

RECONCILIAÇÃO DE DADOS EM REDES DE TROCADORES DE CALOR UTILIZANDO O SOFTWARE EMSO

D. Q. F. MENEZES¹, D. C. de LIMA¹, F. C. PEIXOTO¹ e D. M. PRATA¹

¹ Universidade Federal do Rio de Janeiro, Programa de Engenharia Química/ COPPE.
E-mail para contato: pradiadiego@gmail.com

RESUMO – Este trabalho apresenta um estudo sobre reconciliação de dados em estado estacionário em redes de trocadores de calor, com base no trabalho publicado no livro de Romagnoli e Sánchez (2000). É realizada uma breve revisão bibliográfica com foco nos problemas que envolvem trocadores de calor. O modelo matemático não linear é composto por 17 equações com 30 variáveis, sendo 16 medidas e 14 não medidas, e incluem balanços de massa e energia. O problema é resolvido no pacote computacional EMSO (Ambiente para Modelagem, Simulação e Otimização) que dispõe de rotinas computacionais propriamente desenvolvidas para reconciliação de dados em estado estacionário com restrições lineares ou não lineares. Os resultados obtidos são criteriosamente discutidos e mostraram-se superiores e mais precisos que os reportados em duas abordagens de solução utilizadas por Romagnoli e Sánchez (2000), comprovando a robustez e eficiência do software EMSO em reconciliação de dados.

1. INTRODUÇÃO

Em processos industriais, uma das grandes preocupações é o consumo excessivo de energia na forma de utilidades quentes e frias. Estas correntes são denominadas correntes frias, quando precisam ser aquecidas, ou correntes quentes, quando devem ser resfriadas. O aquecimento ou resfriamento de uma corrente é feito por meio de equipamentos chamados trocadores de calor, os quais recuperam energia entre as correntes do processo, transferindo o calor excedente das correntes quentes para as correntes frias.

A avaliação de consumo energético de uma planta industrial é realizada com base nas variáveis de processo, tais como vazões e temperaturas, entre outras, obtidas por instrumentos de medição de precisão finita e sujeitos a falhas. Logo, esta informação pode estar corrompida por erros, sendo divididos em erros aleatórios ou grosseiros. Assim, a utilização dos dados medidos não necessariamente satisfaz as restrições dos processos, como balanços de massa e energia (modelo matemático), isto é, são gerados “ímbalances”, e desta forma o comportamento do processo é mascarado. Então, para que os dados obtidos pelas rotinas de medição possam tornar-se informações mais confiáveis é necessário que estes sejam tratados de forma matemática e estatisticamente coerente e isto é chamado reconciliação de dados (RD). Projeto e operação ótimos de redes de trocadores de calor (RTC) requer a solução de modelos matemáticos não lineares (Ijaz *et al.*, 2013), por meio de variáveis medidas de processo, e por isso fazem parte do contexto do procedimento de RD.

O simulador EMSO (Soares e Secchi, 2003) dispõe de rotinas propriamente desenvolvidas para RD em estado estacionário com restrições lineares ou não lineares.

Seguindo esta direção, este trabalho apresenta um estudo sobre RD em estado estacionário em uma RTC, com base no exemplo publicado originalmente por Swartz (1989) e posteriormente por Romagnoli e Sánchez (2000), utilizando-se o simulador EMSO.

Este trabalho está organizado em seis seções, além desta introdução. Na Seção 2 é realizada a revisão da literatura. A Seção 3 descreve a formulação do problema de reconciliação de dados. A Seção 4 apresenta a classificação de variáveis. Na Seção 5 é apresentado o problema estudado e os critérios de avaliação. Na Seção 6 são apresentados os resultados. E, finalmente, na Seção 7 as conclusões do trabalho são apresentadas.

2. REVISÃO DA LITERATURA

No procedimento de RD os dados medidos são ajustados de maneira estatisticamente coerente pelo estimador (função objetivo) resultante da formulação de máxima verossimilhança sobre a distribuição estatística dos erros de medição assumida, de forma a satisfazer às leis de conservação e demais restrições impostas ao sistema (modelo matemático), obtendo estimativas confiáveis para as variáveis mediadas, não mediadas (observáveis) e parâmetros do processo (Prata *et al.*, 2010). Tradicionalmente é assumida distribuição Normal, que resulta no estimador de mínimos quadrados ponderados (MQP).

Para que esta finalidade seja atingida, dois outros procedimentos são geralmente usados: a classificação das variáveis e a detecção de erros grosseiros (DEG). O primeiro determina se a informação disponível é suficiente para resolver o problema de RD. O segundo procura por valores medidos que não seguem a distribuição estatística admitida, uma vez que estes a invalidam. Uma etapa importante é caracterização da matriz de variância dos erros de medição, já que as variáveis envolvidas no processo possuem grandezas distintas, obtidas por instrumentos de medição com diferentes graus de precisão. O inverso desta matriz pondera coerentemente o peso dado às variáveis na função objetivo, evitando-se ajustes tendenciosos.

A RD representa uma etapa crucial para estratégias de controle e otimização em tempo real de processos industriais. A operação ótima é calculada conforme um objetivo especificado, sujeita ao modelo do processo e das condições operacionais. A operação ótima é finalmente implementada como os *setpoints* da estratégia de controle. Projeto e operação ótimos de RTC estão neste contexto. Entretanto, muito pouco é descrito na literatura aberta sobre RD em processos industriais reais (Prata *et al.*, 2010), especialmente no caso de RTC.

Parece que o primeiro exemplo de RD em uma RTC foi apresentado por Swartz (1989). O modelo, em estado estacionário, é bilinear, ou seja, onde a sua não linearidade é expressa apenas pelo produto de duas variáveis de decisão (vazão e entalpia, descrita em termos da temperatura). Vários outros pesquisadores utilizaram-se deste exemplo, assumindo que não há mudança de fase, para avaliação de técnicas de solução (Kelly, 1998; Romagnoli e Sánchez, 2000; Ijaz *et al.*, 2013) e DEG (Tjoa e Biegler, 1991; Albuquerque e Biegler, 1996; Wang e Romagnoli, 2003; Özyurt e Pike, 2004). Ijaz *et al.* (2013) avaliaram este exemplo assumindo uma ou duas fases. Recentemente, Singhmaneeskulchai *et al.* (2013) avaliaram RD dinâmica em um outro trocador de calor.

3. O PROBLEMA DE RECONCILIAÇÃO DE DADOS ESTACIONÁRIA

O procedimento de RD não linear, para problemas em estado estacionário, é baseado na solução de um problema de otimização de minimização de uma função objetivo sujeita a restrições algébricas não lineares. O problema tradicional de RD é descrito como:

$$\min_{\underline{x}} \frac{1}{2} [\underline{x} - \underline{z}]^T \underline{V}^{-1} [\underline{x} - \underline{z}] \quad (1)$$

sujeito a:

$$h(\underline{x}, \underline{u}) = 0 \quad (2)$$

$$g(\underline{x}, \underline{u}) \geq 0 \quad (3)$$

onde \underline{V} é matriz de variância/covariância dos erros das variáveis medidas. \underline{z} , \underline{x} e \underline{u} são os vetores das variáveis medidas, medidas reconciliadas e não medidas estimadas (observáveis), respectivamente. Finalmente, \underline{h} e \underline{g} são as restrições algébricas de igualdade e desigualdade, respectivamente.

4. CLASSIFICAÇÃO DE VARÁVEIS

Durante a etapa de classificação de variáveis, cujo esquema é descrito na Figura 1, determina-se se existe informação disponível suficiente para a realização do procedimento de RD. As variáveis de um sistema inicialmente podem ser divididas em dois grandes grupos, medidas ou não medidas. As variáveis medidas são conhecidas por meio de instrumentação, e podem ser classificadas em redundantes, se mesmo após sua exclusão momentânea, o sistema continuar observável (as restrições ainda podem ser resolvidas), e não redundantes se caso contrário. Somente as variáveis redundantes são reconciliadas. As variáveis medidas não redundantes não são modificadas durante o procedimento de RD. Já as variáveis não medidas, se subdividem em observáveis e não observáveis. As classificadas como observáveis, podem ser determinadas (estimadas) pelas demais variáveis medidas (redundantes ou não) e pelas restrições do sistema. Entretanto, as não observáveis não conseguem ter seu valor calculado (necessitam de aquisição de instrumentação). Cabe ressaltar que a presença de apenas uma variável não medida classificada como não observável já torna o sistema não observável, ou seja, o sistema não pode ser resolvido, e consequentemente o procedimento de RD.

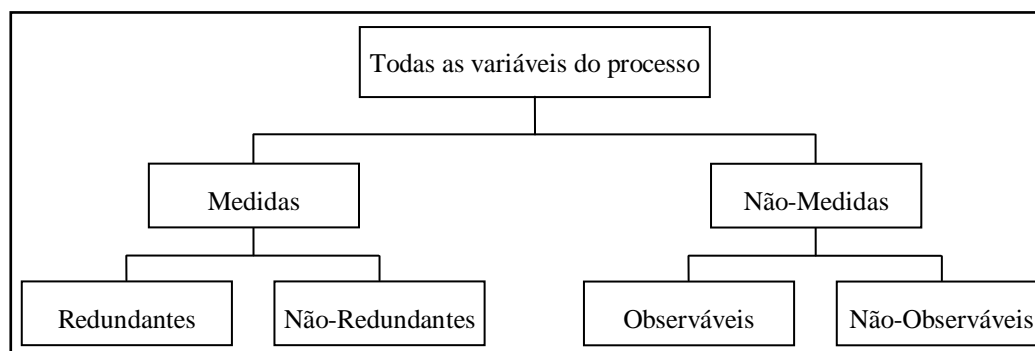


Figura 1 - Classificação das variáveis.

5. O PROBLEMA DE REDES DE TROCADORES DE CALOR

A RTC ilustrada na Figura 2 foi proposta originalmente por Swartz (1989). Neste sistema, uma corrente A recebe calor a partir de correntes B, C e D. Os desvios padrão das vazões e as temperaturas são de 2% e 0,75°C, respectivamente. F, T e h que precedem as correntes A, B, C, D indicam vazão volumétrica, temperaturas e entalpias, respectivamente.

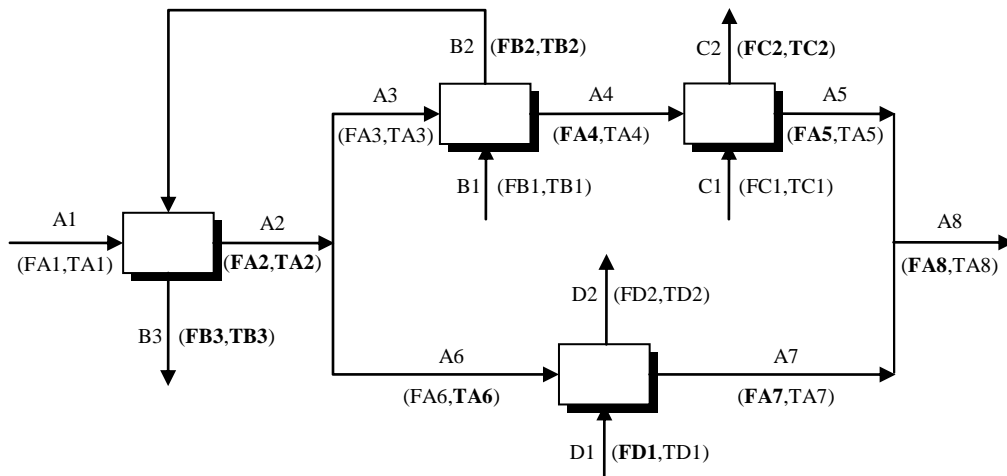


Figura 2 - Esquema de uma RTC (Swartz, 1989; Romagoli e Sánchez, 2000).

O modelo matemático não linear e estacionário é apresentado nas Equações 1 até 17.

$$F_{A1} - F_{A2} = 0 \quad (1)$$

$$F_{B2} - F_{B3} = 0 \quad (2)$$

$$F_{A1}h_{A1} - F_{A2}h_{A2} + F_{B2}h_{B2} - F_{B3}h_{B3} = 0 \quad (3)$$

$$F_{A2} - F_{A3} - F_{A6} = 0 \quad (4)$$

$$T_{A2} - T_{A3} = 0 \quad (5)$$

$$T_{A2} - T_{A6} = 0 \quad (6)$$

$$F_{A3} - F_{A4} = 0 \quad (7)$$

$$F_{B1} - F_{B2} = 0 \quad (8)$$

$$F_{A3}h_{A3} - F_{A4}h_{A4} + F_{B1}h_{B1} - F_{B2}h_{B2} = 0 \quad (9)$$

$$F_{A4} - F_{A5} = 0 \quad (10)$$

$$F_{C1} - F_{C2} = 0 \quad (11)$$

$$F_{A4}h_{A4} - F_{A5}h_{A5} + F_{C1}h_{C1} - F_{C2}h_{C2} = 0 \quad (12)$$

$$F_{A5} + F_{A7} - F_{A8} = 0 \quad (13)$$

$$F_{A5}h_{A5} + F_{A7}h_{A7} - F_{A8}h_{A8} = 0 \quad (14)$$

$$F_{A6} - F_{A7} = 0 \quad (15)$$

$$F_{D1} - F_{D2} = 0 \quad (16)$$

$$F_{A6}h_{A6} - F_{A7}h_{A7} + F_{D1}h_{D1} - F_{D2}h_{D2} = 0 \quad (17)$$

O modelo inclui balanços de massa total e balanços de energia nos trocadores de calor, misturadores e divisores. Este sistema é composto por 16 variáveis medidas (das quais 6 são não-redundantes), 14 variáveis não medidas (todas observáveis), e 17 equações. Desta forma, este sistema se mostra muito abrangente para avaliar procedimentos de RD.

Assume-se que as entalpias específicas para todos os fluxos podem ser representadas por uma expressão quadrática em termos de temperatura, conforme Equação 18:

$$h_i = \eta_{1i} + \eta_{2i}T_i + \eta_{3i}T_i^2, \quad \text{sendo } i = A, B, C, D \quad (18)$$

Os valores das constantes de entalpia são apresentados na Tabela 1 como se segue:

Tabela 1 - Coeficientes para as equações da entalpia específica.

Coeficiente	A	B	C	D
η_1	-6.8909	-14.8538	-28.2807	-11.4172
η_2	0.0991	0.1333	0.1385	0.1229
η_3	1.1081×10^{-4}	0.7539×10^{-4}	0.9043×10^{-4}	0.7940×10^{-4}

É importante ressaltar que o modelo matemático apresentado na forma original não é contém variáveis medidas não redundantes que não devem participar da RD (não devem ser inseridas na função objetivo, ou serem escolhidas como variável de decisão do problema de otimização resultante). As variáveis são apresentadas na seção de resultados. Assim, se faz necessário obter um modelo observável, descritos por equações que contenham apenas variáveis medidas redundantes e não-medidas observáveis. As Equações 19, 20 e 21, representam o novo modelo e foram apresentadas em Romagnoli e Sánchez (2000).

$$F_{A1} - F_{A3} - F_{A6} = 0 \quad (19)$$

$$F_{A6}h(T_{A3}) + F_{D2}h(T_{D1}) - F_{D2}h(T_{D2}) - F_{A6}h(T_{A7}) = 0 \quad (20)$$

$$F_{A3} + F_{A6} - \left(\frac{F_{A3}h(T_{A5}) + F_{A6}h(T_{A7})}{h(T_{A8})} \right) = 0 \quad (21)$$

Romagnoli e Sanchez (2000) resolvem este problema por duas abordagens: Programação Quadrática Sucessiva (SQP) e fatorização QR. Esta última visa eliminar as variáveis não medidas do conjunto de variáveis, proceder com a RD, e estimar os valores das variáveis não medidas posteriormente. Neste trabalho será utilizado o pacote de RD do software EMSO. Foi escolhido o otimizador IPOPT (Wächter, 2002). O IPOPT é um otimizador para problemas não lineares de dimensão elevada, com restrições de desigualdade. Este implementa o método primal-dual do ponto interior, lida com as restrições com o uso de funções barreira, usando filtros para etapa de busca das linhas (*linesearch*) e gradiente conjugado preconditionado para resolver o problema com a Hessiana reduzida.

Pretende-se comparar os resultados destas abordagens. Entretanto, para que isto seja realizado quantitativamente é necessário definir os critérios de avaliação de desempenho.

5.1. Critério de Avaliação

Para avaliação do desempenho da RD são utilizados os seguintes critérios:

Fobj (Função Objetivo): Quanto menor o valor da função objetivo, provavelmente melhor terá sido o resultado, desde que as restrições estejam satisfeitas e seja a mesma função.

Resíduos (RES): As equações do modelo (restrições) são escritas computacionalmente em forma a minimizar o resíduo (diferença entre o lado direito e esquerdo das restrições). Quanto mais próximo de zero melhor. Usualmente é feito por tolerância menor que 1×10^{-6} . Pode-se ainda calcular o maior valor absoluto entre os resíduos (MARES).

Soma absoluta dos resíduos (SARES): Consiste na soma absoluta de cada resíduo das restrições. Quanto menor o seu valor, provavelmente melhor terá sido o resultado.

6. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O tipo de variável, as variâncias dos valores medidos e os valores: medidos, reconciliados e estimados das variáveis não medidas são apresentados na Tabela 2.

Tabela 2 – Resultados da RD para o problema de RTC.

Variável	Tipo	Variância	Medido	SQP	QR	EMSO
FA1	Medida Redundante	400.0	1000.0	963.630	967.43	963.633
FA3	Medida Redundante	64.54515	401.70	407.850	406.58	407.859
FA6	Medida Redundante	122.19091	552.70	555.770	560.85	555.773
FD2	Medida Redundante	185.0144	680.10	689.410	680.1	689.415
TA3	Medida Redundante	0.5625	481.78	481.910	481.82	481.914
TA5	Medida Redundante	0.5625	616.31	615.510	615.51	615.512
TA7	Medida Redundante	0.5625	619.00	617.770	617.87	617.757
TA8	Medida Redundante	0.5625	614.92	616.810	616.87	616.807
TD1	Medida Redundante	0.5625	667.84	668.020	667.84	668.025
TD2	Medida Redundante	0.5625	558.34	558.170	558.34	558.169
TA1	Medida Não Redundante	0.5625	466.33	466.330	466.33	466.330
TA4	Medida Não Redundante	0.5625	530.09	530.090	530.09	530.090
FB1	Medida Não Redundante	25.64409	253.20	253.200	253.2	253.200
TB1	Medida Não Redundante	0.5625	618.11	618.110	618.11	618.110
FC1	Medida Não Redundante	37.97024	308.10	308.100	308.1	308.100
TC1	Medida Não Redundante	0.5625	694.99	694.990	694.99	694.990
FA2	Não Medida Observável	-	-	963.63	967.43	963.633
TA2	Não Medida Observável	-	-	481.91	484.11	481.914
FB2	Não Medida Observável	-	-	253.2	253.20	253.200
TB2	Não Medida Observável	-	-	543.9	543.99	543.9022
FB3	Não Medida Observável	-	-	253.2	253.2	253.200
TB3	Não Medida Observável	-	-	486.51	477.98	486.506
FC2	Não Medida Observável	-	-	308.1	308.10	308.100
TC2	Não Medida Observável	-	-	594.8	595.16	594.8034
FA4	Não Medida Observável	-	-	407.85	406.58	407.859
FA5	Não Medida Observável	-	-	407.85	406.58	407.859
FA7	Não Medida Observável	-	-	555.77	560.85	555.773
FA8	Não Medida Observável	-	-	963.63	967.43	963.6329
FD1	Não Medida Observável	-	-	689.41	680.1	689.415
TA6	Não Medida Observável	-	-	481.91	485.76	481.914

Na Tabela 2 observam-se os resultados das abordagens para o problema de RD e RTC. Os valores das variáveis medidas não-redundantes não são modificados em nenhuma destas.

Tabela 3 – Resultados para os critérios de avaliação da RD para o problema de RTC.

Critério	SQP	QR	EMSO
RES1	0.0000	0.0000	0.0000
RES2	0.0100	0.0000	0.0000
RES3	0.0000	1×10^{-13}	0.0000
RES4	0.0000	0.0000	0.0010
RES5	0.0000	0.0000	0.0000
RES6	0.0000	0.0000	0.0000
RES7	0.0000	0.0000	0.0000
RES8	0.0100	1×10^{-13}	0.0000
RES9	0.0000	0.0000	0.0000
RES10	0.0000	0.0000	0.0000
RES11	0.4756	-0.5071	0.0000
RES12	0.0000	-0.4720	0.0000
RES13	0.0000	0.3780	-0.0010
RES14	-0.1268	-0.2359	-0.0105
RES15	0.6243	0.0936	0.0000
RES16	-0.0446	-1.0130	0.0000
RES17	-3.0470	1.0130	0.0812
MARES	3.0470	1.0130	0.0812
SARES	4.3383	3.0404	0.0947
Fobj	14.7553	13.7352	14.7942

Na Tabela 3 observam-se os resultados para os critérios de avaliação dos valores da função objetivo (Fobj) e resíduos (MARES e SARES) das equações do modelo. Os resultados obtidos no EMSO mostraram-se superiores aos reportados por duas abordagens de solução (SQP e QR) utilizadas por Romagnoli e Sánchez (2000), mesmo que estes autores tenham encontrado um valor menor para a Função Objetivo. Observa-se que algumas restrições apresentadas por Romagnoli e Sánchez (2000) apresentam valor elevado (1.0130 e 3.0470), ou seja, o balanço “não fechou”. Isto mostra claramente que o software EMSO encontrou os valores ótimos, durante a RD e consequentemente mostrou-se mais robusto e preciso.

7. CONCLUSÕES

A utilização do software EMSO mostrou-se superior, robusta e mais precisa do que as duas abordagens apresentadas no livro de Romagnoli e Sanchez (2000) para realizar o procedimento de reconciliação de dados em uma rede de trocadores de calor. Particularmente este é um sistema muito utilizado na literatura técnica devido a sua representação por restrições não lineares com variáveis medidas redundantes e não redundantes e variáveis não medidas observáveis, que foram reconciliadas, mantidas constantes, e estimadas, respectivamente. Acredita-se, assim, contribuir para o enriquecimento da utilização do EMSO na literatura científica, bem como incentivar futuros trabalhos.

8. REFERÊNCIAS

- ALBUQUERQUE, J. S.; BIEGLER, L. T. Data reconciliation and gross-error detection for dynamic systems. *AIChE J.*, v. 42, p. 2841–2856, 1996.
- IJAZ, H.; ATI, U. M.K.; MAHALEX, V. Heat exchanger network simulation, data reconciliation and optimization. *Appl. Therm. Eng.*, v. 52, p. 328-335, 2013.
- KELLY, J. D. A regularization approach to the reconciliation of constrained data sets. *Comput. Chem. Engng.*, v. 22, p. 1771-1788, 1998.
- ÖZYURT, D.B.; PIKE, R.W. Theory and practice of simultaneous data Reconciliation and gross error detection for chemical process. *Comput. Chem. Engng.*, v.28, p. 381–402, 2004.
- PRATA, D. M.; SCHWAAB, M.; LIMA, E. L.; PINTO, J. C. Simultaneous robust data reconciliation and gross error detection through particle swarm optimization for an industrial polypropylene reactor. *Chem. Eng. Sci.*, v. 65, p. 4943–4954, 2010.
- ROMAGNOLI, J. A., SANCHEZ, M. C. *Data Processing and Reconciliation for Chemical Process Operations*. Academic Press. San Diego, 2000.
- SINGHMANEESKULCHAI, P.; ANGUSTORN, N.; SIEMANOND, K. Dynamic data reconciliation in a hot-oil heat exchanger for validating energy consumption. *Chem. Eng. Trans.*, v. 35, p. 493-498, 2013.
- SOARES, R. P.; SECCHI, A. R. EMSO: Environment for Modelling, Simulation and Optimisation. *Comput. Aided Chem. Eng.*, v. 14, p. 947–952, 2003.
- SWARTZ, C.L.E. Data Reconciliation for Generalised flowsheet Applications. In 197th National Meeting American Chemical Society, Dallas, TX, 1989.
- TJOA, I. B.; BIEGLER, L. T. Simultaneous strategy for data reconciliation and gross error detection of nonlinear systems. *Comput. Chem. Engng.*, v 15, p. 679-690, 1991.
- WÄCHTER, A. *An Interior Point Algorithm for Large-Scale Nonlinear Optimization with Applications in Process Engineering*. Tese de Doutorado, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, PA, USA.
- WANG. D.; ROMAGNOLI, J. A., A framework for robust data reconciliation based on a generalized objective function. *Ind. Eng. Chem. Res.*, v. 42, 2003.