



UFBA

UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI

MESTRADO PROFISSIONAL EM ENGENHARIA INDUSTRIAL

ADILTON LOPES DA SILVA

ANALISADORES VIRTUAIS E CONTROLE AVANÇADO
PARA UMA PLANTA INDUSTRIAL DE POLIETILENO LINEAR
E AVALIAÇÃO DE SEUS BENEFÍCIOS ECONÔMICOS



SALVADOR
2023



**UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA
INDUSTRIAL**

ADILTON LOPES DA SILVA

**Analisadores Virtuais e Controle Avançado para uma Planta
Industrial de Polietileno Linear e Avaliação de seus Benefícios
Econômicos**

Salvador

2023

ADILTON LOPES DA SILVA

Analísadores Virtuais e Controle Avançado para uma Planta Industrial de Polietileno Linear e Avaliação de seus Benefícios Econômicos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial da Universidade Federal da Bahia, em cumprimento às exigências para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Industrial.

Orientador: Prof. Marcelo Embiruçu

Salvador

2023

S586 Silva, Adilton Lopes da.
Analisadores virtuais e controle avançado para uma planta industrial de polietileno linear e avaliação de seus benefícios econômicos / Adilton Lopes da Silva. – Salvador, 2023.
187 f.: il. color.

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Embiruçu de Souza.

Dissertação (mestrado) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial - Universidade Federal da Bahia - Escola Politécnica, 2023.

1. Controle avançado. 2. Redes neurais artificiais. 3. Polietileno. 4. Model predictive control. I. Souza, Marcelo Embiruçu. II. Universidade Federal da Bahia. III. Título.


CDD: 668.423

Analísadores Virtuais e Controle Avançado para uma Planta Industrial de Polietileno Linear e Avaliação de seus Benefícios Econômicos

ADILTON LOPES DA SILVA


Dissertação submetida ao corpo docente do programa de pós-graduação em Engenharia Industrial da Universidade Federal da Bahia como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Industrial.

Examinada por:

Documento assinado digitalmente
 **CRISTIANO HORA DE OLIVEIRA FONTES**
Data: 07/12/2023 14:46:33-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>


Prof. Cristiano Hora de Oliveira Fontes - UFBA (Presidente)

Doutor em Engenharia Química pela Universidade Estadual de Campinas, UNICAMP, Brasil

Documento assinado digitalmente
 **JOSE CARLOS COSTA DA SILVA PINTO**
Data: 11/12/2023 10:08:33-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>


Prof. José Carlos da Costa Pinto - UFRJ

Doutor em Engenharia Química pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Brasil

Documento assinado digitalmente
 **DIEGO MOREIRA DE ARAUJO CARVALHO**
Data: 07/12/2023 19:42:48-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Prof. Diego Moreira de Araujo Carvalho

Doutor em Engenharia de Sistemas e Computação pela Universidade Federal do Rio de Janeiro, UFRJ, Brasil

Documento assinado digitalmente
 **CARLOS DE FREITAS ALFANO NETO**
Data: 21/12/2023 09:36:06-0300
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

Eng. Carlos de Freitas Alfano Neto (Braskem)

Mestre em Engenharia Química pela Universidade Federal da Bahia, UFBA, Brasil

Salvador, BA - BRASIL
Dezembro/2023

Agradecimentos

Primeiramente agradeço à minha família por todo o apoio ao longo da vida. Ao meu pai Almeida Alves da Silva (in memorian), um homem com muita inteligência, mas com pouca oportunidade. Retirante do interior do Nordeste que através de muito esforço físico nos proporcionou uma vida mínima para traçarmos nossos caminhos. Um exemplo de pai; esposo; profissional e, assim de tudo, um homem de verdade. Sem o seu esforço eu estaria trabalhando em cima de um caminhão no sol quente e vivendo com o mínimo do mínimo. Minha mãe por todo o cuidado, carinho e dedicação para nos criar como pessoas íntegras e saudáveis. Meu irmão Adriano pelo apoio e pareceria de sempre, pois sem a sua ajuda meu caminho seria muito mais árduo. Minha esposa e filho por todo o amor. Vocês são minha inspiração para sempre buscar o melhor.

Agradeço ao meu amigo Christian Di Maggio pelos ensinamentos e por sempre acreditar no meu potencial.

Agradeço ao Prof. Marcelo Embiruçu pela orientação, pelas discussões produtivas e apoio na construção desse trabalho. Não tenho dúvidas que fiz uma excelente escolha.

Agradeço à BRASKEM, grande empresa onde comecei minha carreira, fiz grandes amigos, e me desenvolvi como pessoa e profissional. Gostaria de agradecer, em especial, aos meus líderes Fernando Rocha, Kleber Lima, Ricardo Muller e Aline Milani pelo apoio, ensinamentos e, principalmente, pelo exemplo.

Dedicatória

Dedico este trabalho a todos os professores que tem uma função incomensurável na humanidade. Em especial aos professores: Diná (Escola Romulo Galvão de Almeida); Ana Cristina de Ciências (Colégio Estadual Bolivar Santana); professor Magno de Física (Colégio Mauro Augusto Teixeira de Freitas). Figuras exemplares que marcaram meu caminho.

Lista de Símbolos e Abreviaturas

Símbolos

a	Coeficientes das dependências
$a_{i,j}$	Coeficiente da variável i dos modelos de processo j
b_j	<i>bias</i> do neurônio j
CM	Relação mássica na alimentação entre o comonômero e o monômero
D	Efeito da dinâmica em cada variável de entrada
DT	Diferencial de temperatura da reação
Et	Concentração mássica de eteno na solução
f	Função de ativação
f^{-1}	Função inversa
h	MI muito alto
H_2	Concentração de hidrogênio da solução
l	MI muito baixo
NE	Número de entradas da RNA
ND	Número de dados experimentais
p_{ij}	Peso da entrada i no neurônio j
R^2	Coeficiente de determinação
R+	Relação direta
R-	Relação inversa
SS_R	Soma de quadrados da regressão
SS_T	Soma total de quadrados
t_d	Atrasos de tempo do sistema
T_i	Temperatura de entrada
TI	Termo independente
T_o	Temperatura de saída
X1	Alimentação lateral do reator (%)
X2	Relação mássica comonômero/ monômero (adimensional)
X3	Concentração de hidrogênio (ppm)
X4	Concentração mássica de eteno (%)
X5	Temperatura do tratamento térmico (°C)

X6	Diferencial de pressão do sistema (kgf/cm ²)
X7	Razão molar do redutor (adimensional)
X8	Vazão total (t/h)
β_n	Coefficiente linear
α_i	Coefficiente angular
ε	Erro quadrático
$\mu_{i,j}$	Entrada i do neurônio j
γ	Parâmetro da função linear da camada de saída
δ	Parâmetro da função linear da camada de saída
y	Saída do neurônio
α_i	Peso do neurônio i
$\beta_{MI,i}$	Parâmetro de correlação da entrada i com a variável MI
ρ	Densidade
$\beta_{\rho,i}$	Parâmetro de correlação da entrada i com a variável Densidade
θ	Variável desvio da densidade
τ	Constantes de tempo do sistema
\dot{V}	Vazão total da solução
$k_{\Delta T, Imp}$	Perturbação não medida aditiva que emula o efeito de impurezas no processo
ΔT	Varição na temperatura

Abreviaturas

AL	Agente alquilante
APC	<i>Advanced Process Control</i>
CAP	Controle Avançado de Processo
CAT	Catalisador
CSTR	<i>Continuous Stirred Tank Reactor</i>
CTA,	<i>Chain Transfer Agent</i>
DENS	Densidade
EPF	Especificação de Produto Final
FC	Filme octeno
FK	Filtro de Kalman
HTC	<i>Heater Treatment Catalytic</i>

IA	Injeção de alta densidade
IB	Injeção de baixa densidade
IMP	Impurezas
IPS	<i>Intermediate Pressure Separator</i>
LCQ	Laboratório de Controle de Qualidade
LIE	Limite Inferior de Especificação
LIM	Limite Inferior de Mistura
LPS	<i>Low Pressure Separator</i>
LSE	Limite Superior de Especificação
LSM	Limite Superior de Mistura
MI	<i>Melt Index</i>
MIMO	<i>Multi-Input Multi-Output</i>
MISO	<i>Multi-Input Single-Output</i>
MPC	<i>Model Predictive Control</i>
NMPC	<i>Nonlinear Model Predictive Control</i>
PEAD	PoliEtileno de Alta Densidade
PEL	PoliEtileno Linear
PELBD	PoliEtileno Linear de Baixa Densidade
PEMD	PoliEtileno de Média Densidade
PID	Proporcional-Integral-Derivativo
RD	Agente redutor
RNA	Rede Neural Artificial
RO	Rotomoldagem
ROI	<i>Return On Investment</i>
SEX	<i>Stress Exponent</i>
SISO	<i>Single-Input Single-Output</i>
TIR	Taxa Interna de Retorno
VPL	Valor Presente Líquido

Sumário

Capítulo I – Introdução.....	1
Resumo	1
I.1. A Importância, os Objetivos e a Organização do Trabalho	2
I.2. Comentários Gerais	5
Capítulo II – Revisão Bibliográfica.....	7
Resumo	7
II.1. Processos de Produção de Polietileno.....	8
II.2. Controle Preditivo Baseado em Modelo de Processo	13
II.3. MPC na Indústria de Polietileno	16
II.4. Analisadores Virtuais.....	22
II.5. Conclusões	27
Referências Bibliográficas.....	27
Capítulo III – Projeto Conceitual do Sistema de Controle	31
Resumo	31
III.1. Objetivos Gerais de Controle	32
III.2. Descrição do Processo - Planta PEL.....	32
III.3. Objetivos e Requisitos Específicos de Controle.....	36
III.3.1. Controle de <i>Melt Index</i> (MI).....	36
III.3.2. Controle de Densidade	37
III.3.3. Controle de Conversão	37
III.3.4. Ativação do Catalisador.....	37
III.3.5. Controle Regulatório	38
III.3.6. Matriz de Controle.....	40
III.3.7. Matriz de Controle 1: Rotomoldagem, Injeção de Baixa Densidade e Injeção de Alta Densidade (Copolímero de Buteno).....	42
III.3.8. Matriz de Controle 2: Injeção de Alta Densidade (Homopolímero)	43
III.3.9. Matriz de Controle 3: Filme Buteno.....	44
III.3.10. Indicadores de Desempenho.....	46
III.4. Conclusões.....	46
Capítulo IV – Estudo de Viabilidade Econômica.....	47
Resumo	47

IV.1. Introdução.....	48
IV.2. Especificação de Produtos.....	48
IV.3. Variáveis-Chave	49
IV.4. Análise Estatística dos Dados de Processo: Oportunidades de Benefícios com Especificação de MI e Densidade.....	50
IV.4.1. Rotomoldagem	53
IV.4.2. Injeção de Baixa Densidade	55
IV.4.3. Filme Octeno	57
IV.4.4. Injeção de Alta Densidade.....	59
IV.5. Outras Oportunidades de Benefícios com a Implantação do CAP.....	61
IV.5.1. Retrabalho	61
IV.5.2. Transição de Resinas	62
IV.5.3. Redução do Consumo de Catalisador.....	64
IV.6. Ganhos e Benefícios Econômicos e Financeiros e Custos Associados ao Projeto	65
IV.7. Conclusões	68
Referências Bibliográficas.....	68
Capítulo V – Analisadores Virtuais para MI e Densidade Baseados em RNA.....	70
Resumo	70
V.1. Introdução	71
V.2. Redes Neurais Artificiais (RNA).....	72
V.2.1. As Funções de Transferência ou de Ativação.....	74
V.3. Etapas da Construção dos Modelos de RNA.....	75
V.3.1. Arquitetura da Rede.....	75
V.3.2. Treinamento e Validação.....	79
V.3.3. Uma Abordagem Integrada para Definição da Arquitetura e Validação do Modelo.....	81
V.4. Modelos Desenvolvidos com Redes Neurais Artificiais	89
V.4.1. Dados Experimentais	90
V.4.2. Seleção das Variáveis de Entrada dos Modelos	92
V.4.3. Modelo de <i>Melt Index</i> (MI)	106
V.4.4. Modelo de Densidade	109
V.4.5. Teste de Validação Estatística	113
V.4.6. Validação Operacional dos Modelos	113

V.5. Conclusões.....	121
Referências Bibliográficas.....	122
Capítulo VI – Projeto e Simulação do Controle Avançado.....	126
Resumo	126
VI.1. Introdução.....	127
VI.2. Controle Preditivo Baseado em Modelo	127
VI.3. Modelagem do Processo.....	128
VI.3.1. Abordagem Baseada no Uso da Experiência dos Especialistas	129
VI.3.2. Modelo Desenvolvido para o MPC	132
VI.4. O Controle de Produtividade e Conversão	139
VI.5. Simulação do MPC.....	141
VI.6. Conclusões	153
Referências Bibliográficas.....	154
Apêndice VI.A. Resultados dos Questionários Aplicados aos Especialistas - Densidade	154
Apêndice VI.B. Relações Dinâmicas entre Variáveis de Entrada e Saída e Utilização da Modelagem Especialista na Construção do Modelo Usado nas Simulações.....	157
Capítulo VII – Considerações Finais e Sugestões para Trabalhos Futuros.....	164
Resumo	164
VII.1. Considerações Finais.....	165
VII.2. Sugestões para Trabalhos Futuros.....	169

Lista de Figuras

Figura II-1. Resumo Esquemático das Tecnologias de Produção de Polietileno.	10
Figura II-2. Resumo Esquemático de Técnicas de Controle Avançado (Agachi <i>et al.</i> , 2006).....	12
Figura II-3. Formulação de um Controlador MPC (Agachi <i>et al.</i> , 2006).....	14
Figura II-4. Estrutura Básica de um MPC (Camacho e Bordons, 1998).....	15
Figura III-1. Fluxograma Simplificado do Processo PEL.	33
Figura III-2. Malha de Controle de Concentração de Eteno.....	39
Figura IV-1. Limites de Especificação.	49
Figura IV-2. Dispersão de Dados de Densidade em Rotomoldagem.	54
Figura IV-3. Dispersão de Dados de <i>Melt Index</i> em Rotomoldagem.....	54
Figura IV-4. Dispersão de Dados de Densidade em Injeção de Baixa Densidade.....	56
Figura IV-5. Dispersão de Dados de <i>Melt Index</i> em Injeção de Baixa Densidade.....	56
Figura IV-6. Dispersão de Dados de Densidade em Filme Octeno.....	58
Figura IV-7. Dispersão de Dados de MI na Família de Filme Octeno.	58
Figura IV-8. Dispersão de Dados de Densidade na Família de Injeção de Alta Densidade.	60
Figura IV-9. Dispersão de Dados de MI na Família de Injeção de Alta Densidade.	60
Figura IV-10. Planejamento de Transições usualmente Praticado na Planta.	63
Figura IV-11. Fluxo de Caixa.....	67
Figura V-1. Analogia entre um Neurônio Biológico e um Artificial (Basheer e Hajmeer, 2000).....	72
Figura V-2. Estrutura de um Neurônio Artificial [Modificado de Haykin (1999)].....	73
Figura V-3. Topologia de uma Rede Neural Artificial: 3, 4, 3 (Entrada, Camada Oculta, Saída).....	76
Figura V-4. Curvas de Aprendizado para Redes de Múltiplas Camadas com Vários Neurônios na Camada Oculta (Rafiq <i>et al.</i> , 2001).	80
Figura V-5. Ilustração da Técnica de Parada Antecipada.	81
Figura V-6. Modelo Tipo MISO.	82
Figura V-7. Topologia de uma RNA com uma Saída e uma Camada Intermediária com um Neurônio.....	84

Figura V-8. Fluxograma de Definição do Número Ótimo de Neurônios da Camada Oculta.	89
Figura V-9. Região dos Dados Experimentais.	90
Figura V-10. Matriz de Correlação: Variáveis de Entrada.	97
Figura V-11. Modelo RNA para MI: Erro Quadrático Médio <i>versus</i> Número de Neurônios.	107
Figura V-12. Modelo RNA para <i>Melt Index</i> (MI): Erro Percentual.	108
Figura V-13. Modelo RNA para <i>Melt Index</i> (MI): Relação Dados Estimados <i>versus</i> Dados Reais $r^2 = 0.970$	108
Figura V-14. Resultados da Rede Neural Artificial para <i>Melt Index</i> (MI) em Variáveis Dimensionais (Dimensões Industriais).	109
Figura V-15. Modelo RNA para Densidade: Erro Quadrático médio <i>versus</i> Número de Neurônios.	111
Figura V-16. Modelo RNA para Densidade: Erro Percentual.	112
Figura V-17. Modelo RNA para Densidade: Relação Dados Estimados <i>versus</i> Dados Reais $r^2 = 0.983$	112
Figura V-18. Resultados da Rede Neural Artificial para Densidade em Variáveis Originais (Valores e Dimensões Industriais).	113
Figura V-19. Validação Operacional - Transição Rotomoldagem → Injeção de Alta Densidade: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual.	116
Figura V-20. Validação Operacional - Transição Filme Buteno → Rotomoldagem: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual. ...	118
Figura V-21. Validação Operacional - Transição Injeção de Baixa Densidade → Rotomoldagem: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual.	120
Figura VI-1. Estrutura de um Controlador Preditivo Baseado em Modelo.	128
Figura VI-2. Tipos Referenciais de Respostas ao Degrau Exemplificados para a Densidade: (a) Resposta Inversa; (a) Primeira Ordem; (c) Segunda Ordem ou Ordem Superior Sobreamortecida; (d) Resposta Sobrelevada.	131
Figura VI-3. Resposta da Pressão no Reator Frente a Variações em: (a) Concentração de Hidrogênio; (b) Temperatura do Tratamento Térmico; (c) Diferencial de Temperatura na Reação.	138

Figura VI-4. Diagrama de Blocos Representativo do Modelo do Processo (“Planta”) Utilizado nas Simulações do MPC.	139
Figura VI-5. Controle de Temperatura da Reação.	141
Figura VI-6. Esquemático de Simulação do MPC.	144
Figura VI-7. Simulações de Controle - Resinas com Hidrogênio.	146
Figura VI-8. Simulações de Controle - Resinas sem Hidrogênio.....	148
Figura VI-9. Simulações de Controle - Problema Regulador.....	151
Figura VI-10. Simulações de Controle - Problema Regulador: Intervalo de Tempo 20 - 40 min.	152
Figura VI-11. Respostas Resultado do Degrau na Razão Buteno/ Eteno em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.	155
Figura VI-12. Respostas Resultado do Degrau na Concentração de Eteno em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.	156
Figura VI-13. Respostas Resultado do Degrau na Concentração de Hidrogênio em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.	156
Figura VI-14. Respostas Resultado do Degrau no Diferencial de Temperatura da Reação em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.	157

Lista de Tabelas

Tabela II.1. Resumo das Referências Bibliográficas em MPC	21
Tabela II.2. Resumo das Referências Bibliográficas em Analisadores Virtuais	25
Tabela III.1. Controles Regulatórios	40
Tabela III.2. Matriz de Controle 1*	43
Tabela III.3. Matriz de Controle 1 - Objetivos de Controle	43
Tabela III.4. Restrições para a Matriz de Controle 1.....	43
Tabela III.5. Matriz de Controle 2*	44
Tabela III.6. Matriz de Controle 2 - Objetivos de Controle	44
Tabela III.7. Restrições para a Matriz de Controle 2.....	44
Tabela III.8. Matriz de Controle 3*	45
Tabela III.9. Matriz de Controle 3 - Objetivos de Controle	45
Tabela III.10. Restrições para a Matriz de Controle 3.....	45
Tabela IV.1. Resumo das Informações sobre os Dados Coletados para o Estudo de Viabilidade Econômica.....	52
Tabela IV.2. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Rotomoldagem	55
Tabela IV.3. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Injeção de Baixa Densidade	57
Tabela IV.4. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Filme Octeno	59
Tabela IV.5. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Injeção de Alta Densidade.....	61
Tabela V.1. Análise de Regressão para a Variável MI.....	98
Tabela V.2. Análise de Regressão para a Variável Densidade.....	102
Tabela V.3. Análise de Regressão com as Entradas Seleccionadas (AR2) e Comparação com a Análise de Regressão com Todas as Entradas (AR1) (EP: Erro Padrão)	105
Tabela V.4. Resultados Estatísticos – Corridas Operacionais.....	121
Tabela VI.1. Coeficientes das Eqs. VI.6 a VI.9	136
Tabela VI.2. Parâmetros Dinâmicos (Constantes de Tempo e Atrasos de Tempo) do Processo (Unidade de Medida: min)	139

Silva, Adilton L. ANALISADORES VIRTUAIS E CONTROLE AVANÇADO PARA UMA PLANTA INDUSTRIAL DE POLIETILENO LINEAR E AVALIAÇÃO DE SEUS BENEFÍCIOS ECONÔMICOS. 2023 (Dissertação de Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial. Universidade Federal da Bahia, Salvador-BA, Brasil, 2023

RESUMO

Orientador: Prof. Marcelo Embiruçu

Esse trabalho apresenta a estruturação necessária pra a implementação de um controlador avançado de qualidade tipo *Model Predictive Control* (MPC, controle preditivo baseado em modelo) para uma planta industrial de produção de polietileno linear da tecnologia “Sclairtech”. Através desse controle serão minimizadas as dispersões das variáveis de qualidade *Melt Index* (MI) e densidade e otimizados os consumos de catalisadores, co-catalisadores, desativadores e leito adsoverdor. Um projeto conceitual foi confeccionado onde todas as premissas para a estratégia de controle são explicitadas. Em seguida foi desenvolvida a análise econômica para validar a viabilidade econômica da implementação do controle, conforme as melhores práticas globais. Além disso, foi desenvolvida e apresentada uma nova técnica de definição da arquitetura ótima para um modelo de Rede Neural Artificial (RNA). Essa técnica foi aplicada na criação de dois analisadores virtuais baseados em redes neurais artificiais para predição das variáveis de qualidade MI e densidade. Por fim, utilizando dados históricos, teste industriais e conhecimento operacional empírico sobre o processo, foram desenvolvidos os modelos para simulação do sistema de controle desenvolvido e os controladores. Nesse contexto, é apresentada uma nova metodologia de desenvolvimento de modelos para os controladores tipo MPC, que utiliza também a experiência de especialistas do processo de forma explícita. Os resultados mostram um desempenho muito adequado do ponto de vista técnico, e um retorno econômico bastante substancial e viável, demonstrando a viabilidade do estudo e projeto desenvolvidos.

Palavras chaves: 1. Controle avançado. 2. *Model Predictive Control*. 3. Polietileno. 4. Redes Neurais Artificiais.

Silva, Adilton L. VIRTUAL ANALYZERS AND ADVANCED CONTROL FOR A LINEAR POLYETHYLENE INDUSTRIAL PLANT AND EVALUATION OF ITS ECONOMIC BENEFITS. 2023 (Master's Dissertation). Postgraduate Program in Industrial Engineering. Federal University of Bahia, Salvador-BA, Brazil, 2023

SUMMARY

Advisor: Prof. Marcelo Embiruçu

This work presents the necessary structuring for the implementation of an advanced quality controller of the type Model Predictive Control (MPC) for an industrial plant producing linear polyethylene using “Sclairtech” technology. Through this control, the dispersions of the Melt Index (MI) and density quality variables will be minimized and the consumption of catalysts, co-catalysts, deactivators and adsorbent bed will be optimized. A conceptual project was developed where all the premises for the control strategy are explained. An economic analysis was then developed to validate the economic viability of implementing the control, in accordance with the best global practices. Furthermore, a new technique for defining the optimal architecture for an Artificial Neural Network (ANN) model was developed and presented. This technique was applied to develop two virtual analyzers based on ANN to predict the MI quality and density variables. Finally, using historical data, industrial tests and empirical operational knowledge about the process, models were developed to simulate the developed control system and controllers. In this context, a new model development methodology for MPC controllers is presented, which also explicitly uses the experience of process experts. The results show a very adequate performance from a technical point of view, and a very substantial and viable economic return, demonstrating the viability of the study and project developed.

Keywords: 1. Advanced quality controller. 2. Model Predictive Control. 3. Polyethylene. 4. Artificial Neural Network.

Capítulo I – Introdução

Resumo

Nesse capítulo introdutório será apresentada uma visão geral do trabalho proposto, sua importância e as principais dificuldades.

I.1. A Importância, os Objetivos e a Organização do Trabalho

Esse trabalho tem como objetivo desenvolver a estruturação necessária para a implementação de um controle avançado otimizador do tipo *Model Predictive Control* (MPC, controle preditivo baseado em modelo) para uma planta de produção de polietileno linear em solução da tecnologia “Sclairtech”. As variáveis controladas devem ser o *Melt Index* (MI, índice de fluidez), a densidade, a conversão e a taxa de produção. Dois analisadores virtuais baseados em redes neurais artificiais para prever as variáveis de qualidade MI e densidade são desenvolvidos utilizando uma abordagem nova que define uma configuração ótima da rede. Na parte de desenvolvimento dos controladores tipo MPC, além dos demais elementos necessários ao desenvolvimento de tais tipos de controladores, é apresentada e usada também uma técnica inovadora de construção dos modelos, que utiliza a experiência das pessoas conhecedoras do processo, denominados especialistas, em complementação às técnicas usuais de modelagem que, neste caso, são também bastante influenciadas pelo conhecimento empírico disponível sobre a operação e os estudos industriais relativos à planta em questão.

A motivação desse trabalho se baseia na necessidade de melhoria na posição da tecnologia “Sclairtech” no *benchmarking* (avaliação comparativa) global de tecnologias de produção de polietileno em solução. A implementação de um controle avançado pode promover melhorias expressivas em qualidade, produtividade, energia e custo variável. Essa condição garante maior competitividade à planta, possibilitando a perpetuação do ativo. Paralelamente a isso, duas novas técnicas genéricas de modelagem são desenvolvidas, apresentadas e aplicadas no trabalho. Dessa forma, esse trabalho tem um papel relevante para a tecnologia citada, e adicionalmente acrescenta duas técnicas inovadoras e passíveis de serem aplicadas em quaisquer outros processos industriais e outras iniciativas de natureza aplicada.

Todo o trabalho foi desenvolvido com uma robusta base teórica, mas com o pragmatismo exigido no mundo industrial. Para isso, a estruturação apresentada se baseia nas melhores práticas das mais importantes empresas dos ramos químicos e petroquímico. Além disso, como já colocado anteriormente, esse trabalho apresenta também duas inovações importantes para a ciência e a engenharia. A primeira define a arquitetura ótima de uma rede neural artificial a partir dos dados disponíveis, um dos principais parâmetros de construção de uma rede. A segunda inovação se refere à possibilidade de utilização do conhecimento do maior bem de uma organização: as pessoas. Técnicas inovadoras

aplicadas a um processo bastante não linear e com o menor tempo de residência no reator entre as tecnologias de produção de polietileno demonstram, também, a complexidade e a importância desse trabalho.

Esse trabalho é dividido em 7 capítulos, incluindo o presente capítulo introdutório. Cada capítulo possui um resumo onde se explicita uma visão geral dele. Em seguida, apresenta-se uma parte introdutória onde alguns tópicos importantes são discutidos a fim de desenvolver as análises posteriores. Posteriormente estudos e análises são realizados baseados no assunto que cada capítulo se propõe a estudar. Por fim, uma conclusão é apresentada, destacando os pontos mais importantes resultantes dos estudos apresentados. A seguir são descritos sucintamente os demais 6 capítulos componentes deste trabalho.

No capítulo II uma revisão bibliográfica é feita sobre os processos de polimerização de polietileno e seus diferentes tipos, sendo apresentado um resumo esquemático das principais tecnologias e seus licenciadores. Além disso, são discutidas as principais técnicas de controle avançado, focando no controle preditivo baseado em modelo (MPC – *Model Predictive Control*). Em seguida é definido o conceito de analisadores virtuais e seus diversos tipos. Ao longo de todo o capítulo são apresentadas aplicações de MPC e analisadores virtuais na indústria de polímeros.

No capítulo III é apresentado o projeto conceitual do sistema de controle para uma planta de produção de polietileno em solução da tecnologia “Sclairtech”. Entre os temas abordados, são discutidos os objetivos gerais do controle, é apresentada uma descrição sucinta do processo produtivo e as principais variáveis controladas que garantem a qualidade do produto são apresentadas. No final do capítulo são mostradas as matrizes de controle para cada família de polímero, divididas de acordo com suas particularidades: Rotomoldagem, Injeção de Baixa Densidade e Injeção de Alta Densidade (Copolímero de Buteno); Injeção de Alta Densidade (Homopolímero); e Filme Octeno, Filme Buteno e Terpolímero. Nessas matrizes são explicitadas as variáveis manipuladas, controladas e suas variáveis desvio. Nesse ponto as matrizes de controle indicam o sentido do ganho de cada variável frente à variável controlada, mas ainda não define a estrutura do controle, o que é abordado no capítulo VI. Por fim são apresentadas as restrições *soft* (suaves) e *hard* (rígidas) para cada controlador.

No capítulo IV é feita uma análise técnica-financeira a fim de avaliar o retorno financeiro da implementação de controle avançado em um processo de polimerização da referida tecnologia. Para isso faz-se necessário a introdução de conceitos técnicos/financeiros que balizam os possíveis ganhos. Nesse contexto, nesse capítulo são descritos

os limites de controle que qualifica um produto *onspec* (especificado), *offspec* (fora de especificação) e apto a ser misturado, e se define as variáveis-chave de controle. Além disso, introduz-se os conceitos de retrabalho e o procedimento típico de transição de resinas. Utilizando-se de um ano de dados reais de processo foi realizada uma análise estatística das variáveis-chave por família de polietileno (Rotomoldagem; Injeção de baixa densidade; Filme octeno e injeção de alta densidade), a fim de identificar a dispersão do processo e o percentual de dados que ficaram fora dos limites de controle, desqualificando-os e classificando-os como produto fora de especificação. São apresentados os ganhos estimados, baseados em referência técnica e conhecimento empírico do processo produtivo. Por fim é realizado o cálculo do Valor Presente Líquido (VPL) e de outras variáveis financeiras, visando validar a viabilidade financeira de tal investimento/iniciativa. Para realizar a análise financeira fez-se necessário se utilizar de dados sigilosos de custo e consumos da empresa detentora da unidade industrial, dados estes que, portanto, não foram explicitados por tais questões de confidencialidade. Uma dificuldade importante para realização da análise financeira foi a definição dos ganhos. Alguns valores foram estimados com base em conhecimento empírico de anos de trabalho do autor desta dissertação (e de colegas seus) na tecnologia, mas também em conhecimento disponível em referências bibliográficas da literatura aberta. Exemplos disso são a redução no consumo de catalisador decorrente da implementação de um novo controle de perfil de temperatura de reação e a redução por transição de resinas. Vale destacar que os ganhos apresentados nesse capítulo se referem a uma condição de estabilidade posterior ao comissionamento do controle.

No capítulo V são apresentados as premissas e o desenvolvimento de dois analisadores virtuais de qualidade tipo Rede Neural Artificial (RNA) para as variáveis-chave: densidade e *Melt Index*. Discute-se os fundamentos teóricos, em complemento ao capítulo I, e se apresenta uma análise de correlação utilizando a análise de regressão para definição das variáveis de entrada, a partir de um conjunto inicial previamente escolhido com base no conhecimento do processo produtivo. Nesse capítulo é desenvolvida uma

nova abordagem para definir a topologia ótima de uma RNA¹. Utilizando dessa sistemática, a estrutura ótima é encontrada automaticamente com os dados de processo. Dessa forma, duas RNA são criadas utilizando-se de dois anos de dados reais, e validadas em condições de transição distintas e também com dados reais de operação.

Com o projeto conceitual pronto e os modelos de RNA, faz-se necessário o desenvolvimento do controlador tipo MPC. Desta forma, no capítulo VI é desenvolvido o controlador tipo MPC e os modelos a serem nele utilizados. Foram desenvolvidos modelos para as variáveis MI, densidade e conversão. Utilizando dados históricos da planta, além de testes industriais específicos, as dinâmicas do processo foram identificadas e utilizadas para sua simulação. As simulações foram feitas para duas situações distintas: resinas que utilizam hidrogênio; e resinas que não utilizam hidrogênio. Para o primeiro caso, o hidrogênio é utilizado como variável manipulada para o controle de MI. No segundo, onde não há o agente terminador de cadeia (hidrogênio), o controle de MI é feito a partir da temperatura do tratamento térmico. Em todos os casos a densidade é controlada pela relação mássica comonômero/ monômero, e a conversão através da concentração de eteno. Em todas as simulações o controlador MPC e a equivalência com os modelos de RNA se mostraram satisfatórias, indicando a viabilidade técnica desse projeto.

Por fim, o capítulo VII traz as conclusões gerais de todo o trabalho realizado, bem como sugestões para trabalhos e desenvolvimentos futuros, como complementação, continuação ou desdobramentos das pesquisas aqui realizadas.

I.2. Comentários Gerais

A tecnologia “Sclairtech” se destaca de outras devido a sua complexidade e baixo tempo de residência no reator. Essa última característica promove uma característica

¹ As origens iniciais do desenvolvimento dessa nova abordagem remontam, de forma distribuída em diversos trabalhos e de maneira não tão sistemática como a aqui realizada, a vários desenvolvimentos anteriores do Grupo de Pesquisa (PROTEC) coordenado pelo orientador deste trabalho. Além disso, embora a sistematização dessa abordagem tenha sido primeiramente iniciada neste trabalho, ela tem sido também desenvolvida no trabalho do mestrando do PEI Ghabriel Anton Gomes de Sá, que possivelmente deverá defender a sua dissertação de mestrado também em 2023. Enquanto o presente trabalho se debruçou mais no desenvolvimento da abordagem para uma aplicação dela em um problema real e complexo, de interesse industrial e com dados de operação normal de uma planta industrial, o trabalho de Ghabriel Anton Gomes de Sá tem se debruçado mais no desenvolvimento da abordagem e de sua validação em uma quantidade maior de problemas *benchmark* encontrados na literatura, bem como na inserção de outros elementos adicionais nessa metodologia, para além daqueles aqui utilizados.

particular da tecnologia “Sclairtech”, que é o baixo tempo para alterar completamente as condições do reator. Além disso, sua ampla variação de MI e densidade é uma particularidade única dentro o portfólio tecnológico atual. Devido a essas particularidades, essa tecnologia normalmente opera com um amplo portfólio de produtos e com grande número de transições. Essa condição resulta em uma penalidade importante para a tecnologia quando o controle de propriedade é feito manualmente. O resultado disso é uma maior geração de produto fora de especificação durante as transições e faixas de especificação mais abertas. A primeira perda influencia no *benchmarking* global das tecnologias e o segundo aspecto em aplicações no mercado. Nesse contexto, esse projeto visa de maneira pragmática apresentar a concepção de um controlador que atue nessas duas problemáticas. O trabalho possui base conceitual, mas apresenta um diferencial positivo que é a sua forte base empírica com dados e aplicações no processo produtivo. A agregação da teoria com a prática, resultado de anos de trabalho do seu autor nessa tecnologia, ajudou bastante na concepção desse projeto.

Capítulo II – Revisão Bibliográfica

Resumo

Nesse capítulo é apresentada uma revisão resumida das principais tecnologias de produção de polietileno, sendo descrito objetivamente como se dá o controle das principais propriedades. Em seguida, uma outra revisão resumida ilustra as técnicas de controle de processo atualmente disponíveis e descreve os ganhos esperados com a implementação de uma técnica robusta. Pela sua importância nesse contexto, o controle predito baseado em modelo (MPC, *Model Predictive Control*) é esmiuçado e posteriormente é apresentada uma revisão bibliográfica de iniciativas realizadas nos últimos 20 anos que utilizam esse tipo de controlador na indústria de produção de polietileno. Por fim, é discutido o que são analisadores virtuais e são citadas algumas de suas aplicações em predição de propriedades do polietileno.

II.1. Processos de Produção de Polietileno

Desde a sua descoberta acidental em 1894 pelo químico Alemão Hans Von Pechmann (Strom e Rasmussen, 2011), o polietileno é um polímero presente no cotidiano da vida moderna. O polietileno é dividido em cinco diferentes tipos: PoliEtileno de Baixa Densidade (PEBD); PoliEtileno de Alta Densidade (PEAD); PoliEtileno Linear de Baixa Densidade (PELBD, ou simplesmente PEL); PoliEtileno de Ultra Alto Peso Molecular (PEUAPM); e PoliEtileno de Ultra Baixa Densidade (PEUBD). Os processos de produção de polietileno são divididos em: super alta pressão (autoclave e tubular); lama (do inglês *slurry*); fase gás; e solução. Cada tecnologia possui suas particularidades, sendo a principal os catalisadores (Ziegler-Natta, Zinco, Metalocenos, Phillips) e iniciadores de reação (Coutinho *et al.*, 2003). Na Figura II.1 é apresentado um resumo esquemático das principais tecnologias e licenciadores, a fim de ilustrar os principais processos e rotas tecnológicas desenvolvidos pela humanidade desde a descoberta desse material. Os processos de produção de PEBD ocorrem em pressão superior a 1500 kgf/cm², temperatura acima de 200 °C e baixa conversão. Nesse tipo de tecnologia não se utiliza catalisadores metálicos, mas sim iniciadores de reação, normalmente peróxidos orgânicos. Os principais licenciadores são: LyondellBasell; Sabic; Versalis; ExxonMobil; Simon Caves (*ECI Group*); Sumitomo; Ineos; e Mitsui. São vários os licenciadores, mas a construção geralmente é bastante semelhante: hiper compressores; trocadores de calor; reatores (autoclave ou tubulares); separadores; e extrusoras. O polietileno linear (PEL ou PELBD) é produzido em processos em solução ou fase gás. Os processos em solução normalmente possuem maior custo operacional devido à necessidade de recuperação do solvente utilizado. Por outro lado, esses são os processos onde são utilizados comonômeros de maior cadeia, como octeno-1 e/ou hexeno-1, possibilitando a obtenção, dessa forma, de excelentes propriedades mecânicas e óticas. Além disso, eles possuem maiores amplitudes de *Melt Index* (MI, índice de fluidez) e densidade, podendo produzir os produtos para as mais diversas aplicações: rotomoldagem; filme; injeção; rafia; sopro; entre outros. Os principais licenciadores são: Dow; Nova Chemical; e Borealis. Os processos em fase gás, assim como os processos em super alta pressão (PEBD), são bastante semelhantes, sendo o grande diferencial entre eles os catalisadores utilizados. Esses processos operam a baixas pressão e temperatura e utilizam geralmente catalisadores metalocênicos que possibilitam a produção de materiais com propriedades diferenciadas e com estreita distribuição de peso molecular. Tais processos também

utilizam catalisadores Ziegler-Natta e de Cromo. Os principais licenciadores são: Univation; Ineos; LyondellBasell; e Mitsui. O PEAD pode ser produzido em fase gás ou em processos em lama (*slurry*), tendo os seguintes licenciadores: Borealis; Chevron Phillips; Ineos; Univation; e LyondellBasell. Nesses processos podem ser utilizados catalisadores Ziegler-Natta, de Cromo ou metallocenos. Os processos que utilizam reatores em *loop* (grandes tubulações circulares integradas a uma bomba de polímero) possuem a capacidade de produção de resinas bimodais. A produção de PEUAPM se dá normalmente através de desenvolvimentos internos, principalmente de catalisadores, utilizando as plataformas das tecnologias já citadas, normalmente do tipo *slurry*. O PEUBD também é produzido nas tecnologias já citadas, em reator e/ou extrusão, e exigem alterações no processo que evitem a fusão do material em etapas posteriores à granulação. As especificidades das tecnologias de produção de PEUAPM e de PEUBD não são mostradas na Figura II.1 devido à falta de conhecimento do autor em relação aos detalhes desses processos e à indisponibilidade de referências.

Em todos processos citados as plantas industriais operam continuamente com produtividades proporcionais à dimensão do projeto. Há plantas industriais com capacidade produtiva superior a um milhão de toneladas por ano. Na grande maioria das plantas industriais a equipe operacional manipula as variáveis de processo através de controladores tipo Proporcional-Integral-Derivativo (PID) ou derivações desse tipo de controlador. Amostras periódicas são coletadas para verificar as propriedades do polietileno em produção e ajustes são feitos, quando necessário. Essa forma de operação representa maior dispersão das propriedades, maior geração de produto fora de especificação e maior custo variável. Nesse contexto, o desenvolvimento de controles avançados de processo representa ganhos expressivos para os diversos processos de produção de polietileno, principalmente devido a sua característica de não linearidade e às interações entre as variáveis. A pequena presença desse tipo de controle nas plantas industriais se deve ao investimento relevante e, principalmente, devido à complexidade para sua implementação.

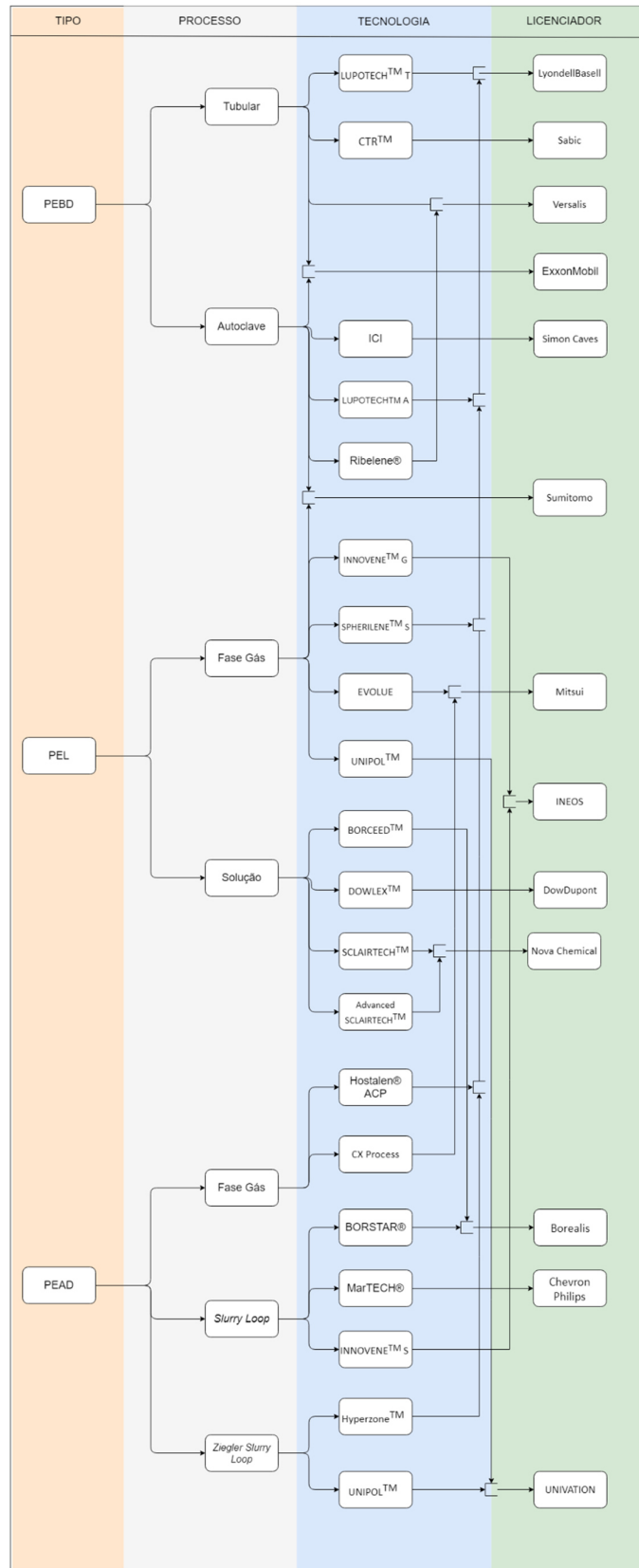


Figura II-1. Resumo Esquemático das Tecnologias de Produção de Polietileno.

Atualmente estão disponíveis diversas técnicas de controle avançado que se diferenciam umas das outras principalmente pelas suposições e compromissos específicos feitos na formulação matemática, critérios de desempenho e representação do processo. De maneira geral, a formulação matemática é definida através das funções objetivo dinâmicas a serem minimizadas e das restrições de desigualdade dinâmicas. A representação matemática usual para o processo é um modelo dinâmico com suas incertezas associadas. Contudo, todas as técnicas têm uma característica em comum: são baseadas explicitamente em um modelo de processo. A mais importante abordagem é o controle preditivo baseado em modelo, do inglês *Model Predict Control* (MPC) (Agachi *et al.*, 2006).

Na Figura II.2 são apresentadas as principais técnicas de controle avançado disponíveis na literatura. O controle preditivo baseado em modelo pode ser dividido em duas categorias principais: linear e não linear. Para processos de polimerização, os modelos não lineares são predominantemente mais adequados e necessários (Embiruçu, 1998).

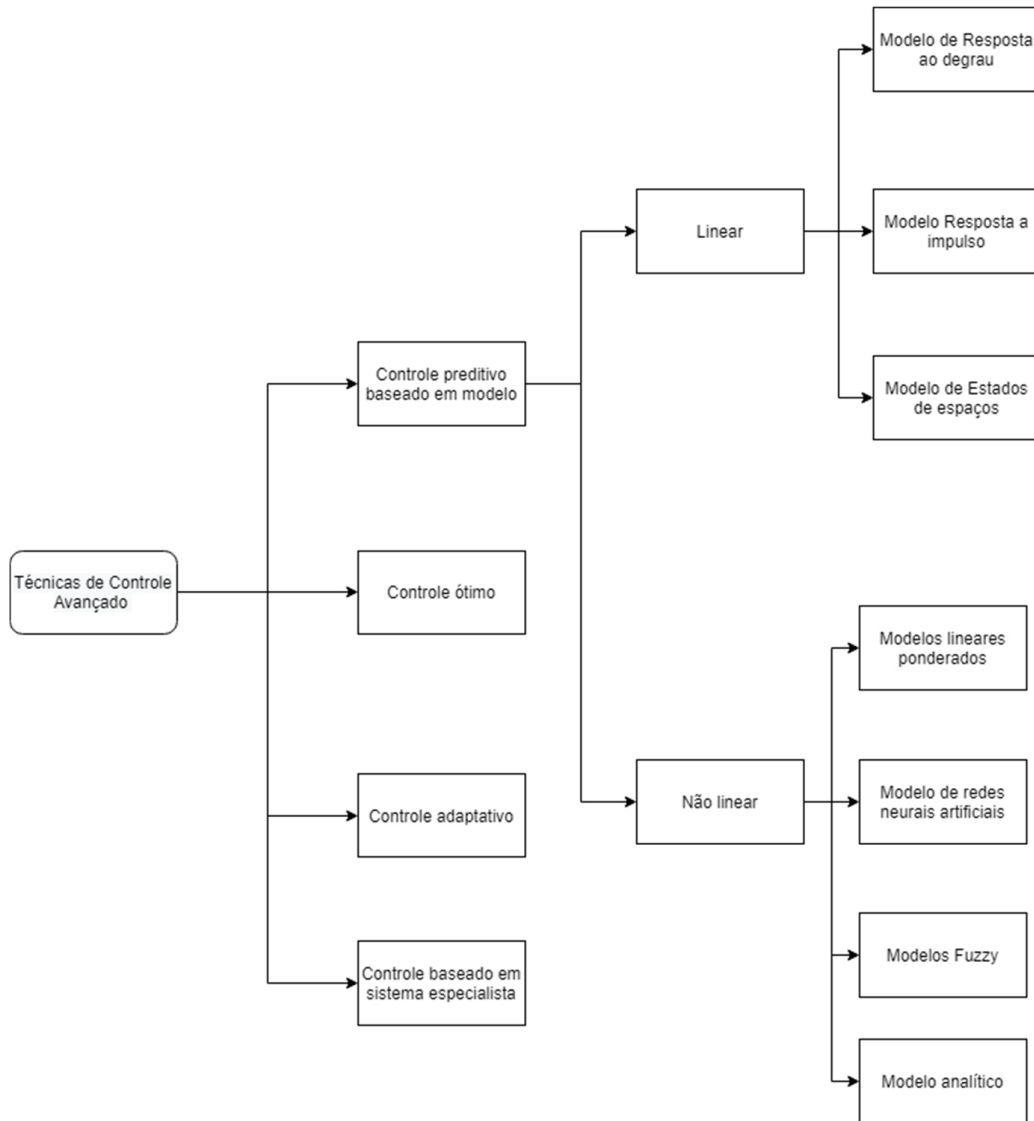


Figura II-2. Resumo Esquemático de Técnicas de Controle Avançado (Agachi *et al.*, 2006).

A implementação de um controle de processo efetivo representa uma operação mais segura, pois garante maior estabilidade evitando a ocorrência de condições de maior risco (parada de planta; danos a equipamentos, tais como bombas, compressores, trocadores de calor, válvulas; liberação de manutenção; entre outras). Além disso, a otimização do processo promove redução do consumo (utilidades e insumos), resultando em uma operação com menor impacto ambiental. Outro ganho esperado está associado à qualidade dos produtos frente à especificação final e a sua variabilidade. De maneira geral, os benefícios surgem das seguintes fontes (Embiruçu, 1998; Brisk, 2005): eficiência; qualidade; lucratividade; segurança; e meio ambiente.

II.2. Controle Preditivo Baseado em Modelo de Processo

O controle predito (MPC) se originou na década de 70 e desde então vem sendo aprimorado e aplicado nos mais diversos ramos. Um controle preditivo não se limita a uma técnica específica, mas a um amplo conjunto de algoritmos de controle que, entre outros, visa minimizar (ou maximizar) uma função objetivo utilizando um modelo do processo para fazer previsões no futuro. Dessa forma, de maneira geral os algoritmos de controle preditivo utilizam um modelo para prever a saída de processo em um certo horizonte de tempo no futuro (horizonte de previsão), calcula a sequência de controle (que torna-se constante a partir de um certo tempo dentro do horizonte de previsão, chamado de horizonte de controle) a fim de minimizar uma função objetivo e desloca o horizonte de controle a fim de recalculá-lo os passos seguintes a cada interação (Camacho e Bordons, 1998).

A estratégia de um controlador tipo MPC representada na Figura II.3 demonstra o momento presente como $t = k$. O futuro é representado como o intervalo de tempo k até $k + p$, denominado horizonte de previsão. Utilizando os dados do passado, o modelo, representado pela variável $y(k)$, calcula a variável controlada no presente e prevê o futuro com base nas variáveis futuras manipuladas ainda não conhecidas. As variáveis futuras manipuladas $u(k)$ no intervalo k até $k + m$, denominado horizonte de controle, são calculadas a fim de minimizar uma função objetiva que tem como base a variável controlada (*setpoint*) (Agachi *et al.*, 2006).

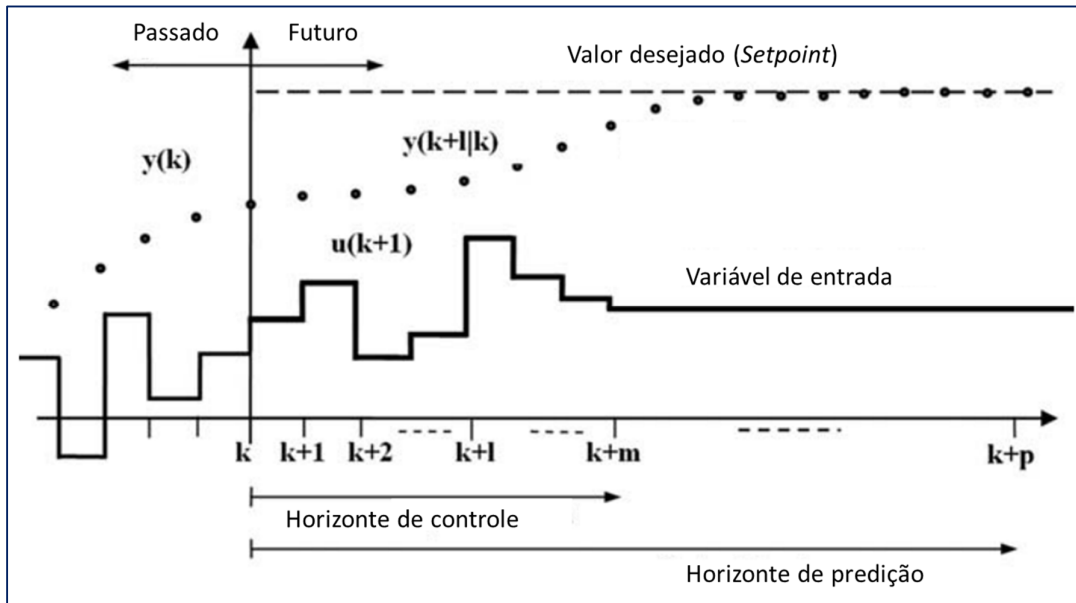


Figura II-3. Formulação de um Controlador MPC (Agachi *et al.*, 2006).

A formulação matemática de um controlador tipo MPC é dada pela Eq. II.1. O primeiro termo dessa equação representa o ajuste da variável controlada frente ao *setpoint* através da minimização do quadrado ponderado da diferença entre o ponto de ajuste e a saída prevista pelo modelo. O segundo termo representa a predição das variáveis manipuladas que seriam enviadas ao processo no futuro ($t = k + p$) após o momento presente ($t = k$). Valores futuros são resultado do problema de otimização que minimiza a função objetivo (Agachi *et al.*, 2006).

$$\min_{\Delta u(k) \dots \Delta u(k+m-1)} \sum_{l=1}^p \left(\|y_{(k+l|k)} - r_{(k+l)}\|^2 T_l^y \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^m \left(\|\Delta u_{(k+l-1)}\|^2 T_l^u \right) \right) \quad \text{Eq. II.1}$$

onde:

- p é o horizonte de predição;
- m é o horizonte de controle;
- $y_{(k+l|k)}$ é a predição da saída no instante $k + l$ utilizando informações do momento k ;
- $r_{(k)}$ é a referência no instante k ;

- $\Delta u_{(k)}$ é o incremento do sinal do controlador até o tempo $k + 1$;
- T_l^y e T_l^u são matrizes diagonais de ponderação utilizadas para penalizar as diferenças quadráticas. Tais termos são parâmetros de sintonia do controlador.

A estrutura básica de um controle tipo MPC é apresentada na Figura . O modelo é utilizado para prever as saídas futuras do processo através das variáveis passadas, da condição presente e das ações de controle futura, calculadas através da função objetivo e das restrições do sistema (Camacho e Bordons, 1998).

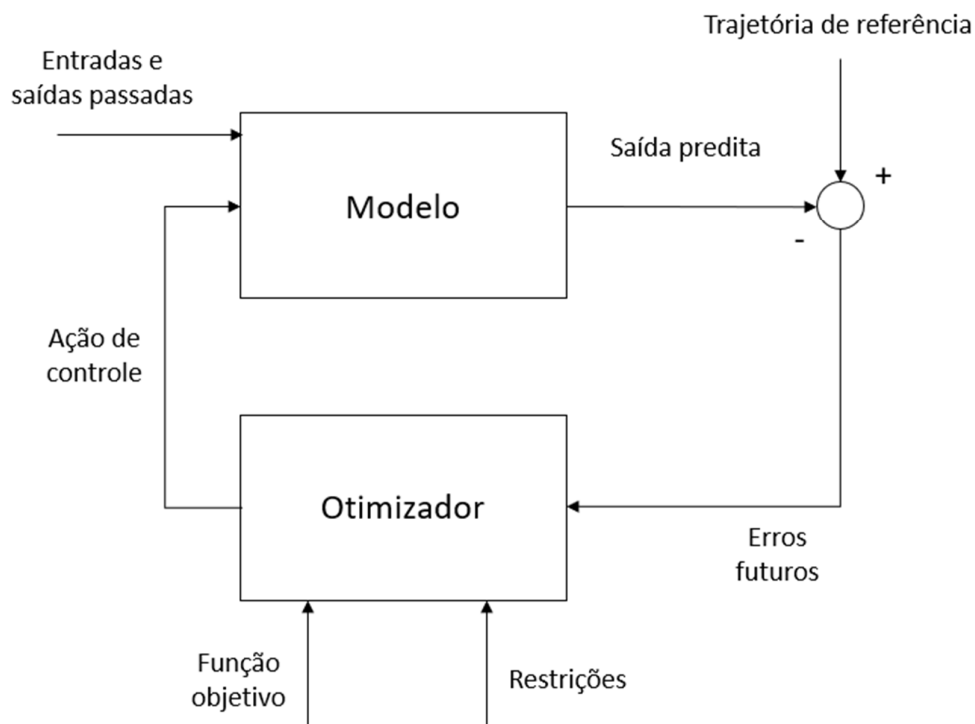


Figura II-4. Estrutura Básica de um MPC (Camacho e Bordons, 1998).

Para além da formulação e informações básicas sobre controladores tipo MPC apresentadas anteriormente, há muitos detalhes e tipos de controladores derivados dessa estrutura básica. Qin e Badgwell (2003) apresentam a evolução dos controladores MPC até o final do século passado, conforme a geração e os principais tipos de controladores comercialmente disponíveis, trazendo uma sumarização de acordo com o tipo de MPC (linear e não linear). Para os controladores lineares são apresentados os seguintes

fornecedores: Aspen Technology; Honeywell Hi-Spec; Adersa; Invensys; e SGS^e. Para as versões não lineares os autores citam os seguintes: Adersa; Aspen Technology; Continental Controls; DOT products; e Pavilion Technologies. Além disso, eles compararam a estrutura hierárquica de um controlador convencional e de um controlador preditivo baseado em modelo. Nesse trabalho eles concluíram que os MPC lineares apresentavam algumas limitações importantes, tais como: não permitem o uso de modelos paramétricos; os algoritmos não são nominalmente estabilizados; nenhum dos algoritmos utiliza métodos modernos de solução numérica. Por outro lado, os modelos não lineares continuam em crescimento em aplicações onde a tecnologia do MPC linear não é adequada, como em muitos processos de polimerização. Naquela época o fornecedor Pavilion dominava o mercado de polimerização, pois respondia por mais de 70% dos exemplos apresentados. Apesar da referência aqui utilizada já encontrar-se um tanto quanto defasada, até o melhor conhecimento do autor não há nada mais atual com esse tipo de informação. Por outro lado, é sabido que desde a data da referida referência o mercado global mudou bastante, mas a Pavilion continua sendo a principal empresa do ramo no mercado brasileiro de MPC na indústria de polietileno, área na qual o autor do presente trabalho é especialista e tem atuação industrial há décadas.

II.3. MPC na Indústria de Polietileno

Embiruçu *et al.* (1996) apresentaram na década de 90 uma extensa revisão bibliográfica das aplicações de controle avançado em processos de polimerização. Nesse trabalho são apresentados diversos artigos referentes a: estimação de propriedades; controlador ótimo; controle não linear; controle linear; controle adaptativo; e as particularidades dos processos de polimerização [monômero; tipo de reator; aplicação (industrial, acadêmica); variáveis manipuladas; dentre outras]. Esse trabalho demonstra a amplitude do MPC na indústria de polímeros naquele período. Passados mais de vinte e cinco anos após a publicação desse artigo, essa seção se propõe a fazer uma certa atualização desse levantamento, avaliando novos trabalhos focados na indústria de produção de polietileno nos últimos vinte anos.

Seki *et al.* (2001) desenvolveram controladores NMPC e os aplicaram em dois processos de polimerização: polipropileno; e polietileno de alta densidade. O algoritmo desenvolvido consiste em duas camadas. A primeira camada utiliza um Controle Quadrático Linear com Integrador (CQLI) baseado na linearização de um modelo

fenomenológico não linear do processo. Na segunda, as ações de controle reais são determinadas pelas restrições do processo, definidas a partir de um problema de Programação Quadrática (PQ), formulado pela linearização do modelo não linear em torno da trajetória CQLI. Para cada análise foi desenvolvido um modelo de espaço de estado. No processo de produção de polietileno de alta densidade em lama com tanque agitado, a base de operação consiste em controlar a pressão parcial de cada composto na fase gasosa. As variáveis manipuladas são [objetivando controlar o MI (*Melt Index*, índice de fluidez) e a densidade do polímero]: razão de hidrogênio/eteno; pressão do reator; relação propileno/eteno; e temperatura da reação. As condições de processo são distintas, de acordo com a resina em produção. Os autores utilizaram o modelo desenvolvido por Wang *et al.* (2000). Os resultados demonstram a melhoria no controle do processo após a implementação do NMPC, frente aos controles lineares tradicionais, destacando a otimização durante as transições de resinas.

Hwang *et al.* (2002) apresentaram um trabalho com várias estratégias de controle avançado para um processo de produção de polietileno em fase gasosa. Dentre as variáveis controladas estão: temperatura do reator; composições de gás; propriedades do polímero; taxa de produção; e controles de nível e peso do leito. As estratégias consistem em: estimadores inferenciais não lineares para fornecer estimativas de distúrbios; analisadores virtuais de qualidade (MI, densidade, teor de eteno, entre outras) projetados para estimar as propriedades do polímero na saída do reator a fim de acelerar as ações de controle do NMPC; controladores preditivos de modelo não linear (NMPC) para descrever o comportamento dinâmico do processo não linear; e MPC, que é adotado em uma estrutura hierárquica para implementação em estágios. O primeiro NMPC (*Process Perfect - GC*) controla a temperatura e composição de gás a fim de estabilizar a operação, enquanto outro controlador, denominado *Quality Process Perfecter (QC)*, define os *setpoints* do controlador GC a fim de controlar as propriedades de qualidade do polímero. O controlador QC realiza transição automática de resinas e maximiza a produção. A transição automática se apresenta como o maior desafio na implementação do controle, principalmente pelas características particulares do processo em fase gasosa, resultado da ampla diferença de temperatura entre as resinas. Entretanto, os controladores conseguiram rejeitar os distúrbios e apresentar resultados relevantes. Os autores indicam uma redução média de 50% na variabilidade do processo.

Fontes e Mendes (2008) aplicaram um controlador MPC não linear (NMPC) em um processo de produção de polietileno de alta densidade em lama com reator agitado

[semelhante ao apresentado por Seki *et al.* (2001)] a fim de controlar três variáveis: temperatura da reação; fração média de comonomero incorporado no polímero; e peso molecular médio (medida indireta do índice de fluidez do polímero). As variáveis manipuladas escolhidas foram: vazão mássica de eteno; vazão mássica de buteno; vazão mássica de catalisador; vazão mássica de cocatalisador; vazão mássica de hidrogênio; vazão mássica do solvente n-hexano; e vazões mássicas de água para os trocadores e jaquetas dos reatores. Os autores desenvolveram um modelo fenomenológico do processo e utilizaram um controlador baseado em redes neurais *feedforward*. A rede neural artificial possuía uma camada oculta, utilizava a função tangente hiperbólica como função de ativação e o algoritmo de treinamento Levenberg-Marquardt. Foram apresentados o problema de otimização, o ajuste de escala das variáveis a fim de facilitar o problema de otimização e o procedimento de sintonia do controlador. Por fim, os resultados demonstraram o bom desempenho do controlador com o algoritmo NMPC baseado em um modelo neural. Contudo, os autores destacam a complexidade que a variável tempo morto e a amostragem em múltiplas taxas incrementam no problema de controle.

Jacob e Dhib (2012) desenvolveram um NMPC para um processo de produção de PEBD com reator autoclave (super alta pressão). Os autores utilizaram um Filtro de Kalman (FK) *unscented* (“sem cheiro” ou “sem perfume” em tradução livre; mas “neutro” parece ser a melhor tradução nesse contexto) para estimar os estados *online* (em linha). O controlador utiliza as vazões de alimentação do monômero e iniciador de reação em cada zona a fim de controlar o perfil de temperatura nas múltiplas zonas do reator e o peso molecular médio. O desempenho do controlador foi avaliado em uma série de casos de simulação sob condições de processo ruidosas, usando o modelo de processo do reator multizona. Os autores demonstraram que o algoritmo NMPC baseado no FK *unscented* teve um desempenho satisfatório em uma grande variedade de condições operacionais.

Jesus (2012) desenvolveu um analisador virtual baseado em filtro de Kalman em uma malha de controle *feedback* com um controlador MPC. O objetivo foi controlar a variável MI e, para isso, utilizou-se de dois tipos de filtros de Kalman: estendido; e estendido com restrições. Além disso, o autor utilizou um filtro de Kalman para estimar quatro parâmetros do modelo do processo com resultados de erros máximos de aproximadamente 12% na etapa dinâmica. O modelo utilizado foi obtido na literatura aberta. Segundo o autor, o controlador apresentou excelente desempenho no estado estacionário e em transições (mudança de *setpoint*).

Skálén *et al.* (2016) desenvolveram a aplicação de um MPC não linear (NMPC) para transição de tipo de produto (*grade*) em uma planta industrial de produção de polietileno de baixa densidade (reator tubular) com capacidade instalada de 350 kt/ano. O objetivo desse trabalho foi otimizar a geração de produto fora de especificação (*off-spec*) através do controle da variável índice de fluidez (*Melt Index*, MI). Nesse trabalho os autores utilizaram um controlador MPC não linear baseado no conceito de controle de processo avançado da Borealis (BorAPC), materializado no *software* de controle OnSpot. O *software* OnSpot é composto por três componentes: um modelo físico não linear do processo; um estimador que usa medições da planta para atualizar estados e parâmetros do modelo; e, finalmente, um algoritmo de controlador. Os autores indicam que o controlador foi capaz de controlar a variável de qualidade MI durante o estado estacionário (condição normal) e principalmente durante as transições. Mesmo sem revelar o valor absoluto, eles comentam que houve redução expressiva na geração de produto fora de especificação.

Muhammad *et al.* (2019) aplicaram um MPC utilizando espaço de estados no controle de processo (MI) em um processo de produção de polietileno de baixa densidade (PEBD) com reator tubular convencional com razão comprimento/ raio igual a 27800. As condições do reator alcançam valores máximos de 2200 bar, 300 °C e velocidade axial de 11 m/s. Os autores utilizam o *software* comercial Aspen Dynamic para desenvolver um modelo dinâmico do processo que é posteriormente emulado no *software* MATLAB Simulink. As variáveis manipuladas para controlar o MI foram o perfil de temperatura a partir da injeção do iniciador de reação e a concentração do agente de transferência de cadeia (CTA, *Chain Transfer Agent*). Os autores utilizam duas técnicas para o desenvolvimento do modelo de espaço de estados: modelo MIMO (*Multi-Input Multi-Output*); e modelo SISO (*Single-Input Single-Output*) aumentado. Os autores concluem que ambos os modelos apresentaram desempenhos equivalentes, sendo o modelo MIMO um pouco melhor do que o SISO aumentado.

Nogueira *et al.* (2020) apresentam uma comparação entre três estratégias avançadas de controle aplicadas em uma planta de produção de polietileno linear, sendo: uma técnica com estabilidade garantida (IHMPC, *Infinite Horizon Model Predictive Control*); uma técnica robusta estabilizada (RIHMPC, *Robust IHMPC*); e um MPC convencional. A planta é representada por um modelo fenomenológico validado com dados reais e os controladores têm como objetivo controlar as variáveis de qualidade MI e densidade através das principais variáveis de processo para tais variáveis de qualidade,

respectivamente: hidrogênio; e comonômero. Para a identificação das funções de transferência para cada caso utilizou-se três condições reais de processo, correspondentes à produção de três resinas distintas (diferentes pares MI/ densidade). Por fim, os autores concluem que o RIHMPC foi a técnica que apresentou melhores resultados, frente as demais, pois proporcionou transições de resinas mais suaves e rápidas, e alcançou o *setpoint* com menor erro de regime.

Em todas as referências citadas (a Tabela II.1 traz um resumo delas) a aplicação de um MPC, geralmente não linear, demonstrou resultados interessantes para os processos de produção de polietileno. A maioria dos trabalhos é desenvolvida em processos de produção de PEBD a super alta pressão. Além disso, poucos trabalhos foram desenvolvidos nos últimos dez anos, principalmente aplicados em plantas industriais, demonstrando que esse ainda é um ramo da ciência com grande espaço para desenvolvimento frente às novas tecnologias.

Tabela II.1. Resumo das Referências Bibliográficas em MPC

Referência	PR ¹	TR ²	NT ³	VC ⁴	VM ⁵	MD ⁶
Seki et al. (2001)	SR	CSAR	AC	MI/ DENS	H/ P/ CO/ T	FN
Hwang et al. (2002)	FG	LF	AC	MI/PR	T/ TP/ MLF	SS/ FN
Fontes e Mendes (2008)	SL	CSAR	AC	T/ MW/ %CO	MO/ CO/ CAT	FN
Jacob e Dhib (2012)	SHP	CTR	AC	T/ MW	MO/ I	FK (<i>unscented</i>)
Jesus (2012)	SL	CSAR	AC	MI/ T	M/ H	FK
Skåln et al. (2016)	SHP	CTR	IN	MI	CTA	NE
Muhammad et al. (2019)	SHP	CTR	AC	MI/ T	I/ CTA	SS
Nogueira et al. (2020)	SL	CSAR	AC	MI/ DENS	H/ CO	FN

¹PRocesso (PR): SoLução (SL); super alta pressão (SHP, *Super High pressure*); lama (SR, *Slurry*); Fase Gás (FG);

²Tipo de Reator (TR): reator contínuo tipo autoclave agitado (CSAR, *Continuous Stirred Autoclave Reactor*); reator tubular contínuo (CTR, *Continuous Tubular Reactor*); Leito Fluidizado (LF);

³NaTureza (NT): ACadêmico (AC); INdustrial (IN);

⁴Variáveis Controladas (VC): índice de fluidez (MI, *Melt Index*); peso molecular (MW, *Molecular Weight*); DENSidade (DENS); Concentração (%) de COPolímero (%CO); PRodução (PR); Temperatura (T); Massa do Leito Fluidizado (MLF);

⁵Variáveis manipuladas (VM): Hidrogênio (H); MOnômero (MO); COmonômero (CO); Temperatura (T); Pressão (P); agente de transferência de cadeia (CTA, *Chain Transfer Agent*); CATalisador e coCATalisadores (CAT); Iniciador (I);

⁶MoDelo (MD): espaço de estados (SS, *State-Space*); Filtro de Kalman (FK); FeNomenológico (FN); comercial/Não Especificado (NE).

II.4. Analisadores Virtuais

Analisadores virtuais são ferramentas matemáticas que estimam o valor de uma variável ou propriedade não medida, através dos valores obtidos por sensores físicos [dispositivos técnicos/ *hardware* que respondem a um estímulo físico (temperatura; pressão; umidade; rotação; entre outras) com frequência definida (Martin *et al.*, 2021), a fim de monitorar variáveis de processo ou ambientais] de outras variáveis e propriedades medidas e que são relacionadas com aquela que é inferida pelo analisador virtual. Sensores virtuais foram desenvolvidos e aplicados com sucesso em muitos campos da indústria (destilação; reação; polimerização; entre outros), resultando em ganhos importantes na qualidade e produtividade dos processos. Os analisadores virtuais podem ser concebidos através de várias técnicas, tais como (Kano e Fujiwara, 2011): redes neurais artificiais; regressão linear; regressão múltipla; modelo *just-in-time*; modelos híbridos; modelos físicos; e regressão de mínimos quadrados parciais. Kano e Fujiwara (2011) apresentam uma estatística das aplicações na indústria e ilustram os principais modelos e suas particularidades.

As principais análises realizadas para um processo de produção de polietileno são densidade e MI. Tais análises são feitas em laboratório e levam em média uma hora e trinta minutos, respectivamente. Além de dispendir recursos humanos e financeiros nessas análises, durante o tempo entre análises o grupo operacional não dispõe da informação dos valores dessas propriedades, sendo necessário acompanhar variáveis de processo que indicam indiretamente se o produto está especificado ou não. Nesse contexto, os analisadores virtuais exercem um importante papel na indústria de produção de polietileno, pois garantem melhor controle de qualidade do polímero a baixo custo.

Karjala *et al.* (1997) utilizam dois filtros de Kalman estendidos para estimar o MI do polietileno a partir de um modelo dinâmico *online* para um reator de polimerização industrial em um processo em solução “Dowlex”. O primeiro modelo rastreia com precisão as variáveis do processo durante perturbações e transições de mudança de qualidade do produto. As previsões deste modelo corrigido são então usadas por um segundo filtro de Kalman para fornecer estimativas em tempo real do MI atual do polímero sendo produzido no reator de polimerização. Os autores demonstram a acurácia do modelo a partir de testes em condições reais de planta e estimam ganhos na redução da produção de produto fora de especificação durante transições de produto.

Fernandes e Lona (2005) apresentam um breve tutorial de como desenvolver um modelo de rede neural artificial para um processo de polimerização. Nesse trabalho é apresentado uma aplicação denominada “modelagem inversa” que visa estimar os dados de processo a partir de variáveis de qualidade e produtividade. Os autores aplicam a ferramenta em três processo de polimerização distintos: polimerização de eteno em fase gás com leito fluidizado; processo em batelada de polimerização de estireno; e transição de grade na polimerização do acetato de vinila. No primeiro caso são estimados variáveis de processo (concentração de eteno, concentração de buteno-1, vazão de catalisador, velocidade superficial do gás, temperatura e porosidade) a partir de peso molecular, composição, polidispersão e produtividade. Na polimerização do acetato de vinila também foi utilizado uma RNA (Rede Neural Artificial) com três camadas ocultas (com vinte neurônios, vinte e cinco neurônios e vinte neurônios, respectivamente). As variáveis estimadas foram as concentrações em diferentes vasos (denominados 52, 64 e 88) e a temperatura, através das variáveis peso molecular, polidispersão, geração máxima de calor e produtividade. Por fim, o último modelo estima a concentração de iniciador, a concentração de monômero, a concentração de emulsificante e a temperatura, a partir do peso molecular, da polidispersão, do diâmetro das partículas, da produtividade e da frequência de ramificação. Para isso utilizou-se de duas camadas ocultas com vinte e vinte e cinco neurônios, respectivamente.

Neumann *et al.* (2006) desenvolveram um modelo fenomenológico não linear e outro empírico baseado em dados industriais, e comparam ambos frente à capacidade de prever o MI e a taxa de produtividade do polímero em um processo de produção de polietileno de baixa densidade constituído por dois reatores de leito fluidizado (fás gás) em série. Para construção do modelo fenomenológico, o leito fluidizado foi dividido em duas regiões: uma fase de emulsão; e uma fase de bolha. As espécies poliméricas foram obtidas por balanços de massa, e as taxas de consumo/ formação a partir de um modelo cinético desenvolvido para catalisadores Ziegler-Natta. Para a predição do MI calculou-se o peso molecular e utilizou-se a técnica dos momentos, sendo aplicada também uma correlação empírica ajustada ao dados experimentais. O modelo empírico foi desenvolvido em três diferentes versões de mínimos quadrados: linear; quadrático; e polinomial. Os autores concluem que o modelo empírico quadrático foi aquele que melhor representou o comportamento dinâmico do MI e da produtividade.

Lewalle (2007) apresentou uma patente onde é descrito um VOA (*Virtual Online Analyzer*, analisador virtual em linha) baseado em redes neurais artificiais, que é utilizado

para prever o MI e a densidade do polietileno a partir das condições de reação em um processo tipo *slurry* (duplo *loop*).

Liu (2007) desenvolveu um analisador virtual de MI para uma planta industrial de produção de polietileno de baixa densidade, localizada em Koahsiung (Taiwan). Inicialmente o autor utilizou a técnica de análise de componentes principais para eliminar a colinearidade entre as variáveis de entrada. Em seguida decompôs o espaço operacional em várias regiões locais através da técnica de clusterização *fuzzy c-mens* e, por fim, utilizou a modelagem *fuzzy* Takagi-Sugeno para prever a variável desejada. O modelo foi aplicado em várias situações e demonstrou acurácia satisfatória.

Zhao e Cui (2011) apresentaram um modelo preditivo das propriedades do polímero (MI e densidade) para um processo industrial de polietileno em fase gás. Os autores combinaram modelos de primeiros princípios (cinética) e um esquema de modelagem com filtro de Kalman estendido. Com essa combinação, um método de *design* (projeto) de estimativa conjunta com filtragem é proposto para atualizar a estimativa das propriedades do polímero com base nos dados de análise de laboratório *off-line*.

Nogueira *et al.* (2017) desenvolveram dois analisadores virtuais de qualidade (fenomenológico e rede neural) a fim de prever a densidade e o MI dos polímero em um processo de produção de polietileno em solução. Os autores utilizaram um algoritmo de ortogonalização usando os autovalores da matriz Hessiana para reduzir o número de parâmetros do modelo fenomenológico a serem estimados, reconhecendo possíveis correlações ou dependência linear entre eles. O modelo de rede neural artificial utilizou o método de validação cruzada a fim de definir a estrutura ótima da rede. Em suma, ambos modelos apresentaram resultados equivalentes e satisfatórios.

Muhammad *et al.* (2021) desenvolveram três modelos de analisadores virtuais, de MI e conversão, não lineares e orientados a blocos, denominados de modelos Neural Wiener (NW), Neural Wiener modificado (M-NW) e Neural Hammerstein (NH), a fim de simular um processo de produção de PEBD em reator tubular. A estrutura do modelo NW consiste em um bloco linear dinâmico (L) que recebe um sinal de entrada $u(k)$ e tem como saída um sinal $v(k)$ que alimenta em cascata um bloco estático não linear (M) em sua saída. No caso do modelo M-NW o bloco não linear recebe o sinal intermediário $v(k)$ e o sinal de entrada $u(k)$. O modelo NH possui configuração inversa ao NW, de modo que o primeiro bloco corresponde ao bloco não linear, que é seguido pelo bloco linear. Para todos os casos o modelo linear foi concebido como espaço de estados e o modelo não linear como uma rede neural artificial. A fim de gerar dados para identificação do

modelo do processo, os autores utilizaram o *software* Aspen Plus para desenvolver um modelo de estado estacionário, validado com dados reais de planta, que foi posteriormente convertido para um modelo dinâmico através do Aspen Dynamic. Todos os modelos tiveram ajustes satisfatório, mas o M-NW foi aquele que teve melhor ajuste ($R^2=0.993$).

Todos os trabalhos citados, resumidos na Tabela II.2, além de outros que são encontrado na literatura utilizando as mais diversas técnicas (não se pretendeu nessa seção fazer uma revisão exaustiva sobre a matéria), reforçam a aplicabilidade de analisadores virtuais na indústria de produção de polietileno.

Tabela II.2. Resumo das Referências Bibliográficas em Analisadores Virtuais

Referência	PR ¹	TE ²	NT ³	VP ⁴
Karjala et al. (1997)	SL	FK	IN	MI
Fernandes e Lona (2005)	FG	RN	AC	CE/ CB/ T/ P/ VSG
Neumann et al. (2006)	FG	FN/ MQ	IN	MI/ PD
Lewalle (2007)	SR	RN	IN	MI/ DENS
Liu (2007)	SHP	FZ	IN	MI
Zhao e Cui (2011)	FG	FK	IN	MI/ DENS
Nogueira et al. (2017)	SL	FN/ RNA	AC	MI/ DENS
Muhammad et al. (2021)	SHP	RNA	AC	MI/ Q

¹PRocesso (PR): SoLução (SL); super alta pressão (SHP, *Super High pressure*); lama (SR, *SluRry*); Fase Gás (FG);

²TÉcnica (TE): Rede Neural Artificial (RNA); Regressão Linear (RL); Filtro de Kalman (FK); Mínimos Quadrados (MQ); FeNomenológico (FN); *FuZzy* (FZ);

³NaTureza (NT): ACadêmico (AC); INdustrial (IN);

⁴Variável Predita (VP): índice de fluidez (MI, *Melt Index*); ProDutividade (PD); conversão (Q); Concentração de Eteno (CE); Concentração de Buteno-1 (CB); vazão de CATalisador (CAT); Velocidade Superficial do Gás (VSG); Temperatura (T); Porosidade (P);DENSidade (DENS).

A Braskem, empresa financiadora desse trabalho, desenvolve há anos modelos de analisadores virtuais a fim de otimizar seus processos. Em 2000, a empresa patenteou um sistema para inferência online de propriedades físicas e químicas e sistema para controle online (Demoro, et al., 2000). Nessa patente um sistema para inferência e controle online das propriedades físicas e químicas do polipropileno e seus copolímeros é descrito. O

sistema compreende modelos para inferência de propriedades físicas e químicas que não são medidas continuamente, até outrora, e modelos para controlar essas propriedades, bem como taxa de produção, densidade do meio de reação e outras variáveis de interesse do processo. O sistema de controle descrito permite maximizar a taxa de produção, bem como o rendimento do catalisador no processo de produção. A empresa apresentou também na Process Week 2015 Rockwell (Chicago/IL/USA) a implementação de analisadores virtuais online e controladores preditivos de modelo, usando Pavilion8® Model Predictive Control (MPC). Ganhos de estado estacionário foram obtidos utilizando modelos híbridos, uma combinação de Redes Neurais e equações fenomenológicas. A Braskem utilizou dados industriais para identificar funções de transferência dinâmica, o que permitiu determinar o tempo de resposta. Inferências online não lineares configuradas ajudaram os operadores a estimar o comportamento futuro de variáveis de baixa taxa de amostragem e serviram como uma variável controlada dentro do controlador preditivo. A iniciativa aumentou a produção em 3%, melhorou a qualidade em 50% e economizar 6% em matérias-primas (Neumann & Moreira, 2015). Atualmente a empresa está atuando fortemente com a empresa Radix Engenharia e Software na construção de modelos de predição de MI e densidade para todas as unidades industriais.

Além disso, há várias outras aplicações desenvolvidas internamente na tecnologia Sclairtech que não possuem referência. São elas:

1. Modelo de predição de MI e densidade baseado em redes neurais artificiais em uma planta de polietileno linear – Braskem x Pavilion (Rockwell) ;
2. Modelos de predição de teor de voláteis na saída da coluna de degasagem – Nesse modelo as entradas da colunas foram decomposta utilizando da técnica de Análise de Componentes Principais (*Principal Component Analysis* - PCA) e aplicadas em um modelo de Gradiente *Boosting*;
3. Modelo de predição da saúde do granulador – Modelo de Aprendizagem de máquina utilizando para identificar condições atípica no granulador e minimizar o número de falhas. Condições reconhecidamente normais foram utilizadas como referência para construção das regiões ótimas correspondente à cada resina. Além disso, as condições referência foram decompostas com um PCA reverso e continuamente calculado a diferença entre a condição atual e referência, possibilitando, dessa forma identificar quais variáveis estão atípicas;

A primeira iniciativa acima foi desenvolvida pela contratação da empresa Pavilion®. As demais foram desenvolvidas pelo autor desse trabalho, enquanto Engenheiro de Processos.

II.5. Conclusões

Diversos processos de produção de polietileno foram desenvolvidos ao longo do tempo, cada um deles com suas particularidades características. A complexidade intrínseca de cada tecnologia gera uma dificuldade na implementação de controladores preditivos baseado em modelos (MPC, *Model Predictive Control*). Entretanto, os ganhos esperados (qualidade, eficiência, lucratividade, segurança e proteção ao meio ambiente) a partir da implementação de tais controladores são relevantes e importantes para um contexto de restrição de recursos naturais e competitividade globalizada.

Diversos exemplos de aplicações de MPC e de analisadores virtuais em plantas de produção de polietileno, nos mais diversos processos, são encontrados na literatura, indicando a viabilidade técnica e financeira da implementação desses tipos de tecnologia. Os analisadores virtuais são ferramentas matemáticas que estimam uma variável ou propriedade através de sensores físicos de outras variáveis e propriedades, tendo como principais técnicas: redes neurais artificiais; regressão linear; regressão múltipla; modelo *just-in-time*; modelos híbridos; modelos físicos; regressão de mínimos quadrados; filtro de Kalman; entre outras. Tais ferramentas podem ser utilizadas nos mais diversos processos a baixo custo e com resultados relevantes.

Referências Bibliográficas

Agachi, P. S., Nagy, Z. K. & Cristea, M. V. ..., 2006. *Model Based Control - Case Studies in Process Engineering*. s.l.:Wiley-VCH.

Brisk, M. L., 2005. Process control: potential benefits and wasted opportunities. *Australian Journal of Electrical and Electronics Engineering*, pp. 2:1, 41-48.

Camacho, E. F. & Bordons, C., 1998. *Model Predictive Control*. s.l.:Springer-Verlag.

Coutinho, F. M. B., Mello, I. L. & Santa Maria, L. C. d., 2003. *Polietileno: principais tipos, propriedades e aplicações*. São Carlos, s.n., pp. v. 13, n. 1,01-13.

Demoro, E. P., Oliveira, A. T. M. D. & Axelrud, C., 2000. Brazil, Patente N° EP1119800B1.

EMBIRUÇU, M., 1998. *Modelagem , Estimção e Controle em Reatores Industriais de Polimerização*. Tese de Doutorado, UFRJ, Rio de Janeiro-Brasil,; s.n.

Embiruçu, M., 2002. *Nota de aula: Estimativa de Benefícios em Projetos de Controle Automático de Processos*. Salvador/BA, Brasil: PEI, UFBA.

Embiruçu, M., Lima, E. L. & Pinto, J. C., 1996. A survey of advanced control of polymerization reactors. *Polymer Engineering and Science*, pp. 36, no. 4, p. 433-447.

Fernandes, F. A. N. & Lona, L. M., 2005. NEURAL NETWORK APPLICATIONS IN POLYMERIZATION PROCESSES. *Brazilian Journal of Chemical Engineering* , 22(03), pp. 401-418.

Fontes, C. & Mendes, M., 2008. Nonlinear predictive control of an industrial slurry reactor. *Controle e Automação*, 19(4), pp. 417-430.

Hwang, C.-A., Johnson, D. & Goff, S., 2002. *Advanced Control Strategies for polyolefin gas phase processes*. Anchorage, AK, USA, IEEE.

Jacob, N. C. & Dhib, R., 2012. Nonlinear MPC of a multi-zone multi-feed LDPE autoclave reactor. *Journal of Industrial and Engineering Chemistry*, 18(5), pp. 1781-1795.

Jesus, L., 2012. *O Filtro de Kalman como analisador virtual para o controle de qualidade em processos de polimerização*, Salvador/BA: Dissertação (mestrado em Engenharia Industrial) - Escola Politécnica, Universidade Federal da Bahia.

Kano, M. & Fujiwara, K., 2011. Virtual Sensing technology in Process Industries: Trends and Challenges Revealed by Recent industrial Applications. *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 44(1), pp. 1-17.

Karjala, T., Meerdink, H. & Dems, B., 1997. Real-Time Estimation of Polymer Properties in an Industrial Polyethylene Reactor. *IEEE Proceedings of 16th American CONTROL Conference - Albuquerque, New Mexico*, pp. 3063-3067.

Lewalle, A., 2007. *Predictive model for density and melt index of polymer leaving loop reactor*. Bruxelles, Patente N° WO2009059969A1.

Li, H., Yu, D. & Braun, J. E., 2011. A review of virtual sensing technology and application in building systems. *HVAC&R RESEARCH* , 17(5), pp. 619-645.

Liu, J., 2007. On-line soft sensor for polyethylene process with multiple production grades. *Control Engineering Practice*, 15(7), pp. 769-778.

Martin, D., Köhl, N. & Satzger, G., 2021. Virtual Sensors. *Business & Information Systems Engineering*, 63(3), pp. 315-323.

- MENG, W., LI, J., CHEN, B. & LI, H., 2013. Modeling and Simulation of Ethylene Polymerization in Industrial Slurry Reactor Series. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 21(8), p. 850–859.
- Muhammad, D., Ahmad, Z. & Aziz, N., 2019. Low density polyethylene tubular reactor control using state space model predictive control. *Chemical Engineering Communications*, 208(4), pp. 500-516.
- Muhammad, D., Ahmad, Z. & Aziz, N., 2021. Modeling of low density polyethylene tubular reactor using nonlinear block-oriented model. *Material Today: Proceedings*, 42(1), pp. 39-44.
- Neumann, G. A., Finkler, T. F., Cardozo, N. S. M. & Secchi, A. R., 2006. Comparison between Phenomenological and Empirical Models for Gas-Phase Polymerization Process Control. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 45(8), pp. 2651-2660.
- Neumann, G. A. & Moreira, I. d. S., 2015. *CS06 - Braskem Uses Model Predictive Control*. Chicago, IL. USA, Process Week 2015 - Rockwell.
- Nogueira, I. B. et al., 2020. A Robustly Model Predictive Control Strategy Applied in the Control of a simulated industrial polyethylene polymerization process. *Computers & Chemical Engineering*, Volume 133, p. 106664.
- Nogueira, I. B. et al., 2017. A model-based approach to quality monitoring of a polymerization process without online measurement of product specifications. *Computers and Industrial Engineering*, 106(C), pp. 123-136.
- Qin, S. & Badgwell, T. A., 2003. A survey of industrial model predictive control technology. *Control Engineering Practice*, 11(7), p. 733–764.
- Seki, H. et al., 2000. A nonlinear predictive control for optimal grade transition of polymerization reactors. *IFAC Proceedings Volumes*, 33(10), pp. 701-706.
- Seki, H. et al., 2001. Industrial application of a nonlinear model predictive control to polymerization reactors. *Control Engineering Practice*, 9(8), pp. 819-828.
- Skålen, S., Josefsson, F. & Ihrström, J., 2016. Nonlinear MPC for grade transitions in an industrial LDPE tubular reactor. *IFAC-PapersOnLine*, 49(7), p. 562–567.
- Strom, E. T. & Rasmussen, S. C., 2011. *The History of Polyethylene*. s.l., s.n., pp. Capítulo 9, 115–145.
- Wang, Y. et al., 2000. A nonlinear predictive control for optimal grade transition of polymerization reactors. *IFAC Proceedings Volumes*, 33(10), pp. 701-706.
- Zhao, Z. & Cui, M., 2011. Polymer properties on-line estimation for gas-phase polyethylene based on particle filtering joint estimation. *9th World Congress on Intelligent Control and Automation*, pp. 505-510.

Capítulo III – Projeto Conceitual do Sistema de Controle

Resumo

O processo de polimerização da planta de Polietileno Linear (PEL) aqui investigada (planta da Braskem, denominada nessa empresa como PEL PE3) é baseado na tecnologia “Sclairtech” do licenciador “NOVA Chemicals” (Canadá). Esse processo em solução é composto por 3 reatores, sendo um CSTR (*Continuous Stirred Tank Reactor*, reator tanque agitado contínuo) autoclave (industrialmente conhecido como “Reator 1”) e dois tubulares [industrialmente conhecidos como “Reator 3” e “*Trimmer*” (finalizador)]. O processo pode ser operado de diferentes formas e aquela onde ele é operado com reator autoclave com o agitador ligado e mais o “*Trimmer*” (chamado de módulo 1) corresponde a 97% do tempo de operação da unidade. Na planta aqui estudada, atualmente somente uma resina é produzida com o reator tubular (“Reator 3”) acoplado ao autoclave com o agitador desligado e mais o “*Trimmer*” (chamado de módulo 3→1). Além da configuração dos reatores, o processo tem também diferentes opções de utilização do sistema catalítico. Uma delas, denominada de *Heater Treatment Catalytic* (HTC, tratamento térmico catalítico), é atualmente utilizada em todos os módulos de produção. Nesse capítulo é feita uma breve descrição do processo e são apresentadas as bases conceituais para o desenvolvimento do modelo do *Advanced Process Control* (APC, controle avançado de processos) para a planta em questão.

III.1. Objetivos Gerais de Controle

O objetivo geral desse trabalho é desenvolver uma estratégia de controle preditivo tipo MIMO (*Multi-Input Multi-Output*, múltiplas entradas e múltiplas saídas) para os parâmetros de qualidade *Melt Index* (MI, índice de fluidez) e Densidade e para a conversão, e implementá-lo na Planta Industrial de Polietileno Linear (PEL) em Solução da tecnologia “Sclairtech” aqui investigada. Os objetivos para a aplicação do APC (*Advanced Process Control*, controle avançado de processos) na unidade PEL incluem:

- Aumento do nível de segurança da planta;
- Aumento de produção;
- Redução de variabilidade na qualidade do produto;
- Otimização das transições de tipos (*grade*) de produtos;
- Redução do consumo de catalisador.

III.2. Descrição do Processo - Planta PEL

No processo de produção das resinas de polietileno na planta PEL o cicloexano (C_6H_{12}) é utilizado como solvente e uma alfa-olefina, geralmente buteno-1 ou octeno-1, é usada como comonômero. Além do PELBD (Polietileno Linear de Baixa Densidade), a planta PEL é capaz de produzir PEAD (Polietileno de Alta Densidade) e PEMD (Polietileno de Média Densidade), a depender da quantidade e do tipo (buteno-1 e octeno-1) de comonômero adicionado no reator.

Um fluxograma simplificado do processo é mostrado na Figura . O eteno e o comonômero são inicialmente purificados e, antes de serem enviados para a reação, são dissolvidos em cicloexano, pressurizados e condicionados termicamente para as condições da reação. O etileno proveniente da Unidade de Químicos da Braskem (antiga COPENE) contém algumas impurezas que são veneno para o catalisador e devem ser removidas antes de alimentar a reação. Para isso, existem dois adsorvedores carregados com peneira molecular que são responsáveis por retirar as principais impurezas, tais como CO_2 , CO , metanol, O_2 e H_2O .

A solução de solvente purificado é enviada dos vasos purificadores para a região de absorção onde o eteno é absorvido no cicloexano. A maior parte do eteno é absorvido nesse contato. O calor de absorção do eteno é de aproximadamente 6.5 kJ/mol, resultando em um aumento de temperatura de 1.1 °C para cada 1% de eteno absorvido,

por isso a absorção de eteno é limitada em 16% em peso (50 °C em equilíbrio). Para suplantar essa limitação a mistura é passada por um trocador resfriador em forma de “U” que resfria a mistura até 30 °C, conhecido como “*Absorver Cooler*” (resfriador absorvedor). Isso faz com que a concentração de eteno absorvido aumente para 21%. Um fluxograma simplificado do processo é mostrado na Figura .

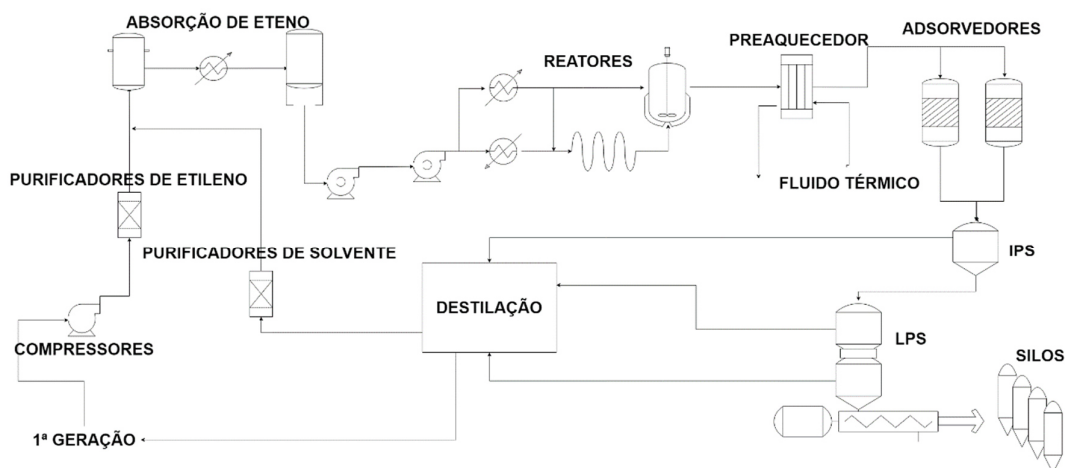


Figura III-1. Fluxograma Simplificado do Processo PEL.

Na seção de reação uma solução catalítica é injetada para propiciar a polimerização do eteno e do comonômero. No processo existem três reatores, sendo dois tubulares e um autoclave: “Reator 1”, autoclave agitado (CSTR, *Continuous Stirred-Tank Reactor*); “Reator 3”, tubular adiabático; e “*Trimmer*” (finalizador, reator de ajuste), outro tubular adiabático. Nesses reatores o monômero e os comonômeros são combinados para produzir polietileno. O reator “*Trimmer*” é um reator tubular com volume aproximadamente igual a 55% do volume do “Reator 1” e tem como principal função melhorar a eficiência do catalisador e aumentar a conversão do eteno. As condições de operação do sistema são ajustadas para cada tipo de polímero, a depender das propriedades desejadas: densidade; e MI. As resinas nessa planta PEL estão divididas em grupos: filme octeno; filme buteno; rafia; injeção; e rotomoldagem. Cada passagem no processo resulta em cerca de 95% de conversão do eteno em polietileno. Na saída do reator é introduzido um desativador do catalisador, de forma a assegurar o término da reação de polimerização.

O processo ocorre sob a presença de catalisadores tipo Ziegler-Natta de primeira geração. No modo *Heater Treatment Catalytic* (HTC, tratamento térmico catalítico) o catalisador é misturado com um agente redutor [o outro modo catalítico disponível nessa

tecnologia, conhecido como modo *standard* (padrão) não é mais utilizado nessa planta]. Após a redução do catalisador a mistura passa por um tratamento térmico com cicloexano aquecido (210-260 °C) e posteriormente é misturada com um agente alquilante (alquilação). A temperatura do tratamento térmico atualmente é utilizada como alternativa para ajustar o MI e a densidade em algumas resinas.

A solução polimérica após o reator CSTR é aquecida entre a faixa de 285~300 °C, a depender da resina em produção, em um trocador aquecedor chamado “*Preheater*” (pré-aquecedor), com a finalidade de evitar a separação de fase nos leitos adsorvedores cuja função é remover os resíduos de catalisador. Para que a remoção do catalisador seja feita, ele deve ser previamente desativado através da adição de um desativador, após o reator “*Trimmer*”, e um segundo desativador logo após o “*Preheater*”. Existem dois propósitos para a desativação dos catalisadores. O primeiro é terminar a reação de polimerização. O segundo é transformar o resíduo do catalisador, de forma que facilite a sua adsorção nos leitos de alumina. Após os vasos adsorvedores a solução segue para os separadores de gás onde o cicloexano, o eteno e o comonômero não reagidos são separados do polímero no Separador de Pressão Intermediária (IPS, *Intermediate Pressure Separator*). Saindo do IPS, o polímero e o solvente são encaminhados para o Separador de Baixa Pressão (LPS, *Low Pressure Separator*).

No primeiro estágio, no IPS, a pressão do sistema é reduzida para valores em torno de 30 kgf/cm². Nesta etapa, a maior parte de cicloexano, octeno-1, octeno-2, buteno-1, buteno-2 e eteno não reagidos vaporizam, saindo na corrente gasosa, de topo, do IPS. A solução que sai no fundo contém aproximadamente entre 40 a 60% de polietileno e cicloexano, em massa. Se a pressão no IPS for elevada, a quantidade de solvente na fase líquida aumenta, diminuindo o fluxo de topo para a área de reciclo, e aumentando a vazão de alimentação para o separador de baixa pressão. Ocorre, também, um aumento da densidade da fase vapor e uma maior quantidade de cera (*grease*, polímero de baixo peso molecular) sai pelo topo. Se a pressão for reduzida, uma maior quantidade de vapor quente sai pelo topo e alimenta a área de reciclo, reduzindo as necessidades de aquecimento, tendo em vista o acréscimo do conteúdo energético da corrente.

O LPS é formado por dois estágios, separados entre si por um prato perfurado, cuja função é proporcionar a deposição de resina no primeiro estágio. A solução polimérica proveniente do fundo do IPS, após uma redução de pressão, alimenta o 1º estágio do LPS, e solvente e componentes mais leves que vaporizaram saem pelo topo. O polímero em estado pastoso sai pelo fundo com aproximadamente 5% de cicloexano.

As correntes de topo oriundas do IPS e do LPS são enviadas à área de destilação onde são purificados através de 5 colunas de destilação (chamadas industrialmente de LB, HB, RB, FE e CM). Na coluna LB todo o eteno e o buteno saem pelo topo e vão para a coluna FE. A corrente da base da coluna LB vai para a coluna HB. Na coluna FE o eteno sai pelo topo e retorna para a Unidade de Químicos onde é purificado, enquanto o comonômero é enviado pela corrente da base para a coluna CM. Na coluna CM há a separação do buteno-1 do buteno-2, ou do octeno-1 do octeno-2. O buteno-2 (ou octeno-2) é formado a partir da isomerização do buteno-1 (ou octeno-1) quando a corrente de processo passa através do leito de alumina em altas temperaturas para remoção do resíduo de catalisador. Esses isômeros devem ser retirados, já que não participam da reação, devido ao impedimento estérico proveniente da cadeia carbônica. O buteno-2 e o octeno-2 são enviados para a fornalha como combustível suplementar. Na coluna HB é retirado o cicloexano pelo topo com destino à área de purificação, e a corrente de fundo, uma solução de cicloexano/ *grease*, é direcionada à coluna RB. Na coluna RB o resto de cicloexano é retirado pelo topo e enviado para o fundo da coluna HB, e a corrente de fundo, que contém *grease* e 10 a 15% de cicloexano, é enviada para a fornalha como combustível suplementar. A coluna HB possui papel importante para o controle do teor de impurezas a ser enviado para a área de purificação. Um descontrole neste teor pode resultar em variações no perfil de reação.

O cicloexano oriundo da destilação (destilado da coluna HB) é purificado em quatro leitos (dois operacionais e dois reservas) de sílica gel que são sistematicamente regenerados. Esses leitos possuem a função básica de reter compostos oxigenados, basicamente carbonílicos, oriundos da decomposição dos desativadores.

O polímero que é acumulado no fundo do vaso LPS alimenta a extrusora, onde é misturado com aditivos sólidos e líquidos e posteriormente granulado (“pelletizado”), seguindo para um vaso chamado de “*Stripper*” (retificadora). Nesse vaso o cicloexano e todos os voláteis são retirados da resina através de uma corrente de vapor de baixa pressão que é injetada na base do equipamento. Em seguida, a resina é enviada para seis silos de mistura onde, por um processo de recirculação, a resina é misturada por um determinado tempo em certas condições de rotação da válvula rotativa e pressão do soprador de ar, a fim de garantir que todas as propriedades sejam constantes em todo o lote. Por fim, a resina é enviada para os silos de produtos ou diretamente para os silos de ensaque.

Cada resina produzida possui uma condição de síntese. A condição de síntese apresenta as condições de processo que são referência para o respectivo *grade* (tipo de

polímero), a fim de auxiliar os grupos operacionais nos ajustes de operação, visando minimizar a geração de produto fora de especificação (*off-spec*). Nesse documento de condição de síntese também estão definidos os limites de especificação de qualidade do respectivo *grade*.

III.3. Objetivos e Requisitos Específicos de Controle

III.3.1. Controle de *Melt Index* (MI)

O *Melt Index* (MI) é uma medida indireta da massa molar do polímero. Quanto maior a massa molar menor será o MI. Esse parâmetro tem relação direta com a taxa de transferência (quando uma nova molécula começa a crescer) e/ ou de terminação (quando há uma desativação daquele ponto) de cadeia de moléculas do polímero dos pontos ativos do catalisador e inversa com a taxa crescimento de cadeia. Os controles primários disponíveis no módulo Reator 1 são temperatura do meio do reator (°C), temperatura do tratamento térmico (°C), alimentação lateral do reator (%), concentração de etileno na reação (%), concentração de hidrogênio (ppm) e a relação mássica entre o comonômero (buteno-1 e/ ou octeno-1) e o eteno (adimensional).

O catalisador utilizado no processo “Sclairtech” é uma mistura de dois metais de transição (titânio e vanádio). Cada espécie (V^{+3} , V^{+4} e Ti^{+3}) contribui para uma região da curva de distribuição de massa molecular. Uma manobra operacional “não convencional” (no sentido de que não é uma manobra “oficialmente” recomendada pelos detentores da tecnologia, mas foi descoberta e desenvolvida empiricamente pelos responsáveis pela planta em questão, que acreditam que tal manobra interfere na atividade catalítica) constantemente utilizada para realizar um ajuste fino no MI é a temperatura do tratamento térmico. Ao elevar a temperatura do tratamento térmico a espécie V^{+4} (que produz mais moléculas de maior massa molar) é favorecida e o MI tende a diminuir. Por outro lado, ao diminuir a temperatura do HTC o MI tende a aumentar. A fim de evitar comprometer significativamente a atividade do catalisador, que também é influenciada pela temperatura do tratamento, os limites praticados de maior e menor temperaturas do tratamento térmico são 260 °C e 210 °C, respectivamente.

O controle de temperatura do meio do reator é fundamental para garantir o controle de MI, pois é mais uma forma indireta de controlar a conversão da reação. A baixa atividade do catalisador, seja devido a sua má ativação ou à presença de impurezas, resulta em variação da temperatura do meio do reator e, concomitantemente, do MI.

III.3.2. Controle de Densidade

O processo “Sclairtech” é bastante versátil, pois com essa tecnologia é possível produzir polietileno para as mais diversas aplicações, tais como: rotomoldagem; injeção de baixa densidade; injeção de alta densidade; rafia; e filme buteno. Nesse contexto a faixa de densidade pode variar de 0.9180 a 0.9620.

A densidade é proporcional à quantidade de comonômero presente na resina. O comonômero adiciona uma ramificação na cadeia principal, promovendo a redução da cristalinidade e, portanto, da densidade.

III.3.3. Controle de Conversão

Devido ao baixo tempo de residência no reator, a conversão é um importante parâmetro para o processo “Sclairtech”. Além disso, a conversão tem uma relação direta com custo [geração polímero de baixo peso molecular (cera) e consumo de catalisador] e qualidade (MI). Adicionalmente, a conversão é uma parcela importante do controle de produtividade. Dessa forma, é essencial um bom controle desse parâmetro.

A conversão pode ser controlada a partir do perfil de temperatura através da dosagem de catalisador e/ ou pela concentração do monômero na solução. Para esse processo o ponto ótimo de conversão é entre 94 e 96%, pois abaixo de 94% a reação se torna muito sensível frente à presença de impurezas e acima de 96% o consumo de catalisador cresce exponencialmente frente à conversão, além de gerar muito polímero de baixo peso molecular (cera). Nesse contexto, o controle de conversão deve ser feito a partir da concentração de eteno na solução, em uma faixa pré-estabelecida. Em paralelo, a temperatura do meio do reator deve operar em um valor de referência estável, conforme condição de síntese.

III.3.4. Ativação do Catalisador

Como descrito anteriormente, a unidade operacional utiliza o modo catalítico HTC. Duas espécies químicas são utilizadas para ativar o catalisador: um agente redutor (RD); e um agente alquilante (AL). O controle da dosagem é feito a partir da relação molar com o catalisador (CAT): RD/CAT e AL/CAT. O tratamento térmico, além de estabilizar a molécula para a etapa de alquilação, diminui a diferença entre a temperatura do catalisador e do reator, evitando que o catalisador se decomponha quando exposto abruptamente às condições da reação (alta temperatura e pressão).

O agente redutor, devido a sua atividade, reduz o catalisador à valência útil e também é consumido por impurezas. Em concentrações elevadas o co-catalisador redutor pode sobre-reduzir o catalisador, resultando em diminuição da atividade catalítica. Por outro lado, se a concentração estiver menor do que a ótima o catalisador não atinge a valência útil e também resulta em diminuição da atividade catalítica. Em resumo, existe um ponto ótimo na relação molar co-catalisador redutor e catalisador. O agente alquilante também possui um ponto ótimo e qualquer elevação além desse ponto resulta em um pequeno decréscimo na atividade catalítica.

Os pontos ótimos das relações entre o catalisador e os co-catalisadores mudam constantemente devido à presença de impurezas. É recomendado operar com 10% acima do ponto ótimo, de modo a evitar eventuais variações de perfil de reação devido à passagem de impurezas pelos leitos purificadores de solvente. Os purificadores de solvente são leitos de sílica gel que possuem a importante função de reter compostos oxigenados, normalmente carbonílicos oriundos da decomposição dos desativadores. Esses purificadores são alternados e posteriormente regenerados a cada três dias aproximadamente. Quando esses leitos estão saturados há passagem de impurezas, demandando maior consumo de catalisador.

III.3.5. Controle Regulatório

Os controles regulatórios existentes (Tabela III.1) deverão ser avaliados antes da implementação do controle avançado. Numa avaliação preliminar o sistema aparenta poucas vulnerabilidades. Nos controles regulatórios as variáveis controladas são correspondentes às variáveis manipuladas pelo controle avançado, sendo elas: concentração de hidrogênio (ppm); relação mássica comonômero/ monômero; conversão (%); temperatura do tratamento térmico (°C); entre outras (com a nova proposta aqui apresentada, a conversão passa a ser uma variável controlada do APC, ao invés de uma manipulada e, portanto, sai dos controles regulatórios). As malhas de controle regulatório utilizam controladores tipo Proporcional-Integral-Derivativo (PID) convencionais e também outras estratégias de controle não convencional (tipo cascata e razão). Na grande maioria dos casos tem-se controle de razão a fim de manter as proporções desejadas para especificar o produto final. A concentração do eteno na reação (Figura III.2), por exemplo, é um controle do tipo razão. Ela é calculada como a relação entre a vazão mássica de eteno dividida pela vazão mássica total pelo reator. O bloco razão, ao verificar

o *setpoint* (valor desejado) da concentração de eteno, definido pelo operador de painel, calcula o *setpoint* da vazão de eteno a partir da vazão mássica total pelo reator no momento correspondente.

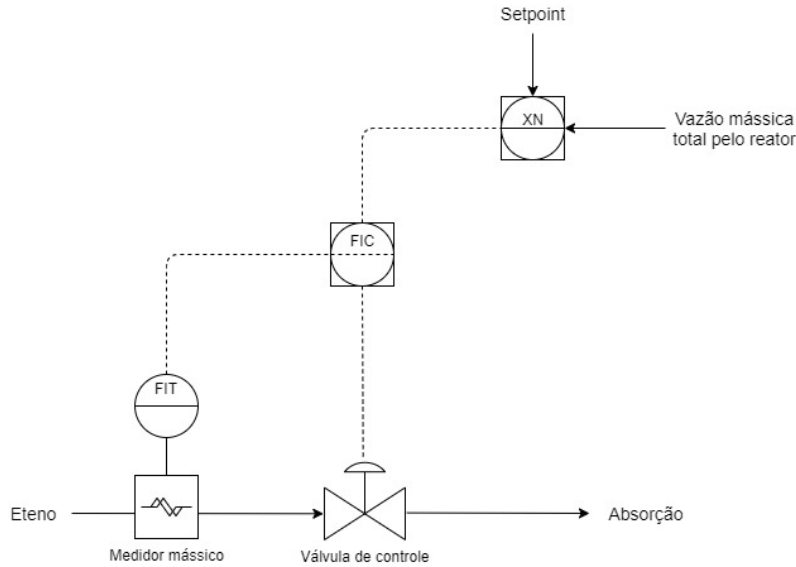


Figura III-2. Malha de Controle de Concentração de Eteno.

Conforme mostrado no rodapé da Tabela III.1, a conversão passa a ser uma variável controlada do APC na nova proposta aqui apresentada, deixando de ser uma manipulada e, dessa forma, saindo dos controles regulatórios. Com isso, a concentração de catalisador passa a ficar livre para uma outra utilização, permitindo assim a implementação de uma estratégia inovadora na tecnologia em questão, onde o catalisador é utilizado como variável de controle da temperatura do meio do reator. Essa nova estratégia traz dois benefícios muito importantes: i) de um lado, garante a estabilidade da reação, estabilidade esta que é necessária para possibilitar a implementação do controle de qualidade; ii) e do outro lado permite uma redução no consumo de catalisador, o que tem um impacto muito importante no benefício econômico alcançado pelas novas estratégias de controle aqui projetadas (ver capítulo IV).

Tabela III.1. Controles Regulatórios

Variável controlada	Cálculo	Variável manipulada
Alimentação lateral do reator (%)	$\frac{\text{Vazão mássica da alimentação lateral}}{\text{Vazão mássica total pelo reator}}$	Vazão mássica da alimentação lateral
Concentração de eteno (%)	$\frac{\text{Vazão mássica de eteno}}{\text{Vazão mássica total pelo reator}}$	Vazão mássica de eteno
Relação mássica buteno/ eteno	$\frac{\text{Vazão mássica de buteno}}{\text{Vazão mássica de eteno}}$	Vazão mássica de buteno
Conversão (%)*	$\frac{\Delta T \text{ da reação}}{\Delta T / \% \text{ monômero convertido} + \Delta T / \% \text{ comonômero convertido}}$	Concentração de catalisador
Concentração de hidrogênio (ppm)	$\frac{\text{Vazão de hidrogênio}}{\text{Vazão mássica total pelo reator}}$	Vazão de hidrogênio
Temperatura do tratamento térmico (°C)	Não se aplica	Vazão de utilidade pelo trocador aquecedor
Temperatura da entrada do reator	Não se aplica	Vazão por conjunto de trocadores

* Com a nova proposta aqui apresentada, a conversão passa a ser uma variável controlada do APC, ao invés de uma manipulada e, portanto, sai dos controles regulatórios.

III.3.6. Matriz de Controle

Baseado na versatilidade e particularidades das famílias do processo “Sclairtech”, esse trabalho propõe a construção de três controladores (matrizes de controle), de acordo com as particularidades das famílias. As premissas adotadas para a confecção das matrizes de controle foram:

- O controle avançado da reação na planta PEL será implementado somente para o módulo 1 (“Reator 1” com o “*Trimmer*”) com o modo catalítico HTC. Isso representa aproximadamente 97% do portfólio da unidade;
- Será proposta uma alteração na estratégia de controle da temperatura do meio do reator, a fim de suprimir a influência das impurezas, que são uma variável do tipo distúrbio não medido;
- A concentração de eteno na reação, apesar de poder gerar algum distúrbio na área de destilação e, além disso, também impactar no controle da temperatura do meio do reator, será uma variável manipulada pelo controlador, especialmente para o controle de conversão. O valor ótimo da conversão será definido como alvo da condição de síntese de cada resina, embora ela seja a variável controlada que mais se admite variação ao redor do *setpoint*, que deve ser no máximo 96.0% e no mínimo 94%;
- A otimização do catalisador a partir da otimização das razões de cocatalisadores não será desenvolvida nesse estudo, devido à sua complexidade e ao seu pequeno efeito nas variáveis de qualidade;
- Em todos os casos a temperatura do HTC não deve ser inferior a 210 °C ou superior a 260 °C, a fim de não afetar a atividade catalítica, conforme discutido anteriormente;
- A função objetivo do controlador deverá minimizar a diferença entre a variável estimada a partir do modelo e o alvo da especificação para ambos MI e densidade, a fim de reduzir ao máximo a variabilidade dessas variáveis de qualidade;
- O controle avançado não deve otimizar a produção da unidade. Por se tratar de uma planta que utiliza solvente, elevar ou diminuir a carga da unidade exige ajustes em outras áreas (extrusão e destilação). Desenvolver um modelo para atender essa condição exige uma complexidade superior à proposta desse trabalho.

A matriz de controle apresenta as variáveis manipuladas, que são aquelas já usualmente utilizadas na operação normal da planta, e controladas (as variáveis de qualidade MI e densidade já definidas, além da conversão) e a relação entre elas. Se uma variável tem relação direta (R+) significa que o ganho da variável é positivo, ou

seja, aumentar a variável manipulada x representa em aumento da variável controlada y . Por outro lado, se a variável manipulada x tem relação inversa (R-) com a variável y significa que elevar a variável x representa diminuir a variável y . Os tipos de relações (positiva ou negativa) apresentadas nessas matrizes são definidos em função do conhecimento do licenciador da tecnologia e do conhecimento empírico acumulado com a operação da planta. A relação mássica comonômero/ monômero, por exemplo, possui relação inversa com a densidade. Em função disso, tem-se como regra empírica que elevar em 10% a relação buteno/ eteno representa em redução de 0.001 na densidade do polietileno.

Os critérios utilizados para definir os três conjuntos de matrizes de controle foram os seguintes:

- Matriz de controle 1: resinas de copolímero de buteno e que utilizam hidrogênio para o controle de MI (ou seja, não incluem resinas de muito baixo MI);
- Matriz de controle 2: resinas de homopolímero, onde não se utiliza o comonômero e a densidade não é controlada;
- Matriz de controle 3: resinas de baixas densidades (copolímeros de buteno) e de muito baixo MI (onde não é possível utilizar hidrogênio para o controle de MI).

III.3.7. Matriz de Controle 1: Rotomoldagem, Injeção de Baixa Densidade e Injeção de Alta Densidade (Copolímero de Buteno)

Para esse grupo de famílias de resinas a densidade é predominantemente controlada a partir da relação mássica comonômero/ monômero. Outros parâmetros de processo também influenciam a densidade, mas com menor ganho. Todas as resinas desse grupo de famílias utilizam hidrogênio para o controle de MI. Alguns ajustes de menor ganho podem ser feitos a partir de outras variáveis.

As Tabela III.2, Tabela III.3 e Tabela III.4 resumem a matriz de controle em termos de direção de ganhos entre variáveis de entrada (manipuladas e perturbações) e de saída (controladas), bem como apresentam os objetivos de controle e as restrições para essa matriz de controle, que são definidos com base naquilo que já é praticado atualmente na operação da planta.

Tabela III.2. Matriz de Controle 1*

MATRIZ DE CONTROLE 1		Controladas		
Variáveis manipuladas		MI	Densidade	Conversão
MV1	Concentração de hidrogênio	R+	R+	-
MV2	Relação mássica buteno/ eteno	R-	R-	R-
MV3	Temperatura do tratamento térmico	R-	R-	-
MV4	Concentração de eteno	R+	R-	R+
Variáveis distúrbios				
DVM1	Temperatura da entrada do reator	R+	R+	R-
DVM2	Temperatura do meio do reator	R+	R-	R+

*Originalmente a Alimentação lateral do reator também foi pensada como uma variável manipulada, mas, como é mostrado no capítulo V, a análise dos dados no desenvolvimento dos analisadores virtuais mostrou um efeito não significativo dessa entrada nas variáveis de qualidade controladas.

Tabela III.3. Matriz de Controle 1 - Objetivos de Controle

VARIÁVEL	RESTRICÇÕES
Concentração de hidrogênio	Máximo <i>hard</i>
Conversão	Faixa <i>soft/ hard</i>
Relação mássica buteno/ eteno	Faixa <i>soft/ hard</i>
Temperatura do tratamento térmico	Faixa <i>soft/ hard</i>
Concentração de eteno	Faixa <i>soft/ hard</i>

Tabela III.4. Restrições para a Matriz de Controle 1

VARIÁVEL	<i>SOFT</i>	<i>HARD</i>	Δ <i>HARD</i>
MI (g/10')	Conforme limite da condição de síntese	Conforme condição de síntese	-
Densidade	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-
Conversão	93 - 96	<92	-
Concentração de hidrogênio (ppm)	-	>40	-
Relação mássica buteno/ eteno	0 - 0.6	>0.6	-
Temperatura do tratamento térmico (°C)	210 - 260	T>260 e T<210	-
Concentração de eteno	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-

III.3.8. Matriz de Controle 2: Injeção de Alta Densidade (Homopolímero)

Nessa família de resinas, onde não se utiliza o comonômero, a densidade não é controlada pois os valores esperados estão todos dentro dos limites de especificação. Portanto, nessa matriz de controle será proposto somente o controle da variável MI através da concentração de hidrogênio e temperatura do tratamento térmico (aqui vale a

mesma observação da Tabela III.2 em relação à alimentação lateral do reator), e da conversão, através da concentração de eteno. As Tabela III.5, Tabela III.6 e Tabela III.7 resumem essa matriz de controle no que se refere à direção dos ganhos, bem como aos seus objetivos de controle e restrições.

Tabela III.5. Matriz de Controle 2*

MATRIZ DE CONTROLE 2		Controladas		
Variáveis manipuladas		MI	Densidade	Conversão
MV1	Concentração de hidrogênio	R+	-	-
MV2	Temperatura do tratamento térmico	R-	-	-
MV3	Concentração de eteno	R+	R-	R-
Variáveis distúrbios				
DVM1	Temperatura da entrada do reator	R+	R-	R-
DVM2	Temperatura do meio do reator	R+	R-	R+

*Aqui vale a mesma observação da Tabela III.2 em relação à Alimentação lateral do reator.

Tabela III.6. Matriz de Controle 2 - Objetivos de Controle

VARIÁVEL	RESTRICÇÕES
Concentração de hidrogênio	Máximo <i>hard</i>
Temperatura do tratamento térmico	Faixa <i>soft/ hard</i>
Concentração de eteno	Faixa <i>soft/ hard</i>

Tabela III.7. Restrições para a Matriz de Controle 2

VARIÁVEL	SOFT	HARD	ΔHARD
MI (g/10')	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-
Densidade	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-
Conversão (%)	93 - 96	<92	-
Concentração de hidrogênio (ppm)	-	>40	-
Temperatura do tratamento térmico (°C)	210 - 260	T>260 e T<210	-
Concentração de eteno	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-

III.3.9. Matriz de Controle 3: Filme Buteno

Uma característica particular desse grupo de famílias são os baixos valores de MI e também os baixos valores de densidade. Nessa configuração a temperatura do HTC possui maior influência no MI. A densidade continua sendo controlada principalmente a partir da relação mássica de comonômero. As Tabela III.8, Tabela III.9 e Tabela III.10

resumem essa matriz de controle em relação à direção dos ganhos, assim como também quanto aos seus objetivos de controle e restrições.

Tabela III.8. Matriz de Controle 3*

MATRIZ DE CONTROLE 3		Controladas		
Variáveis manipuladas		MI	Densidade	Conversão
MV1	Relação mássica buteno/ eteno	R-	R-	R-
MV2	Temperatura do tratamento térmico	R-	R-	-
MV3	Concentração de eteno	R+	R+	R-
Variáveis distúrbios				
DVM1	Temperatura da entrada do reator	R+	R+	R-
DVM2	Temperatura do meio do reator	R+	R-	R+

*Aqui vale a mesma observação da Tabela III.2 em relação à Alimentação lateral do reator.

Tabela III.9. Matriz de Controle 3 - Objetivos de Controle

VARIÁVEL	RESTRICÇÕES
Relação mássica buteno/ eteno	Faixa <i>soft</i> / Máximo <i>hard</i>
Temperatura do tratamento térmico	Faixa <i>soft</i> / <i>hard</i>
Concentração de eteno	Faixa <i>soft</i> / <i>hard</i>

Tabela III.10. Restrições para a Matriz de Controle 3

VARIÁVEL	SOFT	HARD	ΔHARD
MI (g/10')	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-
Densidade	Conforme condição de síntese (faixa da EPF)	Conforme condição de síntese (faixa da EPF)	-
Conversão (%)	93 - 96	<92	-
Relação mássica buteno/ eteno	0 - 0.6	>0.6	-
Temperatura do tratamento térmico (°C)	200 - 265	T>265 e T<200	-
Concentração de eteno	Conforme condição de síntese	Conforme condição de síntese	-

EPF: Especificação de Produto Final.

Para uma planta onde é produzida a família filme octeno, durante a operação da família “Filme Buteno” a variável “Relação mássica octeno/ eteno” deve permanecer fora do controle, e na operação da família “Filme Octeno” a variável “Relação mássica buteno/ eteno” também deve permanecer fora do controle avançado. Durante a produção da família “Terpolímero” o operador de painel deve definir qual relação deve ser manipulada pelo controlador. Durante a entrada na campanha de octeno a relação controlada deve ser a octeno/ eteno e na saída a relação buteno/ eteno.

III.3.10. Indicadores de Desempenho

Para a avaliação da operacionalidade do sistema de controle serão utilizados alguns índices de desempenho, tais como: integral do erro quadrático (ISE, *Integral of Square Error*); Grau de Utilização (GUT); índice percentual de controladas ativas; e índices de desempenho do processo (parâmetros de capacidade, que são medidas de desempenho de longo prazo em relação às especificações superior e inferior: PP, que não considera a centralização, sendo desejável $PP > 1.5$; e Ppk, que considera a centralização, sendo desejável $Ppk > 1.33$).

III.4. Conclusões

Foi apresentada uma breve descrição do processo produtivo aqui investigado, dando ênfase a algumas particularidades voltadas para a implementação de um controle avançado de processos. Além disso, as variáveis relacionadas a objetivos operacionais e de qualidade do sistema de controle foram explicitadas, sendo introduzidas as matrizes de controle. São sugeridas três matrizes de controle, de acordo com as particularidades de cada família de polietileno, que foram agrupadas em três conjuntos correspondentes às respectivas matrizes de controle. Nesse capítulo foi discutido apenas o projeto conceitual do sistema de controle, e outros detalhes relativos às estratégias de controle e tipos de controladores a serem utilizados serão discutidos ainda nos capítulos seguintes, especialmente no capítulo VI.

Capítulo IV – Estudo de Viabilidade Econômica

Resumo

A implementação de um Controle Avançado de Processo (CAP) em uma planta industrial exige um esforço técnico relevante, juntamente com um significativo investimento financeiro. Dessa forma, faz-se necessário avaliar com precisão os ganhos esperados com um possível projeto, a fim de definir a viabilidade econômica. Nesse contexto, no presente capítulo são apresentados os fundamentos para a confecção de um estudo de viabilidade econômica para a implementação de um CAP em uma planta de produção de polietileno linear.

IV.1. Introdução

Diferentemente de outras tecnologias que possuem nicho bem estabelecido, o processo “Sclairtech” é capaz de produzir o polietileno numa faixa ampla de *Melt Index* (MI, índice de fluidez) e densidade. Como resultado, a planta de Polietileno Linear (PEL) é capaz de produzir as resinas das famílias rotomoldagem, filme octeno, filme buteno, injeção de baixa densidade, injeção de alta densidade, rafia e sopro. Além disso, o tempo de residência no reator é muito baixo (aproximadamente 60 segundos), possibilitando transições de tipo (*grade*) de produto em curto intervalo de tempo.

As amplas faixas de MI e densidade associadas ao baixo tempo de residência no reator garantem à planta de PEL uma baixa geração de produto fora de especificação por transição, quando comparada com outras tecnologias. Entretanto, por ser única no Brasil, a operação da planta sob estudo exige um grande número de trocas de tipo a cada mês, a fim de atender ao mercado consumidor.

Todos os controles de propriedades são realizados pelos operadores de painel, a partir do conhecimento do processo e baseados nos resultados do Laboratório de Controle de Qualidade (LCQ). Essa associação de utilização de controles tradicionais (através de operadores) com a dinâmica do portfólio atual (onde prevalece um grande número de trocas de tipo a cada mês) demonstra que existe uma oportunidade para minimizar custos e reduzir desvios de qualidade dos produtos em relação às propriedades desejadas.

Nesse capítulo do trabalho será apresentada uma análise econômica estruturada dos ganhos potenciais com a implementação de um controle avançado na unidade aqui investigada, uma planta PEL com tecnologia “Sclairtech”.

IV.2. Especificação de Produtos

Cada resina produzida na planta de polietileno linear possui uma Especificação de Produto Final (EPF). O documento de EPF determina as faixas de especificação das propriedades de cada tipo de polietileno: cor; MI; densidade; aparência; contaminação; entre outras.

Cada especificação possui dois tipos de faixa. A primeira delas, conhecida na área industrial como “faixa de especificação”, representa a faixa de especificação de mercado. A segunda, mais ampla que a anterior, corresponde à “faixa de mistura”. Se um determinado lote apresentar resultado fora da faixa de especificação, porém dentro da faixa de mistura, esse lote pode ser misturado. Os lotes que apresentarem resultados fora

da faixa de mistura devem ser desclassificados como produto fora de especificação (*offspec*). A Figura IV.1 ilustra essas faixas de especificação, onde LIM é o limite inferior de mistura, LIE é o limite inferior de especificação, LSE é o limite superior de especificação e LSM é o limite superior de mistura.

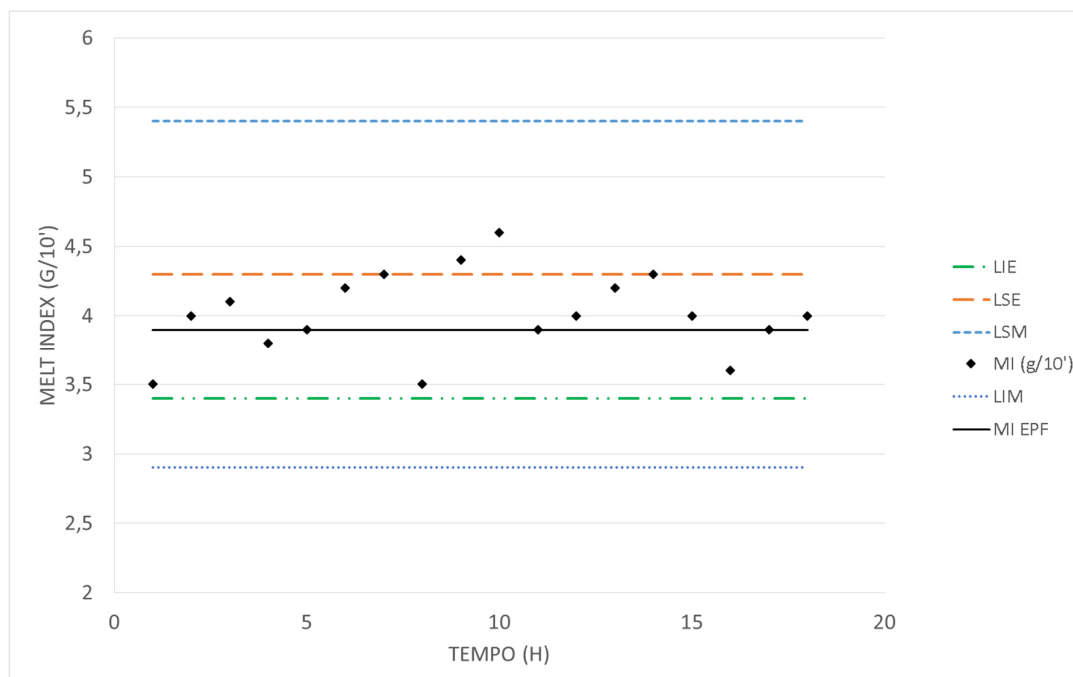


Figura IV-1. Limites de Especificação.

IV.3. Variáveis-Chave

Nesse trabalho é proposta a implementação de um Controle Avançado de Processo (CAP), objetivando controlar as propriedades MI e densidade. Portanto, para avaliar o desempenho do projeto será considerada a geração de produto fora de especificação por variação de MI e variação de densidade durante a operação normal de produção das diferentes resinas. Além disso, estima-se que haverá redução significativa na geração de produto fora de especificação por mudança de tipo (transição de resina ou de *grade*). O SEX (*Stress Exponent*, uma propriedade que mede o caráter não Newtoniano do polímero produzido, e que também é utilizado como um dos parâmetros de controle de qualidade na planta PEL, além do MI e da densidade) será ignorado, visto que ele não é um parâmetro controlado no módulo de reação 1 (reator autoclave com agitador ligado juntamente com reator *Trimmer*, reator finalizador ou de ajuste).

O sistema de controle proposto nesse trabalho contempla também uma nova estratégia de controle regulatório de modo a reduzir o consumo de catalisador. O consumo

de catalisador está diretamente associado ao consumo de alguns outros insumos, tais como co-catalisadores, adsorvente e desativadores. Dessa forma, haverá também reduções proporcionais concomitantes em tais insumos. A redução de consumo de todos esses insumos também terá um impacto econômico positivo com a implementação do projeto proposto.

Em resumo, as variáveis-chave para a avaliação econômica do projeto são: redução na variabilidade do processo, nos produtos fora de especificação e no número de misturas por variação de densidade ou MI; redução de produtos fora de especificação e de perdas de produção por troca de tipo; e redução de consumo de catalisadores e insumos associados.

IV.4. Análise Estatística dos Dados de Processo: Oportunidades de Benefícios com Especificação de MI e Densidade

Nessa parte do trabalho são utilizados dados de planta, correspondentes a um ano de operação, para avaliar a dispersão de dados de MI e densidade, objetivando definir a redução de variabilidade proposta pelo CAP. Tais dados são decorrentes de análises realizadas pelo LCQ em amostras coletadas na extrusora durante a operação da planta industrial. Os dados utilizados são referentes a quatro resinas, cada uma delas representante de uma família diferente entre as seis famílias produzidas atualmente (não contempladas apenas as famílias filme buteno e ráfia): filme octeno; injeção de baixa densidade; injeção de alta densidade; e rotomoldagem. As quatro resinas foram escolhidas devido a sua contribuição no portfólio de mercado da planta, com o conjunto dessas quatro resinas representando aproximadamente 50% de toda a produção anual. Por esse relevante impacto global (e do impacto de cada uma das resinas dentro de suas respectivas famílias), é possível supor que, por aproximação, elas são boas representantes de suas respectivas famílias e, portanto, as demais resinas se comportam de forma semelhante.

Material fora de especificação referente a transição entre resinas e parada/ partida foram, nesse momento, expurgados da análise realizada nessa seção (isso é feito mais a frente, na seção IV.5.2, especificamente no que se refere a transição entre resinas; em relação a parada/ partida, essa é uma análise complexa e minuciosa, que se justificaria apenas se fossem observados ganhos significativos, o que não é o caso aqui, visto que o presente trabalho não contribui significativamente para a redução de tal tipo de perda). A

análise dos dados foi feita através do *software* “Minitab” e se concentrou somente em produto fora de especificação devido a variações de MI e densidade, pois são as variáveis-chave do referido projeto. Há diversas situações que podem produzir desvios no MI e/ ou na densidade, resultando em produto fora de especificação, e as principais são: variação de perfil de reação; equívoco operacional (*setpoint* inadequado); parada do compressor de hidrogênio; variação nos controles diversos.

Em cada gráfico apresentado nas seções seguintes é possível verificar o LIE (Limite Inferior de Especificação) e o LSE (Limite Superior de Especificação) para cada propriedade. Uma vez que o resultado esteja fora desses limites, o lote é misturado e/ ou desclassificado. Além disso, são apresentados o alvo da EPF (Especificação Final do Produto) e a média dos dados experimentais. Por fim, é apresentado o número de dados analisados. A Tabela IV.1 resume as informações sobre os dados coletados, onde:

$$\Delta Dens = (Dens - 0.900) \times 10000 \quad \text{Eq. 2}$$

$$\Delta Desvio Média = \Delta Dens_{EPF} - \Delta Dens_{Média} \quad \text{Eq. 2}$$

Embora esteja se lidando aqui com material fora da faixa de EPF, não se trata do que clássica e industrialmente considera-se *off-spec*. Aqui está-se a tratar com produto fora da faixa de EPF, que aumenta a dispersão de dados, representando, conseqüentemente, maior dispersão dos lotes, maior tempo de mistura, maior número de lotes de mistura, reclamações de cliente, entre outras conseqüências indesejáveis. Conforme salientado anteriormente, as perdas diretas por *off-spec* serão tratados mais à frente na seção IV.5.2.

Tabela IV.1. Resumo das Informações sobre os Dados Coletados para o Estudo de Viabilidade Econômica

Identificação da resina	RO	IB	FC	IA
Família	Rotomoldagem	Injeção de baixa densidade	Filme octeno	Injeção de alta densidade
% da produção	21	20	3	9
% de produção na família	52.7%	37.0%	56.8%	54.6%
Data de início	01/01/2019	01/01/2019	01/01/2019	01/01/2019
Data final	01/01/2020	01/01/2020	01/01/2020	01/01/2020
Tempo total de coleta	2012 horas	926 horas	882 dias	1275 dias
Tempo de amostragem	2 horas	2 horas	2 horas	3 horas
Número de dados	1006	463	441	425
Média - MI	4.0	30	1.0	7.5
EPF - MI	3.9	29	1.0	7.3
Desvio Média/EPF - MI	1.03	1.03	1.00	1.03
LIE - MI	3.4	25	0.80	6.4
LIS - MI	4.3	33	1.20	8.2
Média - Dens	0.9390	0.9245	0.9192	0.9592
EPF - Dens	0.9390	0.9240	0.9190	0.9600
$\frac{\Delta \text{Desvio Média}}{\Delta \text{Dens}_{EPF}}$	0.000	-0.021	-0.011	0.013
LIE - Dens	0.9380	0.9220	0.9170	0.9580
LIS - Dens	0.9400	0.9260	0.9210	0.9620

IV.4.1. Rotomoldagem

A tecnologia “Sclairtech” possui bastante competitividade para a produção de resinas da família de rotomoldagem devido à excelente propriedade de acabamento e ao baixo tempo de ciclo. Durante a operação industrial, são resinas produzidas com alta concentração de eteno na alimentação e, portanto, com um perfil de temperaturas elevadas no reator. Essa família representa a maior parcela no portfólio do mercado da unidade em estudo e é utilizada em diversas aplicações, tais como (Braskem, 2020): reservatórios de água; brinquedos; peças marítimas; peças agrícolas; e peças automotivas.

A análise estatística dos dados (Figuras IV.2 e IV.3 e Tabela IV.2) demonstra que durante a produção dessa resina de rotomoldagem 14.8% dos resultados ficaram fora da faixa de especificação para a densidade (aqui nessas análises estatísticas, “faixa de especificação” refere-se sempre à especificação de mercado, e não de mistura, salvo se for explicitamente indicado em contrário). Por outro lado, quase 23% dos dados ficaram fora da faixa para o MI, sendo que mais de 21% dos dados correspondem a desvios relativos ao limite superior da especificação de MI (ou seja, quase todos os desvios de MI são relativos ao limite superior, aqui denominados de desvios positivos). Essa maior concentração em desvios positivos é explicada pelo fato de desvios negativos de MI representarem maiores problemas na aplicação final da resina, e dessa forma os operadores de controle de painel tendem a um comportamento mais conservador, operando, em geral, com um valor de MI acima do alvo da EPF. Observa-se, na Tabela IV.2, que a quantidade total de material fora dos LE (Limites de Especificação) é igual à soma das quantidades fora dos LE de MI e densidade, ou seja, assume-se aqui (assim como também nas demais resinas) que a quantidade de vezes que MI e densidade estão fora de seus respectivos LE simultaneamente é desprezível.

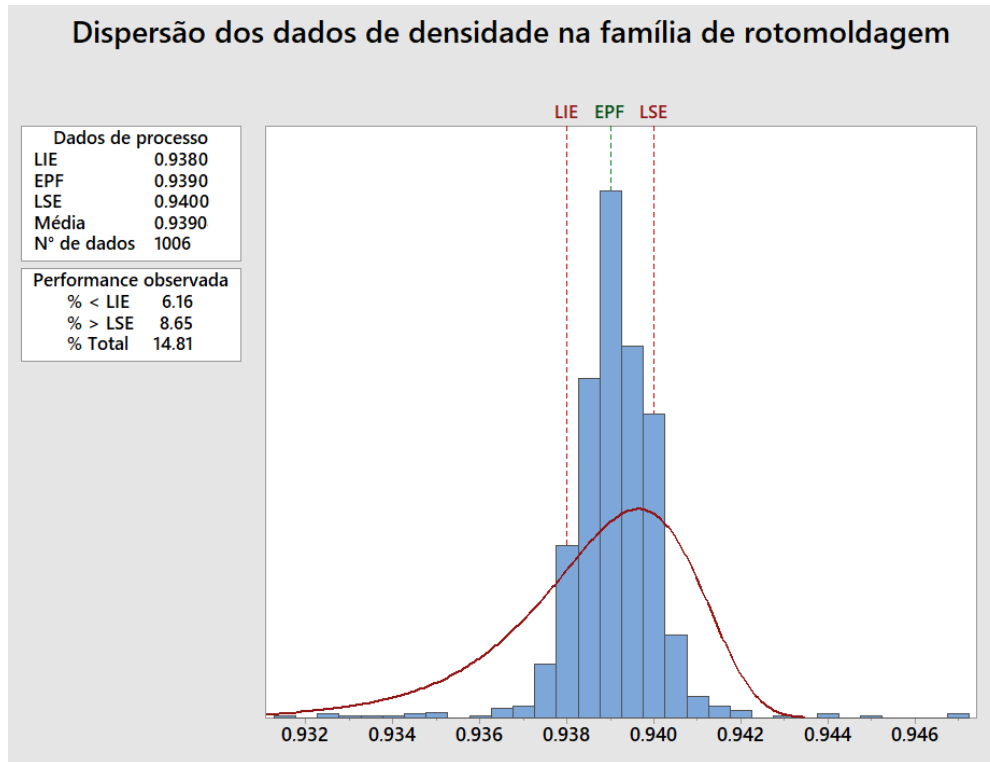


Figura IV-2. Dispersão de Dados de Densidade em Rotomoldagem.

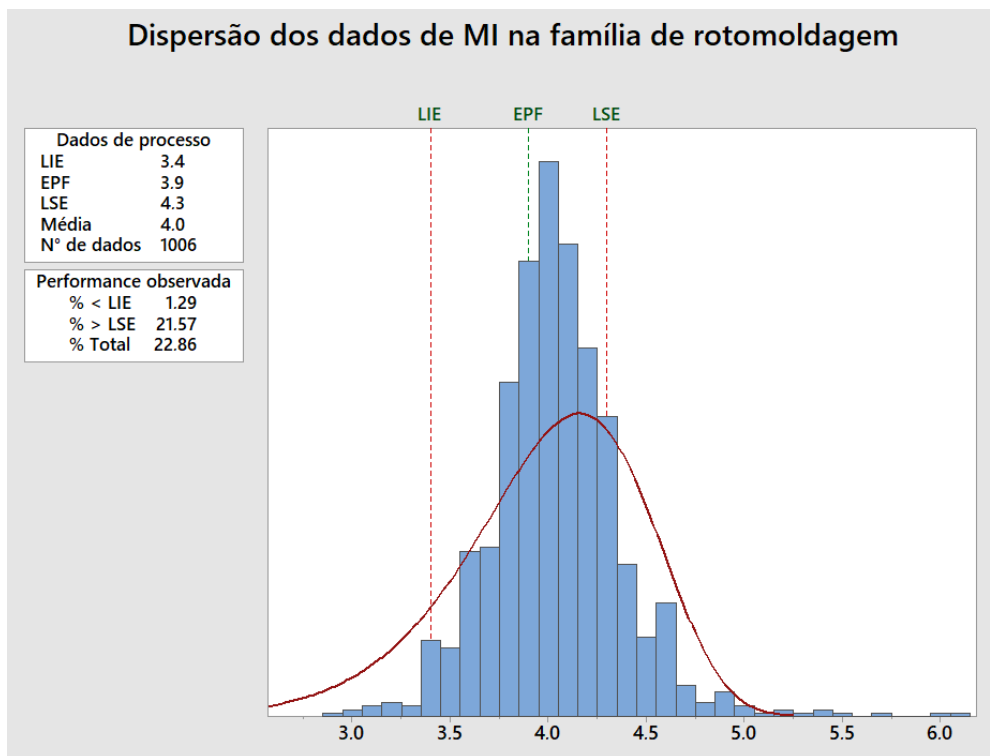


Figura IV-3. Dispersão de Dados de *Melt Index* em Rotomoldagem.

Tabela IV.2. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Rotomoldagem

	Densidade	MI
% Abaixo do LIE	6.16	1.29
% Acima do LIS	8.65	21.57
% Fora dos LE	14.81	22.86
% Total	37.67	

IV.4.2. Injeção de Baixa Densidade

Resinas da família de baixa densidade normalmente apresentam MI superior a 20 g/10 min e densidade inferior a 0.9320. Operacionalmente essa família é produzida com baixa pressão de reação e grande concentração de hidrogênio, devido ao alto MI, e perfis de temperatura de reação médios. A produção é limitada devido às condições de extrusão: temperatura de corte; *pellet*/ grama; qualidade do corte; entre outras. Os materiais produzidos no processo “Sclairtech” apresentam ótima flexibilidade, baixo empenamento e ótima processabilidade. Normalmente são utilizados na produção de peças de injeção na confecção de tampas flexíveis, tampas com lacre, tampas para alimentos e *master batch* (concentrado de pigmentos e/ ou aditivos diversos, em forma de grãos, utilizado para colorir e/ ou incorporar outras propriedades à resina termoplástica desejada) (Braskem, 2020).

Os dados coletados para esta resina (Figuras IV.4 e IV.5 e Tabela IV.3) demonstram que aproximadamente 18% da produção ficaram fora da faixa de liberação e foram misturados ou segregados como material fora de especificação. Os dados de MI se apresentaram mais dispersos e com maior número de dados desclassificados, apresentando 12.96% de dados com desvios positivos e 1.5% com desvios negativos da faixa de especificação. A preponderância de desvios positivos (maiores do que o LSE) está deslocando a média dos dados experimentais em relação ao alvo da EPF. A densidade, por outro lado, se apresenta como uma variável facilmente controlada para essa família, possivelmente devido à alta concentração de comonômero buteno na reação.

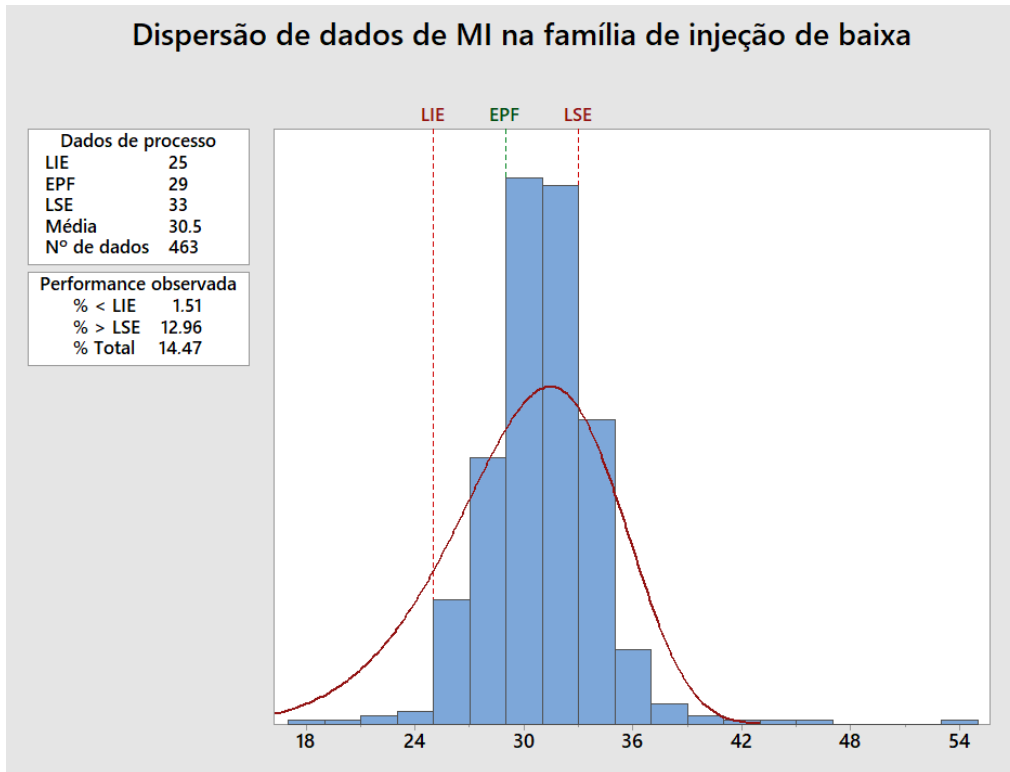


Figura IV-4. Dispersão de Dados de Densidade em Injeção de Baixa Densidade.

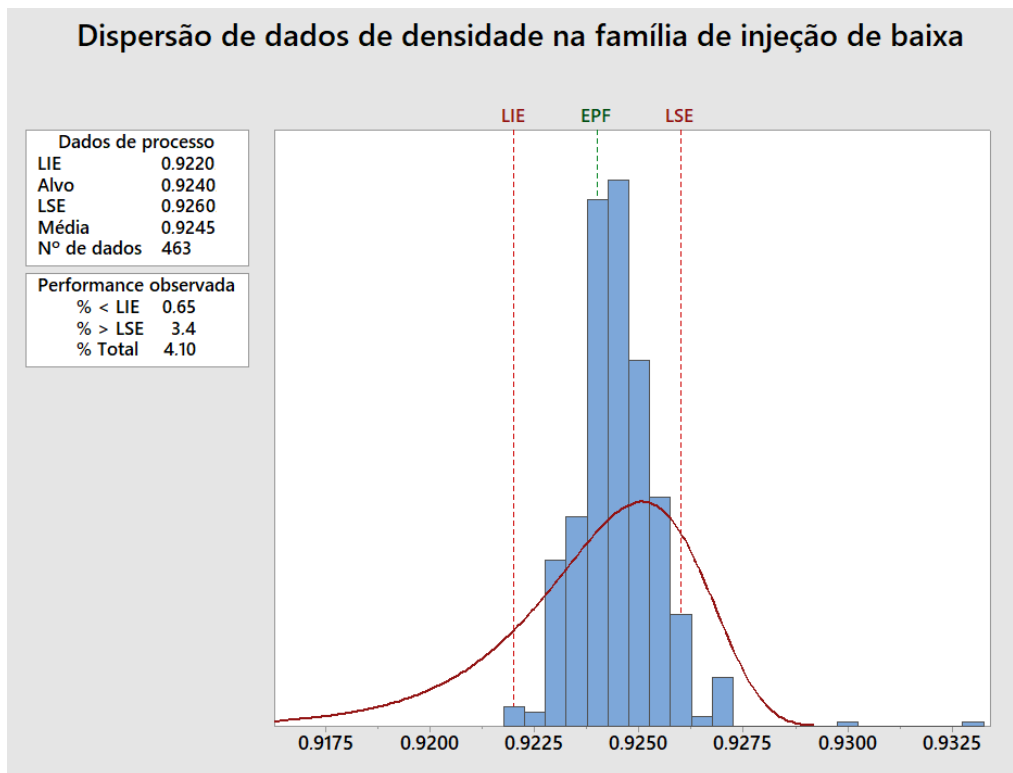


Figura IV-5. Dispersão de Dados de *Melt Index* em Injeção de Baixa Densidade.

Tabela IV.3. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Injeção de Baixa Densidade

	Densidade	MI
% Abaixo do LIE	0.65	1.51
% Acima do LIS	3.40	12.96
% Fora dos LE	4.10	14.47
% Total	18.57	

IV.4.3. Filme Octeno

Resinas de filme apresentam normalmente baixos MI e densidade. Resinas da família filme octeno produzidas na tecnologia “Sclairtech” apresentam vantagens importantes nesse segmento, que a diferenciam no mercado pelo equilíbrio de propriedades óticas e mecânicas. Essa família é caracterizada operacionalmente por grande recirculação do comômero octeno, alta pressão no reator e baixas temperaturas de reação. Devido à baixa carga e à maior demanda térmica para separar o comonômero octeno na destilação, elas são as resinas com maiores custos variáveis da unidade. As aplicações mais usuais são filmes alongados (*stretch*) e sacaria industrial. Nas suas aplicações, essas resinas de polietileno linear normalmente são misturas com polietileno de baixa densidade, visando alcançar um aumento do módulo elástico e uma maior resistência a tração, e reduzir o consumo de energia durante o processamento, como demonstrado por Huizena *et al.* (1990).

Conforme o estudo estatístico apresentado nas Figuras IV.6 e IV.7 e na Tabela IV.4, aproximadamente 29% dos dados de produção dessas resinas estão fora da faixa de especificação, que é o maior percentual observado entre as famílias analisadas. Diferentemente das demais famílias, a família de filme octeno apresenta maiores desvios na densidade (16.32%). Essa condição é resultado da dificuldade de concentrar/desconcentrar o comômero octeno no processo “Sclairtech”. Além disso, há maior incidência de variações de reação nessa família, devido à maior concentração de impurezas na corrente de hidrocarbonetos oriunda da destilação. Esse fato é decorrente das altas temperaturas na destilação, resultado da menor volatilidade do comonômero octeno. O MI apresentou desvio de aproximadamente 12%, sendo a maior parte deles (mais de 11%) de desvios positivos.

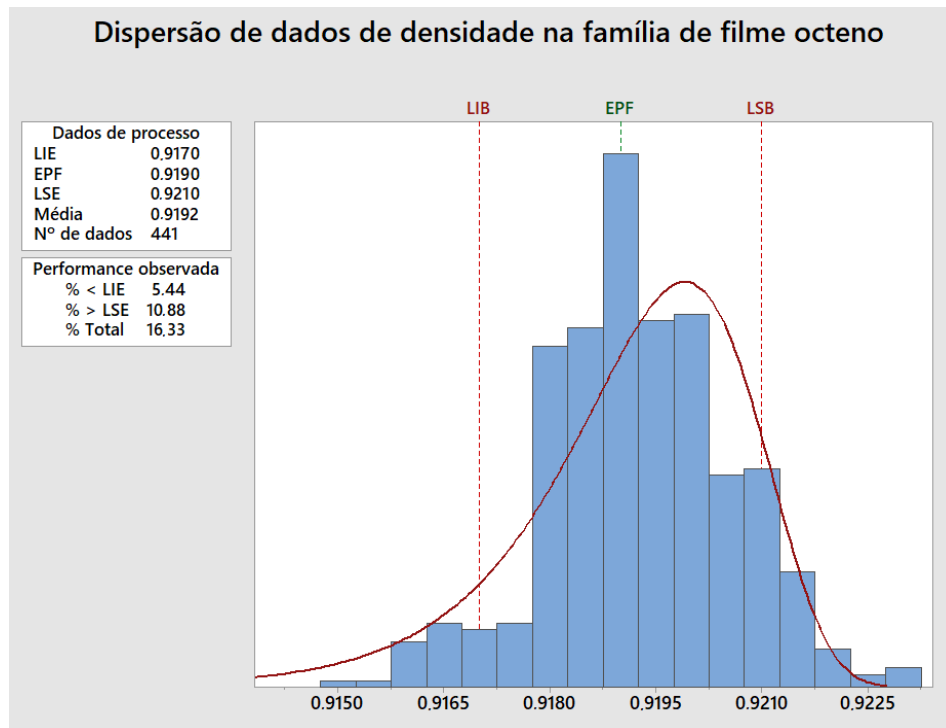


Figura IV-6. Dispersão de Dados de Densidade em Filme Octeno.

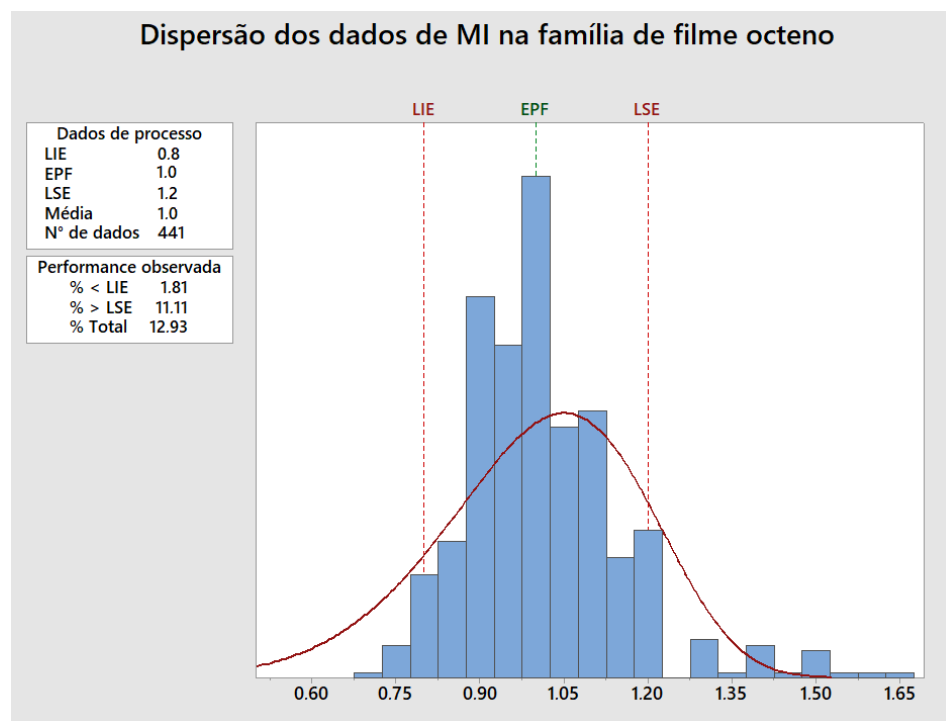


Figura IV-7. Dispersão de Dados de MI na Família de Filme Octeno.

Tabela IV.4. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Filme Octeno

	Densidade	MI
% Abaixo do LIE	5.44	1.81
% Acima do LIS	10.88	11.11
% Fora dos LE	16.33	12.93
% Total	29.26	

IV.4.4. Injeção de Alta Densidade

Essa família de polietilenos apresenta ampla faixa de MI e alta densidade. Devido a sua alta densidade, baixas concentrações do comonômero buteno são utilizadas. Algumas resinas dessa família são homopolímeros e, por isso, se tem pouca margem para controlar a densidade. Devido a sua ampla faixa de MI (4.9-50.0 g/10 min), esses materiais são utilizados em diversas aplicações, sendo as principais (Braskem, 2020): absorventes higiênicos, capa posterior de fraldas; baldes; contentores para alimentos; caixas para produtos congelados. As resinas de alta densidade produzidas na tecnologia “Sclairtech” se destacam dentre as demais devido aos seus elevados valores de módulo de fratura frágil. Além das resinas de rotomoldagem, conforme mencionado anteriormente, a tecnologia “Sclairtech” é particularmente competitiva na produção da família de injeção de alta densidade. Isso é confirmado, inclusive, pelo fato da resina de maior produção na planta industrial ser exatamente uma resina dessa família.

Para a análise estatística da produção de resinas dessa família foi tomada como exemplo uma resina de homopolímero. Conforme mostram as Figuras IV.8 e IV.9 e a Tabela IV.5, aproximadamente 26% dos dados estão fora da faixa de especificação. Mesmo a densidade sendo um parâmetro com pouco grau de liberdade, devido à impossibilidade de utilizar o comonômero, observa-se que a maior quantidade de desvios (18.9%) é no controle do MI. Para o MI, 12.59% dos dados apresentaram desvios negativos, enquanto que 6.29% foram positivos. Para a densidade são observados 7.06% de desvios negativos. Não são observados desvios de densidade positivos, devido à limitação da tecnologia em fazer densidades superiores a 0.962.

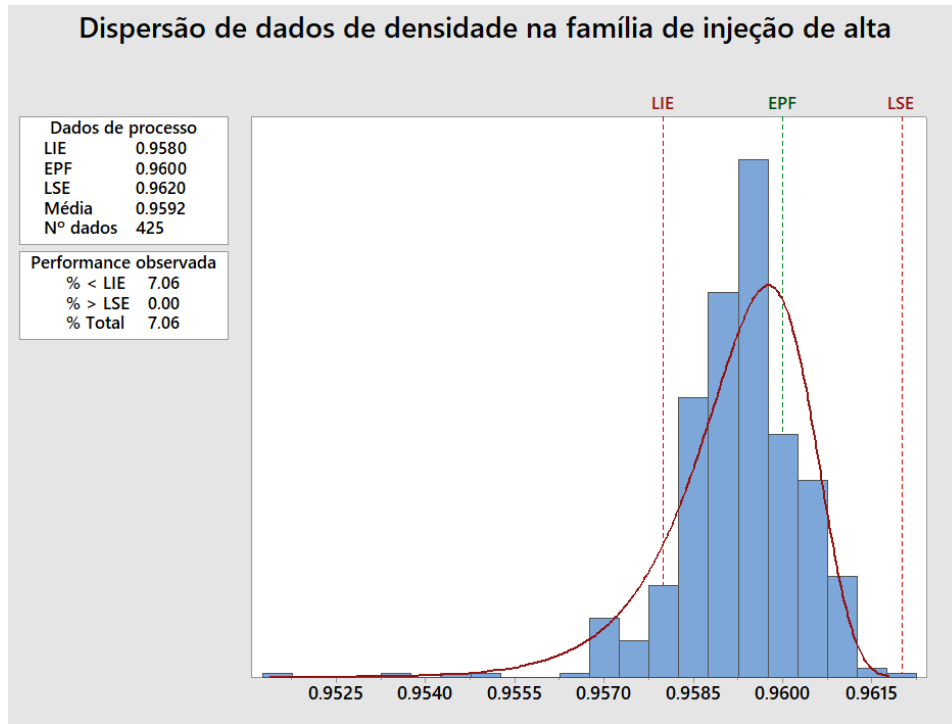


Figura IV-8. Dispersão de Dados de Densidade na Família de Injeção de Alta Densidade.

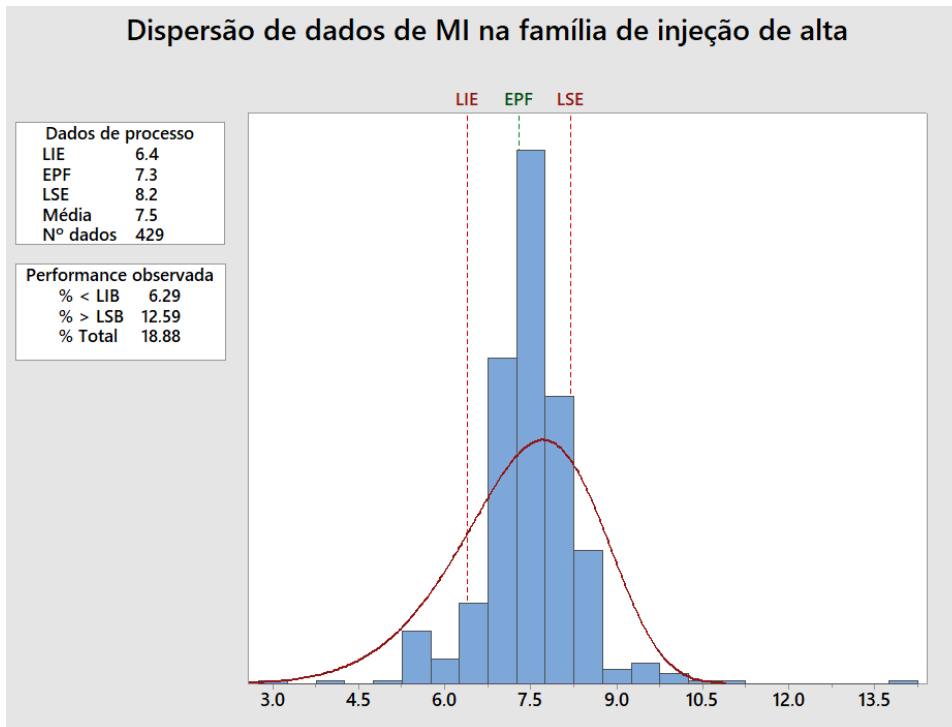


Figura IV-9. Dispersão de Dados de MI na Família de Injeção de Alta Densidade.

Tabela IV.5. Resultados Operacionais Médios de Especificação de Produto na Família Injeção de Alta Densidade

	Densidade	MI
% Abaixo do LIE	7.06	6.29
% Acima do LIS	0.00	12.59
% Fora dos LE	7.06	18.88
% Total	25.94	

IV.5. Outras Oportunidades de Benefícios com a Implantação do CAP

IV.5.1. Retrabalho

Quando um lote apresenta resultado fora da faixa de especificação final (EPF), o material deve ser retrabalhado. O retrabalho pode ocorrer de duas maneiras. Na primeira delas o material é misturado a frio com outro lote que apresenta resultado capaz de corrigir o parâmetro desviado. Portanto, nessa condição dois lotes são misturados num silo especial denominado *blender* (misturador). A planta aqui analisada apresenta, em média, nove lotes misturados por mês (o que representa aproximadamente 5% da produção mensal). Cada retrabalho a frio necessita de três horas de mistura nos *blenders*, objetivando garantir a uniformidade das propriedades em todo o lote (tomando diferentes amostras do lote, é aceitável um desvio padrão máximo de 5% no valor de suas propriedades). Numa condição de alta carga da unidade, uma mistura a frio pode representar redução de carga da unidade, pois para realizar a manobra operacional é necessário espaço na área de silos e tempo. Há relatos de redução de carga por indisponibilidade de silos.

A segunda forma de retrabalho é conhecida como reprocesso. O polietileno que apresenta propriedades fora da especificação pode ser retrabalhado a quente numa extrusora auxiliar. Esse material é injetado na extrusora principal juntamente com aditivos na forma de *master batch*. A capacidade de reprocesso é relativamente pequena e exige que o material fique bloqueado (ou seja, não pode ser vendido, representando capital imobilizado) até a realização do retrabalho. Para essa modalidade de retrabalho há custos associados ao reprocesso e ao capital imobilizado.

A definição do tipo de retrabalho a ser realizado em um lote é função da capacidade da extrusora auxiliar e do desvio em relação aos limites de especificação. No

retrabalho a quente é possível processar lotes com maior variação nas propriedades, fora das especificações vigentes, pois a quantidade processada é percentualmente baixa (~1.5%; ou seja, para cada 60 kg de material especificado, é acrescentado na extrusora 1 kg de material fora de especificação) e, dessa forma, não interfere na qualidade do polímero em produção. Em função disso, em geral, os lotes retrabalhados a quente são decorrentes de transição entre famílias, ou seja, lotes que ficaram com resultados acima do limite de mistura. Contudo, é recorrente o retrabalho a quente de lotes com resultados dentro dos limites de mistura. Essa condição se faz necessária quando eles são ensacados a fim de evitar restrição de carga pela indisponibilidade de silos de mistura. Definir que um lote será retrabalhado a quente significa mantê-lo bloqueado por determinado tempo, representando indisponibilidade de capital imobilizado. Essa definição é resultado de uma análise entre quantidade de material bloqueado, produto fora de especificação e suas respectivas metas industriais. O retrabalho a frio, por outro lado, ocorre com lotes que tiveram resultados entre o limite de especificação e o limite de mistura. Cada caso tem sua particularidade, mas ambos geram prejuízo para o negócio, embora a mistura a frio seja, em princípio, preferível, desde que os desvios de especificação sejam corrigíveis por este procedimento e que os impactos negativos na produção de material novo sejam nulos ou menores do que os impactos negativos de um eventual reprocessamento a quente. Contudo, é sabido que o mercado está cada dia mais exigente quanto à dispersão, pois há um movimento natural de redução no consumo material.

Utilizando dados reais correspondentes ao número de misturas realizadas em cada mês nos anos de 2019 e 2020, definiu-se como o valor objetivo desse projeto o melhor mês frente à média dos dados. Dessa forma, espera-se uma redução de 50% em relação ao número de misturas (a situação nos anos seguintes, 2021 e 2022, é semelhante a esses anos). Para o caso do reprocesso a quente, a redução será proporcional à redução na geração de produto fora de especificação de mercado.

IV.5.2. Transição de Resinas

As transições de resinas ocorrem todas as vezes que as faixa de especificações não são sobrepostas. Normalmente esse tipo de transição ocorre entre resinas de famílias diferentes, e em geral ocorrem seis vezes ao mês na unidade aqui analisada. Portanto, essa unidade industrial realiza, em média, seis transições mensais entre famílias, que sempre resultam em produto fora de especificação. A Figura IV.10 ilustra o planejamento cronológico mensal ótimo de transições entre famílias praticado atualmente na planta

industrial aqui analisada. Essa cronologia, além de minimizar a geração de produto fora de especificação, garante condições de processo favoráveis, a fim de evitar alguns problemas operacionais, tais como: dificuldade de especificar densidade em homopolímero; formação de aglomerados na etapa de remoção de voláteis; acúmulo de comonômero na destilação; otimização dos custos variáveis; entre outros. A estratégia se resume em elevar/ diminuir o MI e a concentração do comonômero (densidade) gradualmente.



Figura IV-10. Planejamento de Transições usualmente Praticado na Planta.

Cada transição representa, em média, a geração de 35 toneladas de produto fora de especificação, representando 280 toneladas mensais (a produção mensal média é de aproximadamente 18 mil toneladas, portanto são gerados 1.6% de produto fora de especificação, em média). No início da transição a carga da unidade é reduzida, visando minimizar a produção de produto fora de especificação. O operador executa uma série de passos baseados no seu conhecimento do processo (não existe um procedimento sistemático, o que representa uma oportunidade de melhoria) e aguarda o resultado do LCQ (Laboratório de Controle de Qualidade). Após a confirmação da especificação a carga da unidade é elevada. A redução de carga necessária para realizar as transições equivale a uma perda de 250 toneladas mensais (ou seja, uma redução de cerca de 1.4% na produção mensal). A unidade necessita, habitualmente, de duas horas para transitar e recompor a carga máxima de cada resina, podendo esse prazo se estender por mais tempo.

Para as transições será proposta uma sequência ótima de passos, mapeados previamente por especialistas da tecnologia. Dessa forma, definida a nova resina a ser produzida, a lógica deve avaliar a origem e ajustar as variáveis manipuladas objetivando a resina destino. Uma vez que os *setpoints* sejam alcançados, o CAP deverá assumir o controle. Após 30 minutos da atuação do CAP, uma amostra deve ser enviada para análise no LCQ. Com esse procedimento se espera uma redução expressiva na geração do produto fora de especificação, pois todas as transições serão ótimas. Portanto, o sistema de

controle final será uma abordagem integrada do CAP com lógicas e sequenciamentos programados, condição que se faz necessária pois algumas manobras operacionais manuais precisam ser realizadas antes que o CAP possa atuar (p.e.: partida do compressor de hidrogênio; alinhamento de água gelada para a extrusão; alterações em alinhamentos; entre outras).

Para definição dos ganhos esperados, utilizou-se as cinco melhores transições realizadas nos anos de 2019 e 2020 (as melhores transições em 2021 e 2022 são semelhantes) como representativas daquilo que poderá ser alcançado depois de implementadas as estratégias de controle e automação projetadas. O critério para classificar uma transição como ótima foi a geração de produto fora de especificação e redução de carga, utilizando o método do melhor operador descrito por Embiruçu (2002). Utilizando a geração média de produto fora de especificação das cinco transições ótimas, e comparando com as gerações médias da produção total dos anos de referência (2018 e 2019), os ganhos esperados foram calculados. Dessa forma, estima-se uma redução média na geração de produto fora de especificação em transições de 35 para 25 toneladas por transição, representado uma redução de aproximadamente 29%. A redução de perdas de produção decorrentes das reduções de carga para transição foi estimada em aproximadamente 25%. Ou seja, se antes da implantação do CAP observa-se uma redução de carga de 100 unidades de carga (uc) para, por exemplo, 50 uc, com uma perda de 50 uc, espera-se uma redução de 15% nessas perdas, ou seja, 12.5 uc, numa redução final de 100 uc para 62.5 uc. Os valores absolutos utilizados para calcular os ganhos não podem ser explicitados devido ao sigilo da informação.

IV.5.3. Redução do Consumo de Catalisador

Os catalisadores são insumos importantes para qualquer processo de produção de polietileno. Os catalisadores utilizados na produção de polietileno estão divididos em seis gerações (Lima, 2002). Cada geração representa uma evolução tecnológica, possibilitando maior produtividade catalítica e melhoria de propriedades importantes para o polímero.

Os catalisadores têm impacto significativo nos custos variáveis de uma planta industrial, aqui entendidos como, além dos catalisadores propriamente ditos, todos os insumos utilizados para ativar (co-catalisadores) e desativar (desativadores) os catalisadores, bem como adsorver (adsorvedores) os resíduos catalíticos. Para a planta

aqui investigada, da tecnologia “Sclairtech”, a proposta desse trabalho é reduzir em 10% o consumo de catalisadores, através do controle da temperatura do meio do reator manipulando o catalisador, o que proporciona a melhoraria de consumo de catalisador reivindicada. A redução proposta foi baseada no método do melhor operador (Embiruçu, 2002), tendo como referência algumas mudanças de turno onde os ajustes necessários foram feitos a fim de otimizar o consumo de catalisadores da planta industrial.

IV.6. Ganhos e Benefícios Econômicos e Financeiros e Custos Associados ao Projeto

A implementação de um controle avançado na planta de produção de polietileno linear representa a possibilidade de ganhos importantes para a unidade. Os ganhos previstos e baseados em dados correspondentes ao ano de 2019 e 2020 (dados dos anos 2021 e 2022 têm comportamento semelhante) são: redução da geração de produto fora de especificação devido a variações de MI e densidade na operação normal, conseqüentemente também com redução do número de misturas e da variabilidade do processo; redução da geração de produto fora de especificação nas transições de grade, com conseqüente redução do número de misturas, e redução nas perdas de produção associadas a transições; redução no consumo de catalisadores. Em breve resumo, os ganhos esperados são (outros benefícios, de difícil dimensionamento e aqui não analisados, poderiam ainda ser vislumbrados, como a redução do número de paradas de planta devido a eventos espúrios):

- Redução de 50% na variabilidade do processo, conforme descrito por Xu *et al.* (2007) (ver também seção IV.4);
- Redução de 50% na geração de produto fora de especificação por variação de MI e densidade na operação normal e, como conseqüência disso e da redução de produto fora de especificação por transição, redução de 50% no número de misturas (ver seção IV.5.1);
- Redução de 29% na geração de produto fora de especificação por transição (ver seção IV.5.2);
- Redução de 25% nas perdas de produção associadas a transições e a silos cheios (ver seção IV.5.2);
- Redução de 10% no consumo de catalisadores (ver seção IV.5.3).

Como a redução do número de misturas está muito relacionada com a redução de produto fora de especificação devido a variações de MI e densidade, foi atribuído para ela o mesmo percentual estimado para a redução do número de misturas: 50%. De toda forma, essa inferência influencia pouco no montante total de produto fora de especificação, visto que a quantidade gerada anualmente é muito baixa (~10% de todo o *off-spec* gerado).

Baseado nas estimativas de ganhos citadas, o resultado financeiro da implantação desse projeto de controle avançado de qualidade numa planta “Sclairtech” é de aproximadamente R\$ 4.0 milhões por ano, sendo R\$ 2.50 milhões correspondente à redução do consumo do catalisador e R\$ 1.5 milhões aos demais ganhos. Os custos dos insumos, a margem de lucro e os valores absolutos das perdas evitadas não podem ser explicitados devido a sigilo industrial.

Os custos associados à implementação desse projeto são compostos pelo mestrado profissional em questão (R\$ 28.3 mil), 352 horas de trabalho (dois meses administrativos) de dois engenheiros (processo e automação) e contratação de uma empresa especializada em controle avançado para executar as lógicas e suporte técnico para a implantação do sistema na planta. Para o custo correspondente a mão de obra foi considerada a atuação de dois engenheiros sêniores com salário de R\$ 9407 (Vagas, 2020), sendo os encargos trabalhistas correspondes a 72.16% do salário base (TCU, 2020). Utilizando como base contratações anteriores equivalentes, o custo de contratação da empresa de suporte foi estimado em R\$ 1.5 milhão. Dessa forma, o investimento total para implementação desse projeto é aproximadamente R\$ 1.5 milhão (mais precisamente R\$ 1.571 milhão) e a avaliação financeira tem os seguintes resultados (Remer *et al.*, 1995):

- Valor Presente Líquido (VPL) de R\$ 11,234,946.59;
- Taxa Interna de Retorno (TIR) igual a 161%; e
- Retorno sobre o investimento (ROI, *Return On Investment*) igual a 1.60.

A Taxa de Mínima de Atratividade (TMA) e os demais parâmetros utilizados no cálculo de VPL são referências de projetos da empresa financiadora desse trabalho, também protegidos por sigilo industrial. O estudo de viabilidade foi feito para um horizonte de dez anos e com valor residual de 30% (do investimento de R\$ 1.571 milhão), conforme mostrado na Figura IV.11, onde observa-se ainda o lucro líquido anual de R\$

2.528 milhões (ao qual é somado o valor residual no último ano) e o investimento inicial de R\$ 1.571 milhão.

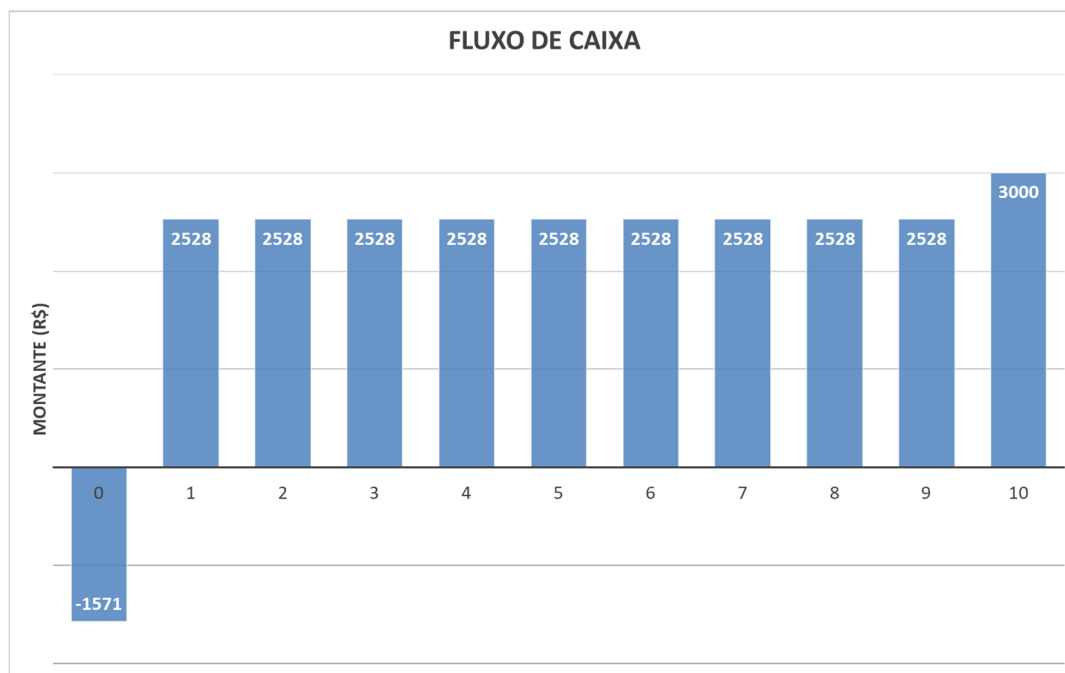


Figura IV-11. Fluxo de Caixa.

Além dos ganhos financeiros estimados, espera-se uma redução significativa na dispersão (variabilidade) dos resultados de MI e densidade, o que é importante para o *market share* (divisão de mercado) da empresa em relação a esta planta industrial. Embora não haja espaço para aumento de mercado, visto que a planta atualmente está “cheia”, isso é importante para a garantia de mercado, pois há uma demanda crescente do mercado para redução das faixas de MI e densidade e estima-se uma redução de 50% na variabilidade das variáveis de qualidade, conforme Xu *et al.* (2007), com a implantação do projeto, o que é impossível na condição atual. A fim de quantificar a redução real deve-se realizar um estudo de desempenho de capacidade (*capability*) após três meses de operação, conforme Montgomery (2004). Todos os ganhos apresentados devem ser confirmados após a implementação do referido projeto.

IV.7. Conclusões

O estudo de viabilidade financeira da implementação de um controle avançado em uma planta de polietileno linear da tecnologia “Sclairtech” demonstrou que o projeto é fortemente viável (VPL = R\$ 11,234,946.59; TIR = 161%; e ROI = 1.60). Os ganhos avaliados são correspondentes a reduções no consumo de catalisador, na geração de produto fora de especificação por transição, na geração de produto fora de especificação por variação de MI e densidade na operação normal, no número de misturas, nas perdas de produção associadas a transição e também decorrentes de silos cheios e na variabilidade do processo. Com o aumento da produtividade das máquinas da terceira geração da cadeia petroquímica, é crucial a diminuição da dispersão das variáveis de qualidade e estreitamento das especificações finais dos produtos. Uma planta industrial que oferece ao mercado uma faixa de especificação com grande dispersão está fadada a ficar obsoleta e, portanto, não competitiva. Dessa forma, a implementação de controle avançado na tecnologia “Sclairtech” resultará também em garantia do *market share* para a empresa detentora da planta industrial e maior competitividade frente a outras tecnologias.

Referências Bibliográficas

- Braskem; <http://www.braskem.com.br/busca-de-produtos>; Acesso em 13 fev. 2020.
- Embiruçu, M., “Nota de aula: Estimativa de Benefícios em Projetos de Controle Automático de Processos”, PEI, UFBA, Salvador/BA, Brasil, 2002.
- Huizena, D.; Chornoby, K.; Engelmann, Paul V.; “Optimization of performance characteristics of LDPE/LLDPE blends in blown film extrusion”, Western Michigan University, EUA, 1990.
- Lima, Aline F., “Produção de copolímeros contendo olefinas e diolefinas com catalisadores ziegler-natta”, Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro/RJ, Brasil, 2010, 11-19.
- Montgomery, D. C. Introduction to statistical quality control. 6ª Ed. New York: John Wiley & Sons, 2009.
- Remer, Donald S., Nieto, Armando P.; “A compendium and comparison of 25 project evaluation techniques. Part 1: Net present value and rate of return methods”; Int. J. Production Economics 42, 79-96, 1995.
- Santos, Rita de Cássia dos., “Caracterização vibracional e térmica de blendas de LDPE e m-LLDPE” [doi:10.11606/D.46.2005.tde-06032007-220909]. São Paulo: Instituto de Química, Universidade de São Paulo, 2005. Dissertação de Mestrado em Físico-Química.
- Vagas; <https://www.vagas.com.br/cargo/engenheiro-de-processos>; Acesso em 13 out. 2020.

Xu, F.; Huang, B.; Akande, S.; “Performance Assessment of Model Predictive Control for Variability and Constraint Tuning”, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 46(4), 1208–1219, 2007.

TCU;<http://portal.tcu.gov.br/lumis/portal/file/fileDownload.jsp?fileId=8A8182A155F0B71C0156049CA21F7ADF>; Acesso em 10 out. 2020.

Capítulo V – Analisadores Virtuais para MI e Densidade Baseados em RNA

Resumo

Nesse capítulo são apresentados as premissas e o desenvolvimento de dois analisadores virtuais de qualidade [densidade e *Melt Index* (MI, índice de fluidez)] do tipo Rede Neural Artificial (RNA) para uma planta industrial de produção de Polietileno Linear (PEL). Os fundamentos teóricos são apresentados objetivamente, a fim de embasar uma nova abordagem que define a arquitetura ótima de uma RNA para um certo conjunto de dados. Utilizando a nova abordagem, os modelos foram desenvolvidos com dados reais correspondentes a dois anos de operação industrial. As variáveis de entrada foram definidas através do conhecimento prévio da tecnologia e a partir de um estudo de sensibilidade utilizando análise de regressão. Por fim os modelos foram validados com um conjunto de dados distinto daquele utilizado no desenvolvimento, mas apenas como uma “mimetização” de sua aplicação real, pois a metodologia aqui desenvolvida e empregada não envolve tal tipo de procedimento.

V.1. Introdução

O processo de polimerização “Sclairtech” é notoriamente multivariável e não linear, inclusive devido às amplas faixas de densidade e *Melt Index* (MI, índice de fluidez) praticadas que, associadas ao baixo tempo de residência no reator, garantem à planta de Polietileno Linear (PEL) uma versatilidade única. Essas características ensejam a implementação de um controle avançado de processos, o que exige um modelo robusto e capaz de prever a dinâmica do processo adequadamente. A modelagem cinética e fenomenológica de um processo de polimerização exige grande esforço científico e tem sido comumente objeto de trabalhos acadêmicos sofisticados (Embiruçu *et al.*, 2000). Visando minimizar tamanho esforço, a utilização de modelos empíricos, em particular os chamados analisadores virtuais, se apresenta como uma abordagem bastante empregada na prática industrial.

Os analisadores virtuais são modelos matemáticos capazes de inferir propriedades de interesse, realizando uma combinação entre as informações medidas frequentemente (*on-line*) e aquelas que são medidas infrequentemente (*off-line*) (Ferreira *et al.*, 2002). Tais analisadores se apresentam como uma ferramenta poderosa para auxiliar na implementação de controles avançados, principalmente na estimação de propriedades poliméricas, e usualmente são utilizadas Redes Neurais Artificiais (RNA) para desenvolvê-los.

Uma RNA é composta por várias unidades de processamento denominadas neurônios (Mcculloch e Pitts, 1943). Esses neurônios são conectados por canais de comunicação que estão associados a determinados pesos. Os pesos são parâmetros definidos através do treinamento da rede (procedimento de estimação de parâmetros para ajustes dos pesos e de outros parâmetros livres), caracterizando sua propriedade mais importante: a capacidade de aprendizado, ou seja, de se ajustar a dados experimentais de comportamento complexo, tendo em vista que as RNA são aproximadores universais de funções matemáticas. O treinamento é realizado através de um processo iterativo de ajustes dos pesos, de modo que a rede neural encontre uma solução generalizada ótima a partir de um conjunto de dados. Uma rede neural tem seu desempenho determinado pela disponibilidade de dados do processo (Haykin, 1999). Esse tipo de analisador virtual, além de ter grande utilidade no monitoramento dos processos, quando associado a um controle preditivo multivariável ajuda tais controladores a apresentarem resultados bastante satisfatórios (Wang, 2009).

Nesse capítulo são apresentados os modelos de analisadores virtuais baseados em RNA desenvolvidos nesse trabalho. Esses modelos serão utilizados posteriormente na construção de um sistema de controle preditivo para as variáveis de qualidade MI e densidade.

V.2. Redes Neurais Artificiais (RNA)

As Rede Neurais Artificiais (RNA) são uma técnica (ou área) da Inteligência Artificial (IA) que apresenta estruturas com grande quantidade de unidades de processamento que, em suas origens, se inspirou no funcionamento do cérebro humano (sistema nervoso). Mcculloch e Pitts (1943) desenvolveram o modelo de uma RNA a partir de uma representação simplificada de um neurônio biológico. Essa ferramenta matemática vem sendo extensamente aplicada nos mais diversos ramos da ciência devido a sua impressionante capacidade de modelar padrões, principalmente não lineares, e detectar correlações implícitas.

Basheer e Hajmeer (2000) fizeram um breve resumo de um neurônio biológico e apresentaram uma analogia com um neurônio artificial (Figura V.1). Nesse contexto, os axios e os dentritos seriam representados pelas conexões entre os nós, enquanto os pesos das conexões representam as sinapses. O limiar de um neurônio biológico seria representado pela soma do neurônio artificial.

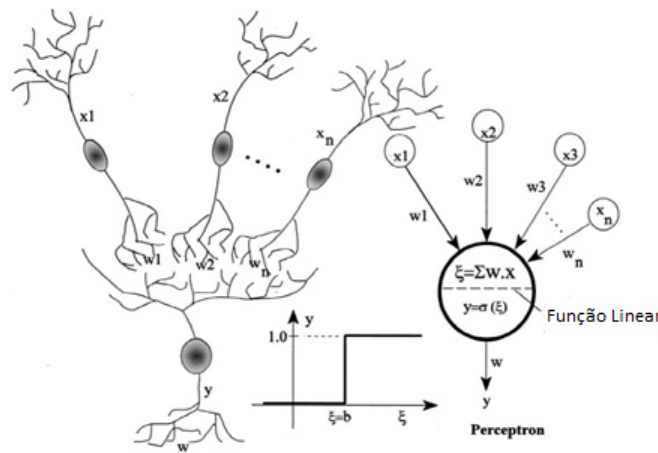


Figura V-1. Analogia entre um Neurônio Biológico e um Artificial (Basheer e Hajmeer, 2000).

Uma RNA é um sistema composto por várias unidades de processamento denominadas neurônios (Figura V.2). Cada neurônio artificial é uma unidade de processamento de informação onde há um integrador, responsável por somar os sinais de entrada, e uma função de ativação.

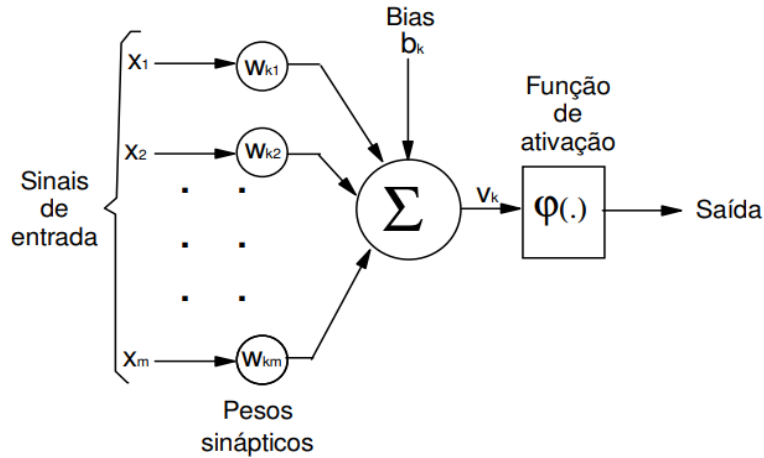


Figura V-2. Estrutura de um Neurônio Artificial [Modificado de Haykin (1999)].

As RNA são compostas por camadas de processamento denominadas camada de entrada, camadas ocultas e camada de saída, que definem a sua topologia, e cada neurônio de uma camada é ligado a seu consecutivo (de outra camada) por conexões, conhecidas como conexões sinápticas, em analogia ao neurônio biológico. Os neurônios que recebem excitações externas compõem a camada de entrada. As entradas devem ser variáveis definidas através de sua relação (direta ou inversa) com a variável de saída (Braga, 2002). As camadas intermediárias (ocultas) são compostas por neurônios onde é feita a maior parte do processamento, através das conexões ponderadas (pesos). Os pesos são definidos na etapa do treinamento (estimação de parâmetros) e são muito importantes pois representam o aprendizado da rede (ajuste do modelo aos dados empíricos). O número de camadas ocultas é determinado durante a definição da topologia da RNA.

De acordo com Haykin (1999), o uso de redes neurais oferece muitas vantagens frente a outras alternativas de modelagem matemática, sendo as principais:

- Habilidade de aproximar qualquer função contínua não linear a um grau de correção desejado, ou seja, com uma precisão arbitrária;

- Possibilidade de adaptar (reajustar) seus pesos sinápticos a modificações do meio através de um retreinamento (nova estimação de parâmetros), possibilitando bons resultados após algumas alterações nas condições operativas do meio;
- Tolerância a falhas, de modo que seu padrão de inferência pode sofrer pouco com algum “dano” (por exemplo, numa possível indicação falsa de uma variável de entrada) em um dos neurônios de uma rede. Isso ocorre devido à natureza distribuída das informações.

V.2.1. As Funções de Transferência ou de Ativação

O modelo de McCulloch e Pitts, conhecido como *perceptron*, apresentava apenas resultados binários. Um *perceptron* é um modelo matemático que recebe várias entradas, possui uma única camada oculta e uma única saída. A partir do *perceptron* muitos outros modelos foram desenvolvidos, que apresentavam valores intermediários. Para limitar os valores de saída de cada neurônio, geralmente no intervalo normalizado $[0,1]$ ou $[-1,1]$, são utilizadas diferentes funções de transferência, também conhecidas como funções de ativação. Dentre as funções de ativação disponíveis na literatura, os tipos básicos são (Haykin, 1999):

- a) Função Degrau: esse tipo de função é a mais simples utilizada. Devido a sua origem no modelo *perceptron*, é conhecida na literatura como modelo de McCulloch e Pitts. Assume valores de 0 ou 1 na camada de saída:

$$f(x) = \{1, \quad x \geq 0; 0, \quad x < 0\}$$

- b) Função Linear: função onde α é um número real que define a saída a partir da multiplicação pela a entrada:

$$f(x) = \alpha \cdot x$$

- c) Função Sigmóide: semilinear, limitada e monotônica, assume valores em um intervalo contínuo entre 0 e 1. Sua equação é dada por:

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{(-\alpha \cdot x)}}$$

A função sigmoidal é especialmente vantajosa para uso em redes neurais treinadas por algoritmos tipo retropropagação (*backpropagation*), onde o erro de estimação é “propagado” da saída da rede em direção à entrada. Esses algoritmos desmembram o erro

total por iteração da RNA, usando a regra da cadeia a fim de modular os ajustes da próxima iteração em cada camada de acordo com sua respectiva contribuição no erro total (Hecht-Nielsen, 1989). Esses algoritmos tipo *backpropagation* são bastante utilizados e devido à adequação da função sigmoideal a tais algoritmos, dentre outros fatores, ela é a mais usada na literatura em modelagem de dados de processos. A tangente hiperbólica, que tem comportamento similar à sigmoide, mas fornece valores no intervalo entre -1 e 1, também é bastante utilizada.

V.3. Etapas da Construção dos Modelos de RNA

A construção de um modelo de RNA é feita em geral em três etapas: arquitetura da rede; treinamento; e validação. É bastante recomendável que os dados utilizados na construção do modelo sejam normalizados conforme a distribuição (limites inferior e superior) de cada conjunto de dados. A normalização garante a minimização de problemas oriundos do uso de unidades de medida e diferentes grandezas, o que pode levar a problemas de mal condicionamento numérico, facilitando a convergência dos pesos da RNA, pois todas as variáveis ficam em uma mesma faixa ou ordem de grandeza de dispersão.

V.3.1. Arquitetura da Rede

A arquitetura de uma RNA é descrita pelo arranjo de neurônios em camadas (entradas e saídas), número de camadas ocultas, padrões de conexão, método de aprendizado e funções de ativação. As variáveis de entrada são definidas a partir de variáveis do sistema que reconhecidamente têm correlação com a(s) saída(s). A correta definição dessas variáveis de entrada é crucial para o desenvolvimento de um bom modelo de um processo complexo, e será abordada com mais detalhes na seção seguinte.

Existem diversas metodologias na literatura para definição da topologia de uma rede, tais como as apresentadas por Ludermir *et al.* (2006), Nazghelichi *et al.* (2011), entre outros. Conforme descrito por Haykin (1999), as camadas ocultas têm a função de aumentar a capacidade de extrair estatísticas ou relações de ordem elevada entre as variáveis de entrada e saída, promovendo uma melhor capacidade de generalização, ou seja, de predição da RNA, principalmente de interpolação. Em geral, uma RNA com uma única camada oculta com um número suficiente (e possivelmente ótimo) de neurônios é capaz de modelar qualquer sistema (Hornik *et al.*, 1989). A Figura V.3 mostra o exemplo

de uma arquitetura de rede com 3 neurônios na camada de entrada, uma camada oculta com 4 neurônio, e 3 neurônios na camada de saída.

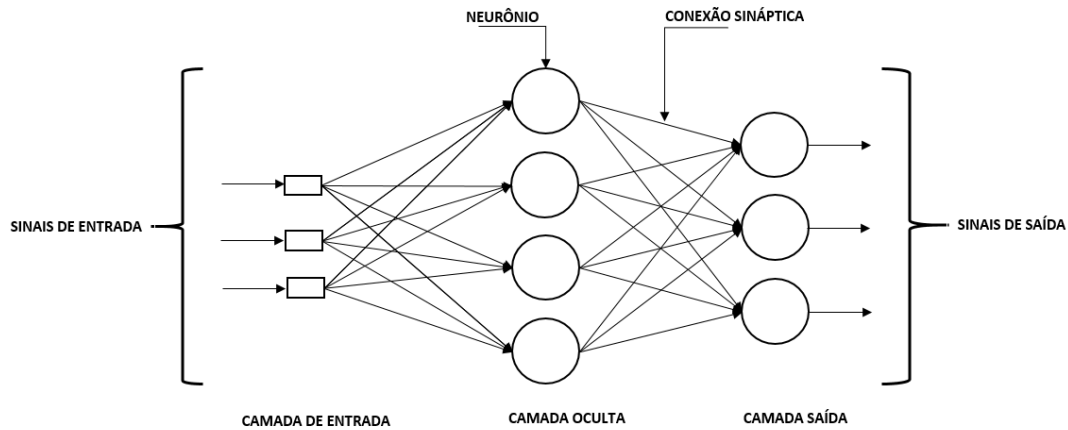


Figura V-3. Topologia de uma Rede Neural Artificial: 3, 4, 3 (Entrada, Camada Oculta, Saída).

V.3.1.1. Análise de Sensibilidade e Definição das Variáveis de Entrada

A análise de sensibilidade é uma forma de determinar como variações nas saídas de um sistema podem ser atribuídas às variações de fatores de entrada, ou seja, como as variáveis de entrada de um sistema afetam suas variáveis de saída. Um estudo de sensibilidade não é um método para validação do modelo, mas serve para direcionar estudos (Hamby, 1995), entre eles a definição de variáveis de entrada para uma modelo empírico. Em geral, uma análise de sensibilidade pode ser local ou global. A análise local consiste em variar apenas uma variável de entrada em níveis distintos e avaliar o seu efeito nas variáveis de saída. Na análise global todos os parâmetros são alterados simultaneamente a fim de calcular diferentes tipos de índices de sensibilidade, desde medidas de correlação entre entradas e saídas até propriedades estatísticas da distribuição de saídas (Pianosi *et al.*, 2016).

Os métodos de análise de sensibilidade estão divididos em métodos matemáticos, métodos estatísticos (probabilísticos) e métodos gráficos. Métodos matemáticos são aqueles que avaliam a sensibilidade da saída em função de variações na entrada. Métodos estatísticos utilizam distribuições de probabilidade e a avaliação do efeito da variação nas entradas na distribuição de saída. Por fim, os métodos gráficos fornecem uma representação da sensibilidade na forma gráfica, fornecendo uma indicação visual da

influência da entrada na saída. Os métodos gráficos em geral são utilizados como uma análise complementar aos demais métodos (Frey e Patil, 2002).

Frey e Patil (2002) e Frey *et al.* (2003) aplicaram um amplo número de métodos de análise de sensibilidade na área de segurança alimentar. Frey e Patil (2002) descrevem e exploram onze dos mais utilizados métodos de análise de sensibilidade, sendo cinco métodos matemáticos [i) Análise de sensibilidade nominal; ii) Regressão logística; iii) Análise do ponto de equilíbrio; iv) Técnica de diferenciação automática; v) Análise de sensibilidade diferencial], cinco métodos estatísticos [i) Análise de regressão; ii) Análise de variância (ANOVA); iii) Método de superfície de resposta; iv) Teste de sensibilidade à amplitude de Fourier; v) Índice de informação mútua] e um método gráfico (gráfico de dispersão). Cada método foi analisado de acordo com suas vantagens e desvantagens, e por fim eles foram comparados. Demonstrou-se que nenhum método pode ser considerado superior a todos os outros, pois cada um possui particularidades e limitações específicas. Por isso cabe ao analista definir quais os métodos que melhor se aplicam a sua necessidade. Muitas vezes é necessário utilizar mais de um método para se chegar às devidas conclusões.

Frey *et al.* (2003), por outro lado, discutiram dois métodos matemáticos (i. Análise de sensibilidade nominal; e ii. Análise de sensibilidade diferencial), sete métodos estatísticos (i. Coeficientes de correlação de amostra e classificação; ii. Análise de regressão; iii. Análise de correlação; iv. Análise de variância; v. Classificação e árvore de regressão; v. Índice de Sobol; e vii. Teste de sensibilidade à amplitude de Fourier) e duas análises gráficas (i. Gráfico de dispersão; e ii. Análise condicional de sensibilidade). Os métodos foram aplicados em uma avaliação de modelos de segurança alimentar desenvolvidos pela agência americana FDA (*Food and Drug Administration*) e pelo USDA (*United States Department of Agriculture*). Por fim, os autores apresentam uma sumarização dos métodos baseada em doze características importantes para a escolha de um método de análise de sensibilidade. Tal análise se apresenta como uma relevante referência para auxiliar na escolha de um método de análise de sensibilidade.

Utilizando a sumarização apresentada por Frey *et al.* (2003), e baseado na recomendação de Frey e Patil (2002) quanto aos quatro critérios para a escolha do método mais adequado (aplicabilidade do método; esforço computacional; facilidade e clareza na representação da sensibilidade; e o propósito da análise), o modelo escolhido para a realização da análise de sensibilidade foi a Análise de regressão. Tal método é de fácil implementação, apresenta facilidade na interpretação, baixo esforço computacional e

atende ao propósito desse trabalho, pois consegue demonstrar com facilidade a relevância das variáveis de entrada frente às variáveis de saída modeladas.

V.3.1.1.1. Análise de Regressão

Conforme Hair *et al.* (2006), a análise de regressão é uma das técnicas estatísticas mais amplamente utilizadas para descrever a relação entre uma variável dependente (saída) e várias variáveis independentes (entradas). Quando uma variável dependente possui somente uma única variável independente ela é conhecida como regressão simples. Por outro lado, quando há mais de uma variável independente, chama-se regressão múltipla.

Esse método é amplamente utilizado, com o auxílio de gráficos de dispersão, de modo a auxiliar nas escolhas das variáveis estatisticamente relevantes de um modelo, excluindo, dessa forma, as insignificantes. Sua representação mais elementar é apresentada na forma linear, mas cada termo pode ter diferentes funções básicas (não lineares) (Frey e Patil, 2002):

$$Y_i = \beta_0 + \beta_1 \cdot X_1 + \beta_2 \cdot X_2 + \beta_3 \cdot X_3 + \dots + \beta_n \cdot X_n \quad \text{Eq. V.3}$$

Utilizando um conjunto de dados disponível (variável dependente e variáveis independentes), os pesos da Eq. V.1 são calculados objetivando minimizar o erro entre o dado real (variável dependente) e o modelo (previsão). Para um modelo linear, esses pesos (β_n) denotam a contribuição de cada variável na saída (variável dependente), sendo o sinal a indicação do tipo de relação, se direta ou inversa. Dessa forma, tais parâmetros podem ser utilizados também com estudo de sensibilidade (Frey e Patil, 2002).

Um modo habitual de avaliar um modelo é calculando o erro entre os dados reais e os valores previstos. A soma dos erros pode fornecer uma interpretação equivocada, pois o resultado dessa soma sempre tenderá a zero, se não houver viés no modelo. Para evitar esse tipo de situação deve-se somar os quadrados dos erros, resultando em uma grandeza denominada soma dos quadrados dos erros (SS_E). Entretanto, utilizar apenas o SS_E para a avaliação representa uma dificuldade quando da ausência de uma referência, pois esse valor será tão grande quanto for o conjunto de dados. Dessa forma, a avaliação da precisão de previsão é feita através do coeficiente de determinação (R^2). Esse parâmetro é calculado como sendo a razão entre a soma de quadrados da regressão (SS_R)

e a soma total de quadrados (SS_T). A SS_R é calculada como a soma dos quadrados da diferença entre o valor estimado e a média dos dados. Por outro lado, a SS_T é calculada como sendo a soma dos quadrados entre os dados reais e a média:

$$SS_T = SS_E + SS_R = \sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_i^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 = \sum_i^n (y_i - \bar{y})^2 \quad \text{Eq. V.4}$$

$$R^2 = \frac{SS_R}{SS_T} = \frac{\sum_i^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i^n (y_i - \hat{y}_i)^2 + \sum_i^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2} = \frac{\sum_i^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2}{\sum_i^n (y_i - \bar{y})^2} \quad \text{Eq. V.5}$$

onde \bar{y} é a média de todas as observações, y_i é o valor da observação individual em i e \hat{y}_i é o valor previsto para a observação i . Dessa forma, um modelo perfeito teria a soma de quadrados da regressão igual à soma total de quadrados e, portanto, $R^2 = 1.0$ (ou, dito de outra forma, um modelo perfeito teria a soma dos quadrados dos erros, SS_E , igual a zero). Por outro lado, se a regressão apresentar resultados melhores do que a média o denominador será muito maior do que o numerador da razão e, portanto, o R^2 tenderá a zero (Hair *et al.*, 2006) (ou, dito de outra forma, um modelo ruim teria suas previsões muito mais próximas da média do que do que dos valores observados).

V.3.2. Treinamento e Validação

Na etapa de treinamento são determinados os pesos da RNA a partir de dados experimentais (no presente estudo, dados reais de operação). A aprendizagem (estimação de parâmetros) nas redes neurais acontece através de ajustes dos pesos [pesos e *bias* (deslocamentos, termos independentes)] das conexões, a partir das suas estimativas iniciais, utilizando dados experimentais que são fornecidos (exposição a condições do ambiente) à rede, com o objetivo de minimizar os erros de predição da rede. Uma rede está bem treinada quando atinge uma tolerância de erro satisfatória previamente definida.

Os dados utilizados no treinamento devem ser bem distribuídos no conjunto de dados modelados, a fim de garantir que a RNA seja capaz de generalizar o comportamento do processo. Entretanto, ao mesmo tempo, deve-se evitar o sobre-treinamento e sobre-ajuste. O sobre-treinamento é caracterizado pelo excesso de tempo durante o treinamento. Por outro lado, o sobre-ajuste ocorre quando o tamanho ótimo da rede é excedido. Em ambos os casos a RNA fica com sua capacidade de predição limitada (Tetko *et al.*, 1995). Para evitar o sobre-ajuste deve-se utilizar uma metodologia robusta para definir a

arquitetura da rede, proporcional à complexidade do sistema. Tetko *et al.* (1995) demonstram que para evitar o sobre-treinamento é necessário realizar um estudo de mínimos globais. Em geral, a fim de evitar essa problemática de sobre-treinamento e sobre-ajuste, se utiliza a técnica de parada antecipada (explicada mais adiante junto com a descrição da Figura V.5). O treinamento de uma RNA é basicamente dividido em duas categorias: supervisionado e não supervisionado.

No treinamento supervisionado um conjunto de dados conhecido é fornecido. A partir desses dados são gerados erros, resultados da diferença entre os dados reais (conhecidos) e os dados calculados a partir de pesos estimados pela RNA. O cálculo do erro possibilita que novos pesos sejam estimados até que a tolerância de erro estabelecida seja alcançada. A rede é aperfeiçoada a cada interação, pois o erro é minimizado até o valor objetivo, comportamento que é ilustrado na Figura V.4. Dentre os métodos de ajuste de pesos no treinamento supervisionado o mais utilizado é o *backpropagation*, já descrito anteriormente.

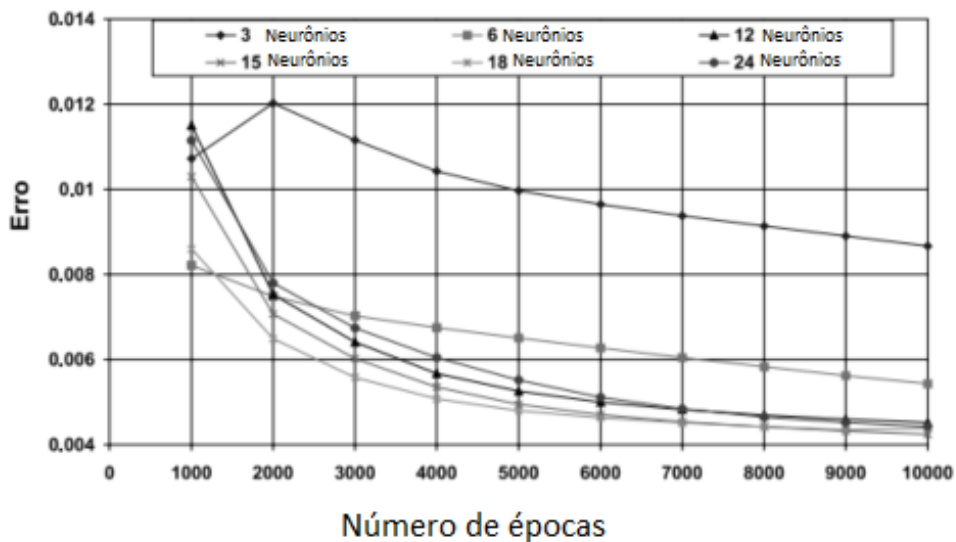


Figura V-4. Curvas de Aprendizado para Redes de Múltiplas Camadas com Vários Neurônios na Camada Oculta (Rafiq *et al.*, 2001).

A fim de determinar a conclusão do treinamento utiliza-se a técnica de parada antecipada (Figura V.5). Nessa técnica é utilizado o método da validação cruzada, e ela consiste em acompanhar a taxa do erro nas etapas de treinamento e validação. O treinamento é considerado concluído no ponto de erro mínimo da validação (derivada

nula) (Haykin, 1999). A validação, também conhecida como teste, é a etapa final, onde um conjunto de dados, normalmente não utilizado no treinamento, é utilizado para determinar o desempenho da rede. O desempenho da rede, medido nesta fase, visa avaliar o desempenho do modelo em condições reais.

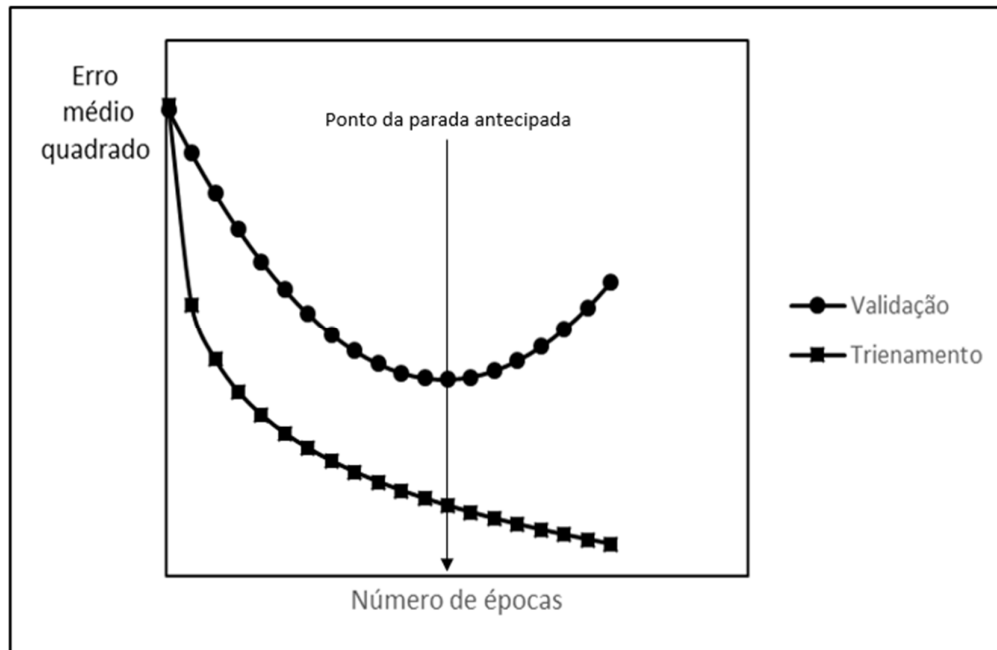


Figura V-5. Ilustração da Técnica de Parada Antecipada.

No treinamento não supervisionado nenhuma saída antecipada é fornecida, dessa forma não há *feedback* (realimentação) com base nos resultados da previsão. Essa técnica busca obter uma representação dos padrões de entrada segundo algum critério pré-estabelecido. Essa abordagem possibilita trabalhar com problemas com pouco ou nenhuma ideia dos resultados esperados.

V.3.3. Uma Abordagem Integrada para Definição da Arquitetura e Validação do Modelo

Nessa seção é apresentada uma metodologia que visa estimar a melhor configuração da rede neural artificial, que é também acoplada ao procedimento de validação do modelo. Nesta metodologia o número de camadas ocultas é definido em 1 (um) e o número de neurônios contidos nela é definido de uma forma sistemática. A adoção de uma topologia com uma única camada intermediária justifica-se pelo fato de,

conforme mencionado anteriormente, já ter sido provado que uma rede *feedforward* (“sem realimentação”) com uma topologia deste tipo é capaz de aproximar qualquer função mensurável a qualquer grau desejado de precisão (Hornik *et al.*, 1989), demonstrando, portanto, que redes neurais artificiais são aproximadores universais.

Admitindo um modelo MISO (*Multi-Input Single-Output*, múltiplas entradas e saída única), a configuração global da rede é mostrada na Figura V.6, onde y é a saída e μ são as entradas. Portanto, baseado nisso e nas premissas anteriormente mencionadas, é adotada, na metodologia aqui descrita, como configuração ótima uma rede com $(N, m, 1)$ (entrada, camada oculta, saída) neurônios, onde N é o número de entradas e m será definido de forma sistemática, conforme descrito a seguir.

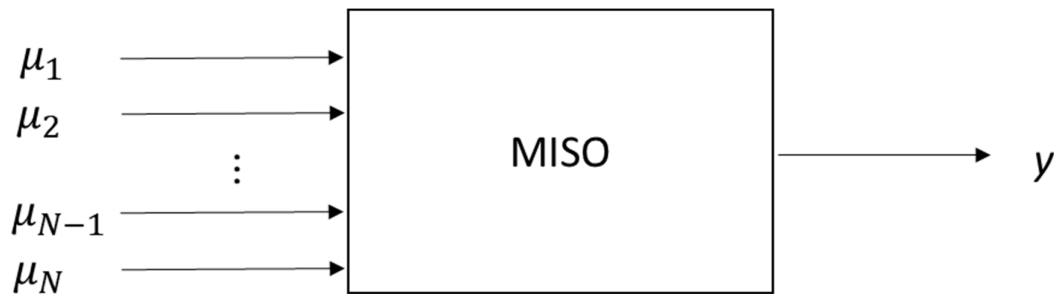


Figura V-6. Modelo Tipo MISO.

Inicialmente as variáveis de entrada e saída devem ser normalizadas, a fim de tornar o problema numericamente mais bem posto e estável, evitando problemas de incoerência, inconsistência ou rigidez numéricas. As saídas são normalizadas entre 0.1 e 0.9, no caso de só assumirem valores positivos, ou entre -0.9 e 0.9, no caso de poderem assumir valores positivos ou negativos. Esses limites de normalização foram ajustados como uma precaução adicional pois as funções utilizadas são assintóticas aos valores limites -1, 0 e 1 e, embora uma função linear na saída possa levar os resultados finais do modelo a valores infinitamente grandes ou pequenos, a adoção desses valores aquém de tais limites ajuda o procedimento de treinamento a obter melhores modelos. Em relação a essa questão as entradas poderiam ser normalizadas entre os limites usuais de -1, 0 e 1, mas são normalizadas da mesma forma que as saídas não só por uma questão de padronização, mas também pelo fato de que, tanto em relação a saídas quanto entradas, a adoção de valores de faixas de normalização menores do que os referidos limites ajuda a

obter modelos com melhores características de capacidade de extrapolação em relação aos limites dos dados utilizados no treinamento.

Admite-se em seguida uma relação linear entre a saída e as entradas, nesse caso:

$$y = \sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_i + \beta \quad \text{Eq. V.6}$$

onde NE é o número de entradas e os parâmetros α_i e β são determinados minimizando o somatório do erro quadrático (ε):

$$\varepsilon_{min} = \sum_{j=1}^{ND} \left[\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,j} + \beta \right) - y_{Exp,j} \right]^2 \quad \text{Eq. V.7}$$

onde ND é o número de dados experimentais, o subscrito Exp refere-se ao valor experimental e o subscrito min indica que ε deve ser minimizado, ou seja, α_i e β são obtidos através do método dos mínimos quadrados, que tem solução analítica para esse modelo linear inicialmente postulado. Na obtenção dos parâmetros α_i e β , já deve ser utilizado um conhecimento importante sobre o comportamento do processo, se disponível, que é o sinal dos ganhos das variáveis de entrada em relação à saída, porque esses sinais devem corresponder exatamente aos sinais dos α_i a serem estimados. Se essa correspondência não for obtida na solução do problema sem restrições descrito pela Eq. V.4, o problema anterior deve reformulado e resolvido com a inclusão de restrições no sinal dos parâmetros α_i , caracterizando-se, portanto, em um problema de Programação Linear, que pode ser resolvido diretamente pelo método simplex, também de forma analítica, e, portanto, sem a necessidade de estabelecer uma estimativa inicial para esses parâmetros α_i e β .

O próximo passo é relacionar os parâmetros encontrados no modelo linear com a primeira estimativa inicial para a rede neural, o que pode ser feito utilizando a expansão em série de Taylor da rede neural. Considerando uma camada intermediária com 1 neurônio e uma função de ativação linear na camada de saída, a saída da rede neural (mostrada na Figura V.7) é dada por:

$$y_{RN} = \gamma \cdot f \left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_i + b_1 \right) + \delta = \gamma \cdot f[g(\mu_i)] + \delta \quad \text{Eq. V.8}$$

onde f é a função de ativação da camada intermediária, p_{ij} é o peso da entrada i no neurônio j , b_j é o *bias* do neurônio j e γ e δ são os parâmetros da função linear da camada de saída. A expansão em série de Taylor de uma função $f(x)$, em torno de um ponto de referência 0 e truncada no termo linear é dada por:

$$f(x) = f(x_0) + \sum_{i=1}^{NE} \left. \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|_0 \cdot (x_i - x_{i,0}) \quad \text{Eq. V.9}$$

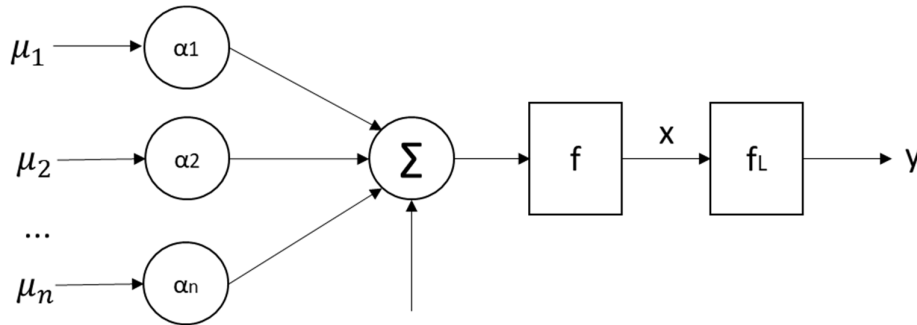


Figura V-7. Topologia de uma RNA com uma Saída e uma Camada Intermediária com um Neurônio.

Considerando $\gamma = 1$ e $\delta = 0$ na equação da rede neural (Eq. V.6) e aplicando a ela a expansão acima (Eq. V.7) obtém-se:

$$\begin{aligned} y_{RN,lin} &= y_{RN,0} + \sum_{i=1}^{NE} \left. \frac{df}{dg} \cdot \frac{\partial g}{\partial \mu_i} \right|_0 \cdot (\mu_i - \mu_{i,0}) \\ &= y_{RN,0} + \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} \left. \frac{\partial g}{\partial \mu_i} \right|_0 \cdot (\mu_i - \mu_{i,0}) \\ &= y_{RN,0} + \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot (\mu_i - \mu_{i,0}) \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{Eq.} \\ \text{V.10} \end{array}$$

Admitir $\gamma = 1$ e $\delta = 0$ não implica em perda de generalidade do procedimento proposto, pois, para uma aproximação linear da rede, eles são parâmetros redundantes e, portanto, desnecessários. Comparando a Eq. V.8 com a Eq. V.4:

$$\begin{aligned}
 y_{RN,0} + \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot (\mu_i - \mu_{i,0}) &= \sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_i + \beta \\
 &= y_{RN,0} + \sum_{i=1}^{NE} \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot p_{i,1} \cdot \mu_i - \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0}
 \end{aligned}
 \tag{Eq. V.11}$$

Portanto:

$$\alpha_i = \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot p_{i,1} \Rightarrow \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot p_{i,1} = \alpha_i
 \tag{Eq. V.12}$$

$$\beta = y_{RN,0} - \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} \Rightarrow \left. \frac{df}{dg} \right|_0 \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} = y_{RN,0} - \beta
 \tag{Eq. V.13}$$

Sabendo que:

$$\left. \frac{df}{dg} \right|_0 = h(p_{i,1}, b) = f' \left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + b_1 \right)
 \tag{Eq. V.14}$$

têm-se para os coeficientes α :

$$h(p_{i,1}, b) \cdot p_{i,1} = \alpha_i
 \tag{Eq. V.15}$$

e para o coeficiente β :

$$h(p_{i,1}, b) \cdot \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} - f \left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + b_1 \right) = -\beta
 \tag{Eq. V.16}$$

Utilizando as equações para os coeficientes α (Eq. V.13):

$$\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} - f\left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + b_1\right) = -\beta \quad \text{Eq. V.17}$$

$$f^{-1}\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta\right) = \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + b_1 \quad \text{Eq. V.18}$$

E assim chega-se à solução para a *bias* b_1 (ainda como função dos pesos $p_{i,1}$):

$$b_1 = f^{-1}\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta\right) - \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} \quad \text{Eq. V.19}$$

Utilizando as Eqs. V.12 e V.17 na Eq. V.13:

$$\begin{aligned} f'\left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + b_1\right) \cdot p_{i,1} &= \alpha_i \\ &= f'\left[\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0} + f^{-1}\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta\right) - \sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_{i,0}\right] \cdot p_{i,1} \\ &= f'\left[f^{-1}\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta\right)\right] \cdot p_{i,1} \end{aligned} \quad \text{Eq. V.20}$$

E assim chega-se à solução para os pesos $p_{i,1}$ e para o *bias* b_1 :

$$p_{i,1} = \frac{\alpha_i}{f'[f^{-1}(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta)]} \quad \text{Eq. V.21}$$

$$b_1 = f^{-1}\left(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta\right) - \frac{\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0}}{f'[f^{-1}(\sum_{i=1}^{NE} \alpha_i \cdot \mu_{i,0} + \beta)]} \quad \text{Eq. V.22}$$

O ponto 0 deve ser escolhido como um estado estacionário conhecido ou, na ausência desse, deve-se utilizar a média dos dados experimentais. Portanto, é possível dar como estimativas iniciais para uma rede de 1 neurônio os valores calculados pelas Eqs. V.19 e V.20, além de $\gamma = 1$ e $\delta = 0$. Observe, portanto, que esse procedimento proposto evita ou dispensa a necessidade de uma estimativa inicial aleatória, resolvendo uma das principais incertezas na obtenção de um modelo ótimo no processo de desenvolvimento

de uma RNA. Da mesma forma que no caso linear, caso os ganhos resultantes não estejam qualitativamente coerentes com o processo, restrições devem ser usadas na estimação dos parâmetros (ou seja, deve ser utilizado um procedimento de treinamento da rede com restrições nos ganhos da RNA).

A fim de preservar a desnecessidade de estimativas iniciais aleatórias, e, portanto, incertas ou indeterminadas, as redes subsequentes, com acréscimo incremental de neurônios, devem ter como estimativa inicial o resultado final da rede anterior e os parâmetros do novo neurônio devem ser tais que ele, na estimativa inicial, não tenha nenhum efeito. Nesse caso, por exemplo, para 2 neurônios tem-se:

$$y_{RN} = \gamma_1 \cdot f \left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,1} \cdot \mu_i + b_1 \right) + \gamma_2 \cdot f \left(\sum_{i=1}^{NE} p_{i,2} \cdot \mu_i + b_2 \right) + \delta \quad \text{Eq. V.23}$$

Nesse caso, é suficiente que γ_2 seja igual a zero. Por coerência (o que poderíamos chamar também de “escolha trivial”, em analogia às “soluções triviais” de sistemas de equações), recomenda-se também que os pesos e *bias* do novo neurônio também tenham estimativas iniciais nulas. Portanto, todo o vetor de novas estimativas iniciais será nulo, mas é importante aqui fazer uma ressalva. Dependendo do algoritmo de treinamento utilizado, essa estimativa inicial nula não garante, mesmo com os dados apenas de estimação, que o desempenho final da rede com um neurônio a mais será igual ou melhor do que a anterior. Então, caso isso não seja verificado, abandona-se a “escolha trivial” e, mantendo-se γ_2 igual a zero, adota-se estimativas iniciais aleatórias para os pesos e *bias* do novo neurônio até obter uma nova rede que tenha, com os dados de estimação, um desempenho igual ou melhor à rede anterior com um neurônio a menos (sujeito a um número máximo de tentativas, por exemplo 10, que, se ultrapassado, indicaria uma inadequação em aumentar o número de neurônios, independentemente do procedimento final de escolha do número ótimo de neurônios, descrito mais adiante). Essa ressalva/cautela é importante para garantir que o procedimento final de escolha do número ótimo de neurônios seja determinado apenas pelo fenômeno de sobre-parametrização, e não seja contaminado por um eventual treinamento deficiente da rede. Nos testes realizados no problema aqui tratado, no entanto, a adoção da “escolha trivial” foi suficiente.

Assim, para cada topologia de rede (com número crescente de neurônios), será encontrado um erro associado a cada rede com um determinado número de neurônios.

Usando, juntamente com esse procedimento descrito, o procedimento de validação cruzada dinâmica, a configuração final (ótima) da RNA será aquela onde a interação posterior apresente um maior erro. Ou seja, espera-se que o erro decresça com o aumento do número de neurônios até um ponto de sobre-parametrização, quando o erro deve aumentar (num padrão semelhante à curva de “Validação” da Figura V.5). O número ótimo de neurônios é aquele imediatamente anterior ao ponto de sobre-parametrização. De acordo com o procedimento de validação cruzada dinâmica utilizado (Schenker e Agarwal, 1996; Nogueira, 2016; Nogueira *et al.*, 2017; Vieira *et al.*, 2003), e considerando os dados divididos em dois conjuntos de dados (P1 e P2), os valores de erro quadrático médio para cada configuração devem ser definidos a partir da utilização de um conjunto de dados (P1) para treinamento da RNA e o outro (P2) para o teste. Em seguida, os conjuntos de dados são utilizados de forma invertida: P2 é usado no treinamento; e P1 no teste. O erro para cada configuração deve ser a soma dos erros quadráticos médios ponderados pelos respectivos números de dados, conforme a sistemática sugerida. Após identificada a configuração ótima, a RNA deve ser treinada e testada com todos os dados disponíveis. Esse procedimento de seleção do número ótimo de neurônios da camada intermediária está mostrado na Figura V.8, e foi utilizado na modelagem das RNA dos dados e modelos aqui utilizados e desenvolvidos. Note que, dessa forma, que não faz sentido usar uma “validação cruzada final”, que não é contemplada no procedimento proposto, sendo usada aqui, mais adiante na seção V.4.5, apenas como uma “mimetização” de sua aplicação real.

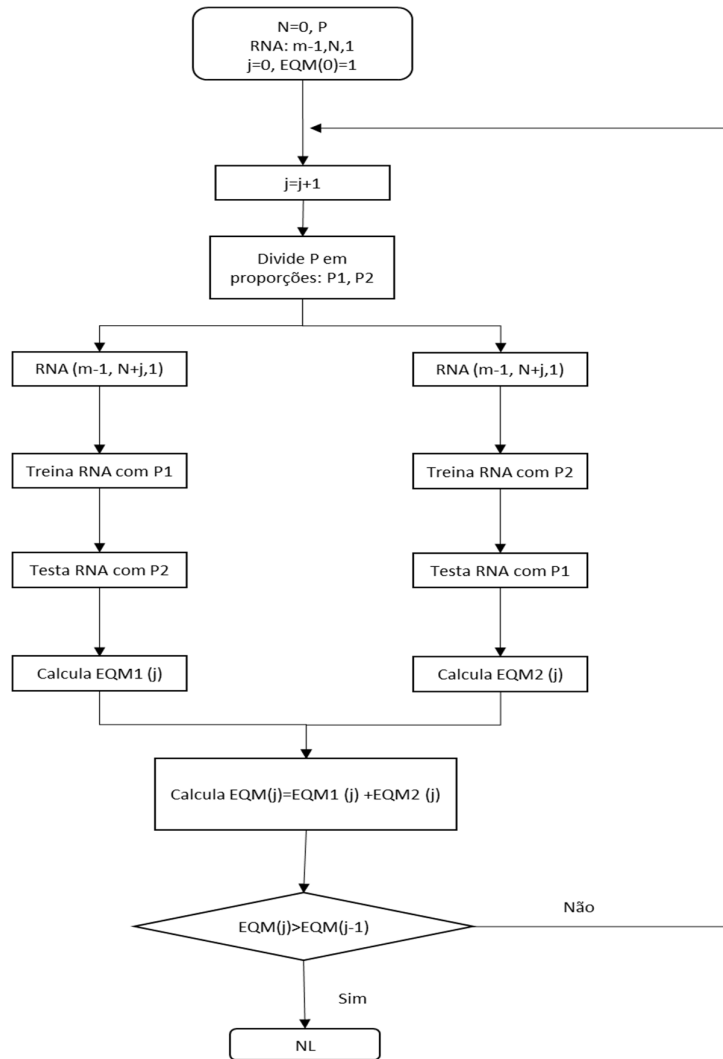


Figura V-8. Fluxograma de Definição do Número Ótimo de Neurônios da Camada Oculta.

V.4. Modelos Desenvolvidos com Redes Neurais Artificiais

Neste trabalho são propostos dois modelos de rede neural artificial, sendo um modelo de MI e o outro de densidade. Nos dois modelos são utilizadas as variáveis de processo (de entrada dos modelos) que estão diretamente relacionadas às propriedades do polietileno formado no reator, escolhidas inicialmente em consonância com o conhecimento do processo (nove entradas) e posteriormente validadas pela análise de sensibilidade. É possível construir um terceiro modelo, nesse caso apenas para o MI, a partir de dados da extrusão, contudo essa abordagem não faz parte do escopo proposto nesse trabalho.

Em relação aos aspectos numéricos e matemáticos, foram utilizadas funções de ativação log-sigmóides nas camadas intermediárias e funções lineares nas camadas de saída. O método de Levenberg-Marquardt foi utilizado para o treinamento das redes, pois conforme demonstrado por Hagan e Menhaj (1994) é o algoritmo mais eficiente dentre os principais que são usualmente aplicados.

V.4.1. Dados Experimentais

Para construção dos modelos foram utilizados dados industriais correspondentes a dois anos de operação. Os dados equivalem à faixa atual de operação correspondente ao portfólio de produtos, conforme mostra a Figura V.9, cobrindo aproximadamente os seguintes intervalos:

- MI: 0 a 70 g/10’;
- Densidade: 0.916 a 0.960.

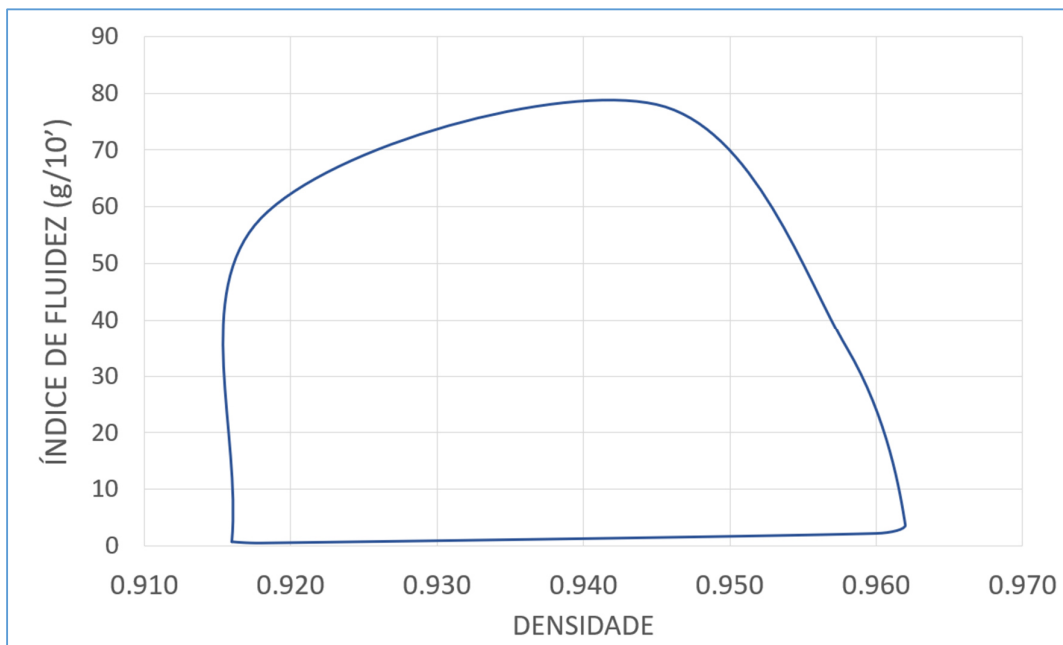


Figura V-9. Região dos Dados Experimentais.

Amostras são continuamente coletadas na extrusão, imediatamente após a formação dos *pellets* (“bolinhas” extrudadas de polímero), e analisadas no Laboratório de Controle de Qualidade (LCQ). Cada parâmetro de qualidade tem um tempo correspondente para análise, sendo o MI analisado a cada duas horas e a densidade a cada

três horas. Algumas outras análises são feitas a fim garantir um efetivo controle de qualidade, tais como índice de amarelo, índice de branco, granulometria, índice de contaminação, dentre outros. Os dados coletados da operação normal do processo são, naturalmente, em princípio dados dinâmicos, pois mudanças e perturbações transientes fazem parte da operação normal do processo. Dessa forma, é necessário desenvolver um modelo dinâmico ou dar um tratamento adequado aos dados para que eles possam ser modelados através de um modelo estacionário. Aqui, dada a dinâmica do reator, que é da ordem de minutos, e a baixa taxa de amostragem dos parâmetros de controle modelados, que é da ordem de horas, não é possível desenvolver um modelo dinâmico acurado. Por outro lado, há componentes dinâmicos importantes embutidos nos dados que precisam ser tratados corretamente. Um deles é tratar adequadamente o tempo morto entre o reator e o ponto de amostragem, visto que os modelos preveem os parâmetros MI e densidade na reação, mas existe um tempo morto considerável (aproximadamente 30 minutos entre o reator e o ponto de amostragem) entre o reator e o ponto de amostragem. Para isso, fez-se necessário determinar o tempo morto entre a reação e o ponto de amostragem. Esse parâmetro foi determinado empiricamente através da pressão no bloco do granulador (denominado de ponto p1). Essa variável possui relação inversa com o MI da resina. Em resumo, observou-se o tempo entre uma redução intencional de MI na reação, resultado da redução do agente terminador de cadeia (hidrogênio), e a elevação de pressão no ponto p1.

Dados de MI e densidade foram coletados da base de dados e, em seguida, foram tratados (o que inclui outros aspectos dinâmicos relevantes, conforme mencionado anteriormente), expurgando condições de partida de planta, variações não usuais de perfil de reação, paradas espúrias de planta, análises reconhecidamente equivocadas, lançamentos errados e falhas de comunicação. Após isso, foi subtraído o tempo morto e coletados os dados da reação. Utilizou-se de dados pontuais ou instantâneos (*snapshot data*), a partir de uma base de dados com registros a cada minuto, sem considerações de valores médios, visto que o tempo de residência é muito baixo, podendo chegar a, no máximo, um minuto e meio.

Para esse trabalho foram utilizadas informações de todas as resinas produzidas atualmente na unidade industrial no módulo de operação Reator 1 (autoclave). Ao todo foram utilizados quatro mil cento e sete (4107) dados para o modelo de MI e três mil trezentos e setenta e dois (3372) dados para a modelagem da densidade, sendo essa diferença de quantidade explicada pela diferença das taxas de amostragem das variáveis

e também por condições diversas de planta que exigiram maior número de análises (transição, variação de reação, *etc.*). Estas quantidades de dados, conforme colocado anteriormente, correspondem a aproximadamente dois dias de operação no período entre 2016 e 2017. Esses anos foram escolhidos devido à baixa ocorrência de longos períodos de descontinuidade operacional. Vale destacar que não houve alterações no portfólio de produtos, de modo que os dados desse período continuam sendo representativos até o presente momento.

V.4.2. Seleção das Variáveis de Entrada dos Modelos

Em relação às variáveis de entrada, foi feita uma seleção prévia, escolhendo as variáveis com base no conhecimento da tecnologia “Sclairtech”. Em uma segunda etapa foi realizada uma análise de sensibilidade para avaliar a relevância das variáveis de entrada preliminares em relação às variáveis de saída dos modelos de RNA propostos, resultando na definição final das variáveis de entrada selecionadas.

As variáveis de entrada inicialmente escolhidas para o estudo de sensibilidade para os modelos de RNA de MI e densidade na reação foram:

- Alimentação lateral do reator (X_1 , %);
- Relação mássica de comonômero (buteno/eteno ou octeno/eteno) na alimentação (X_2 , adimensional);
- Concentração de hidrogênio da solução (X_3 , ppm);
- Concentração mássica de eteno na solução (X_4 , %);
- Temperatura do tratamento térmico do catalisador (X_5 , °C);
- Diferencial de pressão do sistema (X_6 , kgf/cm²);
- Relação redutor/catalisador (X_7 , adimensional);
- Vazão mássica total (X_8 , t/h);
- Diferencial de temperatura da reação (Saída – Entrada) (X_9 , °C).

Conforme mencionado anteriormente, essa escolha inicial das variáveis de entrada dos modelos foi baseada no conhecimento da tecnologia em questão. Uma alternativa a essa proposta seria considerar inicialmente todas as variáveis de reação, e fazer toda a seleção baseada apenas no estudo de sensibilidade. Essa opção não foi explorada pois exigiria mais tempo na análise de sensibilidade, além de torná-la mais complexa. Além

disso, o conhecimento técnico detido pela equipe de técnicos e engenheiros da planta não seria aproveitado, desperdiçando a utilização de uma inteligência humana que é sempre bem-vinda na construção de modelos empíricos, já que não há “inteligência e conhecimento” na estrutura de suas equações em relação ao comportamento do fenômeno modelado, diferentemente do que ocorre nos modelos fenomenológicos.

A concentração de catalisador não foi utilizada como variável de entrada pois ela é utilizada também para compensar alterações nos teores de impureza no sistema, que não são medidos. Dessa forma, um polímero pode ser produzido com mesmo MI e densidade em diferentes concentrações de catalisador. Essa diferença é resultado da maior (ou menor) presença de impurezas decorrente de inúmeros fatores. Para compensar a ausência dessa variável e, por outro lado, considerar simultaneamente também o teor de impurezas, utilizou-se a diferença de temperatura da reação, como uma forma indireta da conversão. Portanto, essa variável (diferença de temperatura da reação) “carrega” consigo o efeito de duas variáveis de entrada importantes, concentrações de catalisador e de impurezas. Apesar dessa variável, rigorosamente falando, ser uma variável de saída, carregando com seu uso potenciais problemas de correlação com outras entradas e de ofensa ao princípio da causalidade entrada-saída, no presente caso esses problemas ficam minimizados. Conforme discutido acima, a maior correlação dessa variável é com as entradas catalisador e impurezas, que não são utilizadas como variáveis de entrada no modelo. Portanto, apesar de haver alguma correlação com outras variáveis de entrada que são utilizadas no modelo, tais dependências são mais fracas. No que se refere à relação de causalidade entrada-saída, que pode ocasionar situações de tentar-se estabelecer correlações de eventos futuros dando causa a eventos passados, dadas a estrutura de modelo utilizado, que é formalmente uma estrutura estática, e a rápida dinâmica do processo (em particular nesse caso, onde a temperatura é uma variável mais rápida do que o MI e a densidade), conforme também já discutido anteriormente, o potencial problema de ofensa a esse princípio da causalidade fica também descartado.

Além do diferencial de temperatura da reação, é utilizada como variável de entrada também uma outra variável de saída, o diferencial de pressão do sistema. A utilização dessa variável é feita com o objetivo de melhorar a qualidade do modelo, suprimindo a ausência do conjunto de outras variáveis de entrada não utilizadas no modelo, seja por falta de medição ou pelo fato de tais entradas não terem, isoladamente, efeitos mais significativos nas propriedades (MI e densidade), mas de certo têm, em conjunto, um efeito apreciável (esse conjunto de outras variáveis de entrada será aqui representado por

U). A escolha dessa variável de saída tem um racional bastante consistente, e vem do fato de ser bem conhecido que o diferencial de pressão do sistema depende basicamente da vazão e da viscosidade, e esta última depende fundamentalmente da temperatura, da concentração e da DPM (Distribuição de Peso Molecular). A principal característica da DPM a influenciar a viscosidade é o peso molecular médio, que é muito bem correlacionado com o MI, e a concentração, em condições normais de operação, é bem representada pela conversão, que por sua vez é bem representada pelo diferencial de temperatura da reação. Além disso, em condições normais de operação a temperatura não tem tanta influência na viscosidade, até porque a temperatura de saída do sistema não varia muito. Portanto, é possível escrever a seguinte relação funcional, onde f simboliza a dependência funcional da saída com as entradas: $X_6 = f(X_8, X_9, MI)$. A partir dessa relação, é possível idealizar também a seguinte relação, onde g simboliza outra dependência funcional: $MI = g(X_6, X_8, X_9)$. Essa última relação indicaria, portanto, que seria possível fazer um modelo de MI utilizando como entradas o diferencial de pressão do sistema, a vazão mássica total e o diferencial de temperatura da reação (e de fato é, conforme mencionado na seção V.4). Como as duas últimas variáveis já são consideradas como entradas do modelo, a última que ficaria faltando seria o diferencial de pressão e, portanto, ela também foi incluída como uma variável de entrada do modelo. Dessa argumentação decorreria uma pergunta lógica: se é possível modelar o MI a partir de X_6 , X_8 e X_9 , porque então utilizar as demais variáveis de entrada? A primeira e principal resposta é que, assim como o uso de X_1 a X_9 (excetuando-se X_6) não é suficiente para obter um modelo com a qualidade desejada e necessária, também o uso de apenas X_6 , X_8 e X_9 também não é [a própria argumentação para a construção da dependência funcional f mostra isso; além disso, embora os resultados não sejam mostrados aqui, estudos desenvolvidos com essa abordagem de modelagem mostraram que, de fato, esta abordagem não é suficiente; ou seja, a rigor a dependência funcional f deveria ser escrita como $X_6 = f_U(X_8, X_9, MI, U)$ e, portanto, $MI = g_U(X_6, X_8, X_9, U)$]. A segunda, que deriva da primeira, mas que também tem implicações importantes quando se tem o objetivo final de utilizar os modelos construídos para fins de controle de processos, é que é desejado e importante se conhecer o efeito de outras entradas nessas propriedades. Por fim, em relação à inclusão dessa variável de saída como entrada, é importante também discutir os dois aspectos mencionados anteriormente: i) correlação com outras variáveis utilizadas como entradas para os modelos; ii) causalidades entrada-saída. No tocante a

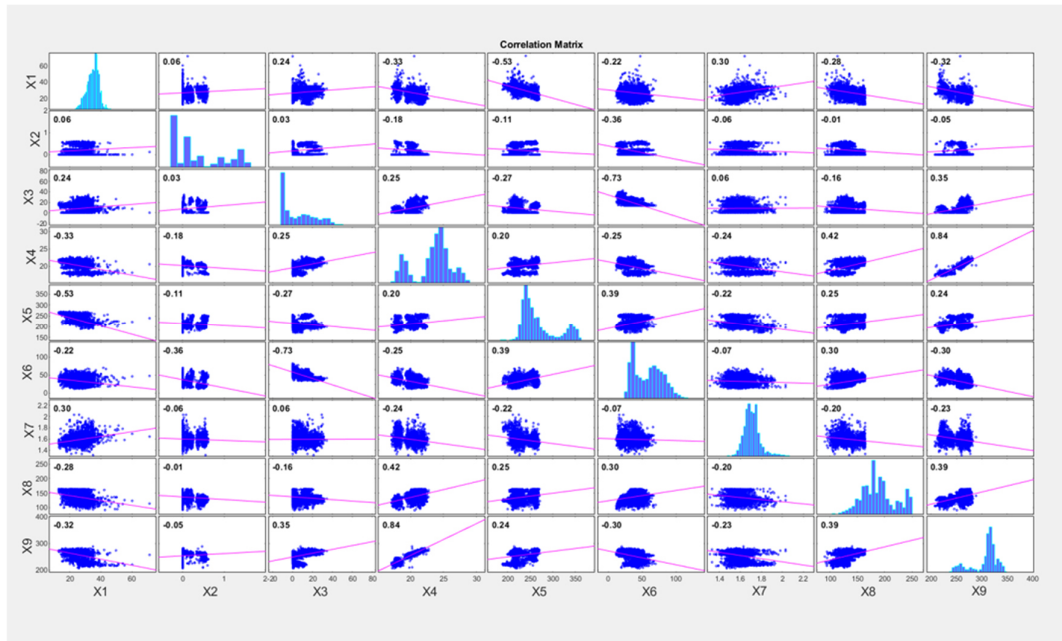
esse segundo aspecto, vale a mesma discussão desenvolvida para o diferencial de temperatura na reação, com o atenuante adicional de que a pressão é uma variável ainda mais rápida do que a temperatura e, portanto, essa é uma questão que pode ser considerada superada também aqui. Relativamente à questão da correlação com outras entradas do modelo, aqui esse ponto é mais delicado. A própria dependência funcional $f(e/ou\ f_U)$ já mostra que o diferencial de pressão é correlacionado diretamente com duas das variáveis de entrada e pode ser correlacionado indiretamente com as demais. Assim, essas correlações podem contaminar as relações das demais entradas com as saídas modeladas (podendo, por exemplo, alterar ganhos entre pares saída-entrada e, eventualmente, até inverter sinais desses ganhos) e, portanto, os resultados de análise de sensibilidade e da própria modelagem final devem ser analisados e avaliados com cuidado e cautela. Por ora, considerando que o modelo a ser desenvolvido é $MI = h(X_1, \dots, X_6, \dots, X_9)$, e considerando f_U , tem-se: $MI = h(X_1, \dots, f_U(X_8, X_9, MI, U), \dots, X_9)$. Portanto, $MI = h_U(X_1, \dots, X_5, X_7, \dots, X_9, U)$. Como o conjunto de variáveis U não é definido de forma precisa, a consequência prática disso é que, nessa abordagem de modelagem, não é possível fazer uma avaliação qualitativa da influência de X_6 no MI com base na fenomenologia. Raciocínio análogo se aplica à densidade.

A despeito das variáveis de qualidade modeladas serem caracterizadas por ganhos de processos distintos, foi adotada como premissa inicial de modelagem a utilização dos mesmos *inputs* (entradas) para ambos os modelos, devido à grande relação existente entre as variáveis de saída. Após a análise de regressão as variáveis de entrada dos modelos de MI e densidade serão definidas conforme a relevância identificada na análise de sensibilidade.

V.4.2.1. Análise de Sensibilidade dos Dados de Processo

Conforme descrito anteriormente, a escolha das variáveis de entrada foi feita a partir de conceitos técnicos e conhecimentos disponíveis em relação ao processo produtivo. Contudo, nessa parte do trabalho será realizado um estudo de sensibilidade através de uma análise de regressão a fim de confirmar as escolhas iniciais. O estudo de sensibilidade por análise de regressão foi realizado utilizando o *software* “Matlab”, e seus resultados são analisados à luz do conhecimento operacional em relação aos ganhos de cada variável. A fim de eliminar a influência da magnitude de valores e da unidade de medida das diferentes grandezas na análise de sensibilidade, os dados foram normalizados

previamente à análise de regressão. A Figura V.10 apresenta a matriz de correlação entre as variáveis de entrada do estudo de correlação. A diagonal principal apresenta um histograma dos dados de entrada do estudo, ou seja, a distribuição de valores da variável em questão. Na matriz de correlação é possível verificar, algumas correlações importantes envolvendo as variáveis de saída utilizadas como variáveis de entrada (diferencial de pressão do sistema, X_6 , e diferencial de temperatura da reação, X_9), o que confirma a necessidade de uma análise cuidadosa e uma avaliação cautelosa dos resultados da análise de sensibilidade e da modelagem final, conforme mencionado na seção anterior. Por exemplo, há uma correlação apreciável entre o diferencial de temperatura da reação e a concentração mássica de eteno na solução (X_4 ; maior concentração de eteno na solução representa maior temperatura média no reator e, portanto, um maior diferencial de temperatura da reação) e entre diferencial de pressão do sistema e a concentração de hidrogênio da solução (X_3 ; elevar o H_2 resulta em um maior MI e, portanto, uma menor viscosidade e menor perda de carga, com conseqüente redução no diferencial de pressão), que é a variável de entrada de maior influência no MI. Além disso, outras correlações são bem conhecidas empiricamente: elevar a vazão total (X_3) resulta em um maior diferencial de pressão no sistema; uma maior temperatura do HTC (X_5) resulta em um menor MI e, portanto, aumenta o diferencial de pressão; dentre outras.



$X_1 =$ Alimentação lateral do reator (%)
 $X_2 =$ Relação mássica comonômero/monômero (adimensional)
 $X_3 =$ Concentração de hidrogênio (ppm)
 $X_4 =$ Concentração mássica de eteno (%)
 $X_5 =$ Temperatura do tratamento térmico (°C)
 $X_6 =$ Diferencial de pressão do sistema (kgf/cm²)
 $X_7 =$ Razão molar do redutor (adimensional)
 $X_8 =$ Vazão total (t/h)
 $X_9 =$ Diferencial de temperatura da reação (°C)

Figura V-10. Matriz de Correlação: Variáveis de Entrada.

A Tabela V.1 (onde SE é o sinal esperado para o coeficiente de cada variável de entrada) apresenta a análise de regressão para a variável MI, na qual foi obtido um coeficiente de determinação (R^2) igual a 0.907 para o seguinte modelo:

$$MI = \beta_{MI,0} + \beta_{MI,1} \cdot X_1 + \dots + \beta_{MI,9} \cdot X_9 \quad \text{Eq. V.24}$$

Tabela V.6. Análise de Regressão para a Variável MI

Entrada	Variável	Parâmetro (β_{MI})	Erro padrão	SE
Termo independente	TI	-0.0171	0.0128	+/-
<i>Alimentação lateral do reator (%)</i>	X_1	<i>-0.0443</i>	0.0178	+
Relação mássica comonômero/ monômero (adimensional)	X_2	0.2512	0.0054	+
Concentração de hidrogênio (ppm)	X_3	0.7801	0.0077	+
Concentração mássica de eteno (%)	X_4	-0.0630	0.0179	-
Temperatura do tratamento térmico (°C)	X_5	-0.3653	0.0078	-
Diferencial de pressão do sistema (kgf/cm²)	X_6	0.1715	0.0131	+/-*
Razão molar do redutor (adimensional)	X_7	-0.0421	0.0123	-
Vazão total (t/h)	X_8	-0.1752	0.0087	-
Diferencial de temperatura da reação (°C)	X_9	0.4122	0.0193	+

* Ver a discussão feita na seção anterior. Se o MI estivesse sendo modelado numa abordagem $MI = g(X_6, X_8, X_9)$, esperar-se-ia um sinal negativo.

Pelos resultados apresentados é possível verificar, dentre outras, algumas correlações importantes, bastante conhecidas operacionalmente (em negrito na Tabela V.1): maior concentração de H₂ resulta em maior MI ($\beta_{MI,3}=0.7801$); maior temperatura do tratamento térmico do catalisador resulta em menor MI ($\beta_{MI,5}=-0.3653$); maior diferencial de temperatura representa maior MI ($\beta_{MI,9}=0.4122$). Pelo valor do coeficiente de determinação ($R^2 = 0.907$) é possível concluir que o modelo se ajustou satisfatoriamente aos dados reais.

Conforme esperado, o hidrogênio (X_3) é um dos parâmetros que possui maior correlação com o MI, juntamente com o diferencial de temperatura do sistema (X_9) (ambos em negrito na Tabela V.1). Por outro lado, a razão molar do redutor (X_7) e a alimentação lateral da reação (X_1) foram as variáveis que apresentaram menor relevância (em itálico na Tabela V.1) e, ainda mais relevante, a relação calculada (inversa, sublinhada na Tabela V.1) da alimentação lateral é diferente daquela observada empiricamente (direta), o que pode ser, entre outros fatores, inclusive resultado da utilização de variáveis de saída como entradas (como mostra a Figura V.10, a alimentação lateral tem alguma correlação com o diferencial de temperatura da reação e uma

correlação ainda maior com a temperatura do tratamento térmico). Em função disso, as variáveis X_1 e X_7 foram desconsideradas como entradas para o modelo de rede neural artificial de *Melt Index*. A concentração de eteno (X_4) também foi uma variável que apresentou baixa correlação (em itálico na Tabela V.1), entretanto ela não foi descartada devido à sua relevância em *grades* (tipos de polímeros) de baixo MI, onde não se utiliza hidrogênio, conhecimento esse que é amplamente confirmado pela experiência dos técnicos e engenheiros na operação e acompanhamento da planta.

A fim de consolidar os fundamentos técnicos das correlações entre as variáveis de entrada e as saídas, e entender melhor o comportamento do processo do ponto de vista de sua fenomenologia, são descritas abaixo as relações causais entre o MI e as diferentes variáveis de entrada validadas pela análise de correlação:

- Relação mássica de comonômero (buteno/eteno ou octeno/eteno) na solução de alimentação (X_2 , adimensional) (+). O controle de MI é feito controlando o peso molecular do polímero. Esse controle é feito controlando a taxa de crescimento do polímero *versus* a taxa de transferência da cadeia. A taxa de crescimento do polímero é proporcional à concentração de eteno. Assim, a adição de comonômero para controlar a densidade também tem efeito na transferência de cadeia, fazendo com que as cadeias se separem mais facilmente e o MI suba. Uma maior concentração de comonômero, em detrimento do monômero, também tem um efeito de reduzir a taxa de crescimento, sendo um fator adicional. Além disso, maiores ramificações (menor densidade) na cadeia principal tendem a interferir na interação intermolecular e, portanto, no MI. Esse efeito secundário é um efeito na viscosidade independente do peso molecular;
- Concentração de hidrogênio na solução de alimentação (X_3 , ppm) (+). Nas reações de transferência de cadeia, assim que as cadeias se soltam do catalisador outra cadeia começa a crescer no mesmo local. O hidrogênio reage com a cadeia polimérica em crescimento, no átomo final, e faz com que ela se quebre, produzindo uma reação de transferência de cadeia. O sítio catalítico permanece ativo e uma nova cadeia começa a crescer. Portanto, nessa função de auxiliar a cadeia anterior a se romper e a nova a começar a crescer, o hidrogênio se comporta como um agente de transferência cadeia. A elevação na concentração desse composto no reator

resultará na formação de um polietileno de menor massa molecular e, portanto, de maior MI (relação direta);

- Concentração mássica de eteno na solução de alimentação (X_4 , %) (-). Uma maior concentração de eteno, mantendo uma mesma conversão inicial, representa em menor MI. Isso ocorre, pois, a maior concentração do monômero na solução resulta em aumento dos choques entre as moléculas, favorecendo a etapa de crescimento de cadeia e, dessa forma, a formação de polímero de alto peso molecular;
- Temperatura do tratamento térmico do catalisador (X_5 , °C) (-). Alterações nessa temperatura podem favorecer mais ou menos a formação das diferentes valências das espécies catalíticas de $TiCl_4$ ou $VOCl_3$. A espécie $VOCl_3$ possui duas valências ativas como catalisador: V^{+3} ; e V^{+4} . A formação da valência V^{+4} é favorecida com a elevação da temperatura, e sítios catalíticos com essa valência tendem a formar um polímero de maior massa molecular. Portanto, quanto maior a temperatura do tratamento térmico menor será o MI;
- Diferencial de pressão (X_6 , kgf/cm²) (+/-). Essa variável é calculada como a diferença entre a pressão do sistema e a pressão no reator. A pressão do sistema é controlada por uma válvula a montante do separador de pressão intermediária (primeiro estágio de separação), visando garantir que o sistema está em uma única fase. A diferença de pressão é função da perda de carga do sistema. Resinas com maior viscosidade (baixo MI) apresentam alto diferencial de pressão. A análise de regressão apresenta um valor positivo de correlação, diferentemente do que a análise fenomenológica indicaria em um possível modelo de MI apenas em função da vazão e dos diferenciais de pressão e temperatura. No entanto, a análise feita na seção anterior mostra que poder-se-ia esperar qualquer sinal de correlação, o que é sustentado também pela Figura V.10, onde pode-se observar, entre outras, uma correlação importante entre o diferencial de pressão e a concentração de hidrogênio na solução de alimentação;
- Vazão mássica total (X_8 , t/h) (-). A vazão mássica total, também conhecida na prática industrial como *Total Solution Rate* (TSR), influencia no tempo de residência no reator. Maior tempo de residência no reator resulta em maior atividade catalítica/taxa de reação, maior conversão, aumento de

temperatura e, por fim, aumento no MI. Dessa forma, uma redução na vazão mássica total implica em uma elevação do MI;

- Diferencial de temperatura da reação (X_9 , °C) (+). Essa variável representa a diferença entre as temperaturas de saída e entrada da seção de reação e, portanto, representa uma medida indireta da conversão. A reação de polimerização de etileno é exotérmica e, portanto, elevar a conversão implica em operar com um perfil de temperatura mais elevado e, conseqüentemente, produzir uma resina com um menor peso molecular e um maior MI.

Embora tenham sido descartadas do modelo, mas para a completude do estudo aqui desenvolvido, são descritas abaixo também as relações causais entre o MI e a alimentação lateral da reação (X_1) e a razão molar do redutor (X_7):

- Alimentação lateral do reator (X_1 , %) (+). Ao elevar a alimentação lateral, parte do eteno que entraria no fundo do reator, local onde é formada resina de alto peso molecular e menor MI, é enviada para o meio do reator. Dessa forma, elevar a alimentação lateral do reator resultará em elevação do MI;
- Relação redutor/catalisador (X_7 , adimensional) (-). Similarmente à temperatura do tratamento térmico do catalisador, a relação molar do cocatalisador tem relação com a ativação das espécies químicas que compõem o catalisador, podendo favorecer a formação de polietilenos de maior ou menor massa molar. Na prática, observa-se que com a redução da relação de cocatalisador redutor há uma redução do MI do polietileno em produção, provavelmente devido ao fato de que essa redução no cocatalisador redutor favorece a formação de espécies catalíticas que tendem a formar polímeros de maior massa molar.

Utilizando os dados de densidade (ρ) para a realização de uma análise de regressão, equivalente à realizada anteriormente com o MI, tem-se o resultado mostrado na Tabela V.2 e um coeficiente de determinação (R^2) de 0.936 para um modelo semelhante ao do MI (Eq. V.22).

Tabela V.7. Análise de Regressão para a Variável Densidade

Entrada	Variável	Parâmetro (β_ρ)	Erro padrão	SE
Termo independente	TI	-0.0937	0.0130	+/-
Alimentação lateral do reator (%)	X_1	<i>-0.0905</i>	0.0143	-
Relação mássica comonômero/ monômero (adimensional)	X_2	-0.4083	0.0051	-
Concentração de hidrogênio (ppm)	X_3	0.1156	0.0067	+
Concentração mássica de eteno (%)	X_4	0.3071	0.0177	+
Temperatura do tratamento térmico (°C)	X_5	0.2826	0.0077	+
Diferencial de pressão do sistema (kgf/cm²)	X_6	<i>-0.0862</i>	0.0126	+/-*
Razão molar do redutor (adimensional)	X_7	<i>-0.0500</i>	0.0124	-
Vazão total (t/h)	X_8	<u>0.0526</u>	0.0074	-
Diferencial de temperatura da reação (°C)	X_9	0.6604	0.0211	+

* Ver a discussão feita na seção anterior. Se o MI estivesse sendo modelado numa abordagem $MI = g(X_6, X_8, X_9)$, esperar-se-ia um sinal negativo.

As principais variáveis para a densidade são (em negrito na Tabela V.2): diferencial de temperatura da reação ($\beta_{\rho,9}=0.6604$); razão mássica comonômero/monômero ($\beta_{\rho,2}=-0.4083$); concentração mássica de eteno ($\beta_{\rho,4}=0.3071$). Esse resultado gera certa surpresa, pois a expectativa era que a razão de comonômero fosse majoritária, visto que é a variável predominantemente utilizada no controle desse parâmetro (isso pode ser explicado, pelo menos em parte, pela utilização de variáveis de saída como entradas do modelo, o que é particularmente o caso do diferencial de temperatura da reação). Por outro lado, as entradas que apresentaram menor correlação com a densidade foram (em itálico na Tabela V.2): razão molar do redutor (X_7); vazão total (X_8); diferencial de pressão do sistema (X_6); e a alimentação lateral da reação (X_1). Devido ao pequeno grau de relevância identificado, tais variáveis foram desclassificadas como entradas para o modelo de densidade. Além disso, assim como a alimentação lateral no modelo de MI, a relação calculada (direta, sublinhada na Tabela V.2) da vazão total é diferente daquela observada empiricamente (inversa) (como mostra a Figura V.10, a vazão total tem alguma correlação com o diferencial de temperatura da reação e uma correlação um pouco maior com a concentração mássica de eteno na solução). Portanto,

considerando apenas as variáveis selecionadas para o modelo, é possível descrever as relações causais entre a densidade e as variáveis de entrada do seu modelo, de um ponto de vista fenomenológico, da seguinte forma:

- Relação mássica de comonômero (buteno/eteno ou octeno/eteno) na alimentação (X_2 , adimensional) (-). O comonômero é o principal parâmetro para controle de densidade. Isso ocorre pois o comonômero é inserido na cadeia principal na forma de ramificação, interferindo na cristalinidade do polímero e, portanto, na densidade. Dessa forma, quanto maior a concentração de comonômero na reação menor será a densidade do polímero;
- Concentração de hidrogênio (X_3 , ppm) (+). O hidrogênio é o agente terminador de cadeia. Quando presente na solução, ele é preferencial para ser inserido nas cadeias maiores, devido ao tamanho da sua molécula, resultando em aumento da densidade. Para compensar esse efeito na densidade, resinas com alto MI necessitam de maior relação mássica de comonômero;
- Concentração mássica de eteno na solução (X_4 , %) (+). De forma semelhante ao hidrogênio, o eteno é preferencial para ser inserido na cadeia principal devido ao tamanho da sua molécula frente à molécula de comonômero (impedimento estérico). Dessa forma, quanto maior a concentração de eteno na solução menor será a inserção do comonômero e, portanto, maior será a densidade;
- Temperatura do tratamento térmico do catalisador (X_5 , °C) (+). Catalisadores Ziegler-Natta de primeira geração têm dificuldade de inserir o comonômero nas cadeias poliméricas maiores, devido ao impedimento estérico característico. Dessa forma, como a elevação dessa temperatura tende a formar polímeros de alta massa molecular, há uma maior dificuldade na adição do comonômero nas cadeias maiores, resultando em maior densidade;
- Diferencial de temperatura da reação (X_9 , °C) (+). O diferencial de temperatura tem correlação com a conversão e com a concentração de eteno no sistema. Conforme comentado sobre o MI, um alto diferencial de temperatura resulta em uma resina com maior MI e, portanto, menor peso

molecular. A baixa massa molecular representa uma cadeia principal menor e, por isso, de mais fácil empacotamento e, portanto, com maior cristalinidade (densidade).

Mais uma vez, para a completude do estudo aqui desenvolvido, são descritas abaixo as relações causais entre a densidade e as variáveis de entrada não utilizadas:

- Alimentação lateral do reator (X_1 , %) (-). Ao diminuir a concentração do eteno no fundo do reator, com o aumento da alimentação lateral, há um favorecimento à inserção do comômero nas cadeias maiores e, portanto, uma redução na densidade;
- Diferencial de pressão (X_6 , kgf/cm²) (+/-). Assim como confirmado na análise de correlação, a expectativa era, de fato, que esse parâmetro tivesse pouca correlação com a densidade, visto que a densidade do polímero tem pouca (ou nenhuma) correção com a perda de carga. De toda forma, considerando a influência inversa do MI no diferencial de pressão numa abordagem $X_6 = f(X_8, X_9, MI)$, e desconsideradas outras correlações com outras variáveis de entrada, poder-se-ia esperar uma relação também inversa (negativa) com a densidade. Por outro lado, assim como no caso do MI e como já discutido anteriormente, qualquer sinal pode ser esperado para a correlação da densidade com o diferencial de pressão na abordagem de modelagem aqui adotada;
- Relação redutor/ catalisador (X_7 , adimensional) (-). Acredita-se que uma maior relação molar desse cocatalisador favorece a ativação das espécies catalíticas com menor impedimento estérico, que facilitam a adição do comonômero, favorecendo a redução da densidade. De toda forma, é sabido que o efeito dessa relação na densidade é menor do que o efeito no MI, que já não é um efeito tão significativo;
- Vazão mássica total (X_8 , t/h) (-). Aumentar o tempo de residência, diminuindo a vazão total, representa um aumento de temperatura de reação e formação de polímero de menor massa molecular e, portanto, com maior densidade. Por outro lado, assim como a relação redutor/ catalisador, a experiência prática mostra que essa variável tem pouca correlação com a densidade.

Observa-se, portanto, que a análise de sensibilidade descartou duas entradas para o modelo de MI (a alimentação lateral da reação; e razão molar do reductor) e quatro para o modelo de densidade (razão molar do reductor; vazão total; diferencial de pressão do sistema; e alimentação lateral da reação) dentre as nove inicialmente propostas baseadas na experiência industrial. Assim, as variáveis alimentação lateral da reação (X_1) e razão molar do reductor (X_7) se mostraram irrelevantes para os dois modelos. Além disso observa-se, em ambos os casos, que os ajustes das regressões se apresentaram bastante satisfatórios, pois os coeficientes de determinação (R^2) foram superiores a 0.900, indicando que os modelos se ajustaram bem aos dados reais.

Na Tabela V.3 são apresentados os coeficientes da regressão com todos as entradas (AR1) (já mostrados nas Tabelas V.1 e V.2) e com as entradas selecionadas a partir do estudo de correlação (AR2). São perceptíveis pequenas variações nos parâmetros da regressão e diferença irrisória entre os coeficientes de determinação (R^2), para ambos os modelos. Esses resultados confirmam que as variáveis descartadas pela análise de regressão são, de fato, dispensáveis para a modelagem das variáveis MI e densidade.

Tabela V.8. Análise de Regressão com as Entradas Selecionadas (AR2) e Comparação com a Análise de Regressão com Todas as Entradas (AR1) (EP: Erro Padrão)

Variável	$\beta_{MI,AR1}$	EP _{AR1}	$\beta_{MI,AR2}$	EP _{AR2}	$\beta_{\rho,AR1}$	EP _{AR1}	$\beta_{\rho,AR2}$	EP _{AR2}
T_I	-0.0171	0.0128	-0.0626	0.0077	-0.0937	0.0130	-0.2067	0.0055
X_1	-0.0443	0.0178	-	-	-0.0905	0.0143	-	-
X_2	0.2512	0.0054	0.2532	0.0054	-0.4083	0.0051	-0.3934	0.0045
X_3	0.7801	0.0077	0.7776	0.0761	0.1156	0.0067	0.1264	0.0054
X_4	-0.0630	0.0179	-0.0575	0.0179	0.3071	0.0177	0.3567	0.0170
X_5	-0.3653	0.0078	-0.3553	0.0072	0.2826	0.0077	0.2849	0.0061
X_6	0.1715	0.0131	0.1776	0.0130	-0.0862	0.0126	-	-
X_7	-0.0421	0.0123	-	-	-0.0500	0.0124	-	-
X_8	-0.1752	0.0087	-0.1766	0.0087	0.0526	0.0074	-	-
X_9	0.4122	0.0193	0.4218	0.0192	0.6604	0.0211	0.6960	0.0211
R^2	0.907		0.906		0.936		0.934	

V.4.3. Modelo de *Melt Index* (MI)

O MI de um polímero aumenta com a diminuição da massa molar e, portanto, é uma medida indireta de seu peso molecular. Essa propriedade é medida como a quantidade de polímero que passa por um orifício padrão em um tempo especificado (Carraher e Seymour, 1984). O método de análise é padronizado a partir da norma ASTM D1238-20 (ASTM, 2020a) e a unidade de medida é dada em $g/10'$.

As diversas aplicações do polietileno têm faixa de MI características que representam as demandas mecânicas e óticas do produto final. Em geral, para a tecnologia em questão, resinas de alto MI ($MI > 20 g/10'$) são características das aplicações de injeção, de alta e baixa densidades, que podem ter com produto final filmes de fralda, baldes, tampas, caixas de alimento, brinquedos, *master batch* (concentrado de pigmentos e/ou aditivos diversos, em forma de grãos, utilizado para colorir e/ou incorporar outras propriedades à resina termoplástica desejada), entre outras. Resinas com baixo MI ($MI < 3.0$) são utilizadas em sacos plásticos, sacarias industriais, sacaria de rafia, bobinas técnicas, entre outros produtos. Valores intermediários em relação às faixas citadas de MI têm como aplicações finais caixas d'água e alguns filmes específicos.

O MI é uma propriedade de qualidade extremamente importante para a indústria de terceira geração. Com o avanço tecnológico, a demanda de polietileno tem crescido substancialmente e a produtividade das máquinas acompanha esse crescimento de maneira proporcional. A elevação de produtividade do parque tecnológico exige que, cada dia mais, o polietileno disponível no mercado esteja homogêneo, pois a heterogeneidade resulta em perda de eficiência e impacto direto nos custos de produção, como resultado da necessidade de ajustes constantes nas máquinas de processamento final das resinas.

A partir das premissas e procedimentos descritos anteriormente, os dados disponíveis foram utilizados para a construção de um modelo de RNA da propriedade de qualidade MI. Foram utilizados mais de quatro mil dados, correspondentes a dois anos de campanhas operacionais. Os dados foram tratados objetivando eliminar anomalias que poderiam representar danos à qualidade do modelo, conforme descrito na seção V.4.1. A configuração ótima da RNA foi encontrada aplicando a sistemática proposta nesse trabalho. Ou seja, foi encontrada a estimativa inicial dos pesos e *bias* de uma RNA com um neurônio e, utilizando do método de Levenberg-Marquardt, foram encontrados os pesos ótimos que minimizam os erros de predição. Os pesos encontrados na RNA com 1

neurônio foram utilizados como nova estimativa para a RNA seguinte, com dois neurônios (ou, generalizando, com 1 neurônio a mais do que a RNA anterior), sendo que na estimativa inicial para o novo neurônio seus pesos e *bias* são nulos. Essa interação foi executada até que o erro de uma configuração de RNA fosse maior do que o erro da RNA anterior (ou seja, com um neurônio a menos na camada intermediária). Utilizando tal procedimento, a configuração ótima encontrada foi uma RNA com cinco neurônios na camada oculta (Figura V.11).

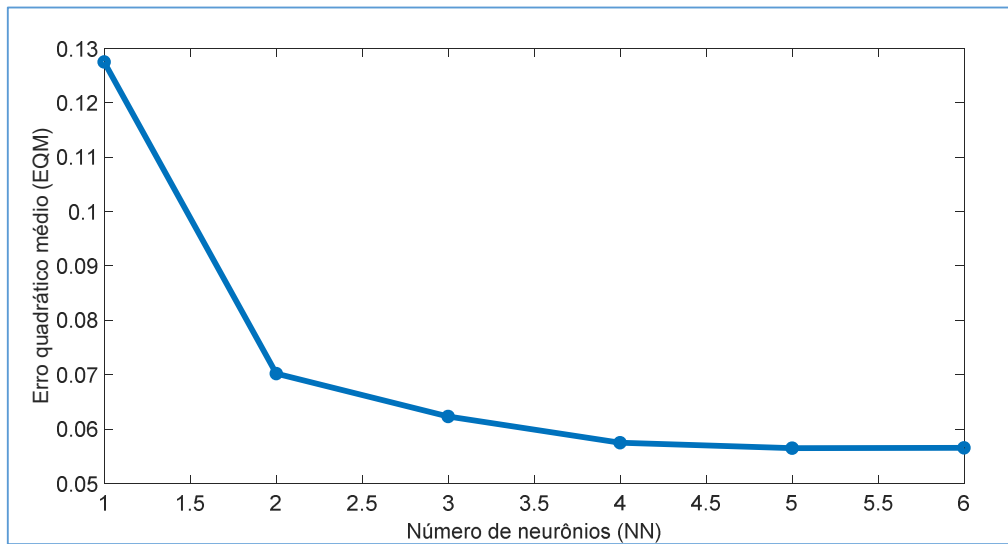


Figura V-11. Modelo RNA para MI: Erro Quadrático Médio *versus* Número de Neurônios.

Na Figura V.12 é apresentado o erro percentual entre o modelo e os dados reais. O erro absoluto médio encontrado foi de 11.58% e o desvio padrão de 10.71%. Para valores baixos de MI os erros estão na sua maioria próximos de zero, contudo regiões de maiores valores de MI apresentam erros maiores. Os maiores desvios são observados na condição de transição de resinas. Esse comportamento já era esperado, devido à maior incerteza da análise, decorrente de uma maior dispersão das variáveis de processo (variáveis de entrada) e da mudança do tempo morto entre o reator e a extrusão (ponto de amostragem), pois durante as transições a carga da unidade é reduzida a fim de minimizar a geração de produto fora de especificação (uma possibilidade futura seria avaliar a alternativa de utilizar um tempo morto variável, em função da TSR, caso seja necessário melhorar a qualidade dos modelos aqui obtidos).

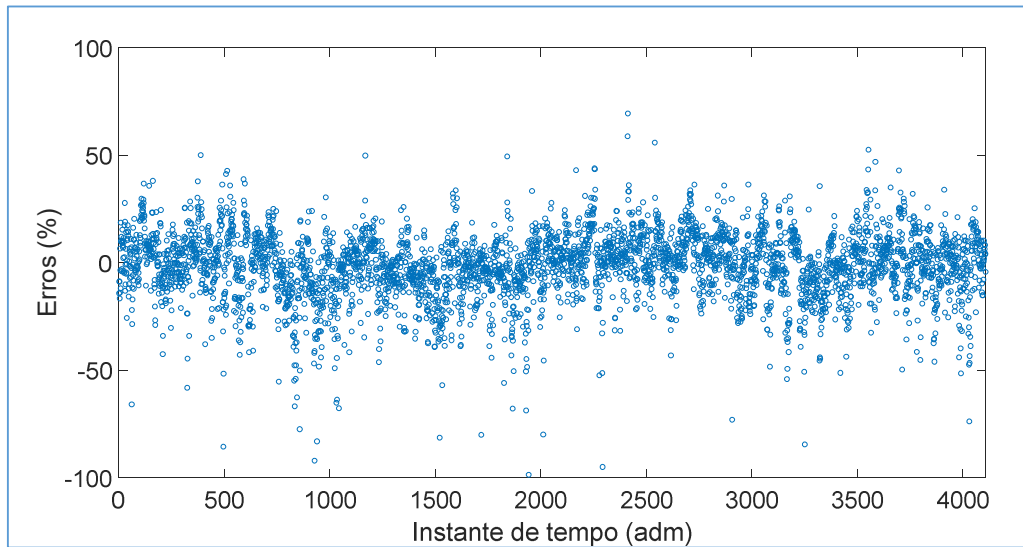


Figura V-12. Modelo RNA para *Melt Index* (MI): Erro Percentual.

A Figura V.13 mostra a dispersão dos erros de modelagem, sendo observado que não existem desvios sistemáticos, e nem mesmo *outliers* (dados espúrios), mas apenas uns poucos pontos com desvios, positivos ou negativos, um pouco maiores.

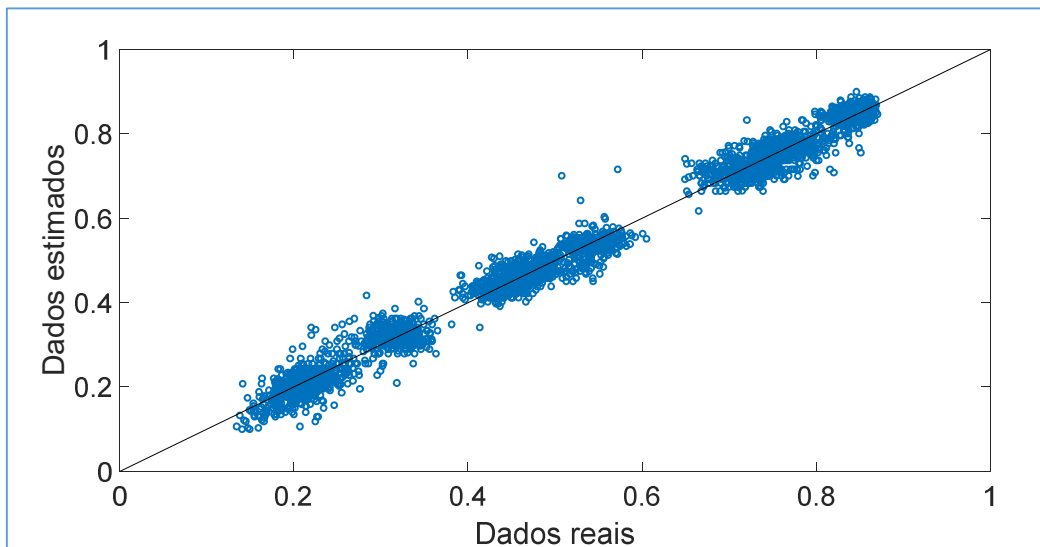


Figura V-13. Modelo RNA para *Melt Index* (MI): Relação Dados Estimados *versus* Dados Reais ($r^2 = 0.970$).

O modelo de previsão do MI apresenta uma acurácia satisfatória para todas as faixas de MI, conforme mostrado na Figura V.14 e também na Figura V.13 (que mostra valores adimensionais). Na Figura V.14 é apresentada apenas uma fração dos dados, mas

que contempla todo o portfólio de produtos (MI variando de 0 a 70 g/10'), a fim de ilustrar visualmente a sobreposição do modelo de MI frente aos dados reais. Optou-se, nesse gráfico, por apresentar apenas uma fração dos dados pois seria mais difícil fazer uma avaliação mais qualitativa do modelo, que foi o objetivo aqui, com todo o conjunto de pontos, devido ao grande número de dados.

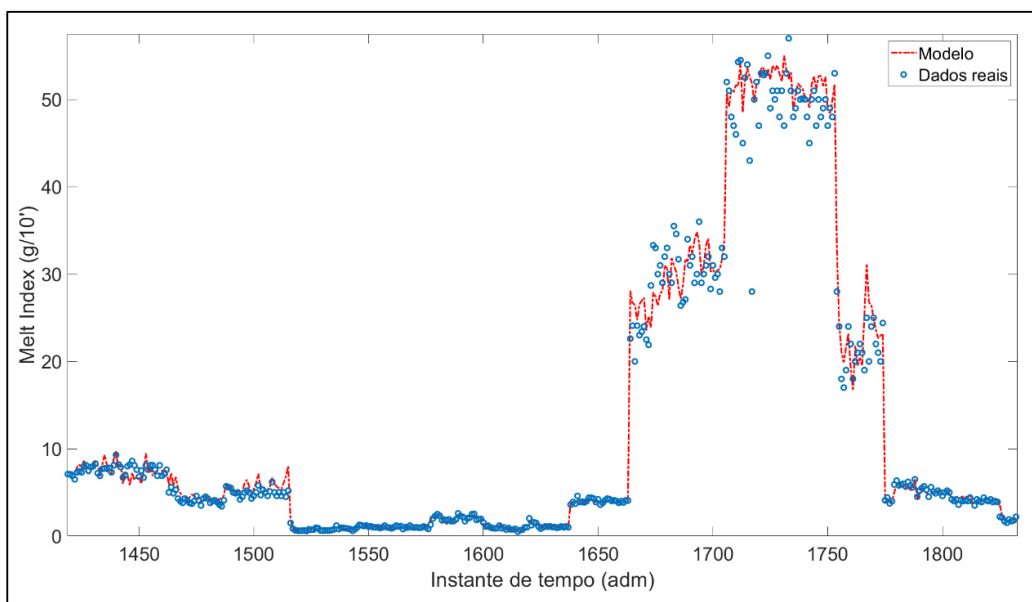


Figura V-14. Resultados da Rede Neural Artificial para *Melt Index* (MI) em Variáveis Dimensionais (Dimensões Industriais).

V.4.4. Modelo de Densidade

A principal classificação do polietileno é feita de acordo com a sua densidade (Peacock, 2000): Polietileno de Alta Densidade (PEAD, 0.940 a 0.960); Polietileno de Média Densidade (PEMD, 0.925 a 0.940); e Polietileno de Baixa Densidade/Linear (PEBD/PEBDL, 0.910 a 0.925). A análise desse parâmetro de qualidade (densidade) é normatizada a partir do ASTM D-4976 (ASTM, 2020b). O polietileno é um polímero resultado da polimerização do monômero etileno, sendo utilizado na maioria das vezes um comonômero que, dependendo da tecnologia, pode ser propeno, buteno-1, hexeno-1, octeno-1, acetato de vinila, entre outros. Os comômeros são utilizados justamente para controlar as ramificações do polímero e, portanto, são a principal variável para controle da densidade no polietileno.

A densidade é uma variável de qualidade que possui uma característica particular devido à natureza dos seus valores numéricos. A variação dos valores de densidade de 0.916 a 0.962 na tecnologia em questão representa uma diferença máxima de 4.8-5.0% em relação aos extremos, limites superior e inferior (é possível até produzir valores menores, como 0.910, mas isso não acontece na prática industrial, pois pode resultar na formação de aglomerados; por isso é considerado o valor mínimo previsto nas condições de síntese, onde não há valores inferiores a 0.916). Essa característica, se não abordada corretamente, pode conduzir a avaliações equivocadas quanto à acurácia do modelo, podendo induzir a uma qualificação errônea. Visando superar essa situação, nesse trabalho foi criada uma variável desvio que é utilizada para a construção do modelo da RNA:

$$\theta = (\rho - 0.900) \cdot 10000 \quad \text{Eq. V.25}$$

onde θ é a variável desvio da densidade ρ . Utilizando dessa variável desvio os valores podem se apresentar de 160 a 620, resultando em um desvio máximo de 2.9-74.2% em relação aos extremos (limites inferior e superior), pois o limite superior da faixa é cerca de quatro vezes maior do que o seu limite inferior.

Utilizando os dados disponíveis e aplicando uma abordagem de modelagem equivalentemente realizada com os dados de MI, foi encontrado um erro mínimo com três neurônios na camada oculta para a variável densidade, conforme mostrado na Figura V.15.

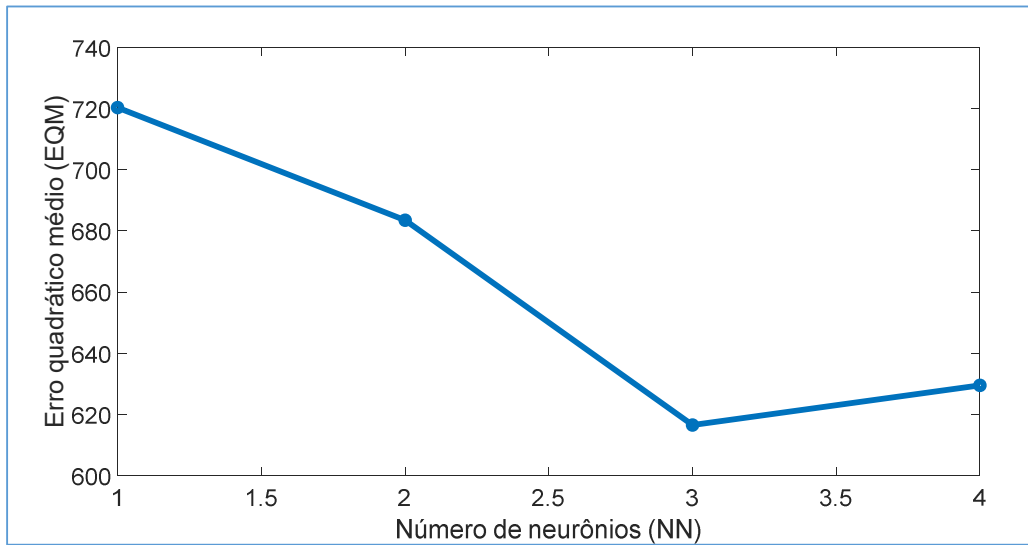


Figura V-15. Modelo RNA para Densidade: Erro Quadrático médio *versus* Número de Neurônios.

O modelo de RNA para a densidade apresentou resultado satisfatório, e ainda melhor do que aquele obtido com o modelo de MI, confirmando a expectativa inicial, pois, conforme já mostrado no capítulo anterior, a densidade é uma variável menos dispersa do que o MI. A Figura V.16 mostra os erros do modelo, que apresentou um erro médio absoluto de 3.83% e um desvio padrão de 4.32%. Assim como no caso do MI, a Figura V.17 também mostra uma dispersão de erros de modelagem não desviada, à exceção de uns poucos dados que poderiam ser considerados *outliers* com predominância de desvios negativos.

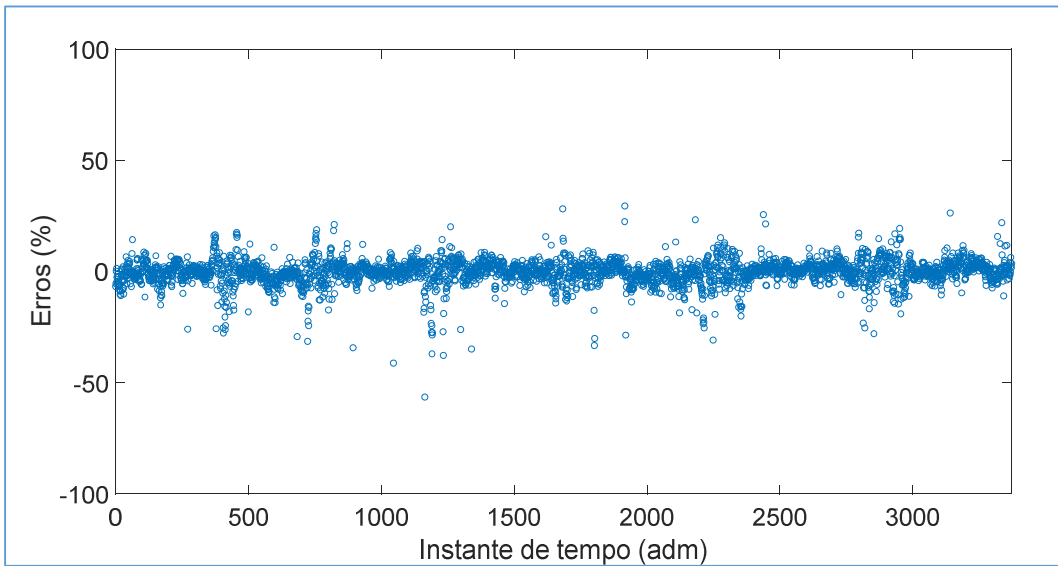


Figura V-16. Modelo RNA para Densidade: Erro Percentual.

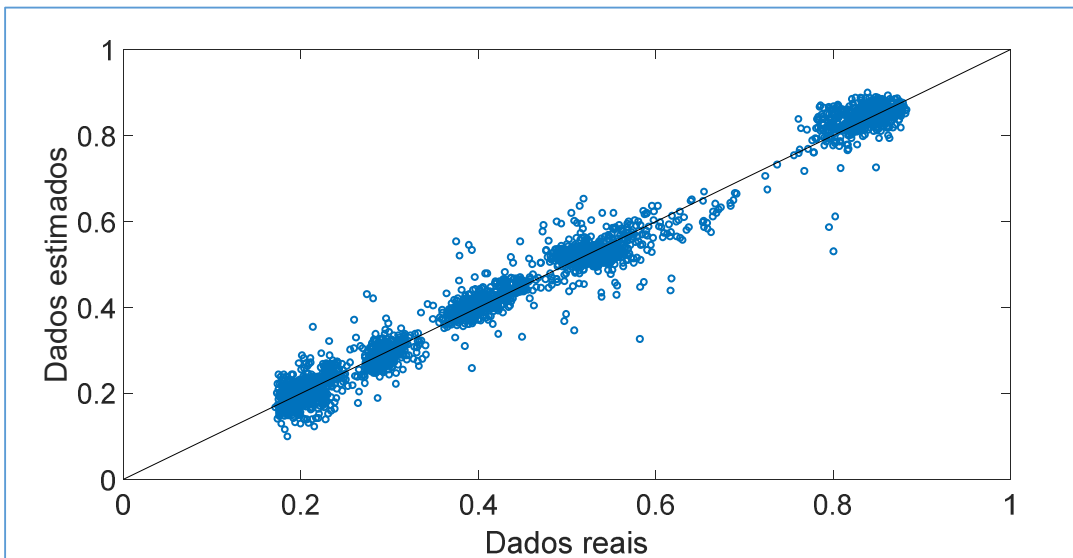


Figura V-17. Modelo RNA para Densidade: Relação Dados Estimados *versus* Dados Reais ($r^2 = 0.983$).

A RNA de densidade apresentou ajuste equivalente ao do modelo de MI. Ou seja, ela apresentou um ajuste satisfatório para todas as faixas correspondentes às diferentes famílias de polietileno, a despeito de um ou outro *outlier* disperso ao longo do intervalo de dados considerado (Figura V.18 e Figura V.17). De forma equivalente ao apresentado no modelo de MI, a Figura V.18 ilustra uma parte do conjunto de dados, a fim de facilitar a demonstração visual da sobreposição entre modelo e dados reais.

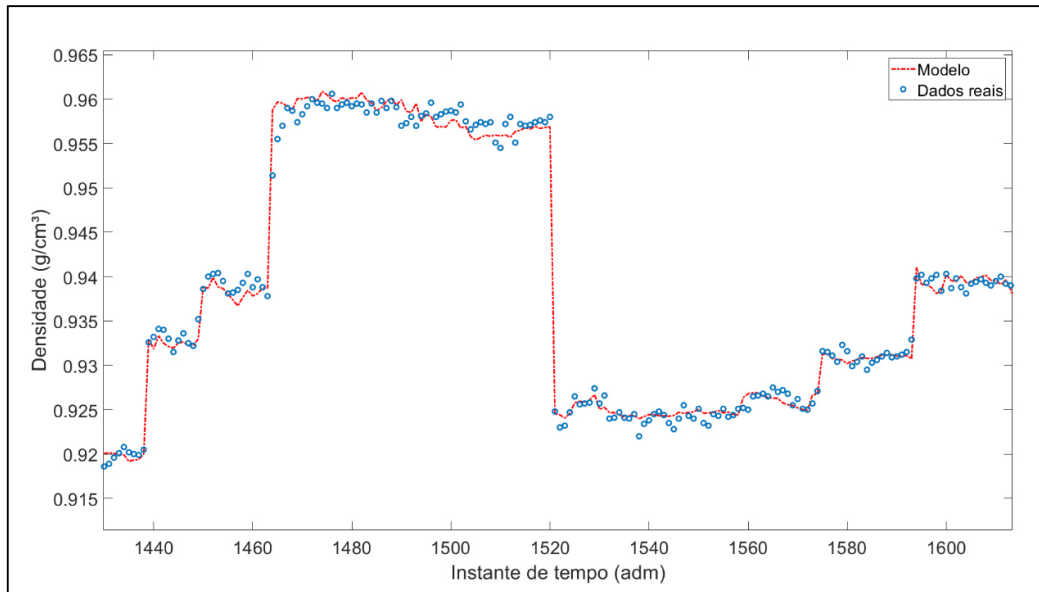


Figura V-18. Resultados da Rede Neural Artificial para Densidade em Variáveis Originais (Valores e Dimensões Industriais).

V.4.5. Teste de Validação Estatística

O coeficiente de determinação e o erro percentual médio associados aos modelos neurais para ambas as estimativas de MI (0.970 e 11.58%) e densidade (0.983 e 3.83%) podem ser avaliados por meio de um teste estatístico apropriado baseado nas respectivas amostras. Como a normalidade da distribuição do erro não foi confirmada em ambos os casos (MI e densidade), de acordo com o teste de Kolmogorov-Smirnov de uma amostra (KSteste) (Belciug, 2020; Schober *et al.*, 2018), o coeficiente de correlação de postos de Spearman (teste não paramétrico) foi usado e um valor próximo a +1 foi obtido, mostrando uma forte correlação entre as estimativas do modelo e as medições de laboratório.

V.4.6. Validação Operacional dos Modelos

Nessa seção a capacidade de previsão dos modelos de redes neurais das propriedades MI e densidade é avaliada em três diferentes campanhas operacionais, envolvendo quatro famílias distintas de polietilenos, utilizando dados reais de planta. Os

dados utilizados nessa etapa são diferentes daqueles utilizados na construção dos modelos, a fim de emular a efetiva utilização dos modelos desenvolvidos, já que a metodologia aqui desenvolvida e utilizada envolve uma abordagem integrada para definição da arquitetura e validação do modelo. Todos os casos envolvem uma transição de famílias, sendo uma delas sempre a família rotomoldagem, devido a sua expressiva participação no portfólio da unidade industrial. As outras três famílias contemplam injeção de alta densidade, filme buteno e injeção de baixa densidade. Tais transições foram escolhidas pois representam as mais frequentes em um ciclo mensal. Em todos os casos utilizou-se 100 horas de dados (o que representa, aproximadamente, 4 dias de operação). Portanto, não se manteve fixo o número de resinas nas avaliações, mas sim o tempo de coleta de dados. Os critérios utilizados para escolher o intervalo de tempo foram: ausência de parada de planta; e período fora do espaço amostral utilizado para construção dos modelos.

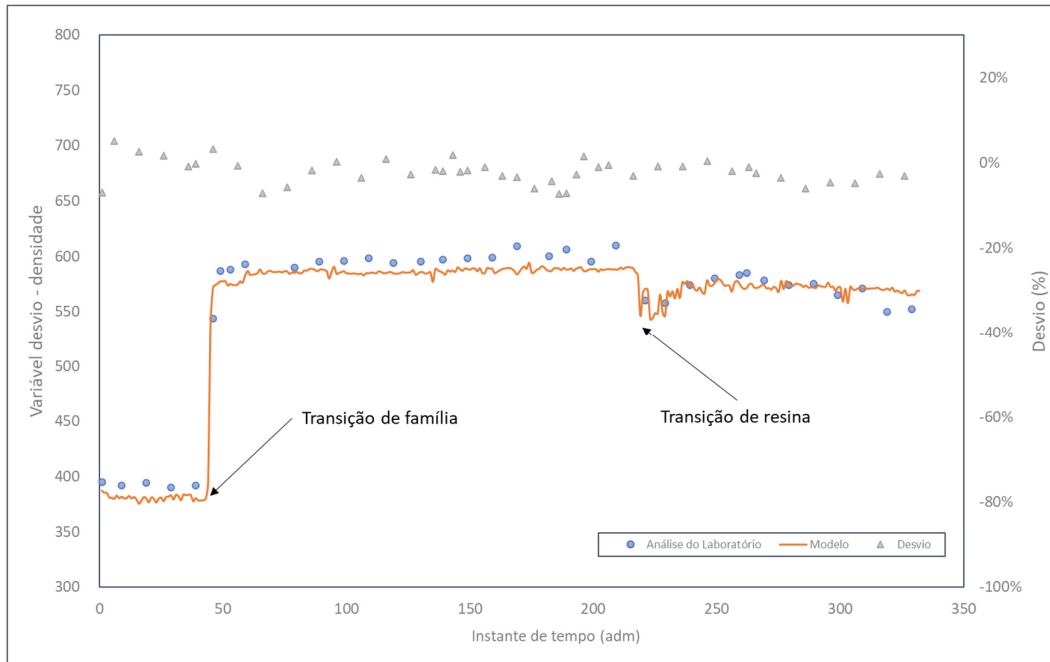
A avaliação de acurácia dos modelos foi feita utilizando as análises do laboratório, que são distribuídas periodicamente (duas ou três horas) ao longo do tempo, cujos resultados são os pontos apresentados nos gráficos. Os gráficos apresentados mostram uma sobreposição satisfatória entre os dados de laboratório e os resultados dos modelos de MI e densidade. A fim de acessar de forma mais verdadeira a acurácia do modelo de densidade, os erros percentuais desse modelo são analisados utilizando a variável desvio da densidade, conforme definição feita na seção anterior.

V.4.6.1. Transição Rotomoldagem → Injeção de Alta Densidade

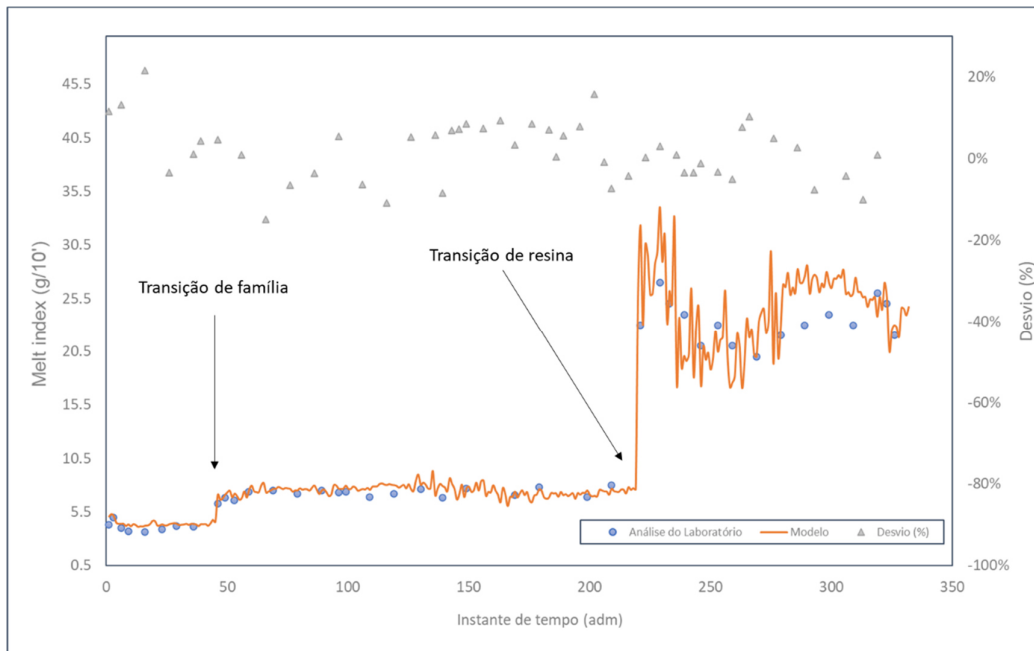
Nesse primeiro caso foi avaliada uma campanha de rotomoldagem ($MI \sim 5 \text{ g}/10'$), representada pela resina de maior contribuição no portfólio, e posterior transição para a família injeção de alta densidade com alto MI ($MI > 7 \text{ g}/10'$), representada por duas resinas distintas. As faixas de densidade situam-se nas regiões superior (no caso da família de injeção de alta densidade) e média (no caso da resina de rotomoldagem).

A Figura V.19 mostra os resultados obtidos, onde pode-se observar que os modelos apresentam boa acurácia, pois apresentaram erros médios de densidade e MI de 1.9% e 7.7%, respectivamente (os desvios padrão foram de 1.1% e 5.3%, respectivamente). Os maiores desvios ocorreram durante as transições de família (e também nas transições de resina dentro da mesma família), resultado, conforme mencionado anteriormente, da possível variação no tempo morto entre o reator e a extrusão (amostragem), pois nas transições a carga da unidade é diminuída para que a

geração de produto fora de especificação seja reduzida. Ainda contribui para esses desvios aumentados a maior variabilidade das variáveis de entrada nessas transições, conforme também já mencionado anteriormente.



(a)

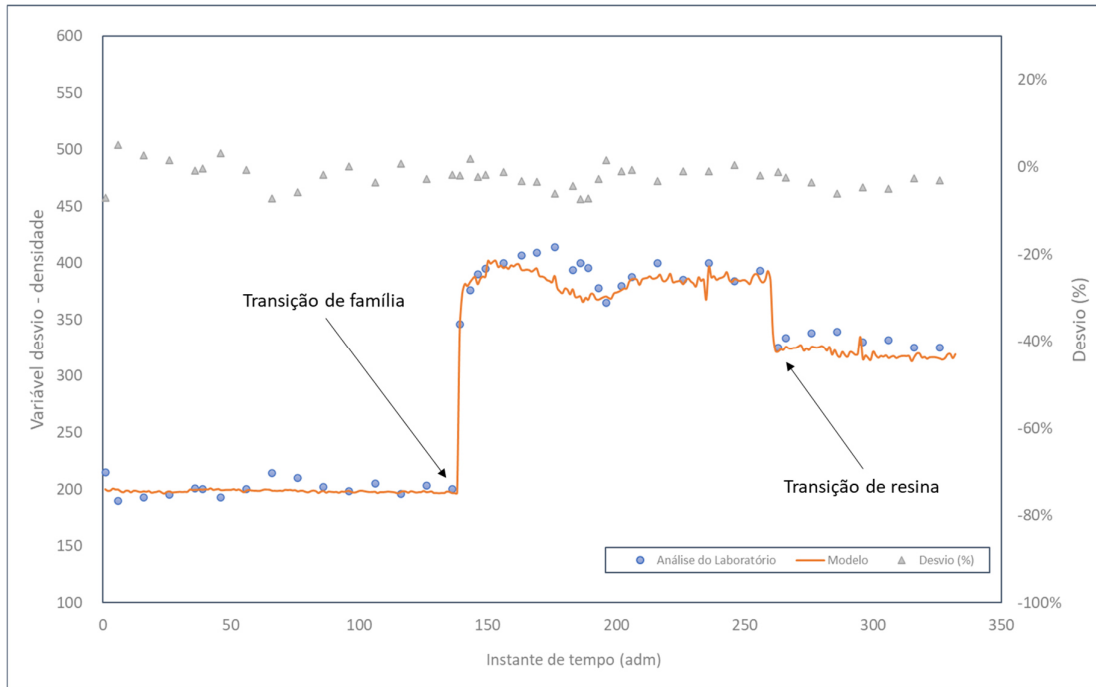


(b)

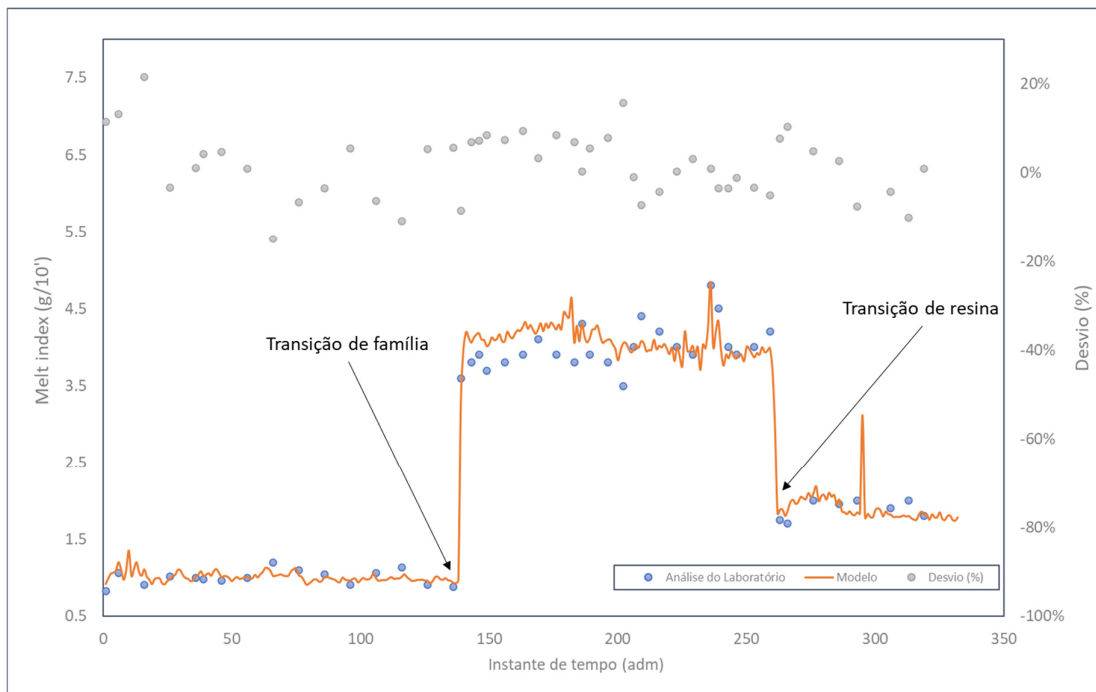
Figura V-19. Validação Operacional - Transição Rotomoldagem → Injeção de Alta Densidade: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual.

V.4.6.2. Transição Filme Buteno → Rotomoldagem

Nesse caso foram utilizados dados de uma campanha de uma resina da família de filme buteno e duas outras da família de rotomoldagem. Para as resinas de rotomoldagem, o fato da vazão de hidrogênio assumir valores muito baixos é um agravante no controle do MI, pois a concentração de hidrogênio na reação é uma variável com ganho relevante nessa variável de qualidade, diferentemente de filme que não utiliza hidrogênio. Por isso, variações no hidrogênio que sejam pequenas absolutamente, mas grandes relativamente (situações que, eventualmente, podem se originar por uma indicação falsa na medição de hidrogênio), irão resultar numa mudança com alguma significância no valor do MI calculado pelo modelo, mudança esta que não será observada no valor medido do MI quando essas variações de hidrogênio forem fruto de uma eventual indicação falsa. Esse fato justifica as variações mais bruscas de MI apresentadas na Figura V.20, observadas, por exemplo, aproximadamente em torno dos instantes 180 e 230.



(a)



(b)

Figura V-20. Validação Operacional - Transição Filme Buteno → Rotomoldagem: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual.

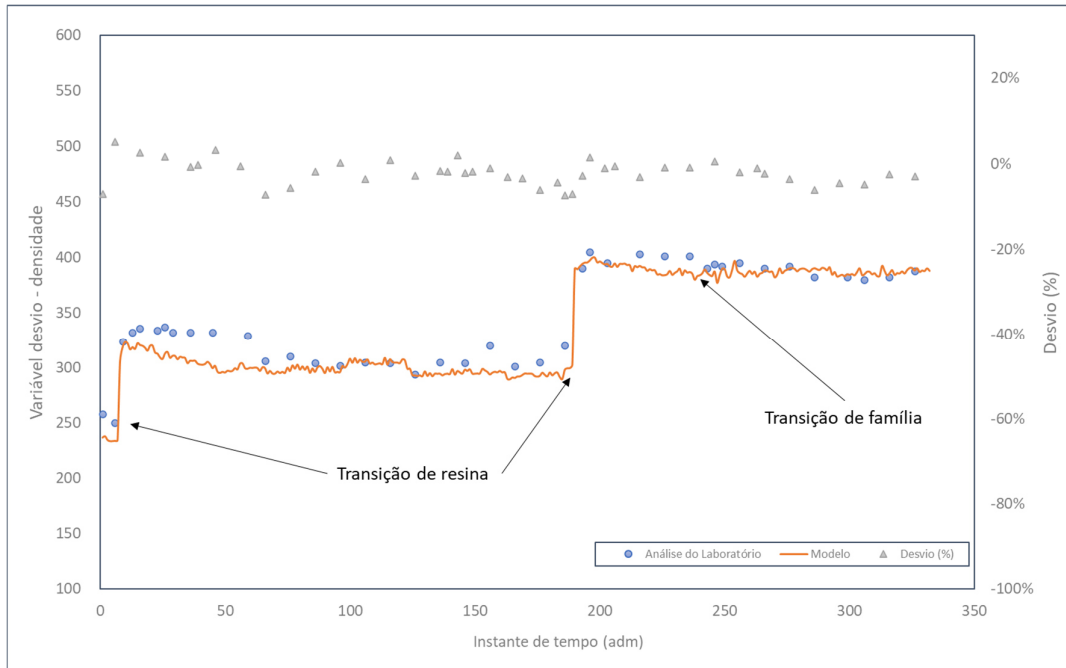
Os erros médios de predição observados foram de 2.9% para a densidade e de 6.2% para o MI (os desvios padrão foram de 2.1% e 5.0%, respectivamente). Conforme

mostra a Figura V.20, os maiores desvios são observados durante a transição entre famílias. Contudo, de maneira geral, os modelos apresentaram resultados satisfatórios ao simular os dados reais (laboratório).

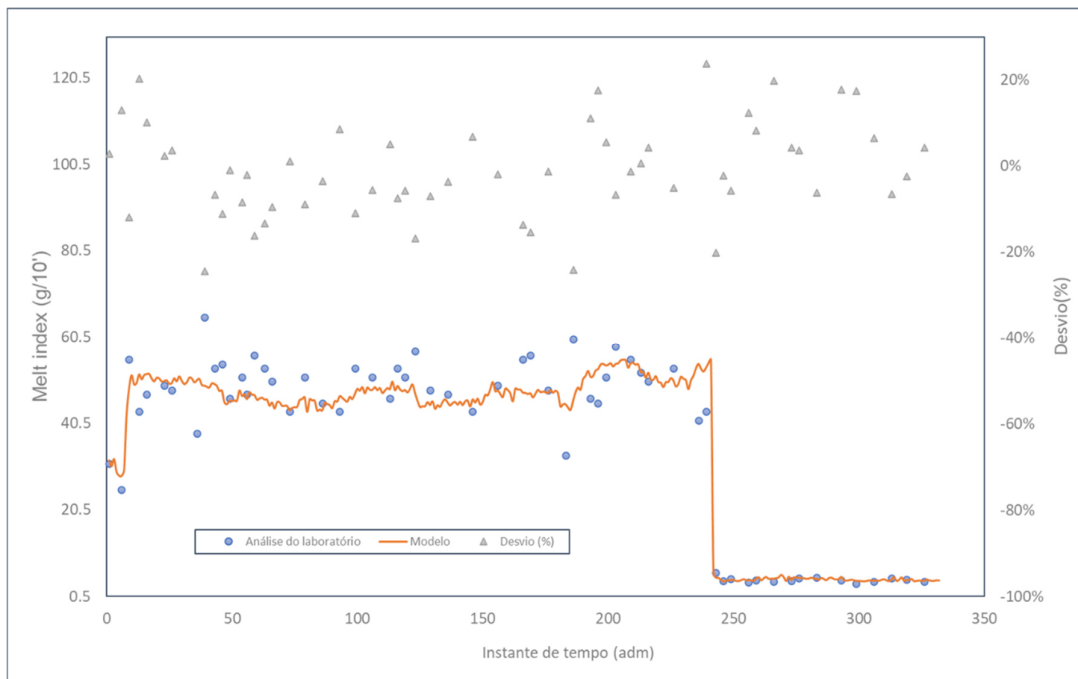
V.4.6.3. Transição Injeção de Baixa Densidade → Rotomoldagem

Resinas da família de injeção de baixa densidade possuem alto MI e baixa densidade. Em função disso a reação opera com maiores concentrações de comonômero e hidrogênio. Além disso, a concentração de eteno é limitada em função da capacidade de recirculação de comonômero. Nessa seção são apresentados resultados de transição da família injeção de baixa densidade (três resinas) para a família rotomoldagem (uma resina).

Os resultados obtidos (Figura V.21) apresentam erro absoluto médio de 3.4% e desvio padrão de 2.8% para a densidade e, para o MI, média e desvio de 10.1% e 13.1%, respectivamente. Conforme mostra a Figura V.21, é possível verificar que resinas de maior MI apresentam maiores variações entre o modelo e os dados reais, resultando em maior desvio padrão. Os maiores desvios para as resinas de alto MI eram esperados, devido às características intrínsecas desse tipo de produto e, portanto, os modelos podem ser considerados adequados para representar o processo.



(a)



(b)

Figura V-21. Validação Operacional - Transição Injeção de Baixa Densidade → Rotomoldagem: (a) Variável desvio - densidade com desvio percentual; (b) MI com desvio percentual.

V.4.6.4. Testes Estatísticos da Validação Operacional

A Tabela V.4 apresenta a média e o desvio padrão dos erros percentuais para os três casos analisados, juntamente com o valor-p das respectivas distribuições obtidas por meio do teste de Kolmogorov-Smirnov de uma amostra (KSteste). O KSteste forneceu um valor-p maior do que 0.05 (nível de significância de 95%), o que mostra que todas as distribuições de erro de três por cento são derivadas da distribuição normal. Além disso, mesmo considerando o tamanho das amostras em cada um dos 3 testes analisados, os resultados obtidos mostram consistência. Quanto ao coeficiente de correlação amostral (r) (Tabela V.4), foi estimado um coeficiente populacional superior a 0.96 em todos os testes, o que sugere forte correlação linear entre o modelo proposto e as medidas laboratoriais (Beleites *et al.*, 2013; Schober *et al.*, 2018).

Tabela V.9. Resultados Estatísticos – Corridas Operacionais

Estudo de Caso	Média (%)		Desvio Padrão (%)		valor-p		r^2	
	MI	Densidade	MI	Densidade	MI	Densidade	MI	Densidade
1. Rotomoldagem → Injeção de Alta Densidade	7.7	1.9	5.3	1.1	0.999	0.218	0.984	0.976
2. Filme Buteno → Rotomoldagem	6.2	2.9	5.0	2.1	0.842	0.936	0.984	0.991
3. Injeção de Baixa Densidade → Rotomoldagem	10.1	3.4	8.2	2.8	0.645	0.704	0.924	0.960

V.5. Conclusões

Nesse capítulo foi apresentada de forma objetiva a base teórica das Redes Neurais Artificiais (RNA) e também uma sistemática generalizada que objetiva encontrar a configuração ótima de uma rede neural artificial, juntamente com um procedimento de validação cruzada dinâmica. Utilizando essa sistemática é necessário definir somente as variáveis de entrada para a construção de uma rede neural artificial ótima para uma dada saída.

A partir da abordagem proposta foram construídos dois modelos de analisadores virtuais de qualidade usando RNA: índice de fluidez (*Melt Index*, MI) e densidade. Para tais modelos foi feita uma seleção inicial das variáveis de entrada, acompanhada da fundamentação técnica/teórica para essas escolhas. Em seguida, foi apresentado um estudo de sensibilidade através de uma análise de regressão, onde se verificou os ganhos

das variáveis de entrada frente às variáveis de saída modeladas. Para o desenvolvimento dos modelos foram utilizados dados reais de planta correspondentes ao período de dois anos de operação. Os dados foram normalizados e foi utilizada a nova abordagem proposta a fim de encontrar a configuração ótima da rede neural. Os modelos ótimos de MI e densidade possuem cinco e três neurônios, respectivamente.

Ambos os modelos apresentaram resultados satisfatórios em todas as regiões de operação. Conforme esperado, o modelo de MI apresentou maior dispersão quando comparado com o modelo de densidade. Observa-se maiores desvios nas transições, o que foi associado à variação do tempo morto entre a reação e a extrusão (amostragem), bem como à maior dispersão das variáveis de entrada nessas regiões de transição. Essa situação (de erros maiores nas transições) é perfeitamente aceitável, pois para as regiões de operação normal, que correspondem a 98% do tempo de operação da planta, os resultados possuem desvios aceitáveis e equivalentes à análise laboratório.

Referências Bibliográficas

- American Society for Testing and Materials, 2020a. *Standard Test Method for Melt Flow Rates of Thermoplastics by Extrusion Plastometer*. s.l.:ASTM 1238-20.
- American Society for Testing and Materials, 2020b. *Standard Specification for Polyethylene Plastics Molding and Extrusion Materials*. s.l.:ASTM D4976-12a.
- Basheer, I. & Hajmeer, M., 2000. Artificial neural networks: fundamentals, computing, design, and application, . *Journal of Microbiological Methods* 43, pp. 3-31.
- Belciug, S., 2020. *Artificial Intelligence in Cancer: Diagnostic to Tailored Treatment*. Academic Press.
- Beleites, C., Salzer, R. & Sergo, V.m 2013. Validation of soft classification models using partial class memberships: An extended concept of sensitivity & co. applied to grading of astrocytoma tissues. *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems*, vol. 122, pp. 12–22.
- Braga, A. d. P., Carvalho, A. P. & Ludermir, T. B., 2000. *Redes Neurais Artificiais – Teoria e Aplicações*. s.l.:Livros Técnicos e Científicos Editora S.A..
- Braga, J. M., 2002. *Introdução às Redes Neurais Artificiais*. s.l.:UFSC.
- Braskem, s.d. *Catálogo de Produtos*. [Online] Available at: <https://www.braskem.com.br/catalogo-de-produtos?key=5> [Acesso em 05 01 2021].
- Carraher, C. E. & Seymour, R. B., 1984. *Structure - Property Relationships in Polymers*. s.l.:Springer.

- Christopher, F. & Patil, S., 2002. Identification and Review of Sensitivity Analysis Methods. *Risk Analysis*, pp. 553-578.
- Croux, C. & Dehon, C., 2010. Influence functions of the Spearman and Kendall correlation measures. *Statistical Methods and Applications*, pp. 497-515.
- Cun, Y. L., Louretzky, L., Hinton, G. & Sejnowski, T., 1988. *A theoretical framework for back-propagation*. Pittsburgh, Pa, Morgan Kaufmann, pp. 21-28.
- DasGupta, B. & Schnitger, G., 1993. The Power of Approximating: A Comparison of Activation Functions.. *Advances in Neural Information Processing Systems*, pp. 615-622, San Mateo, CA. Morgan Kaufmann.
- Embiruçu, M., Lima, E. L. & Pinto, J. C., 2000. Continuous Soluble Ziegler-Natta Ethylene Polymerizations in Reactor Trains. *Mathematical Modeling”, Journal of Applied Polymer Science*, pp. Vol.77, 1574–1590.
- Ferreira, L. S., Marcon, S. M., Trierweiler, J. O. & Secchi, A. R., 2002. *Desenvolvimento de um software de analisador virtual para bioprocessos*. Porto Alegre, s.n..
- Frey, H. C., Mokhtari, A. & Zheng, J., 2004. *Recommended Practice Regarding Selection, Application, and Interpretation of Sensitivity Analysis Methods Applied to Food Safety Process Risk Models*. Washington, D.C 148: North Carolina State University for U.S. Department of Agriculture.
- Frey, H. C. & Patil, S. R., 2002. Identification and Review of Sensitivity Analysis Methods. *Risk Analysis*, pp. Vol. 22, No. 3.
- Frey, H., Mokhtari, A. & Danish, T., 2003. *Evaluation of Selected Sensitivity Analysis Methods Based Upon Applications to Two Food Safety Process Risk Models*. Washington, DC: NC State University for U.S. Department of Agriculture.
- Hagan, M. T. & Menhaj, M. B., 1994. Training feedforward networks with the Marquardt algorithm. *IEEE Transactions on Neural Networks*, pp. 989-993.
- Hair, J. F. *et al.*, 2006. *Análise multivariada de dados*. s.l.:6a edição - Bookman.
- Hamby, D., 1995. A comparison of sensitivity analysis techniques. *Health Phys*, p. 68(2):195–204.
- Haykin, S., 1999. *Neural Network: A Comprehensive Foundation*. s.l.:Prentice Hall International Editions Series.
- Hecht-Nielsen, R., 1989. *Theory of the Backpropagation Neural Network*. s.l., s.n., p. 593–611.
- Hinkle, D. E., Wiersma, W. & Stephen G. J., 2003. *Applied Statistics for the Behavioral Sciences*. s.l.:5th ed. Boston: Houghton Mifflin.
- Hornik, K., Stinchcombe, M. & White, H., 1989. Multilayer Feedforward Networks are Universal Approximators. *Neural Networks*, p. 359.

- Lotufo, F. A. & Garcia, C., 2008. *Sensores Virtuais ou Soft Senros: Uma introdução*. s.l., s.n.
- Ludermir, T. B., Yamazaki, A. & Zanchettin, C., 2006. An Optimization Methodology for Neural Network Weights and Architectures. *IEEE transactions on neural networks*, pp. vol. 17, no. 6.
- Mcculloch, W. S. & Pitts, W., 1943. A logical Calculus of the ideas immanent in nervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, vol. 5., pp. 115-133.
- Moore, D. S. & McCabe, G. P., 2002. *Introdução à prática da Estatística*. s.l.:1a Edição, LTC.
- Nazghelichi, T., Aghbashlo, M. & Kianmehr, M. H., 2011. Optimization of an artificial neural network topology using coupled response surface methodology and genetic algorithm for fluidized bed drying. *Computers and Electronics in Agriculture*, p. 84-91.
- Nogueira, I. B. R., 2016. *Estimação de Parâmetros, Inferência e Controle de Propriedades de Qualidade de um Processo de Copolimerização de Eteno*. s.l.:Dissertação de Mestrado, Universidade Federal da Bahia - UFBA - Escola Politécnica.
- Nogueira, I. *et al.*, 2017. A model-based approach to quality monitoring of a polymerization process without online measurement of product specifications. *Computers & Industrial Engineering*, pp. 123-136.
- Peacock, A., 2000. *Handbook of Polyethylene Structures: Properties, and Applications*., New York: 1st Edition, Marcel Dekker.
- Pianosi, F. *et al.*, 2016. Sensitivity analysis of environmental models: A systematic review with practical workflow. *Environmental Modelling & Software*, pp. 79, 214-232.
- Rafiq, M., Bugmann, G. & Easterbrook, D., 2001. Neural network design for engineering applications. *Computers & Structures*, pp. 79(17), 1541-1552.
- Saltelli, A., 2002. Sensitivity analysis for importance assessment. *Risk Analysis*, pp. 22(3): 579-590.
- Schenker, B. & Agarwal, M., 1996. Cross-validated structure selection for neural networks. *Computers & Chemical Engineering*, pp. v. 20, n. 2, p. 175-186.
- Schober, P., Boer, C. & Schwarte, L. A., 2018. Correlation coefficients: appropriate use and interpretation. *Anesth Analg*, vol. 126, pp. 1763-1768.
- Sprent, P. & Smeeton, N. C., *Applied nonparametric statistical methods*, 2001: 3rd ed. P. Sprent, N. C. Smeeton.
- Swinscow, T. & Campbell. M. J., 1997. *Statistics at square one*. s.l.:9° Edition. Copyright BMJ Publishing Group.

Tetko, I. V., Livingstone, D. J. & Luik, A. I., 1995. Neural network studies. 1. Comparison of overfitting and overtraining. *Journal of Chemical Information and Modeling*, pp. 35(5), 826.

Vieira, R., Embiruçu, M., Sayer, C., Pinto, J. C. & Lima, E. L., 2003. Control strategies for complex chemical processes. Applications in polymerization processes. *Computers and Chemical Engineering*, pp. 27(8-9), 1307–1327.

Wang, L., 2009. *Model Predictive Control System Design and Implementation Using MATLAB*. s.l.: 9^o Edition - Springer.

Capítulo VI – Projeto e Simulação do Controle Avançado

Resumo

Nesse capítulo são apresentadas as bases do controle avançado desenvolvido para a planta de produção de polietileno linear em solução da tecnologia “Sclairtech”, bem como os seus resultados. O controlador utilizado é um MPC (*Model Predictive Control*, controle preditivo baseado em modelos). O modelo do processo foi desenvolvido através de dados históricos, alguns testes operacionais e conhecimento empírico, e as simulações foram realizadas na linguagem Python, utilizando a biblioteca Gekko.

VI.1. Introdução

O processo de polimerização “Sclairtech” possui um dos menores tempos de residência no reator frente a outras tecnologias de produção de polietileno. Essa condição, conforme descrito no capítulo IV, possibilita a transição de tipos de resinas em um curto intervalo de tempo e com baixa geração de produto fora de especificação (*off-spec*). Por outro lado, devido a sua singularidade no portfólio da empresa detentora, essa tecnologia exige uma dinâmica acentuada na programação de produção, a fim de atender à demanda do mercado. Em função disso, inúmeras transições são realizadas em um mês, resultando em perdas expressivas devido à produção de *off-spec* e à redução de carga. Por outro lado, o controle de propriedades realizado através da atuação humana (operadores de processo) em controladores tradicionais, utilizando como base resultados periódicos (2 a 3 horas) de laboratório, indica uma oportunidade de otimização com a implementação de um controle avançado de processos.

O controlador preditivo baseado em modelo (MPC, *Model Predictive Control*), técnica amplamente usada em diversas tecnologias de produção de polietileno (capítulo II), se apresenta como uma solução promissora para ser implementada em uma planta industrial de produção de polietileno da tecnologia “Sclairtech”.

VI.2. Controle Preditivo Baseado em Modelo

O MPC (Figura VI.1) é uma técnica que formula o problema de controle como um problema de otimização para controlar a variável desejada através da sua predição, utilizando um modelo do processo (para predições futuras), e obtenção da ação de controle através da minimização/ maximização de uma função objetivo. Para isso, são consideradas as restrições de processo, denominadas *hard* (rígidas) e *soft* (suaves). As restrições *soft* são aquelas em que o controlador admite violação temporária, e são implementadas através de uma penalização na função objetivo. Por outro lado, as restrições *hard* são aquelas que não podem ser violadas em nenhuma hipótese (Maciejowski, 2002). Essas restrições devem ser definidas no projeto conceitual para a implementação de um MPC.

Nesse tipo de controle, definir o tipo de modelo a ser utilizado é essencial para o sucesso do projeto. Todavia, a modelagem do processo pode ser a parte mais complexa, ainda mais em um processo não linear como uma reação de polimerização de eteno. A

tecnologia “Sclairtech” se destaca, nesse quesito, frente às demais tecnologias de produção de polietileno, principalmente devido ao baixo tempo de residência no reator. Além disso, a possibilidade de realizar degraus nas variáveis manipuladas, a fim de identificar as respostas, pode representar impactos financeiros relevantes para o negócio, devido à possibilidade de geração de produto fora de especificação. Nesse contexto, a utilização de uma planta piloto seria o mais adequado, contudo tal recurso também representa um custo relevante e, por isso, são poucas as empresas que o detêm.

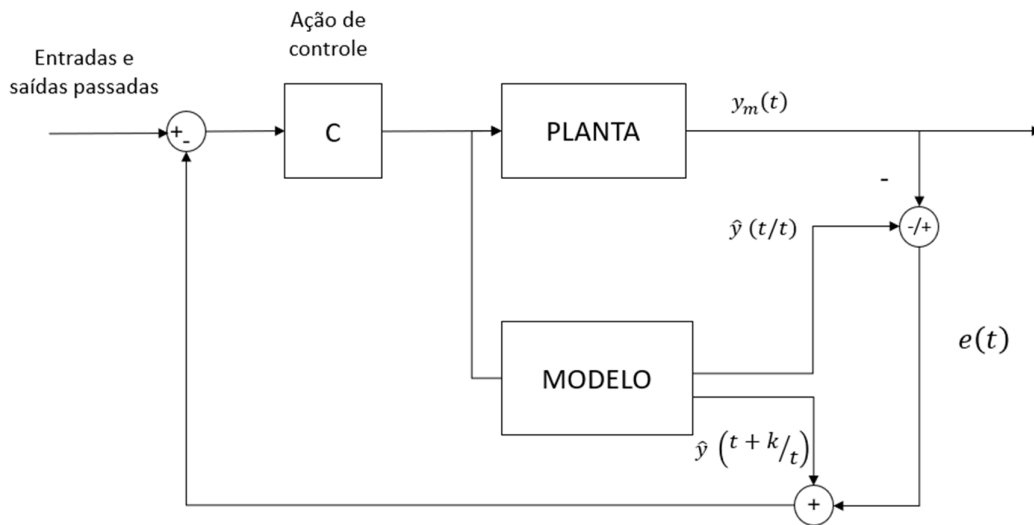


Figura VI-1. Estrutura de um Controlador Preditivo Baseado em Modelo.

VI.3. Modelagem do Processo

Nessa seção são apresentadas as premissas e a metodologia para a construção do modelo da planta, bem como as equações finais do modelo desenvolvido. O modelo da planta deve ser aquele que melhor represente o processo. Nesse contexto, são três os modelos a construir: modelo do MI (*Melt Index*, índice de fluidez); modelo da densidade (ρ); e modelo da conversão (Q). Os modelos de redes neurais apresentados no capítulo V não podem ser utilizados, pois são modelos estáticos e, portanto, não possuem a dinâmica necessária para um modelo de MPC (a rigor, existem alguns elementos dinâmicos nesses modelos, mas insuficientes para sua utilização num MPC). Isso quer dizer que, se utilizados, a dinâmica das variáveis de qualidade em relação às variáveis de entrada (concentração de hidrogênio; temperatura do tratamento térmico; diferencial de temperatura; etc.) seria considerada instantânea (ou de velocidade infinita). Essa

consideração não encontra respaldo na fenomenologia do processo e, dessa forma, deve ser descartada como possibilidade. Utilizar uma modelagem fenomenológica é uma alternativa possível, mas exigiria a confecção de algoritmos com complexidade relevante. Nesse caso, foi adotada uma estratégia que utiliza diferentes abordagens, utilizando dados históricos, alguns testes operacionais e conhecimento empírico. A seguir é descrita a abordagem utilizada para extrair informações a partir do conhecimento detido pelos especialistas no processo, e em seguida são apresentados os modelos finais obtidos, cujo desenvolvimento utiliza, além do conhecimento especialista, também técnicas de modelagem empírica já bem conhecidas.

VI.3.1. Abordagem Baseada no Uso da Experiência dos Especialistas

Numa planta industrial, com suas inúmeras malhas de controle, são os operadores de painel, através de seu conhecimento técnico e empírico, que definem os *setpoints* (valores de referência ou desejados) das malhas. No caso em questão, conforme abordado em capítulo anterior, o operador espera o resultado de MI e/ ou densidade oriundo do laboratório para atuar nas variáveis de processo. Dentre as possibilidades existentes, o indivíduo avalia a diferença entre o valor real (laboratório) e o valor desejado e escolhe em qual variável atuar. No caso do MI, onde há maior grau de liberdade, quando a diferença é pequena normalmente a atuação ocorre em variáveis de menor ganho, visto que uma atuação no hidrogênio pode ser demasiada. Na densidade normalmente a atuação é direta na razão de comonômero/ monômero. Em suma, cada operador de painel tem noção aproximada dos ganhos das variáveis de processo nas variáveis de qualidade e suas respectivas dinâmicas. A compreensão do processo naturalmente será função do tempo de trabalho no painel e da formação técnica de cada profissional.

Objetivamente, esse trabalho propõe utilizar o conhecimento empírico/ técnico dos especialistas do processo a fim de ajudar a identificar os modelos e seus parâmetros. No parágrafo anterior o operador de painel foi identificado como figura chave dessa abordagem, entretanto o especialista é qualquer indivíduo reconhecido como conhecedor do processo. Isso quer dizer que não necessariamente somente operadores de painel possam ser classificados como tal, embora espere-se que todos os operadores, com exceção, talvez, dos ainda inexperientes, possam assim ser classificados. Nesse contexto, engenheiros, técnicos operacionais e responsáveis pela operação, entre outros, também

podem e devem ser considerados. A abordagem proposta aqui para extrair informações do processo a partir do conhecimento detido pelos seus especialistas consiste em:

- I. Identificar os especialistas (que poderão, eventualmente, ajudar também nos itens II a IV infra);
- II. Identificar as variáveis independentes (de entrada) que influenciam na variável de saída (possivelmente controlada) a ser modelada;
- III. Escolher condições operacionais de referência. Essas situações devem ser as mais comumente encontradas na rotina operacional;
- IV. Definir degraus das variáveis independentes identificadas no primeiro item. Os degraus devem ser coerentes com a realidade operacional;
- V. Criar questionários que agreguem as condições de referência e os degraus propostos. Nesses questionários devem ser apresentadas as mais típicas respostas ao degrau usualmente observadas nos comportamentos dinâmicos dos processos (ver, por exemplo, aquelas apresentadas na Figura VI.2) como opções de escolha para o especialista, mas deve-se deixar em aberto a possibilidade do especialista propor um comportamento dinâmico diferente a uma resposta ao degrau específica, nos casos em que ele não sinta que seus conhecimentos/ percepções sejam contemplados pelas opções apresentadas;
- VI. Solicitar aos especialistas o preenchimento dos questionários;
- VII. Utilizar as respostas dos especialistas para a construção de “modelos de especialistas”: o tipo ou estrutura do modelo deve seguir a moda das respostas, e os seus parâmetros devem seguir a média dos valores informados pelos especialistas.

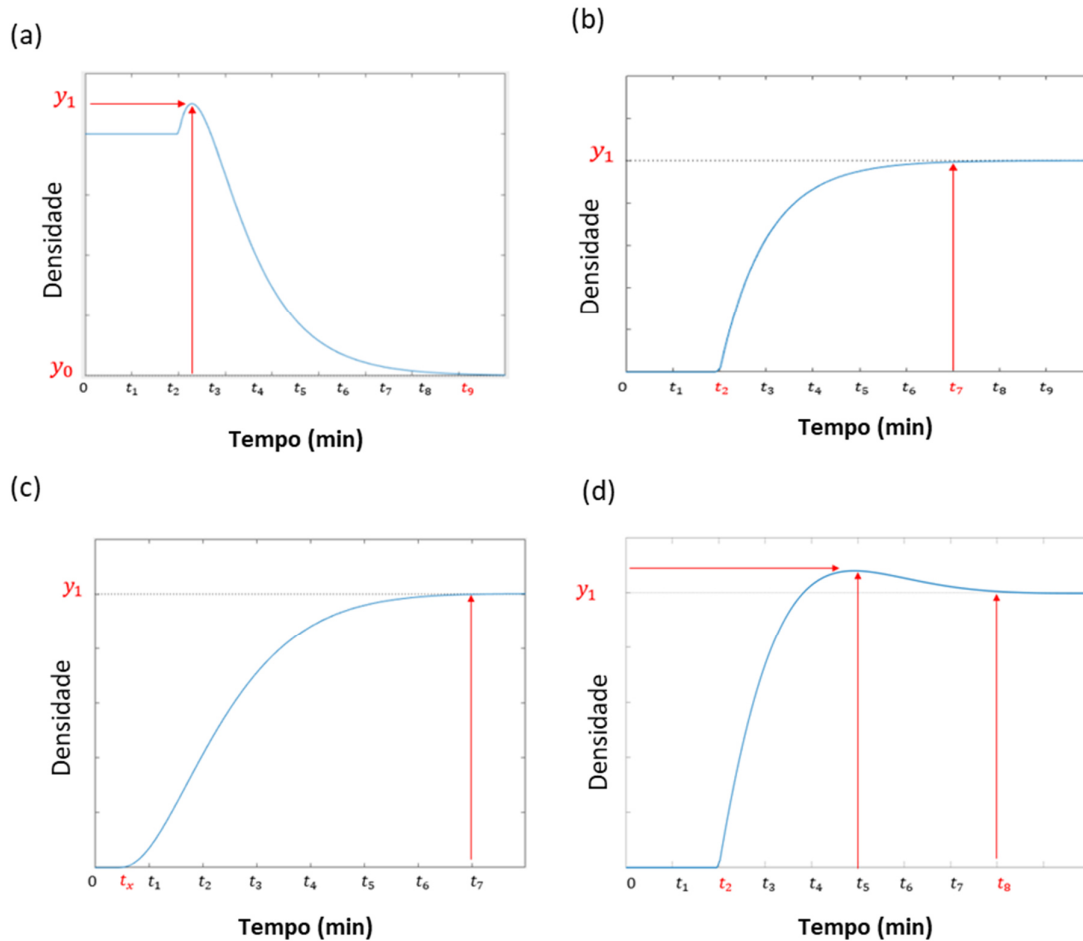


Figura VI-2. Tipos Referenciais de Respostas ao Degrau Exemplificados para a Densidade: (a) Resposta Inversa; (a) Primeira Ordem; (c) Segunda Ordem ou Ordem Superior Sobreamortecida; (d) Resposta Sobrelevada.

Essa abordagem foi utilizada para auxiliar na construção dos modelos, particularmente em relação a parâmetros ϵ / ou comportamentos para os quais havia nenhum ou poucos dados disponíveis. Assim, ela foi pensada para processos onde existem saídas não medidas e a sua dinâmica não pode ser explicitada a partir de outras variáveis, ϵ / ou para aqueles processos onde é difícil ϵ / ou impossível a realização de testes em malha aberta para identificação da sua dinâmica. Mais especificamente no caso particular aqui analisado, ela pode ser mais importante na modelagem da densidade, devido à ausência de uma variável capaz de indicar a sua dinâmica no processo, diferentemente do que ocorre com o MI em relação à pressão do reator. Outra abordagem possível é supor que, devido ao baixo tempo de residência no reator, a dinâmica da densidade é aproximadamente a mesma do MI. Nesse caso, entretanto, a resposta ao degrau do MI em relação à razão de comonomero, variável de entrada de maior ganho na densidade, foi

mínima, impossibilitando uma definição assertiva dessa dinâmica. Finalmente, é possível ainda usar uma abordagem mista, ou seja, usar a modelagem especialista para algumas variáveis de entrada e dados experimentais de variáveis de saída reais e/ ou substitutas (como a pressão do reator, por exemplo) para outras variáveis de entrada, podendo assumir (ou não), em cada caso, a mesma dinâmica para densidade e MI em relação às diferentes variáveis de entrada.

VI.3.2. Modelo Desenvolvido para o MPC

Em posse de dados históricos da planta em operação, optou-se em iniciar a construção dos modelos de MI a partir de dados reais onde cada variável de entrada tenha sofrido alterações isoladas, enquanto as demais variáveis de entrada estavam estáveis. Adicionalmente, alguns testes operacionais foram realizados a fim de identificar alguma dinâmica que não pôde ser encontrada nos dados históricos. Uma parte do modelo, em particular tomando a densidade como variável de saída, foi construída a partir do conhecimento empírico acumulado pela equipe de operação, conforme descrito no item anterior (ver também o apêndice VI.A). Em todos os casos as dinâmicas de MI e densidade foram consideradas as mesmas, pois sempre associadas às variáveis de entrada. De maneira geral, foram utilizadas as seguintes premissas:

- Considerar uma variável como estável significa que o desvio padrão dos dados não é superior a 5% do valor médio do período;
- Por ser o MI uma medida indireta da viscosidade do polímero, a pressão da reação foi utilizada para identificar a dinâmica do modelo de MI;
- A dinâmica da conversão se dá exclusivamente através da dinâmica da temperatura de saída, sendo considerada a mesma dinâmica usada para o MI e para a densidade;
- Quando necessário, informações dinâmicas foram complementadas com o conhecimento/ modelagem especialista (apêndice VI.A);
- As dinâmicas da densidade e do MI foram consideradas aproximadamente as mesmas em relação a todas as variáveis de entrada;
- Os ganhos dos modelos foram identificados a partir dos modelos de redes neurais, desenvolvidos no capítulo V, e/ ou diretamente a partir de dados históricos de operação.

A estrutura de modelo utilizada também foi definida a partir de conhecimento empírico operacional, sendo utilizadas as seguintes equações:

$$\tau_{CM} \cdot \frac{dCM_D(t)}{dt} + CM_D(t) = CM(t - t_{d,CM}) \quad \text{Eq. VI.26}$$

$$\tau_{H_2} \cdot \frac{dH_{2,D}(t)}{dt} + H_{2,D}(t) = H_2(t - t_{d,H_2}) \quad \text{Eq. VI.27}$$

$$\tau_{Et} \cdot \frac{dEt_D(t)}{dt} + Et_D(t) = Et(t - t_{d,Et}) \quad \text{Eq. VI.28}$$

$$\tau_{HTC} \cdot \frac{dHTC_D(t)}{dt} + HTC_D(t) = HTC(t - t_{d,HTC}) \quad \text{Eq. VI.29}$$

$$\tau_{DT} \cdot \frac{dDT_D(t)}{dt} + DT_D(t) = DT(t - t_{d,DT}) \quad \text{Eq. VI.30}$$

$$\rho(t) = a_{\rho,CM,1} \cdot CM_D(t) + a_{\rho,CM,2} \cdot CM_D(t)^2 + a_{\rho,CM,3} \cdot CM_D(t)^3 + a_{\rho,H_2,1} \cdot H_{2,D}(t) + a_{\rho,DT,1} \cdot DT_D(t) + a_{\rho,0} \quad \text{Eq. VI.31}$$

$$MI_h(t) = \exp[a_{MI_h,CM,1} \cdot CM_D(t) + a_{MI_h,H_2,1} \cdot H_{2,D}(t) + a_{MI_h,H_2,2} \cdot H_{2,D}(t)^2 + a_{MI_h,Et,1} \cdot Et_D(t) + a_{MI_h,HTC,1} \cdot HTC(t) + a_{MI_h,DT,1} \cdot DT_D(t) + a_{MI_h,0}] \quad \text{Eq. VI.32}$$

$$MI_l(t) = \exp[a_{MI_l,CM,1} \cdot CM_D(t) + a_{MI_l,Et,1} \cdot Et_D(t) + a_{MI_l,HTC,1} \cdot HTC_D(t) + a_{MI_l,HTC,2} \cdot HTC_D(t)^2 + a_{MI_l,DT,1} \cdot DT_D(t) + a_{MI_l,DT,2} \cdot DT_D(t)^2 + a_{MI_l,0}] \quad \text{Eq. VI.33}$$

$$T_o(t) = a_{T_o,CM,1} \cdot CM_D(t) + a_{T_o,Et,1} \cdot Et_D(t) + a_{T_o,0} \quad \text{Eq. VI.34}$$

$$DT(t) = T_o(t) - T_i(t) \quad \text{Eq. VI.35}$$

$$Q(t) = 100 \cdot \left\{ \frac{DT(t)}{[16.15 - 0.0095 \cdot DT(t)] \cdot Et(t)} - 0.06 \cdot CM(t) \right\} \quad \text{Eq. VI.36}$$

onde:

CM = relação mássica de comonômero (buteno/ eteno ou octeno/ eteno) na alimentação (X_2 no capítulo V, adimensional);

H_2 = concentração de hidrogênio da solução (X_3 no capítulo V, ppm);

Et = concentração mássica de eteno na solução (X_4 no capítulo V, %);

HTC = temperatura do tratamento térmico do catalisador (X_5 no capítulo V, °C);

DT = diferencial de temperatura da reação (Saída – Entrada) (X_9 no capítulo V, °C);

T_i = temperatura de entrada (°C);

T_o = temperatura de saída (°C);

Q = conversão (%);

τ = constantes de tempo do sistema (min);

t_d = atrasos de tempo do sistema (min);

a = coeficientes das dependências (de ordens 0, 1 e 2, denotadas pelos respectivos subscritos) das variáveis de saída em relação às variáveis de entrada (denotadas pelos subscritos saída, entrada) (unidades de medida definidas na Tabela VI.1);

os subscritos h e l referem-se a MI muito baixo (l) e MI mais alto (h), D ao efeito da dinâmica em cada variável de entrada, e os demais subscritos referem-se às variáveis de entrada e saída já definidas.

Para fins de simulação de controle, é suficiente considerar as variáveis de entrada utilizadas nas Eqs. VI.1 a VI.11. Em relação ao MI, e de acordo com o capítulo V, o diferencial de pressão do sistema (X_6 no capítulo V, kgf/cm²) e a vazão mássica total (X_8 no capítulo V, t/h) estão entre as 3 variáveis que têm menos influência, juntamente com a concentração mássica de eteno na solução, e não participam das matrizes de controle (capítulo III), diferentemente do eteno que é uma das variáveis manipuladas. O diferencial de pressão, em especial, por ser uma variável de saída diretamente ligada ao MI do polímero em produção, proporciona um ajuste fino importante ao modelo. Por outro lado, uma vez que o diferencial de pressão é utilizado, se torna obrigatória a utilização da vazão mássica total, visto que ele representa a perda de carga do sistema. Ainda em relação ao MI, é importante ressaltar que são utilizados dois diferentes modelos, um para resinas de MI mais alto (utilizado na matriz de controle 1) e outro para resinas de MI muito baixo (utilizado na matriz de controle 3), situação em que o hidrogênio não é utilizado e, portanto, não é uma variável de entrada. Em relação à densidade, o diferencial de pressão do sistema e a vazão mássica total não são considerados variáveis de entrada no capítulo V e, portanto, também não são considerados aqui. O efeito da concentração mássica de eteno na solução na densidade é capturado indiretamente pelo efeito do diferencial de temperatura (Eqs. VI.9 e VI.10), e a temperatura do tratamento térmico do catalisador tem pouca influência na densidade em resinas com alta concentração de comonomero

(baixa densidade) e baixo MI. A bem da verdade, a temperatura do tratamento térmico do catalisador tem pouca influência na densidade em qualquer resina, tendo apenas um discreto ganho positivo nessa variável de qualidade, de forma que mesmo no modelo de densidade desenvolvido no capítulo V ela poderia ter sido desconsiderada, com perdas pouco significativas para a qualidade daquele modelo. Por isso, ambas variáveis de entrada, concentração de eteno na solução e temperatura do tratamento térmico do catalisador, foram desconsideradas do modelo da densidade.

Nas Eqs. VI.6 a VI.9, os ganhos envolvidos com as diferentes variáveis de entrada (Tabela VI.1) foram ajustados com base nos modelos de redes neurais desenvolvidos no capítulo V e/ ou diretamente com ajuste de dados históricos. A Eq. VI.11, embora desenvolvida com base em conhecimentos do processo, tem uma base fenomenológica, representando a energia total liberada a partir da reação exotérmica de polimerização do eteno (energia liberada por percentual convertido de monômero e comonômero presente na solução).

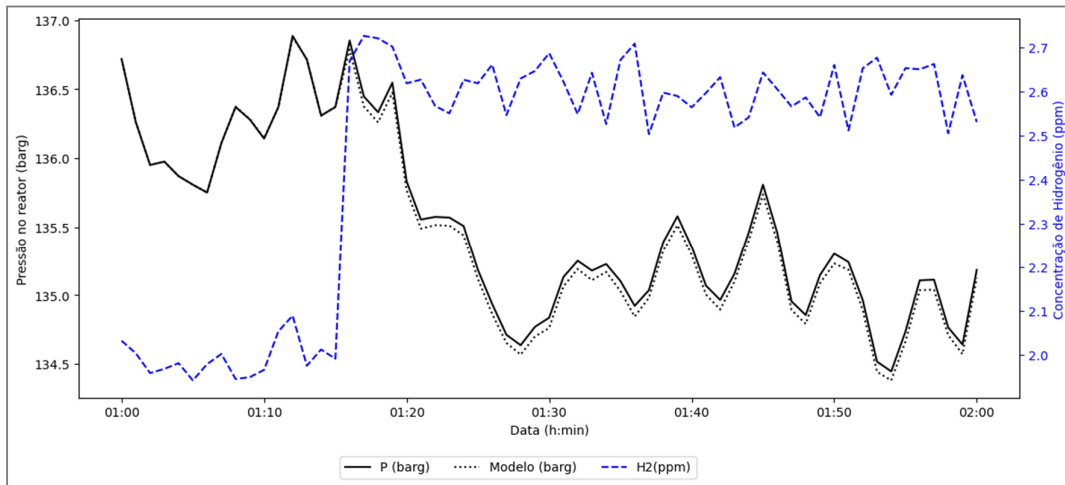
Tabela VI.1. Coeficientes das Eqs. VI.6 a VI.9

	Densidade (ρ)		Melt Index (MI)			Temperatura de saída (T_0)	
	Valor	u.m.	Valor _h	Valor _l	u.m.	Valor	u.m.
$a_{CM,1}$	$-1.4978 \cdot 10^{-1}$	$\frac{g/ml}{gCM/gEt}$	$2.550 \cdot 10^0$	$2.80 \cdot 10^0$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{gCM/gEt}$	$-2.0563 \cdot 10^0$	$\frac{^{\circ}C}{gCM/gEt}$
$a_{CM,2}$	$3.0060 \cdot 10^{-1}$	$\frac{g/ml}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^2}$	0	0	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^2}$	0	$\frac{^{\circ}C}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^2}$
$a_{CM,3}$	$-2.3740 \cdot 10^{-1}$	$\frac{g/ml}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^3}$	0	0	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^3}$	0	$\frac{^{\circ}C}{\left(\frac{gCM}{gEt}\right)^3}$
$a_{H_2,1}$	$-8.1190 \cdot 10^{-5}$	$\frac{g/ml}{ppm}$	$9.500 \cdot 10^{-3}$	0	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{ppm}$	0	$\frac{^{\circ}C}{ppm}$
$a_{H_2,2}$	0	$\frac{g/ml}{ppm^2}$	$-6.900 \cdot 10^{-4}$	0	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{ppm^2}$	0	$\frac{^{\circ}C}{ppm^2}$
$a_{Et,1}$	0	$\frac{g/ml}{\%massa}$	$8.480 \cdot 10^{-2}$	$9.88 \cdot 10^{-2}$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{\%massa}$	$8.5680 \cdot 10^0$	$\frac{^{\circ}C}{\%massa}$
$a_{HTC,1}$	0	$\frac{g/ml}{^{\circ}C}$	$-2.518 \cdot 10^{-2}$	$-3.35 \cdot 10^{-2}$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{^{\circ}C}$	0	adm.
$a_{HTC,2}$	0	$\frac{g/ml}{(^{\circ}C)^2}$	0	$1.50 \cdot 10^{-5}$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{(^{\circ}C)^2}$	0	$(^{\circ}C)^{-1}$
$a_{DT,1}$	$1.4900 \cdot 10^{-4}$	$\frac{g/ml}{^{\circ}C}$	$3.740 \cdot 10^{-2}$	$3.30 \cdot 10^{-2}$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{^{\circ}C}$	0	adm.
$a_{DT,2}$	0	$\frac{g/ml}{(^{\circ}C)^2}$	0	$-2.50 \cdot 10^{-6}$	$\frac{\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)}{(^{\circ}C)^2}$	0	$(^{\circ}C)^{-1}$
a_0	$9.1800 \cdot 10^{-1}$	g/ml	$-5.300 \cdot 10^0$	$-3.20 \cdot 10^0$	$\ln\left(\frac{g}{10\ min}\right)$	$1.1849 \cdot 10^2$	$^{\circ}C$

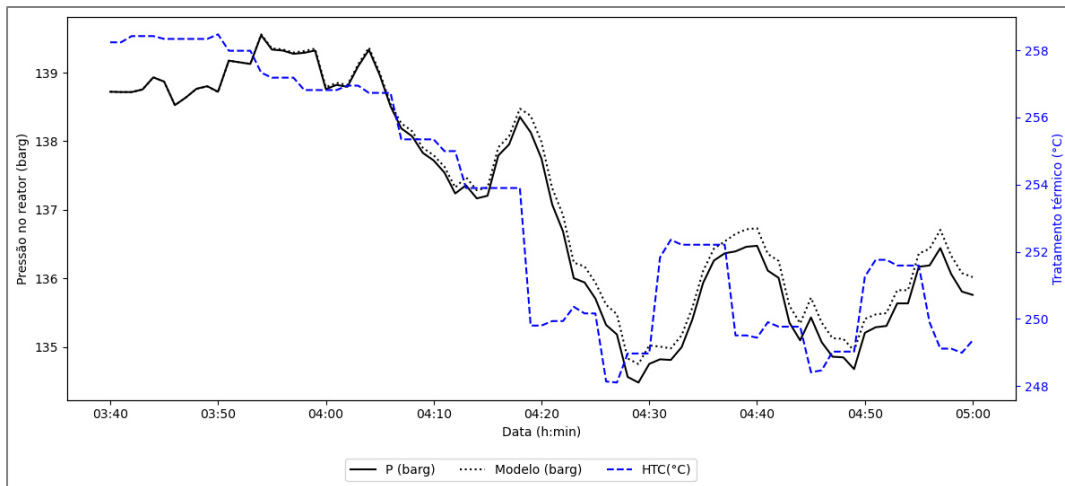
u.m.: unidade de medida.

As dinâmicas do MI relativas às variáveis H_2 , HTC e DT foram obtidas através de alguns testes operacionais realizados especificamente para esse fim, e mostrados na Figura VI.3. No teste da Figura VI.3c o diferencial de temperatura foi variado através da

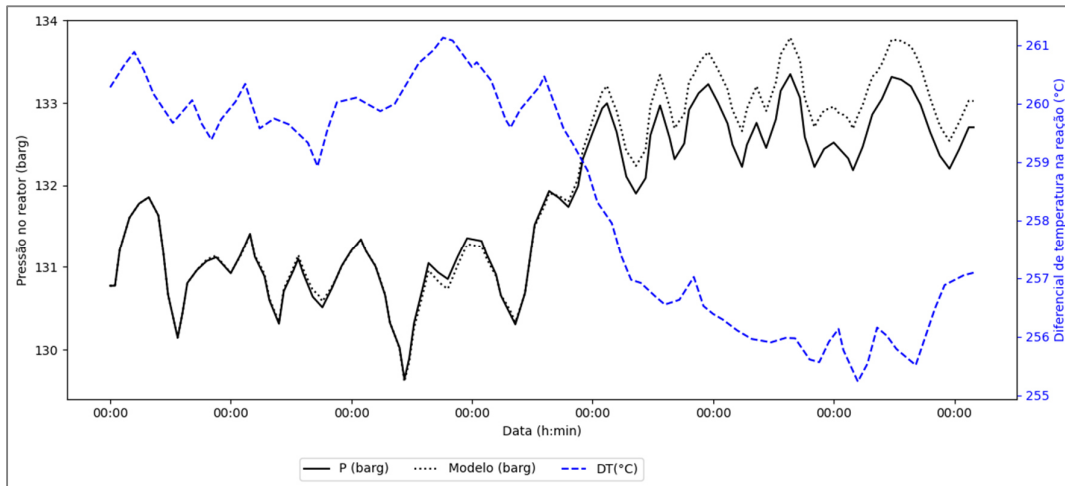
variação da concentração de alimentação de eteno (os efeitos indiretos do eteno também são considerados, ver apêndice VI.B). As dinâmicas em relação a CM e Et foram obtidas a partir de conhecimento/ modelagem especialista sobre o processo (apêndices VI.A e VI.B), porque não foi possível realizar testes sem gerar produto fora de especificação e/ ou risco de parada da planta. Nesse caso, o conhecimento especialista foi extraído em relação ao efeito do eteno e do comonômero na densidade, e as mesmas dinâmicas obtidas entre o eteno e o comonômero e a densidade foram consideradas também para o MI. Note que, nas Eq. VI.6 a VI.8, as dinâmicas de CM e Et são contempladas diretamente e também de forma indireta através da dinâmica do diferencial de temperatura (Eqs. VI.5, VI.9 e VI.10), e esses efeitos indiretos também foram considerados no estabelecimento dessas dinâmicas (ver apêndice VI.B). Deve ser observado ainda que, na Eq. VI.7 (modelo de MI para resinas com MI mais alto), a temperatura do tratamento térmico tem uma influência puramente estática, pois, para esse modelo, essa temperatura não é manipulada e, portanto, fica fixa em um valor de referência comum a todos as resinas (na verdade, em tal situação, a utilização de uma variável estática ou dinâmica produz o mesmo efeito). As dinâmicas do diferencial de temperatura (Eq. VI.10) e da conversão (Eq. VI.11) se dão através da dinâmica da temperatura de saída (Eq. VI.9) em relação às entradas CM e Et . A Tabela VI.2 apresenta os valores dos parâmetros dinâmicos obtidos para o processo. Os resultados mostrados na Figura VI.3 mostram que foram obtidos ajustes dinâmicos muito bons.



(a)



(b)



(c)

Figura VI-3. Resposta da Pressão no Reator Frente a Variações em: (a) Concentração de Hidrogênio; (b) Temperatura do Tratamento Térmico; (c) Diferencial de Temperatura na Reação.

Tabela VI.2. Parâmetros Dinâmicos (Constantes de Tempo e Atrasos de Tempo) do Processo (Unidade de Medida: min)

	CM	H_2	Et	HTC	ΔT
τ	20.2	10.2	13.5	27.0	17.0
t_d	1.0	1.0	5.0	10.0	5.0

Portanto, em termos de diagrama de blocos, o modelo final adotado para representar a planta nas simulações de controle é aquele mostrado na Figura VI.4. Este modelo também é utilizado como modelo interno do controlador MPC.

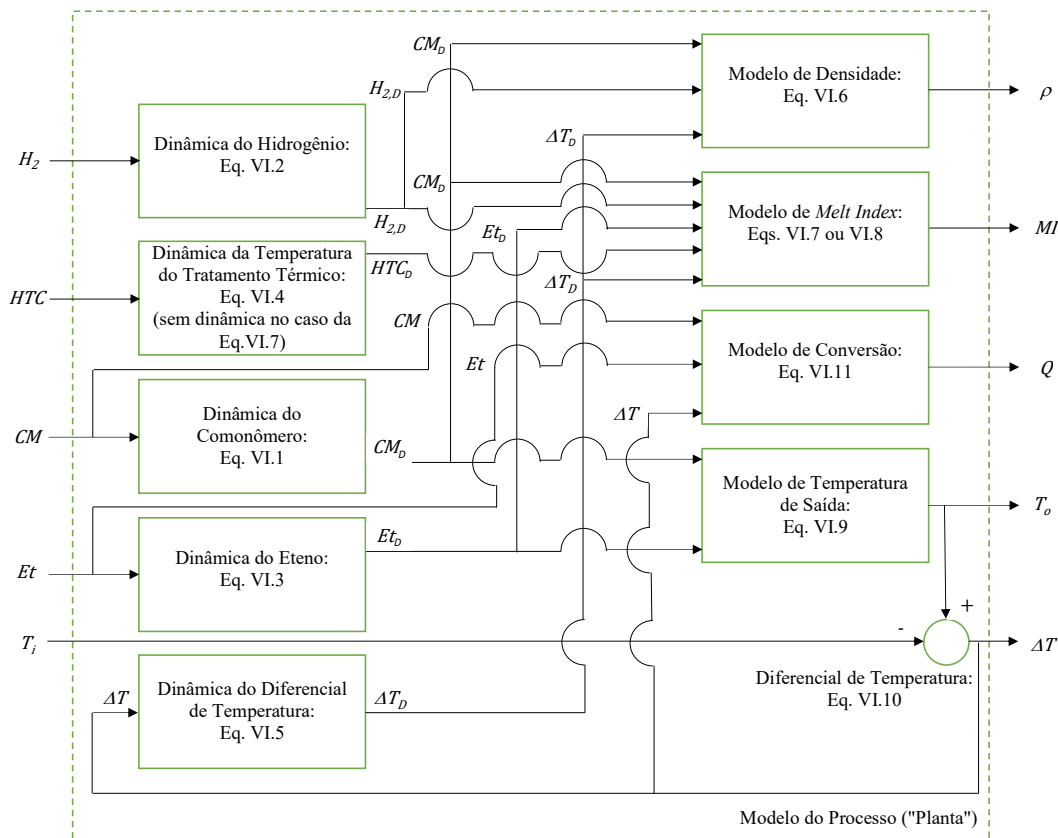


Figura VI-4. Diagrama de Blocos Representativo do Modelo do Processo ("Planta") Utilizado nas Simulações do MPC.

VI.4. O Controle de Produtividade e Conversão

A produção horária de resina ($Prod$) é calculada como a quantidade de eteno e comonômero convertida em polietileno:

$$Prod\left(\frac{ton}{h}\right) = Q \cdot Et \cdot \dot{V} \quad \text{Eq. VI.37}$$

onde:

$$\dot{V} \text{ (ton/h)} = \text{vazão total da solução.}$$

A produtividade deve ser controlada a partir de \dot{V} e o controlador deve ter um incremento máximo (*rate*) que garanta estabilidade para as demais malhas de controle da planta. Essa característica se faz necessária devido à complexidade e interação entre as áreas operacionais dessa tecnologia. Um incremento acentuado, por exemplo, pode resultar em problemas na absorção, na extrusão, na destilação, entre outras áreas. O valor dessa taxa de incremento de sinal deve ser definido a partir das malhas críticas identificadas pela equipe de engenharia e operação. Aqui, nas simulações apresentadas, o controle de produtividade não é feito.

O controle de conversão (Eq. VI.11) deve ser feito a partir da concentração de eteno na reação, sendo uma das variáveis controladas do MPC (ver capítulo III). A fim de garantir estabilidade da reação, a temperatura do meio do reator deve ser uma variável controlada por um controle regulatório simples e *setpoint* definido pelo operador de painel. A utilização de outra variável significativa, tal como a temperatura de saída ou o diferencial de temperatura, pode não ser suficiente para assegurar a estabilidade da reação, que é garantida com melhor desempenho e maior robustez utilizando a temperatura do meio do reator. A ausência dessa variável (temperatura do meio do reator) como manipulada pelo MPC para controle de propriedades visa a minimização dos custos variáveis, já que ela manipula o catalisador, um dos insumos mais caros na operação do processo.

O controle de temperatura (do meio do reator) deve ser feito a partir da concentração de catalisador na solução, em uma cascata tripla com a vazão de catalisador (ver Figura VI.5, onde o controle de temperatura, TIC, cascadeia o controle de concentração de catalisador, CIC, que cascadeia o controle de vazão de catalisador, FIC). Essa estratégia visa eliminar principalmente a interferência das impurezas, uma variável perturbação não medida, embora também ajude a compensar o efeito de perturbações medidas para essa malha de controle (p.e.: CM , Et e T_i). A Figura VI.5 mostra ainda o

controle da temperatura de entrada do sistema, que é feito através da divisão dessa alimentação de entrada por um par de trocadores de calor, um aquecendo e outro resfriando essa corrente (a utilização dessa variável como manipulada para o controle da temperatura do meio do reator é também uma opção, o que é feito em algumas plantas licenciadas dessa tecnologia). Aqui, no ambiente das simulações apresentadas, o controle de temperatura do meio do reator, assim como o de produtividade, também não é feito.

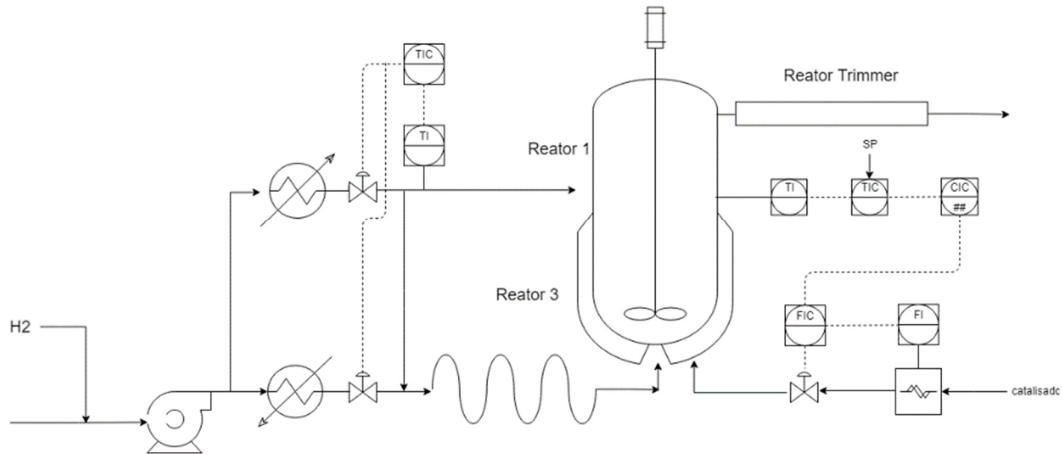


Figura VI-5. Controle de Temperatura da Reação.

VI.5. Simulação do MPC

De posse dos modelos identificados anteriormente, foi possível a execução de simulações de controle com o MPC. Para isso se utilizou da linguagem de programação Python e da biblioteca Gekko. O código foi dividido da seguinte forma, resultando no esquema de simulação do MPC mostrado na Figura VI.6:

- Construção dos modelos da planta a partir dos dados de processo, experimentos operacionais, conhecimento operacional empírico/ modelagem do especialista e redes neurais desenvolvidas no capítulo V, conforme já discutido anteriormente;
- Definição das variáveis de controle [manipuladas (relação mássica buteno/ eteno; concentração de hidrogênio; concentração mássica de eteno; temperatura do tratamento térmico) e controladas (MI; densidade; e conversão)], conforme projeto conceitual (matrizes de controle 1 e 3 do capítulo III). O problema de controle da matriz 2 não é simulado aqui, visto

que é um problema de controle mais simples (não há controle de densidade) e, portanto, se o sistema de controle projetado funciona adequadamente para as outras matrizes, o mesmo ocorrerá para a matriz 2;

- Definição das restrições (MI; densidade; conversão; relação mássica buteno/ eteno; concentração de hidrogênio; temperatura do tratamento térmico; concentração de eteno);
- Definição dos *setpoints*;
- Definição das equações de controle (Eq. VI.13). Não foram implementados os controles antecipativos (*feedforward*) relativos às variáveis perturbação temperatura da entrada do reator e temperatura do meio do reator (ver capítulo III);
- Solução do problema de controle.

$$\min_{\Delta u(k) \dots \Delta u(k+m-1)} \sum_{l=1}^p \left(\|vq_{(k+l|k)} - sp_{(k+l)}\|^2 T_l^y \right. \\ \left. + \sum_{l=1}^m \left(\|\Delta u_{(k+l-1)}\|^2 T_l^u \right) \right) \quad \text{Eq. VI.38}$$

sujeito às restrições conforme as respectivas matrizes de controle.

vq = Variável de qualidade (MI, densidade, conversão);

sp = Setpoint.

Além disso, as seguintes considerações adicionais foram assumidas nessas simulações de controle:

- Dados a qualidade dos modelos de RNA (Redes Neurais Artificiais) desenvolvidos no capítulo V, o objetivo de se acessar nesse capítulo especificamente a qualidade e a viabilidade técnica de um MPC aplicado ao processo em questão, e a necessidade de compatibilizações adicionais entre os modelos aqui desenvolvidos e as RNA do capítulo V [como, por exemplo, a inclusão adicional e a sintonia de correções de *bias* (desvio)] para a utilização de analisadores virtuais nas simulações de controle realizadas nesse capítulo, optou-se aqui por se considerar analisadores

virtuais “perfeitos” (o que é equivalente a se considerar disponíveis medições em linha das variáveis MI e densidade);

- Embora o diagrama da Figura VI.6 mostre ambas a concentração de hidrogênio e a temperatura do tratamento térmico como variáveis manipuladas, na verdade a primeira é utilizada nas simulações da matriz de controle 1, e a segunda na matriz de controle 3;
- A sintonia utilizada foi empírica (tentativa e erro), e encontrada a fim de garantir a estabilidade dos controladores, mas recomenda-se que numa implementação real as malhas sejam avaliadas previamente, a fim de garantir uma boa condição das válvulas e malhas do controle regulatório. As sintonias das matrizes de controle 1 e 3 são diferentes, até mesmo porque os modelos de MI e as variáveis manipuladas são diferentes;
- Como os controles *feedforward* relativos às variáveis perturbação não foram implementados, conforme observação anterior, optou-se aqui por considerar uma situação de controle regulador mais desafiadora, considerando uma perturbação não medida aditiva que emula o efeito de impurezas (*Imp*) do processo ($k_{\Delta T, Imp}$) representado pela variação no perfil de temperatura de reação (ΔT ; e, através deste, nas demais variáveis de saída do processo), uma vez que não é sabido o efeito das impurezas diretamente na atividade do catalisador, pois não há medição em linha das impurezas e os valores disponíveis no manual de tecnologia são para outra composição catalítica, tanto de catalisadores quanto de co-catalisadores. Essa condição reforça a importância do controle de temperatura do meio do reator, como um controle que neutraliza a ação das perturbações não medidas representadas pelas impurezas.

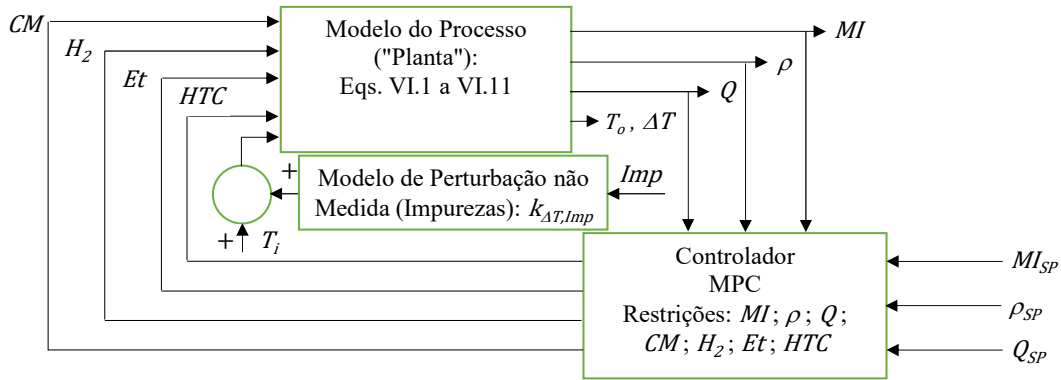


Figura VI-6. Esquemático de Simulação do MPC.

Para a simulação do problema de controle em resinas com hidrogênio (Figura VI.7) se utilizou de condições de processo típicas da unidade industrial em questão (essa simulação corresponde à matriz de controle 1 apresentada no capítulo III). Iniciou-se a condição com uma resina com características da família de rotomoldagem ($MI = 5.0$ g/10 min; densidade = 0.940). Após 20% do horizonte temporal houve uma elevação do *setpoint* da densidade para 0.955 e posteriormente uma elevação do *setpoint* de MI para 10 g/10 min (nessa figura, assim como nas seguintes, os resultados das simulações são mostrados a partir do tempo 5 min, ao invés de zero, pois os 5 primeiros minutos foram utilizados para “zerar as derivadas” e alcançar o estado estacionário inicial, sem mostrar eventuais “perturbações numéricas iniciais”). No próximo movimento as características foram ajustadas para condições da família de injeção de baixa densidade: redução do *setpoint* da densidade para 0.935; e elevação do *setpoint* de MI para 35 g/10 min. Por fim, houve uma elevação do *setpoint* de MI para 55 g/10 min, condição típica de uma resina de injeção de baixa densidade amplamente utilizada em aplicações de *masterbatch* (composto de resina plástica combinado com diferentes produtos como pigmentos e aditivos diversos) e/ ou tampas. Os resultados apresentados na Figura VI.7 mostram que em todas as condições se observou um bom comportamento do controlador, ajustando as variáveis manipuladas frente às alterações de *setpoint* em uma dada variável de qualidade e conseguindo controlar adequadamente essas variáveis de qualidade com um desempenho muito bom, de forma rápida, estável e pouca oscilatória. Em paralelo, a conversão se manteve com *setpoint* em 96% na maior parte do tempo, e durante a elevação de MI para 35 g/10 min foi feita uma redução do *setpoint* de conversão (para 94%), visto que o controlador começou a operar na restrição da concentração máxima de eteno (23%) na solução. Essa redução no *setpoint* de conversão foi feita de forma

semelhante ao que seria feito por um operador durante a operação da planta, já que, em tal situação de saturação da concentração de eteno, a conversão vai sendo perdida mesmo, como pode ser observado no gráfico de conversão da Figura VI.7 (aproximadamente entre os tempos 60 e 70 min). Portanto, essa é uma condição típica de planta, onde é necessário se ajustar o *setpoint* da conversão a fim de retirar o controlador da saturação e minimizar a geração de cera (alta conversão e alta concentração de eteno). A conversão é a variável controlada em que mais se admite variação ao redor do *setpoint*, que deve ser no máximo 96% e no mínimo 93%. Uma outra solução possível para isso seria manter a função objetivo da conversão como a atual (ou seja, minimizar a diferença para um dado valor de referência que varia para diferentes resinas, dentro da faixa mencionada) e considerar os limites supra-citados como restrições *hard*, ao invés de *soft*.

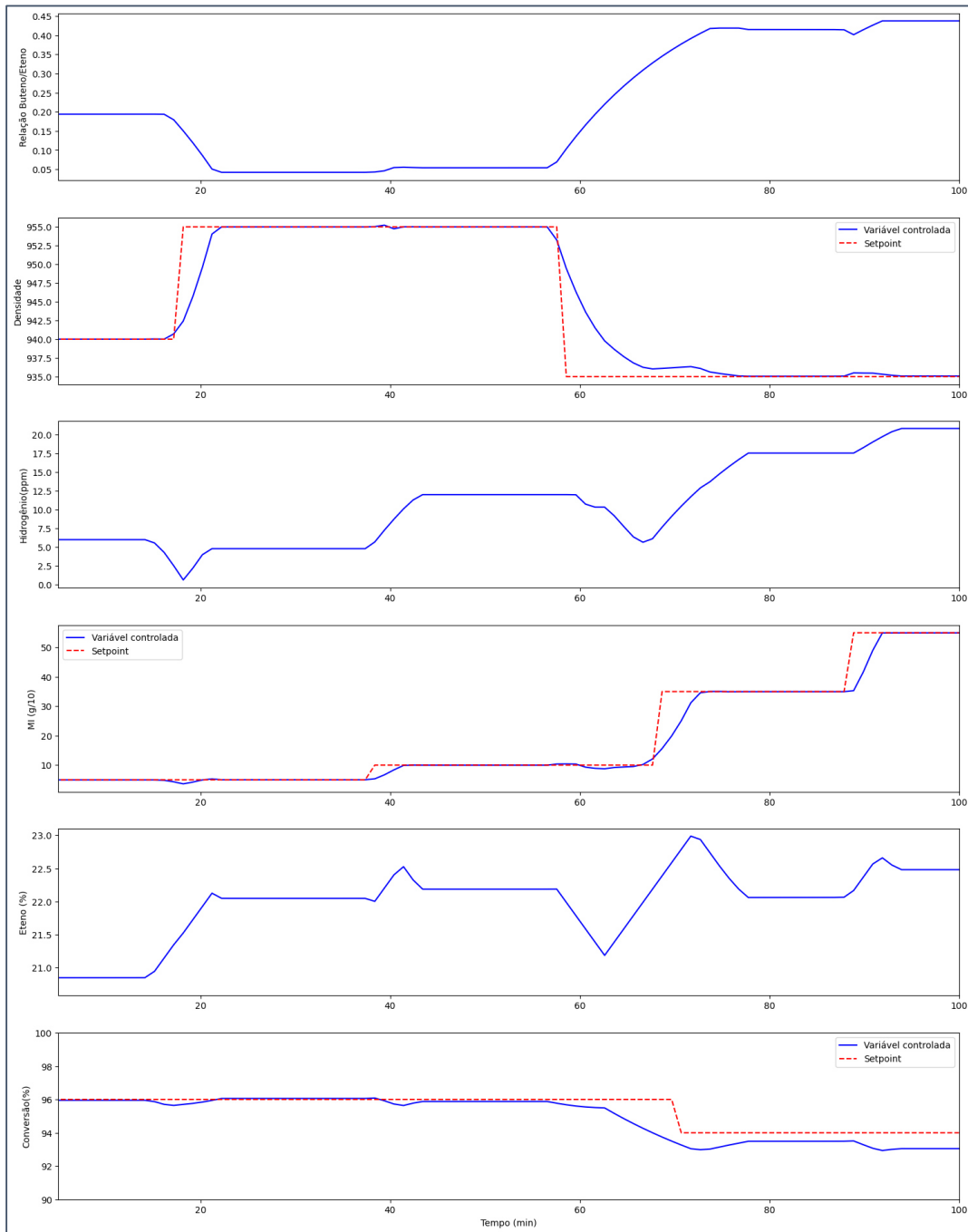


Figura VI-7. Simulações de Controle - Resinas com Hidrogênio.

Para a produção de resinas com baixo MI, onde não se utiliza o hidrogênio, a variável manipulada para controlar a propriedade MI é a temperatura do tratamento térmico do catalisador. A densidade continua sendo controlada a partir da relação mássica do comonômero. Essa condição, majoritariamente representada por resinas da família de filme, é o grande desafio para o controlador. Alguns licenciados não utilizam essa variável

(temperatura do tratamento catalítico) como variável manipulada, pois o ganho de processo dela em relação ao MI não é significativo nas plantas desses licenciados. A influência dessa temperatura no MI depende do sistema catalítico utilizado, que é diferente em diferentes licenciados. Na planta em questão há ganho de processo significativo (e, portanto, influência dessa temperatura no MI) devido às características particulares do sistema catalítico: concentração de vanádio; e ausência de corrente do diluente de alta pressão na descarga das bombas de catalisadores. Uma alternativa para controlar o MI sem a temperatura do tratamento térmico é utilizar a temperatura do meio do reator (diretamente relacionada com a conversão). Essa opção não foi utilizada visto que implica em elevação no custo variável, pois a temperatura média da reação é controlada pela concentração do catalisador na solução.

A simulação do controle em resinas de baixo MI (sem hidrogênio) se utilizou novamente de condições típicas de processo (Figura VI.8; essa simulação corresponde à matriz de controle 3 apresentada no capítulo III). Iniciou-se com uma resina que no reator tem características da família de rotomoldagem, mas é utilizada na aplicação de filme (MI = 2.0 g/10 min; densidade = 0.931). Em seguida houve uma transição para uma resina de filme (MI = 1.0 g/10 min; densidade = 0.922) e por fim para outra resina de filme, essa com MI de 0.7 g/10 min e densidade de 0.918. A conversão se iniciou com *setpoint* de 95% e foi reduzida no momento 50 para 94%, a fim de evitar que a malha de controle de concentração de eteno ficasse saturada. Os bons resultados apresentados na Figura VI.8 mostram o ajuste da razão de comonomero em função da alteração no *setpoint* da densidade. Em paralelo, o MI é controlado basicamente pela temperatura do tratamento térmico, observando-se que ela varia dentro de toda a faixa possível (200 – 260 °C), pois o processo foi submetido a condições extremas de operação. Para ultrapassar esses limites de MI seria necessário atuar em outras variáveis, como temperatura de entrada e temperatura de saída. No caso da conversão se observa que para garantir o seu valor desejado o controlador vai gradativamente reduzindo a concentração de eteno da solução, condição típica de resinas de filme.

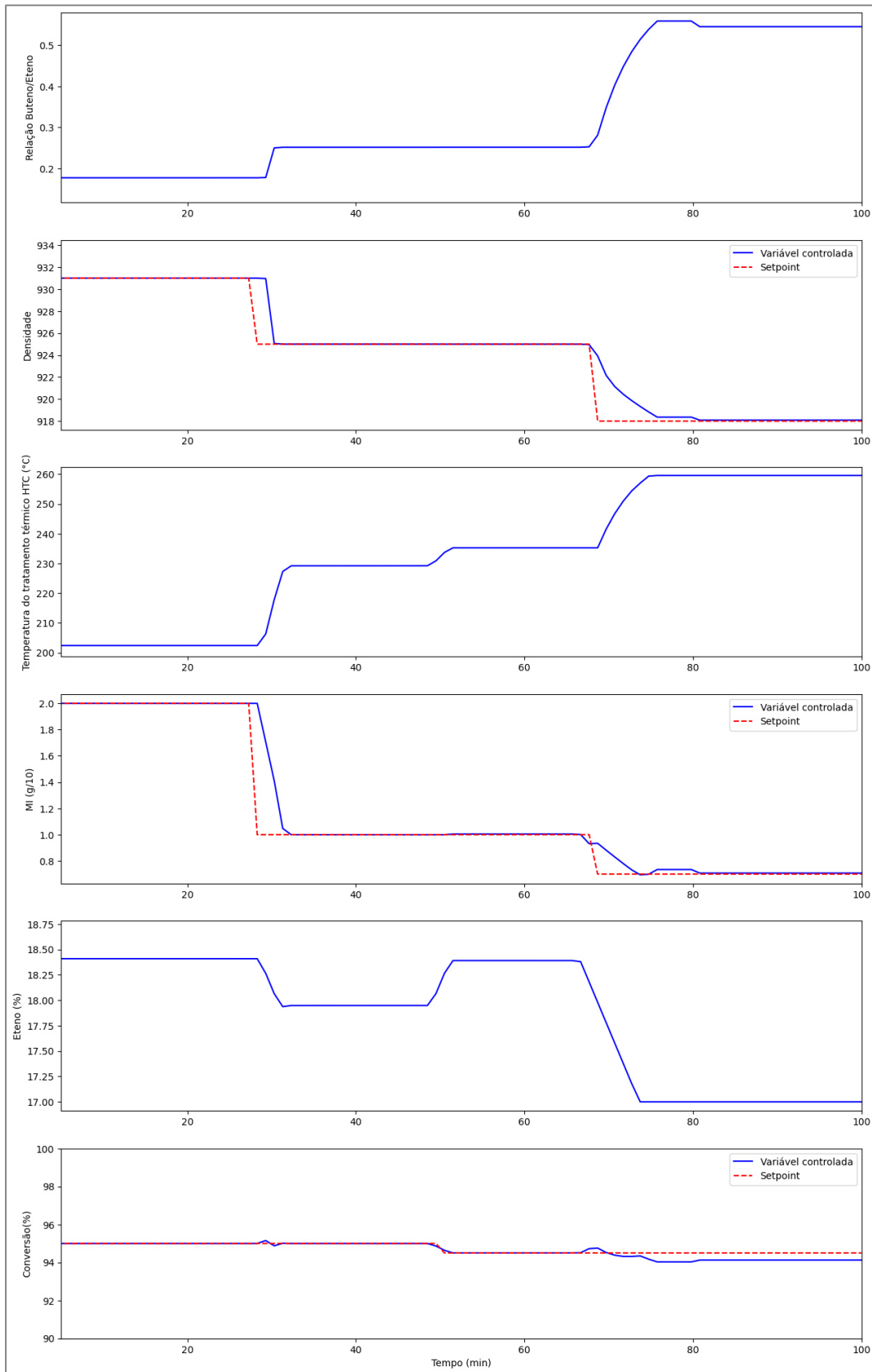


Figura VI-8. Simulações de Controle - Resinas sem Hidrogênio.

Por fim, a Figura VI.9 mostra o desempenho do APC (*Advanced Process Control*, controle avançado de processos) frente a um problema regulador simulado em uma resina da matriz de controle 1, onde é emulado, dentro do mesmo problema servo mostrado anteriormente na Figura VI.7, um aumento da concentração de impurezas no processo, resultando na redução de aproximadamente 5 °C no diferencial de temperatura no momento de tempo entre 30 e 40 min, resultando na redução de aproximadamente 1.3% na conversão da reação, com concomitante redução de 0.8 g/10 min de MI e incremento menor do que 0.0025 na densidade (uma janela entre os instantes de tempo 20 a 40 min é detalhada na Figura VI.10). Observa-se que o controlador consegue rejeitar tais perturbações de forma rápida e segura, demonstrando um comportamento adequado e satisfatório. Houve uma elevação no teor de hidrogênio, objetivando ajustar o MI, e no percentual de eteno, a fim de recompor a conversão. Por outro lado, o ajuste na densidade foi mínimo, devido ao baixo erro observado entre a variável controlada e o *setpoint*.

Dentro das respectivas faixas de operação para essas resinas, a conversão é a variável onde, mesmo com a ação do controlador para tentar controlá-la, se observa maior variação, devido ao baixo tempo de residência no reator. Embora não esteja representado nessa simulação (ou seja, nesse evento hipotético foi considerado que a malha de controle da temperatura do meio do reator estava em manual), numa situação real deste tipo a malha de controle de temperatura do meio do reator operando em automático deve elevar o sinal a fim de elevar a concentração de catalisador e, com isso, eliminar tal distúrbio e manter, dessa forma, uma condição favorável para o controle das propriedades. Esse tipo de evento hipotético é possível, porém de forma limitada, visto que devido ao baixo tempo de residência, conforme comentado anteriormente, a ação de impurezas pode resultar em parada da unidade devido à estabilidade da reação e à possibilidade de separação de fases no sistema. Algumas vezes, é necessário a ação do operador de painel, reduzindo abruptamente a carga da planta para concentrar o catalisador e, dessa forma, evitar a parada da planta. Esse exemplo demonstra a importância da malha de controle de temperatura, proposta nesse trabalho, para um controle estável das propriedades de qualidade. Portanto, aqui cabe frisar que essa simulação traz um problema de controle mais difícil do que aquele a ser enfrentado em uma eventual implementação prática, visto que, conforme descrito acima, efeitos de impurezas serão sentidos pela temperatura do meio do reator, tendo assim três potenciais ações de controle e, portanto, um potencial de controle muito maior do que o aqui simulado: i) ação do controlador da temperatura do

meio do reator, manipulando a concentração de catalisador; ii) ação antecipativa do controlador MPC; iii) ação por realimentação do controlador MPC, que foi a única das três que entrou em ação nessa simulação. Portanto, se o desempenho observado aqui já foi satisfatório, ele será ainda mais satisfatório quando as outras duas ações estiverem implementadas. Vale a pena mencionar ainda que esse problema regulador foi aplicado em uma condição com resinas de alta concentração de eteno na solução (alto diferencial de temperatura), pois para resinas de filme, onde o perfil de temperatura é menor, tal perda de perfil de temperatura resultaria em parada da unidade devido ao risco de separação de fases e consequente obstrução do sistema, resultando em uma extensa parada da unidade. Por fim, vale ser ressaltado que o problema regulador relativo à temperatura de alimentação é idêntico a esse analisado nas Figuras VI.9 e VI.10, que equivale ao mesmo problema de um aumento de 5 °C na temperatura de alimentação.

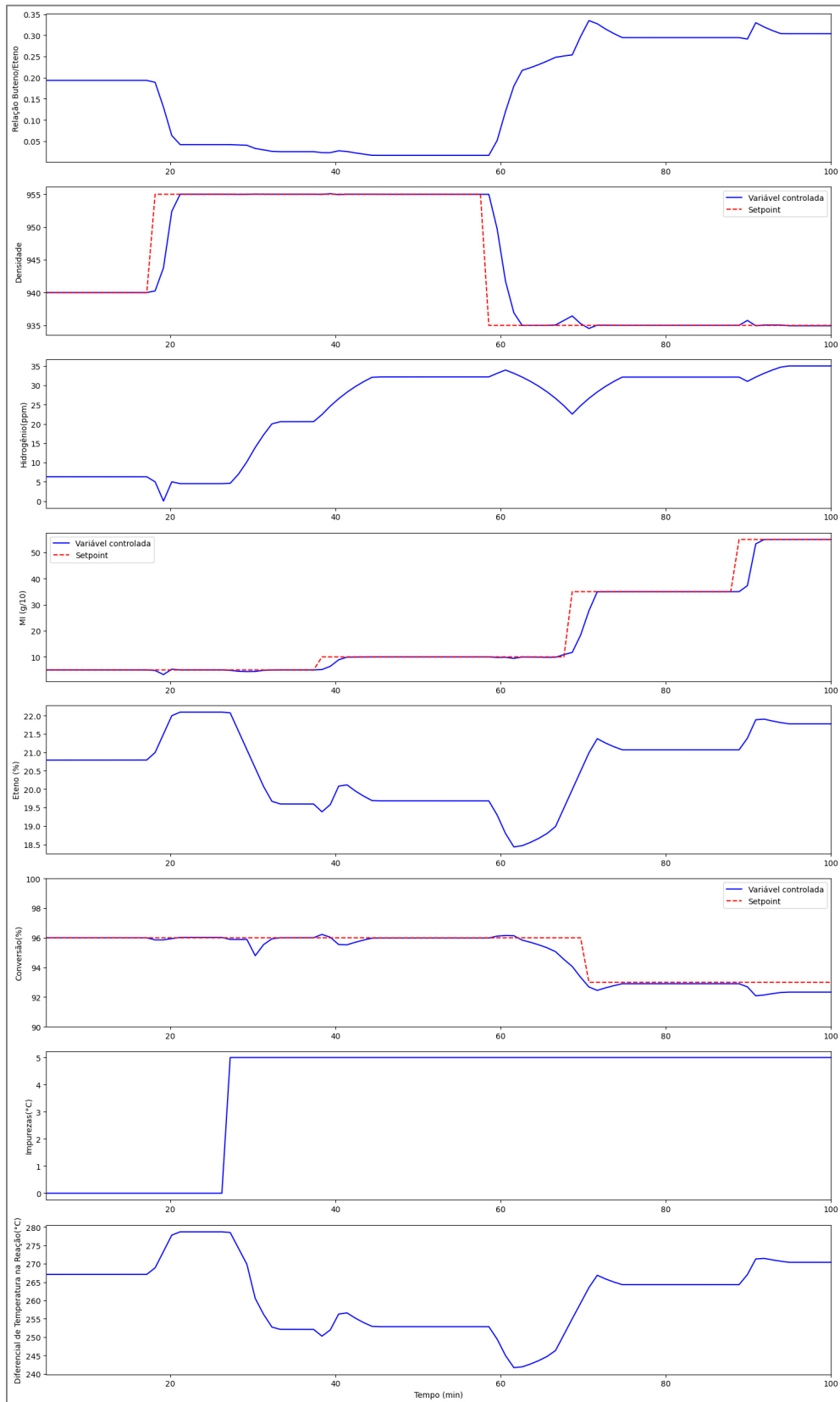


Figura VI-9. Simulações de Controle - Problema Regulador.

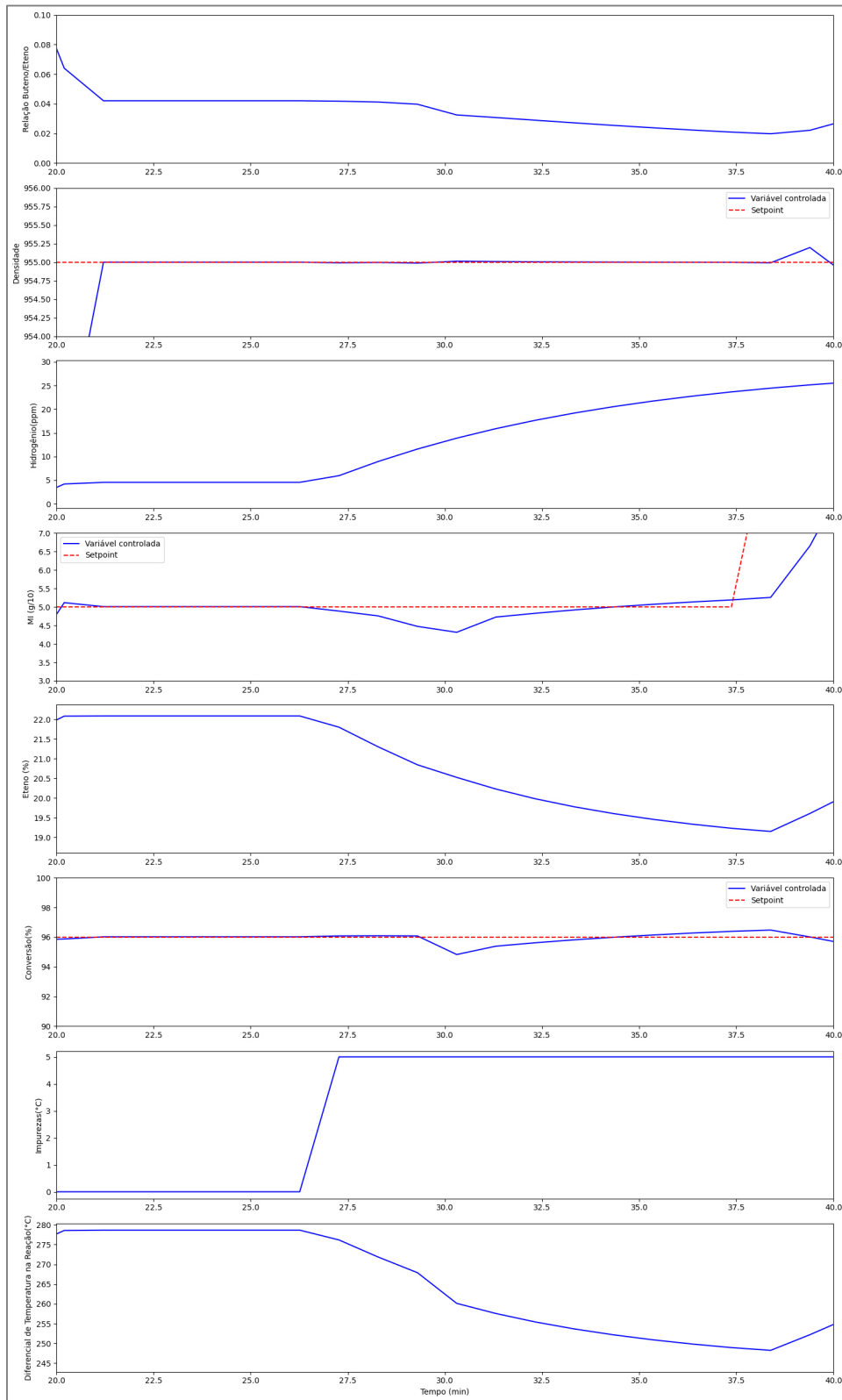


Figura VI-10. Simulações de Controle - Problema Regulador: Intervalo de Tempo 20 - 40 min.

Os controladores se comportaram de maneira satisfatória em todas as faixas operacionais exploradas. A cada alteração de *setpoint* eles conseguiram realizar a correção devida, utilizando as variáveis manipuladas a fim de garantir que a conversão e as variáveis de qualidade controladas (MI e densidade) continuassem sendo mantidas nos valores desejados. Somente o controle de conversão alcançou a restrição, mas algo semelhante era esperado, conforme comentado anteriormente. Na prática, degraus tão acentuados (nos *setpoints* de MI e densidade) não são realizados, pois podem gerar dificuldade de controle e, até mesmo, perda de perfil de reação (a programação de produção é feita de uma tal maneira que as sequências de mudanças de *setpoint* são mais suaves do que aquelas que foram simuladas aqui). Portanto, uma vez que o controle se mostra eficiente em transições “abruptas”, certamente terá desempenho satisfatório no controle de transições menos “abruptas”. Além disso, conforme mostrado e discutido na simulação do problema regulador, o sistema de controle também se mostrou eficiente na rejeição de perturbações, e de novo em condições mais severas do que aquelas que observar-se-ão em condições reais de operação. Conforme colocado anteriormente, foram considerados aqui analisadores virtuais “perfeitos”. Mas, dada a qualidade dos analisadores obtidos no capítulo V, certamente resultados semelhantes serão obtidos utilizando analisadores virtuais reais, especialmente se for utilizado um ajuste de *bias*, o que é recomendado no caso de uma implementação real.

VI.6. Conclusões

Nesse capítulo foram abordados os principais pontos para a implementação de um MPC (*Model Predictive Control*, controle preditivo baseado em modelo) em uma planta de produção de polietileno em solução. A partir de dados históricos, da realização de testes industriais e de modelagem especialista e conhecimento operacional empírico sobre o processo, foi possível desenvolver um modelo matemático satisfatório, capaz de representar bem o processo produtivo. Em resinas onde é possível utilizar hidrogênio essa variável é utilizada para controlar o MI, e para baixos valores de MI a temperatura do tratamento térmico foi a variável manipulada. Outras alternativas para o controle de MI sem o hidrogênio são possíveis, mas não foram utilizadas nesse trabalho, pois representam elevação no custo variável. O controle de densidade é realizado através da relação de comonomero em todas as resinas produzidas. As simulações realizadas demonstram que a implementação de um MPC é viável e resulta em maior estabilidade e

melhor controle das propriedades de qualidade e da conversão da planta industrial. Os resultados obtidos consideraram a hipótese de um analisador virtual perfeito, mas certamente a utilização de analisadores virtuais reais também produzirá bons resultados, em face da boa qualidade desses analisadores demonstrada no capítulo V, especialmente se for realizado um ajuste de *bias* periódico, o que é recomendado para uma implementação real.

Referências Bibliográficas

Embiruçu, M., 1998. *Modelagem, Estimação e Controle em Reatores Industriais de Polimerização de Eteno com Catálise Ziegler-Natta Solúvel*. Tese D.Sc., PEQ-COPPE-UFRJ.

Embiruçu, M.; Lima, E. L.; Pinto, J. C., 2000. *Continuous Soluble Ziegler-Natta Ethylene Polymerizations in Reactor Trains- I. Mathematical Modeling*. Journal of Applied Polymer Science (Print), v. 77, p. 1574-1590.

Embiruçu, M.; Prata, D. M.; Lima, E. L.; Pinto, J. C., 2008a. *Continuous Soluble Ziegler-Natta Ethylene Polymerizations in Reactor Trains, Part 2: Estimation of Kinetic Parameters from Industrial Data*. Macromolecular Reaction Engineering, v. 2, p. 142-160.

Embiruçu, M.; Pontes, K.; Lima, E. L.; Pinto, J. C., 2008b. *Continuous Soluble Ziegler-Natta Ethylene Polymerizations in Reactor Trains, Part 3: Influence of Operation Conditions upon Process Performance*. Macromolecular Reaction Engineering, v. 2, p. 161-175.

Maciejowski, J. M., 2002. *Predictive control: with constraints*. s.l.:Pearson education.

Pontes, K. V.; Cavalcanti, M.; Maciel Filho, R.; Embiruçu, M., 2010. *Modeling and Simulation of Ethylene and 1-Butene Copolymerization in Solution with a Ziegler-Natta Catalyst*. International Journal of Chemical Reactor Engineering, v. 8, p. A7.

Apêndice VI.A. Resultados dos Questionários Aplicados aos Especialistas - Densidade

Nas figuras abaixo são apresentados os resultados da aplicação dos questionários de conhecimento empírico/ modelagem especialista, especificamente para a densidade, que são informações acumuladas pela equipe de operação que também foram utilizadas para construir parte do modelo utilizado nas simulações realizadas neste capítulo. A Figura V.11 mostra os resultados em relação ao efeito da razão buteno/ eteno na densidade, a Figura V.12 mostra os resultados relativos ao efeito da concentração de eteno, a Figura V.13 mostra os resultados do efeito da concentração de hidrogênio, e a Figura V.14 apresenta os resultados relativos ao diferencial de temperatura da reação. Em

todos os casos, são consideradas três diferentes situações em relação à variação da variável de entrada $e/$ ou em reação ao valor base inicial da variável de saída (nesse caso, a densidade). Nessas figuras, a nomenclatura relativa aos modelos de resposta ao degrau está conforme a Figura VI.2, onde $a=1$, $b=2$, $c=3$ e $d=4$. Vale destacar ainda que a temperatura do tratamento térmico também estava no questionário, mas foi consenso dos especialistas que essa variável tem pouco ou nenhuma interferência na densidade do polímero, conforme já mencionado na seção VI.3.2.

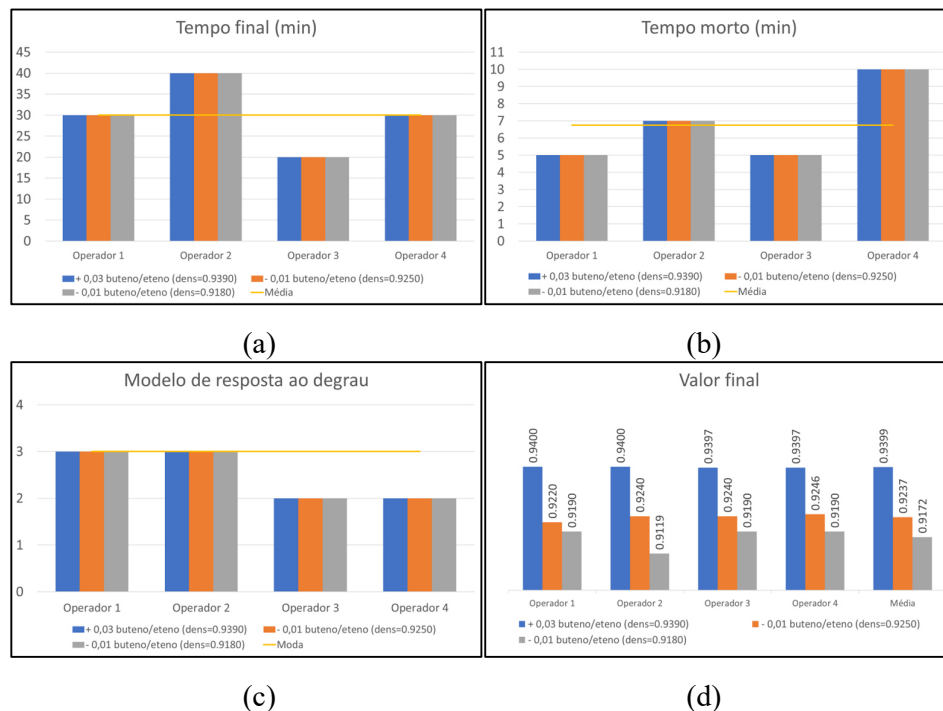


Figura VI-11. Respostas Resultado do Degrau na Razão Buteno/ Eteno em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.

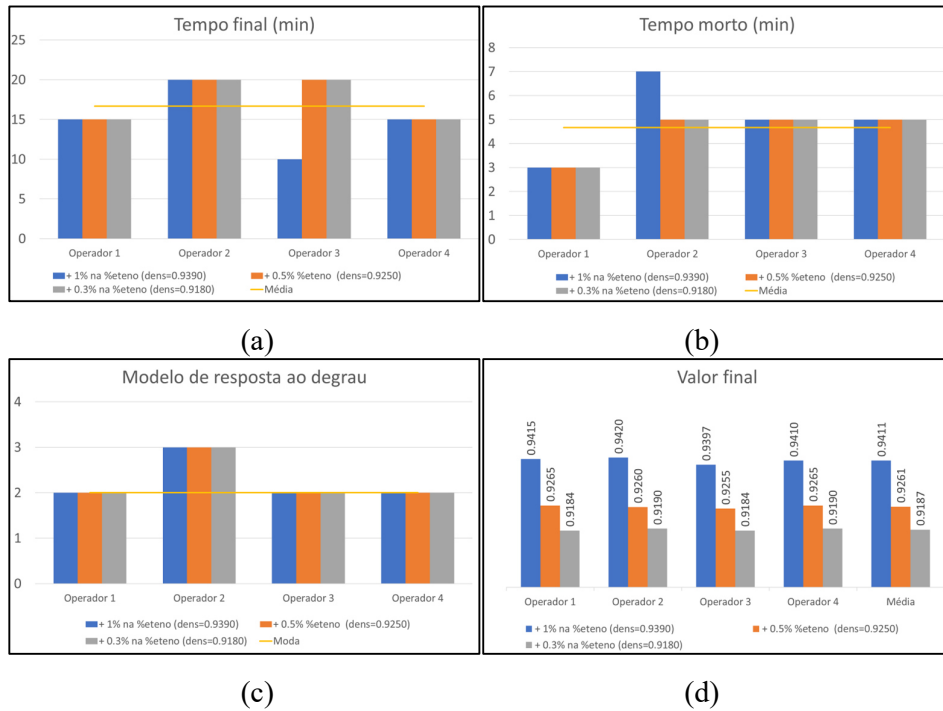


Figura VI-12. Respostas Resultado do Degrau na Concentração de Eteno em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.

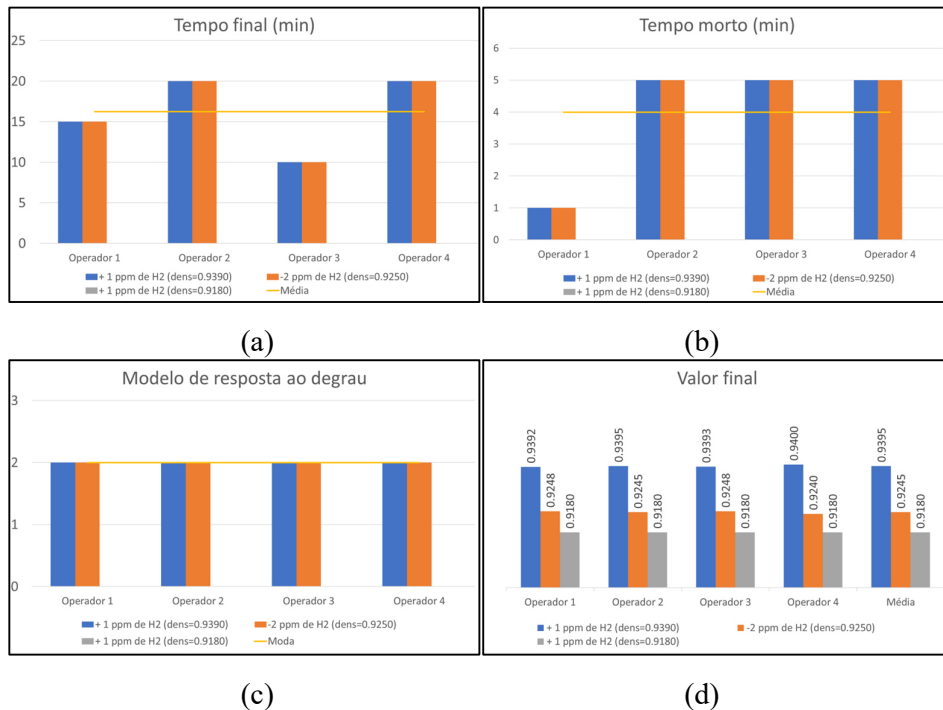


Figura VI-13. Respostas Resultado do Degrau na Concentração de Hidrogênio em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.

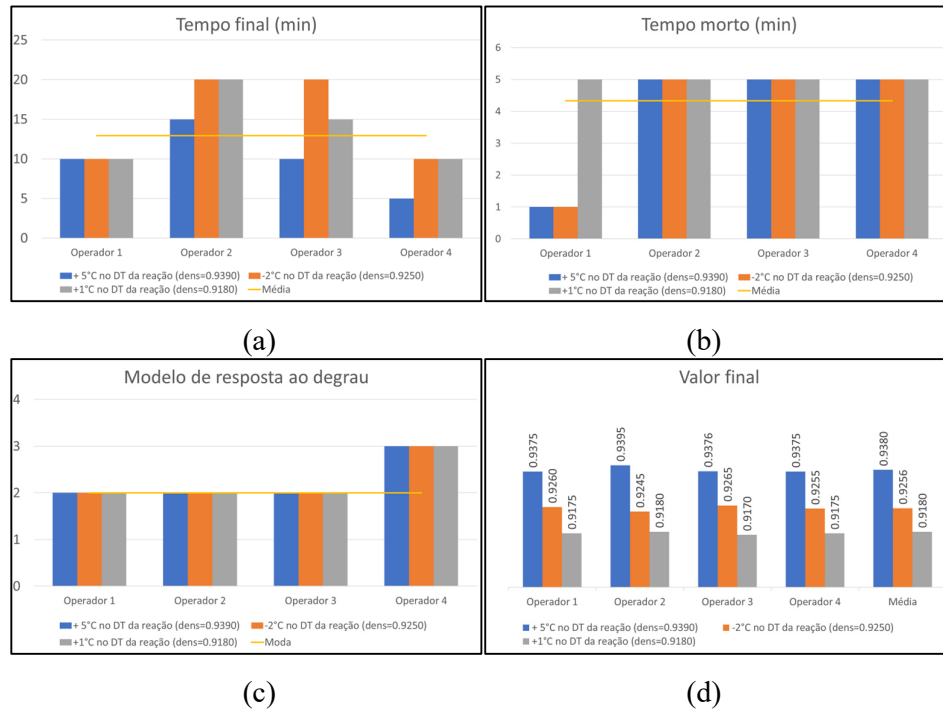


Figura VI-14. Respostas Resultado do Degrau no Diferencial de Temperatura da Reação em Três Diferentes Situações: (a) Tempo Final (min); (b) Tempo Morto (min); (c) Modelo de Resposta ao Degrau; (d) Valor Final.

Apêndice VI.B. Relações Dinâmicas entre Variáveis de Entrada e Saída e Utilização da Modelagem Especialista na Construção do Modelo Usado nas Simulações

Para a análise aqui realizada, é utilizada uma versão linearizada do modelo desenvolvido na seção VI.3.2, Eqs. VI.1 a VI.11. Utilizando variáveis desvio e fazendo a Transformada de Laplace (TL) das Eqs. VI.1 a VI.5:

$$\tau_{CM} \cdot s \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + \overline{CM}_{D,v}(s) = \overline{CM}_v(s) \cdot \exp(-s \cdot t_{d,CM}) \quad \text{Eq. VI.39}$$

$$\frac{\overline{CM}_{D,v}(s)}{\overline{CM}_v(s)} = \frac{\exp(-s \cdot t_{d,CM})}{\tau_{CM} \cdot s + 1} = G_{CM}(s) \quad \text{Eq. VI.40}$$

$$\frac{\overline{H}_{2,D,v}(s)}{\overline{H}_{2,v}(s)} = \frac{\exp(-s \cdot t_{d,H2})}{\tau_{H2} \cdot s + 1} = G_{H2}(s) \quad \text{Eq. VI.41}$$

$$\frac{\overline{Et}_{D,v}(s)}{\overline{Et}_v(s)} = \frac{\exp(-s \cdot t_{d,Et})}{\tau_{Et} \cdot s + 1} = G_{Et}(s) \quad \text{Eq. VI.42}$$

$$\frac{\overline{HTC}_{D,v}(s)}{\overline{HTC}_v(s)} = \frac{\exp(-s \cdot t_{d,HTC})}{\tau_{HTC} \cdot s + 1} = G_{HTC}(s) \quad \text{Eq. VI.43}$$

$$\frac{\overline{DT}_{D,v}(s)}{\overline{DT}_v(s)} = \frac{\exp(-s \cdot t_{d,DT})}{\tau_{DT} \cdot s + 1} = G_{DT}(s) \quad \text{Eq. VI.44}$$

onde:

s = variável de Laplace;

e os subscritos 0 e v referem-se ao estado de referência adotado e às variáveis desvio, respectivamente, e a linha superior indica a variável no domínio de Laplace.

Utilizando variáveis desvio e fazendo a TL das Eqs. VI.9 e VI.10:

$$\overline{T}_{o,v}(s) = a_{T_o,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{T_o,Et,1} \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) \quad \text{Eq. VI.45}$$

$$\overline{DT}_v(s) = \overline{T}_{o,v}(s) - \overline{T}_{i,v}(s) \quad \text{Eq. VI.46}$$

A primeira questão a ser abordada aqui é, conforme colocado na seção VI.3.2, o fato de que os efeitos indiretos do eteno também foram considerados na modelagem da dinâmica do diferencial de temperatura, que foi obtida através de dados experimentais específicos onde esse diferencial de temperatura foi variado através da variação da concentração de alimentação de eteno (Figura VI.3c). Nesse caso, considerando a seguinte mudança de variável [essa mudança de variável é bem natural, já que a relação entre o MI e o diferencial de pressão é uma relação aproximadamente linear quando se considera o logaritmo dessas variáveis (Embiruçu, 1998; Embiruçu *et al.*, 2000, 2008a, b; Pontes *et al.*, 2010)]:

$$lMI(t) = \beta \cdot \ln[MI(t)] + \alpha \quad \text{Eq. VI.47}$$

onde α e β são constantes que ajustam um modelo linear entre o logaritmo do diferencial de pressão e o logaritmo do MI (Embiruçu, 1998; Embiruçu *et al.*, 2000, 2008a; Pontes *et al.*, 2010), e considerando também uma formulação genérica para o modelo de MI (Eqs. VI.7 e VI.8):

$$\begin{aligned}
 lMI(t) = \beta \cdot [& a_{MI,CM,1} \cdot CM_D(t) + a_{MI,H2,1} \cdot H_{2,D}(t) + a_{MI,H2,2} \cdot H_{2,D}(t)^2 \\
 & + a_{MI,Et,1} \cdot Et_D(t) + a_{MI,HTC,1} \cdot HTC_D(t) + a_{MI,HTC,2} \\
 & \cdot HTC_D(t)^2 + a_{MI,DT,1} \cdot DT_D(t) + a_{MI,DT,2} \cdot DT_D(t)^2 \\
 & + a_{MI,0}] + \alpha
 \end{aligned} \tag{Eq. VI.48}$$

é possível fazer a linearização da Eq. 23, utilizar variáveis desvio e fazer a TL:

$$\begin{aligned}
 lMI_v(t) = \beta \cdot [& a_{MI,CM,1} \cdot CM_{D,v}(t) + a_{MI,H2,0} \cdot H_{2,D,v}(t) + a_{MI,Et,1} \\
 & \cdot Et_{D,v}(t) + a_{MI,HTC,0} \cdot HTC_{D,v}(t) + a_{MI,DT,0} \cdot DT_{D,v}(t)]
 \end{aligned} \tag{Eq. VI.49}$$

$$a_{MI,H2,0} = a_{MI,H2,1} + 2 \cdot a_{MI,H2,2} \cdot H_{2,D,0} \tag{Eq. VI.50}$$

$$a_{MI,HTC,0} = a_{MI,HTC,1} + 2 \cdot a_{MI,HTC,2} \cdot HTC_{D,0} \tag{Eq. VI.51}$$

$$a_{MI,DT,0} = a_{MI,DT,1} + 2 \cdot a_{MI,DT,2} \cdot DT_{D,0} \tag{Eq. VI.52}$$

$$\begin{aligned}
 \overline{lMI}_v(s) = \beta \cdot [& a_{MI,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,H2,0} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{MI,Et,1} \\
 & \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) + a_{MI,HTC,0} \cdot \overline{HTC}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot \overline{DT}_{D,v}(s)]
 \end{aligned} \tag{Eq. VI.53}$$

Substituindo as Eqs. VI.15 a VI.21 na Eq. VI.28, e eliminado Et ao invés de DT :

$$\begin{aligned}
 \frac{\overline{lMI}_v(s)}{\beta} &= a_{MI,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,H2,0} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{MI,Et,1} \\
 & \cdot \left[\frac{\overline{DT}_v(s) + \overline{T}_{i,v}(s) - a_{To,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s)}{a_{To,Et,1}} \right] + a_{MI,HTC,0} \\
 & \cdot \overline{HTC}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot \overline{DT}_{D,v}(s) = \\
 &= a_{MI,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,H2,0} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + \frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} \cdot \overline{DT}_v(s) + \frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} \\
 & \cdot \overline{T}_{i,v}(s) - \frac{a_{MI,Et,1} \cdot a_{To,CM,1}}{a_{To,Et,1}} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,HTC,0} \\
 & \cdot \overline{HTC}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot \overline{DT}_{D,v}(s) = \\
 &= \left[a_{MI,CM,1} - \frac{a_{MI,Et,1} \cdot a_{To,CM,1}}{a_{To,Et,1}} \right] \cdot G_{CM}(s) \cdot \overline{CM}_v(s) + a_{MI,H2,0} \cdot G_{H2}(s) \\
 & \cdot \overline{H}_{2,v}(s) + \left[\frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} + a_{MI,DT,0} \cdot G_{DT}(s) \right] \cdot \overline{DT}_v(s) \\
 & + a_{MI,HTC,0} \cdot G_{HTC}(s) \cdot \overline{HTC}_v(s) + \frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} \cdot \overline{T}_{i,v}(s)
 \end{aligned} \tag{Eq. VI.54}$$

Na equação acima, G_{DT} pode ser determinada através da Função de Transferência (FT) obtida no experimento apresentado na Figura VI.3c ($G_{DT,FVI3c}$, FT do logaritmo do diferencial de pressão) da seguinte forma:

$$G_{DT,FVI3c}(s) = \beta \cdot \left[\frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} + a_{MI,DT,0} \cdot G_{DT}(s) \right] \quad \text{Eq. VI.55}$$

$$G_{DT}(s) = \frac{1}{a_{MI,DT,0}} \cdot \left[\frac{G_{DT,FVI3c}(s)}{\beta} - \frac{a_{MI,Et,1}}{a_{To,Et,1}} \right]$$

A determinação de G_{H2} e G_{HTC} , conforme mencionado na seção VI.3.2, é mais direta, através das FT obtidas nos experimentos apresentados nas Figura VI.3a e Figura VI.3b ($G_{H2,FVI3a}$ e $G_{HTC,FVI3b}$, FT do logaritmo do diferencial de pressão):

$$\beta \cdot a_{MI,H2,0} \cdot G_{H2}(s) = G_{H2,FVI3a}(s) \Rightarrow G_{H2}(s) = \frac{G_{H2,FVI3a}(s)}{\beta \cdot a_{MI,H2,0}} \quad \text{Eq. VI.56}$$

$$\beta \cdot a_{MI,HTC,0} \cdot G_{HTC}(s) = G_{HTC,FVI3b}(s) \Rightarrow G_{HTC}(s) = \frac{G_{HTC,FVI3b}(s)}{\beta \cdot a_{MI,HTC,0}} \quad \text{Eq. VI.57}$$

A Eq. VI.29 poderia ainda ser utilizada para determinar a FT do comonômero usando modelos de MI desenvolvidos a partir de conhecimento especialista, conforme será descrito na sequência com modelos de especialistas da densidade, assim como, na sua versão explicitada em termos de Et ao invés de DT :

$$\begin{aligned} \overline{MI}_v(s) &= a_{MI,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,H2,0} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{MI,Et,1} \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) \\ &\quad + a_{MI,HTC,0} \cdot \overline{HTC}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot G_{DT}(s) \\ &\quad \cdot [a_{To,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{To,Et,1} \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) - \overline{T}_{i,v}(s)] = \\ &= a_{MI,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,H2,0} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{MI,Et,1} \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) \quad \text{Eq. VI.58} \\ &\quad + a_{MI,HTC,0} \cdot \overline{HTC}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot a_{To,CM,1} \cdot G_{DT}(s) \\ &\quad \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{MI,DT,0} \cdot a_{To,Et,1} \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) \\ &\quad - a_{MI,DT,0} \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{T}_{i,v}(s) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 = & \left[a_{MI,CM,1} + a_{MI,DT,0} \cdot a_{To,CM,1} \cdot G_{DT}(s) \right] \cdot G_{CM}(s) \cdot \overline{CM}_v(s) + a_{MI,H2,0} \\
 & \cdot G_{H2}(s) \cdot \overline{H}_{2,v}(s) + \left[a_{MI,Et,1} + a_{MI,DT,0} \cdot a_{To,Et,1} \cdot G_{DT}(s) \right] \\
 & \cdot G_{Et}(s) \cdot \overline{Et}_v(s) + a_{MI,HTC,0} \cdot G_{HTC}(s) \cdot \overline{HTC}_v(s) \\
 & - a_{MI,DT,0} \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{T}_{i,v}(s)
 \end{aligned}$$

poderia ser também determinada a FT do eteno, bem como a do comonômero, a partir do conhecimento especialista dessas variáveis e também da FT do diferencial de temperatura

Linearizando a Eq. VI.6, utilizando variáveis desvio e fazendo a TL:

$$\rho_v(t) = a_{\rho,CM,0} \cdot CM_{D,v}(t) + a_{\rho,H2,1} \cdot H_{2,D,v}(t) + a_{\rho,DT,1} \cdot DT_{D,v}(t) \quad \text{Eq. VI.59}$$

$$a_{\rho,CM,0} = a_{\rho,CM,1} + 2 \cdot a_{\rho,CM,2} \cdot CM_{D,0} + 3 \cdot a_{\rho,CM,3} \cdot CM_{D,0}^2 \quad \text{Eq. VI.60}$$

$$\bar{\rho}_v(s) = a_{\rho,CM,0} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{\rho,H2,1} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{\rho,DT,1} \cdot \overline{DT}_{D,v}(s) \quad \text{Eq. VI.61}$$

O formato apresentado pela Eq. VI.36 já seria suficiente para obter o efeito do comonômero (as FT das outras duas variáveis de entrada, conforme mostrado e discutido anteriormente, já foram determinadas através de dados experimentais, o que é preferível), não sendo necessária nenhuma manipulação algébrica adicional, já que o Et não é uma variável de entrada explícita. No entanto, como é necessário obter também a FT em relação ao eteno, e por uma questão de consistência, optou-se por utilizar a versão do modelo da densidade explícito no Et (seria possível, também, obter uma espécie de “modelo médio” a partir de diferentes abordagens, particularmente se fossem utilizadas também informações especialistas relativas ao MI). Dessa forma, substituindo as Eqs. VI.15, VI.16 e VI.19 a VI.21 na Eq. VI.36:

$$\begin{aligned}
 \bar{\rho}_v(s) &= a_{\rho,CM,0} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{\rho,H2,1} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{\rho,DT,1} \cdot G_{DT}(s) \\
 & \cdot \left[a_{To,CM,1} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{To,Et,1} \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) - \overline{T}_{i,v}(s) \right] = \\
 &= a_{\rho,CM,0} \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{\rho,H2,1} \cdot \overline{H}_{2,D,v}(s) + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{To,CM,1} \cdot G_{DT}(s) \\
 & \cdot \overline{CM}_{D,v}(s) + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{To,Et,1} \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{Et}_{D,v}(s) - a_{\rho,DT,1} \\
 & \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{T}_{i,v}(s) = \quad \text{Eq. VI.62} \\
 &= \left[a_{\rho,CM,0} + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{To,CM,1} \cdot G_{DT}(s) \right] \cdot G_{CM}(s) \cdot \overline{CM}_v(s) + a_{\rho,H2,1} \\
 & \cdot G_{H2}(s) \cdot \overline{H}_{2,v}(s) + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{To,Et,1} \cdot G_{DT}(s) \cdot G_{Et}(s) \\
 & \cdot \overline{Et}_v(s) - a_{\rho,DT,1} \cdot G_{DT}(s) \cdot \overline{T}_{i,v}(s)
 \end{aligned}$$

Portanto, considerando conhecida a FT do diferencial de temperatura, conforme desenvolvido anteriormente, as FT do comonômero e do eteno podem ser determinadas a partir dos modelos obtidos através do conhecimento especialista:

$$\begin{aligned} [a_{\rho,CM,0} + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{T_0,CM,1} \cdot G_{DT}(s)] \cdot G_{CM}(s) &= G_{\rho,CM,esp}(s) \\ G_{CM}(s) &= \frac{G_{\rho,CM,esp}(s)}{a_{\rho,CM,0} + a_{\rho,DT,1} \cdot a_{T_0,CM,1} \cdot G_{DT}(s)} \end{aligned} \quad \text{Eq. VI.63}$$

$$\begin{aligned} a_{\rho,DT,1} \cdot a_{T_0,Et,1} \cdot G_{DT}(s) \cdot G_{Et}(s) &= G_{\rho,Et,esp}(s) \\ G_{Et}(s) &= \frac{G_{\rho,Et,esp}(s)}{a_{\rho,DT,1} \cdot a_{T_0,Et,1} \cdot G_{DT}(s)} \end{aligned} \quad \text{Eq. VI.64}$$

onde o subscrito *esp* refere-se ao modelo desenvolvido a partir do conhecimento especialista (Figuras VI.11 e VI.12 no caso do comonômero e do eteno, respectivamente).

Por fim, em nome da completude, é desenvolvido abaixo também o modelo da conversão. Dessa forma, linearizando a Eq. VI.11, usando variáveis desvio e fazendo a TL:

$$Q_v(t) = a_{Q,DT,0} \cdot DT_v(t) + a_{Q,Et,0} \cdot Et_v(t) + a_{Q,CM,0} \cdot CM_v(t) \quad \text{Eq. VI.65}$$

$$a_{Q,DT,0} = \frac{100 \cdot 16.15}{(16.15 - 0.0095 \cdot DT_0)^2 \cdot Et_0} \quad \text{Eq. VI.66}$$

$$a_{Q,Et,0} = \frac{-100 \cdot DT_0}{(16.15 - 0.0095 \cdot DT_0) \cdot Et_0^2} \quad \text{Eq. VI.67}$$

$$a_{Q,CM,0} = -6 \quad \text{Eq. VI.68}$$

$$\bar{Q}_v(s) = a_{Q,DT,0} \cdot \bar{DT}_v(s) + a_{Q,Et,0} \cdot \bar{Et}_v(s) + a_{Q,CM,0} \cdot \bar{CM}_v(s) \quad \text{Eq. VI.69}$$

Utilizando as Eqs. 20 e 21, é possível explicitar a conversão em termos do etileno:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_v(s) &= a_{Q,DT,0} \cdot [a_{T_0,CM,1} \cdot \bar{CM}_{D,v}(s) + a_{T_0,Et,1} \cdot \bar{Et}_{D,v}(s) - \bar{T}_{i,v}(s)] \\ &\quad + a_{Q,Et,0} \cdot \bar{Et}_v(s) + a_{Q,CM,0} \cdot \bar{CM}_v(s) = \\ &= [a_{Q,CM,0} + a_{Q,DT,0} \cdot a_{T_0,CM,1} \cdot G_{CM}(s)] \cdot \bar{CM}_v(s) \\ &\quad + [a_{Q,Et,0} + a_{Q,DT,0} \cdot a_{T_0,Et,1} \cdot G_{Et}(s)] \cdot \bar{Et}_v(s) - a_{Q,DT,0} \\ &\quad \cdot \bar{T}_{i,v}(s) \end{aligned} \quad \text{Eq. VI.70}$$

mas não em termos do diferencial de temperatura, pois nesse caso resultaria em um modelo não realizável:

$$\begin{aligned} \bar{Q}_v(s) &= a_{Q,DT,0} \cdot \bar{DT}_v(s) + a_{Q,Et,0} \\ &\quad \cdot \left[\frac{\bar{DT}_v(s) + \bar{T}_{i,v}(s) - a_{T0,CM,1} \cdot G_{CM}(s) \cdot \bar{CM}_v(s)}{a_{T0,Et,1} \cdot G_{Et}(s)} \right] \\ &\quad + a_{Q,CM,0} \cdot \bar{CM}_v(s) \end{aligned} \tag{Eq. VI.71}$$

$$\begin{aligned} \bar{Q}_v(s) &= \left[a_{Q,DT,0} + \frac{a_{Q,Et,0}}{a_{T0,Et,1}} \cdot \frac{1}{G_{Et}(s)} \right] \cdot \bar{DT}_v(s) + \frac{a_{Q,Et,0}}{a_{T0,Et,1}} \cdot \frac{1}{G_{Et}(s)} \cdot \bar{T}_{i,v}(s) \\ &\quad + \left[a_{Q,CM,0} - \frac{a_{Q,Et,0} \cdot a_{T0,CM,1} \cdot G_{CM}(s)}{a_{T0,Et,1} \cdot G_{Et}(s)} \right] \cdot \bar{CM}_v(s) \end{aligned}$$

particularmente por conta das dinâmicas do diferencial de temperatura e da temperatura de entrada, mas também por conta do comonômero, visto que o tempo morto do etileno é maior do que o comonômero (Tabela VI.2).

Capítulo VII – Considerações Finais e Sugestões para Trabalhos Futuros

Resumo

Neste último capítulo é feita uma avaliação geral de todo o trabalho realizado e são apresentadas algumas sugestões de trabalhos futuros. Tais sugestões constituem possibilidades de abordagens diferentes, outros desenvolvimentos que aprofundam o estudo e/ou extrapolações para outras tecnologias (processos produtivos).

VII.1. Considerações Finais

O mercado global de polímeros está cada dia mais competitivo e, além disso, as mudanças climáticas exigem que os processos produtivos sejam cada dia mais eficientes em segurança, produtividade, qualidade e meio ambiente. Nesse cenário, é um desafio manter tecnologias em solução competitivas, pois elas dispendem muita energia para recuperar o solvente. A tecnologia “Sclairtech” representa, em especial, um desafio ainda maior, devido ao baixo tempo de residência no reator. Evitar a parada da unidade decorrente da instabilidade na reação e garantir um robusto controle de qualidade é fundamental para manter esse processo produtivo competitivo e seguro.

A utilização de controle avançado se apresenta como uma alternativa robusta para obtenção dos objetivos de competitividade. Entretanto, o sucesso de implementação de tais controles é função dos modelos dinâmicos utilizados, que geralmente são bastante complexos, devido à não linearidade dos fenômenos físicos-químicos que os compõem. Para identificação de modelos dinâmicos de polimerização é necessário a realização de experimentos práticos que muitas vezes não são possíveis em plantas industriais, devido aos riscos de continuidade operacional e à indisponibilidade de plantas pilotos.

Esse trabalho apresentou a estruturação necessária para a implementação de um controlador avançado de qualidade tipo *Model Predictive Control* (MPC, controle preditivo baseado em modelo) para uma planta industrial de produção de polietileno linear da tecnologia “Sclairtech”. Um diferencial importante desse trabalho foi a capacidade de coadunar uma robusta fundamentação teórica com a experiência técnica de muitos anos de atuação na tecnologia e, por fim, também com uma visão pragmática.

A estruturação proposta no trabalho se apresenta num formato similar ao utilizado nas principais empresas do ramo químico e petroquímico presentes no Brasil e no mundo: um projeto conceitual típico na construção da ideia e responsável pelas premissas básicas para elaboração da engenharia básica, no capítulo III; a análise financeira necessária para garantir a viabilidade econômica conforme as melhores práticas globais, no capítulo IV; e os demais capítulos (V e VI) assemelhados à engenharia básica de um projeto de investimento. Paralelo a isso, são introduzidos dois novos desenvolvimentos científico-tecnológicos. O primeiro se trata de um procedimento para a definição da estrutura ótima de um modelo de rede neural artificial. A construção de um modelo de RNA (Rede Neural Artificial) se divide resumidamente em: obtenção dos dados; definição da estrutura; treinamento; e teste. Com os recursos tecnológicos disponíveis atualmente é muito fácil

a construção de um modelo de RNA, seja pela disponibilidade de *hardware* (equipamento) como quanto a disponibilidade de códigos (*software*) prontos para a execução. Entretanto, a configuração de uma rede neural artificial é sempre um desafio e é a principal etapa da construção e implementação de um modelo. Usando nova técnica desenvolvida basta dispor dos dados de entrada e saída para garantir um modelo ótimo. O segundo desenvolvimento corresponde à utilização da experiência das pessoas para ajudar na construção dos modelos utilizados nos controladores tipo MPC. As pessoas são o maior bem de uma companhia. São elas que garantem os resultados (bons ou ruins) e detêm o conhecimento dos processos, embasado em uma formação técnica e/ ou a partir da experiência prática. Muitas pessoas não têm ideia do volume de informação que dispõem e que pode ser utilizado na implementação de controladores modernos, ajudando na confecção dos seus modelos. Dessa forma, a segunda técnica cria uma versão inicial de uma metodologia para coletar e utilizar esse valioso conhecimento. Apesar da aplicação específica de ambas as técnicas novas, é possível ressaltar a generalização delas, possibilitando a sua aplicação em quaisquer outros processos. Vale ressaltar que propor tais técnicas em um processo de polimerização de eteno onde o tempo de residência no reator é tão baixo certamente é algo muito audacioso, todavia demonstra a possibilidade de extrapolação para outros processos mais simples e lineares.

Conforme apresentado no capítulo II, o processo “Sclairtech” foi alvo de diversos trabalhos de engenharia de polimerização desenvolvidos no Grupo de Pesquisa (PROTEC) do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Industrial (PEI) da UFBA, onde foi conduzido o presente estudo, e dessa forma a sua complexidade é conhecida e bastante relevante. Nesse contexto, os modelos de *Melt Index* (MI, índice de fluidez) e densidade usados como modelos no MPC são simplificações possíveis, e tais tipos de modelos simplificados são também utilizados de forma pragmática em outros contextos, processos, estudos de caso e aplicações práticas. É sabido que existem melhorias a serem implementadas, entretanto a utilização dos modelos de RNA como artifício de correção dos modelos é algo que pode ser construído pragmaticamente a fim de simplificar a construção de tais modelos reconhecidamente complexos.

As principais dificuldades encontradas durante todo o trabalho estão concentradas na não linearidade do processo de polimerização, no baixo tempo de residência no reator e na interação entre as variáveis de processo. Essas condições exigiram um profundo entendimento do processo a fim de propor melhorias que garantissem a estabilidade da reação e construir matrizes de controle efetivas. Por outro lado, a ampla disponibilidade

de dados ajudou no entendimento e modelagem do processo. Não obstante as dificuldades encontradas, foram obtidos resultados bastante significativos, concentrados basicamente nos estudos apresentados nos capítulos IV, V e III-VI. No capítulo IV, através da dispersão dos dados de qualidade (MI e densidade) encontrada para cada família, se observou que os maiores desvios estão no MI. Com a implementação desse projeto foram estimadas reduções de 50% na variabilidade do processo, no número de misturas para correção e na geração de produto fora de especificação por variação de MI e densidade, redução de 25% nas perdas de produção associadas a transições e a silos cheios e redução de 10% no consumo de catalisador. Em valores monetários se estima o ganho anual de aproximadamente R\$ 4.0 milhões, sendo R\$ 2.5 milhões correspondente à redução do consumo do catalisador e R\$ 1.5 milhões aos demais ganhos. Além dos ganhos financeiros citados, espera-se uma redução no número de intervenções dos operadores de painel e no número de alarmes acionados, representando um importante ganho na ergonomia dessa função. No capítulo V, foi apresentada uma nova técnica de definição da arquitetura ótima para um modelo de RNA. Essa técnica foi aplicada para criação de dois modelos de variáveis de qualidade: MI; e densidade. Algumas variáveis de processo foram escolhidas a partir do conhecimento da planta e aplicadas em uma análise de sensibilidade para definição das entradas dos modelos. Utilizando-se de dois anos de dados, o modelo ótimo encontrados para MI tinha cinco neurônios na camada oculta (erro médio absoluto de 11.58% e desvio padrão igual a 10.71%) e três neurônios para a densidade (erro médio absoluto de 3.83% e desvio padrão igual a 4.32%). Uma vez os modelos prontos, eles foram utilizados em uma validação operacional onde foram testados em diferentes famílias (filme; rotomoldagem; injeção de alta densidade; e injeção de baixa densidade) e durante transições entre elas. Os resultados encontrados foram excelentes ($r^2 > 0.9$), demonstrando a qualidade da técnica e dos modelos desenvolvidos. O desenvolvimento do modelo de RNA para predição de propriedades de qualidade no reator representa uma complexidade relevante, pois as amostras são coletadas na extrusão. Dessa forma, o conhecimento do processo produtivo foi importantíssimo para a integração do tempo morto e a amostragem dos dados de processo. Além disso, esse trabalho utilizou dados analíticos disponíveis (resultado de anos de análises rotineiras de processo), sem qualquer demanda de recursos extras para o seu desenvolvimento.

No capítulo VI foram abordados os principais pontos para a implementação de um MPC no processo “Sclairtech”. Utilizando dados históricos, teste industriais e conhecimento operacional empírico sobre o processo, foram desenvolvidos os modelos

dos controladores. Em resinas onde é possível utilizar hidrogênio, essa variável foi utilizada para controlar o MI, e para baixos valores de MI a temperatura do tratamento térmico foi a variável manipulada. Por outro lado, a razão mássica de comonômero é a variável utilizada para controlar a densidade do polímero. Nesse capítulo é apresentada uma nova metodologia de desenvolvimento de modelos para os controladores tipo MPC, que inclui também a utilização da experiência e do conhecimento das pessoas (especialistas no processo). De forma simplificada é feito um questionário com condições típicas de processo e com a suposição de aplicação de experimentos degraus imaginados nas variáveis de processo. As pessoas conhecedoras do processo, denominados especialistas, devem responder tal questionário indicando o tipo de resposta e os parâmetros correspondentes. Tais informações, decorrentes de anos de trabalho no processo produtivo, são utilizadas como elementos adicionais para a construção dos modelos do MPC. Essa técnica foi desenvolvida para processos onde não é possível realizar testes de resposta ao degrau devido à possibilidade de descontinuidade operacional e/ou ao fato da variável modelada não estar disponível para medição frequente (e/ou não haver uma variável correlata com tal disponibilidade). No trabalho em questão essa técnica foi utilizada para a construção do modelo de densidade, exatamente devido à indisponibilidade de uma variável capaz de indicar a sua dinâmica, diferentemente do MI, onde foi utilizada a pressão do reator. A partir do projeto do MPC, algumas simulações foram realizadas, demonstrando a viabilidade técnica da implementação deste controlador em um processo com tão baixo tempo de residência. As simulações realizadas expressam condições típicas de transições entre famílias e uma condição onde houve passagem de impurezas, resultando em perda de perfil de reação. Em todos os casos os controladores conseguiram manter as variáveis de qualidade e a conversão controladas, demonstrando um resultado muito satisfatório. A construção de um modelo para um processo tão não linear foi definitivamente o maior desafio no capítulo VI, contudo a possibilidade de utilizar os excelentes modelos de RNA, desenvolvidos no capítulo V, para a correção desses modelos atenua a necessidade de modelos mais sofisticados. Para o caso da conversão o modelo pode ser considerado satisfatório, visto que o ele utiliza elementos fenomenológicos da entalpia da reação.

VII.2. Sugestões para Trabalhos Futuros

No que se refere a possibilidades de trabalhos futuros, são listadas abaixo algumas possíveis frentes futuras de novos desenvolvimentos, a partir do presente trabalho:

- Implementação desse projeto em uma planta real da tecnologia “Sclairtech”;
- Desenvolvimento da estratégia de controle para terpolímero (eteno, buteno e octeno);
- Desenvolvimento de modelos de analisadores virtuais para o modo de reação tubular (3→1);
- Desenvolvimento de um controlador tipo MPC para o modo de operação com o reator tubular (3→1);
- Desenvolvimento de um modelo de predição de MI na extrusora e utilização desse modelo para ajustar o modelo da reação;
- Desenvolvimento de um modelo de predição das condições do reator a partir dos parâmetros de qualidade (MI e densidade). Para a construção desse modelo deve-se utilizar dados reais, a fim de ser mais assertivo no desenvolvimento de novos produtos;
- Aplicação da metodologia utilizada nesse projeto em outros processos produtivos industriais.

UFBA
UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA
ESCOLA POLITÉCNICA

PROGRAMA DE PÓS GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA INDUSTRIAL - PEI

Rua Aristides Novis, 02, 6º andar, Federação, Salvador BA
CEP: 40.210-630
Telefone: (71) 3283-9800
E-mail: pei@ufba.br
Home page: <http://www.pei.ufba.br>

