



**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ**  
**CENTRO DE TECNOLOGIA**  
**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA**  
**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**DANIEL MUNIZ BEZERRA**

**REDES NEURAIS ARTIFICIAIS E REDES COMPLEXAS:**  
**APLICAÇÕES EM PROCESSOS QUÍMICOS**

**FORTALEZA, 2005**

**DANIEL MUNIZ BEZERRA**

**REDES NEURAIS ARTIFICIAIS E REDES COMPLEXAS:  
APLICAÇÕES EM PROCESSOS QUÍMICOS**

Dissertação submetida à Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química. Área de concentração: Modelagem e Simulação.

Orientador: Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior.

**Fortaleza, 2005**

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação  
Universidade Federal do Ceará  
Biblioteca de Pós-Graduação em Engenharia - BPGE

- 
- B469r Bezerra, Daniel Muniz.  
Daniel Muniz      Redes neurais artificiais e redes complexas: aplicações em processos químicos /  
Bezerra. – 2005.  
71 f. : il. color., enc. ; 30 cm.
- Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Tecnologia,  
Departamento de Engenharia Química, Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
Química, Fortaleza, 2005.  
Área de Concentração: Modelagem e Simulação.  
Orientação: Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior.
1. Engenharia Química. 2. Inteligência artificial. 3. Métodos de simulação I. Título.

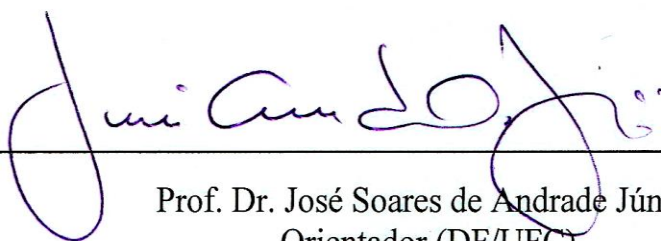
**BEZERRA, Daniel Muniz** – Redes Neurais Artificiais e Redes Complexas: Aplicações em Processos Químicos. Dissertação de Mestrado, UFC, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Área de Concentração: Modelagem e Simulação, Fortaleza/CE, Brasil.

**ORIENTADOR:** Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior

**DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**Aprovada em 29/06/2005**

**BANCA EXAMINADORA**



Prof. Dr. José Soares de Andrade Júnior  
Orientador (DF/UFC)



Prof. Dr. Célio Loureiro Cavalcante Júnior  
Orientador (DEQ/UFC)



Prof. Dr. Frederico Wanderley Tavares  
Orientador (EQ/UFRJ)



Prof. Dr. Raimundo Nogueira da Costa Filho  
Orientador (DF/UFC)

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor José Soares de Andrade Júnior, pelas orientações sempre precisas e objetivas, meu sincero agradecimento.

Aos professores Diana Cristina Silva de Azevedo e Célio Loureiro Cavalcante Jr., do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal do Ceará, e aos engenheiros da PETROBRAS, Augusto César de Moura Andrade, Antônio Carlos Zanin e João Augusto Paiva que nos ajudaram de forma significativa para a elaboração deste trabalho, meus agradecimentos.

Agradeço, também, ao professor André Auto Moreira, pesquisador do Departamento de Física da Universidade Federal do Ceará, e à engenheira Danielle Menezes Bezerra, minha filha, que colaboraram conosco na utilização de *softwares* específicos, importantes para a obtenção de alguns dos resultados e para a redação desta dissertação.

Agradeço, também, à PETROBRAS, representada pela Unidade de Negócios – Lubrificantes e Derivados de Petróleo do Nordeste (LUBNOR), pela oportunidade concedida, o que permitiu a execução deste trabalho.

## RESUMO

Na primeira parte deste trabalho, empregamos uma rede neural artificial (RNA) treinada com algoritmo *back-propagation* para inferir a volatilidade dos gases liquefeitos de petróleo (GLP) produzidos em uma torre de fracionamento de líquido de gás natural (LGN). Os resultados obtidos indicam que a RNA fornece melhores respostas do que um simulador desenvolvido com base fenomenológica que se encontra em fase de implementação na planta em estudo. Na segunda parte da dissertação, o nosso objetivo primordial é demonstrar que os fluxogramas de processos de refinarias de petróleo podem estar intrinsecamente associados à topologias de redes complexas, que são *scale-free*, exibem efeitos de mundo pequeno e possuem organização hierárquica. A emergência dessas propriedades em redes artificiais é explicada como uma consequência dos princípios usados no design de projeto dos processos, os quais incluem regras heurísticas e técnicas algorítmicas. Esperamos que esses resultados sejam também válidos para plantas químicas de diferentes tipos e capacidades.

**Palavras-chave:** Redes Neurais Artificiais, Redes de *Scale-free*, Redes de Mundo Pequeno, Plantas Químicas.

## ABSTRACT

In the first part of this work we apply an artificial neural network (ANN) trained with a back-propagation algorithm to predict the volatility of liquefied petroleum gases (LPG) produced from a fractionation tower of natural gas liquid (NGL). Our analysis indicate that the ANN scheme provides better results than a simulator developed based phenomenological which is currently being implemented in the plant under study. In the second part, our primary objective is to demonstrate that flowsheets of oil refineries can be intrinsically associated to complex network topologies, which are scale-free, display small-world effect and have hierarchical organization. The emergence of these properties artificial networks is explained as a consequence of the design principles used in the process' design, which include heuristics rules and algorithmic techniques. We expect these results to be also valid for chemical plants of different types and capacities.

**Keywords:** Artificial Neural Networks, Scale-free Networks, Small-words Networks, Chemical Plants

# ÍNDICE

INTRODUÇÃO .....	8
CAPÍTULO 1: REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: APLICAÇÕES EM UMA PLANTA DE PROCESSOS QUÍMICOS .....	11
1.1 Introdução .....	11
1.1.1 Neurônio e Rede Neural Biológica .....	12
1.1.2 Rede Neural Artificial .....	15
1.1.3 Função de Transferência .....	17
1.1.4 Arquitetura das Redes Artificiais .....	19
1.1.5 Aprendizagem .....	20
1.1.5.1 Algoritmo <i>Back-Propagation</i> .....	20
1.2 Aplicação das Redes Neurais Artificiais à Inferência da Volatilidade do GLP em uma Torre de Fracionamento de LGN .....	22
1.2.1 Introdução .....	22
1.2.2 Descrição da LUBNOR .....	22
1.2.2.1 Descrição da UPGN .....	23
1.2.3 Metodologia .....	30
1.2.4 Resultados .....	32
1.2.5 Discussão .....	39
CAPÍTULO 2: REDES COMPLEXAS: APLICAÇÕES PARA PLANTAS DE PROCESSOS QUÍMICOS .....	40
2.1 Introdução .....	40
2.1.1 O Modelo de Erdős-Rényi .....	41
2.1.2 Distribuição de Conectividade .....	42
2.1.3 Distância Média .....	43
2.1.4 Coeficiente de Agregação .....	44
2.1.5 Resultados Empíricos de Redes Reais .....	44
2.1.5.1 <i>Internet</i> .....	44
2.1.5.2 Linguística .....	45
2.1.5.3 Redes Celulares .....	45
2.1.5.4 Outros Sistemas .....	45
2.1.6 Rede de Mundo Pequeno .....	45
2.1.7 O Modelo do Contato Preferencial .....	48
2.1.7.1 O Modelo do Contato Preferencial Para Redes Finitas .....	50
2.1.8 O Modelo da Qualidade .....	51
2.2 Estudo de Caso: Topologia Complexa de Plantas Químicas .....	52
2.2.1 Introdução .....	52
2.2.2 Conceitos de Síntese de Processos na Indústria de Refino de Petróleo .....	53

2.2.2.1 Projeto Conceitual .....	54
2.2.2.2 Projeto Básico .....	54
2.2.2.3 Projeto Definitivo .....	55
2.2.3 Metodologia .....	55
2.2.4 Resultados e Discussão .....	57
CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS .....	63
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	65
APÊNDICE .....	70

## INTRODUÇÃO

Em resposta às crescentes demandas da sociedade, tanto no que concerne às especificações de qualidade, segurança e requisitos ambientais traduzidas por legislações cada vez mais restritivas quanto à necessidade de grandes volumes e multiplicidade de produtos, particularmente nas atividades que envolvem o refino de petróleo, mais complexos e intensos têm se tornado os processos operacionais nas refinarias.

Para atendimento a essas demandas, mais e mais equipamentos ou unidades de processos são interpostas ou conectadas às já existentes, fazendo com que as plantas químicas se tornem cada vez mais horizontalizadas, densas e complexas. Paralelamente a isso, as indústrias também têm buscado maior confiabilidade e precisão na monitoração dos processos, através da implementação de metodologias de controle inteligente, compelidas a reduzir custos totais de forma a enfrentar a competição em um ambiente empresarial globalizado. É nos aspectos relativos à monitoração de processos e à sua complexidade que este trabalho se insere.

Na primeira parte deste trabalho, estuda-se um caso de natureza prática e de aplicação imediata, abordando a monitoração da volatilidade ou intemperismo dos Gases Liquefeitos de Petróleo (GLP), gás de cozinha, em uma planta química, na indústria de refino localizada na LUBNOR (Lubrificantes e Derivados de Petróleo do Nordeste – PETROBRAS), Fortaleza - Ceará, através de inferência, utilizando redes neurais artificiais (RNA). Nas refinarias, apesar do surgimento, no mercado, de analisadores em linha, abrangendo um número cada vez maior de aplicações, a maioria das variáveis, principalmente aquelas relacionadas com a qualidade, ainda são controladas conforme procedimento tradicional. Em outras palavras, durante o processo de produção, amostras são coletadas, em intervalos de tempo pré-determinados, e enviadas para o laboratório industrial, onde são analisadas, e cujos resultados vão direcionar as ações subsequentes. Evidentemente, esse procedimento implica, muitas vezes, custos adicionais significativos oriundos de reprocessamento, correções e degradações do produto. A não generalização dos analisadores em linha deve-se ao elevado custo dos equipamentos e à necessidade

de manutenção muito especializada. Além disso, não existem analisadores aplicáveis a determinadas características dos produtos. Para suprir essa lacuna e reduzir custos com esses equipamentos, métodos alternativos têm sido considerados, sendo um deles a utilização de redes neurais artificiais. No caso específico do presente trabalho, não existem analisadores em linha para avaliação da volatilidade.

Na segunda parte do trabalho, de caráter mais acadêmico, estuda-se a complexidade de plantas de processo, com enfoque de inserção dessas plantas em uma classe de modelos geométricos em que as leis de escala e o conceito de universalidade praticamente ditam a sistemática da abordagem (MOREIRA, 2002).

Na última década, tem-se observado um interesse científico – por parte de físicos, químicos e biólogos – no que se refere à topologia e à dinâmica dos sistemas denominados complexos. Nesses sistemas, uma multitude de elementos notadamente simples forma uma rede interconecta de interações locais, caracterizada pela emergência de dinâmicas globais não triviais (complexas), usualmente com a presença de auto-organização (BAK, 1996). Nesse contexto, mais recentemente, tem-se estudado de maneira intensa o aspecto complexo da geometria de redes com características de mundo pequeno, sem escala e organização hierárquica (BARABÁSI & ALBERT, 1999). Tais comportamentos são observados nos mais diferentes sistemas, desde os biológicos, como a cadeia alimentar (CAMACHO *et al.*, 2002), os processos metabólicos (JEONG *et al.*, 2000), e os sociais (LILJEROS *et al.*, 2001) e até mesmo a *Internet* (PASTOR-SATORRAS & VESPIGNANI, 2001). Neste trabalho, construímos redes complexas a partir de plantas químicas de três refinarias da PETROBRAS, calculamos algumas propriedades típicas desses sistemas e discutimos essas propriedades, exibidas no âmbito dos sistemas complexos.

O trabalho é organizado da seguinte forma. No Capítulo 1, apresentamos os principais conceitos de redes neurais artificiais, focalizando as aplicações dessa técnica na modelagem de processos químicos. Apresentamos uma aplicação prática das redes neurais artificiais para a inferência da volatilidade do GLP em uma planta química. Fornecemos uma descrição da unidade industrial, LUBNOR, e do equipamento de processo em que a variável relativa ao intemperismo, o nosso

objeto de estudo, é controlada. Apresentamos e discutimos os resultados obtidos, comparando-os com aqueles provenientes de um simulador fenomenológico, e as perspectivas para uso desta técnica na LUBNOR. No Capítulo 2, apresentamos uma introdução ao estudo de redes complexas consistindo da descrição das redes aleatórias, do modelo de Erdős-Rényi, e do modelo do contato preferencial. Em seguida, apresentamos exemplos de redes reais que exibem características universais, bem como as principais propriedades dessas estruturas complexas. Apresentamos, então, de forma sucinta, alguns conceitos relativos à síntese de processos na indústria de refino, além de uma breve descrição das plantas de processos que utilizaremos para a construção das redes complexas. Determinamos as principais propriedades empíricas dessas redes, procurando identificar comportamentos semelhantes aos das redes complexas previamente estudadas. Finalmente, no Capítulo 3, apresentamos as conclusões do trabalho como um todo, em que delineamos algumas perspectivas para a utilização da abordagem de redes complexas objetivando um melhor entendimento da estrutura e um *design* aperfeiçoado para uma planta de processo. São apresentadas também perspectivas para a utilização de RNA nos processos químicos da LUBNOR.

# CAPÍTULO 1: REDES NEURAIS ARTIFICIAIS: APLICAÇÕES EM UMA PLANTA DE PROCESSOS QUÍMICOS

## 1.1 Introdução

Uma das atividades mais conhecidas na engenharia consiste no ajuste de modelos matemáticos a dados experimentais. As redes neurais representam hoje uma técnica importante nessa área, com aplicação a uma grande variedade de problemas práticos. Em particular, essa técnica deve ser empregada quando a solução de um problema é dificultada por alguns dos seguintes pontos: falta de entendimento físico ou estatístico do problema, variações estatísticas dos dados observáveis e mecanismo não linear responsável pela geração dos dados (HAYKIN, 2001). Nos anos 80, foram publicados importantes trabalhos abordando diversos aspectos da teoria e aplicação de redes neurais artificiais, contribuindo decisivamente para o ressurgimento do interesse da comunidade científica por esse assunto. A seguinte definição conceitua o que vêm a ser as redes neurais artificiais (RNA) do ponto de vista computacional:

[...] são sistemas paralelos distribuídos, compostos por unidades de processamento simples (nodos) que calculam determinadas funções matemáticas (normalmente não lineares). Tais unidades são dispostas em uma ou mais camadas e interligadas por um grande número de conexões, geralmente unidirecionais. Na maioria dos modelos, essas conexões estão associadas a pesos, os quais armazenam o conhecimento representado no modelo e servem para ponderar a entrada recebida por cada neurônio da rede. O funcionamento dessas redes é inspirado em uma estrutura física concebida pela natureza: o cérebro humano (BRAGA *et al.*, 2000).

O interesse em redes neurais artificiais tem sido motivado pela constatação de que o cérebro humano processa informações de forma muito diferente do computador digital. Enquanto este último é extremamente rápido e preciso na execução de instruções sequenciais, o cérebro humano é um sistema altamente complexo, não linear e paralelo (HAYKIN, 2001). O cérebro é formado basicamente por células nervosas, neurônios, que se interligam de forma determinada e precisa, formando os chamados circuitos neurais. Através desses circuitos, o organismo é capaz de produzir respostas estereotipadas ou produzir comportamentos variáveis em maior ou menor intensidade (TAFNER, 1998).

Todo ser vivo dotado de um sistema nervoso é capaz de modificar o seu comportamento em função de experiências passadas. Essa modificação de comportamento é denominada aprendizado e ocorre no sistema nervoso devido a uma propriedade chamada plasticidade cerebral (TAFNER, 1998).

Semelhantemente ao sistema nervoso, as redes neurais artificiais são organizadas na forma de um número de elementos individuais simples, nodos ou neurônios, que se interconectam, formando redes capazes de armazenar e transmitir informações vindas do exterior. Outra capacidade importante das redes neurais artificiais é auto-organização ou plasticidade, que, a exemplo do sistema nervoso do ser vivo, através de um processo de aprendizado, permite a alteração do padrão de interconexão de seus elementos. As redes neurais artificiais têm tido uma grande aplicação em modelagem ou regressão, seja ela linear ou não, para uma ou diversas variáveis independentes (TAFNER, 1998). Em termos gerais, a utilização de redes neurais consiste das seguintes etapas: (a) estabelecimento de uma arquitetura de rede; (b) fornecimento à rede de dados experimentais; (c) ajuste dos parâmetros da rede até que ela aprenda; e, (d) utilização da rede com novos dados de entrada para reprodução ou previsão dos correspondentes dados de saída.

Nas duas subseções que se seguem, serão descritas, resumidamente, a estrutura das redes neurais biológicas, a concepção do primeiro modelo de rede neural artificial inspirado no modelo biológico e a evolução desse modelo até o modelo base utilizado atualmente. Nas últimas subseções serão apresentadas a estrutura funcional das redes neurais artificiais e comentários relativos ao algoritmo *back-propagation*, o mais utilizado em modelagem com RNA.

### 1.1.1 Neurônio e Rede Neural Biológica

O trabalho pioneiro de Ramón y Cajal (1911) introduziu a ideia de neurônios como constituintes estruturais do cérebro e que têm a capacidade de receber e transmitir estímulos, permitindo ao organismo responder a alterações do meio (HAYKIN, 2001).

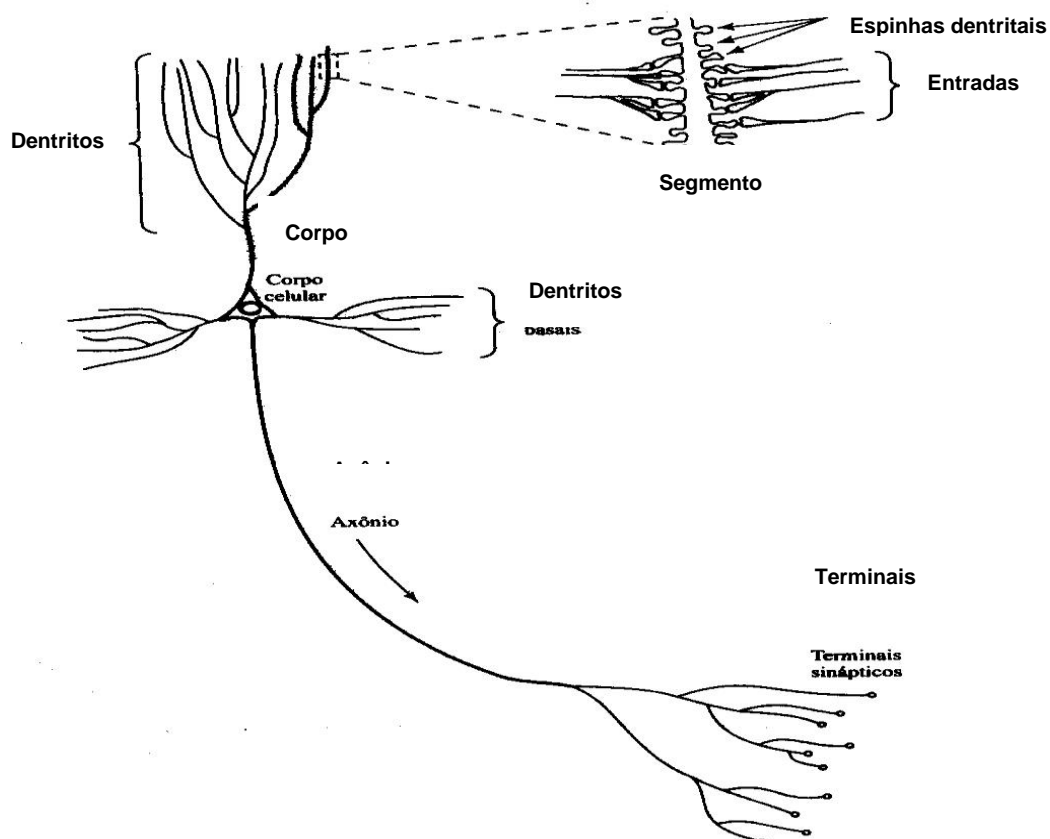


Figura 1.1: Neurônio animal típico (HAYKIN, 2001).

Os neurônios são células constituídas de um corpo celular, de onde partem dois tipos de prolongamentos: os axônios e os dendritos. Os dendritos são prolongamentos citoplasmáticos, apresentam uma superfície irregular com um grande número de ramificações e são estruturas especializadas na função de receber estímulos, através das espinhas dendritais (LOPES, 1999). A Figura 1.1 apresenta um neurônio típico. O axônio é uma única expansão citoplasmática, longa e de diâmetro constante, cuja extremidade final apresenta ramificações ou terminais sinápticos. O axônio é uma estrutura especializada na transmissão do impulso nervoso a outro neurônio ou a outros tipos de células como as glandulares e as musculares (LOPES, 1999).

Os neurônios conectam-se entre si e a outros órgãos através de um tipo especial de junção, chamada de sinapse, que é um ponto de união entre um neurônio e os dendritos. A região da sinapse funciona como uma mediadora nas interações entre neurônios e entre neurônios e outros órgãos (LOPES, 1999).

Os estímulos ou impulsos nervosos oriundos de outros neurônios ou de outros tipos de células são recebidos pelos dendritos e conduzidos até o corpo

celular, onde são processados e novos impulsos são gerados. Esses impulsos são transmitidos através do axônio até os dendritos dos neurônios seguintes (BRAGA *et al.*, 2000). As sinapses funcionam como elementos mediadores ou reguladores, controlando a transmissão dos impulsos. Na região da sinapse, entre dois neurônios, a membrana do axônio é chamada de membrana pré-sináptica, enquanto a membrana do dendrito é chamada de membrana pós-sináptica. A sinapse atua basicamente convertendo sinais elétricos pré-sinápticos em sinais químicos pós-sinápticos. A membrana celular atua na produção e transmissão destes dois tipos de sinais (BRAGA *et al.*, 2000).

Há uma diferença de potencial entre o interior e o exterior do neurônio ou da célula, provocada pela dessemelhança de concentração de potássio no interior da célula e da concentração de sódio, externa à célula. Esse potencial elétrico é chamado de potencial de repouso e é da ordem de  $-70\text{mV}$  em relação ao exterior. Para que a célula produza um impulso nervoso, é necessário que os impulsos das sinapses reduzam esse potencial para  $-50\text{mV}$ . Quando isso ocorre, o fluxo de sódio e de potássio é invertido, e o interior da célula torna-se positivo em relação ao exterior. Essa inversão de polaridade faz com que o impulso nervoso se propague pelo axônio até os terminais sinápticos. Quando o impulso chega aos terminais, os canais controlados por tensão se abrem e moléculas neurotransmissoras alcançam a região entre a membrana pré-sináptica e pós-sináptica e o processo continua no neurônio seguinte. De acordo com o tipo de neurotransmissor liberado, a sinapse poderá ser inibitória ou excitatória. A contribuição de todos os neurônios pré-sinápticos na polarização do neurônio seguinte, ou seja, no pós-sináptico, determinará se ele vai ou não gerar um impulso nervoso. Para que seja gerado um impulso nervoso, é necessário, portanto, que o somatório das contribuições ultrapasse um limiar excitatório. Depois de gerar um impulso, o neurônio entra em um período no qual não pode receber nenhum estímulo, enquanto retorna ao potencial de repouso (BRAGA *et al.*, 2000).

A propriedade de auto-organização ou plasticidade cerebral, que permite que o sistema nervoso em desenvolvimento se adapte ao meio ambiente, deve-se a dois mecanismos: a criação de novas conexões sinápticas entre neurônios e a modificação das sinapses existentes (HAYKIN, 2001).

As RNA procuram imitar as funções das redes neurais biológicas, buscando implementar seu comportamento básico e sua dinâmica. Do ponto de vista físico, as redes neurais são bastante diferentes. Entretanto, como veremos na próxima subseção, elas têm características em comum, pois são baseadas em unidades de computação paralela e distribuídas, que se comunicam por meio de conexões sinápticas e possuem detectores de características, redundância e modularização das conexões (BRAGA *et al.*, 2000).

### 1.1.2 Rede Neural Artificial

O primeiro modelo de rede neural artificial, mostrado na Figura 1.2, foi proposto pelo neurofisiologista Warren S. McCulloch, do *Massachusetts Institute of Technology* (MIT) e pelo matemático Walter Pitts, da Universidade de *Illinois* (TAFNER *et al.*, 1995). O modelo de neurônio proposto substituiu os dendritos por entradas  $x_i$ , cujas ligações ao corpo celular eram realizadas por elementos chamados pesos  $w_i$ , simulando as sinapses. Os estímulos captados pelas entradas são processados pela função de soma  $\Sigma$ , e o limiar excitatório é representado pela função de transferência ou ativação  $\theta$ .

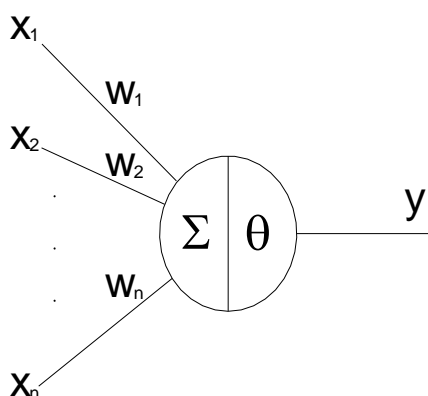


Figura 1.2: Neurônio de McCulloch e Pitts (BRAGA *et al.*, 2000).

No modelo de McCulloch e Pitts (MCP), a ativação do neurônio é obtida através da aplicação de uma função de transferência ou ativação, que ativa ou não a saída, dependendo do valor da soma ponderada das suas entradas, conforme a seguinte equação (BRAGA *et al.*, 2000):

$$\sum_{i=1}^n x_i w_i \geq \theta. \quad (1.1)$$

A descrição do modelo de McCulloch e Pits apresenta algumas limitações (BRAGA *et al.*, 2000). Com apenas uma camada, só é possível implementar funções linearmente separáveis com esse modelo. Além disso, pesos negativos são mais adequados para representar disparos inibidores, e o modelo foi proposto originalmente com pesos fixos não ajustáveis. A partir do modelo de McCulloch e Pits, foram introduzidos novos conceitos e derivados vários outros modelos, que permitem a produção de uma saída qualquer com diferentes funções de ativação e que também superam os problemas relativos à incapacidade de resolução de problemas não linearmente separáveis (BRAGA *et al.*, 2000).

A Figura 1.3 apresenta um diagrama que serve de base para os projetos de redes neurais artificiais e em que podemos identificar os elementos fundamentais dos modelos atuais, ou seja, as sinapses (cada uma caracterizada por um peso sináptico), o somatório e a função de ativação.

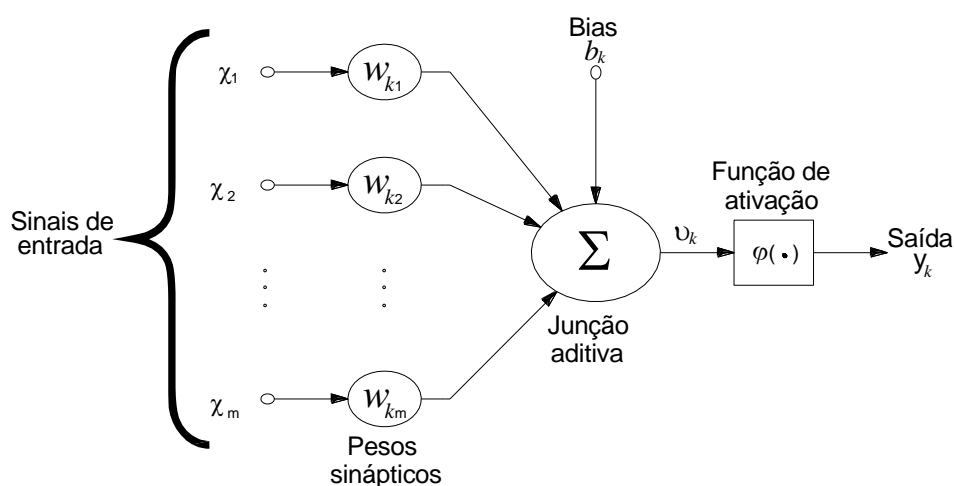


Figura 1.3: Modelo base de um neurônio artificial (HAYKIN, 2001).

Mais precisamente, a Figura 1.3 se refere a um neurônio  $k$  e apresenta os sinais de entrada  $x$ , que podem ser especificados individualmente como  $x_j$  e são multiplicados pelo peso sináptico correspondente  $w_{kj}$ . Convencionaremos aqui que o subíndice  $k$  refere-se ao neurônio em questão e o subíndice  $j$  ao sinal de entrada ao qual o peso se refere. O segundo elemento é o somatório  $\Sigma$ , que adiciona os

respectivos sinais de entrada ponderados pelo peso sináptico. O terceiro elemento é a função de ativação  $\theta$ , que na verdade corresponde à resposta ou saída do neurônio artificial e, simultaneamente, restringe o intervalo permissível de amplitude do sinal de saída a um valor finito (HAYKIN, 2001). Existe, ainda, neste neurônio base um parâmetro extra, chamado tendência  $b_k$ , que serve para aumentar ou diminuir a entrada efetiva da função de ativação dependendo se ele é positivo ou negativo, respectivamente (HAYKIN, 2001). A partir da Figura 1.3, podemos escrever:

$$v_k = u_k + b_k, \quad (1.2)$$

onde:

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j. \quad (1.3)$$

A saída ou resposta do neurônio será obtida a partir da aplicação da função de ativação:

$$y_k = \varphi(v_k) = \varphi(u_k + b_k) \quad (1.4)$$

onde  $b_k$  atua como se fosse um peso sináptico associado a uma entrada fixa de valor unitário.

### 1.1.3 Função de Transferência ou Ativação

Em grande parte da literatura sobre redes neurais são utilizados três tipos de funções de ativação para produzir o valor de saída do neurônio artificial: a função degrau, a função linear e as funções sigmoidais.

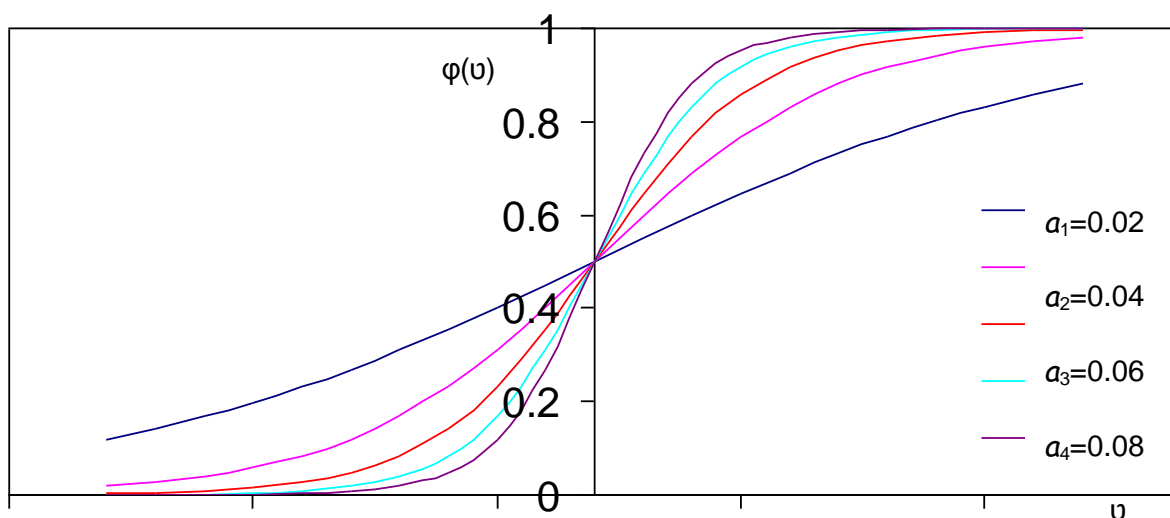


Figura 1.4 - Função log sigmoidal correspondente à equação (1.5) variando-se o parâmetro “a”.

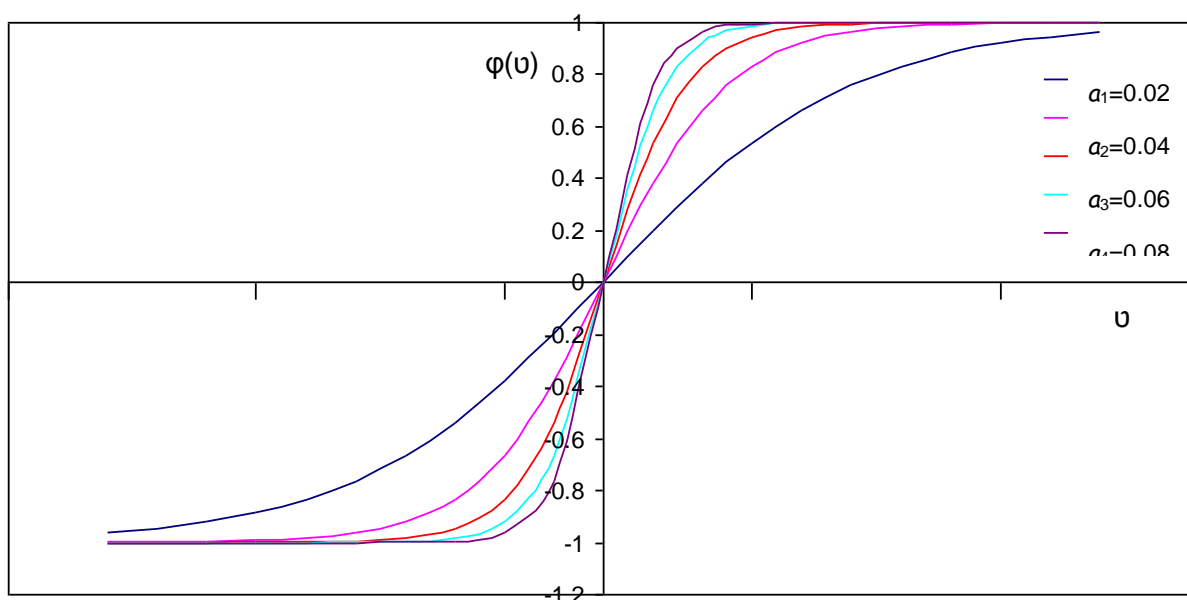


Figura 1.5: Função tangente sigmoidal correspondente à equação (1.6) variando-se o parâmetro “a”.

A função log sigmoidal, apresentada na Figura 1.4, é uma das mais utilizadas na construção das redes neurais artificiais, pois: a) apresenta um conjunto de propriedades que se mostram muito úteis nos cálculos relacionados à aprendizagem dos pesos e no mapeamento realizado pela rede; b) é não linear; c) é contínua e diferenciável; d) a derivada tem forma simples; e, e) é estritamente monotônica (RAUBER, 1999). A função log sigmoidal pode ser representada pela seguinte equação:

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + e^{-av}}, \quad (1.5)$$

onde a variação do parâmetro  $a$  determina funções sigmóides com diferentes inclinações. Verifica-se também que a função sigmoidal assume valores contínuos entre 0 e 1. Outra função muito utilizada é a tangente sigmoidal, mostrada na Figura 1.5, e expressa matematicamente seguinte forma:

$$\varphi(v) = \frac{e^{av} - e^{-av}}{e^{av} + e^{-av}}. \quad (1.6)$$

Em ambos os gráficos, variou-se o parâmetro  $u$  entre -100 a +100. Verifica-se que a tangente sigmoidal assume valores contínuos entre -1 e +1.

#### 1.1.4 Arquiteturas das Redes Artificiais

Em termos práticos, uma rede neural artificial se apresenta com neurônios organizados em várias camadas. A arquitetura da rede é constituída dos seguintes elementos: número de entradas e saídas, número de camadas, número de neurônios em cada camada, número de pesos em cada neurônio, a forma como os pesos estão associados (se dentro das camadas ou entre as camadas) e quais neurônios receberão correção (ZUPAN & GASTEIGER, 1993). As arquiteturas são agrupadas em duas categorias básicas: *feed-forward*, que são estáticas, sem realimentação, ou *feed-back*, que são dinâmicas, apresentando laços de realimentação, ou seja, as saídas influenciam as entradas.

A Figura 1.6 apresenta um exemplo de um tipo de arquitetura de rede com dez entradas totalmente conectadas, com uma camada oculta, também chamada de escondida, composta de quatro neurônios, e uma camada de saída, com dois neurônios. A camada oculta é aquela que não tem contato com o ambiente externo. Em uma aplicação prática, o número de entradas e saídas é imposto pelo problema específico, e o número de camadas ocultas e de seus neurônios dependem da complexidade do problema.

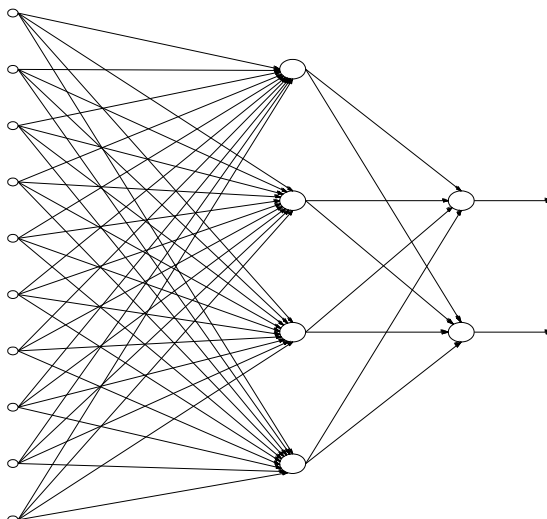


Figura 1.6: Rede *feed-forward* com uma camada oculta (HAYKIN, 2001).

### 1.1.5 Aprendizagem

Em redes neurais artificiais, a aprendizagem é o processo pelo qual os parâmetros livres da rede são ajustados através do estímulo pelo ambiente no qual a rede está inserida. O tipo de aprendizagem é determinado pela maneira que a modificação dos parâmetros ocorre (MENDEL & McCLAREN, 1970).

A literatura apresenta algumas regras básicas de aprendizagem. Dentre elas, a aprendizagem por correção de erro é a mais utilizada, e foi aplicada neste trabalho. Essa regra pode ser descrita pelas seguintes etapas: (a) um nó recebe um sinal de entrada; (b) e após processá-lo; (c) gera um sinal de saída, que é comparado ao valor alvo, gerando um erro; (d) que, se insatisfatório, (e) acarreta em um ajuste no peso, que é, na verdade, a origem do erro. O processo é repetido até que o erro atinja um valor pré-determinado ou satisfatório. Ao longo dos anos foram desenvolvidos vários algoritmos para a solução de problemas de aprendizagem e que diferem entre si pela forma como os pesos são ajustados (HAYKIN, 2001).

#### 1.1.5.1 Algoritmo *back-propagation*

O algoritmo mais utilizado para a correção dos pesos é o algoritmo *back-propagation*, desenvolvido por Rumelhart *et al.* (1986). Esse algoritmo fundamenta-se em equações claras e precisas, em que a correção dos pesos começa a partir da última camada e progride em direção à camada de entrada. Zupan & Gasteiger

(1993) apresentam a dedução das seguintes equações para a correção dos pesos da última e das demais camadas, respectivamente:

$$\Delta \omega_{ji}^{last} = \eta(\gamma_j - out_j^{last})out_j^{last} (1 - out_j^{last})out_i^{last-1} \quad (1.7)$$

$$\Delta \omega_{ji}^l = \eta \left( \sum_{k=1}^r \delta_k^{l+1} \omega_{kj}^{l+1} \right) out_j^l (1 - out_j^l) out_i^{l-1}, \quad (1.8)$$

onde os erros correspondentes às camadas são calculados da seguinte forma:

$$\delta_j^{last} = (\gamma_j - out_j^{last})out_j^{last} (1 - out_j^{last}) \quad (1.9)$$

$$\delta_j^l = \left( \sum_{k=1}^r \delta_k^{l+1} \omega_{kj}^{l+1} \right) out_j^l (1 - out_j^l) \quad (1.10)$$

sendo  $\Delta \omega_{ji}^{last}$  a diferença entre o peso anterior à correção e o novo peso, correspondente ao neurônio  $j$  e a entrada ou sinal  $i$ , na última camada,  $\eta$  a taxa ou parâmetro de aprendizagem,  $\gamma_j$  o valor desejado de saída do neurônio  $j$ , evidentemente da última camada,  $out_j^{last}$  o valor de saída produzido pelo neurônio  $j$  na última camada,  $\Delta \omega_{ji}^l$  a diferença entre peso anterior à correção e o peso novo correspondente ao neurônio  $j$  e ao sinal ou entrada  $i$ , na camada corrente  $l$ . Considera-se que  $l$  corresponde a uma camada qualquer, excluindo a última camada que foi convencionada como tendo índice *last* (ZUPAN & GASTEIGER, 2003).

## **1.2 Aplicação das Redes Neurais Artificiais à Inferência da Volatilidade dos Gases Liquefeitos de Petróleo (GLP) em uma Torre de Fracionamento de Líquido de Gás Natural (LGN).**

### *1.2.1 Introdução*

Muitas aplicações de RNA em modelagem de processo têm surgido nos últimos anos. Nascimento e Giudici (1998) utilizaram redes neurais artificiais na otimização do processo industrial de polimerização do *nylon-6,6*, apresentando resultados mais confiáveis do que os métodos convencionais de programação não linear. Silva e colaboradores (1999) mostraram que as RNA exibem bons resultados na avaliação dos níveis de contaminação de óleos de transformadores. Fernandes (2001), em um estudo de processo na Refinaria Gabriel Passos – PETROBRAS, considerou uma unidade de geração de hidrogênio e mostrou que as redes neurais artificiais podem ser utilizadas para inferir com sucesso a vazão do produto. Na dissertação (mestrado) de Marzano (1999) apresentam-se bons resultados na inferência do teor de oxigênio na fumaça de uma das caldeiras da USIMINAS também utilizando a técnica de RNA.

Nesta seção, inicialmente serão descritas as Unidades de Produção da Lubrificantes e Derivados de Petróleo do Nordeste (LUBNOR), Unidade de Negócios da PETROBRAS em Fortaleza, Ceará, com maior ênfase na Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN), onde está localizada a torre de destilação de LGN, objeto deste nosso estudo. Na seção seguinte, será descrita a metodologia para utilização das redes neurais artificiais com o objetivo de inferir ou modelar de forma estática a volatilidade do GLP produzido na UPGN, a partir de variáveis convenientemente escolhidas. Na última seção serão apresentados os resultados e discussões.

### *1.2.2 Descrição da LUBNOR*

A LUBNOR é constituída das seguintes unidades produtivas: Unidade de Vácuo (UVAC), Unidade de Geração de Hidrogênio (UGH), Unidade de Hidrotratamento (HDT) e a Unidade de Processamento de Gás Natural (UPGN).

Na UVAC, principal unidade da LUBNOR, encontra-se uma torre de destilação a vácuo, com capacidade para processar até 1.100 m<sup>3</sup>/dia de petróleos pesados, normalmente com características naftênicas. Nessa unidade, por destilação direta, no fundo da torre, são produzidos Resíduos de Vácuo ou Cimento Asfáltico de Petróleo (CAP). Nos cortes intermediários são obtidos Destilados Naftênicos Leves, Médios e Pesados, para posterior produção dos Lubrificantes Básicos Naftênicos, além de um diesel pesado utilizado para preparação de Combustíveis Marítimos. No topo, é produzida uma nafta usada como diluente na preparação de Asfaltos Diluídos.

A UGH é a unidade de produção de hidrogênio a partir de gás natural através do processo de reforma a vapor. O hidrogênio produzido é utilizado na Unidade de Hidrotratamento para hidrogenação catalítica dos Destilados Naftênicos produzidos na UVAC. O hidrotratamento tem como objetivo reduzir os teores de enxofre, nitrogênio e aromáticos dos Destilados Naftênicos, propiciando que eles atendam às especificações dos Lubrificantes Básicos Naftênicos. São produzidos quatro Lubrificantes Básicos: NH-140, NH-20, NH-10 e Isovolt. Estes básicos são utilizados por diversos formuladores para produção de produtos específicos, o NH-140 vai dar origem a graxas, o NH-20 é utilizado na produção de fluídos de corte, o NH-10 na produção de óleos de amortecedores e lubrificantes de compressores de refrigeração, e o Isovolt na produção de óleos isolantes de transformadores.

#### 1.2.2.1 Descrição da UPGN

A UPGN tem por objetivo separar gases leves, ricos em metano e etano, GLP e C5+, do gás natural oriundo das instalações *off-shore* do Ceará. Tem capacidade de processar até 350.000 m<sup>3</sup>/d, produzindo comercialmente GLP, C5+ (gasolina natural) e gás residual seco (metano e etano) utilizado como combustível industrial e automotivo. A Figura 1.7 apresenta uma visão geral da UPGN e a Tabela 1.1 apresenta a composição típica do gás natural processado na LUBNOR.



Figura 1.7: Visão geral da UPGN da LUBNOR.

Tabela 1.1: Composição típica do gás natural processado na LUBNOR.

COMPONENTES	% MOLAR
N <sub>2</sub>	1.53
CO <sub>2</sub>	1.07
C <sub>1</sub>	76,05
C <sub>2</sub>	8.03
C <sub>3</sub>	7.00
iC <sub>4</sub>	1.81
nC <sub>4</sub>	2.50
iC <sub>5</sub>	0.76
nC <sub>5</sub>	0.70
nC <sub>6</sub>	0.35
nC <sub>7</sub>	0.20

A Figura 1.8 apresenta um diagrama simplificado de blocos do processamento do gás natural na UPGN da LUBNOR.

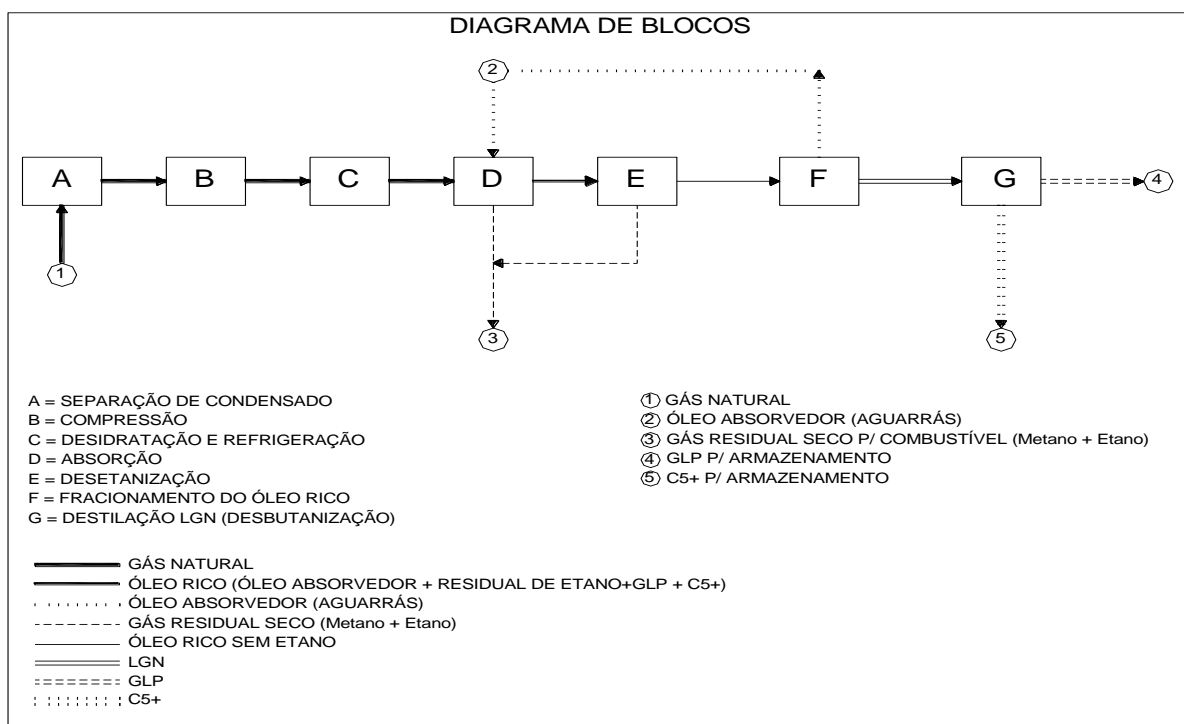


Figura 1.8: Diagrama de blocos da UPGN da LUBNOR.

O gás natural, ao chegar à UPGN, passa inicialmente por um vaso separador de condensado e, posteriormente, por um processo de desidratação para retirada do vapor d'água em equilíbrio. Isso permite que o gás possa ser submetido a baixas temperaturas sem ocorrer formação de hidratos. Em seguida, o gás é submetido a refrigeração e compressão que visa a aumentar a sua solubilidade no óleo de absorção, aguarrás. Na etapa seguinte, o gás natural segue para a torre de absorção, que promove o escoamento em contracorrente do óleo de absorção com o gás natural. Do topo da torre são removidas as frações leves do gás natural, metano e etano. O produto de fundo é o óleo rico constituído das frações pesadas, mais o óleo de absorção e residual de etano. O produto de fundo é então levado à torre desetanizadora, que nada mais é do que uma absorvedora com refervedor. Ela utiliza o óleo absorvedor refrigerado e pré-saturado com vapor da própria torre para reabsorver os produtos mais pesados do gás que retornam para o topo. O produto do fundo é o óleo rico constituído de óleo absorvedor e LGN que é a carga da torre de fracionamento, próxima etapa do processo. Na torre de fracionamento de óleo

rico, separa-se por destilação o óleo absorvedor (no fundo) que retorna ao processo, do LGN (produto de topo), que é carga da torre desbutanizadora. Na Figura 1.12, é apresentado o fluxograma desta torre, cujo entendimento do funcionamento é importante para o estudo, que será descrito, com mais detalhes no final desta subseção. Na desbutanizadora, também, separa-se por destilação o GLP (no topo) da gasolina natural, C5+, (no fundo). As Figuras 1.9, 1.10 e 1.11 apresentam a torre desbutanizadora, vaso acumulador e bombas de refluxo de topo e o condensador de topo, respectivamente (LUBNOR, Manual de Operações, UPGN-ASFOR).

Compõem ainda a UPGN um sistema de produção de propano e um sistema de injeção e regeneração do monoetilenoglicol utilizados na refrigeração e desidratação, respectivamente, do gás natural na entrada da planta, representados pelo bloco C no diagrama da figura 1.8.



Figura 1.9: UPGN da LUBNOR com a torre desbutanizadora ao centro.



Figura 1.10: Vaso acumulador (na parte superior) e bombas (principal e reserva) de refluxo da UPGN da LUBNOR.



Figura 1.11: Condensador de topo (vaso retangular) da torre desbutanizadora da UPGN.

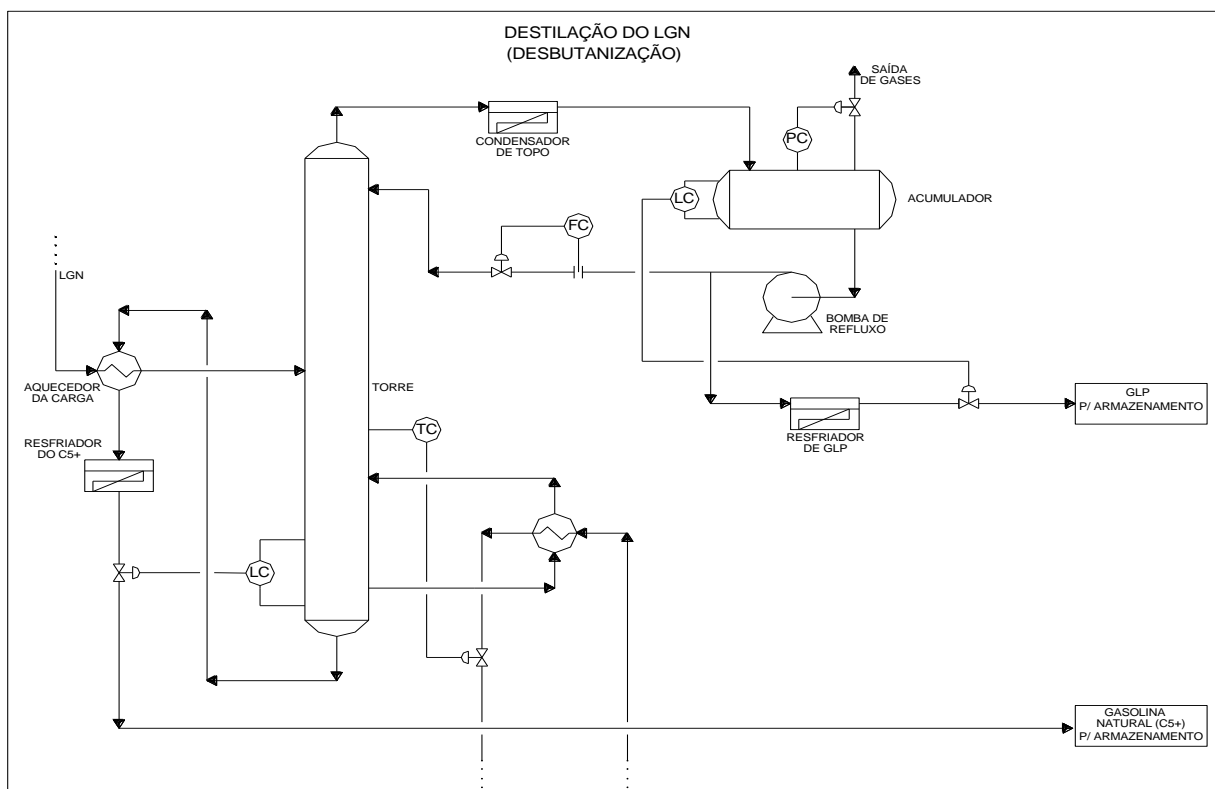


Figura 1.12 – Fluxograma de processo da torre desbutanizadora da UPGN.

Conforme apresenta a Figura 1.12, a carga de LGN da torre desbutanizadora é pré-aquecida pela gasolina natural (produto de fundo) para atingir a temperatura adequada às condições de destilação. A gasolina natural, antes de ser armazenada, passa por outro processo de resfriamento. O fluido quente do refeedor é o óleo quente proveniente de um forno do sistema de fracionamento de óleo rico, representado pelo bloco F do diagrama da figura 1.8. Este forno também funciona como refeedor do sistema de fracionamento do óleo rico.

O vapor do topo da torre desbutanizadora, constituído de GLP, propano e butano, é totalmente condensado num trocador de calor, sendo coletado em um acumulador. Através de bombeamento, uma parte é descarregada de volta à torre como refluxo e a outra parte é enviada para o resfriador antes de ser armazenado. As principais condições de processo do sistema de desbutanização estão descritas a seguir e nas Tabelas 1.2 e 1.3.

Tabela 1.2: Condições operacionais (vazões) na UPGN da LUBNOR.

CORRENTE	VAZÃO (m <sup>3</sup> /h)
Gás natural na entrada da UPGN	5.400
GLP (T = 38° C)	6.45
Gasolina natural (C5+)	1.4
Refluxo de GLP (T = 49° C)	12.5

Tabela 1.3: Condições operacionais de temperaturas e pressões na torre desbutanizadora da UPGN (LUBNOR).

CORRENTE	TEMPERATURA (°C)	PRESSÃO (kgf/cm <sup>2</sup> )
Carga	60.2	11.8
Vapor do topo	61.8	17.4
Saída do fundo	146.9	12.4
Refluxo	49.0	11.8
GLP (saída para armazenamento)	38.0	23.8

A norma ASTM D 1837- *Standard Test Method for Volatility of Liquefied Petroleum Gases* (2002) define a volatilidade do GLP como sendo uma medida da quantidade dos componentes menos voláteis presentes no produto, e é expressa em termos da temperatura dos 95% evaporados do material. Essa característica do GLP é também conhecida como intemperismo e faz parte da especificação legal desse produto (LUBNOR, 2003). Em termos gerais, o intemperismo é controlado da seguinte forma: a pressão e a temperatura do topo operam em valores fixos, pré-determinados para obtenção do intemperismo desejado. O controlador de temperatura funciona intertravado com a vazão de refluxo, ou seja, a temperatura é mantida no *set-point* através de variações na vazão de refluxo. Por sua vez, a pressão é mantida constante através de sinais do controlador de pressão para duas válvulas de saída de gás, sendo uma para queima e outra para a entrada da compressão no bloco B, como mostra a figura 1.8. No dia a dia, o ajuste no *set-point*

correspondente à pressão do topo, e somente é realizado para variações significativas na composição ou vazão da carga, enquanto os ajustes na temperatura são mais frequentes.

### 1.2.3 Metodologia

Nesta seção, são descritas as variáveis de entrada bem como a coleta dos conjuntos de padrões para treinamento e validação da topologia da rede neural utilizada.

Escolheram-se como variáveis de entrada da rede: a temperatura e a pressão do vapor no topo da torre desbutanizadora; a temperatura e vazão do refluxo; e a vazão do GLP para armazenamento. Na escolha dessas variáveis, adotaram-se os seguintes critérios: (a) são variáveis monitoradas *on-line* pelo sistema supervisor e, (b) com base na experiência operacional, são as variáveis relacionadas com o sistema de topo que mais sofrem flutuações com os ajustes de rotina, excetuando-se a temperatura e a pressão no topo, que operam com *set-point* fixo.

Para a coleta de dados referentes às variáveis de entrada foi utilizado o Sistema de Informações da Planta (PI). Esse sistema é um conjunto de *softwares* modulado que a PETROBRAS utiliza nas suas refinarias para monitorar e controlar as plantas de processo. O PI seleciona, recupera e arquiva dados e tem *interface* com aplicativos do *Windows (Microsoft)*. Quanto à variável de saída da rede, o intemperismo, os dados foram determinados no laboratório. O ensaio para obtenção dessa característica do GLP é muito simples e, sucintamente, consiste de: (a) refrigerar a amostra por meio de serpentina de resfriamento, (b) coletar 100 ml em um tubo normatizado, (c) sob condições específicas, deixar o líquido evaporar à pressão ambiente, (d) corrigir a temperatura observada quando 5 mL da porção de teste líquida restarem, considerando pressão barométrica, se for o caso, e o erro do termômetro no ponto de gelo. A temperatura corrigida é o intemperismo ou volatilidade do GLP.

No período de 1<sup>o</sup>/jul a 4/dez/2004, foram coletados 183 conjuntos das variáveis, que podemos chamar de padrões para treinar, validar e simular a rede.

Desses conjuntos, escolheram-se aleatoriamente 131 conjuntos para treinar a rede e 52, ou seja, 28% do total para posterior validação. Em geral, utilizam-se de 20% a 30% dos dados para a simulação das redes em trabalhos desse tipo (BAWAZEER, 1996; FERNANDES, 2001; MOLGA, 2002). A Tabela 1.4 apresenta os 52 conjuntos das variáveis ou *padrões* utilizados para validação. Em princípio, não foi adotada nenhuma filtragem ou tratamento dos dados.

Para o desenvolvimento das redes neurais foi utilizada a *interface* gráfica do aplicativo *Neural Network Toolbox* do *Matlab*, versão 6.5, que permite facilmente a criação de redes, seleção das funções de transferência e dos algoritmos para treinamento, além do acompanhamento visual do desempenho das redes.

Tabela 1.4: Conjunto de dados utilizados para validação da rede.

Temperatura do vapor no topo (°C)	Pressão do vapor no topo (kgf/cm <sup>2</sup> )	Temperatura do refluxo (°C)	Vazão de refluxo (m <sup>3</sup> /h)	Vazão de GLP (t/d)	Intemperismo (°C)
60.51	12.60	43.02	4.33	44.39	2.0
60.51	12.60	43.02	4.33	44.39	2.0
60.51	12.60	43.02	4.33	44.39	2.0
61.75	13.47	42.95	4.36	35.23	1.4
61.72	13.40	45.05	4.86	41.84	1.4
59.51	13.93	41.35	4.46	24.95	0.5
60.03	12.60	43.48	5.31	34.46	2.2
59.53	13.08	43.37	4.16	33.41	-1.1
60.03	12.60	43.48	5.31	34.46	2.2
62.83	14.23	44.64	4.54	24.84	1.8
61.73	13.63	42.51	4.33	33.26	-2.0
64.85	11.84	39.55	3.53	14.23	6.0
62.28	11.14	38.90	3.45	40.33	17.0
64.54	13.04	41.53	3.28	34.69	8.6
61.46	13.01	42.37	4.12	32.22	5.0
64.54	13.04	41.53	3.28	34.69	8.6
61.92	13.10	44.64	4.10	46.55	6.0
61.79	12.06	44.05	4.26	39.23	7.0
62.07	11.95	40.71	3.99	35.89	7.0
59.23	12.69	39.88	3.24	35.00	4.3
59.59	12.67	43.74	3.24	33.49	2.2
60.28	12.81	46.02	6.10	38.63	0.0
61.04	12.97	48.32	5.70	36.50	-2.0
59.42	12.64	44.68	4.81	40.01	-0.2
59.60	12.19	41.26	4.41	40.61	4.0
61.75	13.82	45.21	5.37	41.15	-1.8

60.73	10.60	38.99	4.31	29.68	0.5
62.82	13.36	42.59	4.79	32.89	4.4
60.44	12.38	39.85	4.73	17.92	1.1
59.18	10.84	40.62	2.99	41.00	1.7
58.91	13.18	44.89	5.24	27.88	1.7
60.06	12.61	43.03	5.34	28.58	2.2
59.18	10.84	40.62	2.99	41.00	1.7
60.70	12.74	43.16	4.76	41.78	0.0
60.70	12.74	43.16	4.76	41.78	0.0
60.33	12.51	43.36	5.14	41.14	0.0
60.33	12.51	43.36	5.14	41.14	0.0
60.33	12.51	43.36	5.14	41.14	0.0
58.47	12.79	44.18	5.28	44.73	-1.1
58.50	11.84	39.86	3.00	47.26	1.7
60.79	12.78	45.25	5.30	45.95	0.0
60.90	12.81	45.04	4.80	45.08	1.9
61.08	12.77	42.29	5.01	52.26	4.4
59.88	12.78	42.50	5.36	45.19	2.1
60.28	12.60	44.96	5.43	39.54	1.4
59.82	12.39	42.94	4.24	48.85	3.3
58.99	12.61	46.63	5.60	37.94	0.0
58.90	12.60	42.86	4.87	43.24	-1.1
61.28	13.69	43.66	4.92	35.15	0.8
63.33	14.21	47.69	5.27	37.48	2.2
60.42	14.31	48.15	6.40	39.49	0.7
60.21	12.83	47.32	6.02	35.29	3.0

### 1.2.4 Resultados

Foram treinados 10 tipos de redes. A Tabela 1.5 apresenta os resultados das quatro melhores redes na fase de validação.

Tabela 1.5 – Principais redes obtidas na fase de validação

Número de neurônios na camada oculta	Erro absoluto (EA) (°C)	Erro relativo (ER) (%)	Coefficiente de correlação linear (R)
120	2.81	1.2	0.502
80	2.59	1.1	0.584
60	2.65	1.1	0.600
40	2.96	1.3	0.504

O erro absoluto, relativo e o coeficiente de correlação (LEVINE *et al.*, 1998) foram calculados através das seguintes equações:

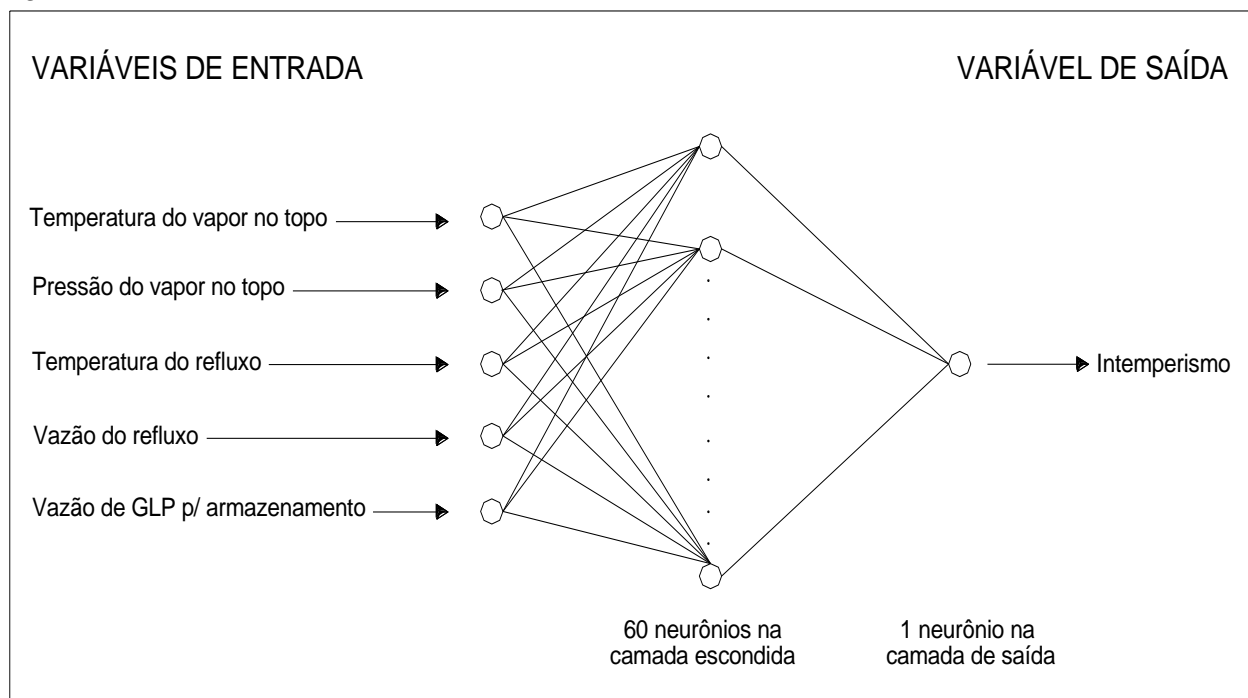
$$EA = \frac{1}{N} \sum_1^N |y_{LAB} - y_{RNA}| \quad (1.11)$$

$$ER = \left( \frac{1}{N} \sum_1^N \frac{|y_{LAB} - y_{RNA}|}{y_{LAB}} \right) \times 100 \quad (1.12)$$

$$R = \frac{\sum_{i=1}^N (y_{LAB(i)} - y_{LAB(médio)})(y_{RNA(i)} - y_{RNA(médio)})}{\sqrt{\sum_{i=1}^N (y_{LAB(i)} - y_{LAB(médio)})^2} \sqrt{\sum_{i=1}^N (y_{RNA(i)} - y_{RNA(médio)})^2}} \quad (1.13)$$

onde  $N$  é o número de amostras,  $y_{LAB(i)}$  é o valor de cada variável da medida no laboratório,  $y_{LAB(médio)}$  é a média das variáveis medidas no laboratório,  $y_{RNA(i)}$  é o valor de cada variável calculada nos modelos de RNA e  $y_{RNA(médio)}$  é a média das variáveis calculadas (saídas) no modelo. Para o cálculo do erro relativo (ER) o intemperismo é expresso em graus *Celsius* e para cálculo do erro absoluto (EA) a temperatura é a absoluta (K). A rede com 80 neurônios apresentou resultados semelhantes aos da rede com 60 neurônios. Elegeu-se, porém, esta última como a melhor, uma vez que apresentou um maior coeficiente de correlação linear. Adotou-se como critério principal para avaliar a eficiência das redes, o coeficiente de correlação linear ( $R$ ) entre o valor calculado pela rede e o valor medido no laboratório na fase de validação. Quanto mais forte uma associação entre variáveis, mais próximo de 1 será o coeficiente de correlação. A Figura 1.13 apresenta um diagrama da rede com 60 neurônios.

Figura 1.13: Modelo da rede com 60 neurônios.



Todas essas quatro redes são do tipo *feed-forward* com uma função de transferência tipo tangente sigmoidal na camada escondida. Na camada de saída, empregou-se uma função linear. Após vários testes, estabeleceu-se que 5.000 *epochs* eram suficientes para a convergência na fase de treinamento. *Epochs* é o número de vezes que o conjunto de dados é submetido à rede e os pesos são ajustados (DEMUTH & BEALE, 1993). O tempo de computação em cada uma dessas redes é de 4 a 5 minutos. O algoritmo de treinamento adotado foi o *Scaled Conjugated Gradient (Trainscg)* (HAGAN *et al.*, 1996). Esse algoritmo é um dos disponíveis no aplicativo e apresenta a maior velocidade de convergência.

A Figura 1.14 mostra os resultados obtidos na etapa de treinamento com os 131 conjuntos de padrões utilizados com a rede de 60 neurônios. Verifica-se uma excelente convergência da rede.

A Figura 1.15 mostra os resultados na validação e a Figura 1.16 compara esses resultados com os obtidos em um simulador desenvolvido por técnicos da PETROBRAS (MORO, 1997), atualmente em fase de implantação na LUBNOR. Nesse simulador, o intemperismo é determinado pela seguinte equação:

$$I_{(k)} = I_{(R)} + KLV(LV_{(k)} - LV_{(R)}) + KTC(TC_{(k)} - TC_{(R)}) + Bias, \quad (1.14)$$

onde  $I_{(k)}$  é o intemperismo do GLP no instante  $k$  em °C,  $I_{(R)}$  é o intemperismo determinado sob rigorosas condições de controle (condições de referência) em °C,  $KLV$  é uma constante calculada após um período de acompanhamento e corresponde à razão do ganho de intemperismo e a relação molar líquido vapor em °C/(kmol/kmol),  $LV_{(k)}$  é a relação molar líquido vapor no instante  $k$  em kmol/kmol,  $LV_{(R)}$  é a relação molar líquido vapor nas condições de referência em kmol/kmol,  $KTC$  é uma constante calculada nas condições de referência e corresponde à razão do ganho de intemperismo e temperatura ( $TC$ ) de topo da torre desbutanizadora corrigida, em °C/°C,  $TC_{(k)}$  é a temperatura do topo da desbutanizadora no instante  $k$  corrigida com a pressão parcial em °C,  $TC_{(R)}$  é a temperatura corrigida correspondente às condições de referência em °C e o *Bias* é a diferença sistemática de medição entre o laboratório e o simulador. A relação molar líquido vapor é determinada no prato de topo. A temperatura de topo é corrigida pela pressão parcial, através da equação de Antoine (HIMMELBLAU, 1984),

$$TC = \left[ \frac{1}{\left( A + \left( \frac{1}{(T + 273)} \right) \right)} \right] - 273 \quad (1.15)$$

com 
$$A = \left( \frac{R}{HV} \right) \log(PP / PP_b) \quad (1.16)$$

onde  $T$  é a temperatura de topo da torre em °C,  $PP$  é pressão parcial dos hidrocarbonetos no topo da coluna em kgf/cm<sup>2</sup> (abs),  $PP_b$  é a pressão parcial de referência em kgf/cm<sup>2</sup> (abs),  $R$  é a constante universal dos gases em kcal/(kmol.°C) e  $HV$  é o calor de vaporização do GLP em kcal/kmol.

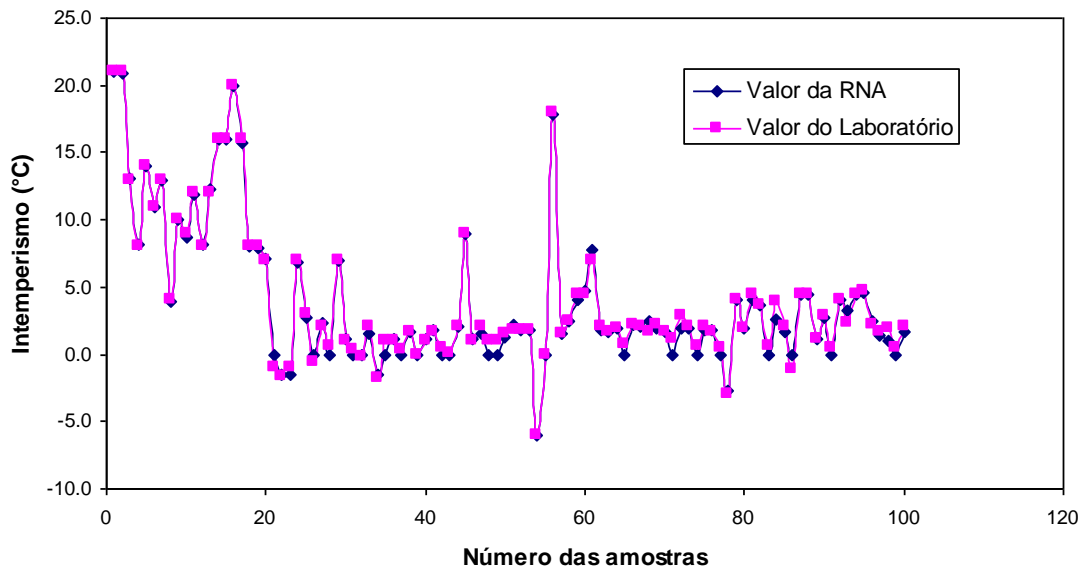


Figura 1.14: Resultados da rede de 60 neurônios no treinamento

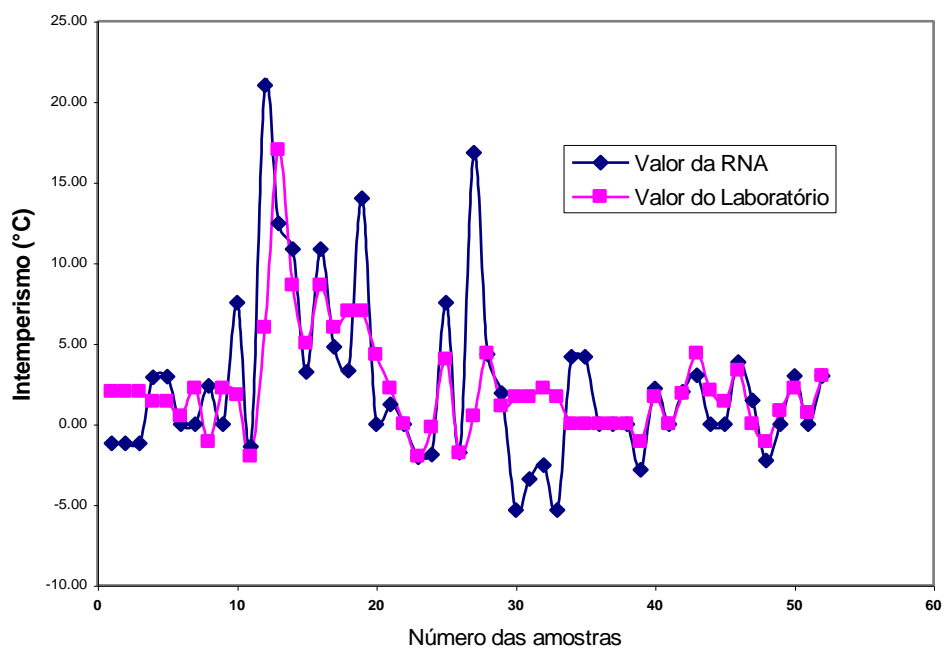


Figura 1.15: Resultados da rede de 60 neurônios na validação.

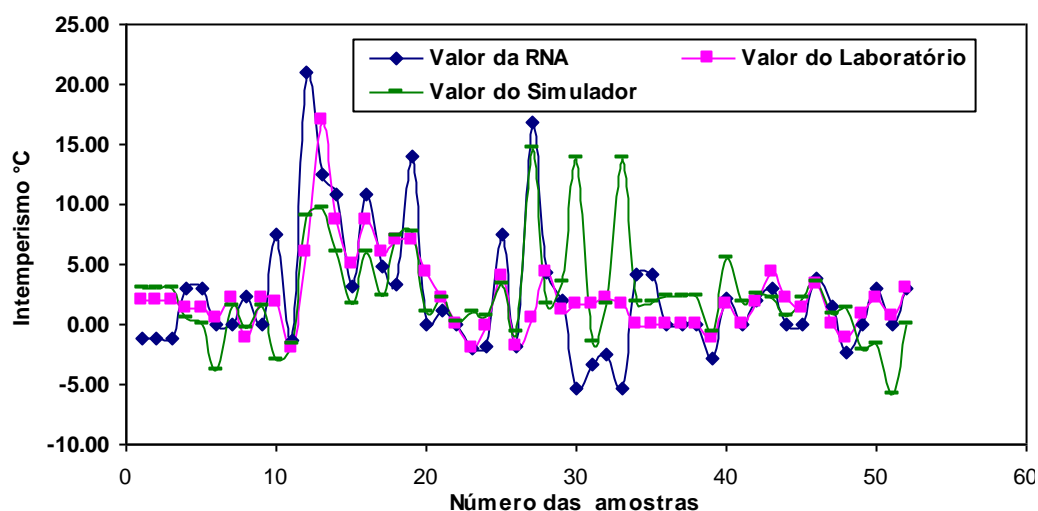


Figura 1.16: Comparação Rede Neural e Simulador

Graficamente verifica-se que a rede neural apresenta uma tendência em acompanhar os resultados do laboratório, entretanto alguns pontos na faixa central não mostraram esse comportamento. No gráfico, também, verifica-se que a RNA apresentou resultados um pouco melhores do que o simulador, o que se confirma nos resultados mostrados na Tabela 1.6, que apresenta os valores obtidos para avaliação das diferenças entre o intemperismo calculado pela rede e pelo simulador, em relação aos valores medidos no laboratório. Calculou-se o erro médio absoluto, o erro médio relativo e o coeficiente de correlação.

Tabela 1.6: Comparação entre o Simulador e a RNA

Modelos	Erro absoluto (EA) (°C)	Erro relativo (ER) (%)	Coefficiente de Correlação (R)
Simulador X Lab	2.65	1.2	0.43
RNA X Lab	2.65	1.1	0.60

Eliminaram-se dos dados que originaram o gráfico da Figura 1.16, os pontos que apresentavam maiores distorções, em torno de 6 pontos, tanto no caso do simulador como na RNA. O novo gráfico, Figura 1.17, apresenta uma melhor aderência entre os resultados do laboratório e simulador e RNA. Para os valores remanescentes foi calculada também a média dos erros relativos, a média dos erros absolutos e o coeficiente de correlação linear entre os valores obtidos na RNA e no simulador, e os valores do laboratório. Novamente a RNA apresenta desempenho melhor que o simulador, conforme apresenta a Tabela 1.7, a seguir:

Tabela 1.7: Comparação entre o Simulador e a RNA (excluindo-se 6 pontos)

Modelos	Erro absoluto (EA) (°C)	Erro relativo (ER) (média)	Coefficiente de Correlação
Simulador X Lab	1.82	0.9	0.58
RNA X Lab	1.78	0.9	0.69

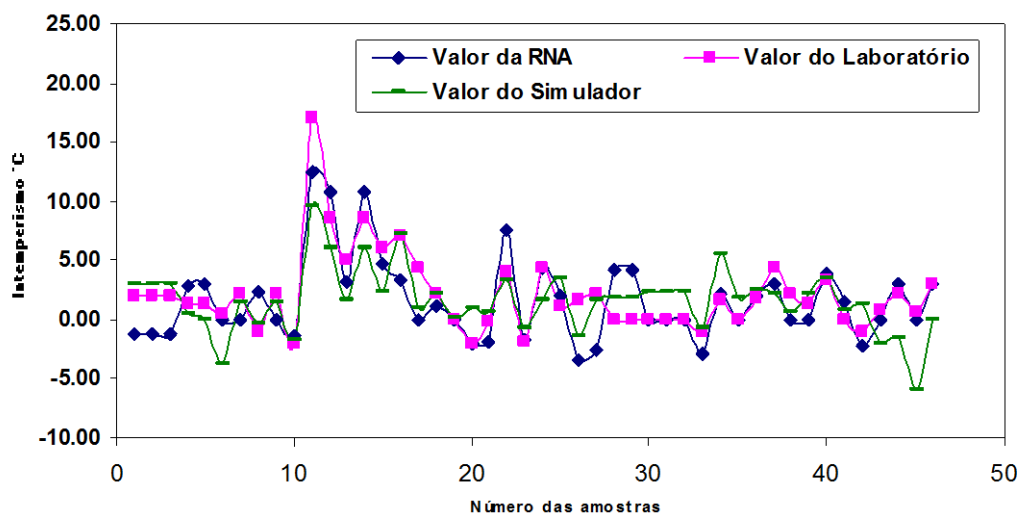


Figura 1.17: Comparação Rede Neural e Simulador (excluindo alguns valores)

Para se avaliar o grau de importância de cada uma das variáveis de entrada na determinação do intemperismo, calculou-se o erro na saída da rede (em relação aos valores de laboratório) substituindo cada uma das variáveis pela sua média. Os erros calculados estão na Tabela 1.8. Esse artifício foi usado por López e colaboradores (2003). A variável que tiver maior importância contribui para o maior erro, conforme mostra tabela a seguir, ou seja, a vazão de refluxo e a temperatura do refluxo conforme o modelo são as variáveis que mais afetam o intemperismo, enquanto a vazão de GLP e a pressão do topo são as variáveis que têm menor influência.

Tabela 1.8: Nível de importância das variáveis

Variável (médias)	Erro absoluto (°C)	Erro Relativo (%)
Temp. do topo (°C)	3.08	1.4
Pressão do topo (kgf/cm <sup>2</sup> )	2.71	1.2
Temp. do refluxo (°C)	3.28	1.5
Vazão do refluxo (m <sup>3</sup> /h)	3.37	1.5
Vazão do GLP (t/d)	2.57	1.2

### 1.2.5 Discussão

Os resultados obtidos podem ser avaliados, do ponto de vista operacional, como satisfatórios, considerando que os dados *padrões* não foram submetidos a nenhum tipo de filtragem, ou seja, distúrbios operacionais e outros eventos poderiam ter contribuído para algumas distorções. Eventualmente tem-se testado essa rede com valores pontuais e os resultados obtidos têm-se mostrado promissores. O próximo passo é instalar a rede no *PI* para inferência em linha. Em paralelo, pretendemos *treinar* novas arquiteturas de redes e fazer estudos de correlações e avaliações das variáveis utilizadas nessas redes. Há, ainda, a possibilidade de agregarmos novas variáveis, como, por exemplo, a vazão de carga e a temperatura no fundo da torre desbutanizadora.

Uma aplicação imediata para uso da técnica será o desenvolvimento de uma rede neural artificial que modele a torre desbutanizadora para inferir simultaneamente o intemperismo e a pressão de vapor, uma vez que ambas variáveis são controladas nesse ponto do processo. Outra perspectiva para uso de redes neurais artificiais é a utilização na preparação de determinadas misturas, quando, para algumas propriedades dos componentes não existem correlações para cálculos de composição. Existem ainda, outras variáveis operacionais controladas, particularmente aquelas relacionadas com qualidade, que não são inferidas *on line* devido a limitações tecnológicas, porém de grande importância nos processos, e que podem ser objeto de aplicação das RNA.

## CAPÍTULO 2: REDES COMPLEXAS: APLICAÇÕES PARA PLANTAS DE PROCESSOS QUÍMICOS

### 2.1 Introdução

A ferramenta usada em Física para tratar de sistemas formados por um número grande de elementos é a Mecânica Estatística. Nessa disciplina, tenta-se descrever as propriedades globais dos sistemas construindo modelos mínimos para a dinâmica dos elementos. Muitos sistemas podem ser estudados estabelecendo interações entre vizinhos em uma rede. Por exemplo, uma célula pode ser descrita como uma rede complexa de proteínas conectadas através de reações químicas; a *Internet*, como uma rede complexa de computadores conectados através de diversos meios de comunicação; um sistema de geração e transmissão de energia elétrica também pode ser descrito como uma rede complexa de geradores, transformadores e subestações, conectados através de linhas de transmissão. Essas redes, apesar de representarem sistemas totalmente diferentes, apresentam características comuns, e esse fato tem atraído a atenção de pesquisadores no sentido de investigarem o mecanismo que determina a topologia dessas estruturas complexas (AMARAL & OTTINO, 2004).

Esses sistemas, na natureza e na sociedade humanas, são constituídos por um grande número de agentes interagentes, que formam uma rede com geometria complexa exibindo características de mundo pequeno, *scale-free* e hierarquia (WATTS, 1999; BARABÁSI, 2002). Exemplos incluem muitos processos metabólicos existentes (JEONG *et al.*, 2000), relação presa-predador (WILLIAMS & MARTINEZ, 2000), e relações em grupos sociais (LILJEROS *et al.*, 2001). Um importante aspecto sempre presente nesses sistemas é o comportamento autorregulatório, responsável pela sua robustez a perturbações e flexibilidade para responder a mudanças ambientais e estímulos externos. Tal relação entre robustez e flexibilidade, que representa o ingrediente necessário para assegurar e manter a funcionalidade do sistema, resulta do fato de que a organização global dos agentes é alcançada na ausência de qualquer controle central, como um fenômeno coletivo emergindo de interações locais. Dessa forma, a geração de uma estrutura

descentralizada pode evitar o aparecimento de pontos vulneráveis onde um ataque poderia provocar um colapso total da rede (COHEN *et al.*, 2000). Ao mesmo tempo, essa descentralização torna o sistema complexo mais adaptável, porque permite aos agentes locais atuarem diante da variabilidade das condições externas e de eventuais demandas específicas.

Uma questão óbvia que surge a partir desses fatos e ideias e que está longe de ser respondida é como as interações locais das unidades elementares da rede podem gerar naturalmente uma dinâmica com organização global. No momento, o estudo desses sistemas complexos depende do desenvolvimento de novas técnicas para elucidar seus comportamentos através da (i) análise da estrutura topológica de sua rede de interações e, (ii) da investigação da origem e características de suas dinâmicas e intrínseca auto-organização. As ações recíprocas desses dois elementos, a saber, topologia e dinâmica, podem ser muito efetivas em revelar os mecanismos que regem as estratégias dos sistemas reais na natureza. Ademais, isso pode conduzir a novas ideias para os projetos de redes artificiais com melhoria de *performance* que exibam propriedades de mundo pequeno e/ou *scale-free* como, por exemplo, a rede de distribuição de energia elétrica (FALOUTSOS *et al.*, 1999) e a *Internet* (PASTOR-SATORRAS & VESPIGNANI, 2004).

Neste capítulo, são comentadas as propriedades observadas em redes que representam alguns sistemas reais e são apresentados modelos existentes para redes complexas, em especial, o modelo do contato preferencial que exhibe uma das propriedades mais surpreendentes observadas em redes reais, a distribuição de conectividade em lei de potência. Apresenta-se um estudo das malhas de processo de três unidades industriais abordando conceitos e propriedades de redes complexas.

### 2.1.1 O modelo de Erdős-Rényi

O interesse por redes complexas na ciência iniciou-se, aparentemente, no campo da teoria de grafos. Um grafo é uma estrutura abstrata que representa um conjunto de elementos denominados nós e suas relações de interdependências e

arestas (GOLDBARG & LUNA, 2000). Um trabalho pioneiro nessa área introduz o modelo proposto por Paul Erdős & Alfréd Rényi (1959). Esse modelo baseia-se nas seguintes premissas: o sistema tem  $N$  nós, qualquer par de nós pode ser conectado com probabilidade  $p$ , criando, portanto, uma rede com  $pN(N-1)/2$  conexões distribuídas aleatoriamente. A Figura 2.1 mostra uma rede gerada segundo o modelo de Erdős & Rényi (ER) e como a forma dessa rede é aleatória, o tratamento estatístico é oportuno. Nesta seção, são apresentadas algumas das propriedades desse modelo, e, na próxima seção, essas propriedades serão comparadas com as de redes reais.

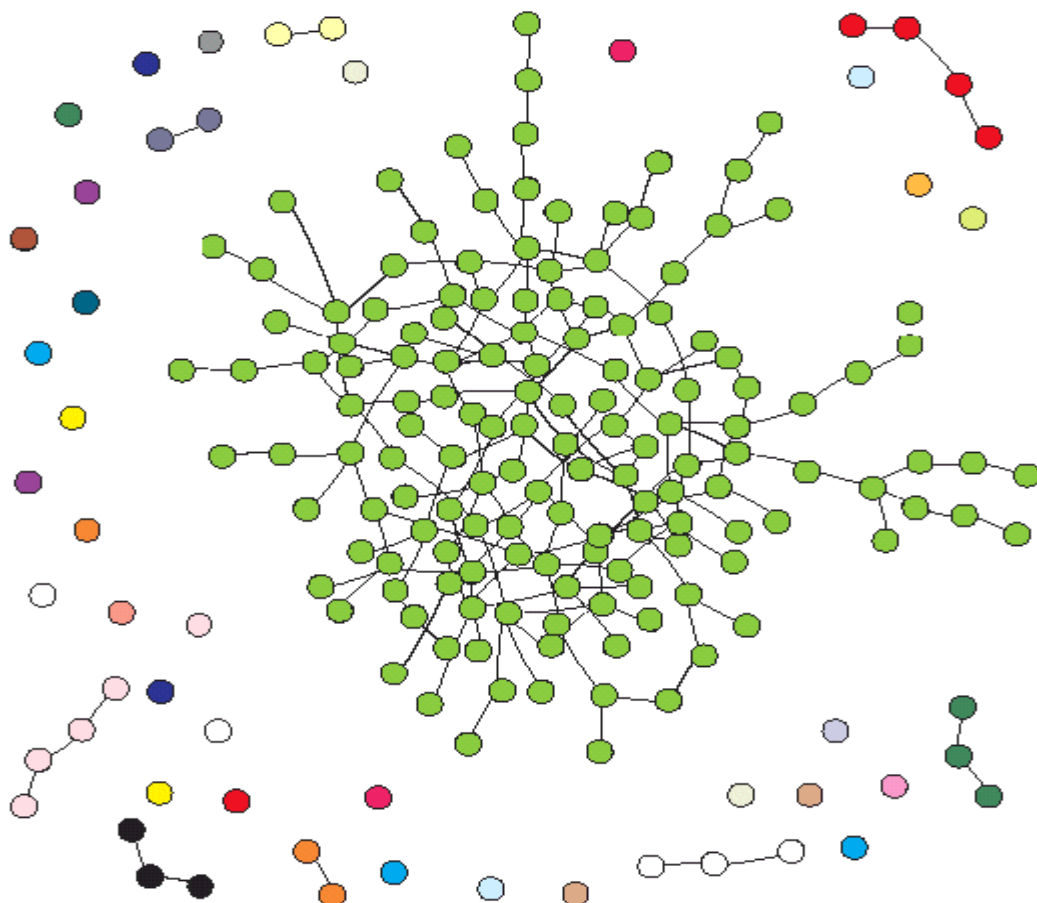


Figura 2.1: Rede gerada conforme modelo de Erdős-Rényi (STROGATZ, 2001).

### 2.1.2 Distribuição de Conectividade

Numa rede aleatória com  $N$  nós, desde que qualquer par de nós tenha a mesma probabilidade  $p$  de se conectarem, a probabilidade de um nó  $i$  qualquer

apresentar  $k$  conexões tem uma distribuição que se aproxima da distribuição binomial,

$$P(k) = C_{N-1}^k p^k (1-p)^{N-1-k}, \quad (2.1)$$

onde  $C_{N-1}^k$  é o número de diferentes combinações em que as conexões podem ser distribuídas;  $p^k$  é a probabilidade que existam  $k$  conexões e  $(1-p)^{N-1-k}$  é a probabilidade que as outras  $N-1-k$  conexões estejam ausentes. Quando  $N$  tende para o infinito, a forma binomial se aproxima da distribuição de Poisson,

$$P(k) = e^{-\langle k \rangle} \frac{\langle k \rangle^k}{k!}, \quad (2.2)$$

onde  $\langle k \rangle = pN$  é a conectividade média. Esse resultado mostra que a maioria dos nós apresenta aproximadamente o mesmo número de conexões, apesar da distribuição aleatória de conexões.

### 2.1.3 Distância média

A distância entre dois nós é definida como o número mínimo de conexões que os separam, e pode ser interpretada com uma medida do grau de distanciamento dos nós de uma rede. A distância média  $\bar{l}$  é a média das distâncias entre todos os pares de nós. Se a probabilidade  $p$  for suficientemente pequena, pode acontecer de não existir um caminho conectando dois nós. Nesse caso, a distância entre eles é infinita. Define-se, então, a distância média, tomando apenas os pares de nós em um mesmo agregado totalmente conectado. Em média, cada nó tem  $\langle k \rangle$  primeiros vizinhos. Cada um desses tem  $\langle k \rangle$  vizinhos, resultando em  $\langle k \rangle^2$  segundos vizinhos,  $\langle k \rangle^3$  terceiros vizinhos e assim por diante. Se o número  $N$  de nós da rede for suficientemente grande,  $\ln(N) \gg \langle k \rangle$ , o número de nós a uma distância  $\bar{l}$  continua crescendo exponencialmente até que, eventualmente, o número de vizinhos a uma distância  $\bar{l}$  fique da ordem do tamanho da rede,  $N$ . Assim a distância média deve crescer logaritmicamente com o tamanho da rede,

$$l \sim \ln(N). \quad (2.3)$$

### 2.1.4 Coeficiente de Agregação

O coeficiente de agregação  $C_i$  mede a tendência de uma rede de formar pequenos ciclos. Se dois nós têm um vizinho em comum, então  $C_i$  é a probabilidade de que eles sejam conectados. Em outras palavras, o coeficiente de agregação  $C_i$  é definido como a fração entre o número de pares conectados dentre seus  $k_i$  vizinhos,  $n_i$ , e o número de todas as possíveis conexões entre eles, equação (2.4). Nas redes reais, esse coeficiente é muito maior do que nas redes aleatórias para o mesmo número de nós e conexões. No modelo ER, como não existe nenhuma correlação entre as conexões, o coeficiente de agregação é igual à probabilidade  $p$ .

$$C_i = \frac{2n_i}{k_i(k_i - 1)} \quad (2.4)$$

### 2.1.5 Resultados empíricos de redes reais

Nesta seção, são apresentadas algumas propriedades observadas em redes reais construídas ou geradas a partir de sistemas naturais e artificiais.

#### 2.1.5.1 Internet

As informações que trafegam na rede mundial de computadores, *Internet*, são distribuídas por roteadores que determinam para onde cada pacote de informações deve ir. Em estudos recentes (PASTOR-SATORRAS e VESPIGNANI, 2004) mostram que a *internet* apresenta uma distribuição de conectividade na forma de uma lei de potência  $P(k) \sim k^{-\gamma}$ , com expoente  $\gamma = 2.23$ . Para essa mesma rede, o coeficiente de agregação,  $C_a$ , medido em diferentes momentos entre 1997 e 1999, por exemplo, variou entre 0.18 a 0.3 (PASTOR-SATORRAS & VESPIGNANI, 2004), sendo bem maior que uma rede aleatória com os mesmos parâmetros,  $C_a = 0.0001$ . Mostra-se também que a distância média é da ordem de  $1 \sim 9$  (PASTOR-SATORRAS & VESPIGNANI, 2004).

### 2.1.5.2 Linguística

Yook *et al.* (2001) identificaram uma rede complexa cujos nós são palavras conectadas por seus significados, isto é, duas palavras se conectam caso sejam sinônimas, conforme o *Merriam-Webster Dictionary*. Os resultados indicam a existência de um grande agregado de 22.311 palavras de um total de 23.279 com distância média  $\bar{l} = 4.5$ , com coeficiente de agregação  $C_a=0.7$  e a distribuição de conectividade seguindo uma lei de potência com expoente  $\gamma = 2.8$ .

### 2.1.5.3 Redes Celulares

Jeong *et al.* (2000) estudaram o metabolismo de 43 organismos e construíram uma rede complexa em que os nós são os substratos, tais como: ATP, ADP e H<sub>2</sub>O, e as conexões são estabelecidas quando esses substratos participam da mesma reação química. Essa rede apresenta uma distribuição de conectividade segundo uma lei de potência com expoente  $\gamma$  entre 2.0 e 2.4, dependendo do organismo, e a distância média  $\bar{l}$  é da ordem de 3.3.

### 2.1.5.4 Outros sistemas

Foram também observadas distribuições em lei de potência nas redes formadas pelas colaborações de atores em filmes de cinema (BARÁBASI & ALBERT, 1999); no sistema de distribuição de energia elétrica no oeste dos Estados Unidos (WATTS & STROGATZ, 1998); nos preços de ações de companhias individuais (VASILIK *et al.*, 1999); nas redes de colaborações em artigos científicos (NEWMAN, 2001) e muitas outras.

### 2.1.6 Rede de Mundo Pequeno

O conceito de mundo pequeno descreve o fato de que apesar de as redes complexas frequentemente apresentarem grande tamanho, na maioria delas é relativamente pequena a distância entre quaisquer dois nós. O mais conhecido exemplo de mundo pequeno foi um experimento conduzido pelo psicólogo Stanley

Milgram (MILGRAM, 1967), que concluiu que qualquer par de pessoas está separado no máximo por apenas seis relações.

O experimento de Stanley Milgram apresenta o mesmo comportamento do modelo ER no que diz respeito à pequena distância média, apesar de que as relações entre as pessoas não são aleatórias, pois um primeiro contato entre elas é estimulado por vizinhos ou colegas de trabalho. Apesar deste comportamento similar ao modelo ER, as redes reais apresentam o coeficiente de agregação muito maior. Para abordar essas duas propriedades, a pequena distância média e o alto coeficiente de agregação, foi criado o modelo de mundo pequeno (WATTS & STROGATZ, 1998). O ponto de partida desse modelo é uma rede unidimensional com  $N$  nós, em que cada nó está conectado aos seus  $K$  vizinhos mais próximos. Nessa condição, o coeficiente de agregação é dado por

$$C = \frac{3(K-2)}{4(K-1)}, \quad (2.5)$$

Em seguida, cada conexão pode ser redirecionada com probabilidade  $p$  para um ponto aleatório na rede. Dessa forma, são introduzidas  $pN$  conexões aleatórias no sistema, como mostra a Figura 2.2.

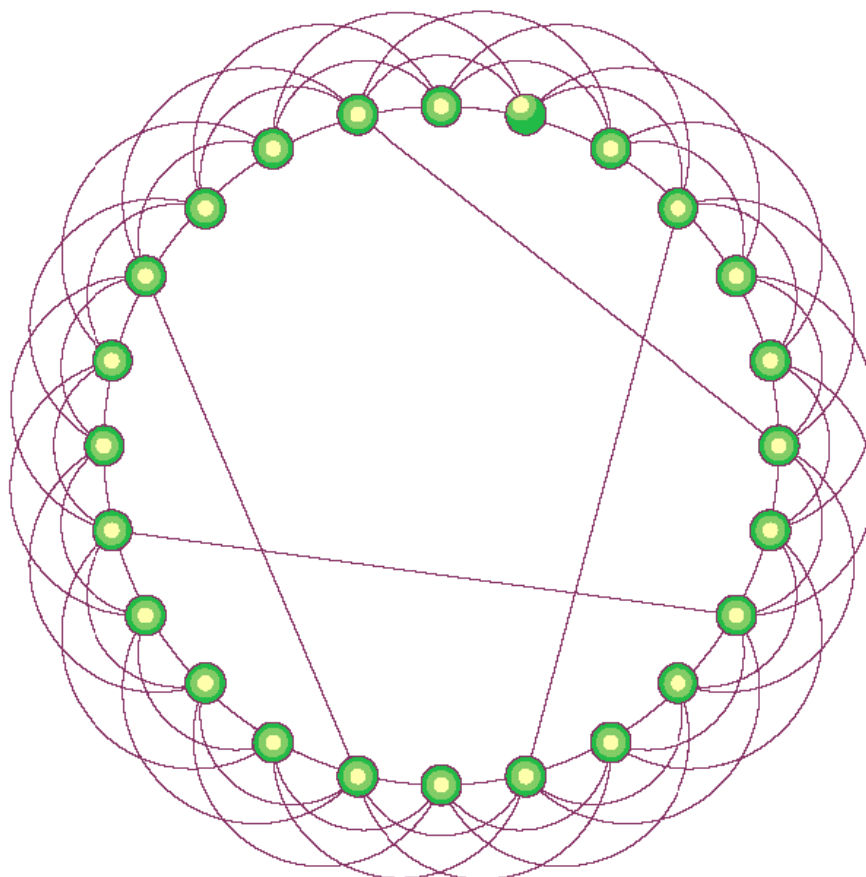


Figura 2.2: Rede gerada pelo modelo (WATTS & STROGATZ, 1998)

Esse modelo permite, através da variação de um parâmetro, partir de uma rede regular quando  $p=0$ , para uma rede totalmente conectada, quando  $p=1$ . Mesmo com pequenos valores de  $p$ , quando a rede ainda exibe alto coeficiente de agregação, o sistema atinge o estado de mundo pequeno, isto é, um alto coeficiente de agregação devido à ordem local, e uma pequena distância média, devido às ligações aleatoriamente redirecionadas.

O modelo apresentado é análogo a um sistema social no qual a maioria das pessoas tem amizade com pessoas próximas, seja no trabalho, na mesma rua ou no bairro onde moram, e essas pessoas são, em geral, apresentadas umas às outras. Entretanto, cada pessoa tem um ou mais amigos em outras cidades, ou mesmo em outro país. Essas relações de longo alcance são representadas no modelo de mundo pequeno pelas conexões redirecionadas.

### 2.1.7 O modelo do contato preferencial

Nas seções anteriores, foram apresentados vários sistemas reais formando redes complexas com distribuição de conectividade em lei de potência e sem valor característico, não exibindo um comportamento médio. Esse comportamento é diferente das redes aleatórias, que têm distribuição de conectividade Poissoniana, com valor característico, isto é, a probabilidade é a mesma em todo o campo de observação. Na prática, a conectividade das redes reais só é limitada pelo número finito de conexões. Por essa razão, essas redes são chamadas redes sem escala - *scale-free networks*. Barábasi & Albert (1999) sugeriram que a ausência de escala nas redes reais com distribuição de conectividade em lei de potência é oriunda dos seguintes mecanismos que governam a evolução da rede:

- (1) Crescimento da rede: começando com um pequeno número de nós  $m_0$ , todos conectados entre si, outros nós são adicionados, um de cada vez, e cada um se conecta a  $m$  ( $< m_0$ ) nós, já presentes na rede.
- (2) Contato preferencial: supõe-se que, ao se estabelecerem novas conexões, a probabilidade  $\Pi$  de que o novo nó se conectará a um nó  $i$  é proporcional à sua conectividade  $k_i$ ,

$$\Pi(k_i) = \frac{k_i}{\sum_j k_j} \quad (2.6)$$

Dorogovtsev *et al.* (2000a) estudaram a evolução da população  $N_k(N)$  de nós com conectividade  $k$ , numa rede com um número  $N$  de nós e chegaram à seguinte expressão:

$$N_k(N+1) = N_k(N) + m \frac{k-1}{\sum_k k' N_{k'}(N)} N_{k-1}(N) - m \frac{k}{\sum_k k' N_{k'}(N)} N_k(N) + \delta_{k,m}. \quad (2.7)$$

A primeira parcela em (3,7) se refere aos nós que já tinham conectividade  $k$  na rede de tamanho  $N-1$ . A segunda parcela é a probabilidade de que um nó com conectividade  $k-1$  receba uma conexão e seja promovido para a população  $N_k$ . O

terceiro termo subtrai os nós com conectividade  $k$  que recebem mais uma conexão. O último termo acrescenta o novo nó que entra na rede com  $m$  conexões. A probabilidade de um nó ter conectividade  $k$  é, simplesmente,  $p(k,N)=N_k(N)/N$ . Determinando  $p(k)$  no limite em que  $N$  vai a infinito, o número total de conexões no sistema pode ser aproximado por  $mN$ , e o termo de normalização,  $\sum_k k N_k(N)$  fica  $2mN$ . Temos, então,

$$p(k) = \frac{k-1}{2} p(k-1) - \frac{k}{2} p(k) + \delta_{m,k}, \quad (2.8)$$

que leva a

$$p(k) = \frac{k-1}{k+2} p(k-1), \quad (2.9)$$

e

$$p(m) = \frac{2}{m+2}, \quad (2.10)$$

resultando, finalmente, em

$$p(k) = \frac{2m(m+1)}{k(k+1)(k+2)}. \quad (2.11)$$

No limite em que  $k$  vai para infinito essa solução leva a uma lei de potência  $p(k) \sim k^{-\gamma}$  com o expoente  $\gamma=3$ . Em Albert & Barabási (2002), a distribuição de conectividade no modelo de contato preferencial é determinada através de tratamento contínuo, ou seja, por meio de uma abordagem temporal da evolução da rede, pois descreve a evolução da conectividade média dos nós,  $\langle k_i \rangle = pN$ , com instante  $i$  em que o nó é introduzido na rede. Nesse tipo de abordagem, encontra-se a seguinte relação para a distribuição acumulada:

$$P(k) \propto \left( \frac{m}{k} \right)^{1/\beta} \quad (2.12)$$

onde  $\beta = 1/2$ . A distribuição acumulada é relacionada com a distribuição de conectividade,

$$p(k) = -\frac{\partial P(k)}{\partial k} \propto \frac{m^{1/\beta}}{\beta} k^{-1-1/\beta}, \quad (2.13)$$

que também apresenta uma distribuição em lei de potência com expoente  $\gamma=1+1/\beta=3$ , em concordância com o mesmo resultado da equação (2.11).

### 2.1.7.1 O modelo do contato preferencial para redes finitas

A solução da equação (2.11) é exata no limite em que o tamanho da rede vai para o infinito. A Figura 2.3 mostra a distribuição de probabilidade acumulada para diferentes tamanhos de redes obtidas por iteração numérica da equação (2.7).

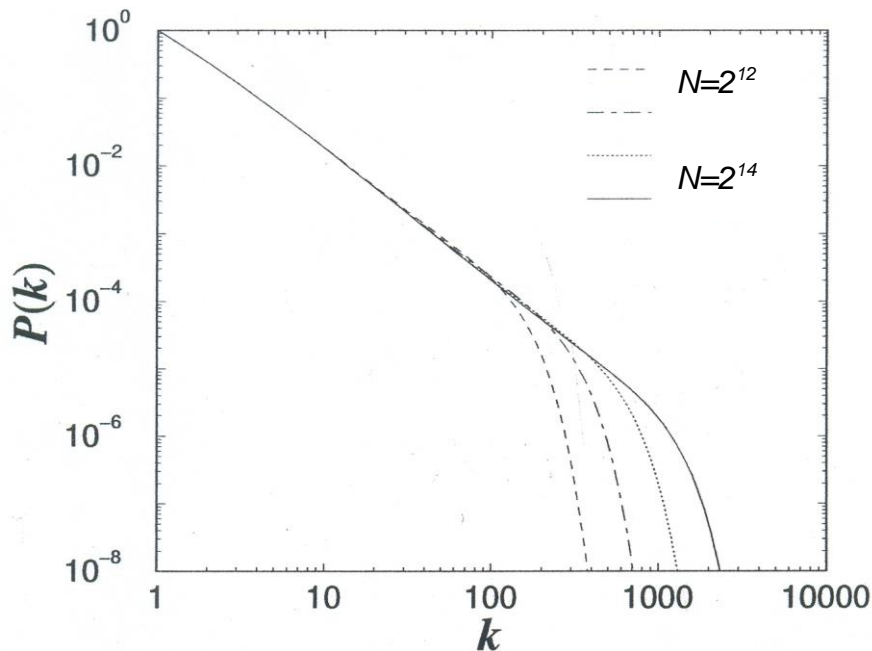


Figura 2.3: Distribuição acumulada de conectividade para diferentes tamanhos de rede (MOREIRA, 2002).

Por sua vez a distribuição acumulada é definida pela equação,

$$P(k) = \sum_{k'=k}^{\infty} p(k') \quad (2.14)$$

e deve decrescer segundo uma lei de potência com o expoente  $\alpha=\gamma-1=2$ . A Figura 2.3 mostra que, acima de certo valor, a distribuição muda para decaimento tipo

exponencial e que a posição do truncamento exponencial move-se para maiores valores de  $k$  quando a rede cresce.

No desenvolvimento contínuo verifica-se que a conectividade de um nó cresce segundo a relação  $\left(\frac{i}{N}\right)^\beta$ . Os nós mais conectados estão provavelmente entre aqueles presentes nos primeiros momentos do crescimento da rede, em  $i \sim 1$ . Logo a probabilidade de se encontrar um nó com mais de  $N^\beta$  conexões deve ir rapidamente a zero, ou seja, o expoente  $\beta$  controla a posição do truncamento exponencial.

### 2.1.8 O modelo da qualidade

Em Bianconi & Barabási (2001a) discute-se que, nas redes reais, existe um outro aspecto para o estabelecimento de novas conexões além da conectividade dos nós já presentes na rede. Cada nó tem um potencial intrínseco para competir por novas conexões. Nesse caso, a probabilidade de uma conexão ser dirigida a um determinado nó  $i$  não é somente proporcional à sua conectividade, mas também a essa capacidade ou qualidade ( $\eta_i$ ). Em analogia à equação (2.6), para o contato preferencial, o modelo da qualidade é desenvolvido a partir da expressão

$$\Pi_i = \frac{\eta_i k_i}{\sum_k \eta_j k_j} \quad (2.15)$$

Os valores de  $\eta_i$  para cada nó são determinados aleatoriamente a partir de uma distribuição  $p(\eta)$ . No desenvolvimento da equação (2.15), admitindo-se  $\eta_i$  constante para todo  $i$ , chega-se aos resultados obtidos no modelo do contato preferencial. Para  $\eta_i$  assumindo valores com igual probabilidade no intervalo  $[0, 1]$ , a distribuição de conectividade segue a forma (KRAPIVSKY *et al.*, 2000):

$$p(k) \approx \frac{k^{-(1+Q)}}{\ln(k)}, \quad (2.16)$$

onde  $Q = 1.225$ . Com uma correção logarítmica, a distribuição segue uma lei de potência com  $\gamma = 1 + Q = 2.225$ ,

$$p(k) \approx k^{-\gamma} \quad (2.17)$$

O modelo da qualidade apresenta um expoente mais próximo das redes reais, geralmente na região  $2 < \gamma < 3$ .

## 2.2 Estudo de Caso: Topologia Complexa de Plantas Químicas

### 2.2.1 Introdução

De muitas formas, uma planta química pode ser considerada como um sistema complexo, uma vez que sua dinâmica deve seguir estritas condições de robustez e, por outro lado, operar dentro de significativos limites de adaptabilidade. Especificamente, o projeto de um processo químico é resultado de uma decisão empresarial, suportada por um plano estratégico para atender ao mercado de uma região e gerar lucros. No caso de uma refinaria de petróleo, por exemplo, esse tipo de indústria tem que ser capaz de fabricar uma ampla variedade de produtos e em grandes quantidades, obedecendo a rigorosas especificações e dentro de um processo produtivo particularmente peculiar em termos de segurança e impacto ambiental.

O projeto de uma planta química certamente representa uma das mais intrincadas e criativas atividades da engenharia (SEIDER *et al.*, 1989). Esta é uma tarefa que geralmente é desenvolvida por engenheiros químicos e requer um detalhado conhecimento da termodinâmica e dos fenômenos de transporte ocorrendo em nível de cada operação unitária que constitui o sistema. Além disso, o projetista deve ter uma visão suficientemente integrada do processo para traduzi-lo em um complexo fluxograma, no estabelecimento das condições operacionais adequadas, considerando ainda a seletividade e custos dos produtos desejados.

Finalmente, é de fundamental importância mencionar que o produto acabado do projeto de um processo químico não é seguramente exato, isto é, duas soluções obtidas por duas equipes diferentes podem ser substancialmente

diferentes. A fim de superar a grande complexidade e facilitar o desenvolvimento do fluxograma de processo, algumas escolhas razoáveis têm que ser feitas que não sejam formalmente baseadas em matemática ou em princípios físicos. Na realidade, esse não determinismo representa uma etapa crucial no projeto de plantas químicas e envolve a aplicação de heurística (regras práticas ou empíricas) durante a chamada fase preliminar de síntese de processo (SEIDER *et al.*, 1989). Essas regras, conhecidas por levarem a projetos próximos do ótimo em relação à seleção de matérias-primas, distribuição de produtos e operações de separação, transferência de calor e mudanças de pressão, têm sido criadas a partir do grande *know-how* e experiência acumulada durante a elaboração de muitos projetos no passado.

Nesta seção, são construídas redes complexas e avaliadas suas principais características a partir de algumas unidades de processo de três refinarias da PETROBRAS, onde são mapeadas as interações entre os nós, no caso, equipamentos e instrumentos de controle em linha e as conexões estabelecidas pelas correntes fluidas de processo que unem esses nós. Para melhor entendimento da concepção de uma refinaria, antes da apresentação das propriedades no contexto de redes complexas, serão apresentados, na próxima seção, alguns conceitos de síntese de processo na indústria de refino e uma descrição das unidades industriais escolhidas para a construção das redes.

### *2.2.2 Conceitos de síntese de processos na indústria de refino de petróleo*

Como já mencionado, o projeto de uma planta de refino de petróleo começa com uma decisão empresarial, suportada por um plano estratégico, visando a atender ao mercado de uma região e gerar lucros. Conforme a Figura 2.4, essa indústria preenche uma vasta gama de aplicações e, em geral, esses produtos são preparados em grandes quantidades, atendendo a especificações restritas e com processo produtivo apresentando características peculiares de segurança e impacto ambiental. O projeto de uma unidade industrial passa, em geral, por algumas fases, que serão discutidas a seguir.

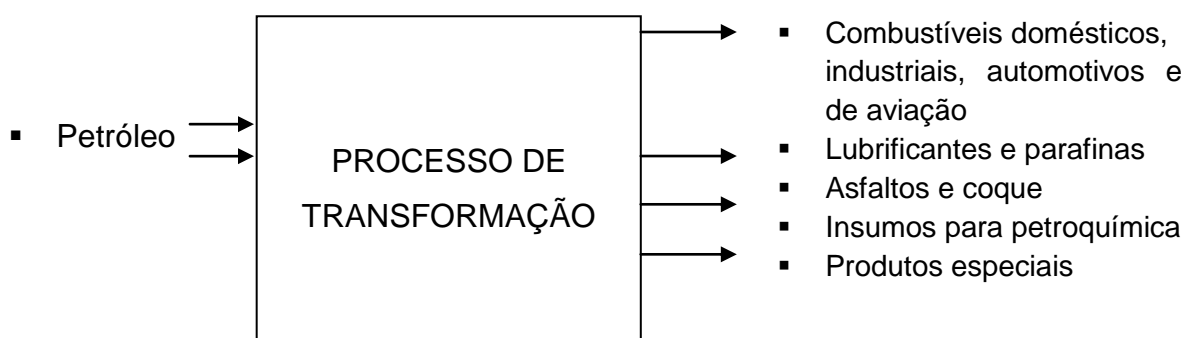


Figura 2.4: Manufatura da indústria de refino de petróleo

### 2.2.2.1 Projeto Conceitual

Essa fase consiste na consolidação das seguintes informações: local onde será instalada a planta, capacidade, recursos humanos, logística de matéria-prima, de escoamento de produtos e estudos de viabilidade técnico-econômica, social e ambiental.

### 2.2.2.2 Projeto Básico

Inicia-se com um diagrama de blocos representando as principais partes do processo em termos funcionais. A partir de um diagrama de blocos, simultaneamente são aplicadas informações oriundas de plantas piloto, de simuladores computacionais e de plantas similares, evoluindo para um fluxograma de processo acompanhado com um balanço de energia e de massa mostrando o estado de cada corrente, ou seja, temperatura, pressão, fase, composição, vazões e outras propriedades. Durante a elaboração do projeto básico, sínteses detalhadas do processo são realizadas através de método algorítmico aplicável a processos contínuos. No refino, esses métodos podem ser aplicados aos principais processos, para sintetizar sequências ou *trains* de separação, reatores, redes de trocadores de calor, fornos, turbinas, bombas e compressores, otimizando e integrando os processos como um todo (SEIDER *et al.*, 1989).

Para assegurar a controlabilidade funcional, depois de concluído o diagrama de processo, dá-se início a uma síntese qualitativa da estrutura de controle, classificando-se as variáveis em manipuladas e controladas, antes do dimensionamento definitivo dos equipamentos. Posteriormente, simulações

dinâmicas são conduzidas para avaliação e ajustes das premissas do estágio qualitativo (SEIDER *et al.*, 1989).

### 2.2.2.3 Projeto Definitivo

Envolve o projeto básico detalhado incluindo o dimensionamento dos equipamentos de processo, a malha de instrumentação e controle, análise de confiabilidade e análises de riscos.

## 2.2.3 Metodologia

No presente estudo, são apresentadas evidências para a existência de uma topologia complexa por trás da estrutura de plantas químicas tipificadas por refinarias de petróleo. Mostraremos então que essas redes complexas têm características de *scale-free* e geometrias hierárquicas. A análise é baseada em fluxogramas de processo de unidades de destilação e craqueamento catalítico que constituem parte de duas diferentes refinarias da PETROBRAS. Enquanto a primeira planta química, chamada aqui de Refinaria I, pode processar  $8.000\text{m}^3/\text{d}$  de exclusivamente óleo leve, a segunda, ou Refinaria II, processa misturas de 80% de óleo pesado e 20% de óleo leve e tem uma maior capacidade, de aproximadamente  $30.000\text{m}^3/\text{d}$ . Analisou-se também o fluxograma de uma unidade de destilação a vácuo e uma unidade de hidrotratamento pertencente a uma terceira refinaria da PETROBRAS, chamada aqui de Refinaria III, que processa  $1.000\text{m}^3/\text{d}$ . Na Figura 2.5, se apresenta uma parte de fluxograma de processo típico de uma refinaria de petróleo, consistindo de alguns dispositivos básicos e elementos de processos unitários (válvulas, bombas, trocadores de calor e colunas de destilação, entre outros), conectados por um emaranhado de tubulações. A correspondente rede, mostrada na Figura 2.6, é obtida simplesmente pela associação de cada unidade de processo da Figura 2.5 a nodos e suas correspondentes linhas de fluxos a conectores. Na Figura 2.7, a estrutura complexa da Refinaria I é visualizada usando-se o *software Pajek* para análise de grandes redes (BATAGELJ & MRVAR, 1998).

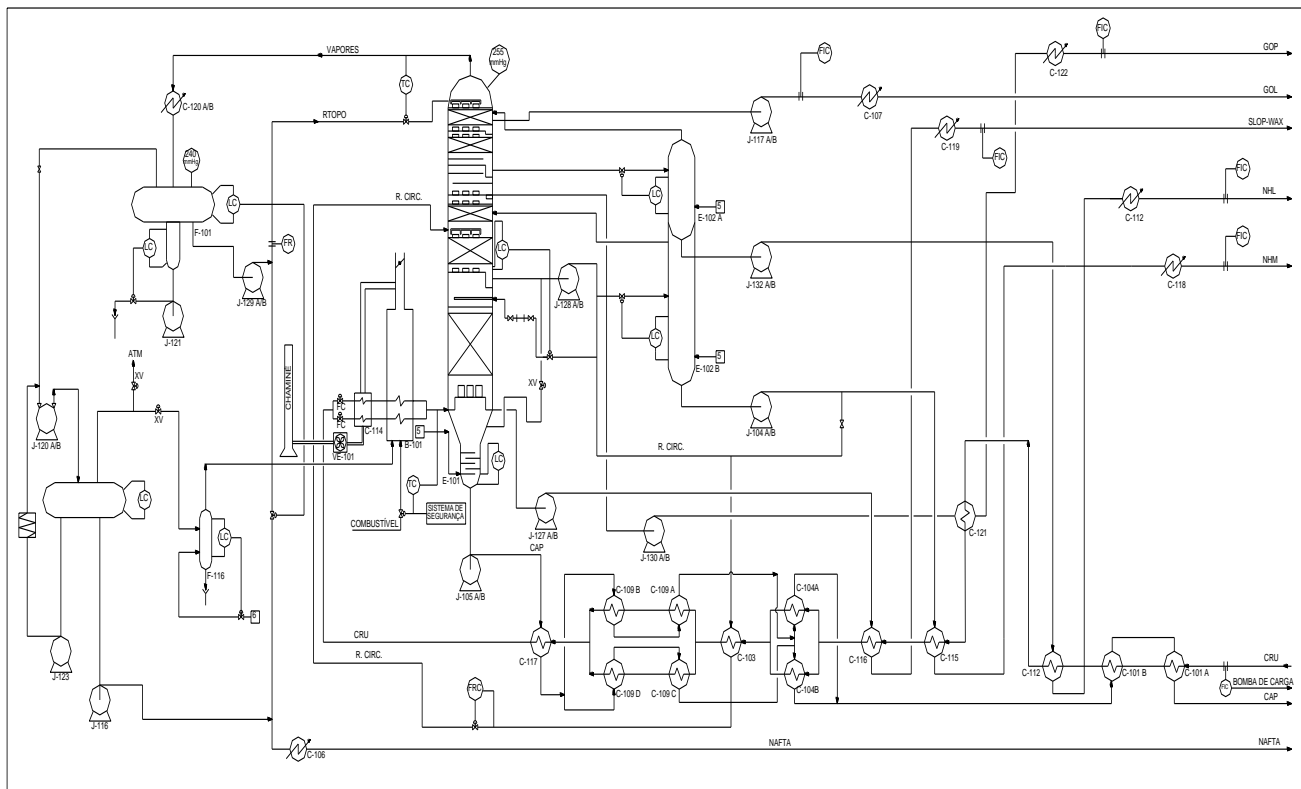


Figura 2.5: Parte de um fluxograma de processo, típico de uma unidade de destilação de uma planta química.

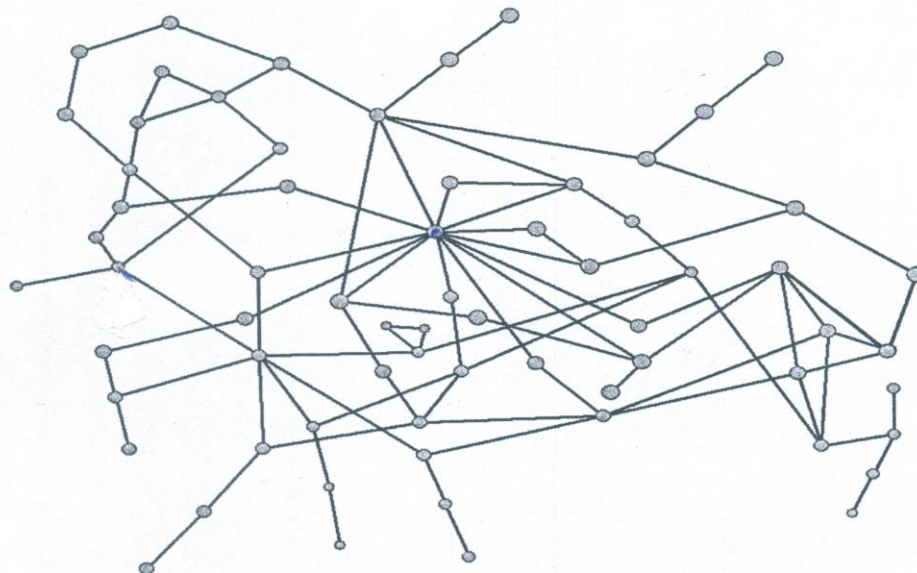


Figura 2.6: Representação da rede complexa da Figura 2.5. A visualização é obtida por meio do software *Pajek* para análise de grandes redes (BATAGELJ & MRVAR, 1998).

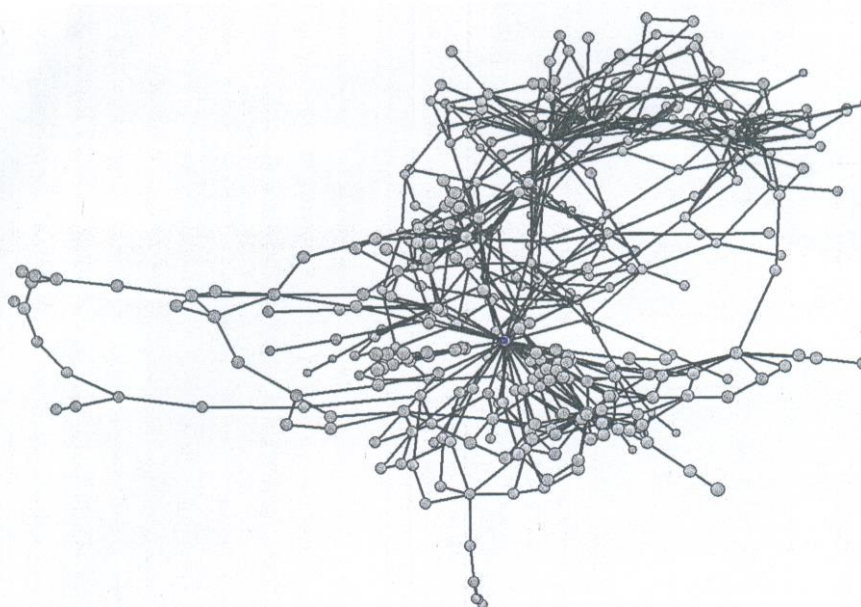


Figura 2.7: Visualização através do *software de Pajek* (BATAGELJ & MRVAR, 1998) da topologia da rede complexa correspondente aos fluxogramas das unidades de destilação e craqueamento catalítico da Refinaria I.

#### 2.2.4 Resultados e discussão

Os resultados apresentados na Figura 2.8 fornecem uma indicação clara de que a topologia da rede correspondente à Refinaria I é *scale-free* (BARABÁSI, 2002). Mais precisamente, a distribuição de probabilidade para valores grandes e intermediários de conectividade  $k$  pode ser adequadamente descrita como uma lei de potência,  $p(k) = k^{-\gamma}$ , com expoente  $\gamma = 3.3 \pm 0.1$ . Isto é feito ajustando-se os pontos da lei de potência em um gráfico *log-log* a uma reta pelo método dos mínimos quadrados. A distribuição de probabilidade das Refinarias II e III seguem um comportamento semelhante, com os expoentes  $\gamma = 3.2 \pm 0.2$  e  $\gamma = 3.0 \pm 0.2$ , respectivamente (Figuras 2.9 e 2.10). A proximidade desses expoentes pode ser explicada pelo fato de que os mesmos princípios de projetos foram aplicados na concepção dessas três refinarias, embora seus fluxogramas de processo sejam substancialmente diferentes e com propósitos de realizarem diferentes tarefas.

O cálculo da média do comprimento do menor caminho  $l$  entre dois nós, conforme definido por Watts e Strogatz (1998), fornece  $l=5.3$  e  $5.9$  e  $5.03$  para as Refinarias I, II e III respectivamente. Quando comparados com seus tamanhos  $N$ , esses pequenos valores de  $l$  sugerem, mas não necessariamente confirmam, a presença de efeitos de pequeno mundo. Estritamente falando, para uma rede ser

considerada de pequeno mundo (WATTS, 1999; AMARAL *et al.*, 2000; DOROGOVTSSEV & MENDES 2004), o menor caminho não somente deve ser pequeno, mas também deve crescer mais lentamente do que qualquer potência positiva, por exemplo  $l \sim \ln(N)$  (COHEN, 1988).

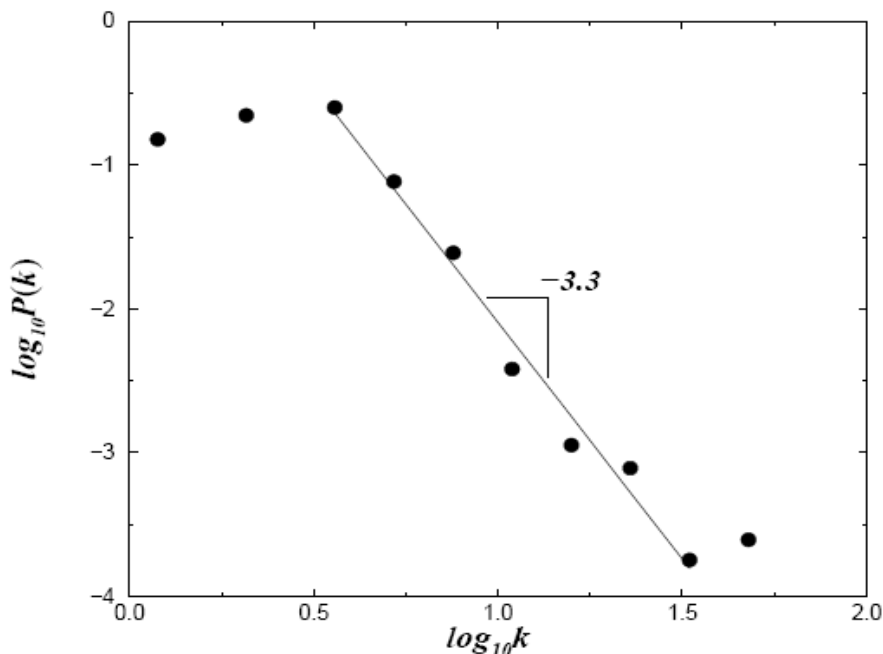


Figura 2.8: Gráfico *log-log* mostrando a distribuição de probabilidade da Refinaria I. A linha sólida corresponde ao melhor ajuste de dados na região em lei de potência  $p(k) \sim k^{-\gamma}$ , com expoente  $\gamma \sim 3.3 \pm 0.1$ .

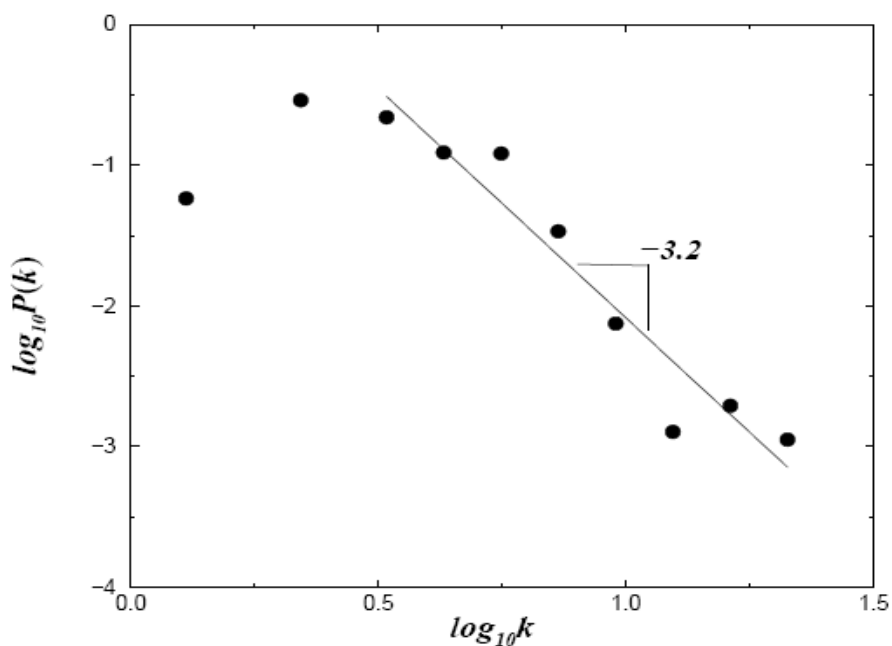


Figura 2.9: Gráfico *log-log* mostrando a distribuição de probabilidade da Refinaria II. A linha sólida corresponde ao melhor ajuste de dados na região em lei de potência  $p(k) \sim k^{-\gamma}$ , com expoente  $\gamma \sim 3.2 \pm 0.2$ .

Tabela 2.1: Valores numéricos e tamanhos calculados para os parâmetros da rede complexa das Refinarias I, II e III.

	$N$	$\langle k_i \rangle$	$C_{ran}$	$C$	$l$
Refinaria I	452	4.02	0.009	0.21	5.3
Refinaria II	470	3.84	0.008	0.16	5.9
Refinaria III	202	3.33	0.016	0.12	5.0

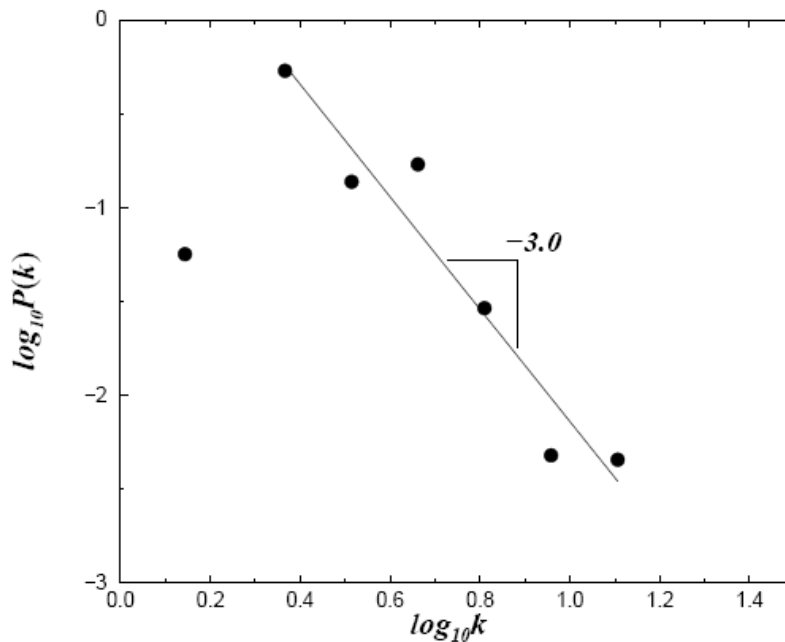


Figura 2.10: Gráfico  $\log\text{-}\log$  mostrando a distribuição de probabilidade da Refinaria III. A linha sólida corresponde ao melhor ajuste de dados na região em lei de potência  $p(k) \sim k^{-\gamma}$ , com expoente  $\gamma \sim 3.0 \pm 0.2$ .

Redes de pequeno mundo também têm grande coeficiente de agregação (WATTS & STROGATZ, 1998). O coeficiente de agregação de um nodo  $i$ ,  $C_i$ , é definido como a fração entre o número de pares conectados dentre seus  $k_i$  vizinhos,  $n_i$ , e o número de todas as possíveis conexões entre eles, definido na equação (2.4).

Usando a definição da equação (2.4), pode-se encontrar o coeficiente de agregação médio,  $C = \langle C_i \rangle$ , para toda a rede. Encontramos para a Refinaria I,  $C = 0.21$ , para a Refinaria II,  $C = 0,16$ , na Refinaria III o valor é  $C = 0.12$ . Conforme mostrado na Tabela 2.1, esses valores são, excetuando-se a Refinaria III, cerca de 20 vezes maiores do que os encontrados nos coeficientes de agregação dos grafos aleatórios  $C_{ran} = \frac{\langle k_i \rangle}{N}$ , com a mesma conectividade média, reforçando assim a

hipótese de que as plantas químicas são redes de pequeno mundo. Com o objetivo de mostrar o aspecto hierárquico dos fluxogramas de engenharia das refinarias um tipo de análise mais complicado é requerido. Recentemente, demonstrou-se analiticamente que a hierarquia intrínseca de redes *scale-free* conduz à relação de escala,  $C(k) \sim k^{-1}$ , onde  $C(k)$  representa o coeficiente de agregação dos nós com conectividade  $k$ . Subsequentemente, a ocorrência de tal comportamento tem também sido utilizada como um meio de identificar a arquitetura hierárquica de várias redes reais (RAVASZ & BARABÁSI, 2003).

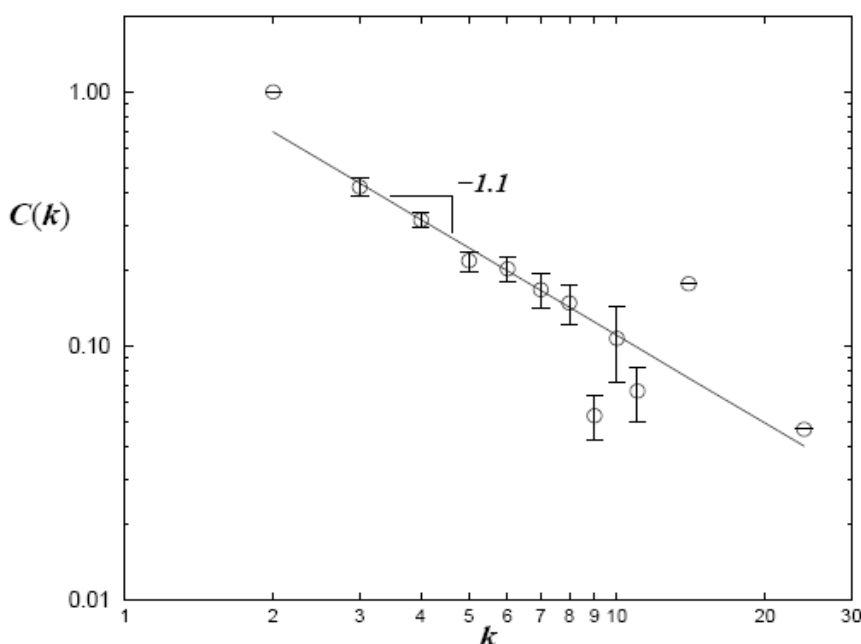


Figura 2.11: Gráfico logarítmico do Coeficiente de Agregação *versus* a conectividade da rede da Refinaria I. A reta foi obtida ajustando os pontos pelo método dos mínimos quadrados aos dados de uma lei de potência,  $C(k) \sim k^{-\beta}$ , com o expoente  $\beta = 1.1 \pm 0.1$ .

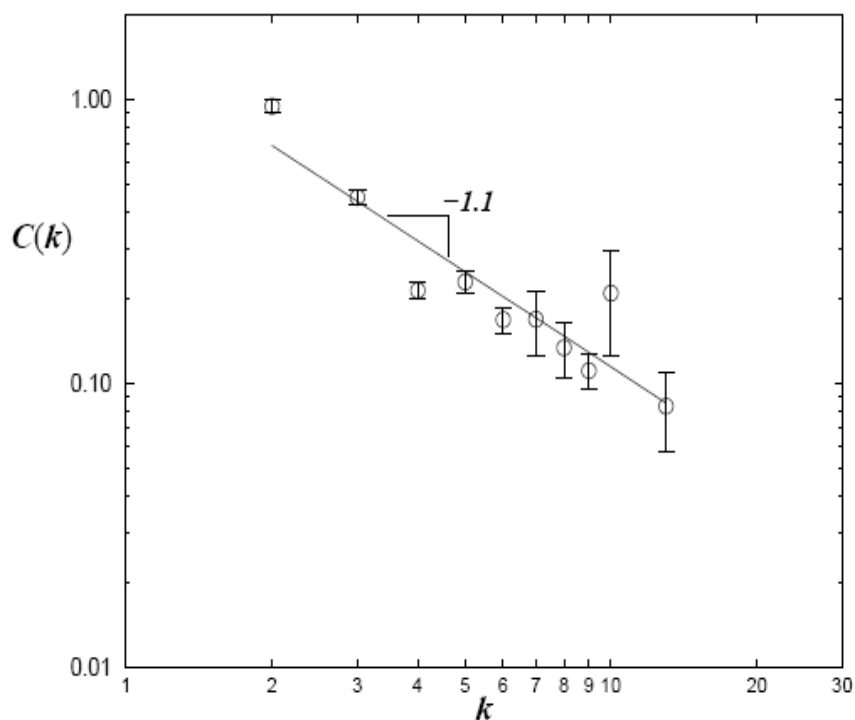


Figura 2.12: Gráfico logarítmico do Coeficiente de Agregação *versus* a conectividade da rede da Refinaria II. A reta foi obtida ajustando os pontos pelo método dos mínimos quadrados aos dados de uma lei de potência,  $C(k) \sim k^{-\beta}$ , também com o expoente  $\beta = 1.1 \pm 0.1$ .

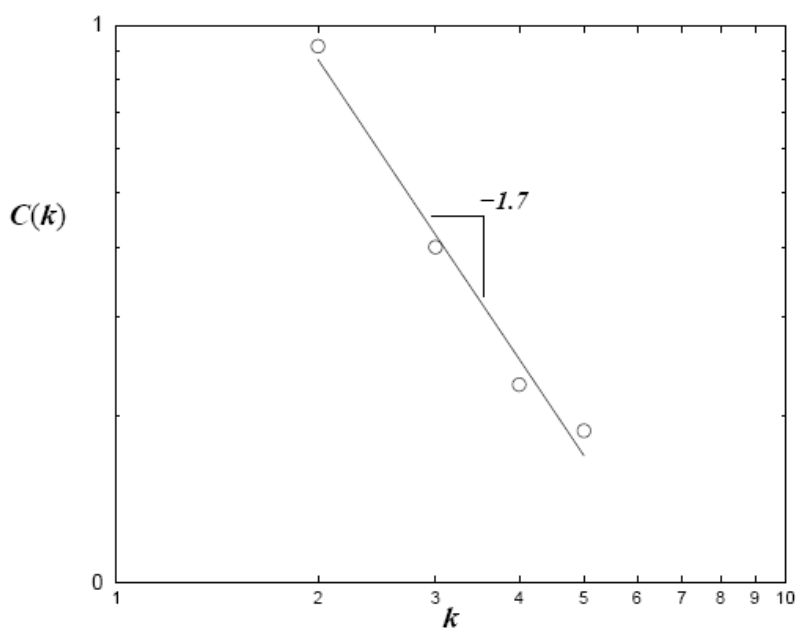


Figura 2.13: Gráfico logarítmico do Coeficiente de Agregação *versus* a conectividade da rede da Refinaria III. A reta foi obtida ajustando os pontos pelo método dos mínimos quadrados aos dados de uma lei de potência,  $C(k) \sim k^{-\beta}$ , também com o expoente  $\beta = 1.7 \pm 0.1$ .

Inicialmente, a observação de  $C(k)$  *versus*  $k$ , incluindo todos os nós no conjunto de dados das três refinarias, revela flutuações que são suficientemente

grandes para desestimular qualquer descrição conclusiva acerca da hierarquia de ambas as redes. Entretanto, uma análise detalhada desses resultados numéricos indica a presença de muitos nós com  $C_i = 0$ . Esses nós correspondem principalmente àqueles constituintes do fluxograma de processo que têm baixa conectividade  $k$  como válvulas, bombas etc. ou são usualmente adicionados em um segundo estágio do *design* do processo unicamente para permitir simples ou múltiplas ligações entre os agregados de processos unitários mais específicos do sistema. Conforme descrito na Figura 2.11, a eliminação dos nós com  $C_i = 0$  a partir de  $C(k)$  para a Refinaria I permite a identificação de uma lei de escala,  $C(k) \sim k^{-\beta}$ , com o expoente  $\beta = 1.1 \pm 0.1$ , que é surpreendentemente próximo do comportamento esperado de uma topologia hierárquica. Adotou-se a mesma estratégia para a Refinaria II e foram encontrados resultados similares, confirmando a validade da abordagem. No que diz respeito à estrutura da Refinaria III, provavelmente devido ao seu tamanho reduzido, resultados divergentes com relação à organização hierárquica foram encontrados, embora essa rede apresente também distribuição de conectividade seguindo lei de potência.

A identificação de várias redes com distribuição de probabilidade em lei de potência na Natureza tem sido geralmente justificada em termos de sua evolução através de processos auto-organizados nos quais os elementos centrais são espontaneamente gerados e representam a parte dominante do sistema conectado (DOROGOVTSEV & MENDES, 2004). Aqui, mostrou-se que uma rede projetada pelo homem, composta por processos unitários e dispositivos de uma planta química, também pode apresentar comportamento *scale-free*. Além disso, encontramos significativa evidência nos dados reais para sugerirmos que essas redes exibem efeitos de mundo pequeno e também organização hierárquica em suas estruturas (RAVASZ & BARABÁSI, 2003). Embora artificial, acreditamos que essas características são oriundas do esquema de síntese de processo adotados tacitamente no projeto da planta química, o qual envolve uma combinação de heurística e técnicas algorítmicas (SEIDER *et al.*, 1989). Esperamos que estes resultados possam ser úteis no estágio de desenvolvimento de projetos e na avaliação e caracterização dos fluxogramas de processo na fase final de refinarias e outras plantas químicas.

## CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Na primeira parte desta dissertação, empregamos uma técnica de modelagem com base em Redes Neurais Artificiais, que já vem sendo aplicada desde os meados da década de 1980, para inferir a volatilidade dos gases liquefeitos de petróleo (GLP) produzidos na torre de fracionamento de líquido de gás natural (LGN) localizada na planta da LUBNOR-PETROBRAS. Acreditamos que o presente trabalho se reveste de importância porque, no período em que foram levantados os dados, estava sendo implantado um simulador fenomenológico desenvolvido por engenheiros da PETROBRAS, ensejando uma oportunidade para comparações entre as duas técnicas. Outro fator de interesse é que o autor deste trabalho, coincidentemente, estava assumindo a responsabilidade pelo acompanhamento operacional da UPGN e, dessa forma, foi mais uma oportunidade para aprimorar o conhecimento da planta.

A partir da análise apresentada no Capítulo 1, concluímos que, para o período considerado, a RNA apresentou resultados um pouco melhores do que o simulador fenomenológico. Sob o ponto de vista operacional, esta certamente representa uma informação útil para auxiliar os operadores na busca de manter a especificação do produto no que diz respeito à sua volatilidade. Algumas distorções e flutuações relativamente importantes foram verificadas, provavelmente devido à filtragem preliminar deficiente dos dados ou distúrbios operacionais durante a coleta das amostras. Isto vem também comprovar o efeito relevante da qualidade dos dados sobre o processo de inferência, revelando que a representação fiel das condições operacionais corresponde a uma etapa primordial da implementação da técnica. Notadamente, um próximo passo é promover a aplicação imediata na planta da RNA, utilizando os recursos do *Plant Information (PI)*, para inferência em linha. Pretendemos também estudar o comportamento do sistema com novas e distintas redes e verificar a eficiência de monitoração com a inclusão de novas variáveis.

Na segunda parte do trabalho, numa abordagem mais acadêmica, foram analisadas unidades de processos químicos de três refinarias no contexto dos sistemas complexos. O estudo concentrou-se na investigação da possível associação dos fluxogramas de processo dessas plantas à topologia das redes

complexas que exibem características de *scale-free*, mundo pequeno e organização hierárquica.

Para as Refinarias I e II, verificou-se que as topologias correspondentes apresentam fortes evidências da presença de efeitos de mundo pequeno, conectividade na forma *scale-free* e estrutura hierarquizada. No que concerne à estrutura da Refinaria III, provavelmente devido ao seu tamanho reduzido, resultados divergentes com relação à organização hierárquica foram encontrados, embora essa rede apresente também distribuição de conectividade seguindo lei de potência.

Esperamos que estes resultados sejam válidos para plantas químicas de diferentes tipos e capacidades e que essas propriedades de *scale-free*, mundo pequeno e hierarquia possam, de alguma forma, servir de parâmetros na avaliação da aderência de fluxogramas de processo na fase final de um projeto.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

**ALBERT, R. & BARABÁSI A.-L.** *Statistical Mechanics of Complex Networks*, Review of Modern Physics, v. 74, January 2002.

\_\_\_\_\_. *Science* 286, 509, 1999.

**AMARAL, L. A. N. & OTTINO, J. M.** *Complex Systems and Networks: Challenges and Opportunities for Chemical and Biological Engineers*, Chemical Engineering Science, 59, p. 1653-1666, 2004.

**AMARAL, L. A. N.; SCALA, A.; BARTHÉLEMY, M. & STANLEY, H. E.** Proc. Nat. Acad. Sci, USA 97, 11149, 2000.

**ASTM D 1837.** *Standard Test Method for Volatility of Liquefied Petroleum Gases*, 2002.

**BAK, P.** *How Nature Works*, Copernicus, Springer-Verlag, New York, 1996.

**BARABÁSI, A.-L.** *Linked: The New Science of Networks*, Perseus Books, Group, Cambridge MA, 2002.

**BATAGELJ, V. & MVAR, A.** *Connections* 21, 47, 1998.

**BAWAZEER, K. H.** *Crude Oil Product Quality Parameters Prediction Using Neural Networks and Fuzzy Logical*, M.S. Thesis, Florida Atlantic University, Boca Raton, FL, 1996.

**BIANCONI, G. & BARABÁSI, A.-L.** *Europhys, Lett.* 54, 436, 2001a.

**BRAGA, A. P.; CARVALHO, A. C. P. L. F. & LUDEMIR, T. B.** *Redes Neurais Artificiais Teoria e Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora S. A., 2000.

**CAMACHO, J.; GUIMERÁ, R. & AMARAL, L. A. N.** *Phys. Rev. E*, 65, 0300901, 2002.

**COHEN, J. E.** *Discr. Appl. Math.*, 26, 1412, 1998.

**COHEN, R.; EREZ, K.; ben-AVRAHAM, D. & HAVLIN, S.** *Phys. Rev. Lett.* 85, 4226, 2000.

- DEMUTH, H. & BEALE, M.**. *Neural Network ToolBox User's Guide*, 1993.
- DOROGOVTSSEV, S. N. & MENDES, J. F. F.**. cond-mat /O4004593, 2004.
- DOROGOVTSSEV, S. N.; MENDES, J. F. F. & SAMUKHIN, A. N.**. Phys. Rev. Lett. 85, 4633, 2000a.
- ERDÖS, P. & RÉNYI, A.**. *Publ. Math. Debrenn*, 6, 290, 1959.
- FALOUTSOS, M.; FALOUTSOS, P. & FALOUTSOS, C.**. *Comp. Comm. Rev.* 29, 251, 1999.
- FERNANDES, N. F.**. *Modelagem de uma Unidade de Geração de Hidrogênio, Estudo de Processo*, PETROBRAS/UN-REGAP. Betim, 2001.
- GOLDBARG, M. C. e LUNA, H. P. L.**. *Otimização Combinatória e Programação Linear: Modelos e Algoritmos*. Rio de Janeiro: Campus, 2000.
- HAGAN, M. T.; DEMUTH, H. B. e BEALE, M. H.**. *Neural Network Design*. Boston: PWS Publishing Company, 1996.
- HAYKIN, SIMON.**. *Redes Neurais, Princípios e Prática*. Porto Alegre: Bookman, 2001.
- HIMMELBLAU, D. M.**. *Engenharia Química: Princípios e Cálculos*. Rio de Janeiro: Prentice-Hall do Brasil, 1984.
- JEONG, H.; TOMBOR B.; ALBERT, R.; OLTVAI Z. N. & BARABÁSI, A.-L.**. *Nature*, (London) 407, 651. 2000.
- KRAPIVSK, P. L.; REDNER, S. & LEYVRAZ, F.**. Phys. Rev. Lett. 85, 4629, 2000.
- LEVINE, DAVID M.; BERENSON, MARK L. & STEPHAN, DAVID.** *Estatística: Teoria e Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2000.
- LILJEROS, F.; EDLING, C. R.; AMARAL, L. A. N.; STANLEY, H. E. & ABERG Y.**. *Nature* 411, 907, 2001.
- LOPES, SÔNIA G. B. C.**. *Bio*, 5. edição, v. 1. São Paulo: Editora Saraiva, 1999.
- LOPEZ, S. V.; SOUZA JR., M. B. de; ARANDA, D. A. G.; LIMA, E. L. & CAMPOS, M. C. M. M. de.** *Modelagem por Redes Neurais de um Processo Industrial de*

*Coqueamento Retardado de Óleos Nacionais Pesados*. Revista PETRO & QUÍMICA, junho/2003.

**LUBNOR**. *Manual de Especificação de Produtos, Asfaltos, Lubrificantes Naftênicos e Demais Produtos Comercializados pela GECOM/CE-MA*. LUBNOR, 2003.

**LUBNOR**. *Manual de Operações*, UPGN-ASFOR.

**RAMÓN y CAJAL, S.** *Histologie du Sistema Nerveux de l'Homme et des Vertébrés*. Paris: Maloine, 1911.

**MARZANO, L. F.** *Modelagem do Teor de Oxigênio na Fumaça da Caldeira 2 da Usiminas através de Redes Neurais Artificiais*. Tese de Mestrado, Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais. Belo Horizonte, 1999.

**MENDEL, J. M. e McLAREN R. W.** Reinforcement–Learnig Control and Pattern Recgnition Systems in *Adaptative, Learning, and Pattern Recognition Systems: Theory and Aplicattions*, vol. 66, J. M. Mendel and K. S. FU, eds., p. 287-318. New York: Academic Press, 1970.

**MILGRAM, STANLEY**. *The Small World Problem*. Psychology Today, p. 60 – 67. May/1967.

**MOLGA, E. J.** *Neural Network Approach Modeling of Chemical Reactors: Problems, Resolutions, Criteria of Application*, Chemical Engineering and Processing, 42 p. 675 – 695. 2003.

**MOREIRA, A. A.** *Relações de Escala em Redes Complexas e na Penetração de Fluxo em Supercondutores Desordenados*. Tese de Doutorado, Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará. Fortaleza, 2002.

**MORO, L. F. L.** *SICON – Uma solução cliente servidor para controle avançado*. IV Congresso Petrobrás de informática e Telecomunicações” – INFTEL. São Paulo, 1997.

**NEWMAN, M. E. J.** *The Structure of Scientific Collaboration Networks*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America 98, 404-409. 2001.

**NASCIMENTO, C. A. O. & GIUDICI, R..** *Neural Network Based Approach for Optimization Applied to an Industrial Nylon-6,6 Polymerization Process*, Computers Chem. Engng., v. 22 (1998), Suppl., p. S595-S600.

**PASTOR-SATORRAS, R. & VESPIGNANI, A..** *Evolution and Structure of the Internet: A Statistical Physics Approach*, Cambridge University Press. 2004.

**RAUBER, THOMAS W..** *Redes Neurais Artificiais*. Departamento de Informática, Universidade Federal do Espírito Santo. 1999.

**RAVASZ, E. & BARABÁSI, A. L.,** *Phys. Rev. E* 67, 026112, 2003.

**RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E. & WILLIAM, R. J..** *Learning Representations of Back-Propagations Errors*, Nature. vol323, pp 533-536. London, 1986.

**SEIDER, W. D.; SEADER, J. D. & LEWIN, D. R..** *Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*. New York: John Wiley & Sons, 1989.

**SILVA, I. N. da; SOUZA, A. A. de; SOUZA, M. G. Z. N. de; FALCÃO, C. & BORDON, M. E..** *Avaliação do Nível de Contaminação do Óleo Isolante de Transformadores Através de Redes Neurais Artificiais*. SEMINÁRIO NACIONAL DE PRODUÇÃO E TRANSMISSÃO DE ENERGIA ELÉTRICA SNTPEE, XV. Foz de Iguaçu, 1999.

**STROGATZ, H. S..** *Nature*, 411, 2001.

**TAFNER, M. A..** *Redes Neurais Artificiais: Aprendizado e Plasticidade*. Revista "Cérebro & Mente", Universidade Estadual de Campinas, março/maio, 1998.

**TAFNER, M. A. de, XEREZ, M. & FILHO, I. W. R..** *Redes Neurais Artificiais: Introdução e Princípios de Neurocomputação*. Blumenau, EKO: Editora da FURB, 1995.

**VASILIK, PLEROU; PARASMEWARAN, GOPIKRISHNAN; AMARAL, LUIS A. N.; MEYER, MARTIN & STANLEY, H. EUGENE..** Los Alamos E-Print cond-mat/9907161, 11/Julho/1999. Disponível em <http://arxiv.org/Pscache/cond-mat/pdf/9907/9907161.pdf>.

**WATTS, D. J..** *Small World: The Dynamics of Networks Between Order and Randomness*, Princeton University Press. 1999.

**WATTS, D. J. & STROGATZ, S. H.** *Nature* 393, 440, 1998.

**WILLIAMS R. J. & MARTINEZ, N. D.** *Nature* 404, 180, 2002.

**YOOK, S.H.; JEONG, H. & BARABÁSI, A.-L.** *Weighted evolving networks*, *Phys. Rev. Lett.*, 5835-5838, 86 2001.

**ZUPAN, J. e GASTEIGER J.** *Neural Networks for Chemists An Introduction*. New York: VCH Publishers, 1993.

# APÊNDICE

## The Complex Topology of Chemical Plants

J. S. Andrade Jr. <sup>a,b,\*</sup>, D. M. Bezerra <sup>b,c</sup>, J. Ribeiro Filho <sup>a,d</sup>,  
A. A. Moreira <sup>a</sup>

<sup>a</sup> *Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil*

<sup>b</sup> *Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Ceará, 60451-970 Fortaleza, Ceará, Brazil*

<sup>c</sup> *Gerência de Otimização, LUBNOR, PETROBRAS, Fortaleza, Ceará, Brazil*

<sup>d</sup> *Departamento de Matemática, Universidade Estadual do Vale do Acaraú, 62040-370 Sobral, Ceará, Brazil*

---

### Abstract

We show that flowsheets of oil refineries can be associated to complex network topologies that are scale-free, display small-world effect and possess hierarchical organization. The emergence of these properties from such man-made networks is explained as a consequence of the currently used principles for process design, which include heuristics as well as algorithmic techniques. We expect these results to be valid for chemical plants of different types and capacities.

*Key words:* Scale-free networks, Small-world networks, Chemical plants

*PACS:* 89.20.Bb, 89.75.Hc, 89.75.Da

---

Several systems in nature and human society are constituted by a large number of interacting agents that form a network with complex geometry exhibiting small-world, scale-free and hierarchical features (1; 2). Examples include many of the existing metabolic processes (3), food webs (4), and the relations in social groups (5). An important aspect always present in these systems is a self-regulatory behavior that is responsible for their robustness to perturbations and flexibility to respond to environmental changes and external stimulus. Such a relation between robustness and flexibility, that represents a necessary ingredient to ensure and maintain the functionality of the system, generally results from the fact that the global organization of agents is reached in the absence of any central control, but as a collective phenomenon emerging from

---

\* Corresponding author

*Email address:* soares@fisica.ufc.br (J. S. Andrade Jr.).

local interactions. In this way, the generation of a decentralized structure prevents the occurrence of those vulnerable points where an attack could lead to the overall collapse of the network (6). At the same time, this non-central feature makes the complex system more adaptable, because it allows for the local response of agents to the variability of external conditions and eventual specific demands.

An obvious question arising from these facts and ideas that is far from being answered is how local interactions among elementary units of the network can naturally generate a dynamics with global organization. At present, the study of these complex systems depends on the development of new techniques to elucidate their behavior by (i) analysing the topological structure of their network of interactions, and (ii) investigating the origin and characteristics of their intrinsic self-organized dynamics. The interplay between these two elements, namely, topology and dynamics, can be very effective in revealing the mechanisms behind the regulatory strategies of real systems in nature. Furthermore, this could lead to novel ideas for design of artificial networks with improved performance that display small-world and/or scale-free properties like, for instance, the network of electrical energy distribution (7) and the Internet (8).

In many ways, a chemical plant can be considered as a complex system whose dynamics has to follow very strict conditions of robustness and, on the other hand, to operate with certain flexibility. Specifically, the project of a chemical process is the result of an enterprise decision supported by a strategic plan to attend the market of a region and generate profit. In the case of an oil refinery, for example, this type of industry must be able to provide a broad spectrum of chemicals that are produced at large amounts, but obeying very strict specifications within a productive process that can also be very peculiar in terms of safety and environmental impact. The design of a chemical plant certainly represents one of the most intricate and creative engineering activities (9). A task that is usually performed by chemical engineers, it requires a detailed knowledge of the thermodynamics and transport phenomena taking place at the level of each unitary operation that constitutes the system. Furthermore, the designer must have a sufficiently integrated view of the process to succeed in the development of its complex flowsheet and selection of operational conditions, with also enhanced performance in terms of selectivity and cost of the desired product.

Finally, it is of paramount importance to mention that the accomplishment of a project for a chemical process is surely not a one-to-one task, i.e., two effective solutions obtained from different design teams might be substantially different. In order to overcome the great complexity and expedite the development of the process flowsheet, some *reasonable choices* have to be made that are not formally based on mathematical or physical principles. Indeed, this

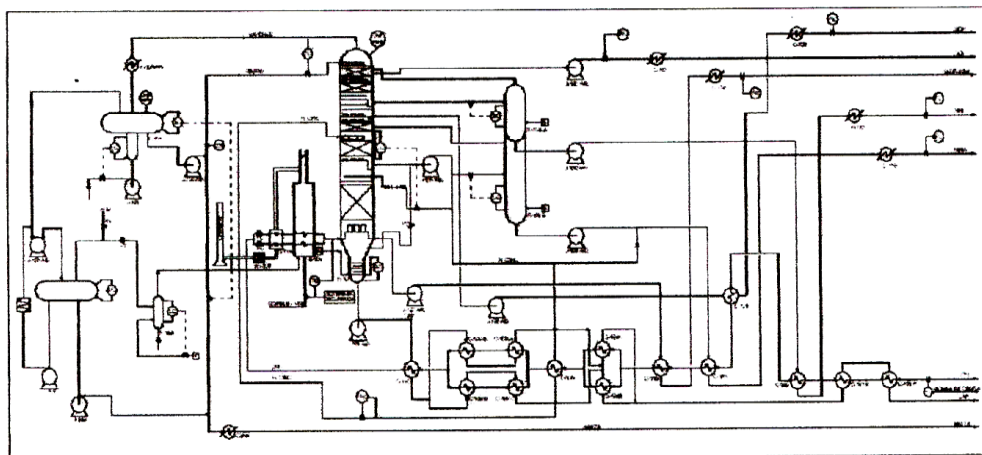


Fig. 1. Subset of a typical flowsheet showing the distillation unit of a chemical plant.

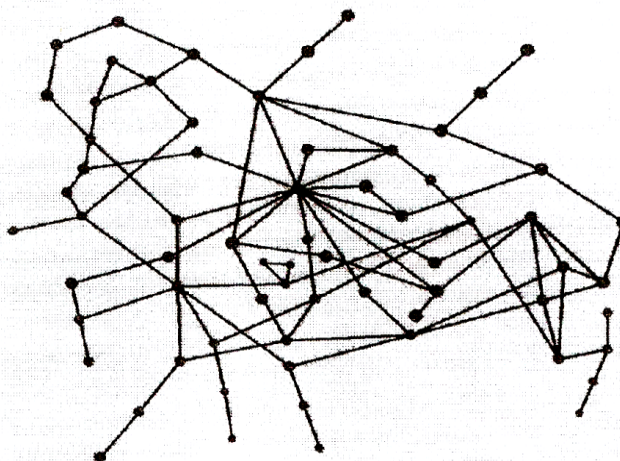


Fig. 2. Complex network representation of Fig. 1. The visualization is obtained by means of the Pajek code for large network analysis (10).

*non-determinism* represents a crucial step of the design of chemical plants and involves the application of *heuristics* or rules of thumb to undergo the steps in the so-called preliminary process synthesis phase (9). These rules, known to lead to the near-optimal designs in relation to the selection of raw materials, distribution of chemicals, and operations of separation, heat-transfer and pressure-change, have been built from the large *know-how* and experience accumulated during the design of many projects in the past.

In the present study, we show evidence for the existence of a complex topology behind the structure of chemical plants—typified here by oil refineries—that is reminiscent of networks displaying scale-free and hierarchical geometries. Our analysis is based on flowsheets of the distillation and catalytic cracking units that constitute part of two distinct oil refineries, owned and operated by PETROBRAS, the Brazilian State-owned Oil Company. While the first

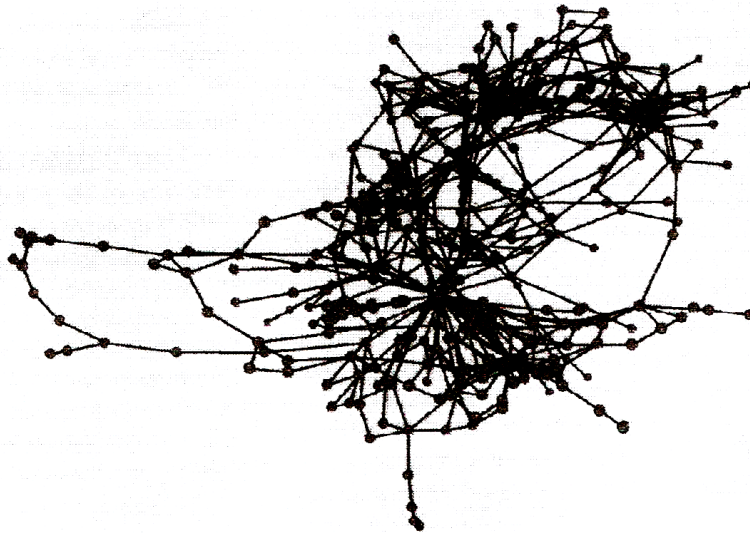


Fig. 3. Pajek visualization (10) of the complex network topology corresponding to the flowsheets of the distillation and catalytic cracking units of Refinery I.

chemical plant, named here Refinery I, can process  $8000 \text{ m}^3/\text{day}$  of exclusively light oil, the second one, or Refinery II, works with a mixture of 80% of heavy and 20% of light oil and has a much larger capacity, of approximately  $30000 \text{ m}^3/\text{day}$ . In Fig. 1 we show the subset of a typical flowsheet comprising some of the basic devices and unitary process elements (e.g., valves, pumps, tanks, heat exchangers, chemical reactors, and distillation columns, among others) connected by a nested flow pipeline. The corresponding network shown in Fig. 2 is simply obtained by associating each of the process units displayed in Fig. 1 to nodes, and their corresponding flow connections to bonds. In Fig. 3, the complex structure of Refinery I is visualized using the Pajek software for large network analysis (10).

The results presented in Fig. 4 provide clear indication that the network topology of Refinery I is scale-free (2). More precisely, its degree distribution for intermediate and large values of the connectivity (degree)  $k$  can be properly described as a power-law,  $p(k) \sim k^{-\gamma}$ , with an exponent  $\gamma = 3.3 \pm 0.1$ , as calculated from the least-square fit to the data in the scaling region. The degree distribution for Refinery II follows an entirely similar behavior, with an exponent  $\gamma = 3.2 \pm 0.2$ . The close agreement between these exponents can be substantiated by the fact that the same set of design principles have been applied to the project of both refineries, although their flowsheets are substantially different and purpose-built to perform rather different tasks.

Our calculation for the average length of the shortest path  $\ell$  between two nodes, as defined in Ref. (11), gives  $\ell = 5.3$  and  $5.9$  for Refinery I and II, respectively. When compared with the corresponding sizes  $N$  of the refineries, these small values of  $\ell$  suggest, but do not confirm, the presence of a *small-world effect*. Strictly speaking, for a network to be considered *small-world*

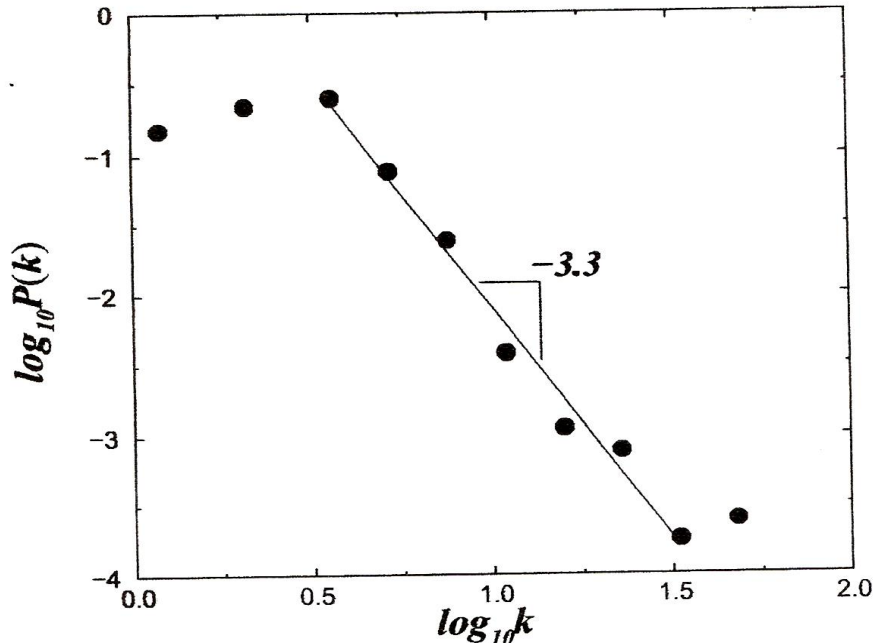


Fig. 4. Log-log plot showing the degree distribution of Refinery I. The solid line corresponds to the best fit to the data in the scaling region of a power-law,  $p(k) \sim k^{-\gamma}$ , with the exponent  $\gamma = 3.3 \pm 0.1$ .

	$N$	$\langle k_i \rangle$	$C_{ran}$	$C$	$\ell$
Refinery I	452	4.02	0.009	0.21	5.3
Refinery II	470	3.84	0.008	0.16	5.9

Table 1

Sizes and numerical values calculated for complex network parameters of Refineries I and II.

(1; 12; 13), the shortest path  $\ell$  should not only be small, but also grow slower than any positive power of the system size  $N$ . Small-world networks also have large clustering coefficient (11). The clustering coefficient for a node  $i$ ,  $C_i$ , is defined as the fraction between the number of connected pairs among its  $k_i$  neighbors,  $n_i$ , and the number of all possible connections between them,

$$C_i \equiv \frac{2n_i}{k_i(k_i - 1)}. \quad (1)$$

Using the definition Eq. (1), we can compute an average cluster coefficient,  $C = \langle C_i \rangle$ , for the entire network. We find it to be  $C = 0.21$  and  $0.16$  for Refinery I and II, respectively. As shown in Table 1, these values are about 20 times larger than the clustering coefficients computed for random graphs,  $C_{ran} = \langle k_i \rangle / N$ , with the same average connectivity  $\langle k_i \rangle$ , thus reinforcing our hypothesis that chemical plants are small-world networks. In order to show the hierarchical aspect of the refinery flowsheets, a more subtle type of analysis

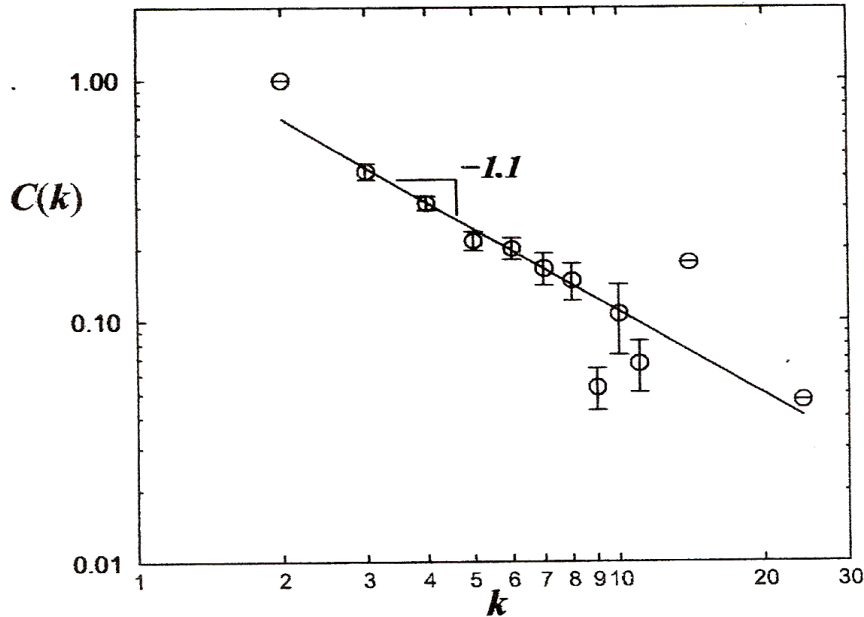


Fig. 5. Logarithmic plot of the clustering coefficient  $C(k)$  against the connectivity  $k$  for the network topology of Refinery I. The straight line is the least-square fit to the data of a power-law,  $C(k) \sim k^{-\beta}$ , with the exponent  $\beta = 1.1 \pm 0.1$ .

is required. Recently, it has been analytically demonstrated that the intrinsic hierarchy of deterministic scale-free networks leads to the scaling relation,  $C(k) \sim k^{-1}$ , where  $C(k)$  represents the average clustering coefficient of nodes with connectivity  $k$ . Subsequently, the occurrence of such a behavior has also been used as a way to identify the hierarchical architecture of several real networks (14). Initially, the observation of  $C(k)$  versus  $k$  including *all nodes* in the data sets of the two refineries revealed fluctuations that were large enough to impair any conclusive description about the hierarchy of both network organizations. However, a detailed analysis of these numerical results indicates the presence of many nodes with  $C_i = 0$ . These nodes mainly correspond to those constituents of the flowsheets that have very low connectivity  $k$  (e.g., valves, pumps, etc.) or are usually added in a secondary stage of the design process to simply provide a single or multiple connection among clusters of more specific unitary processes in the system. As depicted in Fig. 5, the elimination of nodes with  $C_i = 0$  from the calculation of  $C(k)$  for Refinery I enables us to identify a scaling law,  $C(k) \sim k^{-\beta}$  with  $\beta = 1.1 \pm 0.1$ , that is surprisingly close to the behavior expected for a hierarchical topology. Adopting the same strategy for Refinery II we find an entirely similar result, confirming the validity of our approach.

The identification of several networks with power-law degree distribution in Nature has been generally justified in terms of their evolution through a self-organized process in which hub elements are spontaneously generated and represent the dominant parts of the connected system (13). Here we have shown that man-designed networks composed by unitary processes and de-

vices of a chemical plant can also display scale-free behavior. Moreover, we found significant evidence from real data to suggest that these networks exhibit small-world effect and also have hierarchical organization in their structure (14). Although artificial, we believe that these features stem from the process synthesis schemes tacitly adopted in the design of chemical plants, which involves a combination of *heuristics* and algorithmic techniques (9). We expect these results to be useful in the design stage as well as in the evaluation and characterization of final flowsheets of refinery and other chemical plants.

We thank Diana Azevedo, Célio Cavalcante and João Augusto Paiva for useful discussions, and CNPq, CAPES, and FUNCAP for financial support.

## References

- [1] D. J. Watts, *Small Worlds: The Dynamics of Networks between Order and Randomness*, (Princeton University Press, 1999).
- [2] A. L. Barabási, *Linked: The New Science of Networks*, (Perseus Books Group, Cambridge MA, 2002).
- [3] H. Jeong, B. Tombor, R. Albert, Z. N. Oltavi, and A.-L. Barabási, *Nature* **407**, 651 (2000).
- [4] R. J. Williams and N. D. Martinez, *Nature* **404**, 180 (2000).
- [5] F. Liljeros, C. R. Edling, L. A. N. Amaral, H. E. Stanley HE, and Y. Aberg, *Nature* **411**, 907 (2001).
- [6] R. Cohen, K. Erez, D. ben-Avraham, and S. Havlin, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 4626 (2000).
- [7] M. Faloutsos, P. Faloutsos, and C. Faloutsos, *Comp. Comm. Rev.* **29**, 251 (1999).
- [8] R. Pastor-Satorras and A. Vespignani, *Evolution and Structure of the Internet: A Statistical Physics Approach*, (Cambridge University Press, 2004).
- [9] W. D. Seider, J. D. Seader, and D. R. Lewin, *Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*, (John Wiley & Sons, New York, 1989).
- [10] V. Batagelj and A. Mrvar, *Connections* **21**, 47 (1998); <http://vlado.fmf.uni-lj.si/pub/networks/pajek/>
- [11] D. J. Watts and S.H. Strogatz, *Nature* **393**, 440 (1998).
- [12] L. A. N. Amaral, A. Scala, M. Barthélemy, and H. E. Stanley, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **97**, 11149 (2000).
- [13] S. N. Dorogovtsev and J. F. F. Mendes, cond-mat/0404593, (2004).
- [14] E. Ravasz and A.-L. Barabási, *Phys. Rev. E* **67**, 026112 (2003).