., HALAWANI, T., AND MOHANDÉS, M. **Use of artificial neural networks process analyzers: a case study**. ESANN'2002 proceedings - European Symposium on Artificial Neural Networks Bruges (Belgium), pp. 465-470, 2002.

FACCHIN S. **Técnicas de análise multivariável aplicadas ao desenvolvimento de analisadores virtuais**. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, UFRGS, Porto Alegre – RS, 2005.

FINKLER, T. F. **Desenvolvimento de uma ferramenta para obtenção de modelos empíricos**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

FORTUNA L., GRAZIANI S., XIBILIA M. G. **Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns**. CONTROL ENGINEERING PRACTICE, V.13(4), 499-508, 2005.

FORTUNA,L.;GRAZIANI,S.;RIZZO,A.;& XIBILIA,M.G. **Softsensors for monitoring and control of industrial processes**. London, UK: Springer, 2007.

FOUST, A.S.. **Princípios das operações unitárias**. 3ed. Rio de Janeiro: LTC, Cáp. 1 e 2, 2000.

FRANKS, R. G. E. **Modeling and simulation in chemical engineering**. Wiley- Interscience, (1972).

FULLÉR, R. **Neural fuzzy systems**.1995.Disponível em: citeseer.nj.nec.com/64350.html. Acesso em: 9 mar. 2010, 1995.

GARCIA, C. **Modelagem e simulação**. Editora Edusp, Cap. 2pp.32-34, 2005.

GOMIDE, F. A. C.; GUDWIN, R. R. **Modelagem, controle, sistemas e lógica difusa**. SBA Controle & Automação/ Vol.4 N° 3/ Setembro - Outubro 1994.

GONZALEZ, G.D. **Issues in soft-sensor applications in industrial plants**. In: **symposium proceedings.ISIE 94**, IEEE Trans. Ind. Electron., p.380-385, 1994.

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. Cáp.1 a 3, Bookman, 2001.

HERTZ, J. A., KROGH, A. and PALMER, R. G. **Introduction to the theory of neural computation**. Santa Fé institute studies in the science of complexity. Addison-Wesley , 1991.

HUAMANÍ, i. L. **Redes neurais fuzzy aplicadas em identificação e controle de sistemas**.Unicamp, Campinas, SP: [s.n.], 2003.

HOLLAND, J.H. **Adaptation in natural and artificial systems**, University of Michigan Press, 1975.

IYODA, E. M. **Inteligência computacional no projeto automático de redes neurais híbridas e redes neurofuzzy heterogêneas**. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Elétrica e de Computação - Universidade Estadual de Campinas, 2000.

JANG, R. J. **Anfis: adaptive-network-based fuzzy inference system**. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, pp. 665–685, 1993.

JANG, J. S. R.; SUN, C.T. **Neuro-fuzzy modeling and control**. proc. IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics, vol. 23 n° 3, p-665-685, 1995.

JANG, J. S. R.; SUN, C. T.; e MIZUTANI, E. **Neuro-fuzzy and soft computing**. Editora Prentice Hall, New Jersey, 1ª edição, 1997.

JANSON, D. J. & FRENKEL, J. **Training product unit neural networks with genetic algorithms.** IEEE Expert 8, pp. 26–33, 1993.

JERBIĆ, I.;BOLF, N.; PAVELIĆ, H. **Development of soft sensors for debutanizer Product quality estimation and control.** Proceedings of European Congress of Chemical Engineering (ECCE-6), 2007.

KALID, R.A. **Controle de colunas de destilação.** 2007. Disponível em: <http://www.eng.ufba.br/cecapi/ccd.html>. Último acesso em: Janeiro 2010.

KANO, M.; MIYAZAKI, K.; HASEBE, S.; e HASHIMOTO, I. **Inferential control system of distillation compositions using dynamic partial least squares regression.** Journal of Process Control, 2000.

KANO, M.; SHOWCHAIYA, N.; HASEBE, S.; E HASHIMOTO, I. **Inferential control of distillation compositions: selection of model and control configuration.** Control Engineering Practice 11, pp. 927–933, 2003.

KOMULAINEN, T., SOURANDER, M., JAMSA-JOUNELA, S. L. **An online application of dynamics PLS to a desaromatization process.** Computers & Chemical Engineering, 28, 26611-2619, 2004.

KU, W., STORER, R. H., GEORGAKIS, C., 1995. **Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis.** Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems 30, 179-196.

LAHIRI, S.K e KHALFE, N. M. **Soft sensor development and optimization of the commercial petrochemical plant integrating support vector regression and genetic algorithm.** Chemical Industry & Chemical Engineering Quarterly 15, pp. 175–187 2009.

LOTUFO F.A., GARCIA C. **Sensores virtuais ou soft sensors: uma introdução.** DINCON, 2008.

LUO, J. X. E SHAO, H. H. **Developing soft sensors using hybrid soft computing methodology: a neurofuzzy system based on rough set theory and genetic algorithms.** Soft Computing, vol. 10, pp. 54-60, 2006.

LUYBEN, W.L. **Process modeling, simulation and control for chemical engineers.** Editora: McGraw-Hill International Editions, 2ª Edição, 1999.

LUYBEN, W.L. **Evaluation of criteria for selecting temperature control trays in distillation columns.** J. Proc. Cont. 16, 115-134, 2006.

MARLIN, T. E. **Process control: designing process and control systems for dynamic performance.** 2 ed. New York, Mc Graw Hill, 2000.

MENEGUELO, A. P.; ROQUEIRO, N.; E MACHADO, R. A. F. **Modelagem de coluna de destilação para implementação de observador de estados.** 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, 2005.

MENEGUELO, A. P. **Contribuições à análise e modelagem de operações transientes de colunas de destilação.** Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos da UFSC, julho de 2007.

MOHR, T., **Desenvolvimento de um analisador virtual para uma planta de polietileno de alta densidade.** DISSERTAÇÃO DE MESTRADO – PPGEQ – UFRGS, 2004.

MONTGOMERY, D. C., PECK, E. A. I. **Introduction to linear regression analysis.** JOHN WILEY & SONS, NOVA IORQUE, 1982.

MONTGOMERY, D.C., E.A. PECK, AND & G.G. VINING. **Introduction to linear regression analysis.** 3rd edition, John Willey & Sons, New York, 2001.

MING-DA MA, JING-WEIKO, SAN-JANGWANG, MING-FENGWU, SHI-SHANGJAN, SHYAN-SHUSHIEH, DAVIDSHAN-HILLWONG. **Development of adaptive soft sensor based on statistical identification of key variables.** Control Engineering Practice (2009), Control Engineering Practice, pp. 10-19, 2009.

NAGAI, E. Y. ARRUDA, L. V. R. **Identificação de modelos inferenciais fuzzy para a estimação de medidas de concentração em processos de refino.** 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás - IBP, Copyright, 2004.

NOBRE, F. S. M.; PALHARES, Á. G. B. **Informações quantitativas e qualitativas no projeto de controladores nebulosos.** SBA Controle & Automação/ vol.8 no 2/ mai., jun., Julho e Agosto 1997.

NUNES, P.G.A. **Uma nova técnica para seleção de variáveis em calibração multivariada aplicada às espectrometrias UV-VIS e NIR.** Tese de doutorado, UFPB/CCEN, João Pessoa, 2008.

ORTEGA, N.R.S. **Aplicação da teoria da lógica fuzzy a problemas de biomedicina.** Tese de doutorado, IF-USP. São Paulo. p.153, 2001.

ÖZBEK, M. O. **Inferential model predictive control of poly (ethylene terephthalate) degradation during extrusion.** Thesis of Master, Middle East Technical University, Germani, 2006.

PÁDUA, A. B. **Redes neurais artificiais: teorias e aplicações.** Editora Livros Técnicos e Científicos, Cap. 1,2 e 3, 2000.

PAGLIOSA, A. L. **Obtenção das funções de pertinência de um sistema neurofuzzy modificado pelas redes de Kohonen.** 2003. Dissertação (Mestrado em Automação Industrial) – Centro de Ciências Tecnológicas, Universidade do Estado de Santa Catarina, Joinville, 2003.

PEDROSA, L. da S. **Controle adaptativo de uma coluna piloto de destilação em batelada com inferenciação de composição através de redes neurais artificiais.** Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 1998.

PEDRYCZ, W. & GOMIDE, F. **An Introduction to fuzzy sets: analysis and design**. MIT Press, Cambridge, MA, 1998.

PEDRYCZ, W.; CAMINHAS, W.; GOMIDE, F. **Fuzzy set based neural networks: structure, learning and application**. Journal of Advanced Computational Intelligence ;Vol. 03, nº 3, 1999.

PIANG, L. W. **Inferential estimation and control of chemical processes using partial least squares based model**. Thesis of Master of Engineering (Chemical). Faculty of Chemical and Natural Resources Engineering, University Technology, Malaysia, 2005.

RALLO, R., FERRE -GINÉ, J., ARENAS A. and GIRALT, F. **Neural virtual sensor for the inferential prediction of product quality from process variables**. Computers and Chemical Engineering, 26, 1735-1754, 2002 .

REBOUÇAS, D. L. **Sistema de inferência neural e processamento estatístico multivariável aplicado à indústria do petróleo**. Universidade Federal Do Rio Grande Do Norte. Departamento de Engenharia de Computação e Automação. Trabalho De Conclusão de Curso, 2009.

ROXANA, J. C. **Técnicas de seleção de características aplicadas a modelos neuro-fuzzy hierárquicos BSP**. PUC, Departamento de Engenharia Elétrica, Rio de Janeiro, 2002.

RUMELHART, D. E., HINTON, G. E., E WILLIAMS, R. J. **Learning representations by backpropagation errors**. Nature, 323:533–536, 1986.

ROHN, M. da C.; MINE, M. R. M. **Uma aplicação de redes neurais artificiais à previsão de chuvas de curtíssimo prazo**. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, CURITIBA, 2003.

SAITO, J. H. **RNA modelos estacionários e dinâmicos**. UFSCAR, (Apresentação de Trabalho/Seminário). Disponível: http://www2.dc.ufscar.br/~saito/download/topicos_pis/. Último acesso em: Abril 2010.

SALTELLI, A.; TARANTOLA, S.; CAMPOLONGO, F.; RATTO, M. **Sensitivity analysis in practice**. Inglaterra: John Wiley & Sons, 2004.

SALVATORE, L. **Inferência do teor de enxofre em unidades de hidrotreatamento de diesel baseada em modelagem heurística**. Dissertação de Mestrado, Escola de Química/Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2007.

SANDRI, S.; CORREA, C.; **Lógica nebulosa**. V Escola de RN, ITA – São José dos Campos/SP, Junho, 1999.

SEBORG, D; EDGAR, T.; MELLICHAMP, E. D. **Process dynamics and control**. John Wiley & Sons, Inc., 1989.

SECCHI A. R., CARDOZO N. S. M., ALMEIDA N. E. FINKLER T. F. **An algorithm for automatic selection and estimation of model parameters**. Proceedings of the International

Symposium on Advanced Control of Chemical Processes vol. 2, p. 789-794. Gramado, Brasil, 2006.

SIEGEL, M. **Sensor modeling and simulation: can it pass the turing test vims2001: workshop virtual and intelligent measurement systems**. Budapest, 2001. Disponível em: <<http://www.cs.cmu.edu/~mws>>. Acesso em: 15 de junho 2010.

SMITH, C. A. E CORRIPIO, A. **Princípios e prática de controle automático de processo**. 3ª Edição, Editora Gen e LTC, Cap. 4 e 7 pp. 226-227, 2008.

SÖDERSTRÖM, T. & STOICA, P. **System identification hemel hempstead**. U.K., Prentice Hall Internacional, 1989.

SODRÉ, C. H. **Practical evaluation of hold-up for passive decoupling in distillation column**. PhD Thesis, University of Nottingham, Available in: George Green Library, 1999.

SODRÉ, C. H., A. J., JONES, W. **The effect of large hold-up in a distillation column**. Proceeding of Empromer, Santa Fé, V 1, pp 349-354, 2001.

SKOGESTAD. **Dynamics and control distillation column: a tutorial introduction**. Trans. IchemE, 75, part A, pp. 539-562, (1997b).

SOUZA, F. J. **Modelos neuro-fuzzy hierárquicos**. Tese de Doutorado, Departamento de Engenharia Elétrica Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Abril 1999.

SUTTER, J.M. e KALIVAS, J.H. **Comparison of forward selection, backward elimination and generalised simulated annealing for variable selection**. Microchem. J. 47, pp. 60– 66, 1993.

TAKAGI, T. & SUGENO, M. **Fuzzy identification of systems and its applications to modeling and control**. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics, 1985.

TAKAHASHI J. H. **Predição de propriedades mecânicas de aços de alta resistência microligados utilizando técnicas de inteligência computacional**. Dissertação de Mestrado, Centro Universitário do Leste de Minas Gerais-UNILESTE, MG, 2006.

TITO, E. A. H. **Tópicos avançados em inteligência artificial**, 2001; Disponível em: <http://www.ele.puc-rio/br/labs/ica>. Acesso em: 15 de junho 2010.

TREVISAN, M. G. e POPPI, R. J. **Química analítica de processos**. Quim. Nova, Vol. 29, N°. 5, pp.1065-1071,2006.

ZADEH, L. A. **Fuzzy sets, information and control**. pp. 338–353, 1965.

ZADEH, L. A. **Fuzzy logic: issues, contentions and perspective**. IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing **6**, pp. 172–183, 1994.

ZAMPROGNA, E.; BAROLO, M.; SEBORG, D. E. **Composition estimations in a middlevessel batch distillation column using artificial neural networks**. Chemical

Engineering Research and Design -Trans IChemE, v.79, part A, n.6, pp.689-696, September, 2001.

ZAMBROGNA, E.; BAROLO, M.; SEBORG, D. E. **Development of a soft sensor for a batch distillation column using linear and nonlinear pls regression techniques.** 15th triennial world congress, barcelona, spain, 2002.

ZAMBROGNA, E.; BAROLO, M.; SEBORG, D. E. **Optimal selection of soft sensor inputs for batch distillation columns using principal component analysis.** Journal of Process Control, vol. 15, pp. 39-52, 2005.

ZANATA, D. R. P. **Desenvolvimento de um sensor virtual empregando redes neurais para medição da composição em uma coluna de destilação.** Dissertação de Mestrado, Universidade de São Paulo-USP, 2005.

ZYNGIER, D.; ARAÚJO, O.Q.F.; COELHO, M.A.Z.; E LIMA, E.L. **Robust soft sensors for sbr monitoring. water science and technology.** Vol. 43, N° 3, pp 101–105 , Publishing 2001.

APÊNDICE A

FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA DO MODELO DINÂMICO DA COLUNA

A.1 Modelo da coluna de destilação

Os modelos teóricos ou fenomenológicos de várias unidades de processos químicos são obtidos por meio dos princípios fundamentais de conservação de massa, energia e momento do sistema. Na sua forma geral, o princípio de conservação em um sistema sem reação química, afirma que:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Acúmulo} \\ \text{no} \\ \text{Sistema} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Total Alimentado} \\ \text{no Sistema Através} \\ \text{de Sua Fronteira} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Total Retirado} \\ \text{do Sistema Através} \\ \text{de Sua Fronteira} \end{array} \right]$$

O estado estacionário de uma coluna de destilação representa o processo em um determinado instante, neste caso não inclui informações que permitam fazer um acompanhamento e prever as mudanças ocorridas nas variáveis de estado do sistema, quando este é perturbado de alguma forma. Considerar o termo acúmulo no processo significa dizer que as características de funcionamento dinâmico do processo estão incluídas.

Modelos matemáticos são dinâmicos no sentido de uma aproximação do comportamento real do sistema estudado, no presente trabalho é apresentado o modelo dinâmico utilizado de uma planta piloto de destilação binária, de forma que cada equação do balanço geral e componente é resolvida para cada estágio.

As principais características dinâmicas das colunas de destilação são aquelas relacionadas com a composição e surgem a partir do volume de líquido sobre as bandejas, na base da torre, sobre o refeedor e do vaso receptor de refluxo. As equações que relacionam as variáveis de estado (variáveis dependentes) com as diversas variáveis independentes são derivadas da aplicação dos princípios de conservação das quantidades fundamentais e de equações de estado.

As equações diferenciais são não-lineares na natureza e, dependendo do grau de complexidade do modelo pode incluir balanço de massa e de energia em cada estágio/bandeja, a dinâmica do fluxo ou retido líquido (mudança do *hold-up* de líquido), as correlações apropriadas para equilíbrio líquido-vapor e os modelos detalhados dos refeedor e condensador (SKOGESTAD, 1997 B).

A medida que a complexidade do modelo aumenta um maior esforço computacional é necessário. Então, sempre que possível, vale a pena simplificar as equações omitindo termos insignificantes ou variações. Por exemplo, se uma variável muda apenas ligeiramente, em seguida, ao invés de incluir uma equação no modelo para calcular um valor de forma contínua, um número médio constante podem ser incluídos.

Pressupostos do modelo comum incluem: mistura perfeita em ambas ou em todas as fases, equilíbrio térmico e termodinâmico entre as fases, eficiências de bandeja constante ao longo de seu funcionamento, saturados de refluxo em ebulição entrando na coluna, desprezando o retido de vapor e de líquidos mantendo-os constantes em cada bandeja.

A.2 Hipóteses simplificadoras no modelo da coluna

Em sua abordagem inicial SODRÉ (1999), fez as algumas hipóteses simplificadoras para a modelagem da coluna em estado dinâmico, as quais serão apresentadas aqui.

A.2.1 A Pressão constante

O modelo assume que a pressão é constante, ou seja, é a mesma em todas as bandejas e não varia com o tempo. Esta hipótese de pressão constante pode ser justificada, porque o equipamento foi projetado de tal forma que ficasse aberto para a atmosfera e a queda de pressão ao longo da coluna de destilação é pequena.

A.2.2 Transbordamento molar constante

Considerando que a entalpia de vaporização de cada componente que alimenta a coluna é constante, o número de moles que irá vaporizar é igual ao número de moles de líquido. Com isso, o número de equações por bandeja será reduzido, haja vista que não se faz necessário realizar um balanço de energia em cada estágio.

Desta forma, o fluxo de vapor que flui na coluna é igual em todas as bandejas da seção de retificação e em todas as bandejas da seção de esgotamento. No entanto, se a alimentação de líquido na coluna não se encontrar em seu ponto de bolha a quantidade de vapor que flui na coluna será diferente, tanto na seção de retificação quanto na seção de esgotamento.

A.2.3 Retido de vapor desprezado

Para uma baixa pressão de operação, a densidade do vapor é muito menor que a do líquido. Isto significa que a maior parte do componente/material presente na coluna está na fase líquida, apesar do fato que o volume de vapor normalmente é um fator de 10 vezes maior que o volume de líquido.

Com isso, o retido (*hold-up*) de vapor pode ser desprezado, isto implica dizer que uma mudança no fluxo de vapor na base da coluna, também causará imediatamente uma alteração no fluxo de vapor no topo da coluna.

A.2.4 Dinâmica de fluxo Interno na Coluna

Quando a vazão de refluxo da coluna aumenta, o retido de líquido (*hold-up*) da bandeja superior ($n=1$) também aumenta e, isso, faz com que as forças sejam aplicadas nas bandejas inferiores, logo o retido em cada bandeja também aumenta.

A resposta do fluxo de líquido na saída de cada bandeja após uma modificação no fluxo de alimentação desta bandeja é equivalente a um sistema de primeira ordem. Como o fluxo de líquido em cada estágio se modifica dinamicamente, a Equação (49) de Francis pode ser uma boa relação para fornecer a vazão para cima do vertedouro do prato em escoamentos com vertedouros retangulares:

$$F_L = 3,33 \cdot L_W \cdot (H_{ow})^{1,5} \quad (49)$$

Onde: F_L = Vazão de líquido que flui por cima do vertedouro m^3/s ;

L_W = é a altura do vertedouro naquela seção da coluna (m);

H_{ow} = é a altura do líquido acima do vertedouro do prato (m);

No entanto, como a fórmula de Francis, definida em LUYBEN (1999), não é adequada para descrever o comportamento do líquido nas bandejas da coluna em estudo, uma vez que as bandejas têm formato circular, além disso, a própria natureza do fluxo gasoso através do vertedouro não garante boas estimativas.

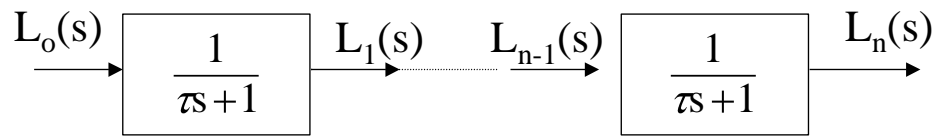
Com um tempo de atraso insignificante no fluxo de vapor, FRANKS (1972) sugere a seguinte relação, Equação (50), para descrever o fluxo de líquido em cada bandeja:

$$\tau \frac{dL_n}{dt} = L_{n-1} - L_n \quad (50)$$

A equação acima representa o tempo de atraso que ocorre entre o líquido que flui da bandeja L_{n-1} para a bandeja com L_n , onde τ é constante de tempo hidráulica do sistema. Esta equação diferencial é utilizada para cada bandeja da seção de retificação e esgotamento, juntamente com a constante de tempo encontrada experimentalmente.

Considerando cada bandeja da coluna como um sistema de primeira ordem, conforme a Figura A.1, a função de transferência global para as n bandejas num sistema de primeira ordem é:

Figura A.1 – Diagrama de blocos para as bandejas não interagindo.



Fonte: Autor (2011)

O diagrama de blocos da Figura A.1 é equivalente a Equação (51):

$$\frac{L_n(s)}{L_o(s)} = \frac{1}{(\tau s + 1)^n \tau} \quad (51)$$

Neste modelo τ foi medido experimentalmente. Para o caso de quatro bandejas em série, se ocorrer uma mudança de grau de tamanho AA na variável de entrada $L_o(s)$, a resposta no domínio do tempo $L_n(t)$ para cada de interação é dada pela Equação abaixo:

$$L_4(t) = \frac{AA}{\tau \tau^4} (\tau \tau^4 - e^{-\frac{t}{\tau}} (\frac{\tau \tau t^3}{6} + \frac{\tau \tau^2 t^2}{2} + \tau \tau^3 t + \tau \tau^4)) \quad (52)$$

Onde: AA = Tamanho da mudança de grau na entrada;

τ = Constante de tempo hidráulica em cada bandeja(s);

t = tempo em(s).

Já o fluxo ao longo do refervedor, Equação (53), é:

$$L_{12} = K(h)^{3/2} \quad (53)$$

Onde: L_{12} = é o fluxo de líquido sobre o vertedouro (mol/s);

K = Constante de Correção;

h = Altura do líquido sobre o vertedouro (cm).

A.2.5 Equilíbrio líquido-vapor

Para descrever a relação de equilíbrio líquido-vapor para o componente mais volátil na mistura binária, a lei de Dalton é aplicada para a fase vapor e o comportamento não-ideal de desvio do líquido a lei de Raoult, Equação (54) é aplicada com um coeficiente de atividade. Para o sistema metanol e água:

$$P y_n = P^v_{Me} x_n \gamma_{Me} \quad (54)$$

Onde: P^v_{Me} = Pressão de vapor do metanol na temperatura do sistema

x_n = Fração molar do metanol na fase líquida

γ_{Me} = Coeficiente de atividade do metanol na fase líquida

P = Pressão total do sistema (mmHg), que é dada por: $P = p_{Me} + p_{H_2O}$; onde p_{Me} e p_{H_2O} são, respectivamente, a pressão parcial do metanol e da água.

A.2.6 Coeficiente de atividade

Para muitas misturas binárias não-ideais, utiliza-se uma expressão para calcular o coeficiente de atividade que contém dois ou mais parâmetros binários dá bons resultado, para a mistura metanol e água as Equações (55) e (56) de VAN LAAR (1968), abaixo, são utilizadas:

$$RT \ln \gamma_{Me} = A_L \left[1 + \left(\frac{A_L x_n}{B_L (1 - x_n)} \right) \right]^{-2} \quad (55)$$

$$RT \ln \gamma_{H_2O} = B_L \left[1 + \left(\frac{B_L (1 - x_n)}{A_L x_n} \right) \right]^{-2} \quad (56)$$

Onde: γ_{Me} = coeficiente de atividade do Metanol;

γ_{H_2O} = coeficiente de atividade da água;

x_n e $(1 - x_n)$ = a fração do Metanol e da água, respectivamente;

A_L e B_L = parâmetros de Van Laar para a mistura metanol e água;

R = Constante dos gases ideais.

Na Tabela A.1 é mostrado os valores dos parâmetros A_L e B_L .

Tabela A.1 Parâmetros de VAN LAAR (1968).

Metanol e água	$A' = \frac{A_L}{RT}$	$B' = \frac{B_L}{RT}$
	0.8906	0.5139

Fonte: Autor (2011)

A.2.7 Pressão de vapor do sistema

A pressão de vapor de um componente puro é uma propriedade física de cada componente e é, somente, uma função de temperatura. A pressão de vapor dos componentes puros, metanol e água, são dadas pela Equação de Antoine:

$$\ln P_{Me}^V = \frac{C_{A_{Me}} - D_{A_{Me}}}{T + E_{A_{Me}}} \quad (57)$$

$$\ln P_{H_2O}^V = \frac{C_{A_{H_2O}} - D_{A_{H_2O}}}{T + E_{A_{H_2O}}} \quad (58)$$

Onde: P_{Me}^V e $P_{H_2O}^V$ = pressão de vapor dos componentes puros, respectivamente metanol e água (mmHg);

T = Temperatura Absoluta (Kelvin)

C_A , D_A e E_A = Coeficientes da equação de Antoine com pressão de vapor em milímetros de mercúrio e T em Kelvin. A Tabela A.2 mostra os valores de cada constante.

Tabela A.2 Constantes de Antoine para mistura Metanol e água.

Componente	C_A	D_A	E_A
Metanol	18.5875	3626.55	-34.29
Água	18.3036	3816.44	-46.13

Fonte: Autor (2011)

A.2.8 Eficiência de Murphree dos estágios

Os pratos são considerados como não-ideais e a eficiência é descrita pela eficiência de Murphree, descrita pela Equação (59):

$$E_{MV} = \frac{y_n - y_{n+1}}{y_n^* - y_{n+1}} \quad (59)$$

Onde: E_{MV} = Coeficiente de eficiência de Murphree na bandeja n ;

y_n^* = Composição do vapor em equilíbrio com a composição x_n na n bandeja;

y_n = Composição atual de vapor que deixa a bandeja n ;

y_{n+1} = Composição atual de vapor que entra na bandeja n .

A eficiência de Murphree é aplicada em cada bandeja, com intuito de se obter a composição real deixando a bandeja em qualquer instante, apresenta-se sob a forma:

$$y_n = E_{MV}y_n^* + (1 - E_{MV}) \cdot y_{n+1} \quad (60)$$

A.3 Equações do modelo

A coluna possui 10 bandejas reais ($n=10$). Os estágios são enumerados a partir do topo, sendo o condensador o estágio número 1 e o refeedor o estágio 12. O acúmulo de líquido em cada bandeja é M_n (mol) e tem composição molar x_n (fração molar).

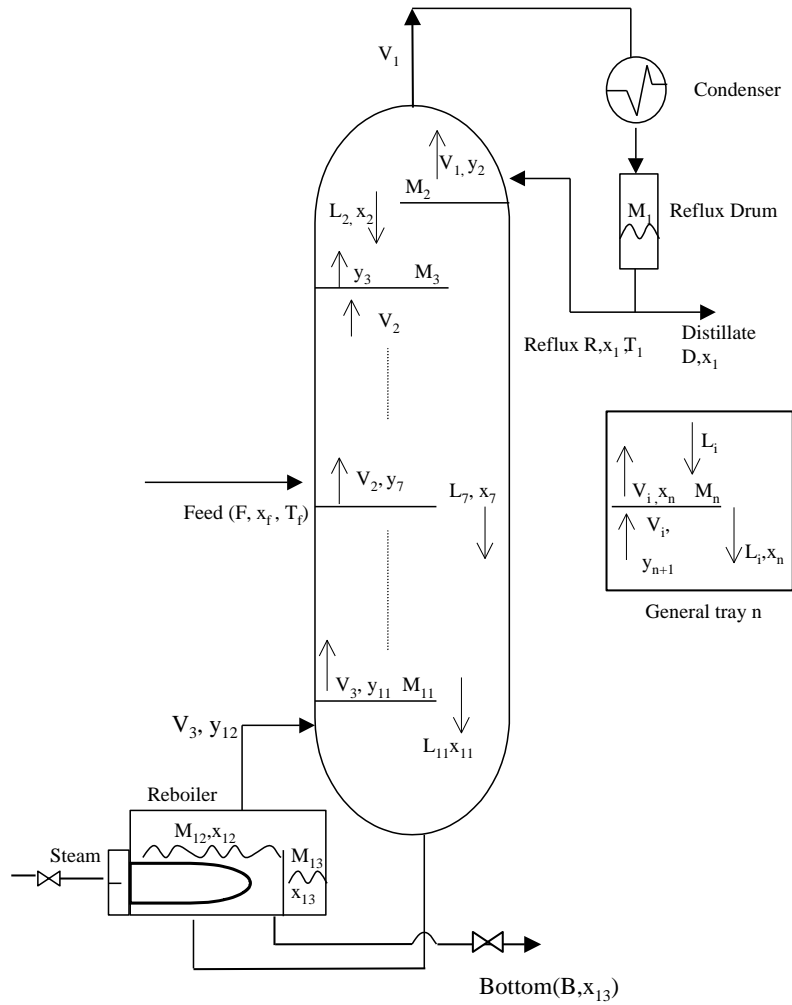
A mistura metanol e água é alimentada na coluna com líquido subresfriado (ponto de bolha), com o fluxo molar de alimentação F (mol/min) e fração molar do metanol x_F . O fluxo de vapor superaquecido é resfriado e completamente condensado, depois indo para o tambor de refluxo. O líquido acumulado no tambor de refluxo é parcialmente alimentado de volta no topo da coluna na bandeja de $n=2$, com uma vazão de refluxo subresfriada R (mol/min) e é parcialmente retirado como produto de destilado com uma vazão molar D (mol/min).

O acúmulo de líquido no tambor de refluxo é M_1 (mol) é assumindo como perfeitamente misturado, com uma composição molar x_1 . A pressão P é constante em cada bandeja ao longo da coluna. Já o vapor é gerado pelo refeedor da coluna e é alimentado na bandeja inferior ($n=11$), e o produto final é removido na vazão de fundo B (moles/min) e composição x_{12} .

O balanço de massa total e componente em cada estágio da coluna produz um conjunto de equações diferenciais não-lineares. Equações algébricas adicionais são necessárias para

realizar o balanço de energia no estado estacionário, relações de equilíbrio líquido-vapor e o fluxo de líquido do refeedor e o fluxo de líquido em cada bandeja, onde é utilizado a fórmula de Francis. As equações para a coluna são baseadas na dinâmica de fluxo no esquema da Figura A.3 e são descritos abaixo.

Figura A.2 – Bandejas da Coluna n_2, n_F, n_{11} e n .



Fonte: SODRÉ (1999).

A.3.1 Tambor de refluxo

Fazendo um balanço de massa no tambor de refluxo, obtemos a Equação (61):

$$\frac{dM_1}{dt} = V_1 - R - D \tag{61}$$

Fazendo um Balanço Componente, Equação (62), no tambor de refluxo:

$$\frac{d(M_1 x_1)}{dt} = V_1 y_2 - R x_1 - D x_1 \quad (62)$$

Diferenciando a Equação (62) e assumindo que o acúmulo (M_1) não é constante, assim como a composição x_1 , encontramos:

$$x_1 \frac{dM_1}{dt} + M_1 \frac{dx_1}{dt} = V_1 y_2 - R x_1 - D x_1 \quad (63)$$

Substituindo a Equação (61) na Equação (63), então teremos que o balanço componente é dado por:

$$\frac{dx_1}{dt} = \frac{V_1 (y_2 - x_1)}{M_1} \quad (64)$$

A.3.2 A bandeja de topo (n=2)

Considerando que a vazão de refluxo não é um líquido saturado, a vazão de líquido na seção de retificação da coluna será maior que a vazão de refluxo, e V_1 , o vapor que deixa a bandeja superior será menor do que o vapor subindo, V_2 . Então, o vapor que deixa a bandeja superior será dado pela seguinte relação:

$$V_1 = V_2 - R \frac{c_{pm} (T_2 - T_1)}{\lambda \lambda_m} \quad (65)$$

Onde: V_1 = Fluxo de vapor que deixa a bandeja de topo (mol/s);

V_2 = Fluxo de vapor que entra na seção de retificação da coluna (mol/s);

R = Vazão Refluxo (mol/s);

T_2 = Temperatura da bandeja de topo (°K);

T_1 = Temperatura do refluxo (°K);

C_{pm} = Calor específico da mistura (cal/mol °K)

λ_m = Calor latente da mistura (cal/mol).

O calor específico da mistura, Equação (66), é calculado:

$$C_{pm} = C_{pM_s} x + C_{pH_2O} (1 - x) \quad (66)$$

Onde: C_{pMe} = Calor específico do metanol (cal/mol K);
 C_{pH2O} = Calor específico da água (cal/mol K).

Fazendo um balanço de massa na bandeja de topo, conforme a Equação (67):

$$\frac{dM_2}{dt} = V_2 - V_1 - L_2 + R \quad (67)$$

Usando o balanço componente, obtemos a seguinte Equação (68) diferencial:

$$\frac{d(M_2 x_2)}{dt} = V_2 y_3 + R x_1 - L_2 x_2 - V_1 y_2 \quad (68)$$

Diferenciando em ambas as variáveis x_2 e M_2 , na Equação (68), temos:

$$x_2 \frac{dM_2}{dt} + M_2 \frac{dx_2}{dt} = V_2 y_3 + R x_1 - (V_1 y_2 + L_2 x_2) \quad (69)$$

Substituindo a Equação (67) da bandeja $n = 2$ na Equação (69), encontramos a variação do componente com o tempo, dada pela Equação (70):

$$\frac{dx_2}{dt} = \frac{(V_2(y_3 - x_2) - V_1(y_2 - x_2) + R(x_1 - x_2))}{M_2} \quad (70)$$

O fluxo de líquido que deixa a bandeja de topo, Equação (71), usando a constante de tempo calculada na seção A.2.4 é:

$$L_2 = \frac{1}{\tau} (M_2 - M_{O2}) \quad (71)$$

Onde: L_2 = fluxo de líquido que deixa a bandeja 2 (mol/s);

M_2 = retido molar na bandeja 2 (mol);

M_{O2} = retido estático na bandeja 2 (mol);

τ = constante de tempo hidráulica (s).

O retido estático, comum para cada bandeja é calculada usando as dimensões da bandeja e da densidade da mistura sobre a bandeja. A vazão de refluxo, R , é especificada como constante ou variável. A condição de vazão de refluxo constante é aplicado para a resposta em malha aberta, quando a temperatura da bandeja superior não é controlada. O fluxo de refluxo

variável é usada quando a coluna está sendo executado sob o controle da temperatura do topo proposto (SODRÉ, 1999).

A.3.3 Bandeja de alimentação ($n=7$)

Para a alimentação de líquido sub-resfriado na temperatura T_F , que está abaixo do ponto de bolha, o vapor que deixa a bandeja de alimentação será dado pela Equação (72):

$$V_2 = V_3 + F \left(\frac{c_{PF}(T_F - T_7)}{\lambda_F} \right) \quad (72)$$

Onde: V_2 = Vapor da seção de retificação (mol/s);

V_3 = Vapor da seção de esgotamento (mol/s);

F = Vazão de alimentação (mol/s);

T_F = Temperatura de alimentação(K);

T_7 = Temperatura da bandeja de alimentação (K);

c_{PF} = Calor específico da mistura de alimentação (cal/mol.K);

λ_F = Calor latente de vaporização (cal/mol)

Façamos então um balanço de massa nesta bandeja, $n=7$, conforme a Equação (73):

$$\frac{dM_7}{dt} = V_3 - V_2 + L_6 - L_7 + F \quad (73)$$

Aplicando um balanço componente na bandeja $n=7$, Equação (74):

$$\frac{d(M_7 x_7)}{dt} = L_6 x_6 + F x_F - V_2 y_7 + V_3 y_8 - L_7 x_7 \quad (74)$$

Diferenciando a Equação (74), temos:

$$x_7 \frac{dM_7}{dt} + M_7 \frac{dx_7}{dt} = L_6 x_6 + F x_F - V_2 y_7 + V_3 y_8 - L_7 x_7 \quad (75)$$

Substituindo a Equação (73) na Equação (75), encontramos a variação do componente com o tempo, Equação (76):

$$\frac{dx_7}{dt} = \frac{(V_3(y_8 - x_7) + V_2(x_7 - y_7) + L_6(x_6 - x_7) + F(x_f - x_7))}{M_7} \quad (76)$$

O líquido que deixa a bandeja de alimentação é calculado, Equação (77) pela relação:

$$L_7 = \frac{1}{\tau} (M_7 - M_{O_7}) \quad (77)$$

O fluxo de alimentação é constante durante todos os experimentos, exceto quando ocorre a coluna é submetida a um mudança programada é feita para verificar o seu desempenho.

A.3.4 Seção de retificação ($2 < n \leq 6$)

O fluxo de vapor da seção de Retificação é assumido como constante, e é igual V_2 calculado a partir da Equação (72). A variação no hold-up molar na seção de retificação é dada por meio do seguinte balanço de massa, Equação (78):

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n-1} - L_n \quad (78)$$

Seguindo o mesmo procedimento usado da bandeja topo e na alimentação, a equação de balanço componente da seção de retificação Equação (79), foi encontrada:

$$\frac{dx_n M_n}{dt} = L_{n-1} x_{n-1} - L_n x_n + V_2 y_{n+1} - V_2 y_n \quad (79)$$

A diferenciação das variáveis x_n e M_n na Equação (79) nos dá a Equação (80):

$$M_n \frac{dx_n}{dt} + x_n \frac{dM_n}{dt} = L_{n-1} x_{n-1} - L_n x_n + V_2 y_{n+1} - V_2 y_n \quad (80)$$

Substituindo a Equação (78) na Equação (80) obtemos, a Equação (81) o balanço componente:

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{(V_2 (y_{n+1} - y_n) + L_{n-1} (x_{n-1} - x_n))}{M_n} \quad (81)$$

Seguindo o mesmo procedimento da Equação (78), o fluxo de líquido da seção de retificação é calculada por meio da seguinte Equação:

$$L_n = \frac{1}{\tau} (M_n - M_{O_n}) \quad (82)$$

A.3.5 Seção de esgotamento (*Stripping*) ($8 \leq n \leq 10$)

Na seção de esgotamento o fluxo de vapor é considerado constante e é igual V_3 , calculado a partir da Equação (72) gerado no refeededor.

Fazendo um balanço de massa, Equação (83):

$$\frac{dM_n}{dt} = L_{n-1} - L_n \quad (83)$$

No estado transiente, ocorrem variações do *hold-up* e da composição molar, conforme o balanço abaixo:

$$\frac{d(x_n M_n)}{dt} = L_{n-1} x_{n-1} - L_n x_n + V_3 y_{n+1} - V_3 y_n \quad (84)$$

Diferenciando ambas as variáveis da Equação (84), encontramos a Equação (85):

$$M_n \frac{dx_n}{dt} + x_n \frac{dM_n}{dt} = L_{n-1} x_{n-1} - L_n x_n + V_3 y_{n+1} - V_3 y_n \quad (85)$$

Substituindo a Equação (83) na Equação (85), o balanço componente da seção de esgotamento, Equação (86), é encontrado:

$$\frac{dx_n}{dt} = \frac{(V_3(y_{n+1} - y_n) + L_{n-1}(x_{n-1} - x_n))}{M_n} \quad (86)$$

A dinâmica de fluxo de líquido é calculada após a integração do balanço de massa, Equação (83), usandoo mesmo procedimento para a Equação (71), encontra-se:

$$L_n = \frac{1}{\tau} (M_n - M_{On}) \quad (87)$$

A.3.6. Bandeja de base da coluna ($n=11$)

Fazendo um balanço de massa na bandeja de base, tem-se:

$$\frac{dM_{11}}{dt} = L_{10} - L_{11} \quad (88)$$

Realizando um balanço de massa componente na base da coluna encontra-se a seguinte equação diferencial:

$$\frac{d(x_{11}M_{11})}{dt} = x_{10}L_{10} - x_{11}L_{11} + V_3y_{12} - V_3y_{11} \quad (89)$$

Diferenciando a Equação (89), em relação a ambas variáveis x_{11} e M_{11} , têm-se:

$$M_{11} \frac{dx_{11}}{dt} + x_{11} \frac{dM_{11}}{dt} = L_{10}x_{10} - L_{11}x_{11} + V_3y_{12} - V_3y_{11} \quad (90)$$

Substituindo a Equação (88) na Equação (90), dando balanço componente:

$$\frac{dx_{11}}{dt} = \frac{(L_{10}(x_{10} - x_{11}) + V_3(y_{12} - y_{11}))}{M_{11}} \quad (91)$$

O fluxo de líquido que deixa a bandeja $n=11$ é calculado da mesma maneira como obtido na Equação (71), resultando em:

$$L_{11} = \frac{1}{\tau} (M_{11} - M_{o11}) \quad (92)$$

A.3.7 O refeedor ($n=12$)

O calor de entrada do refeedor é estimado utilizando o fluxo de vapor medido. Cada posição da válvula de controle do vapor indica a quantidade de vapor gerada ao refeedor e, portanto, de vapor condensado produzido. A pressão de vapor na linha é conhecida e, portanto, também a sua temperatura de saturação e o calor latente de condensação, λ_{vapor} . A entrada de calor para o refeedor é dada por:

$$H_{\text{re}} = M_{\text{cond}}\lambda_s \quad (93)$$

Onde: λ_s = Calor latente do vapor (cal/mol);

H_{re} = Calor de entrada para o refeedor;

M_{cond} = Condensado dos tubos do refeedor (Kg/min);

Dividindo este calor de entrada pelo calor latente da mistura, o fluxo de vapor que deixa o refeedor é encontrado:

$$V_3 = \frac{H_{re}}{\lambda_{re}} \quad (94)$$

Onde: V_3 = Vapor que sai do refeedor;

λ_{re} = Calor latente da mistura no refeedor.

Realizando um balanço de massa no refeedor:

$$\frac{dM_{12}}{dt} = L_{11} - L_{12} \quad (95)$$

Usando um balanço componente, temos:

$$\frac{d(x_{12}M_{12})}{dt} = x_{11}L_{11} - x_{12}L_{12} - V_3y_{12} \quad (96)$$

Diferenciando ambas as variáveis na Equação (96), temos:

$$M_{12}\frac{dx_{12}}{dt} + x_{12}\frac{dM_{12}}{dt} = x_{11}L_{11} - x_{12}L_{12} - V_3y_{12} \quad (97)$$

Substituindo a Equação (95) na Equação (97) resulta no balanço componente:

$$\frac{dx_{12}}{dt} = \frac{(L_{11}(x_{11} - x_{12}) - V_3x_{12})}{M_{12}} \quad (98)$$

O fluxo de líquido que deixa o refeedor é calculado utilizando a fórmula de Francis, Equação (49). O fluxo de vapor pode ser constante, quando não há controle da temperatura na base da coluna, ou variável quando está é usada como variável manipulada no controle da temperatura da base.

A.3.8 Transbordamento (*Overflow*) do refeedor ($n = 13$)

Realizando um balanço de massa:

$$\frac{dM_{13}}{dt} = L_{12} - B \quad (99)$$

Em um balanço componente a seguinte Equação (100) diferencial é encontrada:

$$\frac{d(x_{13}M_{13})}{dt} = x_{12}L_{12} - x_{13}B \quad (100)$$

Diferenciando ambas as variáveis da Equação (100), x_{13} e M_{13} , resulta em:

$$\frac{M_{13}dx_{13}}{dt} + \frac{x_{13}dM_{13}}{dt} = x_{12}L_{12} - x_{13}B \quad (101)$$

Substituindo a equação (99) na Equação (101):

$$\frac{dx_{13}}{dt} = \frac{L_{12}(x_{12} - x_{13})}{M_{13}} \quad (102)$$

No estado estacionário $x_{12} = x_{13}$.

A.3.9. A Composição de vapor

Todo os balanços materiais e componentes são equações de estado diferenciais e descrevem o comportamento dinâmico da coluna de destilação. O conjunto de equações diferenciais ordinárias foram integradas numericamente usando o método de Euler, com passo de integração $\Delta t = 0,02$. Além destas equações, cada bandeja e o refeedor tem uma equação de equilíbrio dada pela a lei de Raoult, Equação (54). As composições líquidos são obtidas para cada passo de tempo a partir da equação de componentes e as composições de vapor equivalentes são calculados usando também a Equação (54).

A.3.10 Densidade da mistura

A densidade é assumida como constante em cada bandeja, no entanto, densidades diferentes são usadas ao longo da coluna descrita pela seguinte relação:

$$\rho_n = \rho_{Me}x_n + \rho_{H_2O}(1 - x_n) \quad (103)$$

Onde: ρ_{Me} = Densidade do Metanol;

ρ_{H_2O} = Densidade da água;

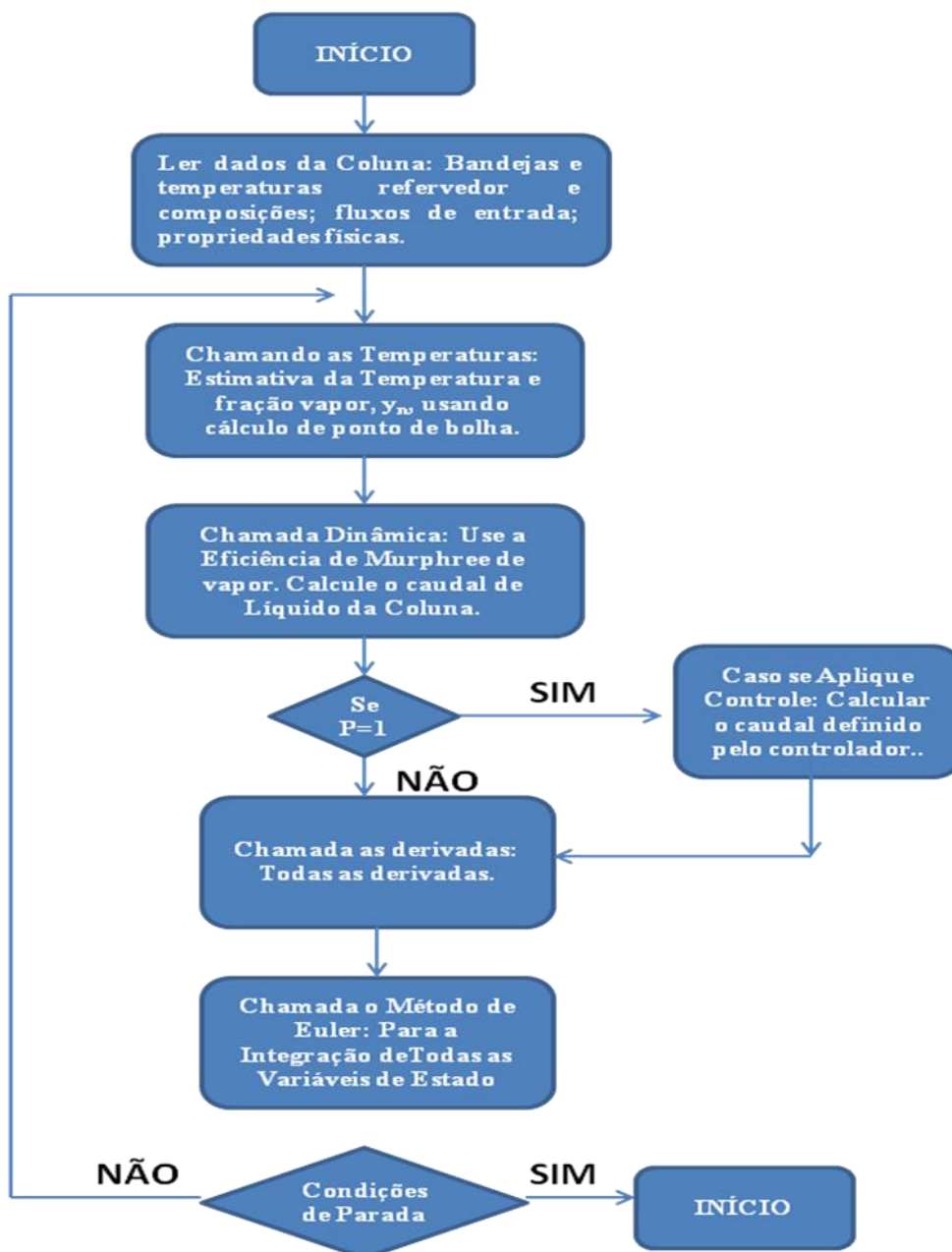
A.4 Validação do modelo matemático da coluna

Um programa de computador foi inicialmente escrito em FORTRAN, o qual foi desenvolvido, por SODRÉ (1999), para resolver o sistema de equações. Neste trabalho este modelo foi revalidado e as curvas de respostas obtidas são mostradas no Capítulo 3, os dados foram armazenados em arquivos do *software* MATLAB®, com um tempo de impressão de $t_{print} = 60s$, onde o modelo estacionário foi obtido quando todas as equações diferenciais foram igualadas a zero.

Os dados de entrada do modelo são: a estimativa inicial para todas as bandejas, as temperaturas refeedor e fração molar do componente mais volátil; composição e vazão de alimentação, número de bandejas, número bandeja de alimentação, número de bandejas nas seções de retificação e *stripping*; hold-up inicial de cada bandeja, refeedor e condensador; calores de vaporização; peso molecular e eficiência Murphree em cada bandeja. O método de Newton Raphson é usado para convergência de temperatura.

A Figura A.4 fornece o algoritmo de simulação da coluna, o programa em FORTRAN, bem como a descrição de todas as sub-rotinas, que podem ser vistas no **APÊNDICE B** do trabalho de SODRÉ (1999).

Figura A.3 Rotina de programação do modelo da coluna de destilação em estudo.



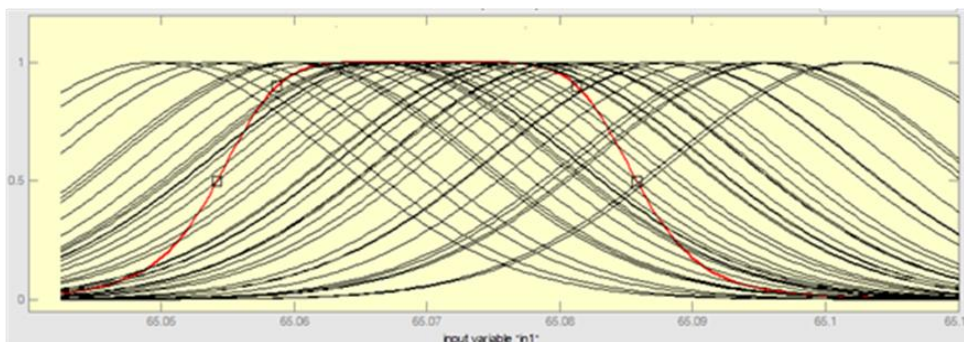
Fonte: SODRÉ (1999).

APÊNDICE B

RELAÇÃO DAS FUNÇÕES DE PERTINÊNCIAS E REGRAS GERADAS PELO SISTEMA

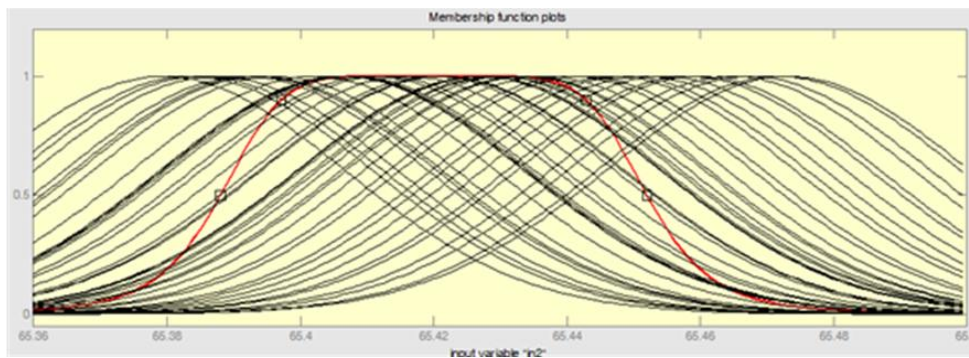
As funções pertinências das 18 entradas e única saída (composição) podem ser vista pela Figura 7.4. de a) a q).

a) Função de Pertinência da variável de entrada T_1 .



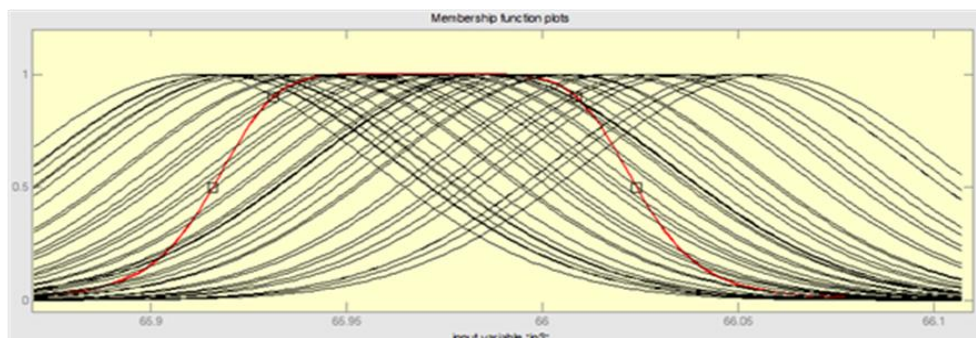
Fonte: AUTOR (2010).

b) Função de Pertinência da variável de entrada T_2 .



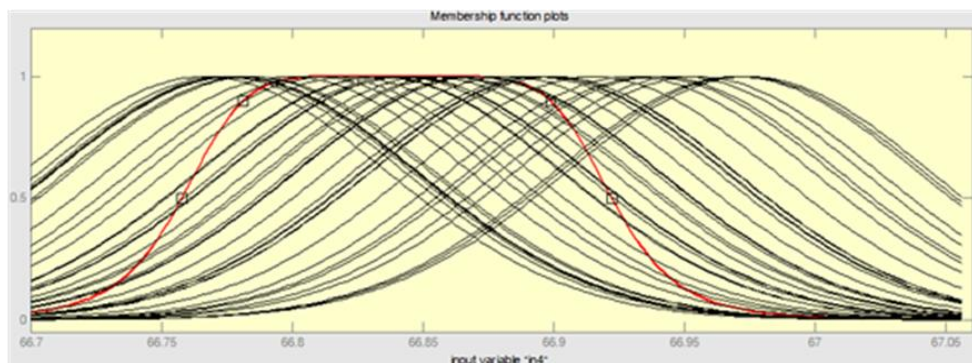
Fonte: AUTOR (2010).

c) Função de Pertinência da variável de entrada T_3 .



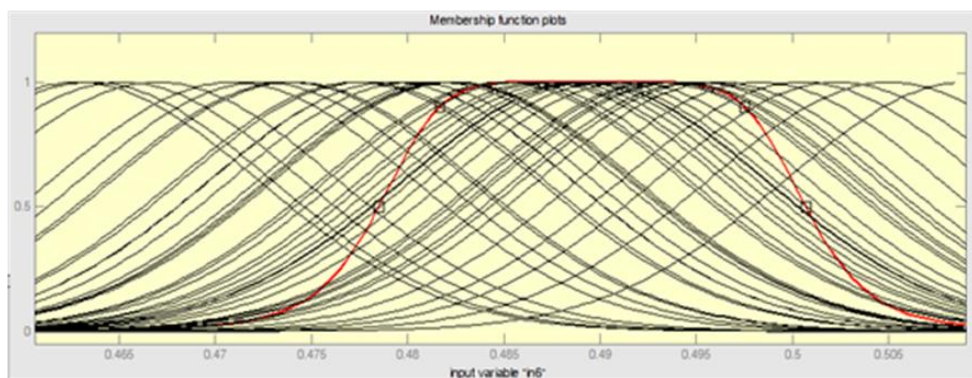
Fonte: AUTOR (2010).

d) Função de Pertinência da variável de entrada T_4 .



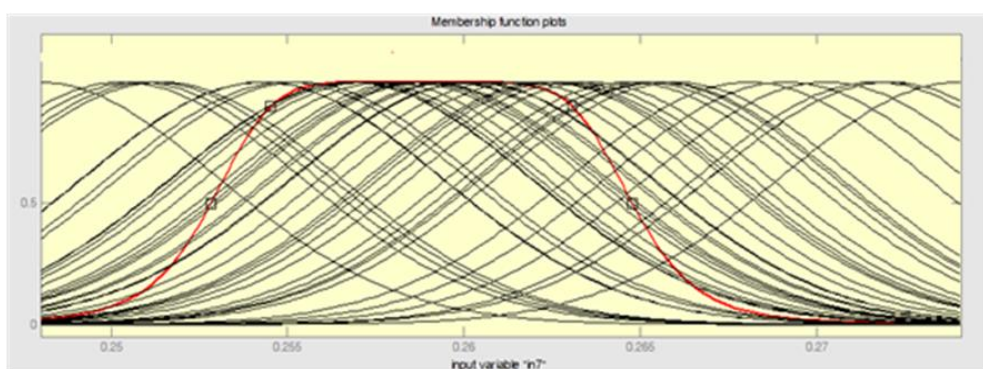
Fonte: AUTOR (2010).

e) Função de Pertinência da variável de entrada T_5 .



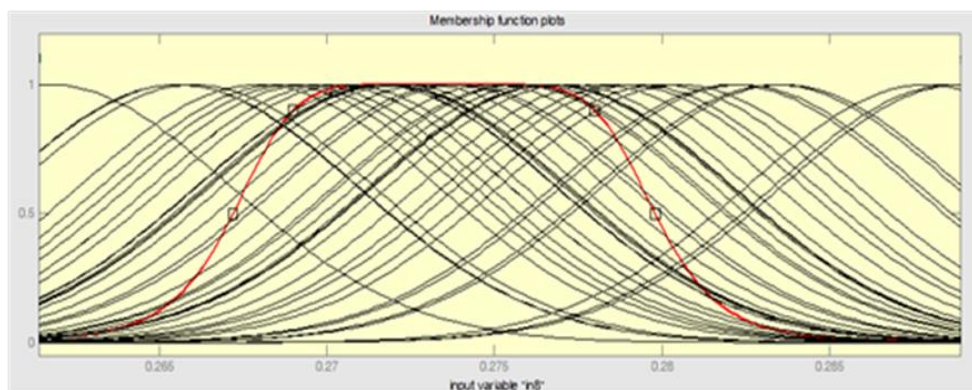
Fonte: AUTOR (2010).

f) Função de Pertinência da variável de entrada Q_R .



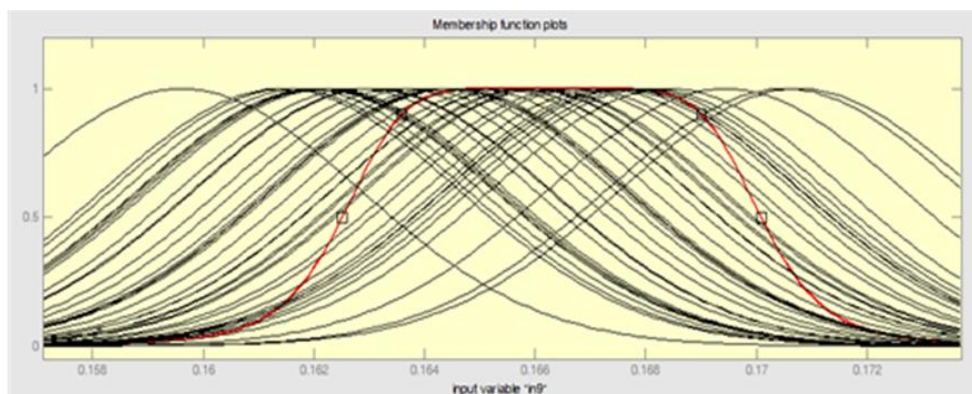
Fonte: AUTOR (2010).

g) Função de Pertinência da variável de entrada R.



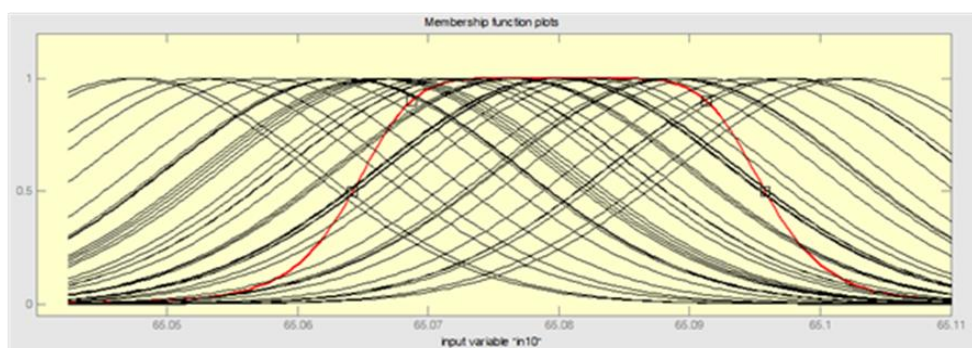
Fonte: AUTOR (2010).

h) Função de Pertinência da variável de entrada x_f .



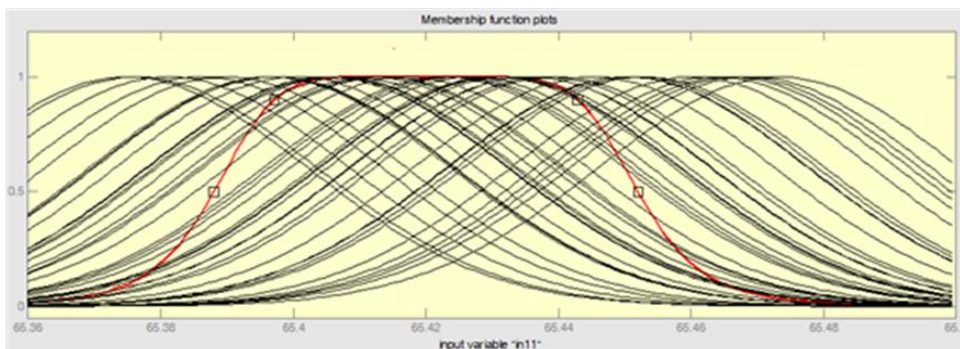
Fonte: AUTOR (2010).

i) Função de Pertinência da variável de entrada F_L .



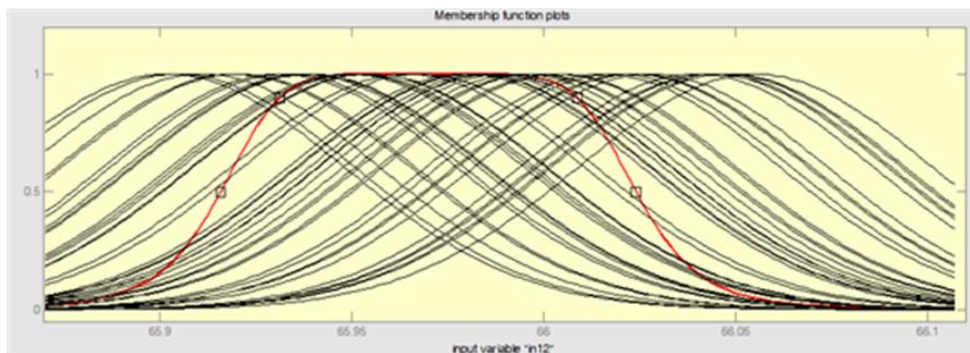
Fonte: AUTOR (2010).

j) Função de Pertinência da variável de entrada $T_{1(T-1)}$.



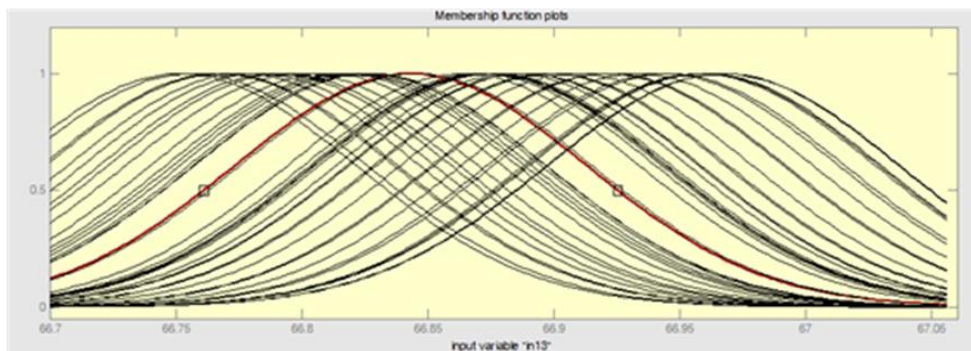
Fonte: AUTOR (2010).

k) Função de Pertinência da variável de entrada $T_{2(T-1)}$.



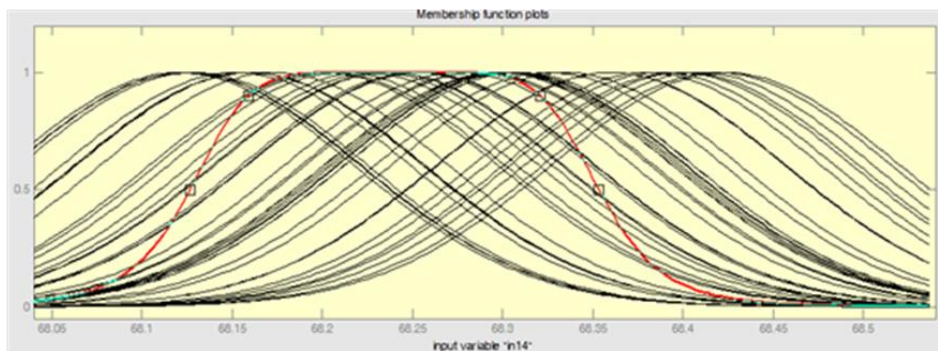
Fonte: AUTOR (2010).

l) Função de Pertinência da variável de entrada $T_{3(T-1)}$.



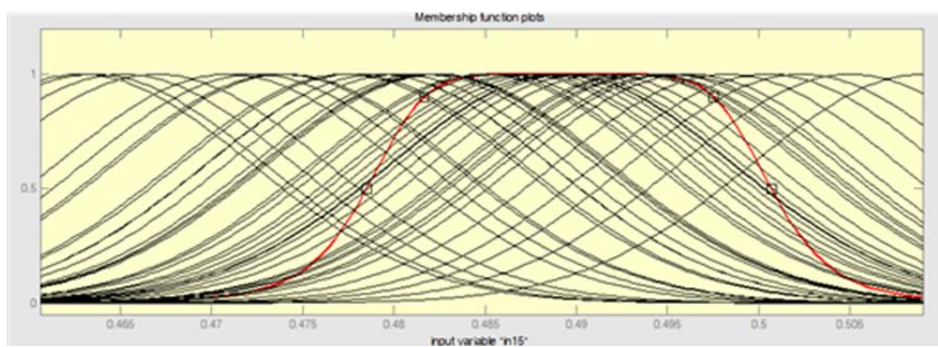
Fonte: AUTOR (2010).

m) Função de Pertinência da variável de entrada $T_{4(T-1)}$.



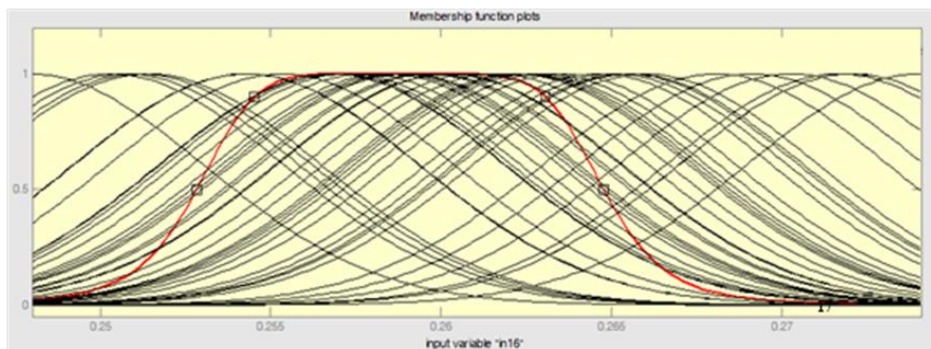
Fonte: AUTOR (2010).

n) Função de Pertinência da variável de entrada $T_{5(T-1)}$.



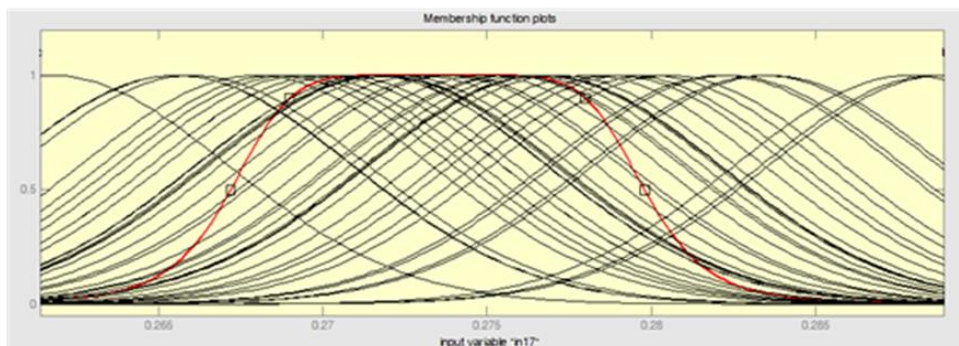
Fonte: AUTOR (2010).

o) Função de Pertinência da variável de entrada $Q_{R(T-1)}$.



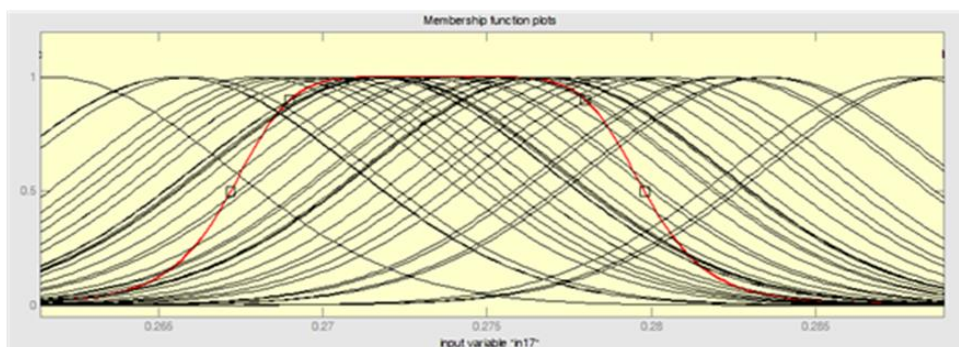
Fonte: AUTOR (2010).

p) Função de Pertinência da variável de entrada $R_{(T-1)}$.



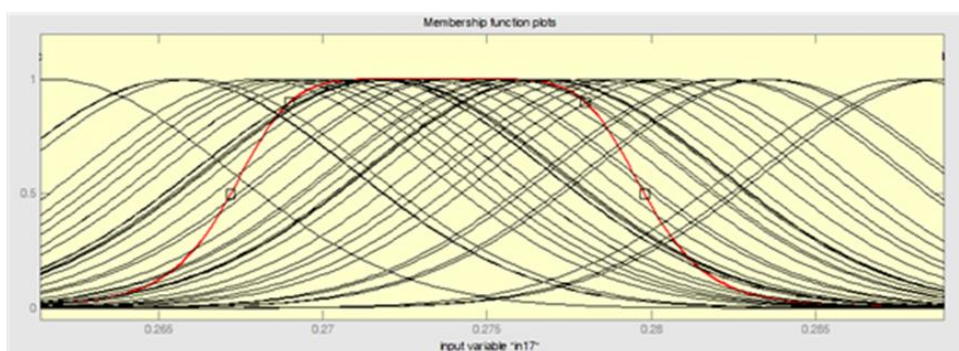
Fonte: AUTOR (2010).

q) Função de Pertinência da variável de entrada $X_{F(T-1)}$.



Fonte: AUTOR (2010).

r) Função de Pertinência da variável de entrada $F_{L(T-1)}$.



Fonte: AUTOR (2010)