

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS  
ESCOLA DE ENGENHARIA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA  
CURSO DE ESPECIALIZAÇÃO EM AUTOMAÇÃO INDUSTRIAL

# Métodos de Construção de Analisadores Virtuais para Estimação de Teor de Enxofre de Hidrocarbonetos

BEN-HUR SALLES RODRIGUES

Monografia submetida à Banca Examinadora designada pela Comissão Coordenadora do Curso de Especialização em Automação Industrial, como parte dos requisitos necessários à obtenção do Certificado de Especialista em Automação Industrial.

Orientador: Prof. Dr. Rodney Rezende Saldanha

Belo Horizonte – MG  
Dezembro de 2014.

## AGRADECIMENTOS

À minha família, por sempre me acompanharem e me darem forças para alcançar meus objetivos. Especialmente meus pais, Helena e Luiz Carlos, e meus irmãos, Luciano e Luana.

À minha namorada, Caroline, pelo amor, apoio e incentivo em todos os momentos.

A todos que trabalharam comigo na Accenture durante esta jornada, nas pessoas de Cássio Pascoal, Daniel Codo, Fábio Carvalho, Felipe Carvalho, Hamilton Oliveira, Louis Soares, Matheus Miranda, Mônica Mendonça e Wagner Alvarenga pelo crescimento profissional e pessoal.

A todos os alunos do Curso de Especialização em Automação Industrial da UFMG pelo companheirismo e aprendizado.

Ao Prof. Dr. Rodney Rezende Saldanha pela orientação neste trabalho.

A todos os professores do Curso de Especialização em Automação Industrial da UFMG pelos ensinamentos teóricos e práticos.

E a todos que, de alguma maneira, colaboraram para o desenvolvimento deste trabalho.

## SUMÁRIO

<b>RESUMO</b> .....	<b>6</b>
<b>ABSTRACT</b> .....	<b>7</b>
<b>1. INTRODUÇÃO</b> .....	<b>8</b>
1.1 Considerações Gerais .....	8
1.2 Estrutura do Trabalho.....	9
<b>2. HIDROTRATAMENTO DE PETRÓLEO</b> .....	<b>11</b>
<b>3. ANALISADORES VIRTUAIS</b> .....	<b>16</b>
<b>4. FERRAMENTAS DE CONSTRUÇÃO DE ANALISADORES VIRTUAIS</b> .....	<b>21</b>
4.1 Regressão Linear Múltipla .....	22
4.2 Redes Neurais Artificiais (RNAs).....	24
<b>5. METODOLOGIA E IMPLEMENTAÇÃO</b> .....	<b>28</b>
<b>6. RESULTADOS</b> .....	<b>36</b>
6.1 Resultados da Regressão Linear Múltipla.....	36
6.2 Resultados das Redes Neurais Artificiais .....	41
<b>7. CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> .....	<b>53</b>
7.1 Conclusões.....	53
7.2 Trabalhos Futuros .....	54
<b>8. ANEXOS</b> .....	<b>55</b>
8.1 Tabela de Resultados de correlação obtidos com as RNAs .....	55
8.2 Tabela de Resultados de MSE obtidos com as RNAs.....	56
<b>9. REFERÊNCIAS</b> .....	<b>57</b>

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

**ppm** – Partes por milhão.

**PID** – Controlador Proporcional, Integral e Derivativo.

**SP** – *Setpoint*.

**MSE** – Erro Médio Quadrático (*Mean Square Error*).

**RNA** – Redes Neurais Artificiais.

**MLP** – (*Multilayer Perceptron*).

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Esquema da unidade de HDT da REFAP/RS .....	12
Figura 2 – Efeito da amostragem na resposta de um PID .....	19
Figura 3 – Representação de um neurônio .....	25
Figura 4 – Exemplo de resultado para uma rede com 3 camadas escondidas .....	33
Figura 5 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO_C1_ENT_00% .....	38
Figura 6 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO_TOTAL_ENT_00% .....	39
Figura 7 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO_C2_ENT_20% .....	40
Figura 8 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO_TOTAL .....	43
Figura 9 – MSE das RNAs para o GRUPO_TOTAL .....	43
Figura 10 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO_C1 .....	44
Figura 11 – MSE das RNAs para o GRUPO_C1 .....	44
Figura 12 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO_C2 .....	45
Figura 13 – MSE das RNAs para o GRUPO_C2 .....	46
Figura 14 – Desempenho da RNA com 2 camadas escondidas e 5 neurônios para o GRUPO_C1_ENT_20% .....	48
Figura 15 – Desempenho da RNA com 1 camada escondida e 2 neurônios para o GRUPO_TOTAL_ENT_00% .....	49
Figura 16 – Desempenho da RNA com 1 camada escondida e 4 neurônios para o GRUPO_C2_ENT_20% .....	50
Figura 17 – Desempenho da RNA com 2 camadas escondidas e 4 neurônios para o GRUPO_C2_ENT_20% .....	50
Figura 18 – Gráficos de Correlação e MSE da Tabela 3 .....	51

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Grupos de resultados.....	32
Tabela 2 – Resultados obtidos com a regressão linear múltipla .....	36
Tabela 3 – Diferenças entre as RNAs de 1 e 2 camadas .....	51

## **RESUMO**

A aquisição de um analisador de processo para obtenção, em tempo real, do teor de enxofre no produto de unidades de hidrotratamento pode ser dispendiosa e sua instalação pode demorar devido à necessidade de parada da unidade. Apresentam-se neste trabalho, soluções para construção de analisadores virtuais com o objetivo de inferir o teor de enxofre no produto. Para isto, são utilizadas as técnicas de regressão linear múltipla e redes neurais artificiais, e comparados os desempenhos de modo a se obter a melhor configuração para construção de um analisador virtual de teor de enxofre.

**Palavras-Chave:** Redes Neurais Artificiais, Regressão Linear Múltipla, Hidrotratamento, Teor de Enxofre, Analisador Virtual.

## **ABSTRACT**

The acquisition of a process analyzer to obtain, in real time, a product's sulfur content may be expensive and its installation can take a while, due to the need of stop the processing unit. Are presented in this work, solutions for building soft sensors with the objective to infer the sulfur content in the product. To achieve that goal, multiple linear regression and artificial neural network techniques are used and their performance are compared in order to obtain the best configuration for constructing a sulfur content soft sensor.

**Keywords:** Artificial Neural Network, Multiple Linear Regression, Hydrotreating, Sulfur Content, Soft Sensor.

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1 Considerações Gerais

Um dos métodos mais utilizados para determinação da qualidade de produtos na indústria é a amostragem do mesmo e posterior realização de ensaios em laboratório para verificação se a produção está ou não atendendo aos requisitos mínimos exigidos pelo mercado para comercialização daquele determinado produto.

O que dificulta o uso das análises de laboratório para controle de processos é a sua frequência, que muitas vezes varia de uma a três vezes ao dia, e dependendo do tempo necessário para a obtenção do resultado de laboratório, este pode ser disponibilizado para a equipe de operação quando o processo não necessariamente apresenta as mesmas características.

Uma das soluções adotadas quando há a necessidade de disponibilidade da informação de qualidade de um produto com alta frequência, é a instalação de analisadores de processo. Mas várias questões devem ser analisadas antes da tomada da decisão. Uma delas é o custo do mesmo, que pode chegar a casa dos milhões de reais.

Um dos processos nos quais a obtenção da qualidade do produto em tempo real apresenta um potencial de ganho econômico é o hidrotreatamento do petróleo. O hidrotreatamento é um processo que visa, através da hidrogenação dos compostos, remover elementos indesejáveis, dentre eles o enxofre [Correa, 2011].

Segundo [Campos et al., 2013], para o bom funcionamento de sistemas de controle de processos voltados para a otimização, como os sistemas de controle avançado, é necessário que haja uma medição contínua das propriedades de algumas correntes da planta; sendo inviável a espera de análises de laboratório para balizar as decisões de tais sistemas.

Neste contexto, este trabalho propõe o uso de analisadores virtuais, também conhecidos como *soft sensors*, como uma solução para o problema de obtenção do teor de enxofre do petróleo hidrotratado em uma alta frequência e com baixo investimento inicial.

Foram utilizados dados de uma planta real de hidrotratamento. Por solicitação do fornecedor dos dados, os mesmos foram normalizados, e sua fonte não será revelada.

Serão discutidas algumas abordagens para a construção do analisador virtual, a possibilidade do uso do analisador virtual para o controle de processos e a comparação entre os métodos utilizados para determinação do método mais eficaz de construção do mesmo.

Sendo assim, os objetivos são:

- Propor o uso de analisadores virtuais como uma solução para obtenção do teor de enxofre em alta frequência e com baixo investimento inicial;
- Discutir diferentes métodos e técnicas para a construção dos analisadores virtuais;
- Apresentar um estudo de caso sobre a construção de um analisador virtual.

## **1.2 Estrutura do Trabalho**

Este trabalho encontra-se subdividido em sete capítulos, sendo que o primeiro é a introdução, onde é apresentado, de forma resumida, o problema e as soluções propostas.

No Capítulo 2, é descrito o processo industrial de hidrotratamento de petróleo, procurando descrever a relevância do conhecimento da qualidade do produto para a máxima eficiência da unidade.

O Capítulo 3 traz uma breve revisão da teoria por trás dos analisadores virtuais, abordando conceitos e exemplos de aplicações.

O Capítulo 4 apresenta as técnicas a serem utilizadas para a construção do analisador virtual, apresentando os motivos, vantagens e desvantagens de cada uma delas.

As implementações realizadas e as variáveis escolhidas para compor cada um dos analisadores virtuais desenvolvidos ao longo deste trabalho encontram-se no Capítulo 5.

No Capítulo 6, os resultados são apresentados e discutidos, buscando uma resposta ao problema apresentado na Introdução.

Finalmente, no Capítulo 7, são apresentadas as conclusões gerais e temas pertinentes à possíveis trabalhos futuros.

## 2. HIDROTRATAMENTO DE PETRÓLEO

Segundo [Campos et al., 2013], o objetivo das unidades de hidrotreamento de petróleo é promover a remoção de compostos indesejáveis dos derivados de petróleo através do uso de hidrogênio na presença de catalisadores específicos.

São removidos compostos como enxofre, nitrogênio, aromáticos, etc., de correntes de óleo diesel, gasolina, querosene de aviação, dentre outras.

A remoção destes compostos se torna necessária por questões ambientais e de qualidade do produto, o que faz com que o uso de tais unidades de processamento venha ganhando força no Brasil desde a década de 1990 [Silva, 1995].

Segundo o site da ANP (Agência Nacional de Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis) [www.anp.gov.br/?id=2366], já há varejistas habilitados para vender diesel de baixo teor de enxofre (10 ppm) desde 2013, sendo cadastrados automaticamente os varejistas que já comercializavam, na época, o enxofre contendo 50 ppm.

Isto se deve ao fato de a presença do enxofre nos combustíveis causar a formação de dióxido de enxofre ( $\text{SO}_2$ ), que a depender do tempo de exposição pode causar problemas respiratórios, irritar a mucosa dos olhos e agravar problemas cardiovasculares. Além disso, em contato com o oxigênio presente no ar, pode ser formado o trióxido de enxofre ( $\text{SO}_3$ ), que por sua vez pode reagir com a humidade presente na atmosfera e transformar-se em ácido sulfúrico ( $\text{H}_2\text{SO}_4$ ) [Cruz, 2010].

O teor de enxofre no óleo diesel é uma característica importante, pois quanto mais baixo, menos óxidos que podem formar ácidos corrosivos como o sulfúrico e o sulfuroso são formados como resultado de sua queima. Para atender à legislação do órgão regulador, e minimizar o impacto ambiental da queima de combustíveis fósseis como o óleo diesel, se faz necessário um investimento massivo em instalação e modernização das instalações de refino de petróleo [Soares, 2002], em especial nas unidades de hidrotreamento.

Em adição ao cumprimento da legislação brasileira com relação ao teor de enxofre no diesel produto, o hidrotratamento de derivados do petróleo pode trazer benefícios diversos, como condições mais favoráveis de armazenamento do produto devido à mudança de suas propriedades e possibilitar a incorporação de novas correntes, antes inadmissíveis, ao produto final [Longhi et al., 2012].

Uma unidade de hidrotratamento, de modo geral, tem fluxograma conforme apresentado por [Longhi et al., 2012]; podendo variar algumas particularidades de cada processo, como a posição e/ou a existência de baterias de trocadores de calor, ou a quantidade de reatores, dependendo da composição da corrente a ser hidrotratada.

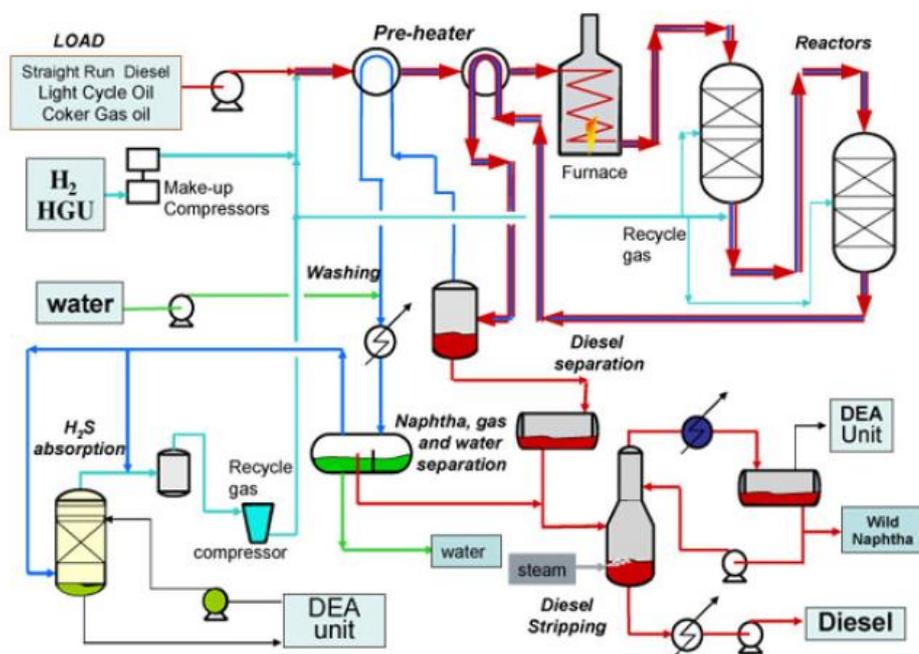


Figura 1 – Esquema da unidade de HDT da REFAP/RS  
 Fonte: Longhi et al., 2012

A carga da unidade é composta por uma mistura complexa de hidrocarbonetos que se deseja retirar as impurezas, no caso de uma unidade de hidrotratamento de gasolina, estes hidrocarbonetos podem ter de quatro a doze átomos de carbono e no caso do óleo diesel, um líquido mais viscoso que a gasolina, de nove a vinte átomos de carbono [Soares, 2002].

Como, a depender da natureza da carga, o ponto de ebulição da mesma pode variar consideravelmente, o arranjo de trocadores, e as temperaturas envolvidas nas reações podem variar.

Esta carga é misturada com o hidrogênio da unidade de produção de hidrogênio (denominada HGU no fluxograma apresentado por [Longhi et al., 2012]), e uma corrente de gás de reciclo rico em hidrogênio, e pré-aquecida com trocadores de calor, visando assim um reaproveitamento da energia dos efluentes dos reatores, e em um forno até atingir a temperatura desejada para o envio aos reatores [Campos et al., 2013].

Nos reatores, há a presença de catalisadores, que podem variar de acordo com a corrente a ser hidrotratada e com os objetivos da unidade. A escolha do tipo de catalisador a ser utilizado é indispensável para se obter o controle das reações do processo, dirigindo as mesmas na direção dos produtos de interesse da unidade em questão [Silva, 1995].

Os catalisadores utilizados no hidrotratamento devem ter características hidrogenantes e devem ter minimizadas as características de craqueamento e saturação, de modo a se obter uma boa seletividade do processo e minimizar o consumo de hidrogênio [Correa, 2011], por se tratar de um dos principais insumos, e mais caros, do processo de hidrotratamento.

No interior dos reatores, impurezas como o enxofre são retiradas das correntes que se deseja purificar, reagindo, na presença dos catalisadores, com o hidrogênio presente na carga [Correa, 2011].

Conforme descrito por [Campos et al., 2013], devido ao fato de as reações de hidrotratamento serem exotérmicas, as temperaturas dos leitos de reação são controladas, injetando gás frio rico em hidrogênio na entrada dos leitos de reação. Tal prática, além de resfriar os leitos de reação também fornece hidrogênio para a proteção dos catalisadores da deposição de produtos nos mesmos, aumentando a durabilidade do catalisador e fornecendo excesso de matéria prima para a reação de remoção de contaminantes da carga.

Estas reações produzem compostos como o ácido sulfídrico ( $H_2S$ ) e a amônia ( $NH_3$ ), que devem ser separados dos hidrocarbonetos livres de impurezas como o nitrogênio e o enxofre nas seções posteriores da unidade de hidrotratamento.

A separação é feita através do envio da carga tratada líquida para uma torre retificadora, de acordo com [Campos et al., 2013], onde os compostos como o ácido sulfídrico ( $H_2S$ ) e a amônia ( $NH_3$ ) são retirados no topo e enviados para tratamento. Tal separação é feita pela diferença de peso molecular destas moléculas (mais leves) e dos hidrocarbonetos de interesse (mais pesados), através da injeção de vapor na torre retificadora.

Dada a breve explicação de como uma corrente de hidrocarbonetos tem o enxofre removido, podemos identificar alguns pontos que influenciam fortemente na eficiência de tal remoção e, conseqüentemente, identificar algumas variáveis de processo que possuem correlação com a presença ou não de enxofre no produto final.

Inicialmente, podemos dizer que se a carga do processo possui teor de enxofre constante, isso não irá afetar o teor de enxofre no produto final. Porém, devido à natureza altamente dinâmica do tipo de carga tratada em uma refinaria, conforme podemos observar no trabalho de [Júnior, 1995], devemos considerar que as vazões de hidrocarbonetos que podem compor a carga da unidade de hidrotratamento devem ser levadas em conta.

Em adição a isso, podemos citar as diferenças de temperaturas dos leitos dos reatores como determinantes para indicar o grau de severidade das reações ocorridas no determinado leito. Uma forma amplamente difundida na literatura de se identificar de forma mais representatividade a reação em um determinado leito de reação é o WABT (*Weighter Average Bed Temperature*), que é determinado pela Equação 1.

$$WABT(^{\circ}C) = \frac{1}{3}T_{entrada}(^{\circ}C) + \frac{2}{3}T_{saída}(^{\circ}C) \quad (1)$$

Outras variáveis que podem ser de suma importância na determinação da quantidade de enxofre presente no produto final é a quantidade de gás rico em ácido sulfídrico ( $H_2S$ ) retirado na torre retificadora. Isto pode nos dar uma idéia da quantidade de hidrogênio que foi removido dos hidrocarbonetos e reagiu com o hidrogênio misturado à carga no começo da unidade.

### 3. ANALISADORES VIRTUAIS

Segundo [King, 2011], a medição de propriedades pode ser dividida em duas categorias básicas:

- A primeira é composta de técnicas matemáticas, onde medições básicas de processo, como vazões, temperaturas e pressões são utilizadas para inferir uma propriedade. Esta técnica, também chamada de analisadores virtuais, ou *soft sensors* são frequentemente utilizadas para realizar uma predição de qualidade de produtos ou parâmetros que não possuem medição direta, como atividade de um catalisador, inundação de colunas de separação, etc.;
- A segunda é o uso de analisadores de processo para realizar a medição direta da propriedade desejada.

A intenção deste estudo, e conseqüentemente deste capítulo, é abordar a primeira categoria, utilizada frequentemente onde algumas saídas do processo não podem ser medidas por um sensor ou analisador de processo por motivos variados, mas são essenciais para um controle e monitoramento eficiente de processos industriais [Wang et al., 1996].

Sendo assim, podemos assumir que o processo em questão, no caso deste estudo o hidrotreamento de derivados de petróleo, possui alguma medição de qualidade de seus produtos, mesmo que esta não seja feita em tempo real.

No caso específico da indústria de refino de petróleo, é muito comum que a qualidade do produto seja determinada por análises realizadas em laboratórios qualificados e certificados. Em alguns casos este laboratório pode pertencer à própria empresa e estar instalado dentro da refinaria, em outros pode ser um serviço contratado pela empresa produtora.

O uso de resultados de laboratório para determinação da qualidade dos produtos possui algumas desvantagens, como por exemplo, as citadas em [Campos et al., 2013]:

- O atraso entre a coleta da amostra e o resultado de laboratório pode chegar a várias horas, o que, no caso de a planta ter sofrido novas perturbações entre o momento da coleta e da obtenção do resultado, pode levar o operador a atuar sem realmente saber o estado atual da planta. O resultado disso é uma operação muito longe dos limites, o que pode representar perdas econômicas;
- Este método não permite o controle em tempo real baseado em tais informações;
- Quaisquer erros humanos como limpeza ineficiente dos recipientes a serem utilizados, podem levar a valores distintos da realidade.

Sendo assim, podemos afirmar que esta técnica, como qualquer outra que busque mensurar características de um escoamento e/ou produto, possui erros associados; os quais dependem do método de obtenção dos parâmetros, do seu tempo de resposta e de eventuais erros humanos.

Outra opção é o uso de analisadores de processo, a segunda dentre as categorias básicas de obtenção de propriedades citadas por [King, 2011]. Esta pode ser uma solução para que o operador tenha a informação da propriedade mensurada em maior frequência, possibilitando que o operador tenha tempo hábil para realizar as correções necessárias no processo.

Algumas empresas e/ou plantas podem encontrar dificuldade para viabilizar o investimento inicial ou para a manutenção dos analisadores, que pode ser uma demanda frequente e especializada na forma de calibração, limpeza, troca de filtros, entre outros. Além disso, os analisadores de processo podem trazer informações em uma frequência alta quando comparada à das análises de laboratório, mas insuficiente no caso de uma contaminação de produto, que pode gerar a perda de todo um inventário [Campos et al., 2013].

Além disso, devido ao custo significativo de um analisador de processo, muitas vezes o mesmo analisador é utilizado para determinar propriedades de diversas correntes da unidade. Como exemplo, podemos citar um analisador de teor de enxofre que é utilizado para medir o teor de enxofre da carga e do produto final do processo.

Como as correntes supracitadas, geralmente, possuem ordens de grandeza distintas, sendo que a carga geralmente contém algo da ordem de milhares de ppm de enxofre e o produto pode ser produzido com teores de até 10 ppm no caso do diesel de baixo enxofre comercializado no Brasil, deve-se ter certeza de que o analisador apresenta boa precisão para todo o espectro de análise requerido [Campos et al., 2013], ou mesmo se determinada leitura está dentro do *range* de leitura para qual o analisador foi especificado.

Uma alternativa aos cenários apresentados é a primeira dentre as categorias básicas de obtenção de propriedades citadas por [King, 2011], a implementação de um analisador virtual.

Segundo [King, 2011], mesmo que esteja em funcionamento um analisador de processo confiável para realizar a medição de uma propriedade, ainda vale a pena desenvolver um analisador virtual em paralelo. Como o analisador virtual é baseado nas variáveis medidas diretamente, sua resposta é consideravelmente mais rápida que a do analisador.

Um exemplo do fenômeno citado no parágrafo anterior pode ser visto na Figura 2, simulando uma resposta de um PID sintonizado de maneira ótima respondendo ao mesmo processo, com variação no tempo de amostragem de 30 para 300 segundos. Tal experiência resultou em um desvio maior e mais prolongado em relação ao SP. Sendo assim, um analisador virtual serve não somente como um substituto do analisador de processo, mas também o complementa, devido à sua maior frequência de atualização.

Um dos principais objetivos da construção de analisadores virtuais na indústria petroquímica é o seu uso em sistemas de controle de processos voltados para a otimização, como os sistemas de controle avançado; que frequentemente necessitam de informações em tempo real sobre propriedades de diversas correntes da planta [Campos et al., 2013].

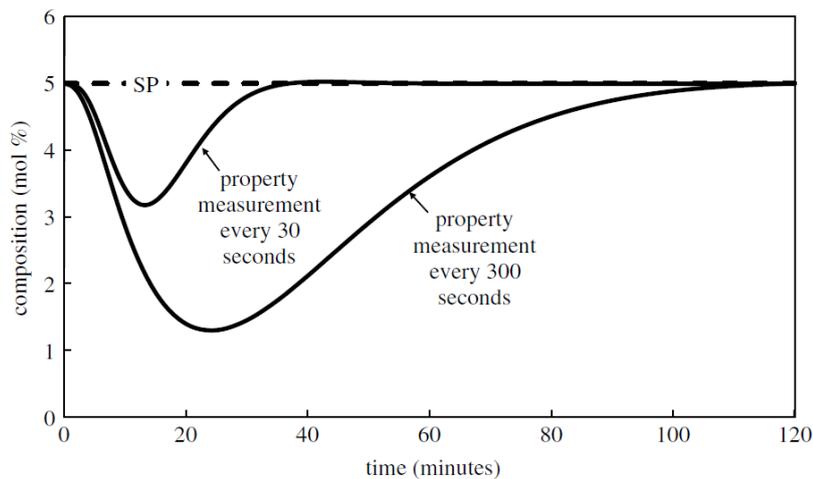


Figura 2 – Efeito da amostragem na resposta de um PID  
Fonte: King, 2011

Segundo [Campos et al., 2013], a obtenção de um bom desempenho dos analisadores virtuais envolve muitas decisões e escolhas vinculadas a vários aspectos, como:

- Finalidade do analisador virtual;
- Os dados requeridos para uma boa estimativa da propriedade;
- Quais as variáveis que irão compor o modelo;
- Estrutura e características do modelo ou algoritmo a ser utilizado;
- Seleção e validação do modelo escolhido;
- Mecanismos de ajuste;
- Acompanhamento do desempenho e manutenção frequente do algoritmo ou modelo.

Além disso, para um bom desempenho do analisador virtual, deve-se escolher variáveis para composição do modelo obedecendo alguns critérios como variáveis independentes entre si, que influenciem de fato a propriedade que se deseja inferir; conhecimento do processo que se está estimando o comportamento [Campos et al., 2013].

Adicionalmente, espera-se que as fontes geradoras das variáveis escolhidas para compor o modelo em questão estejam provendo dados coerentes com a realidade. Ou seja, no caso de o modelo ser composto por várias informações de sensores da planta, como sensores de temperatura, pressão, vazão, etc., é essencial que os mesmos estejam calibrados, e sua manutenção se dê com frequência, pois em caso de falha ou incoerência de algum deles, o analisador virtual também terá seu valor gerado equivocadamente.

## **4. FERRAMENTAS DE CONSTRUÇÃO DE ANALISADORES VIRTUAIS**

As diferentes técnicas de implementação de analisadores virtuais permitem que grandezas representativas de parâmetros de qualidade dos produtos sejam estimadas, para que os mesmos possam ser utilizados em algoritmos de controle de processos.

Podemos dividir os modelos matemáticos utilizados para o desenvolvimento de analisadores virtuais de diversas formas, uma delas divide os modelos entre duas grandes categorias, segundo [Campos et al., 2013], os modelos fenomenológicos e os modelos empíricos; também classificados por [Aguirre, 2004] como, respectivamente, modelagem caixa branca e identificação de sistemas.

Os modelos fenomenológicos, ou caixa branca, são construídos a partir de equações que representam princípios fundamentais como as leis da física, da termodinâmica ou da conservação; sendo, portanto, fundamentados em conceitos teóricos. Já para a obtenção dos modelos empíricos, ou identificação de sistemas, são utilizadas relações matemáticas que buscam representar as relações de causa e efeito entre as variáveis de entrada e a propriedade que se deseja inferir e cujos parâmetros são determinados a partir de dados.

Qualquer um que seja o tipo de modelo escolhido para a modelagem, depende de uma base de dados para seu ajuste, sendo que os modelos fenomenológicos necessitam de uma massa de dados relativamente menor para seu ajuste. Especificamente neste trabalho, não foram utilizados modelos fenomenológicos, pois os mesmos podem revelar características importantes do processo. Esta situação é indesejada pela fonte detentora dos dados, e por este motivo não será uma das técnicas abordadas neste trabalho.

## 4.1 Regressão Linear Múltipla

Uma técnica extremamente simples, podendo ser executada por qualquer pessoa com acesso ao programa Microsoft Excel®, é a Regressão Linear Múltipla. Tal técnica pode ser realizada através do uso da ferramenta Solver®, disponível no programa. A ferramenta pode ser utilizada para realizar uma regressão linear múltipla, similar à demonstrada na Equação 2 [Esteves, 2010], que pode ser definida como uma versão mais simples do estimador de mínimos quadrados proposto por [Aguirre, 2004].

$$\hat{y} = b_0 + b_1x_1 + b_2x_2 + \dots + b_nx_n \quad (2)$$

Onde:

- $\hat{y}$  é a estimativa da variável de interesse;
- $x_1, x_2, \dots, x_n$  são as variáveis de entrada;
- $b_0, b_1, b_2, \dots, b_n$  são os coeficientes das variáveis de entrada.

Segundo [Larson et al., 2010], ao utilizar várias variáveis independentes (entradas) para realizar uma previsão de uma variável dependente (resposta) pode-se obter uma resposta adequada para a minimização dos resíduos (diferenças entre a variável estimada e a real).

Sendo assim, podemos afirmar que a regressão linear múltipla assume que a saída (variável de interesse) é uma média ponderada das variáveis de entrada. Obviamente esta técnica tem limitações, pois se trata de uma aproximação linear e a maioria dos processos industriais contém fortes não-linearidades.

Mas a regressão linear múltipla foi escolhida por demonstrar bons resultados para a construção de alguns analisadores virtuais (dependendo do tipo de processo e sua complexidade) e para se obter um parâmetro de comparação com outras técnicas.

Após determinar as variáveis de entrada da regressão linear múltipla, são definidos arbitrariamente valores iniciais aos coeficientes. Isto posto, o objetivo principal de uma técnica de estimação é minimizar os erros, isto é  $(y - \hat{y})$ .

Porém, na realidade, a aproximação da função de estimação da função real é realizada através da minimização do MSE (erro médio quadrático), isto é  $\sum(y - \hat{y})^2$ . Esta técnica também é chamada de método dos mínimos quadrados [Esteves, 2010].

O uso do MSE é mais adequado, pois pune igualmente desvios positivos ou negativos da função, evitando que, na soma dos erros não quadráticos, erros positivos cancelem erros negativos e, erroneamente, o algoritmo possa entender ter encontrado a melhor solução, a que mais aproxima a função de estimação da função real, quando na verdade parte dos pontos possui um erro positivo e parte possui um erro negativo, que se anulam na soma.

Este tipo de modelo se caracteriza pela simples implementação e por apresentar bons resultados quando se tem uma boa correlação linear entre as entradas selecionadas e a saída desejada. Porém, deve-se ter em mente que o fato de haver correlação entre duas variáveis não necessariamente implica em causalidade.

Ou seja, não podemos afirmar que se quando uma primeira variável apresenta um crescimento e uma segunda variável também apresenta, que o comportamento da segunda variável ocorreu devido à mudança da primeira. De qualquer sorte, o uso da correlação linear é importante para a determinação de quais variáveis irão compor o modelo do analisador virtual.

## 4.2 Redes Neurais Artificiais (RNAs)

Outra técnica bastante utilizada para a construção de analisadores virtuais é a implementação de RNAs (Redes Neurais Artificiais). Segundo [Braga et al., 2007], devido à características inerentes às RNAs, como o paralelismo natural e a forma de representação interna de suas redes, possibilitam desempenhos superiores à modelos convencionais.

Além disso, a capacidade de aprendizado através de exemplos e de generalizar os dados tratados, gerando respostas coerentes para dados não conhecidos faz com que esta técnica seja amplamente utilizada para diversas aplicações em detrimento de outras técnicas.

Um dos motivos para a escolha do uso de RNAs como um dos métodos de implementação do analisador virtual neste trabalho é justamente o aprendizado das RNAs, que pode ser supervisionado ou não, em que se mapeam entradas e saídas da rede em questão para obtenção dos pesos sinápticos necessários à adequação das saídas com as entradas [Perales, 2011].

De maneira geral, podemos representar um neurônio 'k' de 'm' entradas conforme modelo da Figura 3 pela Equação 3.

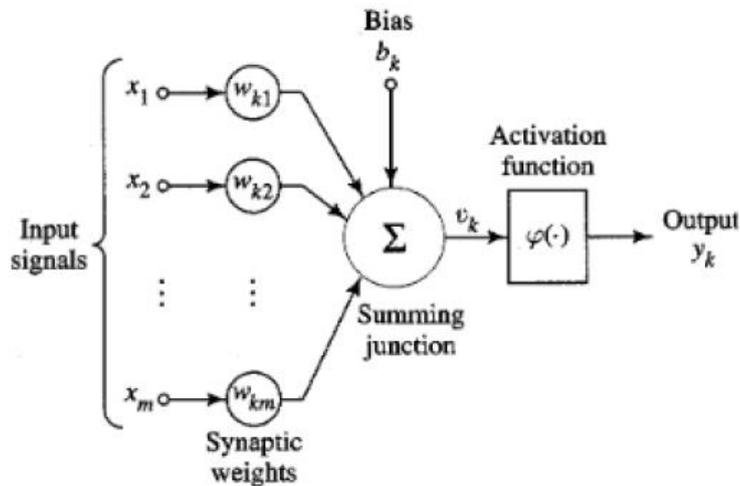


Figura 3 – Representação de um neurônio  
 Fonte: Haykin, 2001

$$y_k(x, w) = \varphi[\sum_{i=1}^m(x_i * w_{ki}) + b_k] \quad (3)$$

Onde:

- $\varphi$  é a função de ativação do neurônio;
- $w_{ki}$  é o peso sináptico da entrada  $i$ ;
- $b_k$  é o termo de polarização do neurônio;
- $x = [x_i, \dots, x_m]^T$  é o vetor de entradas do neurônio;
- $w = [w_{ki}, \dots, w_{km}]^T$  é o vetor de pesos sinápticos do neurônio.

Quando se implementa uma RNA, é primordial para que seu desempenho seja satisfatório que ela possua a habilidade de aprender a partir de seu ambiente e melhorar o seu desempenho através de tal aprendizagem [Haykin, 2001].

Segundo [Braga et al., 2007], antes de se utilizar uma rede neural na solução de um problema, a mesma deve passar por uma fase de aprendizagem, onde a rede extrai informações relevantes de padrões de informações apresentados a ela. Assim, a rede cria uma representação própria do problema, podendo, posteriormente, resolver problemas similares.

[Haykin, 2001] define aprendizagem, no contexto de redes neurais, como um processo pelo qual os parâmetros livres de uma rede neural são adaptados através de um processo de estimulação pelo ambiente no qual ela está inserida, sendo que seu tipo é determinado pelo modo com que a modificação dos parâmetros ocorre.

Existem várias regras de aprendizagem aplicadas a redes neurais disponíveis em obras como [Braga et al., 2007] e [Haykin, 2001]. Como suas denominações podem variar entre uma obra e outra, a título de exemplo enumeramos as regras apresentadas em [Haykin, 2001]:

- Aprendizagem por correção de erro;
- Aprendizagem baseada em memória;
- Aprendizagem Hebbiana;
- Aprendizagem competitiva;
- Aprendizagem de Boltzmann.

Além de existirem diversas regras de aprendizado de RNAs, elas também podem ser agrupadas em regras de aprendizado supervisionado e não-supervisionado [Braga et al., 2007].

Portanto, além da escolha das variáveis de entrada e saída, a utilização de uma RNA pede que sejam determinados outros parâmetros, como a regra de aprendizado. Além disso, também deve ser determinada a existência de camadas escondidas, e caso positivo, o número de camadas.

Especificamente para o escopo deste trabalho, devido à complexidade inerente às reações químicas que ocorrem em uma unidade de hidrotreatamento, serão utilizadas RNAs de múltiplas camadas, também conhecidas como MLP (*Multilayer Perceptron*).

[Haykin, 2001] relata o uso bem sucedido de *perceptrons* de múltiplas camadas, doravante chamados apenas de MLP, para resolver problemas de alta complexidade através de seu treinamento de forma supervisionada com o algoritmo de retropropagação de erro (*error back-propagation*), um algoritmo baseado na regra de aprendizagem por correção do erro. Esta forma de aprendizado consiste em dois passos através das camadas da rede: a propagação, onde um vetor de entrada é aplicado aos nós da rede (mantendo-se seus pesos fixos) e seu efeito se propaga através da rede, produzindo um conjunto de saídas; e a retropropagação, onde a resposta produzida pela rede é subtraída de uma resposta desejada para produzir um sinal de erro, que por sua vez é propagado para trás, variando-se os pesos da rede de modo a se obter uma resposta (saída) mais próxima possível da desejada.

Uma das características do MLP que o torna mais adequado à solução do problema em questão, é o fato de que o modelo de cada neurônio da rede inclui uma função de ativação não-linear. Esta não-linearidade deve ser, necessariamente, suave; pois a função deve ser diferenciável em qualquer ponto [Haykin, 2001]. Isto torna mais fácil o treinamento de problemas não-lineares, como a modelagem de uma reação química, por exemplo.

## 5. METODOLOGIA E IMPLEMENTAÇÃO

Conforme dito anteriormente, os dados fornecidos foram normalizados a pedido da empresa cedente, com o intuito de preservar as informações confidenciais que poderiam, eventualmente, ser extraídas das ordens de grandeza dos mesmos e outras conclusões que poderiam ser tiradas de posse dos dados.

Sendo assim, as variáveis foram renomeadas, e um breve descritivo de todas as variáveis disponíveis para utilização neste estudo é apresentado a seguir:

- V\_CARGA\_TIPO\_01 – vazão total de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_TIPO\_02 – vazão total de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_TOTAL – vazão total de carga;
- V\_CARGA\_01 a V\_CARGA\_13 – vazão de carga de um determinado tipo;
- V\_H2S – vazão de gás rico em H<sub>2</sub>S;
- MV\_SAIDA\_H2S – abertura da válvula que controla a vazão de gás rico em H<sub>2</sub>S;
- COMB\_AQUEC\_FORNO – vazão de combustível enviado ao forno de aquecimento da unidade;
- CONSUMO\_H2 – consumo de H<sub>2</sub> para hidrotreatamento do produto;
- V\_QUENCH\_01 a V\_QUENCH\_03 – vazão de H<sub>2</sub> para resfriamento de leito;
- MV\_PID\_TEMP\_01 – saída de uma malha de controle de temperatura de reação;
- WABT\_GLOBAL – WABT dos reatores;
- DELTA\_T\_LEITO\_01 a DELTA\_T\_LEITO\_04 – diferencial de temperatura no leito 01 a 04;

- WABT\_NORM – WABT normalizado.

Infelizmente, por problemas apresentados pelo historiador de dados de processo, algumas variáveis tinham ausência de dados em alguns momentos, e portanto tiveram de ser excluídas da utilização para geração dos modelos empíricos construído durante o trabalho. Uma lista das variáveis excluídas é apresentada a seguir:

- V\_CARGA\_03 – vazão de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_04 – vazão de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_07 – vazão de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_11 – vazão de carga de um determinado tipo;
- V\_CARGA\_12 – vazão de carga de um determinado tipo;
- DELTA\_T\_LEITO\_03 – diferencial de temperatura no leito 3º leito.

Estas variáveis foram excluídas devido à ausência de métodos que pudessem prover seus valores nos momentos de falha do historiador de processo de forma fidedigna ao comportamento da planta. Sendo assim, caso estas variáveis fossem utilizadas, poderíamos observar um desempenho melhor ou pior que o possível de se alcançar, mas obtido de forma não fundamentada em conceitos teóricos. Quaisquer outra ação com tais variáveis, como por exemplo, a interpolação de seus valores, poderia trazer prejuízos enormes à modelagem. Uma interpolação dos dados poderia assumir que os valores de horas ou dias se comportaram de maneira linear, o que na maioria esmagadora das vezes não é verdade.

Sabe-se, de posse do conhecimento dos dados originais, que os mesmos englobam duas campanhas distintas realizadas, especificamente, nesta unidade de hidrotratamento. Tais campanhas diferem não somente pela ordem de grandeza do enxofre presente no produto, mas também pelo distinto ponto operacional de diversas outras variáveis de processo que irão compor a modelagem.

Há vantagens e desvantagens de se separar ou não as campanhas para criação de modelos distintos do comportamento do processo. Uma das vantagens é a presença de um número maior de pontos de operação do processo, o que segundo [Campos et al., 2013] evita que, em caso de pouca variação da propriedade inferida, possa se tornar mais difícil estabelecer reações de causa e efeito que o modelo deve representar. Porém, a depender da estrutura dos dados, uma divisão de campanhas ou de métodos de operação distintos pode fazer com que o analisador virtual tenha um desempenho melhor justamente por ter sido modelado para aquela situação específica. Tal divisão pode ser feita manualmente, através de interações (indicações de campanhas distintas) pelos sistemas de controle da unidade ou até mesmo através de RNAs construídas para identificar se um determinado grupo de dados apresenta um ou outro grupo de características.

Neste trabalho foram adotados os dois métodos, sendo realizadas todas as modelagens propostas para analisadores virtuais com a presença de todos os dados e separadamente para cada campanha. Tal separação foi feita manualmente e foi possível pelo conhecimento prévio do processo e análise dos dados não-normalizados.

Dados os cenários supracitados, teremos 3 conjuntos de resultados ao longo deste trabalho: os resultados das modelagens realizadas com todos os conjuntos de dados; das modelagens de parte dos dados pertencentes à campanha 1; e das modelagens de parte dos dados pertencentes à campanha 2 (doravante chamados de GRUPO\_TOTAL, GRUPO\_C01 e GRUPO\_C02, respectivamente). Para estes três grandes grupos serão construídos analisadores virtuais através de métodos distintos, e então os resultados destes métodos serão comparados apenas entre si, não sendo válido realizar a comparação com resultados de um grupo diferente, por exemplo.

Conforme descrito no Capítulo 4, foram utilizadas duas técnicas para a construção de analisadores virtuais: a regressão linear múltipla e RNAs. O objetivo principal é realizar a melhor aproximação do comportamento real do processo, mas também se deseja realizar uma comparação entre as técnicas, produzindo um paralelo importante para escolha futura de um método para construção de um analisador virtual, similar ou não.

Para a construção dos analisadores virtuais, foram utilizados conjuntos distintos das variáveis de entrada, selecionadas de acordo com sua correlação linear com os dados de laboratório de teor de enxofre no produto. Foram construídos quatro grupos de variáveis de entrada de acordo com sua correlação linear, listados a seguir:

- ENT\_00% – todas as variáveis de entrada foram utilizadas;
- ENT\_10% – foram utilizadas as variáveis de entrada com correlação linear igual ou superior a 10%;
- ENT\_20% – foram utilizadas as variáveis de entrada com correlação linear igual ou superior a 20%;
- ENT\_20%\_PROC – foram utilizadas as variáveis de entrada com correlação linear igual ou superior a 20%, sendo eliminadas variáveis que representam a mesma influência.

Segundo [Larson et al., 2010], o coeficiente de correlação linear é uma medida da força e direção da relação linear entre dois grupos de variáveis. Caso haja uma correlação linear negativa forte, o coeficiente será próximo de -1, enquanto no caso de uma correlação linear positiva forte, o mesmo estará próximo de 1.

Vale ressaltar que, a construção do quarto grupo listado de variáveis de entrada teve como base a afirmação de [Campos et al., 2013], que diz que intruzir em um modelo de uma inferência ou analisador virtual duas ou mais variáveis que representam a mesma influência pode levar a graves falhas de modelagem.

Sendo assim, cada um dos grupos anteriormente apresentados (GRUPO\_TOTAL, GRUPO\_C01, GRUPO\_C02) terá quatro subgrupos que terão de ser comparados individualmente (ENT\_00%, ENT\_10%, ENT\_20%, ENT\_20%\_PROC). Uma matriz com a composição dos grupos, e a nomenclatura utilizada daqui em diante é apresentada a seguir.

Tabela 1 – Grupos de resultados

GRUPOS	GRUPO_TOTAL	GRUPO_C1	GRUPO_C2
ENT_00%	GRUPO_TOTAL_ENT_00%	GRUPO_C1_ENT_00%	GRUPO_C2_ENT_00%
ENT_10%	GRUPO_TOTAL_ENT_10%	GRUPO_C1_ENT_10%	GRUPO_C2_ENT_10%
ENT_20%	GRUPO_TOTAL_ENT_20%	GRUPO_C1_ENT_20%	GRUPO_C2_ENT_20%
ENT_20%_PROC	GRUPO_TOTAL_ENT_20%_PROC	GRUPO_C1_ENT_20%_PROC	GRUPO_C2_ENT_20%_PROC

Inicialmente, foi realizada a modelagem dos dados pelo método de regressão linear múltipla, citado anteriormente no Capítulo 4. A restrição das variáveis de entrada realizada é válida tanto para os analisadores virtuais construídos através do método de regressão linear múltipla quanto para a construção das RNAs.

Para a obtenção de uma RNA com as características ótimas para cada problema, foi adaptada uma rotina em RStudio®, uma interface de usuário do R®, *software* de computação estatística; desenvolvida como parte da disciplina de Redes Neurais Artificiais, cursada em 2013. Esta rotina constrói várias RNAs com números variáveis de camadas escondidas e de neurônios por camada, e fornece como saída não somente os valores estimados da variável de interesse, mas também gráficos dos dados estimados *versus* dados reais, gráfico de erro da estimativa e as métricas de qualidade MSE e correlação linear para cada uma das RNAs construídas.

A rotina utiliza os pacotes ‘*mlbench*’, ‘*Rcpp*’ e ‘*RSNNS*’, do *software* R® e sua versão atualizada encontra-se em anexo a este documento. Tais pacotes podem ser encontrados no site <http://cran.r-project.org/>, destinado a armazenar códigos e documentação para RStudio® e R®.

Anteriormente a rotina contava com parametrização para uma a três (1-3) camadas escondidas e um a vinte (1-20) neurônios por camada. Antes de efetuar quaisquer modificações, a rotina foi executada sem quaisquer modificações. Devido ao maior volume de dados para composição dos analisadores virtuais quando comparado com a outra aplicação para qual foi utilizada a rotina, observou-se um tempo de execução relativamente alto (aproximadamente 2,5 minutos).

Além disso, os resultados para a rede com três camadas escondidas claramente necessitavam de um maior número de iterações, devido ao número maior de parâmetros para serem ajustados, conforme pode ser visto na Figura 4, onde a linha vermelha representa o resultado da RNA e a linha preta representa os dados de validação. O exemplo é apresentado considerando-se o grupo de variáveis de entrada 'GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%'.

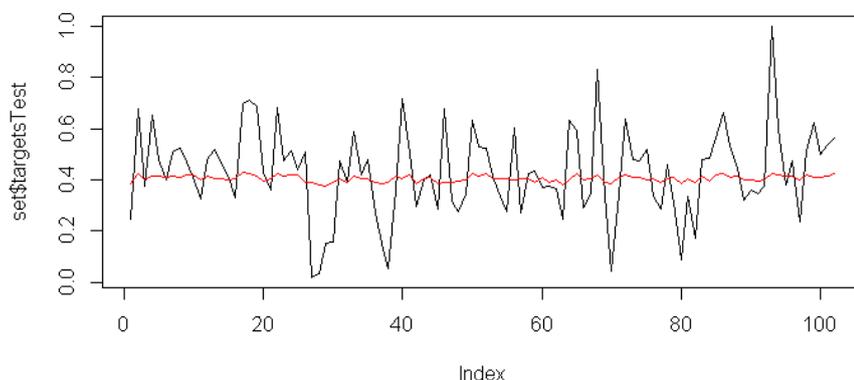


Figura 4 – Exemplo de resultado para uma rede com 3 camadas escondidas  
Fonte: RStudio®

Diante do cenário apresentado decidiu-se restringir o número de camadas escondidas e de neurônios testados para cada camada escondida, visando o menor custo computacional e a possibilidade de funcionamento deste algoritmo para uso do analisador virtual em sistemas de controle de processos em tempo real, como, por exemplo, sistemas de controle avançado que, geralmente, demandam informações a cada minuto em plantas de hidrotreatamento.

Para evitar a polarização dos dados, foi utilizada a função *sample* do RStudio®, que amostra as linhas de uma determinada matriz de forma aleatória, evitando assim que um comportamento observado em apenas parte dos dados seja deixado de fora da modelagem ou da validação por mera questão de posicionamento na matriz de entradas.

O percentual de dados utilizados para treinamento e validação foi de 80% para treinamento e 20% para validação. O algoritmo do RStudio® sugere um percentual de validação padrão de 15% dos dados. O mesmo foi modificado com o intuito de se obter um analisador virtual mais robusto, visto que quanto menor o percentual de dados utilizados para treinamento, maior vai ser a confiabilidade da resposta obtida.

Além disso, foram utilizados como padrão o máximo de iterações de 500, parâmetro para inicialização da função de geração do MLP de 0.1, a função de ativação da camada de saída como uma função linear, a função de aprendizagem da rede como retropropagação do erro, e a função de ativação dos neurônios da(s) camada(s) escondida(s) como sigmoideal.

Os parâmetros tiveram sua configuração mantida conforme já presente na rotina, não sendo realizados testes com outras configurações devido ao desempenho satisfatório obtido com a manutenção da configuração.

Para evitar desempenhos bons ou ruins obtidos apenas pontualmente com as redes testadas, a rotina foi executada 3 (três) vezes para cada um dos 12 conjuntos de dados, com o objetivo de estabelecer as métricas de desempenho (correlação linear e MSE) como não somente um resultado isolado, que pode ser melhor ou pior pela amostragem dos dados de modelagem e validação, mas uma média e desvio padrão.

Outra diferença entre as metodologias de construção do analisador virtual pela regressão linear múltipla ou pelas RNAs é a utilização dos dados para modelagem e validação. No caso das RNAs, os dados foram divididos entre dados de modelagem e validação na proporção de 80% e 20%, respectivamente; enquanto que para a construção da regressão linear múltipla, os mesmos dados foram utilizados para modelagem e validação, o que, teoricamente, leva a um desempenho maior, devido à maior quantidade de dados para modelagem, e consequentemente, maior quantidade de situações modeladas.

## 6. RESULTADOS

### 6.1 Resultados da Regressão Linear Múltipla

Aplicada a metodologia citada no Capítulo 5, foram obtidos os resultados discutidos a seguir.

Devido às limitações já apontadas, e inerentes ao método de regressão linear múltipla, foram observados dados de correlação e MSE considerados baixos para o uso em escala industrial. A Tabela 2 mostra um sumário dos resultados obtidos com as regressões lineares múltiplas implementadas no Microsoft Excel®.

Tabela 2 – Resultados obtidos com a regressão linear múltipla

<b>GRUPO</b>	<b>CORR</b>	<b>MSE</b>
GRUPO_TOTAL_ENT_00%	38.54%	2.624E-02
GRUPO_TOTAL_ENT_10%	37.65%	2.645E-02
GRUPO_TOTAL_ENT_20%	33.80%	2.729E-02
GRUPO_TOTAL_ENT_20%_PROC	31.90%	2.768E-02
GRUPO_C1_ENT_00%	3.63%	2.733E-04
GRUPO_C1_ENT_10%	-19.00%	3.301E-04
GRUPO_C1_ENT_20%	4.40%	2.732E-04
GRUPO_C1_ENT_20%_PROC	-2.37%	2.732E-04
GRUPO_C2_ENT_00%	27.87%	2.087E-02
GRUPO_C2_ENT_10%	24.71%	2.128E-02
GRUPO_C2_ENT_20%	28.00%	2.068E-02
GRUPO_C2_ENT_20%_PROC	19.40%	2.159E-02

Os resultados demonstram um desempenho razoável, quando analisada a correlação linear, para as regressões feitas com a totalidade dos dados (grupos que se iniciam com 'GRUPO\_TOTAL'), e um desempenho um pouco pior para as regressões realizadas somente com os dados da campanha C2 (grupos que se iniciam com 'GRUPO\_C2'). Porém, demonstram um desempenho ruim e instável quando observados os resultados da campanha C1 (grupos que se iniciam com 'GRUPO\_C1').

Este fenômeno pode ser explicado pela quantidade de dados disponível em cada um dos grupos. Enquanto o grupo com a totalidade dos dados, obviamente, contém o maior número de amostras para determinação dos parâmetros de regressão, os grupos C1 e C2 contém diferentes quantidades de dados, sendo o grupo C1 representa aproximadamente 6% do total de dados, e o grupo C2, conseqüentemente, 94%. Isso faz com que, devido à falta de situações para determinação adequada dos parâmetros, as regressões lineares do grupo C1 minimizem o erro quadrático com os valores próximos da média dos valores de referência, conforme podemos observar na Figura 5.

Tal característica de uma regressão linear múltipla realizada com um número reduzido de dados também explica a correlação linear variando entre valores baixos positivos e negativos.

Além disso, uma análise interessante a ser feita, observando-se os dados de correlação e MSE das regressões realizadas com a totalidade dos dados, é a redução da correlação e o aumento do MSE quando reduzimos a quantidade de dados de entrada, filtrando-os pela sua correlação linear com a variável desejada. Ao contrário do que se pode imaginar, quando são retirados dados de entrada de menor correlação com a saída, o desempenho da regressão piora.

Isso ocorre porque o próprio algoritmo do Solver® atribui pesos menores às saídas que não vão contribuir com uma diminuição da soma do erro quadrático do resultado, de modo que o filtro se mostrou ineficiente para aumentar a correlação entre o resultado do analisador virtual e as análises de laboratório.

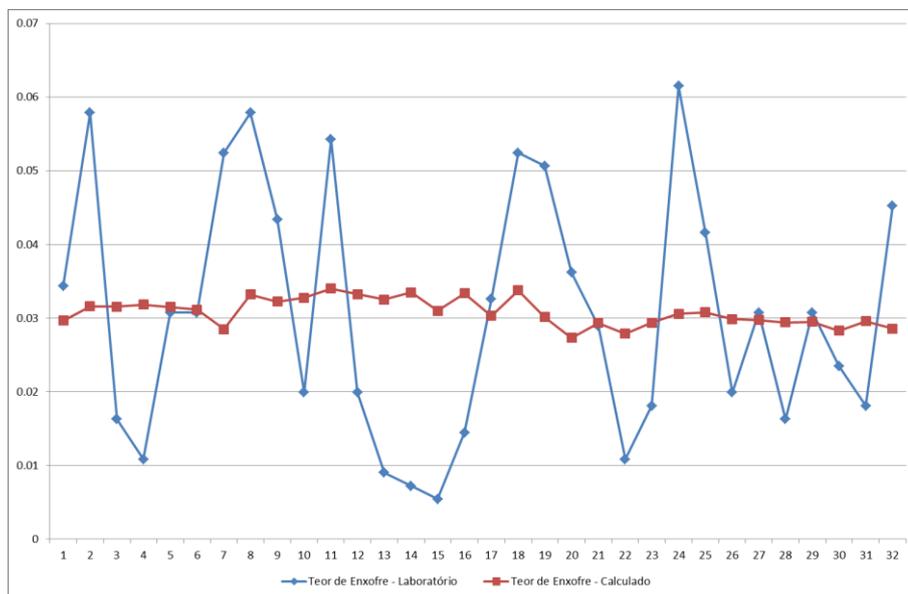


Figura 5 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO\_C1\_ENT\_00%  
 Fonte: Microsoft Excel®

Sendo assim, podemos então comparar os dois melhores desempenhos das regressões lineares múltiplas construídas durante este trabalho, de forma a se obter um *benchmark* para a comparação com os desempenhos das RNAs, conforme interesse já citado.

As regressões que apresentaram o melhor desempenho dentro de seu grupo de limitações pelos dados de saída (TOTAL, C1 e C2) foram as referentes aos grupos GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00% e GRUPO\_C2\_ENT\_20%. Os gráficos com as respostas dos grupos citados podem ser vistos na Figura 6 e na Figura 7.

Analisando a Figura 6 e a Figura 7, em conjunto com os dados da Tabela 2, podemos observar que nenhuma das duas regressões conseguiu capturar os dados mais afastados da média, o que pode ser classificado como um caso menos grave do ocorrido com o GRUPO\_C1\_ENT\_00%, discutido anteriormente.

Porém, pode-se observar que o MSE dos dois é apenas marginalmente melhor que a maioria de seus pares de mesmo grupo (GRUPO\_TOTAL e GRUPO\_C2), a exceção do GRUPO\_C2\_ENT\_20%\_PROC, que apresentou uma correlação consideravelmente abaixo dos seus pares.

Portanto, podemos dizer que, com a utilização dos dados disponíveis e através do método de regressão linear múltipla, não podemos obter um desempenho satisfatório para a construção de um analisador virtual de teor de enxofre no produto para utilização do mesmo em controle de processos.

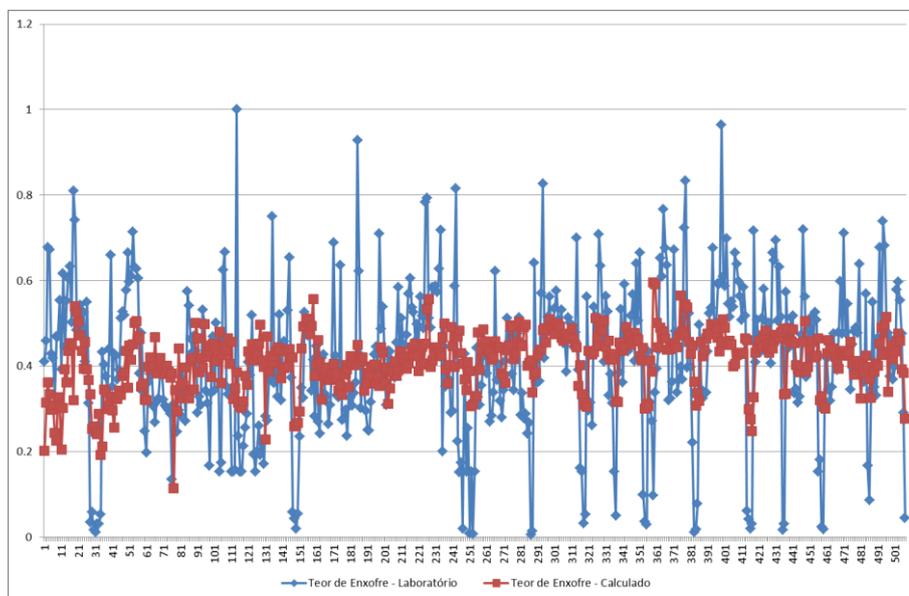


Figura 6 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%  
Fonte: Microsoft Excel®

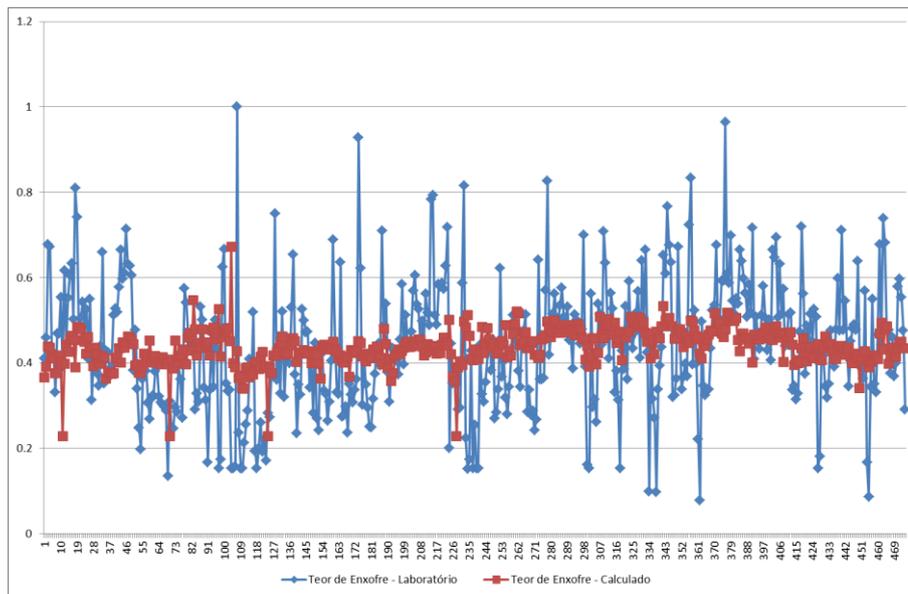


Figura 7 – Desempenho da regressão linear múltipla para o GRUPO\_C2\_ENT\_20%  
 Fonte: Microsoft Excel®

Mesmo os dois grupos apresentando desempenhos bons quando comparados aos seus pares, o objetivo principal deste estudo é a obtenção de uma técnica que satisfaça a eventual necessidade da indústria de ter disponível, em tempo real, uma medição deste valor com uma confiabilidade maior do que a apresentada pela técnica de regressão linear múltipla em qualquer um dos cenários simulados.

A título de exemplo, o MSE apresentado pela rede de maior correlação (GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%) representa um erro médio absoluto de, aproximadamente, 0.16 (dezesseis centésimos). Vale a pena ressaltar que os dados estão normalizados e, portanto, o erro representa 16% do *range* considerado da medição de teor de enxofre. Se o objetivo for, por exemplo, um teor de enxofre igual a 10% do range, nem um valor do analisador virtual igual a zero traria segurança de especificação do produto.

## 6.2 Resultados das Redes Neurais Artificiais

Uma vez esgotadas as possibilidades de uso da regressão linear múltipla como método de construção do analisador virtual desejado, partiu-se para o uso de RNAs, com o objetivo de um desempenho mais assertivo do analisador em relação aos resultados de laboratório.

Inicialmente, ao se utilizar a rotina pré-existente, detectou-se que a quantidade de dados disponíveis seria insuficiente para a estimativa, em tempo hábil, dos parâmetros de peso da RNA de 3 (três) camadas escondidas, pois tal configuração levava a um custo computacional alto, e conseqüentemente a um tempo de execução acima do necessário para o uso em escala industrial do analisador virtual construído.

Isso se deve ao fato de que, para que tal configuração gerasse uma resposta satisfatória, o número de iterações necessárias iria tomar um tempo consideravelmente superior quando comparado às RNAs de 1 (uma) e 2 (duas) camadas.

Sendo assim, a rotina foi ajustada e modificada para que fossem geradas somente RNAs que pudessem ser implementadas em um ambiente industrial, com tempo de execução baixo, da ordem de segundos, para que seus resultados pudessem ser utilizados em sistemas de controle de processos que funcionam, normalmente, a cada minuto.

A rotina utilizada, após as modificações realizadas para a adequação da mesma ao problema foco deste trabalho, encontra-se na no Capítulo 8.

Conforme explicitado anteriormente, para evitar que a geração inicial de pesos realizada aleatoriamente fosse determinante no desempenho das RNAs, a rotina foi executada 3 (três) vezes para cada uma das configurações previamente definidas.

Sendo assim, cada um dos grupos de variáveis de entrada e saída gerou 3 (três) conjuntos de saídas, e conseqüentemente, 3 (três) valores de MSE e correlação para cada uma das configurações possíveis de RNAs, e posteriormente geradas média e desvio padrão dos mesmos para comparação entre si e com os dados das regressões lineares múltiplas. A título de recordação, foram testadas RNAs com 1 (uma) e 2 (duas) camadas escondidas e de 1 (um) a 5 (cinco) neurônios por camada escondida.

Pela grande quantidade de RNAs testadas, foi gerado um volume grande de dados de MSE e correlação, que foram compilados em gráficos e tabelas individuais, para melhor compreensão. As tabelas podem ser visualizadas na seção ANEXOS.

Os gráficos foram divididos por grupos. Sendo um gráfico de MSE e um de Correlação para o GRUPO\_TOTAL, assim como para o GRUPO\_C1 e GRUPO\_C2. Todos os gráficos contém a média (barras dos gráficos) e uma incerteza de 3 desvios padrão (linhas vermelhas ao redor da média).

Foram considerados 3 desvios padrão pelo fato de [Larson et al., 2010] apresentar a regra empírica que diz que aproximadamente 99,7% dos dados de uma distribuição simétrica estão dentro de 3 desvios padrão em relação à média. Portanto, podemos afirmar com 99,7% de certeza que a assertividade da RNA em questão estará entre os limites estabelecidos pelas linhas vermelhas dos gráficos.

Além disso, os resultados foram agrupados de acordo com o tipo de rede aplicada. Por exemplo, os resultados para a RNA de 1 (uma) camada escondida, e 2 (dois) neurônios por camada escondida foram nomeados R1C\_2N.

A seguir são apresentados os resultados, sendo que a Figura 8 e a Figura 9 são referentes ao GRUPO\_TOTAL, a Figura 10 e a Figura 11 ao GRUPO\_C1, e Figura 12 e a Figura 13 ao GRUPO\_C2.

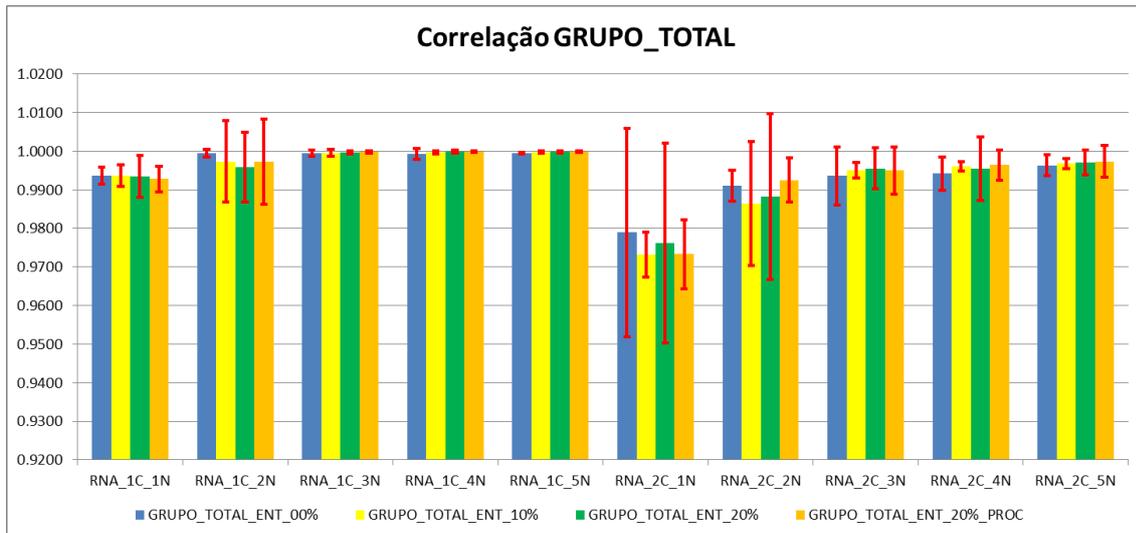


Figura 8 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO\_TOTAL  
 Fonte: Microsoft Excel®

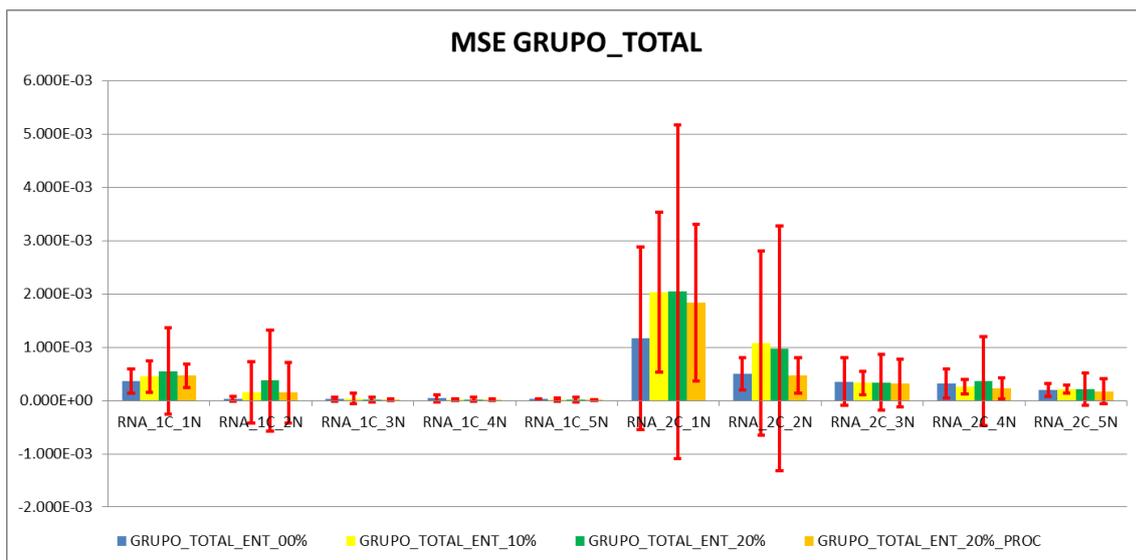


Figura 9 – MSE das RNAs para o GRUPO\_TOTAL  
 Fonte: Microsoft Excel®

É possível observar pelos gráficos de Correlação e MSE do GRUPO\_TOTAL que as RNAs de uma camada escondida e 3 a 5 neurônios por camada apresentaram bons resultados, com correlação próxima de 1 e baixo MSE, sendo que ambos apresentaram baixo desvio padrão. Tais dados demonstram a robustez das soluções utilizando estas configurações de RNAs.

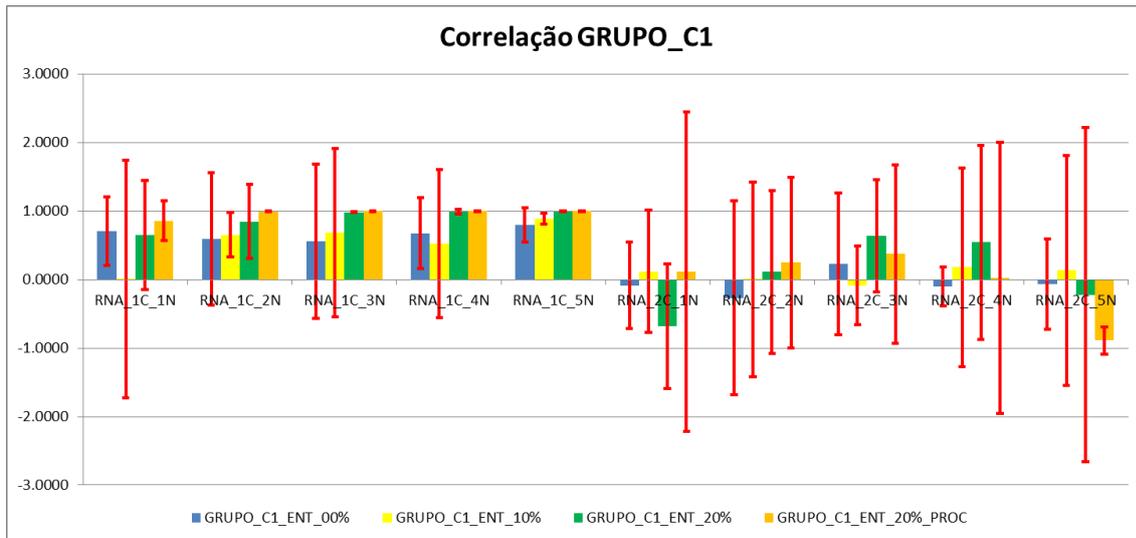


Figura 10 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO\_C1  
 Fonte: Microsoft Excel®

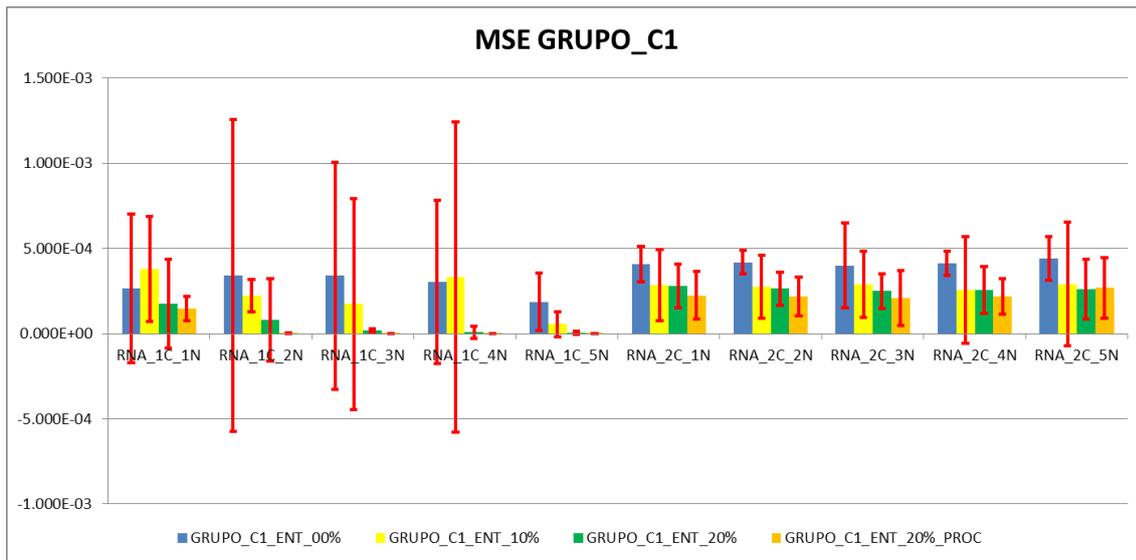


Figura 11 – MSE das RNAs para o GRUPO\_C1  
 Fonte: Microsoft Excel®

Podemos constatar pelos gráficos do GRUPO\_C1 que apresentaram correlação próxima de 1 (RNA\_1C\_2N, RNA\_1C\_3N, RNA\_1C\_4N e RNA\_1C\_5N) algumas apresentaram alta variabilidade da correlação e/ou do MSE. Exceções podem ser visualizadas graficamente, e comprovadas pelas tabelas de dados presentes na seção ANEXOS.

Além disso, ainda com relação à Figura 10 e à Figura 11, as RNAs de duas camadas apresentaram grande variabilidade para os valores de correlação, enquanto que as de uma camada apresentaram o mesmo comportamento para o MSE, indicando a dependência dos valores iniciais de pesos para a obtenção de um bom ajuste, ou de um número maior de iterações para a calibração dos mesmos.

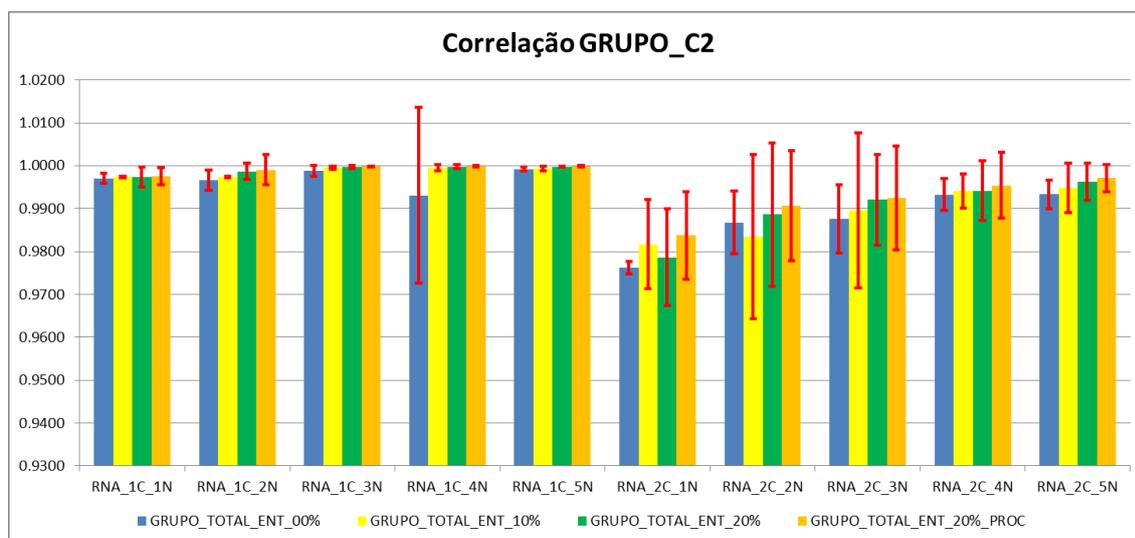


Figura 12 – Correlação linear das RNAs para o GRUPO\_C2  
 Fonte: Microsoft Excel®

Através da análise dos gráficos do GRUPO\_C2, podemos verificar que a correlação das redes apresenta menos variabilidade entre as diferentes configurações de RNAs, analogamente ao encontrado no GRUPO\_TOTAL e o oposto do verificado no GRUPO\_C1. Isto pode ser explicado pelo número de amostras do GRUPO\_C2 e do GRUPO\_TOTAL serem consideravelmente maiores quando comparados ao GRUPO\_C1.

Também podemos verificar uma variabilidade consistentemente mais alta para as RNAs com duas camadas esondidas, analogamente ao comportamento do GRUPO\_TOTAL.

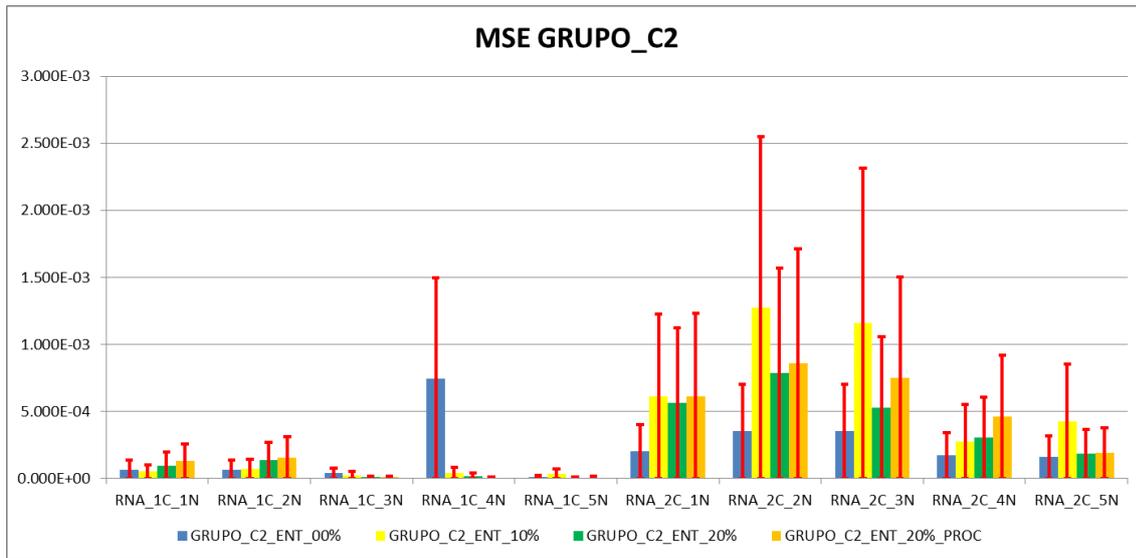


Figura 13 – MSE das RNAs para o GRUPO\_C2  
 Fonte: Microsoft Excel®

Pode-se perceber que, a exceção de algumas médias de correlação, principalmente das redes de 2 camadas do grupo com variáveis da campanha C1 (GRUPO\_C1), o desempenho das RNAs é altamente superior aos apresentados pelas regressões lineares múltiplas. Até mesmo redes mais simples, como as de uma camada escondida e poucos neurônios por camada apresentam correlação maior que o dobro das apresentadas pelas regressões lineares.

Além da diferença de ordem de grandeza da correlação linear, a observação das figuras acima nos permite analisar redes com desvio padrão de correlação discrepantes das demais. Nos casos onde os três ensaios, realizados com o intuito de estabelecer um desempenho independente dos parâmetros iniciais, produziram valores de correlação próximos, o desvio padrão é da ordem de  $10^{-4}$  ou até menor, enquanto que para as redes que apresentaram valores de correlação dependentes dos valores iniciais, este valor chegou próximo de 1 (um), como no caso da RNA com 2 (duas) camadas escondidas e 5 (cinco) neurônios por camada aplicada ao GRUPO\_C1\_ENT\_20%.

Este fato demonstra que a correlação de tal rede variou muito ao longo das amostras, provavelmente pela pequena quantidade de dados para análise, fenômeno já comentado quando da análise do desempenho da regressão linear múltipla para os grupos C1. Conforme mencionado anteriormente, com um número maior de iterações, possivelmente este indicador seria melhorado, mas devido à pequena quantidade de dados disponíveis, isto não significaria, necessariamente, um desempenho satisfatório do analisador virtual oriundo de tal configuração.

Para exemplificar as semelhanças entre o desempenho das RNAs do grupo C1 e o desempenho da regressão linear, a Figura 14, onde a linha vermelha representa o valor estimado e a linha preta o valor de referência.

Analisando a Figura 14 podemos observar resultado semelhante à regressão linear, onde busca-se o menor erro possível entre a estimativa e o valor de referência através da manutenção do valor estimado um valor médio de referência. Um dado interessante a ser observado na figura é a quantidade de dados de validação, que é igual a 7 (sete), que corresponde a 20% do total de dados.

Em uma RNA de tamanha complexidade, seria necessário um número muito maior de dados, tanto para modelagem quanto para validação, para que se obtivesse um rendimento satisfatório de forma recorrente.

Por outro lado, podemos observar nas tabelas de correlação e erro, presentes na seção ANEXOS, excelentes desempenhos de correlação linear de diversas redes. Isto apenas não garante bom desempenho, pois pode haver um erro entre as estimativas. Porém, observamos também um MSE da ordem de  $10^{-5}$  para algumas destas redes, como é o caso da maioria das RNAs de 1 (uma) camada para o GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%.

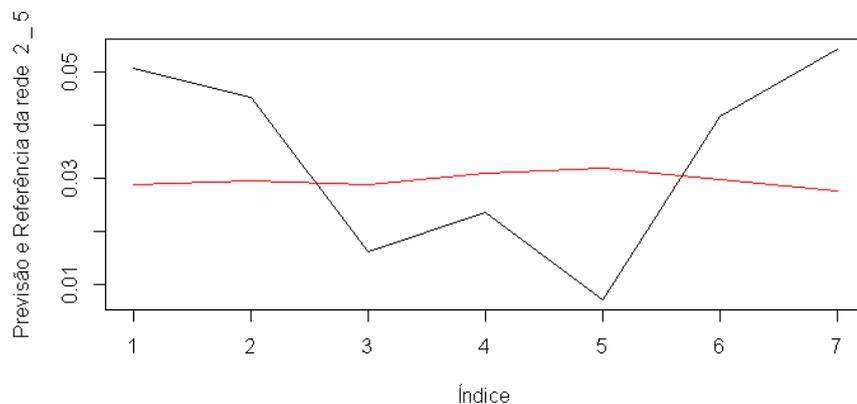


Figura 14 – Desempenho da RNA com 2 camadas escondidas e 5 neurônios para o GRUPO\_C1\_ENT\_20%  
Fonte: RStudio®

O bom desempenho de uma destas redes é apresentado na Figura 15 tomando-se como exemplo a rede de 1 (uma) camada escondida e 2 neurônios por camada.

Na Figura 15, tamanha é a aderência da curva estimada (linha vermelha) em relação aos valores de referência (linha preta) que é até difícil visualizar a linha de referência. Isto demonstra, graficamente, o valor extremamente baixo do MSE obtido com a rede.

Especificamente no caso da RNA com 1 camada escondida e 2 neurônios para o GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%, a média do MSE foi de  $3.033 * 10^{-5}$ , o que fazendo a mesma analogia utilizada para a regressão linear, significa um erro médio absoluto de, aproximadamente  $5.51 * 10^{-3}$ . Lembrando, mais uma vez, que os dados encontram-se normalizados, isto representa um erro médio de 0.551% do *range* considerado para a variável de interesse.

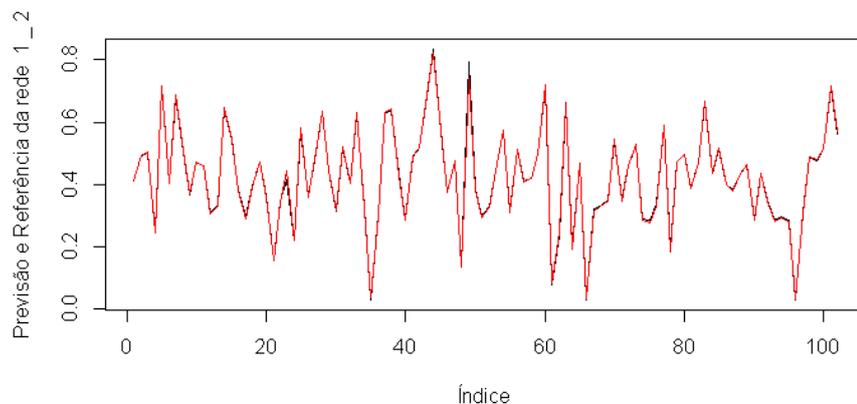


Figura 15 – Desempenho da RNA com 1 camada escondida e 2 neurônios para o GRUPO\_TOTAL\_ENT\_00%  
Fonte: RStudio®

Outro fato interessante observado durante a construção das RNAs e, posteriormente, nos gráficos e tabelas de correlação e MSE consolidadas, é que o desempenho de redes mais complexas, de 2 (duas) camadas escondidas, foi inferior ao das redes de menor complexidade quando aplicadas ao mesmo conjunto de dados. Parte disso se deve ao maior número de parâmetros a serem ajustados, e demonstra que, nem sempre, a ferramenta de maior complexidade apresenta o melhor desempenho para resolução de um determinado problema.

Tal cenário se encontra de acordo com o dilema polarização vs variância das RNAs, que diz que quanto maior for a complexidade da rede, maior é seu erro devido à variância, enquanto é reduzido o erro devido à polarização. Caso já tenhamos chegado a um valor suficientemente pequeno de erro devido à polarização, aumentar a complexidade da rede somente vai fazer com que aumentemos o erro devido à variância [Teixeira, 2001].

Para ilustrar tal fenômeno, podemos observar a Figura 16 e a Figura 17, onde são apresentados os gráficos temporais para RNAs de, respectivamente, 1 (uma) e 2 (duas) camadas escondidas, e a mesma quantidade de neurônios por camada. Apesar de as duas apresentarem bom desempenho, é possível observar que a linha preta (valor de referência) se destaca um pouco mais na Figura 17.

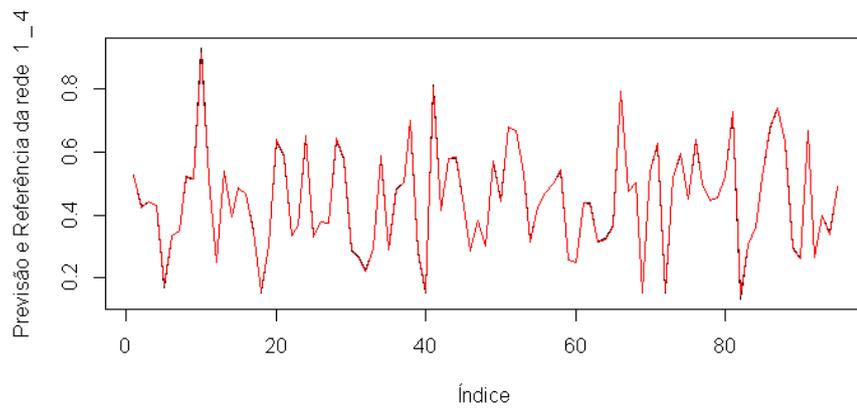


Figura 16 – Desempenho da RNA com 1 camada escondida e 4 neurônios para o GRUPO\_C2\_ENT\_20%  
Fonte: RStudio®

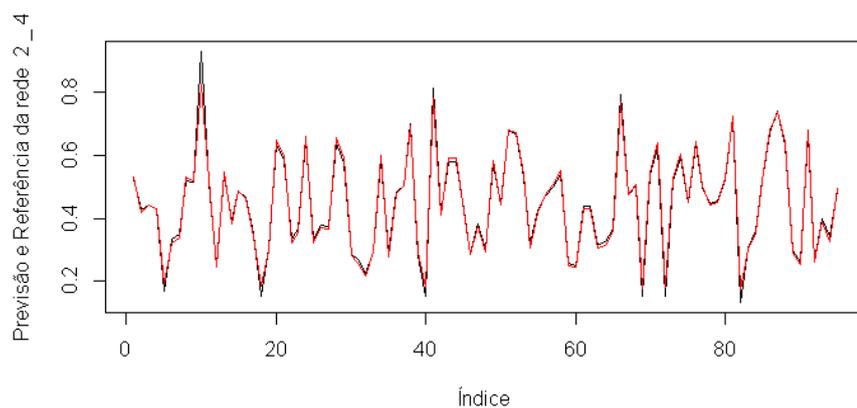


Figura 17 – Desempenho da RNA com 2 camadas escondidas e 4 neurônios para o GRUPO\_C2\_ENT\_20%  
Fonte: RStudio®

As razões numéricas para a pequena diferença de desempenho observada nos gráficos da Figura 16 e da Figura 17 podem ser vistas na Tabela 3 e na Figura 18. Podemos ver que no caso da correlação, a mesma reduziu em aproximadamente 0.5% com a adição de uma nova camada escondida, enquanto a variabilidade dos resultados diminuiu.

Tabela 3 – Diferenças entre as RNAs de 1 e 2 camadas

GRUPO_C2_ENT_20%		Rede 1 Camada	Rede 2 Camadas	Diferença
		4N	4N	
Correlação	Média	0.9997	0.9942	0.0056
	Desvio Padrão	0.0001	0.0023	-0.0022
MSE	Média	1.31E-05	2.68E-04	-2.55E-04
	Desvio Padrão	6.68E-06	1.02E-04	-9.49E-05

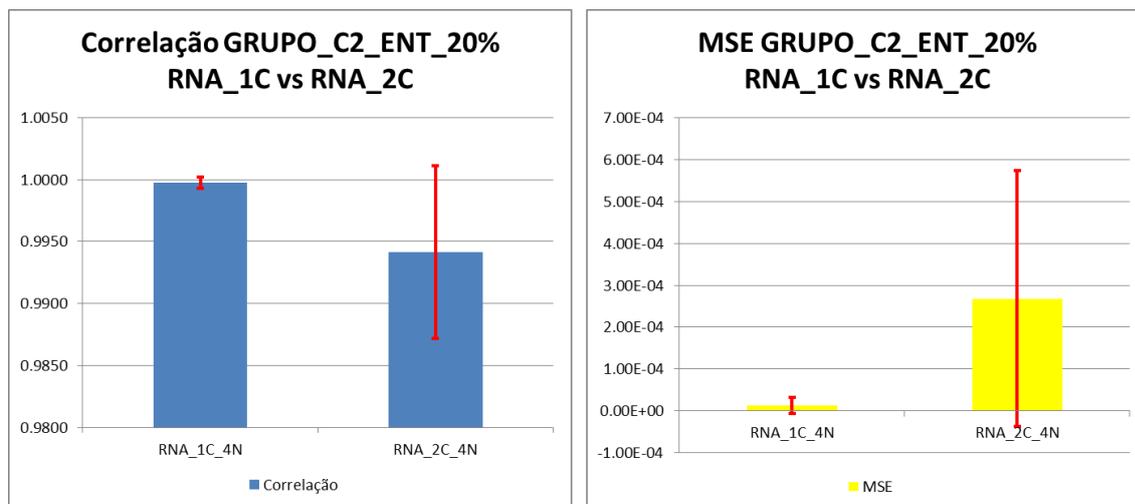


Figura 18 – Gráficos de Correlação e MSE da Tabela 3  
Fonte: Microsoft Excel®

Já se considerarmos o MSE, podemos observar que a diferença entre as médias acontece na ordem de grandeza, sendo um na casa de  $10^{-4}$  e outro na casa de  $10^{-5}$ , o que explica o leve descolamento dos valores produzidos pela RNA de 2 (duas) camadas escondidas do valor de referência, e seu desvio padrão também diminuiu, a exemplo do ocorrido com a correlação.

Além disso, o bom desempenho do analisador virtual gerado a partir dos dados do GRUPO\_TOTAL tornaram dispensável a divisão dos dados em campanhas C1 e C2 para construção de dois analisadores virtuais, um para cada campanha.

Portanto, podemos afirmar que RNAs relativamente simples, como as de 1 (uma) camada escondida e 2 (dois) ou 3 (três) neurônios por camada possuem alta correlação e MSE baixos, tornando possível seu uso em escala industrial, necessitando apenas da definição do método de implementação e comunicação com os sistemas de controle (PLC ou DCS) para uso em sistemas de controle de processos voltados para a otimização, como os sistemas de controle avançado.

## 7. CONSIDERAÇÕES FINAIS

### 7.1 Conclusões

O objetivo deste trabalho foi a construção de um analisador virtual para inferir o teor de enxofre no produto de uma unidade de hidrotratamento de derivados de petróleo, visando que os valores gerados por este analisador virtual pudessem ser utilizados por sistemas de controle de processos voltados para a otimização, como os sistemas de controle avançado.

Além disso, buscou-se realizar tal tarefa com as ferramentas menos complexas possíveis, de modo que não houvesse dificuldade para implementação das mesmas nos sistemas disponíveis na indústria, evitando assim a compra de sistemas dedicados.

Observou-se que o uso do método de regressão linear múltipla para a solução deste problema não é adequado, pois não foi possível capturar as dinâmicas de mudança de teor de enxofre a partir dos dados de entrada disponíveis. Portanto, as implementações de regressão linear múltipla geraram correlações lineares baixas (da ordem de 38% para os melhores casos) entre os dados estimados e os valores de referência e um alto MSE, inviabilizando o uso desta metodologia para o problema apresentado.

Fatores como a alta complexidade, o grande número de variáveis que afetam o teor de enxofre no produto e a quantidade de amostras para modelagem tornaram o uso de RNAs mais simples uma alternativa viável para a resolução do problema, sendo obtidos resultados excelentes de correlação linear na etapa de validação da rede e MSE extremamente baixos.

Conforme citado anteriormente, tal solução pode gerar a economia de milhões de reais para plantas de hidrotratamento de derivados de petróleo, evitando a compra de analisadores de processo ou até mesmo utilizada em paralelo aos mesmos durante o período de processamento e análise da amostra.

Além do eventual benefício da substituição do analisador de processo, o uso destas informações em sistemas de controle de processos pode levar a uma economia igualmente grande, a depender das técnicas utilizadas.

Os resultados apresentados neste trabalho mostram que o uso de RNAs para construção de analisadores virtuais pode ser uma alternativa à compra de analisadores de processo, sendo uma solução de ótimo desempenho, baixo custo, e alto potencial de retorno para a indústria.

## **7.2 Trabalhos Futuros**

Para trabalhos futuros, podemos destacar a sugestão da implementação em escala industrial do método em questão, buscando maiores evidências do bom desempenho das RNAs apresentado com os dados de validação.

## 8. ANEXOS

### 8.1 Tabela de Resultados de correlação obtidos com as RNAs

Correlação		Rede 1 Camada					Rede 2 Camadas				
		1N	2N	3N	4N	5N	1N	2N	3N	4N	5N
GRUPO_TOTAL_ENT_00%	Média	0.9936	0.9994	0.9994	0.9992	0.9995	0.9789	0.9910	0.9936	0.9942	0.9963
	Desvio Padrão	0.0008	0.0003	0.0003	0.0005	0.0000	0.0090	0.0013	0.0025	0.0014	0.0009
GRUPO_TOTAL_ENT_10%	Média	0.9937	0.9973	0.9996	0.9997	0.9998	0.9732	0.9864	0.9951	0.9961	0.9968
	Desvio Padrão	0.0010	0.0035	0.0003	0.0001	0.0001	0.0020	0.0053	0.0007	0.0004	0.0005
GRUPO_TOTAL_ENT_20%	Média	0.9934	0.9959	0.9997	0.9998	0.9998	0.9762	0.9882	0.9955	0.9954	0.9971
	Desvio Padrão	0.0018	0.0030	0.0001	0.0001	0.0001	0.0086	0.0072	0.0018	0.0027	0.0011
GRUPO_TOTAL_ENT_20%_PROC	Média	0.9928	0.9972	0.9998	0.9998	0.9998	0.9733	0.9925	0.9950	0.9964	0.9973
	Desvio Padrão	0.0011	0.0037	0.0001	0.0001	0.0001	0.0030	0.0019	0.0020	0.0013	0.0014
GRUPO_C1_ENT_00%	Média	0.7106	0.5943	0.5630	0.6799	0.8041	-0.0847	-0.2653	0.2300	-0.1018	-0.0668
	Desvio Padrão	0.1678	0.3214	0.3743	0.1736	0.0829	0.2100	0.4722	0.3455	0.0950	0.2188
GRUPO_C1_ENT_10%	Média	0.0120	0.6572	0.6861	0.5271	0.8882	0.1200	0.0078	-0.0835	0.1802	0.1346
	Desvio Padrão	0.5792	0.1069	0.4086	0.3597	0.0271	0.2980	0.4738	0.1919	0.4853	0.5599
GRUPO_C1_ENT_20%	Média	0.6521	0.8463	0.9863	0.9918	0.9958	-0.6792	0.1138	0.6389	0.5474	-0.2223
	Desvio Padrão	0.2662	0.1803	0.0011	0.0109	0.0025	0.3018	0.3959	0.2724	0.4728	0.8139
GRUPO_C1_ENT_20%_PROC	Média	0.8596	0.9978	0.9996	0.9998	0.9994	0.1147	0.2494	0.3740	0.0249	-0.8877
	Desvio Padrão	0.0970	0.0017	0.0002	0.0002	0.0005	0.7772	0.4155	0.4335	0.6586	0.0652
GRUPO_C2_ENT_00%	Média	0.9971	0.9967	0.9988	0.9931	0.9992	0.9763	0.9868	0.9877	0.9932	0.9934
	Desvio Padrão	0.0004	0.0008	0.0004	0.0068	0.0001	0.0005	0.0025	0.0027	0.0012	0.0011
GRUPO_C2_ENT_10%	Média	0.9974	0.9974	0.9995	0.9995	0.9994	0.9817	0.9835	0.9897	0.9941	0.9948
	Desvio Padrão	0.0000	0.0001	0.0001	0.0002	0.0002	0.0035	0.0064	0.0060	0.0013	0.0019
GRUPO_C2_ENT_20%	Média	0.9974	0.9987	0.9997	0.9997	0.9998	0.9786	0.9887	0.9921	0.9942	0.9963
	Desvio Padrão	0.0008	0.0006	0.0001	0.0001	0.0000	0.0038	0.0056	0.0035	0.0023	0.0014
GRUPO_C2_ENT_20%_PROC	Média	0.9976	0.9990	0.9998	0.9999	0.9999	0.9837	0.9907	0.9925	0.9954	0.9972
	Desvio Padrão	0.0007	0.0012	0.0000	0.0000	0.0001	0.0034	0.0043	0.0040	0.0026	0.0011

## 8.2 Tabela de Resultados de MSE obtidos com as RNAs

MSE		Rede 1 Camada					Rede 2 Camadas				
		1N	2N	3N	4N	5N	1N	2N	3N	4N	5N
GRUPO_TOTAL_ENT_00%	Média	3.655E-04	3.033E-05	3.073E-05	4.406E-05	3.247E-05	1.170E-03	5.040E-04	3.574E-04	3.228E-04	2.007E-04
	Desvio Padrão	7.434E-05	1.513E-05	1.274E-05	2.376E-05	2.441E-06	5.715E-04	9.968E-05	1.477E-04	9.122E-05	3.937E-05
GRUPO_TOTAL_ENT_10%	Média	4.535E-04	1.540E-04	3.771E-05	1.946E-05	1.797E-05	2.036E-03	1.074E-03	3.334E-04	2.637E-04	2.135E-04
	Desvio Padrão	9.952E-05	1.938E-04	3.283E-05	6.859E-06	7.971E-06	5.016E-04	5.761E-04	7.259E-05	4.534E-05	2.408E-05
GRUPO_TOTAL_ENT_20%	Média	5.521E-04	3.756E-04	2.327E-05	1.866E-05	1.946E-05	2.043E-03	9.791E-04	3.416E-04	3.639E-04	2.167E-04
	Desvio Padrão	2.710E-04	3.155E-04	1.480E-05	1.291E-05	1.415E-05	1.046E-03	7.649E-04	1.745E-04	2.772E-04	1.017E-04
GRUPO_TOTAL_ENT_20%_PROC	Média	4.698E-04	1.472E-04	1.363E-05	1.127E-05	1.124E-05	1.837E-03	4.777E-04	3.231E-04	2.288E-04	1.724E-04
	Desvio Padrão	7.403E-05	1.882E-04	5.031E-06	5.043E-06	4.232E-06	4.908E-04	1.117E-04	1.487E-04	6.576E-05	7.910E-05
GRUPO_C1_ENT_00%	Média	2.665E-04	3.413E-04	3.404E-04	3.041E-04	1.871E-04	4.076E-04	4.196E-04	3.994E-04	4.126E-04	4.408E-04
	Desvio Padrão	1.456E-04	3.045E-04	2.217E-04	1.592E-04	5.645E-05	3.498E-05	2.280E-05	8.287E-05	2.381E-05	4.219E-05
GRUPO_C1_ENT_10%	Média	3.809E-04	2.216E-04	1.750E-04	3.321E-04	5.505E-05	2.830E-04	2.757E-04	2.892E-04	2.555E-04	2.900E-04
	Desvio Padrão	1.024E-04	3.165E-05	2.063E-04	3.028E-04	2.479E-05	6.964E-05	6.114E-05	6.519E-05	1.047E-04	1.208E-04
GRUPO_C1_ENT_20%	Média	1.761E-04	7.968E-05	1.913E-05	8.717E-06	5.156E-06	2.795E-04	2.647E-04	2.497E-04	2.565E-04	2.614E-04
	Desvio Padrão	8.724E-05	8.070E-05	2.667E-06	1.156E-05	3.267E-06	4.291E-05	3.272E-05	3.371E-05	4.609E-05	5.817E-05
GRUPO_C1_ENT_20%_PROC	Média	1.471E-04	1.031E-06	2.960E-07	8.416E-08	4.186E-07	2.249E-04	2.190E-04	2.091E-04	2.191E-04	2.693E-04
	Desvio Padrão	2.333E-05	7.510E-07	2.262E-07	6.976E-08	4.525E-07	4.705E-05	3.849E-05	5.332E-05	3.524E-05	5.906E-05
GRUPO_C2_ENT_00%	Média	1.211E-04	1.351E-04	4.586E-05	2.621E-04	3.481E-05	9.611E-04	5.358E-04	4.998E-04	2.785E-04	2.695E-04
	Desvio Padrão	2.273E-05	2.274E-05	1.340E-05	2.496E-04	3.820E-06	6.757E-05	1.175E-04	1.177E-04	5.734E-05	5.307E-05
GRUPO_C2_ENT_10%	Média	1.308E-04	1.377E-04	2.558E-05	2.349E-05	3.149E-05	9.405E-04	8.520E-04	5.469E-04	2.979E-04	2.713E-04
	Desvio Padrão	1.718E-05	2.369E-05	8.723E-06	1.347E-05	1.217E-05	2.049E-04	4.254E-04	3.864E-04	9.267E-05	1.420E-04
GRUPO_C2_ENT_20%	Média	1.249E-04	7.719E-05	1.626E-05	1.306E-05	1.107E-05	1.002E-03	5.354E-04	3.762E-04	2.680E-04	1.710E-04
	Desvio Padrão	3.258E-05	4.524E-05	3.247E-06	6.679E-06	1.446E-06	1.876E-04	2.623E-04	1.762E-04	1.016E-04	6.131E-05
GRUPO_C2_ENT_20%_PROC	Média	1.181E-04	4.548E-05	8.112E-06	8.602E-06	6.244E-06	7.813E-04	4.613E-04	3.906E-04	2.345E-04	1.422E-04
	Desvio Padrão	4.346E-05	5.219E-05	3.213E-06	2.197E-06	2.517E-06	2.054E-04	2.861E-04	2.507E-04	1.536E-04	6.332E-05

## 9. REFERÊNCIAS

[Aguirre, 2004] Aguirre, L. A. (2004). Introdução à identificação de sistemas. Técnicas lineares e não lineares aplicadas a sistemas reais. 2. ed. Belo Horizonte: Editora UFMG

[Bergmeir et al., 2012] Bergmeir, C.; Benitez, J. M. (2012). Neural Networks in R Using the Stuttgart Neural Network Simulator: RSNNS. Journal of Statistical Software, 46(7), 1-26.

[Braga et al., 2007] Braga, A. P.; Carvalho, A. C. P. L. F.; Ludemir, T. B. (2007). Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos.

[Braga, 2012] Braga, A. P. (2012). Notas de Aulas de Redes Neurais Artificiais.

[Campos et al., 2013] Campos, M. M. de; Gomes, M. V. de C.; Perez, J. M. G. T.. Controle avançado e otimização na indústria do petróleo. 1.ed. Rio de Janeiro: Interciência.

[Correa, 2011] Correa, B. M. (2011). Estudo sobre Hidrotratamento do refino do petróleo.

[Cruz, 2010] Cruz, F. E. D. (2010). Produção de hidrogênio em refinarias de petróleo: avaliação exergética e custo de produção.

[de Toledo et al., 2005] de Toledo, E. C. V., da CA Meyer, J. F., & Maciel Filho, R. (2005). Modelagem dinâmica de um reator de hidrotratamento.

[Eddelbuettel et al., 2011] Eddelbuettel, D.; Francois, R. (2011). Rcpp: Seamless R and C++ Integration. Journal of Statistical Software, 40(8), 1-18.

[Esteves, 2010] Esteves, E. (2010). Regressão não-linear utilizando a ferramenta solver@ do microsoft excel@. Instituto Superior de Engenharia, Universidade do Algarve, Faro, Portugal [disponível em <http://w3.ualg.pt/eeesteves>].

[Haykin, 2001] Haykin, S. (2001). Redes neurais: princípios e prática. Tradução Paulo Martins Engel. – 2.ed. – Porto Alegre: Bookman.

[Hirata, 2009] Hirata, F. (2009). Avaliação da ocorrência de corrosão naftênica na bateria de pré-aquecimento de carga de uma unidade de Hidrotratamento de Diesel (HDT).

[King, 2011] Kint, M. (2011). Process Control: A Practical Approach. John Wiley & Sons Ltd.

[Larson et al., 2010] Larson, R.; Farber, B. (2010). Estatística Aplicada. Tradução Luciane Ferreira Pauleti Vianna. – 4.ed. – São Paulo: Pearson Prentice Hall.

[Leisch et al., 2010] Leisch, F.; Dimitriadou, E. (2010). mlbench: Machine Learning Benchmark Problems. R package version 2.1-1.

[Lin et al., 2007] Lin, B., Recke, B., Knudsen, J. K., & Jørgensen, S. B. (2007). A systematic approach for soft sensor development. Computers & chemical engineering, 31(5), 419-425.

[Longhi et al., 2012] Longhi, L. G. S., Reginato, A. S., Teixeira, H. C. G., Cortez, C. A. C., Lusa, L. P., Gonzalez, S. S., & Fleck, T. D. (2012). Control loop performance assessment and improvement of an industrial hydrotreating unit and its economical benefits. Sba: Controle & Automação Sociedade Brasileira de Automatica, 23(1), 60-77.

[Mohr, 2004] Mohr, T. (2004). Desenvolvimento de um analisador virtual para uma planta de polietileno de alta densidade.

[Moreira, 2013] Moreira, R. B. T. (2013). Construção do livro de ofertas a partir de dados de alta frequência e um algoritmo de predição de valores baseado em técnicas de agrupamento e regressão linear.

[Perales, 2011] Perales, T. R. (2011). Utilização de Redes Neurais Artificiais no Diagnóstico de Cardiopatias.

[Silva, 1995] da Silva, R. M. C. F. (1995). Cinética e modelagem no reator de HDT.

[Silveira, 2012] Silveira, L. S. D. (2012). Desenvolvimento de uma estratégia de controle avançado para uma Unidade Recuperadora de Propano.

[Soares, 2002] Soares, K. O. (2002). Estudo das especificações dos derivados de petróleo – gasolina e óleo diesel – histórico e perspectivas.

[Teixeira, 2001] Teixeira, R. De A. (2001). Treinamento de Redes Neurais Artificiais Através de Otimização Multi-Objetivo: Uma nova Abordagem para o Equilíbrio entre a Polarização e a Variância.

[Wang et al., 1996] Wang, X., Luo, R., & Shao, H. (1996, December). Designing a soft sensor for a distillation column with the fuzzy distributed radial basis function neural network. In Decision and Control, 1996. Proceedings of the 35th IEEE Conference on (Vol. 2, pp. 1714-1719). IEEE.