



XXXVII IBERIAN LATIN AMERICAN CONGRESS
ON COMPUTATIONAL METHODS IN ENGINEERING
BRASÍLIA - DF - BRAZIL

OTIMIZAÇÃO UTILIZANDO METAMODELO KRIGING: UMA APLICAÇÃO À SEPARAÇÃO DE PROPENO POR DESTILAÇÃO

Savana Barbosa de Brito Lélis Villar

Thiago Gonçalves das Neves

Adriana Barbosa da Costa

Sidinei Kleber da Silva

Michela Mulas

Antônio Tavernard Pereira Neto

Deborah Almeida dos Anjos

Antonio Carlos Brandão de Araújo

savana_lelis@hotmail.com

Universidade Federal de Campina Grande

Avenida Aprígio Veloso 882 Bodocongó, 58109970, Paraíba, Campina Grande, Brasil

Resumo. Neste trabalho, uma metodologia para otimização de processos baseada em metamodelos foi proposta. Para enfrentar problemas de simulação e otimização baseados em modelos complexos, soluções baseadas em modelos reduzidos foram propostas na literatura, designadas na literatura por metamodelos. O desempenho da otimização foi baseada em modelos kriging através do planejamento experimental Latin Hypercube Sampling. A krigagem é um método de interpolação que procura minimizar a variância estimada a partir de um modelo prévio. O principal objetivo desse trabalho foi simular o processo de produção de propeno e otimizá-lo através do método da krigagem, através dos softwares comerciais Aspen Plus® e Matlab®. Com o método kriging, atingiu-se resultados próximos daqueles obtidos através da solução rigorosa. Com a otimização, foi possível obter a melhor configuração de operação visando à minimização do consumo energético do processo.

Palavras-chave: Propeno, Destilação, Otimização, Kriging

1 INTRODUÇÃO

Simular uma planta química significa criar um modelo de processo, de acordo com a descrição e comportamento reais, capaz de prever as respostas e produção de acordo com as entradas do sistema.

Os metamodelos surgiram para enfrentar problemas de simulação, projeto e otimização de maneira a minimizar o esforço computacional atrelado ao modelo rigoroso, assim como solucionar problemas de convergência em procedimentos iterativos.

A predição das respostas do processo através do metamodelo Kriging foi realizada através do software Matlab[®] a fim de representar de forma mais fiel possível o modelo rigoroso desenvolvido no software Aspen Plus[®].

A constante busca por melhorias na eficiência dos processos químicos está atrelada, há várias décadas, aos métodos de otimização. As técnicas de otimização buscam identificar a solução que otimize uma determinada função objetivo, que representa matematicamente os objetivos de um sistema a serem melhorados. Elas têm, entre suas restrições, a representação do modelo matemático que simula o comportamento do sistema (SILVA, 2001).

Na otimização, a complexidade dos processos pode acarretar em elevados tempos computacionais e a dificuldade de realizar simulações para vários cenários do processo. A utilização de metamodelos surge como alternativa para a otimização de grandes modelos matemáticos.

Segundo Henley e Seader (1988), usualmente o grande consumo de energia envolvido em processos de separação está associado a compressores, refeedores e condensadores. Desta forma, a procura por alternativas de novas configurações dos processos de separação que aumentem a eficiência do consumo de energia é de extrema importância.

Os problemas de otimização que surgem neste contexto baseiam-se essencialmente em modelos matemáticos do processo em estudo e algoritmos de otimização que, através destes, buscam determinar estratégias de operação que maximizem lucros operacionais levando em consideração restrições de capacidade, de segurança, de mercado e ambientais (GOMES, 2007).

Para otimizar o processo, foi utilizada a ferramenta *Optimization* do Aspen Plus[®], atingindo resultados minimizados para as cargas térmicas dos refeedores das três colunas de destilação e obedecendo restrições de pureza do produto e taxas de *boilup* das colunas. Para garantir a potencialidade do método da krigagem, realizou-se uma otimização no Matlab[®] com os dados gerados por este método. Dessa forma, um conjunto de resultados ótimos foi gerado e avaliado.

Os metamodelos estão sendo cada vez mais utilizados nos projetos de engenharia, objetivando uma resposta computacional rápida e também para se obter um comportamento do processo frente à diversos cenários sem que haja a necessidade de mudanças no próprio sistema operacional. A combinação dos benefícios potenciais da predição de respostas dos metamodelos com a ferramenta de otimização são, portanto, grande motivação desse trabalho.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

2.1 Metamodelo

Modelos reduzidos que são obtidos a partir de dados gerados com um modelo rigoroso são frequentemente designados na literatura por metamodelos (MECKESHEIMER et al, 2002). Metamodelos são utilizados para aproximação de modelos rigorosos, substituindo-os total ou parcialmente quando os códigos computacionais oriundos destes demandam esforço

computacional demasiadamente grande para que sua utilização direta seja viável (CLARKE et al., 2005, MECKESHEIMER et al., 2001). O uso de metamodelos pode ser também interessante quando o modelo rigoroso apresenta limitações relacionadas a aspectos numéricos, como problemas de convergência em procedimentos iterativos.

O grande desafio científico é a geração de um modelo substituto o mais preciso possível, utilizando-se o menor número de avaliações do modelo de alta fidelidade.

Várias técnicas podem ser utilizadas para a construção de modelos substitutos. Elas estão agrupadas em duas categorias, funcional e física (fidelidade hierárquica). A técnica funcional engloba diferentes abordagens, tais como, métodos baseados em ajuste de dados, séries polinomiais e métodos de ordem reduzida. A categoria física envolve modelos baseados na física do problema estudado.

No presente trabalho, será utilizada a categoria funcional com a abordagem de ajuste de dados, que por sua vez dispõe de diversos modelos de ajustamento, tais como superfície de resposta (AFONSO, et al., 2008; KEANE & NAIR, 2005; GIUNTA & WATSON, 1998), krigagem (AFONSO, et al., 2008), redes neurais artificiais (NAIDU, 2004; KARTAM, et al., 1997) e funções de base radial (GUTMANN, 2001; FORRESTER, et al., 2008)

O termo "metamodelo" foi utilizado pela primeira vez em meados da década de 70 (BLANNING, 1974). As primeiras aplicações tinham como objetivo auxiliar no cálculo de sensibilidades dos modelos de simulação, onde surgia a necessidade de se executar o metamodelo diversas vezes (BLANNING, 1974; 1975; KLEIJNEN, 1975; MICHEL & PERMUT, 1975).

Os metamodelos, igualmente conhecidos como modelos substitutos (*surrogate models*), são construídos e então usados no lugar dos modelos reais de simulação.

Uma vertente na pesquisa em metamodelos é o estudo de erros de aproximação dos metamodelos: dado um problema, passa-se ao estudo dos metamodelos que melhor se adequam ao problema (KLEIJNEN & SARGENT, 2000). A partir de então, os metamodelos vem sendo progressivamente estudados e atualmente são usados para auxiliar no cálculo de sensibilidades de modelos de simulação, substituir simulações que demandam muitos recursos computacionais e melhorar o desempenho de algoritmos iterativos de otimização mantendo fixo o custo computacional.

Atualmente, o uso de metamodelos vem encontrando mais espaço em aplicações, em geral de grande complexidade, em alguns casos intratáveis. Várias técnicas já são amplamente usadas com o mesmo objetivo, como o uso de polinômios, técnicas de agrupamento de dados, uso de modelos estatísticos, redes neurais e muitos outros (FONSECA, 2009).

O objetivo de um metamodelo é fornecer, para conjuntos de dados de entrada específicos, uma resposta próxima o suficiente daquela que seria oferecida ao se avaliar o modelo que se está tentando representar. Basicamente, um metamodelo é uma função analítica que aproxima a resposta de um modelo numérico complexo μ , tal que:

$$y = \mu(x) \tag{1}$$

onde y é um vetor que reúne as respostas de interesse, e x o vetor que reúne as variáveis de projeto, parâmetros de entrada do problema considerado.

2.2 Kriging

A modelagem por processos gaussianos, ou krigagem, é uma poderosa técnica de meta-modelagem, à qual se tem dado crescente atenção nas últimas duas décadas (ECHARD et al., 2013).

A krigagem é um método de interpolação, uma família de algoritmos de regressão que usa a ideia do método dos mínimos quadrados (GOOVAERTS, 1999) e procura minimizar a variância estimada a partir de um modelo prévio (LANDIM, 1998). O kriging é também definido como um "método de estimação por médias móveis" (LANDIM, 1998).

O método Kriging faz uma descrição mais acurada da estrutura espacial dos dados e produz valiosa informação sobre a distribuição da estimativa do erro, por ser entendida como uma série de técnicas de análise de regressão, que leva em conta a dependência estocástica entre os dados distribuídos no espaço.

Por meio da krigagem, é possível conhecer o erro associado à predição dos valores estimados. Esse erro é analisado através da variância da estimativa, conhecendo-se assim a confiança associada a estas estimativas, as quais podem ser chamadas de ótimas (YAMAMOTO; CONDE, 1999).

A diferença entre a krigagem e outros métodos de interpolação é a maneira como os pesos são atribuídos às diferentes amostras. No caso de interpolação linear simples, por exemplo, os pesos são todos iguais a $1/N$ (N = número de amostras); na interpolação baseada no inverso do quadrado das distâncias, os pesos são definidos como o inverso do quadrado da distância que separa o valor interpolado dos valores observados. Na krigagem, o procedimento é semelhante ao de interpolação por média móvel ponderada, exceto que aqui os pesos são determinados a partir de uma análise espacial, baseada no variograma experimental (CAMARGO, 1997).

De acordo com GOMES (2007), a estrutura do modelo Kriging pode ser descrita como a seguir:

$$\hat{y}(x) = \mathfrak{F}(x) + z(x) \quad (2)$$

onde:

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

As funções \mathfrak{F} são frequentemente definidas como modelos de regressão. As funções $z(x)$ são inspiradas em funções randômicas gaussianas ou processos estocásticos gaussianos, e apresentam ainda a propriedade de serem estacionárias (SANTNER et al., 2003). Em geral, as funções utilizadas para este fim tem média zero e variância σ^2 . Uma função covariância está associada à função $z(x)$.

2.3 Latin Hypercube Sampling

O primeiro passo para a construção de um modelo substituto baseado no ajuste de dados é a geração de uma amostra de pontos. Estes são locais no espaço de projeto em que os valores da resposta dos modelos de alta fidelidade serão calculados para construir o modelo aproximado. A seleção da amostra é uma etapa muito importante uma vez que para casos onde a avaliação da função requer um alto custo computacional deve-se procurar um plano de amostragem eficaz, o que significa o número mínimo de pontos que garantirão um modelo substituto com boa precisão.

Neste trabalho a amostra foi gerada utilizando Hipercubo Latino (*Latin Hypercube Sampling - LHS*) (FORRESTER, et al., 2008, GIUNTA, 2002) por ser um método de fácil implementação computacional.

As técnicas de Projeto de Experimentos *DOE* (*Design of Experiments*) baseiam-se neste conceito e entre as várias técnicas de plano de amostragem disponíveis na literatura tem-se: Monte Carlo, Quase Monte Carlo (*QMC*), Hipercubo Latino (*Latin Hypercube Sampling*) (KEANE & NAIR, 2005; QUEIPO, et al., 2005), vetor ortogonal (*OA*) (FORRESTER, et al., 2008; GIUNTA, 2002).

O planeamento experimental via *LHS* foi desenvolvido por (MCKAY, et al., 1979) como uma extensão n -dimensional da amostragem do quadrado Latino (RAJ, 1968). Seja um inteiro m positivo, um quadrado Latino (SÁNCHEZ, 2011; MIKHEEV, 2011) de ordem m é um arranjo de m caracteres latinos (caracteres do alfabeto latino ou romano) em um quadro de m linhas e m colunas, onde cada letra latina aparece uma só vez em cada linha e apenas uma vez em cada coluna. A Figura 1 mostra um arranjo de um quadrado latino de ordem $m = 5$.

3	5	2	4	1
2	1	3	5	4
4	3	5	1	2
1	2	4	3	5
5	4	1	2	3

Figura 1. Quadrado latino de ordem cinco

Para obter uma amostra *LHS*, o intervalo de cada dimensão do espaço de amostragem é dividido em m subintervalos, que não se sobrepõem, de igual probabilidade. Para um domínio de projeto com dimensão n , este particionamento resulta num total de m^n subintervalos no domínio de projeto. Em seguida, m pontos são selecionados aleatoriamente no domínio de projeto obedecendo às seguintes restrições (PINTO, 2014).

Cada ponto deve ser aleatoriamente alocado dentro de um subintervalo do domínio e para cada projeção unidimensional deste ponto só haverá um e apenas um ponto em cada subintervalo. Considerando dez amostras e um espaço de projeto de dimensão dois, x_1 e x_2 , que é o caso do quadrado latino, ambas variáveis definidas em $[0,1]$, a Fig. 2 ilustra uma solução possível para o conjunto de amostras que satisfazem os critérios do método. Observa-se que em cada linha e coluna dos intervalos das variáveis é posicionado um e apenas um ponto e que em cada subintervalo o ponto está alocado aleatoriamente (PINTO, 2014).

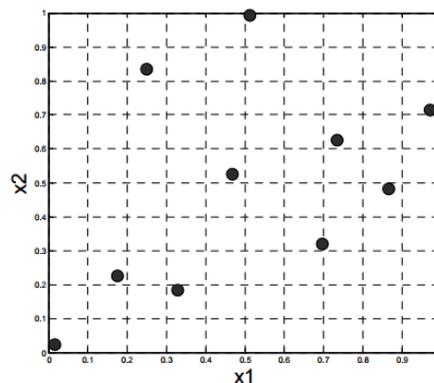


Figura 2. Dez pontos LHS num espaço de projeto bidimensional

2.4 Destilação

A destilação que é uma operação de separação é utilizada na petroquímica, usinas sucroalcooleiras, em diversos processos que requeiram a recuperação de um ou mais reagentes, dentre outros. As variações estão relacionadas com o modo de operação contínuo ou em batelada, a presença ou não de uma etapa reacional na coluna, e seu interior pode apresentar diferentes superfícies de condensação, como pratos, bandejas ou anéis.

Destilação é um processo no qual uma mistura de líquido ou vapor de duas ou mais substâncias é separada através da aplicação e remoção de calor. A destilação baseia-se no fato de o vapor gerado por uma mistura em ebulição é rico em componentes que possuem menor ponto de ebulição. Entretanto, quando este vapor é resfriado e condensado, o líquido gerado será mais rico no componente mais volátil do que o líquido que lhe deu origem. Porém, para este processo atingir alto grau de separação, faz-se necessário o uso de uma coluna de destilação.

Segundo Rocha (2008), o consumo de energia empregado para aquecimento e resfriamento sucessivo em cada prato é elevado, e esta é uma característica construtiva de unidades de destilação. Desta forma, a melhor maneira de reduzir os custos operacionais é aumentar sua eficiência de operação, o que na maioria das vezes é obtido por meio de otimização e controle do processo.

2.5 Otimização de Processos

A otimização de processos é importante em qualquer área de conhecimento, visto que a sua finalidade é solucionar problemas que afetam o desempenho de algum setor. No geral, ela possui duas vertentes: a maximização, e a minimização. Diversos são os problemas que podem ser resolvidos utilizando essa ferramenta, como por exemplo, os que abordam rendimento e lucro, bem como os custos e o tempo de produção (GOLDBARG & LUNA, 2000).

No nível das unidades de processo, o objetivo da otimização é determinar o valor apropriado para as variáveis do processo que proporcionem máximo desempenho, dentro do perfil de produção.

Na solução de problemas de otimização faz-se necessário o uso de modelagens e métodos aplicados à tomada de decisões e à resolução de problemas. Nesse trabalho, utilizou-se duas ferramentas para a otimização, ambas baseadas na associação de modelos matemáticos rigorosos do processo.

Em busca de soluções ótimas os softwares são projetados com ênfase na confiabilidade dos resultados e na melhoria constante da interface gráfica a ser apresentada ao usuário. Para a otimização a ser realizada no software Aspen Plus[®], há a ferramenta *Optimization* onde, após modelagem e simulação da planta, são inseridas as variáveis manipuladas e seus limites operacionais, função objetivo e restrições, obtendo como resposta os valores ótimos das variáveis manipuladas e da função objetivo a ser minimizada ou maximizada. Neste caso, trata-se de uma otimização rigorosa de processos, com uma interface bem definida para o usuário, evitando-se a elaboração de algoritmos complexos, o que muitas vezes força à simplificação física do problema. Já para a otimização no software Matlab[®], faz-se necessário à implementação de algoritmos, descrevendo uma sequência de passos para a solução do problema.

3 METODOLOGIA

3.1 Simulação da unidade de recuperação de propeno

A simulação da unidade de recuperação de propeno empregada neste trabalho foi implementada através do simulador comercial de processos AspenPlus[®]. Esta simulação busca representar a unidade de processo da forma mais fiel possível do ponto de vista de configuração.

As simulações em estado estacionário foram realizadas utilizando-se blocos *RadFrac* (destilação por estágios de equilíbrio) e o modelo termodinâmico escolhido foi a equação de Soave-Redlich-Kwong (*SKR*), considerado adequado para separação de hidrocarbonetos.

A corrente de propeno, proveniente de outras unidades do processo e constituída de vários componentes, alimenta a primeira coluna de destilação e segue o processo até atingir uma composição de propeno (produto principal) em torno de 99,5%. O diagrama do sistema pode ser visto na Fig. 3.

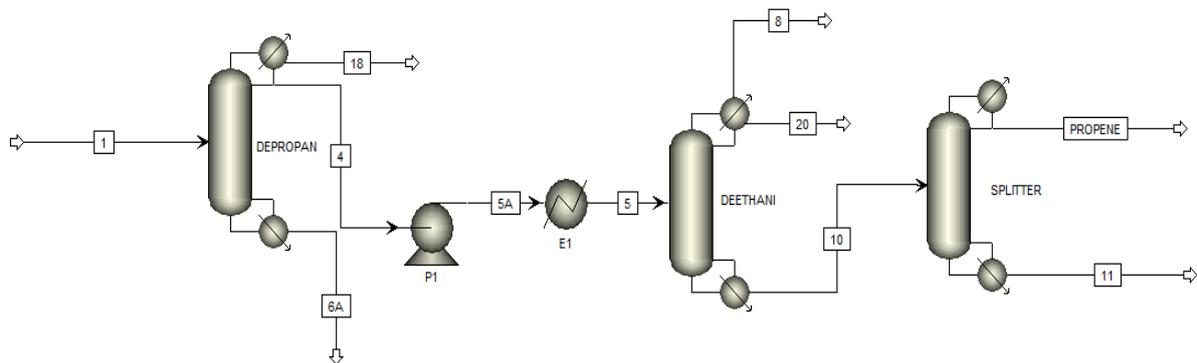


Figura 3. Fluxograma de recuperação do propeno simulado no Aspen Plus[®]

Foust (1987) salienta que são diversas as propriedades físicas e químicas em que a separação pode ser baseada, porém cabe ao engenheiro observar a propriedade com maior diferença entre os componentes e assim permitir uma separação mais fácil e econômica. Neste processo, recorreu-se à diferença de volatilidade entre os componentes para realizar a separação.

O objetivo da primeira coluna de destilação (Despropanizadora) é separar as espécies químicas mais pesadas (pela base) das mais leves (pelo topo). A água decantada sai na corrente 18, já os hidrocarbonetos mais leves saem na corrente 4, constituída principalmente de propeno, propano e etano. Esta corrente passa pela bomba (*PI*) e é pré-aquecida (*E1*) antes de alimentar a segunda coluna; desetanizadora. A corrente 20 é constituída da água condensada. A fração de etano (corrente 8) pode ser encaminhada para estocagem de gás liquefeito de petróleo (*GLP*). O produto principal, na sua maioria, segue o processo através da corrente 10. Esta, por sua vez, alimenta a última coluna, Splitter, onde o papel fundamental desta é a separação do propeno como produto de topo e propano e frações de espécies mais pesadas, na corrente 11 como produto de base.

Como se pode observar na Fig. 3, o processo de recuperação de propeno é constituído por três colunas de destilação, um trocador de calor e uma bomba.

3.2 Geração do metamodelo Kriging

Este tópico apresenta a metodologia utilizada neste trabalho para a obtenção do metamodelo Kriging a ser posteriormente utilizado para otimização.

A metodologia para obtenção do metamodelo Kriging considera os seguintes aspectos:

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

Neste trabalho foi utilizado o pacote DACE (*Design and Analysis of Computer Experiments*) (LOPHAVEN, et al., 2002a), que é uma *toolbox* do Matlab para trabalhos com aproximações via krigagem para modelos computacionais.

Tabela 1. Modelos de correlação disponíveis no Toolbox Matlab DACE

Função Correlação	$R_j(\theta_j, w_j, x_j) =$
Exponencial:	$\exp[-\theta_j d_j]$
Exponencial Geral:	$\exp[-\theta_j d_j ^{\theta_{n+1}}], 0 < \theta_{n+1} \leq 2$
Gauss:	$\exp[-\theta_j (d_j)^2]$
Linear:	$\max\{0, 1 - \theta_j d_j \}$
Esférica:	$1 - 1.5\xi_j + 0.5\xi_j^3, \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$
Cúbica:	$1 - 3\xi_j + 2\xi_j^3, \xi_j = \min\{1, \theta_j d_j \}$
Spline:	$\zeta(\xi_j), \xi_j = \theta_j d_j $
	$\zeta(\xi_j) = \begin{cases} 1 - 15\xi_j^2 + 30\xi_j^3, & 0 \leq \xi_j \leq 0.2 \\ 1.25(1 - \xi_j)^3, & 0.2 \leq \xi_j \leq 1 \\ 0, & \xi_j \geq 1 \end{cases}$

Diferentes formas de função de correlação podem ser empregadas, como: exponencial, exponencial generalizada, Gaussiana, entre outros, como mostra a Tabela 1.

Neste trabalho considerou-se uma função de correlação Gaussiana (AFONSO, et al., 2008), onde n é o número total de variáveis e θ, k são os parâmetros de correlação utilizados para ajustar o modelo.

Para a geração de dados com o modelo rigoroso, optou-se por uma estratégia de planejamento experimental *LHS*. A amostragem baseada em *LHS* procura preencher o espaço de busca de forma que todas as dimensões do espaço vetorial sejam representadas (LOPHAVEN et al., 2002).

O algoritmo utilizado para a geração de planejamentos experimentais *LHS* neste trabalho baseia-se no procedimento descrito em SANTNER et al. (2003).

Foram gerados dois planejamentos com as variáveis manipuladas, um para os dados de construção do modelo Kriging com um número de amostras igual a 400 e outro para os dados de validação com 100 amostras. Outro planejamento experimental foi realizado para os distúrbios, onde se tornou possível avaliar o processo frente a dois casos diferentes de perturbações no processo.

Os dados que foram gerados no *LHS* foram inseridos no software Aspen Plus[®] onde foi possível realizar uma análise de sensibilidade no simulador através da ferramenta *Model Analysis Tools Sensitivity*, obtendo os dados através do modelo rigoroso.

Utilizou-se o toolbox DACE/MATLAB (LOPHAVEN et al., 2002a) que provê ferramentas para estimação dos parâmetros do modelo Kriging e simulação. Para isto, os dados obtidos com o planejamento *LHS* a partir do modelo rigoroso e a estrutura do modelo de regressão selecionada são alimentados ao toolbox, que procede a estimação de parâmetros (GOMES, 2007).

Um conjunto de dados de treinamento é utilizado na estimação de parâmetros através do procedimento nativo do toolbox DACE. Diferentes modelos Kriging são então gerados a partir de diferentes estimativas iniciais, selecionando-se aquele que proporcionar o menor erro de predição a partir de um conjunto de dados de validação (GOMES, 2007).

O toolbox DACE disponibiliza sete diferentes modelos de correlação, ficando a cargo do usuário determinar qual deles devesse ser utilizado. No procedimento implementado neste trabalho, a seleção do modelo de correlação foi incorporada ao procedimento de estimação de parâmetros. Para isto, o usuário seleciona um subconjunto desejado dos modelos de correlação disponíveis. (GOMES, 2007).

A avaliação de desempenho do interpolador Kriging foi realizada utilizando-se dos valores reais e estimados das variáveis para cada caso estudado. Para esta avaliação foi utilizado o índice de confiança (c), proposto por Camargo e Sentelhas (1997), que permite analisar conjuntamente a precisão e a exatidão dos resultados obtidos. Este índice é calculado pelo produto do coeficiente de correlação (r), conforme Eq. (3), e do índice de concordância (d), proposto por Willmott (1981) é explicitado na Eq. (4).

$$r = \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})(E_i - \bar{E})}{\sqrt{(\sum_{i=1}^N (O_i - \bar{O})^2)(\sum_{i=1}^N (E_i - \bar{E})^2)}} \quad (3)$$

$$d = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (O_i - E_i)^2}{\sum_{i=1}^N (|E_i - \bar{O}| + |O_i - \bar{O}|)^2} \quad (4)$$

onde N é o número total de experimentos, O_i é o valor real e E_i é o valor da variável estimada pelo método.

Ainda segundo os autores, a precisão do modelo é dada pelo coeficiente de correlação e a exatidão está relacionada ao afastamento dos valores estimados em relação aos observados; matematicamente, esta aproximação é dada pelo índice de concordância e seus valores variam de zero para nenhuma concordância a 1 para a concordância perfeita.

Os critérios de avaliação do desempenho de modelos quanto ao seu índice de confiança (c) estão apresentados na Tabela 2.

O coeficiente de determinação (R^2), ou simplesmente o quadrado do coeficiente de correlação, também servirá como índice estatístico para análise de desempenho, uma vez que este está associado à qualidade da regressão.

Tabela 2. Indicador de desempenho do interpolador utilizado segundo valores de c .

Valor de c	Desempenho
>0.85	Ótimo
0.76 a 0.85	Muito bom
0.66 a 0.75	Bom
0.61 a 0.65	Mediano
0.51 a 0.6	Sofrível
0.41 a 0.5	Mau
≤ 0.4	Péssimo

3.3 Otimização do processo

Para este trabalho, definiu-se a função objetivo (F_{obj}) a ser minimizada como sendo o consumo energético dos refeedores das colunas de destilação ($Q_{REBDUT1}$, $Q_{REBDUT2}$ e $Q_{REBDUT3}$) representada através da Eq. (5), a partir da manipulação das variáveis de decisão razão molar da vazão de destilado e alimentação, razão molar de refluxo, razão molar da vazão da base e alimentação e temperatura do trocador de calor.

As restrições do processo foram definidas como a razão molar de boilup da coluna 1 (x_1^{boilup}) e fração molar do propeno (x_2^{PROP}), de acordo com as Eqs. (6) e (7), respectivamente.

$$F_{obj} = Q_{REBDUT1} + Q_{REBDUT2} + Q_{REBDUT3} \quad (5)$$

$$x_1^{boilup} \leq 3 \quad (6)$$

$$x_2^{PROP} \geq 0.995 \quad (7)$$

Para realizar a otimização do modelo rigoroso, implementou-se a função objetivo a fim de atender à um problema muito comum em uma planta química: consumo de energia. As restrições e as variáveis manipuladas foram definidas baseadas no conhecimento do processo, bem como seus limites operacionais. Em seguida, realizou-se a Amostragem por Hipercubo Latino (LHS) que tem por objetivo gerar uma região do espaço amostral para as variáveis manipuladas. Os dados obtidos com o planejamento experimental foram utilizados no software Aspen Plus a fim de obter as variáveis respostas da simulação do processo, através de análises de sensibilidades. Após o levantamentos dos dados, partiu-se para o procedimento de otimização.

Já para a otimização no Matlab® a diferença principal consiste na otimização baseada na predição dos dados através do metamodelo Kriging, assim como o desenvolvimento de algoritmo de otimização no software Matlab.

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1 Comparação da predição do modelo rigoroso com o Kriging

A fim de analisar o metamodelo para diferentes situações de distúrbios no processo de recuperação de propeno, foram gerados dois planejamentos experimentais com as variáveis distúrbios, que são os fluxos molares de todos os componentes que entram no processo e a

temperatura da mesma corrente de alimentação. A Tabela 3 aborda o primeiro caso (caso 1) de distúrbio estudado.

Tabela 3. Valores das variáveis distúrbios para o caso 1

Variáveis	Valores
Vazão 1,3-BUTADIENO	4.012 (Kmol/hr)
Vazão 1-BUTENE	165.19 (Kmol/hr)
Vazão BUTANO	37.827 (Kmol/hr)
Vazão CIS-2-BUTENE	81.024 (Kmol/hr)
Vazão ETANO	43.028 (Kmol/hr)
Vazão ÁGUA	1.743 (Kmol/hr)
Vazão HEXANO	0.958 (Kmol/hr)
Vazão ISOBUTANO	113.54 (Kmol/hr)
Vazão ISOBUTENE	153.23 (Kmol/hr)
Vazão 2-METILBUTANO	3.778 (Kmol/hr)
Vazão PENTANO	2.873 (Kmol/hr)
Vazão PROPANO	138.26 (Kmol/hr)
Vazão PROPENO	478.51 (Kmol/hr)
Vazão TRANS-2-BUTENE	105.55 (Kmol/hr)
Temperatura da corrente 1	73.26 (°C)

Nas Figuras 4, 5 e 6 é possível analisar o comportamento das respostas do metamodelo frente o modelo rigoroso (Aspen).

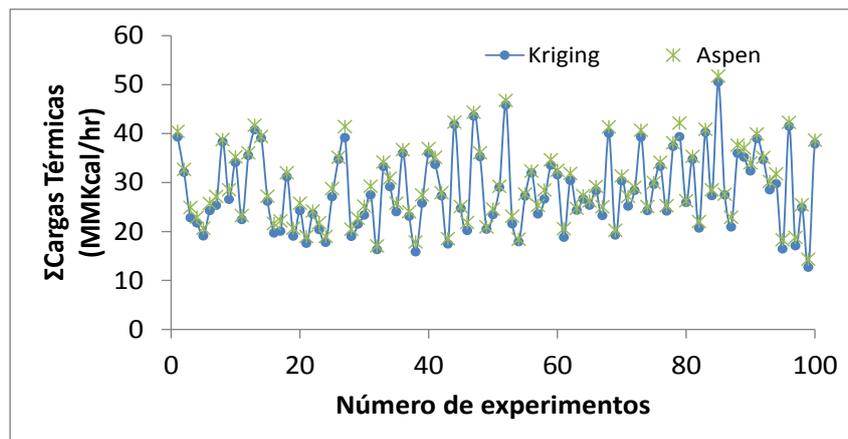


Figura 4. Comportamento da função objetivo estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

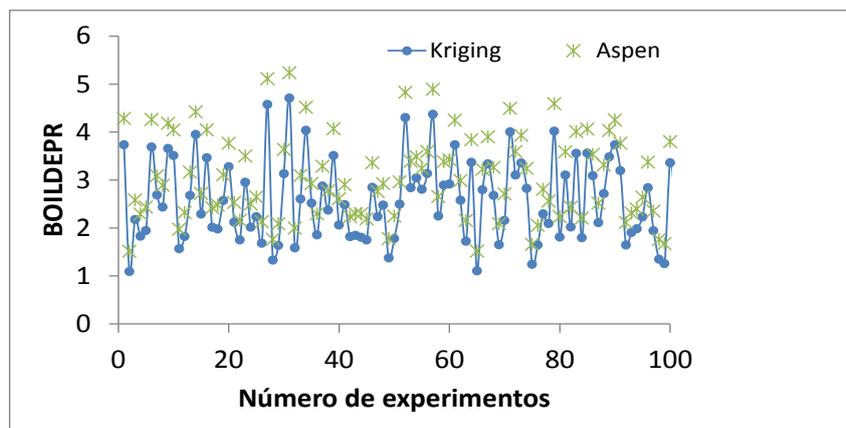


Figura 5. Comportamento da restrição 1 estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

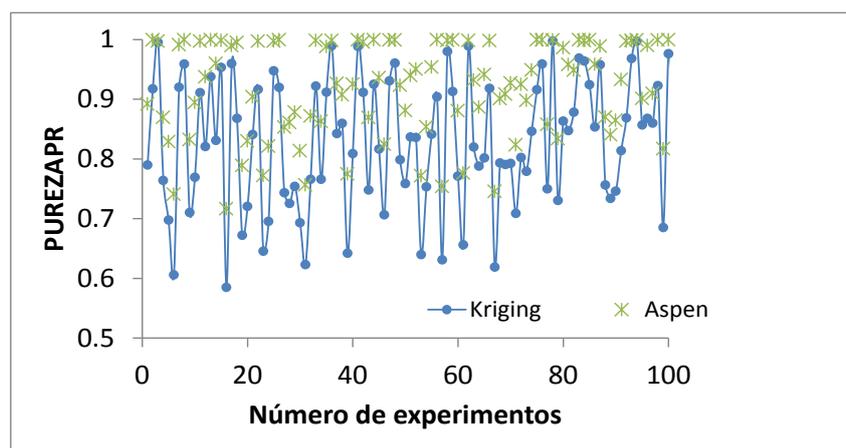


Figura 6. Comportamento da restrição 2 estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

Os modelos Kriging mostraram resultados satisfatórios para as predições das restrições de desigualdade e função objetivo, porém, para este caso, um erro de predição considerável é perceptível para a variável de pureza de propeno.

A Tabela 4 apresenta os índices estatísticos do coeficiente de correlação (r), coeficiente de determinação (R^2), índice de concordância (d) e índice de confiança (c) para cada variável de saída estimada pelo interpolador Kriging.

Tabela 4. Índices estatísticos calculados para à análise do desempenho do interpolador Kriging (caso 1)

	Σ REBDUT	BOILDEPR	PUREZAPR
R^2	0.995	0.993	0.889
r	0.9978	0.9965	0.9429
d	0.923	0.9978	0.61
c	0.92	0.994	0.57
Desempenho	Ótimo	Ótimo	Sofrível

O erro de predição é explicitamente pequeno para as variáveis 1 e 2, porém, a pureza de propeno não apresentou boa precisão e exatidão na sua estimativa, sugerindo que neste caso talvez fossem necessárias mais iterações para se chegar a melhores metamodelos. Com esse

intuito, realizou-se um melhor ajustamento dos parâmetros do Kriging e analisou-se a eficiência do metamodelo frente a outro cenário de perturbações na planta, como mostra a Tabela 5 que apresenta o segundo caso a ser estudado de distúrbios do processo.

Tabela 5. Valores das variáveis distúrbios para o caso 2

Variáveis	Valores
Vazão 1,3-BUTADIENO	4.319 (Kmol/hr)
Vazão 1-BUTENE	156.66 (Kmol/hr)
Vazão BUTANO	40.751 (Kmol/hr)
Vazão CIS-2-BUTENE	68.396 (Kmol/hr)
Vazão ETANO	47.382 (Kmol/hr)
Vazão ÁGUA	2.088 (Kmol/hr)
Vazão HEXANO	0.978 (Kmol/hr)
Vazão ISOBUTANO	127.647 (Kmol/hr)
Vazão ISOBUTENE	177.63 (Kmol/hr)
Vazão 2-METILBUTANO	3.18 (Kmol/hr)
Vazão PENTANO	3.177 (Kmol/hr)
Vazão PROPANO	141.38 (Kmol/hr)
Vazão PROPENO	469.96 (Kmol/hr)
Vazão TRANS-2-BUTENE	117.04 (Kmol/hr)
Temperatura da corrente 1	61.95 (°C)

As Figuras 7, 8 e 9 mostram a comparação entre as respostas do metamodelo frente ao modelo rigoroso para o segundo caso de distúrbios.

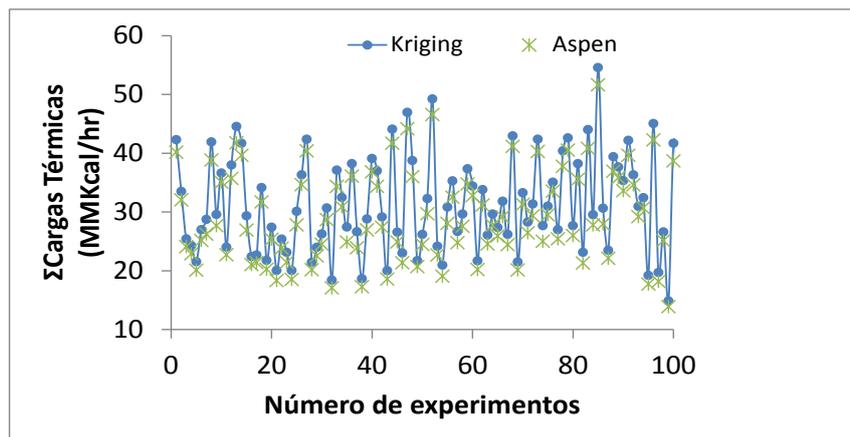


Figura 7. Comportamento da função objetivo estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

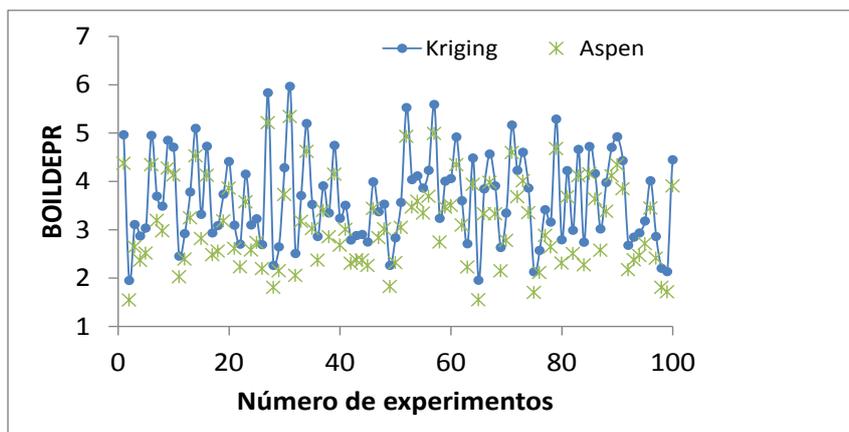


Figura 8. Comportamento da restrição 1 estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

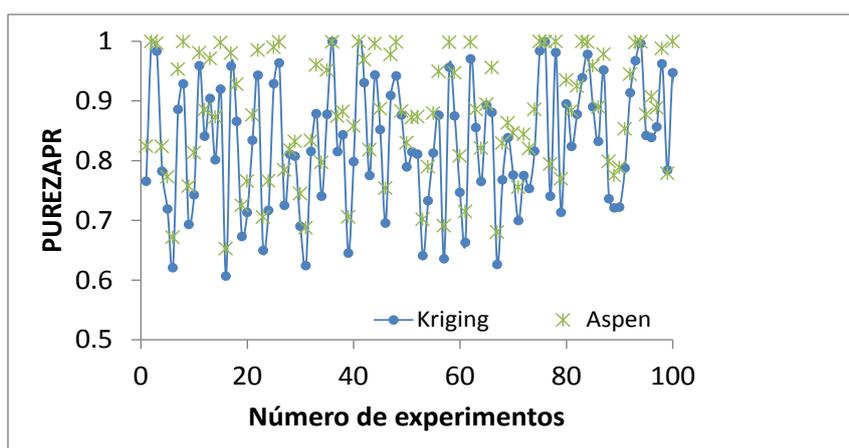


Figura 9. Comportamento da restrição 1 estimada pelos modelos Kriging e rigoroso.

A Tabela 6 mostra os índices estatísticos do modelo Kriging para o segundo cenário de perturbações no processo.

Tabela 6. Índices estatísticos calculados para à análise do desempenho do interpolador Kriging (caso 2)

	Σ REBDUT	BOILDEPR	PUREZAPR
R^2	0.998	0.999	0.961
r	0.9991	0.9996	0.9808
d	0.925	0.913	0.93
c	0.92	0.91	0.91
Desempenho	Ótimo	Ótimo	Ótimo

Avaliando os resultados da tabela acima, nota-se o ótimo desempenho do método Kriging na predição dos dados. Não houve variação expressiva do valor do índice de concordância (d) para as variáveis avaliadas, com os valores se mantendo próximos a 1 (um), o que pode indicar exatidão do modelo selecionado. Assim, pode-se afirmar que matematicamente existe uma aproximação entre os valores reais e os valores estimados pelo modelo de interpolação testado para as variáveis em estudo. Além disso, o coeficiente de determinação (R^2) manteve-se também próximo a 1 (um) para as 3 variáveis, indicando boa exatidão do metamodelo.

Comparando as duas variáveis pureza de propeno e *boilup* da coluna 1 nos dois casos analisados de distúrbios no processo, apesar de graficamente se mostrarem de forma similar, para o caso 2 as mesmas apresentaram uma diferença entre os valores reais e estimados bem menor, tornando o metamodelo mais preciso. Com um aumento no valor do coeficiente de determinação, conclui-se também um melhor ajustamento do modelo estatístico em relação aos valores observados.

4.2 Otimização

O problema de otimização limitou-se em minimizar a função das cargas térmicas dos refeedores das três colunas de destilação considerando as restrições de pureza de propeno e taxa de *boilup* da coluna despropanizadora.

Os modelos submetidos à otimização foram obtidos a partir dos casos de simulação e avaliação estatística, segundo os itens descritos anteriormente. Dois procedimentos de otimizações foram realizados, em um método foi utilizado o Matlab através da construção de algoritmos complexos e no outro método utilizou-se o software Aspen Plus para a otimização do modelo rigoroso.

É utilizado a função *fmincon* do *toolbox* de otimização do programa Matlab no algoritmo para a otimização, que aplica o método do ponto interior na solução do problema.

Para a otimização no software Aspen Plus, utilizou-se a ferramenta *Model Analysis Tool/Optimization*, que aplica o Método da Programação Quadrática Sequencial (*SQP*) para a resolução de problemas de otimização não linear com restrições lineares e não lineares de igualdade e desigualdade. Neste trabalho, todas as restrições são lineares de desigualdade. A Figura 10 mostra a interface dessa ferramenta, onde as informações necessárias foram inseridas e nenhum algoritmo de programação adicional foi necessário para obter as respostas da otimização.

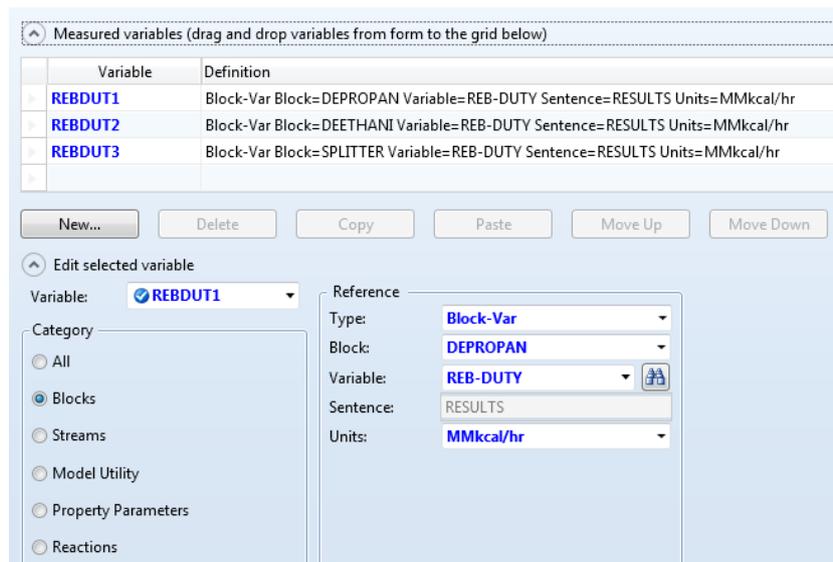


Figura 10. Interface da ferramenta *Optimization* do Aspen Plus

A Tabela 7 mostra os resultados obtidos para a otimização realizada no Aspen Plus.

Tabela 7. Resultados da otimização do Aspen

Resultado	Aspen
Função Objetivo (MMKcal/hr)	18.48
Restrição 1	0.98
Restrição 2	2.08
Variável Manipulada 1	0.46
Variável Manipulada 2	1.49
Variável Manipulada 3	0.7
Variável Manipulada 4	0.78
Variável Manipulada 5	42
Variável Manipulada 6	1.91
Variável Manipulada 7	35.1

Uma vantagem da otimização realizada no Aspen Plus é a facilidade da disposição do problema através da interface bem definida para o usuário, evitando-se a elaboração de algoritmos complexos. Entretanto, para este caso, verificaram-se problemas na obtenção de determinadas soluções, como por exemplo, a não convergência do procedimento para uma restrição de fração molar de propeno (restrição1) ≥ 0.995 , ou para limites mais amplos de outras variáveis. Esse representa um problema fundamental para o caso estudado, uma vez que há necessidade de obter propeno de alta pureza ($>99.5\%$).

Para a otimização através da predição de dados pelo método Kriging realizada pela função *fmincon* do Matlab, ocorreu convergência de solução ótima com poucas execuções do algoritmo, tendo-se conseguido obedecer a restrição de pureza do produto além das demais restrições. Para esse caso, os resultados são mostrados na Tabela 8.

Tabela 8. Resultados da otimização através do modelo Kriging no Matlab

Resultados	Matlab (Kriging)
Função Objetivo (MMKcal/hr)	20.5
Restrição 1	0.995
Restrição 2	2.27
Variável Manipulada 1	0.46
Variável Manipulada 2	2.8
Variável Manipulada 3	0.7
Variável Manipulada 4	0.75
Variável Manipulada 5	39.4
Variável Manipulada 6	1.93
Variável Manipulada 7	35

Ao realizar o procedimento de otimização com a restrição de pureza de propeno >0.995 , ocorreu, como era esperado, aumento no valor da função objetivo que representa o somatório das cargas térmicas dos refeedores das três colunas de destilação, visto que quanto maior a pureza obtida na corrente de produto, maior a energia necessária para promover a separação.

Objetivando a comparação dos dois procedimentos de otimização, um teste foi realizado, que consistiu em inserir no Aspen Plus os valores ótimos para as variáveis manipuladas

geradas através da otimização no Matlab com o metamodelo, tomando como base os resultados expostos na Tabela 8. Na Tabela 9 torna-se possível avaliar as otimizações.

Tabela 9. Comparação dos resultados das otimizações do Aspen Plus e do modelo Kriging no Matlab

Resultados	Matlab (Kriging)	Aspen
Função Objetivo (MMKcal/hr)	20.5	21.01
Restrição 1	0.995	0.997
Restrição 2	2.27	3

Estes resultados mostram claramente o bom desempenho do metamodelo Kriging associado à otimização no Matlab, apresentando boa aderência à solução rigorosa, considerando-se os valores finais das variáveis de decisão da função objetivo e das restrições.

A capacidade do metamodelo de representar adequadamente as variáveis de otimização pode ser avaliada através do desvio entre a função objetivo aproximada e a do caso base que foi de aproximadamente 2,42%. Essa diferença é justificável pelo fato de que a otimização realizada no Matlab foi baseada nos dados de predição do metamodelo Kriging, cujo erro de estimativa apesar de mínimo, existe. Além disso, um metamodelo é uma função analítica que aproxima a resposta de um modelo numérico complexo, ou seja, aspectos fenomenológicos não são incorporados a Krigagem para a predição das respostas, contraditoriamente no que acontece no Aspen.

5 CONCLUSÕES

Os metamodelos Kriging utilizados neste trabalho conseguiram substituir, com alto desempenho, os modelos de processo rigorosos, proporcionando maior confiabilidade quando a solução do modelo rigoroso fica sujeita a problemas de não convergência. A utilização do modelo Kriging neste trabalho cumpre o propósito do estudo da sua aplicabilidade na otimização e na modelagem de processos químicos.

A otimização possibilitou obter o propano de alta pureza com uma fração molar de 99,5% no destilado, com o mínimo de desperdício de vapor e conseqüente mínimo consumo de energia, visto que a carga térmica do refeedor é a principal fonte de calor da coluna.

Os resultados obtidos mostram que a manipulação na carga térmica do refeedor é um fator crucial tanto na qualidade da separação quanto na redução de gastos energéticos.

AGRADECIMENTOS

Ao apoio financeiro da CAPES e a todos os colaboradores deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- AFONSO, S. M. B., HOROWITZ, B. & WILMERSDORF, R. B., 2008. *Comparative Study of Surrogate Models for Engineering Problems*. ASMO-UK (Association for Structural and Multidisciplinary Optimization in the UK)(Bath): s.n.
- BLANNING, R.W, 1974, "The Sources and Uses of Sensitivity Information". *Interfaces*. Vol. 4, No. 4, pp. 21-23.
- BLANNING, R.W, 1975, "Response to Michel, Kleijnen and Permut". *Interfaces*. Vol. 5, No. 3, pp. 24-25.

- CAMARGO, Â. P.; SENTELHAS, P.C. Avaliação do desempenho de diferentes métodos de estimativa da evapotranspiração potencial no estado de São Paulo, Brasil. *Revista Brasileira de Agrometeorologia*, v.5, n.1, p.89-97, 1997.
- CAMARGO, E. C. G. Desenvolvimento, implementação e teste de procedimentos geoestatísticos (krigagem) no sistema de processamento de informações georeferenciadas (SPRING). São José dos Campos, 1997. 115 p. Dissertação (Mestrado em Sensoriamento Remoto) – INPE.
- CLARKE, S.M., GRIEBSCHE, J.H., SIMPSON, T.W., 2005, “Analysis of Support Vector”.
- ECHARD, B., GAYTON, N., LEMAIRE, M., RELUN, R. 2013: A combined Importance Sampling and Kriging reliability method for small failure probabilities with time-demanding numerical models – *Reliability Engineering and System Safety*, v.111, p. 232-240.
- FONSECA, L.G., 2009, Algoritmos Genéticos Assistidos por Metamodelos Baseados em Similaridade. Tese de D.Sc., LNCC/MCT, Petrópolis, RJ.
- FORRESTER, A., SOBESTER, A. & KEANE, A., 2008. *Engineering Design Via Surrogate Modelling: A Practical Guide*. Wiley. Giunta, A.A., 2002. “Use of data sampling, surrogate models, and numerical optimization in engineering design”. In *Proceedings of the 40th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. Reno, NV.
- FOUST, A. S. et al. *Principios de Operaciones Unitarias*, 2.ed. México: CECSA, 1987. p. 751
- GIUNTA, A. A. & WATSON, L., 1998. A Comparison of Approximation Modeling Techniques: Polynomial versus Interpolating Models. s.l., AIAA-98-4758.
- GOLDBARG, M. C., LUNA, H. P. L. *Otimização combinatória e programação linear: modelos e algoritmos*. Rio de Janeiro: Campus, 2000.
- GOMES, M.V.C., 2007, *Otimização sequencial por aproximações – Uma aplicação em tempo real para o refino de petróleo*. Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- GOOVAERTS, P. Geostatistics in soil science: state-of-art and perspectives. *Geoderma*, v. 89, p. 1-45, 1999.
- GUTMANN, H. M., 2001. A Radial Basis Function Method for Global Optimization. *Journal of Global Optimization*, p. 201–227.
- KARTAM, N., FLOOD, I., GARRETT, J. H. & Agrawal, G., 1997. *Artificial Neural Networks for Civil Engineers: Fundamentals and Applications*. s.l.:ASCE Publications.
- KEANE, A. J. & NAIR, P. B., 2005. *Computational Approaches for Aerospace Design: The pursuit of Excellence*. Hoboken: John Wiley & Sons Inc.: s.n.
- KLEIJNEN, J.P.C., 1975, "A Comment on Blanning's "Metamodel for Sensitivity Analysis: The Regression Metamodel in Simulation"". *Interfaces*. Vol. 5, No. 3, pp. 21-23
- KLEIJNEN, J.P.C., SARGENT, R.G., 2000, "A Methodology for Fitting and Validating Metamodels in Simulation". *European Journal of Operational Research*, Vol. 120, pp. 14-29.
- LANDIM, P. M. B. *Análise estatística de dados geológicos*. São Paulo: Fundação Editora da Unesp, 1998. 226 p.
- LOPHAVEN, S.N., NIELSEN, H.B., SONDERGAARD, J. 2002, *Aspects of MATLAB Toolbox DACE*, Technical Report IMM-REP-2002-13, 2002 Technical University of Denmark, Denmark.
- MCKAY, M. D., BECKMAN, R. J. & CONOVER, W. J., 1979. A Comparison of Three Methods for Selecting Values of Input Variables in the Analysis of Output from a Computer Code. *Technometrics*, Vol. 21, No. 2, pp. 239-245.
- MECKESHEIMER, M., BARTON, R., SIMPSON, T. et al., 2001, “Metamodeling of Combined Discrete/Continuous Responses”, *AIAA Journal*, v. 39, n. 10, pp. 1950-1959.

- MECKESHEIMER, M., BOOKER, A.J., BARTON, R. et al., 2002, "Computationally Inexpensive Metamodeling Assessment Strategies", *AIAA Journal*, v. 40, n. 10, pp. 2053-2060.
- MICHEL, A.J., PERMUT, S.E., 1975, "A Comment on Blanning's "The Sources and Uses of Sensitivity Information"". *Interfaces*, Vol. 5, No. 3, pp. 19-20.
- MIKHEEV, 2011. *Encyclopedia of Mathematics*. [Online] Available at: http://www.encyclopediaofmath.org/index.php?title=Latin_square&oldid=15140 [Acesso em 18 04 2016].
- NAIDU, S. L. S., 2004. *Neural Network Surrogate Model For Multidisciplinary Design Optimization*. s.l.:M. Tech. Dissertation, Indian Institute of Technology.
- PINTO, J. W. O., 2014, *Uso da otimização sequencial aproximada a problemas Uni e multiobjetivos de gerenciamento de reservatórios*. Dissertação, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, Brasil.
- QUEIPO, N. V. et al., 2005. Surrogate-based analysis and optimization. *Progress in Aerospace Sciences*, Volume 41, p. 1–28.
- RAJ, D., 1968. Sampling Theory. New York: McGraw-Hill. Regression for Approximation of Complex Engineering Analyses", *Journal of Mechanical Design*, n. 127, v. 6, pp. 1077-1087.
- ROCHA, R. S. Determinação Experimental de Correntes do Processo de Destilação Molecular de Resíduos de Petróleo e Extensão da Curva PEV, 2008. 190 f. Tese (Mestrado em Engenharia Química) - Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2008.
- SÁNCHEZ, I. F. H., 2011. *Quadrados Latinos com Aplicações em Engenharia de Software*, Dissertação de Mestrado. Recife: UFPE.
- SANTNER, T.J., WILLIAMS, B.J., NOTZ, W.I., 2003, *The Design and Analysis of Computer Experiments*, New York, Springer-Verlag.
- SEADER, J. D.; HENLEY E. J.; *Separation Process Principles*, 1998, 2nd (2005) Editions. John Wiley & Sons Inc.
- SILVA, E. E. Otimização de estruturas de concreto armado utilizando algoritmos genéticos. Trabalho de dissertação – Universidade de São Paulo. 2001.
- YAMAMOTO, J. K.; CONDE, R.. Classificação de recursos minerais usando a variância da interpolação. *Revista Brasileira de Geociência*, v. 29, n. 3, p. 349-56, 1999.