



ANÁLISE TRANSIENTE E ESTIMATIVA DE VARIÁVEIS CRÍTICAS EM UMA COLUNA INDUSTRIAL DE ALTA PUREZA UTILIZANDO REDES NEURAS ARTIFICIAIS

Arioston Araújo de Moraes Júnior

Jéssica Oliveira de Brito Lira

aamj@ct.ufpb.br

jessicalira23@hotmail.com

Universidade Federal da Paraíba, Centro Tecnologia, Campus Universitário I, 58051-900,
João Pessoa, Paraíba, Brasil

Romildo Pereira Brito

brito.romildo@outlook.com

Universidade Federal de Campina Grande

Av. Aprígio Veloso, 882, 58429-140, Paraíba, Campina Grande, Brasil

Abstract. *Colunas de destilação de alta pureza apresentam diversas características inerentes, dentre as quais se destacam as não linearidades, o longo tempo de resposta e a presença de distúrbios não diretamente mensuráveis. Para superar essas e outras dificuldades, nesse trabalho é proposta um estudo sistemático sobre o comportamento transiente de uma coluna de destilação industrial de alta pureza (processo do 1,2-Dicloroetano), propondo melhorias desde a construção do modelo matemático e termodinâmico, validação (simulação) e estudo sobre os efeitos das principais variáveis do processo. Esse estudo é a base para construção de modelos de inferência, sensores virtuais baseados em redes neurais artificiais (RNA), para estimativa dos teores de compostos considerados críticos no processo, concentrações do Tetracloreto de Carbono (CCl_4) e Clorofórmio (CHCl_3), ambos na corrente de base da coluna. Nesse contexto é utilizado um algoritmo de seleção de variáveis, baseado em estatística multivariável, através de regressão linear múltipla (MLR) e análise de componentes principais (PCA). Os resultados obtidos nos trazem diversas conclusões, tanto do ponto de vista do controle em colunas de alta purezas quanto da seleção de variáveis (regressores), além das avaliações sobre as estimativas do modelo de inferência gerado pelas redes neurais artificiais.*

Keywords: Coluna de destilação, Compostos críticos, Alta pureza, Rede neurais artificiais.

1 INTRODUÇÃO

Em processos de destilação, bem como em diversos outros processos químicos, as industriais modificam e melhoram suas tecnologias quando são requeridas em aumentar sua produção, condições efetivas de segurança, seus índices de eficiência e a qualidade final do produto. Nesse contexto, a importância de um acompanhamento para um grande conjunto de variáveis críticas de processos utilizando dispositivos de medição adequados é evidente.

Com esse e outros objetivos são efetuadas medições de variáveis físicas, garantidas de maneira satisfatória com o uso de inúmeros sensores físicos, como exemplos, destacam-se os termômetros e termopares na medição de temperatura, o tubo de Bourdon na leitura de pressão, a placa de orifício e rotâmetros para medição de vazão, sensores de pressão diferenciais e flutuantes para medição nível, dentre outros. Por outro lado, quando se deseja medir em tempo real variáveis químicas e bioquímicas não facilmente mensuráveis, tais como teor ou composição de produtos, biomassa e pH, então surge o problema de como fazer tais medições. Segundo Fortuna et al. (2007), para resolver essa e outras dificuldades foi que surgiram então o soft sensor, também conhecido como Sensor Virtual (SV) ou Modelo Inferencial (MI).

A gama de tarefas a serem cumpridas pelos sensores virtuais é ampla, onde a sua área original de aplicação e, ainda, a mais dominante é, com certeza, a predição de variáveis de processos, que podem ser determinadas a um baixo tempo/período de amostragem ou somente através de análises off-line. Nestes casos, o SV pode ser uma boa alternativa em relação às medições tradicionais, desde que as variáveis de entradas (secundárias) possam ser fornecidas/medidas sem problemas e quando a simulação é utilizada para gerar os dados à construção do sensor, geralmente implementada em um software, seja capaz de fornecer a variável desejada de forma precisa.

Um dos produtos de maior valor agregado da cadeia produtiva do Policloreto de Vinila (PVC) é o 1,2 Dicloroetano (1,2-DCE), matéria-prima básica para a produção do Monocloreto de Vinila (MVC). O 1,2-DCE para ser convertido no MVC, através do craqueamento térmico, deve estar seco e livre de impurezas e, por isso, passa por um processo de destilação com o intuito de remover as impurezas.

Contribuições com a análise transiente e a estimativa dessas impurezas, produtos de base no processo de destilação do 1,2-Dicloroetano, se mostram adequadas para construção de uma metodologia de desenvolvimento de sensores virtuais, haja vista que os valores das concentrações dessas variáveis (impurezas) são altamente críticos no processo e obtidos apenas por medições off-line (análises de laboratório).

As Redes Neurais Artificiais (RNA), inseridas na área de sistemas inteligentes ou inteligência artificial, são bastante atraentes para construção de sensores virtuais, haja vista que sempre que se deseja modelar processos complexos, sem a necessidade do conhecimento fenomenológico do processo, com grandes conjuntos de dados de entrada-saída e para substituir modelos que são demasiadamente complicados para resolver em tempo real, ela demonstra ter diversas habilidades (Haykin, 2001).

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver uma metodologia de construção de sensores virtuais para o processo de destilação do 1,2-Dicloroetano (1,2-DCE). As dificuldades de estimativas em tempo real e controle das impurezas de base, que são as composições do

tetracloroeto de carbono, CCl_4 , (mantido em torno de 3000 ppm) e do clorofórmio, CHCl_3 , (mantido abaixo de 400 ppm), motivaram e o tornaram o processo como estudo de caso nesse trabalho.

Raríssimos trabalhos, durante o desenvolvimento desse artigo, foram encontrados sobre qual critério deve ser utilizado na seleção de variáveis para compor as entradas de um sensor virtual “*soft sensor*” em colunas de alta pureza, se realmente as temperaturas e pressões com baixas variações devem ser incluídas no modelo de inferência e, principalmente, não foi encontrado nenhum trabalho que tinha como objetivo estimar compostos contaminantes (diluídos) em processos de alta pureza. Além disso, a maioria dos trabalhos encontrados na literatura foram aplicados em processos binários, com limitações termodinâmicas menores do que em processos multicomponentes.

1.1 Sensores Virtuais (Soft Sensors)

O desenvolvimento acelerado de métodos modernos em aspectos de monitoramento e no controle automático de processos proporcionam diversos benefícios às plantas industriais. Novos desafios estão constantemente focados no desenvolvimento da teoria de controle, métodos de identificação, atuadores modernos, sensores inteligentes e na possibilidade de se aplicar métodos avançados.

Ao mesmo tempo, espera-se que as plantas industriais apresentem maior eficiência e obedeçam as leis que estabelecem limites firmes de qualidade dos produtos e de emissões de poluentes. Como resultado, um número maior de variáveis de processos necessita ser supervisionada com instrumentos de medições adequados. Entretanto, quando se deseja medir variáveis químicas e bioquímicas, não facilmente mensuráveis, tais como composição de produtos, biomassa, pH, dentre outras, a disponibilidade desses sensores específicos com medições em tempo real é muito escassa ou até inexistente. Outro problema está associado à previsão de falhas em medições efetuadas por sensores físicos como, por exemplo, de temperatura, pressão, vazão e nível, seja pela sua quebra ou retirada temporária para manutenção e calibração (Zamproga et al.; 2005)

Segundo Fortuna et al. (2007), para resolver essas e outras dificuldades foi então que surgiu a tecnologia dos “Soft Sensors”, neste trabalho será utilizada a nomenclatura de “Sensor Virtual (SV)”. Conceitualmente um sensor virtual é um modelo matemático, implementado em software, 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 (Morais JR, 2011).

As características requeridas para os dados a serem utilizados na geração da inferência confundem-se com a natureza e as características deste modelo ou algoritmo, e também das variáveis integrantes do mesmo. A coleta dos dados dessas variáveis secundárias é a uma das fases mais importantes na obtenção da inferência, pois se os dados forem ruins, os sensores virtuais também serão ruins.

Nesse trabalho os dados obtidos para construção do sensor virtual são provenientes da modelagem matemática e simulação nos regimes estacionário e dinâmico do processo, sendo o processo ajustado e validado com dados reais de uma planta de uma indústria petroquímica. Quando a simulação do modelo do processo é utilizada para geração dos dados do sensor virtual, cujas entradas para este modelo são outras variáveis de controle medidas, saídas da planta e distúrbios mensuráveis, uma configuração representativa é mostrada de acordo com a Figura 1.

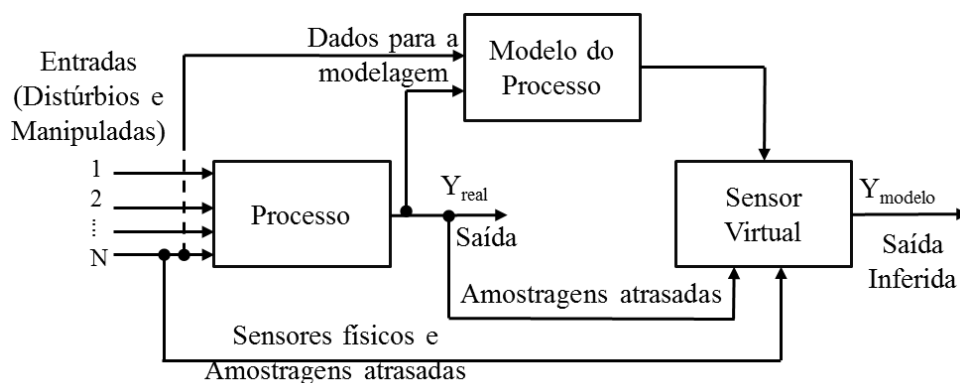


Figura 1. Sensor virtual com entradas fornecidas por um modelo matemático do processo.

Foi incluído no trabalho um estudo sobre seleção de variáveis com técnicas de análise estatística multivariável, haja vista que a seleção de variáveis a serem efetivamente utilizadas no modelo não pode ser feita apenas baseada em aspectos teóricos.

1.2 Objeto de Estudo (Processo de purificação do 1,2-DCE)

A conversão do 1,2-DCE para produção do Monômero Cloreto de Vinila (MVC) através do craqueamento térmico, exige que o 1,2-EDC deva estar seco (teor água menor que 10 ppm), a fim de evitar a corrosão excessiva dos equipamentos.

Além disso, essa corrente deve ter uma alta pureza, tipicamente maior que 99,5 % (peso/peso), haja vista que o processo de craqueamento é altamente suscetível à inibição e deposição por traços de impurezas. Segundo MCPerson et al. (1979), a presença de contaminantes nesse processo pode acarretar diversos efeitos, dentre os quais se destacam:

- ❖ A reação pode ser inibida parcialmente, proporcionando uma redução da conversão e instabilidade do processo à jusante;
- ❖ Acelera a formação de coque sobre as paredes do tubo das fornalhas de craqueamento, o que causa a parada prematura do equipamento para a remoção do coque por oxidação.

No processo em estudo, a purificação do 1,2-EDC é realizada em um conjunto de três torres de destilação, conforme fluxograma da Figura 3, com o objetivo de remover água e compostos orgânicos (ou Orgânicos Clorados - OC) de alto e baixo ponto de ebulição em relação ao 1,2-EDC.

A alimentação da torre 1 (também chamada de coluna de secagem), da sequência de três torres, é composta por 98 a 99% de 1,2-EDC saturado em água (H₂O), além de outras substâncias orgânicas cloradas. Apesar de ser menos volátil do que os compostos orgânicos clorados considerados, a H₂O sai pelo topo da coluna de secagem devido à inversão da volatilidade relativa, principalmente, na região acima da primeira alimentação da coluna (F₁).

A corrente de base da coluna de secagem, torre 1, segue para a torre 2 (coluna de destilação propriamente dita), a qual também é alimentada pela corrente de base de outra coluna de destilação oriunda da recuperação do 1,2-DCE do craqueamento e pela corrente de topo da torre 3 (coluna a vácuo). A torre 3 tem como objetivo produzir uma corrente de topo isenta de componentes pesados para alimentar as fornalhas de craqueamento.

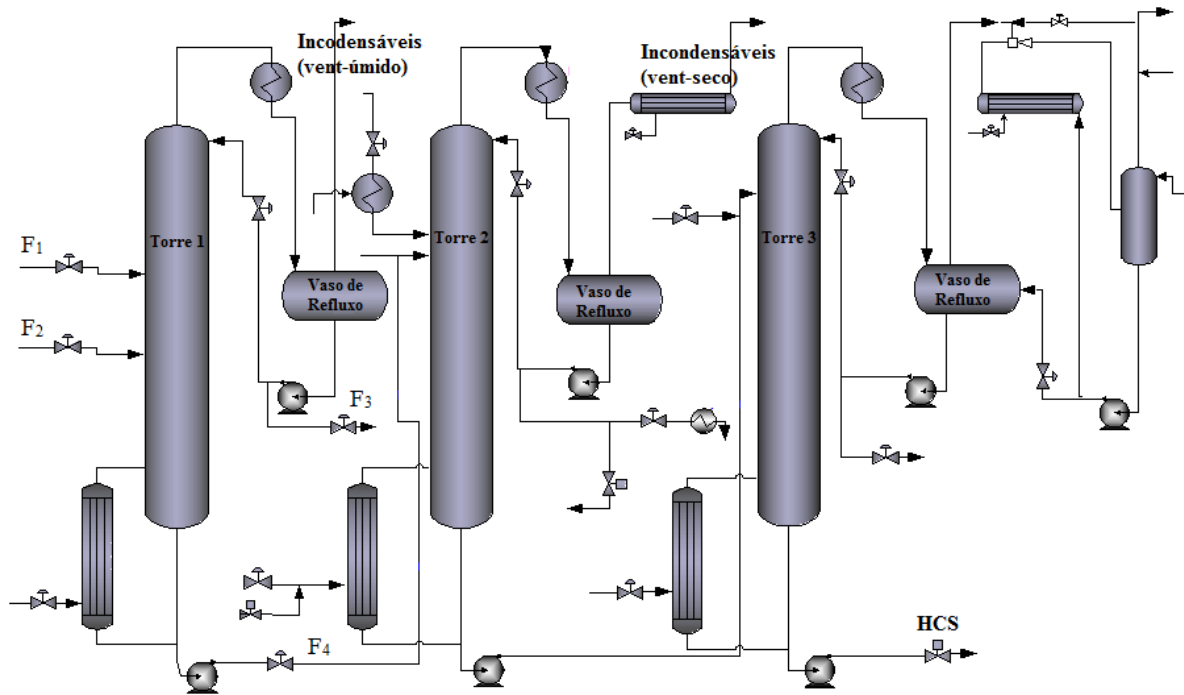


Figura 3. Fluxograma esquemático do processo de purificação do 1,2-EDC.

Devido ao seu efeito catalítico no processo de craqueamento, a presença do Tetracloreto de Carbono (CCl_4) numa determinada concentração, quando bem controlada, é desejável. Já a presença de CHCl_3 não é desejável, haja vista que o mesmo é um promotor de coqueamento (coque). Este componente é indesejável em concentrações maiores que 400 ppm na base da Torre 1, sem mencionar que a maior parte da composição do produto de topo da mesma coluna é composta por esse componente. Vale salientar que todo CHCl_3 e CCl_4 que alimentam a Torre 2 saem na corrente de topo, de modo que a definição quanto á quantidades desses componentes deve ser tomada antes da Torre 2, ou seja, na base da torre 1.

Logo, um controle ótimo e uma estimativa em tempo real das concentrações desses componentes na saída da torre 1 trará diversos benefícios ao processo, haja vista que atualmente técnicas tradicionais de medição como cromatografia gasosa e analisador em linha não atendem de forma satisfatória ao objetivo de estimar e controlar em tempo real a composição dessas variáveis.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Modelagem Matemática de Processos de Separação por Estágios

Uma vez que o modelo fenomenológico do processo é ajustado para o objetivo em questão, construção do sensor virtual, seus resultados tendem a ser confiáveis mesmo quando se faz extrapolações. Aqui são apresentadas as principais equações do modelo matemático e termodinâmico, utilizadas para as simulações do regime estacionário e dinâmico da coluna de destilação do processo de purificação do 1,2-Dicloroetano; onde o cálculo preciso de uma coluna de destilação multicomponente requer a determinação rigorosa da temperatura, das vazões, composições das correntes e da taxa de transferência de calor em cada estágio. Esta determinação é alcançada através da resolução do balanço material, do balanço de energia e das relações de equilíbrio para cada estágio.

Considerando uma coluna de destilação com N estágios, enumerados de cima para baixo, o esquema representativo de um prato j é mostrado conforme a Figura 2. A alimentação entrando no estágio j pode ser um líquido, um vapor ou uma mistura de líquido e vapor. O sinal da carga térmica Q será negativo se o calor estiver sendo retirado do prato e positivo caso contrário. Nesse modelo matemático entra no estágio j uma alimentação com uma ou duas fases de fluxo molar F_j , com composição global $z_{i,j}$ de um componente i, temperatura T_{Fj} , pressão P_{Fj} , e entalpia molar global h_{Fj} . Assume-se que a pressão da alimentação é igual ou maior do que a pressão do estágio P_j . A diferença de pressão ($P_F - P_j$) pode ser reduzida à zero através de uma válvula F.

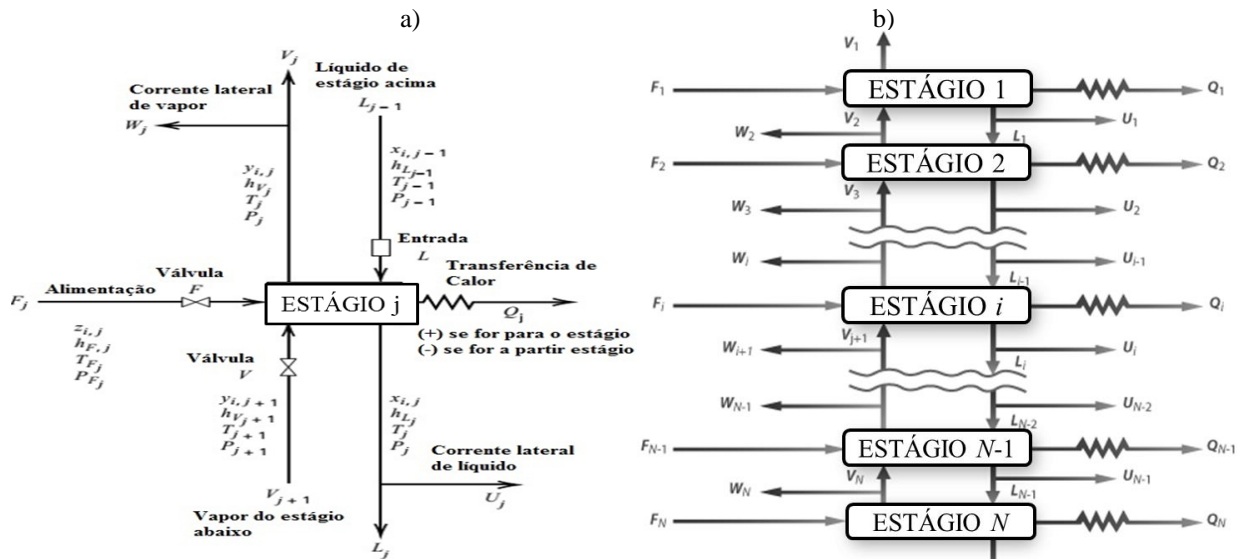


Figura 2. a) Representação de um estágio de equilíbrio em estado estacionário. b) Esquema em cascata de separação por estágios.

Calor é transferido a uma taxa Q, para simular no estágio interresfriadores, interaquecedores, condensadores e refeedores. Associado a cada estágio teórico temos a seguinte relação de equações expressas em termos do conjunto de variáveis da Figura 3. Estas equações são conhecidas como equações MESH e são:

M – Balanço material para cada componente, C equações para cada estágio, Equação (1):

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_jz_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad (1)$$

E – Equações de Equilíbrio, C equações para cada estágio, Equação (2):

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (2)$$

Onde $K_{i,j}$ é a razão das constantes de equilíbrio de fases.

S – Somatório das frações molares dos componentes, fase vapor e líquida, respectivamente, uma para cada estágio, dada pelas Equações (3) e (4):

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^C y_{i,j} - 1 = 0 \quad (3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^C x_{i,j} - 1 = 0 \quad (4)$$

H – Balanço de Energia para cada estágio (dado pela Equação (5)):

$$H_{i,j} = L_{j-1}h_{L_{j-1}} + V_{j+1}h_{V_{j-1}} + F_j h_{F_j} - (L_j + U_j)h_{L_j} - (V_j + W_j)h_{V_j} + Q_j = 0 \quad (5)$$

As energias cinéticas e potenciais são desprezadas. Uma equação de balanço material geral pode ser usada no lugar das Equações (3) e (4), $\sum_{i=1}^j z_{i,j} = 1$, somando com a Equação (1) para todos os componentes e estágios acima do 1 através de j , tem-se então a Equação (6):

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (6)$$

Em geral, $K_{i,j} = K_{i,j}\{T_j, P_j, x_j, y_j\}$, $h_{V_j} = h_{V_j}\{T_j, P_j, y_j\}$ e $h_{L_j} = h_{L_j}\{T_j, P_j, x_j\}$. Se estas relações não são contadas como equações e estas três propriedades não são contadas como variáveis, cada estágio de equilíbrio é definido unicamente por $2C + 3$, $C =$ Compostos, equações MESH.

Na resolução estacionária do modelo o termo de acúmulo das Equações (1), (2) e (6) são iguais a zero, resultando em um conjunto de equações algébricas não lineares. Assim, os simuladores necessitam de uma técnica iterativa para encontrar o valor da variável dependente com o objetivo de satisfazer o valor desejado para a variável especificada. O simulador Aspen PlusTM, aqui empregado, utiliza a técnica *inside-out* para promover essa convergência das Equações MESH.

Ao serem considerados os termos de acúmulos de massa e energia em cada prato nas equações MESH, temos então o modelo dinâmico de estágio de equilíbrio da coluna de destilação multicomponente. O método de integração utilizado para solução numérica no simulador Aspen DynamicsTM é o de Euler implícito com passo variável, o qual combina a vantagem de velocidade convergência desse método com a robustez de integradores de passos variáveis.

2.2 Redes Neurais Artificiais para Estimativa de Variáveis em Processos Químicos

Muitas das técnicas, para a construção de sensores virtuais, estão amplamente disponíveis e a seleção de métodos adequados é dependente do comportamento dinâmico do processo específico e adequação prática ao modelo de aplicação. Esses modelos podem ser formulados pelas teorias das equações dos princípios de conservações, chamadas de modelagem caixa branca (white-box) ou de primeiros princípios (FPM), pelas abordagens empíricas através de identificação caixa preta (modelos black-box), ou ainda, utilizando os modelos por analogia caixa cinza (green-box).

As diversas características positivas quando se utilizam Redes Neurais Artificiais (RNA) em processos não lineares, por exemplo, a adaptação por experiência, a capacidade de aprendizado, a habilidade de generalização, organização dos dados, tolerância a falhas, armazenamento distribuído, dentre outras; motivaram o emprego dessa técnica nesse trabalho. Uma rede neural artificial consiste em um conjunto de neurônios artificiais interligados por conexões sinápticas, ela está inserida dentro de uma área conhecida como sistemas inteligentes (conexionistas) ou inteligência computacional (Himmelblau, 2008).

Diversos tipos de função de ativação, diferenciáveis e não diferenciáveis, são testadas no estudo, que tem como principal objetivo limitar a saída do neurônio dentro de um intervalo de valores razoáveis a serem assumidos pela sua própria imagem funcional.

As arquiteturas de RNA alimentadas adiante com múltiplas camadas (*Multilayer Feedforward Networks*) são aplicadas nesse trabalho na estimativa de concentrações; Elas são comumente chamadas de MLP ou MPC (*Multilayer Perceptron*) são as mais difundidas na literatura, principalmente para o objetivo de inferência de variáveis, sua arquitetura pode ser vista na Figura 3.

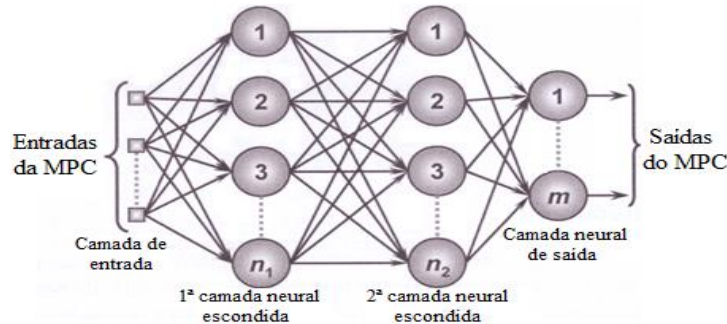


Figura 3. Rede MLP multicamadas.

As principais características das RNA foram definidas e avaliadas para construção dos sensores virtuais, estimativa das concentrações das impurezas na base da torre 1. Esses aspectos vão desde a arquitetura de rede, funções de ativação, processo de aprendizagem, algoritmo de treinamento e definição dos critérios de parada durante o treinamento e simulação da RNA. Esses fatores são de suma importância para o desenvolvimento do trabalho, haja vista que o não conhecimento desses aspectos acarreta em diversos problemas, tanto no aspecto do conhecimento prático da identificação quanto na possibilidade de melhora dos resultados.

Durante o processo de aprendizagem da rede de múltiplas camadas costuma-se dividir os dados disponíveis em dois conjuntos: um conjunto de treinamento, com um total de 60 a 90% dos dados, e um conjunto para teste, que contém um total de 10 a 40% dos dados, outros percentuais são denominados para esses fins. Neste trabalho, os dados foram divididos em 3 (três) conjuntos: um conjunto de dados de treinamento, com um total de 70% dos dados, um conjunto para teste e outro para validação, cada um contendo um total de 15% dos dados. Outros percentuais foram avaliados para tais fins.

Alguns algoritmos para o treinamento de uma rede *feedforward* multicamada estão disponíveis na literatura; Entre os métodos determinísticos se destacam: o do gradiente descendente com e *sem momentum*, quase-Newton (que inclui o método de Levenberg-Marquardt) e do gradiente conjugado. Todos esses algoritmos utilizam, para o cálculo das derivadas parciais das variáveis de saída em função dos parâmetros de ajuste (pesos sinápticos), o algoritmo de retropropagação do erro (do inglês “*error back-propagation*”) (Haykin, 2001).

Uma das dificuldades ao utilizar redes neurais 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, 2001). Aqui é utilizado o critério de por validação cruzada, onde o treinamento é interrompido a cada C ciclos e é realizada uma estimativa do erro da rede com base no conjunto de dados de teste. A partir do momento em que o erro medido no conjunto de teste apresentar crescimento, o treinamento é encerrado. O que se deseja com esta técnica é descobrir o momento exato em que a rede começa a perder generalização.

2.3 Técnicas de Pré-Processamento de Dados e Seleção de Variáveis

Um dos grandes desafios à construção de modelos de inferência, como é o caso do sensor virtual neural (SVN), é a correlação entre as variáveis de entrada e saída. Na prática, a retirada de algumas variáveis formando modelos menores é uma abordagem popular, entretanto, isso diminui o desempenho de previsão do modelo. Por outro lado, incluir todas as variáveis em um modelo aumentará sua complexidade, como consequência ocorreria problemas de sobreajuste (Piang, 2005).

Foi incluído no trabalho um estudo sobre seleção de variáveis com técnicas de análise estatística multivariável, haja vista que a seleção de variáveis a serem efetivamente utilizadas no modelo não pode ser feita apenas baseada em aspectos teóricos. A influência de certas variáveis pode ser apenas parcialmente independente de outras, ou pode variar com a região operacional do processo, então para se obter o grupo de variáveis independentes (entradas) que irão compor o modelo, eliminando influências ambíguas, aqui serão utilizadas técnicas de estatística multivariada, com auxílio de predição por meio de regressão linear múltiplas (MLR) e da Análise de Componentes Principais (PCA), onde foram desenvolvidas as rotinas em código Matlab®.

Os seguintes métodos estatísticos de seleção de variáveis podem ser utilizados: todas as Regressões Possíveis (*All Possible Regressions*), Adição sequencial (do Inglês *Forward Selection* (FS)), Seleção por Eliminação (do Inglês *Backward Elimination* (BE)), Regressão Por Etapas (do Inglês *Stepwise Regression* (SR)) e a Regressão por Etapas nas Predições do Modelo (do Inglês *Stepwise Regression on Model Predictions*, (SRMP)).

Algoritmo da Seleção de Entradas através da Regressão por etapas. O primeiro método proposto para seleção de regressores é com base em uma análise de um modelo de regressão multivariável, com o intuito de direcionar um determinado conjunto de dados com um determinado número de variáveis. Em tal situação estamos interessados em filtrar as variáveis candidatas para obter, por exemplo, um modelo de regressão que contenha o “melhor” subconjunto de variáveis para compor as entradas finais do sensor virtual. Obviamente, que a experiência prévia do processo e as considerações teóricas do modelo matemático nos auxiliaram quais são essas variáveis candidatas. Vamos supor um modelo de múltiplas entradas e única saída (MISO), onde existam K variáveis candidatas, x_1, x_2, \dots, x_k , e uma única variável a ser inferida y . Todos os modelos devem incluir o termo de interseção 0, de tal maneira que o modelo com todas as variáveis incluídas tenham $K+1$ termos. Além disso, segundo Montgomery e Runger (2014), a forma funcional de cada variável candidata, por exemplo, $x_1=1/x$, $x_2=\ln(x)$, dentre outras, é considerada correta.

A construção do algoritmo se tornar inovadora no sentido de que ao se ajustar o modelo em uma MLR, é possível utilizar qualquer um dos métodos estatísticos aqui citados e os resultados podem ser avaliados por um ou mais critério de desempenho. Esse algoritmo foi implementado no software Matlab® e suas principais etapas são descritas no algoritmo narrativo expresso abaixo:

1. Entre com o Número de elementos da amostra (N) e com o número de variáveis (NV);
2. Defina o tipo de técnica de seleção de variáveis (TRP, FS, BE e SR), aqui foi utilizada a metodologia da TRP. A definição de qual procedimento será utilizado é importante porque várias matrizes X serão formadas, dependendo das combinações das variáveis. Por exemplo, se tivermos 10 variáveis candidatas, serão formadas 1024 matrizes de entradas que darão origem a 1024 modelos de regressão a serem avaliados;

3. Entrada dos valores das matrizes X e Y (Equação (7)):

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} 1 & x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1N} \\ 1 & x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2N} \\ 1 & x_{31} & x_{32} & \cdots & x_{3N} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ 1 & x_{m1} & x_{m2} & \cdots & x_{mN} \end{bmatrix} \quad \mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix} \quad (7)$$

4. Calcular o produto entre as matrizes $\mathbf{X}^T\mathbf{X}$ (Equação (8)):

$$\mathbf{X}^T\mathbf{X} = \begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_{i1} & \sum_{i=1}^m x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^m x_{iN} \\ \sum_{i=1}^m x_{i1} & \sum_{i=1}^m x_{i1}^2 & \sum_{i=1}^m x_{i1}x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^m x_{i1}x_{iN} \\ \sum_{i=1}^m x_{i2} & \sum_{i=1}^m x_{i2}x_{i1} & \sum_{i=1}^m x_{i2}^2 & \cdots & \sum_{i=1}^m x_{i2}x_{iN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ \sum_{i=1}^m x_{iN} & \sum_{i=1}^m x_{iN}x_{i1} & \sum_{i=1}^m x_{iN}x_{i2} & \cdots & \sum_{i=1}^m x_{iN}^2 \end{bmatrix} \quad (8)$$

5. Obter a matriz inversa $(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1}$;

6. Efetuar a multiplicação $\mathbf{X}^T\mathbf{Y}$ (Equação (9)):

$$\mathbf{X}^T\mathbf{Y} = \left[\sum_{i=1}^m y_i \quad \sum_{i=1}^m x_{i1}y_i \quad \sum_{i=1}^m x_{i2}y_i \quad \cdots \quad \sum_{i=1}^m x_{iN}y_i \right]^T \quad (9)$$

7. Encontrar os N coeficientes da regressão linear múltipla β_N (Equação (10)):

$$(\mathbf{X}^T\mathbf{X})^{-1} \cdot \mathbf{X}^T\mathbf{Y} = \beta = [\beta_0 \quad \beta_1 \quad \beta_2 \quad \cdots \quad \beta_N]^T \quad (10)$$

8. Obter os valores fornecidos pelo modelo de regressão linear múltipla, MLR, (Equação (11)):

$$\hat{y}_i = \beta_0 + \beta_1 x_{i1} + \beta_2 x_{i2} + \dots + \beta_N x_{iN}; \text{ para } i = 1, \dots, m \quad (11)$$

9. Verificar através de um índice de desempenho, qual o melhor ou os melhores modelos de inferência. O critério utilizado aqui é função da soma quadrática do erro, SQE, como medida do desvio dos dados originais (y_i) e os fornecidos pelo modelo (\hat{y}_i), dado pela Equação (12); que é o erro médio quadrático ou média quadrática do erro (MQE), para p variáveis contidas no modelo e n número de amostras testadas, fornecido pela Equação (13).

$$SQE = \sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (12)$$

$$MQE = \frac{SQE}{(n - p)} \quad (13)$$

Vale ressaltar que além desse algoritmo para seleção de variáveis, também foi utilizada a técnica de Análise Componentes Principais (PCA), descrita na próxima sessão. Sendo assim, a PCA é empregada nesse trabalho com os objetivos de: ser uma alternativa útil à análise de

regressão na seleção das variáveis secundárias; e obter o pré-processamento do conjunto de dados iniciais gerados pelas simulações.

2.4 Remoção de Erros Espúrios (Outliers)

Segundo Fortuna et al.(2007), dados coletados em uma planta ou oriundos de um modelo matemático podem estar corrompidos pela presença de erros espúrios “outliers”, isto é, observações não consistentes com a maioria dos dados e incluem pontos inexistentes, falhas de leituras, problemas de transmissão etc. A maioria das outras técnicas existentes utilizam estatística multivariada, sendo a maioria delas baseadas na análise dos componentes principais, PCA (Jolliffe, 2002).

Análise de Componentes Principais (PCA). A análise de Componente Principais (PCA) talvez seja a técnica mais antiga e mais conhecida de análise multivariada. A PCA transforma um conjunto de dados originais em um novo conjunto de dados, esse novo conjunto de dados é chamado de componentes principais (PC_i, com $i=1, 2, \dots, N$ componentes). Considere uma matriz **A** que possui três elementos [x_1, x_2, x_3], esses elementos podem ser dispostos em um gráfico tridimensional, conforme ilustra a Figura 4.

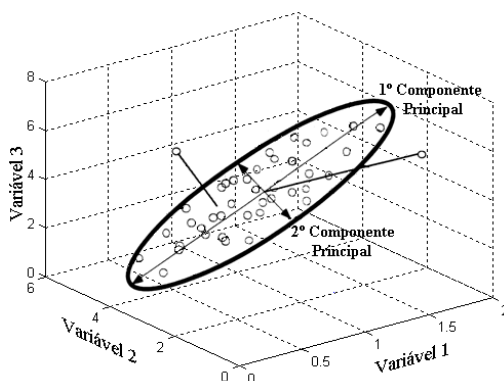


Figura 4. Componentes Principais.

Partindo do princípio que a matriz de dados originais **A** foi definida, uma análise de PCA começa com dados de m variáveis para i indivíduos, cujos componentes principais estão representados no gráfico da Figura 5. Os i componentes principais (PC₁) são obtidos a partir das combinações lineares das variáveis da matriz **A**, que possui elementos, [X_1, X_2, \dots, X_m], fornecido pela Equação (14):

$$Z_i = c_{i1}X_1 + c_{i2}X_2 + \dots + c_{im}X_m \quad (14)$$

Em particular, a variância de Z_i é igual ao i Autovalor dos elementos da Matriz **A**, $\text{Var}(Z_i) = \lambda_i$, e as constantes $c_{i1}, c_{i2}, \dots, c_{im}$ são os elementos do correspondente Autovetores, escalonado de modo que a Equação (15) seja satisfeita:

$$c_{i1}^2 + c_{i2}^2 + \dots + c_{im}^2 = 1 \quad (15)$$

Uma propriedade importante dos autovalores é que a soma deles é igual à soma dos elementos da diagonal da matriz COV. Logo, conforme mostra a Equação (16):

$$\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_m = c_{11} + c_{22} + c_{mm} \quad (16)$$

Portanto, para a determinação das componentes principais, é necessário calcular a matriz de variância-covariância, encontrar os Autovalores e os Autovetores e, por fim, escrever as combinações lineares, que serão as novas variáveis, denominadas de componentes principais, (REGAZZI, 2001). A Figura 5 ilustra o procedimento para se efetuar o cálculo análise de componentes principais.

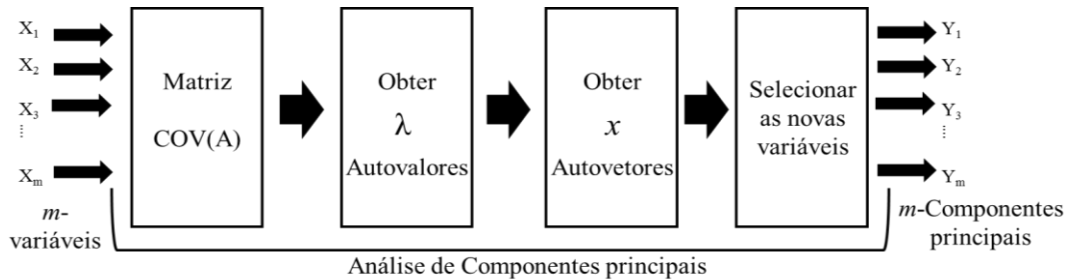


Figura 5. Cálculo da análise de componentes principais. Fonte: Adaptada de SOUZA (2005).

Geralmente, a PCA é aqui utilizada com dois propósitos: seleção de variáveis e exclusão de *outliers*. Além de sua aplicação aqui à seleção de variáveis, o pré-processamento de dados é uma tarefa muito importante para o futuro do desempenho de um modelo de identificação como a rede neural artificial, modelo o qual serão construídos os sensores virtuais para inferência de concentração.

Análise Residual de erros espúrios (Outliers). O resíduo (erro) de um modelo em uma regressão múltipla (linear ou não linear) é apresentado conforme a na Equação (17).

$$e_i = y_i(\text{Real}) - y_i(\text{Modelo}) \quad (17)$$

O resíduo de um modelo de regressão múltipla de fato representa um importante papel no julgamento sobre a adequação geral da estimativa (Montgomery e Runger, 2014). Vários tipos de análises gráficas de erros são frequentemente úteis, haja vista que padrões de comportamento nesses gráficos indicam que o modelo pode conter ou não amostras espúrias. Montgomery e Runger. (2014) descrevem vários métodos de detecção dessas observações influentes (possíveis *outliers*). E nesses métodos, ao invés de se verificar o erro residual de um modelo são calculados outros tipos de resíduos escalonados. Dentre os quais se destaca os erros padronizados residuais (d_i), Equação (18).

$$d_i = \frac{y_{i(\text{real})} - y_{i(\text{modelo})}}{\sqrt{\text{MQE}}} \quad (18)$$

3 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Aqui são apresentados os principais resultados obtidos com a metodologia proposta para o trabalho; o fluxograma da Figura 7 resume as etapas realizadas durante o desenvolvimento do trabalho. Os resultados que serão aqui apresentados seguiram a metodologia de construção da Figura 6, cada uma das etapas serão descritas e seus respectivos resultados fornecidos a partir do próximo tópico.

3.1 Simulação do Processo

A simulação do processo em regime estacionário foi desenvolvida nesse trabalho no software Aspen PlusTM, é de suma importância, haja vista que é nesse tipo de simulação que todos os equipamentos e acessórios são instalados: coluna, refeedor, condensador, vaso de refluxo, divisor de corrente, válvulas de controle e bombas. Os resultados obtidos em regime estacionário demonstraram a importância dessa simulação e, sobretudo, os efeitos produzidos nas concentrações de interesse mediante as modificações nas diversas variáveis de processos (análise de sensibilidade). Esses resultados nos auxiliam tanto na simulação em regime transiente e no controle, quanto na etapa de seleção das variáveis para a construção dos sensores virtuais.

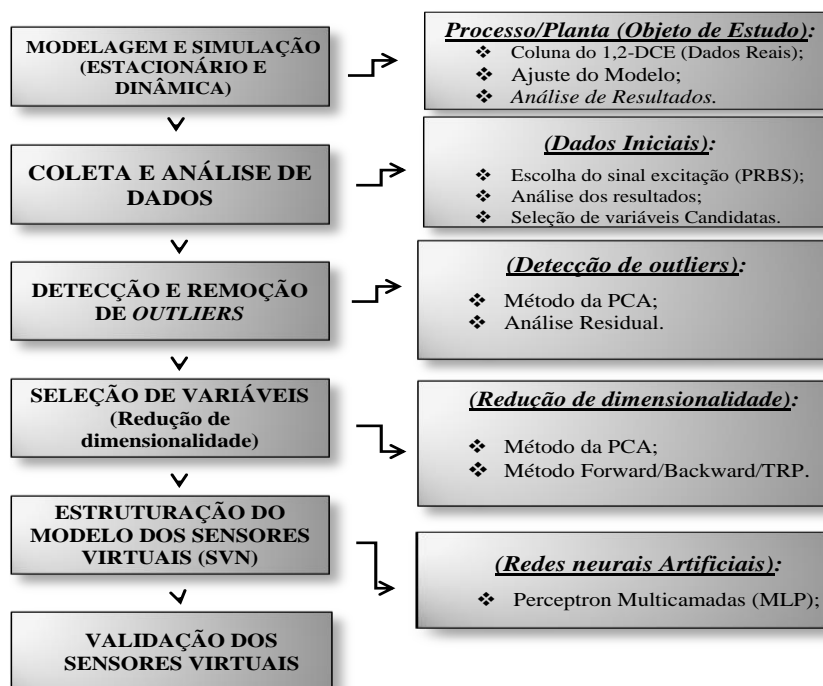


Figura 6. Metodologia desenvolvida para construção dos sensores virtuais.

3.2 Análise Transiente e seus Efeitos nas Concentrações das Impurezas

Durante o desenvolvimento do trabalho optou-se por se utilizar os dados no regime transiente do processo para construção dos sensores virtuais, através da simulação no software Aspen Dynamics®. A Figura 8 apresenta o fluxograma, da coluna de destilação em estudo, em regime transiente utilizado durante as simulações nesse estado.

Onde, no fluxograma da Figura 7: F₁- Vazão do 1,2 DCE proveniente de um processo de oxidação; F₂- Vazão do 1,2 DCE proveniente de um processo de cloração direta; F₃- Vazão de Destilado/Vazão de Hidrocarbonetos Clorados úmidos; F₄-Vazão de base/Vazão de base do 1,2-DCE; F_{INCOND} - Vazão de incondensáveis do vaso de refluxo; F_{ÁGUA}- Vazão de água na saída do vaso de refluxo; R- Vazão de Refluxo; RR-Razão de refluxo; P_{VR}- Pressão do vaso de refluxo; H_{H2O}- Nível de água do vaso de refluxo; H_{org}- Nível de orgânicos clorados do vaso de refluxo; e H_{referv} - Nível do refeedor/base da coluna.

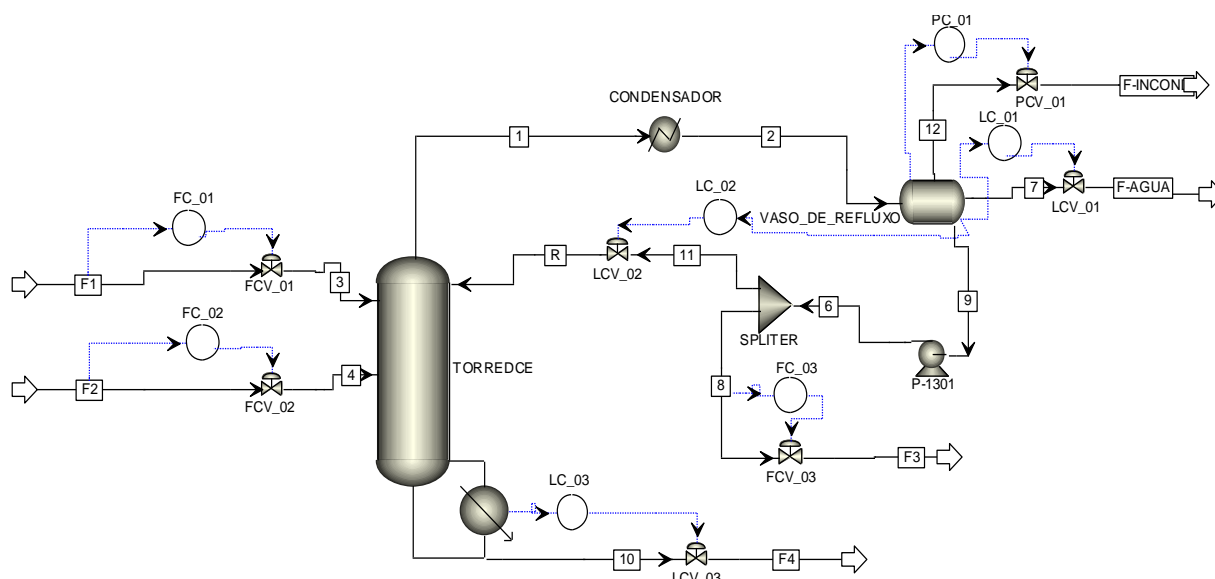


Figura 7. Fluxograma de processo em regime transiente implementado no Aspen Dynamics™.

O conjunto de dados gerados é discutido mediante as perturbações efetuadas em sua concepção e análises sobre o efeito das mesmas nas composições dos principais componentes da base da coluna (CHCl_3 , CCl_4).

Dinâmica das Vazões de alimentação. As vazões de alimentação, F_1 e F_2 , somente são manipuladas ou têm seus valores de referência (*setpoint*) alterados quando ocorrem situações anormais no processo como, por exemplo, partida ou parada da planta. Os gráficos das Figuras 8 a), b) e c) mostram, respectivamente, o efeito da vazão F_1 , valor de referência $F_1=21000$ kg/h, sobre a concentração do composto tetracloreto de carbono (XCCl_4) e do clorofórmio (XCHCl_3).

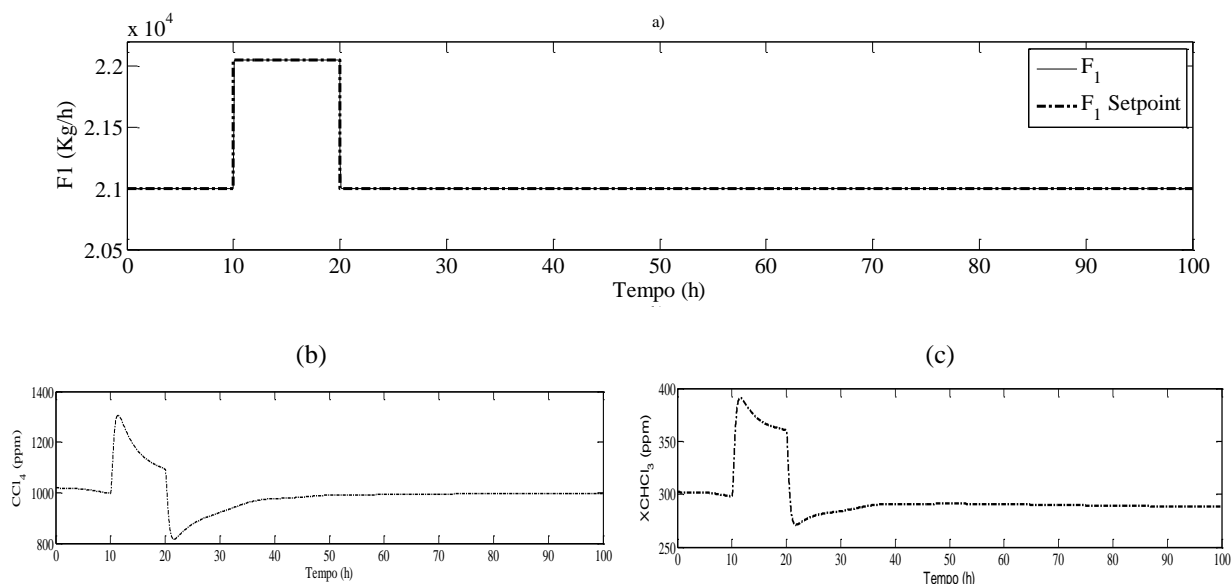


Figura 8. a) Variação degrau de $\pm 5\%$ sobre a vazão F_1 ; b) Efeito da perturbação em F_1 sobre a concentração XCCl_4 ; e c) Efeito da perturbação em F_1 sobre a concentração XCHCl_3 .

O gráfico da Figura 8 a) mostra que o controlador de fluxo da corrente F_1 atua para corrigir a perturbação efetuada e trazê-la de volta para o seu valor desejado (*setpoint*) e, de

acordo com os gráficos da Figuras 8 b) e c), as concentrações do compostos CCl_4 e CHCl_3 sofrem um aumento diretamente proporcional ao aumento da vazão F_1 , no instante de tempo de 10 h, e uma diminuição proporcional a redução de F_1 no tempo de 20 horas de operação da coluna. É importante citar que também foram avaliados os efeitos dinâmicos das seguintes variáveis: Vazão de destilado (F_3), carga térmica do refeedor (Q_R), concentrações das correntes de alimentação e das 71 temperaturas dos estágios da coluna. No entanto, foram selecionadas apenas um total de 7 (sete) variáveis secundárias (candidatas) para compor os sensores virtuais de estimativa de cada uma das saídas a serem inferidas, que são: F_1 , F_2 , F_3 , Q_R , CCl_4 (F_1), CCl_4 (F_2), e T_{71} . E F_1 , F_2 , F_3 , Q_R , CHCl_3 (F_1), CHCl_3 (F_2), e T_{71} , respectivamente, para as saídas XCCl_4 e XCHCl_3 .

3.3 Conjunto de Dados dos Sensores Virtuais Dinâmicos

O teste de coleta dos dados para o treinamento dos sensores virtuais consistiu: perturbar, com um sinal aleatório, todas as variáveis candidatas selecionadas no estudo transiente; exceto as vazões F_1 e F_2 que tiveram suas respectivas ações de controle removidas. O objetivo desse teste é avaliar uma situação crítica na planta a qual representaria a perda do controle dessas variáveis, ou seja, o processo estaria funcionando em malha aberta para as vazões de alimentação e com distúrbio sobre as demais variáveis. Assim, durante tempo total de 100 horas de simulação e um tempo de amostragem de 1,2 minutos os conjuntos de “Dados 1 e 2” foram armazenados, representando: uma matriz com (5001×7) das entradas e uma matriz (5001×1) para cada uma das saídas; ou seja, um total de 35007 dados referentes às 7 (sete) entradas e 5001 dados para cada uma das saídas.

3.4 Etapa de Seleção de Variáveis

Seleção utilizando a Técnica de Todas as Combinações Possíveis (TRP). Nessa etapa foi utilizado o algoritmo da Seção 3.3. Essa abordagem pode encontrar o “melhor” modelo, dos 254 gerados aqui (127 para cada uma das saídas) para inferência relativamente ao critério mínimo MQE, enquanto outros métodos tipo etapas não oferecem tal segurança, além disso eles podem ser distorcidos pelas dependências entre os regressores. Nessa metodologia foram avaliadas as seguintes entradas frente às respectivas saídas, y_1 e y_2 , conforme mostra a Tabela 1.

Tabela 1. Variáveis candidatas a serem utilizadas em um modelo de inferência.

SAÍDAS ESTIMADAS	ENTRADAS (VARIÁVEIS CANDIDATAS)						
y_1 (XCCl_4)	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7
	F_1	F_2	F_3	Q_R	CCl_4 (F_1)	CCl_4 (F_2)	T_{71}
y_2 (XCHCl_3)	u_1	u_2	u_3	u_4	u_5	u_6	u_7
	F_1	F_2	F_3	Q_R	CHCl_3 (F_1)	CHCl_3 (F_2)	T_{71}

Com a finalidade de comparar os diferentes modelos desenvolvidos, observando o critério de desempenho do MQE, são representados os 5 modelos que apresentaram o menor MQE, em ordem decrescente, para a saída y_1 e y_2 , respectivamente, Figuras 9 a) e b).

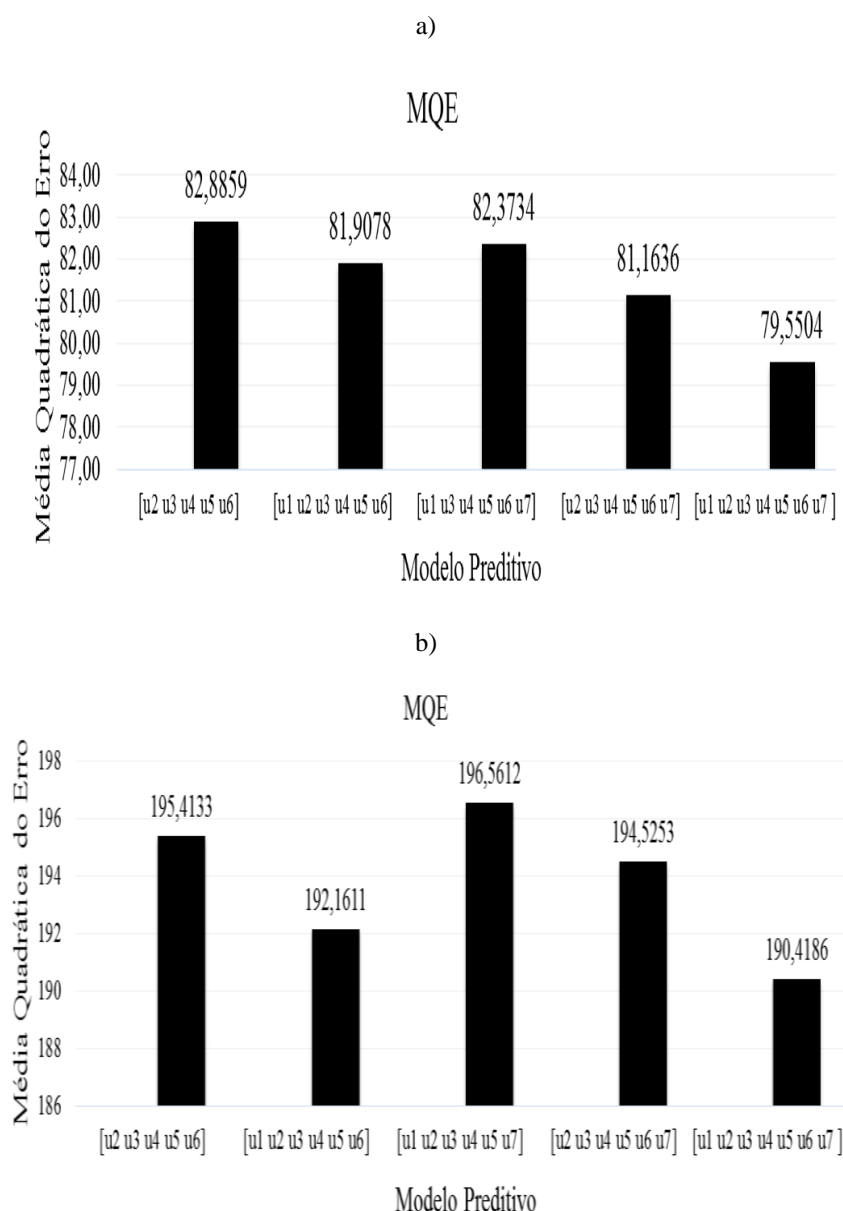


Figura 9: a) Cinco últimos melhores modelos dos 127 avaliados com relação a saída $XCCl_4$; e a) Cinco últimos melhores modelos dos 127 avaliados com relação a saída $XCHCl_3$.

Logo, o modelo final escolhido para inferência da concentração $XCCl_4$ é aquele que possui o menor $MQE = 79,5504$; e o modelo final escolhido para inferência da concentração $XCHCl_3$ é aquele que possui o menor $MQE = 190,4186$. Dessa forma, os 7 (sete) regressores ou todas as variáveis definidas como candidatas na etapa inicial são selecionadas para compor o modelo final dos sensores virtuais.

Seleção de Variáveis utilizando a PCA. Inicialmente a PCA foi aplicada para reduzir a dimensão do conjunto de dados de entrada da RNA, através da seleção das componentes principais (PC). Ela foi utilizada aqui como uma técnica alternativa ao método da TRP, sendo mais indicada quando o número de regressores inicialmente selecionados for muito grande, indicando qual seria o melhor deles.

Os autovalores (scores) são as projeções das amostras na direção das componentes principais, suas coordenadas são obtidas pelo produto da matriz de dados e a matriz de

autovetores. De acordo com Jolliffe (2002) as principais PC, aquelas com variância maior que 0,7, correspondem: as cinco primeiras PC da Tabela 2, para o caso da saída $XCCL_4$.

Tabela 2: a) Autovalores (scores) das PC selecionadas com relação à saída $XCCL_4$.

Componentes Principais	Variância (Autovalores)	Variância Explicada (%)	Variância Acumulada (%)
PC1	1,9896	28,42	28,42
PC2	1,6006	22,87	51,29
PC3	1,1518	16,45	67,74
PC4	0,9237	13,20	80,94
PC5	0,8798	12,57	93,51
PC6	0,3925	5,61	99,12
PC7	0,0619	0,88	100,00

Logo, conforme apresentado na Tabela 2, as sete variáveis originais dos conjuntos de dados podem ser analisadas a partir das cinco PC selecionadas, as quais expressam, 93,89% da variância explicada. Através das componentes selecionadas são extraídas as principais variáveis originais pelo valor absoluto dos autovetores “loadings”. Sendo assim, a Tabela 3 apresenta os loadings das variáveis originais para as cinco PC para a saída $XCCL_4$. Indicando dessa forma, quais variáveis devem estar contidas no modelo final.

Tabela 3: Autovetores (Loadings) das PC selecionadas com relação a saída $XCCL_4$.

Componentes	F_1	F_2	F_3	Q_R	$CCl_4 (F_1)$	$CCl_4 (F_2)$	T_{71}
PC1	-0,5698	0,00492	0,14259	-0,0444	-0,039831	0,768161	-0,24776
PC2	-0,0911	0,65832	-0,1499	-0,2187	-0,690069	-0,064085	0,087842
PC3	-0,1542	0,64202	0,09723	-0,2341	0,6984819	-0,107204	0,020541
PC4	-0,5547	-0,1956	-0,2074	-0,006	0,0429816	-0,121088	0,771034
PC5	0,57221	0,13298	0,02928	-0,0255	0,066839	0,5952055	0,542812

A seleção de variáveis por meio da PCA indica que devem ser utilizadas as cinco variáveis inicialmente candidatas, que são: F_1 , F_2 , $CCl_4 (F_1)$, $CCl_4 (F_2)$, e T_{71} para construção do sensor virtual na estimativa de $XCCL_4$. De maneira análoga, foram expressos os mesmos resultados para a saída $XCHCl_3$.

De fato, os modelos finais produzidos pela PCA não comprovam os resultados da análise dinâmica e o conhecimento fenomenológico do processo, haja vista que técnica descarta variáveis de extrema relação com as composições de base da torre como, por exemplo, Q_R e F_3 . Além disso, em comparação com os resultados da seleção de variáveis por todas TRP,

esses modelos não estão contidos entre os 20 (vinte) melhores modelos selecionados na TRP, contidos apenas entre os cinquenta melhores. Por fim, serão empregados os melhores modelos da técnica anterior.

3.5 Sensores Virtuais Neurais (SVN) Dinâmicos

Quanto à topologia das RNA que forneça satisfatoriamente as saídas do processo, Perceptron Multicamadas (MLP), foram utilizadas diversas arquiteturas e alguns algoritmos de treinamento às RNA. Sendo testadas redes cujas as camadas intermediárias (ocultas) variaram de 1 a 3; e cujo número de neurônios variaram de 5 a 30 em cada uma das camadas. Aqui foi adotado como melhor RNA a que produziu um menor Erro Quadrático Médio (MQE), ou seja, a topologia dos sensores virtuais neurais que produziu um menor MQE de predição em comparação com o valor gerado pelo modelo dinâmico do processo (Aspen Plus DynamicsTM).

Das 312 redes neurais (156 para cada saída) do tipo MLP avaliadas foram selecionadas as 3 (três) melhores redes de cada uma das 3 (três) topologias avaliadas: com 1 (uma), 2 (duas) e 3 (três) camadas ocultas. Os resultados mais satisfatórios foram alcançados ao se utilizar o algoritmo de treinamento *Levenberg-Marquardt* (LVM). As Tabelas 4 a) e b) apresentam as 9 (nove) redes neurais artificiais que apresentaram melhor desempenho para estimativa da composição do tetracloreto de carbono (XCCL₄) e do Clorofórmio (XCHCl₃).

Tabela 4: a) Melhores RNA do tipo MLP obtidas para inferência de composição do XCCL₄ através do algoritmo de treinamento *Levenberg-Marquardt*. b) Melhores RNA do tipo MLP obtidas para inferência de composição do XCCL₄ através do algoritmo de treinamento *Levenberg-Marquardt*.

a)

Número de Camadas Ocultas	Número de Neurônios da Camada Oculta	Funções de Ativação (Oculta-Saída)	Número de Épocas	MQE (TREIN)	MQE (VAL)
1	[20]	<i>logsig-logsig*</i>	167	5,5810E-05	5,0384E-05
1	[25]	<i>tansig-tansig**</i>	122	1,7433E-04	8,6890E-05
1	[30]	<i>logsig-logsig*</i>	73	2,0560E-04	2,4585E-04
2	[10 10]	<i>logsig-logsig*</i>	197	6,7781E-05	4,3598E-05
2	[10 25]	<i>logsig-logsig*</i>	185	3,1889E-05	2,8537E-05
2	[10 30]	<i>logsig-logsig*</i>	131	6,3114E-05	6,2454E-05
3	[10 20 10]	<i>logsig-logsig*</i>	141	7,5339E-05	5,2986E-05
3	[10 20 15]	<i>logsig-logsig*</i>	182	9,8751E-05	8,1289E-05
3	[10 20 20]	<i>logsig-logsig*</i>	201	4,8447E-05	5,40E-05

b)

Número de Camadas Ocultas	Número de Neurônios da Camada Oculta	Funções de Ativação (Oculta-Saída)	Número de Épocas	MQE (TREIN)	MQE (VAL)
1	[10]	<i>logsig-logsig*</i>	116	2,9695E-04	3,1002E-04
1	[25]	<i>tansig-tansig**</i>	57	3,0518E-04	3,4419E-04
1	[30]	<i>logsig-logsig*</i>	82	7,1784E-04	4,7598E-04
2	[5 15]	<i>logsig-logsig*</i>	212	1,8841E-04	1,8345E-04
2	[5 30]	<i>logsig-logsig*</i>	212	2,3576E-04	1,6253E-04
2	[10 15]	<i>logsig-logsig*</i>	119	2,2101E-04	1,6739E-04
3	[3 5 20]	<i>logsig-logsig*</i>	216	1,8175E-04	1,6875E-04
3	[5 5 30]	<i>logsig-logsig*</i>	121	2,7351E-04	1,7873E-04
3	[10 5 10]	<i>logsig-logsig*</i>	121	2,5340E-04	1,9608E-04

As RNA foram avaliadas por meio do erro médio quadrático (MQE) das etapas de treinamento (70% dos dados totais), validação e teste (cada uma com 15% dos dados totais). Os resultados obtidos à inferência das composições de base do XCCl_4 e do XCHCl_3 foi efetuada através dos sensores virtuais, com um tempo total de simulação de 100 horas de operação da coluna do 1,2-DCE, comparado com os valores desejados (Aspen DynamicsTM), são, respectivamente, apresentados nos gráficos das Figuras 10 a) e b).

De acordo com o gráfico da Figura 10 a), o modelo desenvolvido mostrou-se capaz de desempenhar a função de estimador de XCCl_4 e isso ocorreu após 185 iterações realizadas pelo sistema (RNA MLP [10 25]). O que de fato também foi apresentado para a estimativa de XCHI3 , Figura 9 b), onde nesse caso a RNA tipo MLP [3 5 20] necessitou de iterações para convergir.

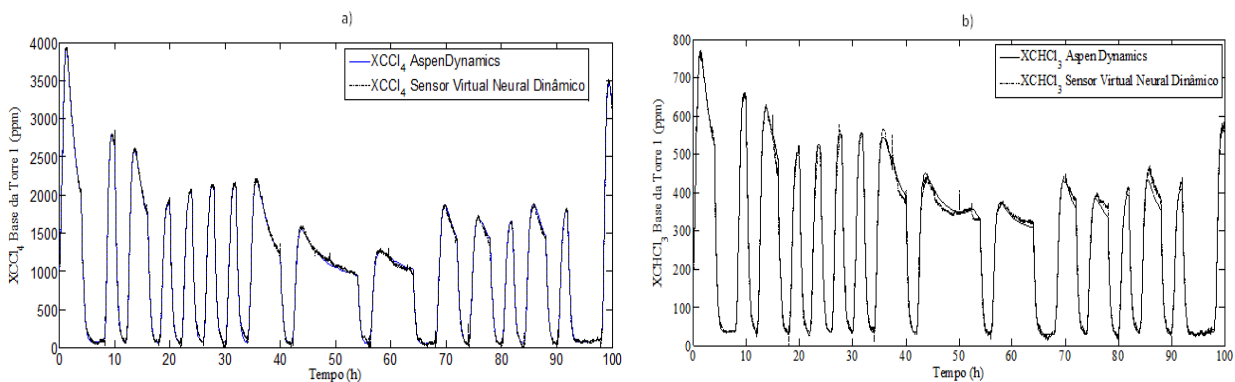


Figura 10: a) Sensor Virtual Neural dinâmico (XCCl_4) versus a saída desejada (Simulador); e b) Sensor Virtual Neural dinâmico (XCHCl_3) versus a saída desejada (Simulador).

Logo, os sensores virtuais apresentaram bons resultados para inferência das concentrações compostos críticos na base da torre do 1,2-DCE. É importante notar sobre a ocorrência de diversas perturbações nas variáveis de entrada, conjunto de Dados 1, o que aumenta a robustez dos sensores e garante uma boa confiabilidade de estimativa.

4 CONCLUSÕES

Nesse trabalho foram apresentados os resultados referentes a metodologia proposta para construção de dois sensores virtuais neurais, um para estimativa da concentração do composto tetracloreto de carbono e outro na estimativa do composto clorofórmio, ambos na correte de base da torre de destilação do 1,2-Dicloroetano. Ambas as redes apresentaram erros satisfatórios, uma boa análise de regressão e uma boa média de MQE para o conjunto de dados totais; sendo que o sensor virtual de composição do tetracloreto de carbono apresentou um MQE um pouco menor (em torno de 10^{-5}), enquanto o do clorofórmio foi em torno de 10^{-4} em comparação com as saídas do modelo do simulador Aspen *Dynamics*TM.

REFERÊNCIAS

Fortuna, L.; Graziani, S.; Rizzo, A.; & Xibilia, M.G. , 2007. *Soft sensors for monitoring and control of industrial processes*. London, UK: Springer.

Haykin, S., 2001. *Redes neurais: princípios e prática*. 2ª Edição, Bookman.

Himmelblau, D., 2008. “*Accounts of Experiences in the Application of Artificial Neural Networks in Chemical Engineering*”. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 47, 5782-5796.

Jolliffe, I. T. , 2002. *Principal component analysis*. 2nd ed., Springer series in statistic.

Kadlec, P.; Gabrys, B.; Strandt, S., 2009. *Data-driven Soft Sensors in the process industry*. *Computers and Chemical Engineering*, pages 795–814.

Morais JR, A. A., 2011. *Elaboração de um Analisador Virtual Utilizando Sistema Híbrido Neuro-Fuzzy para Inferenciar a Composição em um Processo de Destilação*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Alagoas.

Montgomery, D.C.; and Runger, G. C. , 2014. *Applied Statistics and Probability for Engineers*. Sixth Edition, WILEY.