

BALANÇO DE MASSAS: DESENVOLVIMENTO DE SISTEMAS ROBUSTOS PARA A RECONCILIAÇÃO DE DADOS

M.V.L. Pereira⁽¹⁾; R.D.S. Nicolato⁽¹⁾, R. Galery⁽¹⁾

1-Departamento de Engenharia de Minas da UFMG

Rua Espírito Santo, 35 s/702 30160 030 Belo Horizonte - MG BRASIL.

E-mail: marcos_vlp@yahoo.com.br; robertodsn@ufmg.br; rgalery@demin.ufmg.br;

RESUMO

Numa usina de beneficiamento de minério para o controle eficiente das operações, faz-se necessário a coleta diária de uma quantidade muito grande de dados. Dependendo das condições de equipamentos das usinas esses dados podem ser obtidos *on-line* ou *off-line*. Essas informações devem ser armazenadas diariamente sendo necessário, portanto a amostragem contínua de fluxo e massas. Ferramentas de análise consistentes que possibilitem a reconciliação das informações em relatórios de produção pertinentes ao processo devem também estar disponíveis. Um exemplo típico dessa aplicação envolve a reconciliação de dados de uma usina para o fechamento do balanço de massas. Esse problema se caracteriza como um problema típico de otimização onde a correção é feita de forma a minimizar o erro de fechamento do balanço. O presente trabalho tem como objetivo apresentar um sistema que permita a construção do diagrama de fluxos do processo, bem como realizar o cálculo, otimização e reconciliação dos dados. É possível realizar a coleta de maneira *on-line*, por meio de bancos de dados, e *off-line*, por meio de inserção de dados feitos pelos usuários. O fato de permitir uma coleta híbrida de dados oferece maior flexibilidade e maior abrangência nos resultados.

PALAVRAS CHAVE: Balanço de massas, mínimos quadrados, beneficiamento de minérios.

1. INTRODUÇÃO

As totalizações das entradas e saídas dos equipamentos de processo, considerando-se as acumulações, como tanques, pilhas de homogeneização de minérios etc., estão sempre em uma situação de balanço matemático (Eq 1), mas as medidas coletadas não. Tal fator interfere no que se pode chamar de Contabilidade da Produção, pois tudo que envolve as medidas quantitativas de material recebido, expedido, produções e consumos estão sujeitas a erros de medição, sejam eles de natureza “on-line” ou “off-line”. O que ocorre no final é que o balanço geral de massa não fecha justamente porque os dados colhidos são muitas vezes inconsistentes.

$$\sum \text{saídas} = \sum \text{entradas} - \text{Armazenado} \quad (1)$$

Nos casos em que a instrumentação é “on-line”, tais erros podem ser originados por diversas causas como, por exemplo, erros de medição aleatórios, instrumentação descalibrada, modelos inadequados, amostragem na frequência incorreta, não linearidade do instrumento, densidade incorreta ou variando com temperatura, polarização de leitura do instrumento, leitura fora de faixa do instrumento, erro de transmissão do sinal. Em situações onde as medidas são feitas de maneira “off-line”, como, por exemplo, resultantes de análises laboratoriais, resultantes de amostragens na usina, temos, a falta de padronização de metodologia no momento da coleta da amostra, o despreparo do operador, etc.

O balanço de massas, além de fornecer dados necessários para a produção pode também ser utilizado para identificar falhas e ser um indicativo para possíveis otimizações no processo. A maneira usual de se contornar este problema consiste em se atribuir maior grau de confiança para determinadas medidas baseado no conhecimento empírico do funcionamento da usina e de se alterar os dados artificialmente. O objetivo é fornecer um método matemático independente de crenças e comportamentos emotivos para se recalculer o valor mais provável para as medidas efetuadas de maneira que o ajuste seja o mínimo possível para cada variável segundo sua confiança.

É necessário reforçar que tais ajustes e balanços referentes ao presente trabalho só podem ser relacionados com sistemas em estado estacionário. aplicar tais análises em estado transitório de operação torna a metodologia inválida. Análises considerando a dinâmica do processo serão abordadas em futuros trabalhos devido a sua maior complexidade.

2. FORMULAÇÃO GERAL

Diante dos problemas citados anteriormente se faz necessária uma metodologia que possibilite um ajuste mínimo em cada variável e que respeite as equações de balanço individuais de cada elemento na planta. Reconciliação de dados é um método ou algoritmo que permite ajustar os valores das medidas realizadas para que a equação de balanço de massas seja obedecida (Bagajewicz, 2000). Por este processo deve-se atribuir maior erro à medição de maior incerteza. A soma dos erros é em geral ponderada pela precisão de cada instrumento ou pelo grau de confiança das estimativas realizadas para os valores não medidos. Realizar a reconciliação antes da análise de grandes erros é incorreto. *Este procedimento só é útil para distribuir os erros residuais, de natureza aleatória, após a detecção de grandes erros.*

O problema inicialmente pode ser definido como:

$$\begin{aligned} \min F(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_N) &= \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} (M_i - \hat{M}_i)^2 \\ \text{sujeito a:} \\ \phi_1(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_N) &= 0 \\ \phi_2(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_N) &= 0 \\ \phi_3(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_N) &= 0 \\ \dots \\ \phi_k(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_N) &= 0 \end{aligned} \quad (2)$$

Onde :

F é a função a ser minimizada; N é número de amostras; σ_i é a incerteza ou desvio padrão da medida i ; M_i é a i -ésima medição; \hat{M}_i é o valor reconciliado da i -ésima medição; k é o número de elementos do circuito (restrições); ϕ_k representam as equações lineares (ou quase) de balanço de cada elemento do circuito.

A equação pode ser reformulada matricialmente dessa maneira:

$$\begin{aligned} \min (M - M)^T Q^{-1} (M - M) \\ \text{sujeito a: } A \cdot M = 0 \end{aligned} \quad (3)$$

Onde:

M é o vetor contendo todas as medições; M é o vetor contendo todas as medições reconciliadas; Q é a matriz de variância/covariância das variáveis que tem em sua diagonal principal as incertezas elevadas ao quadrado (σ_i^2); A é matriz contendo os coeficientes das equações lineares (ou quase) de balanço do circuito (restrições);

A Eq. 3 sintetiza o problema como um todo. Resumidamente é necessário minimizar o somatório dos erros quadráticos dos ajustes feitos ponderados pelas respectivas incertezas das medições. Além disso, é obrigatório que todo elemento do circuito feche sua equação de balanço segundo Eq. 1 individualmente.

2.1. Tipos de Variáveis

A partir das Eq. 2 e 3 pode concluir-se erroneamente que é necessário saber o valor de todas as medidas presentes na planta para se conseguir fechar o balanço de massas. Isso pode não ser verdade em alguns casos. As condições para que se consiga realizar a reconciliação de dados sem possuir todas as medições do processo estão relacionadas com os seguintes conceitos:

- Observabilidade - Uma variável é dita observável se pode ser estimada através de outras medidas e das restrições do processo em estado estacionário;
- Redundância - Uma variável medida é dita redundante se for observável mesmo quando seu instrumento de medição é removido.

2.2. Busca de Soluções Ótimas Sujeitas a Restrições

A metodologia mais comum utilizada em problemas semelhantes é a minimização de funções multivariáveis utilizando o método dos multiplicadores de Lagrange (Edgar e Himmelblau, 1989). O método foi desenvolvido para otimizar, por exemplo, uma função, de duas variáveis, do tipo $f(x, y)$, sendo $\varphi(x, y) = 0$ a condição de restrição ou constrangimento a ser obedecida. Lagrange define uma função auxiliar $F(x, y, \lambda)$ tal que:

$$F(x, y, \lambda) = f(x, y) + \lambda \varphi(x, y) \quad (4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial x} + \lambda \frac{\partial \varphi}{\partial x} = 0 \\ \frac{\partial f}{\partial y} + \lambda \frac{\partial \varphi}{\partial y} = 0 \\ \varphi(x, y) = 0 \end{array} \right. \quad (5)$$

Onde, λ é o multiplicador de Lagrange.

No ponto de mínimo (máximo) da função, as derivadas parciais da função em relação a x e a y se anulam e podemos escrever a equação (5). Temos três equações e três incógnitas: x , y e λ e portanto podemos resolver o problema. Observe que o fato das derivadas parciais se anularem no ponto de máximo ou mínimo é uma condição necessária e não suficiente. Após encontrar o resultado, devemos verificar se o ponto corresponde a um máximo ou mínimo.

2.3. Aplicação dos Multiplicadores de Lagrange no Problema de Balanço de Massas

Utilizando-se da metodologia dos multiplicadores de Lagrange para encontrarmos o mínimo da função, que é a soma ponderada pelas incertezas dos erros quadráticos entre o ajuste e a medição real, pode-se transformar a Eq. 2 em:

$$\phi = \sum_{i=1}^N \frac{1}{\sigma_i^2} (M_i - \hat{M}_i)^2 + 2 \sum_{l=1}^k \lambda_l \sum_{j=1}^N a_{lj} \hat{M}_j \quad (5)$$

$$\phi = (M - \hat{M})^T Q^{-1} (M - \hat{M}) + 2 \lambda^T A \hat{M} \quad (5a)$$

$$\left. \begin{array}{l} \frac{\partial \phi}{\partial M_1} = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial M_2} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial \phi}{\partial M_N} = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_1} = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_2} = 0 \\ \dots \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_k} = 0 \end{array} \right\} m+k \text{ equações (6)}$$

De acordo com a formulação acima a Eq. 6 fornecerá um sistema de equações lineares de $(m+k)$ equações e $(m+k)$ incógnitas de solução trivial.

3. EXEMPLOS

Na Fig. 1 é apresentado como exemplo um circuito com dois reatores em série contendo cinco fluxos e os respectivos erros de medição.

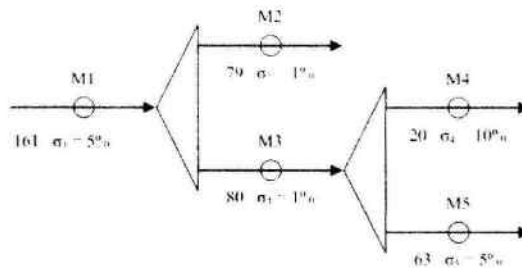


Figura 1 – Suposto diagrama de processo em estado estacionário

A partir dos dados fornecidos na Fig.1 temos:

- M – vetor contendo todas as medições:

$$M = \begin{bmatrix} M_1 & M_2 & M_3 & M_4 & M_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 161 & 79 & 80 & 20 & 63 \end{bmatrix}$$

- $\bar{\sigma}$ – vetor contendo os desvios padrões absolutos de cada medição, tomando como base os valores percentuais da Fig. 1:

$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} \sigma_1 \cdot M_1 & \sigma_2 \cdot M_2 & \sigma_3 \cdot M_3 & \sigma_4 \cdot M_4 & \sigma_5 \cdot M_5 \end{bmatrix}$$

$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} 0,05 \cdot 161 & 0,01 \cdot 79 & 0,01 \cdot 80 & 0,1 \cdot 20 & 0,05 \cdot 63 \end{bmatrix}$$

$$\bar{\sigma} = \begin{bmatrix} 8,05 & 0,79 & 0,8 & 2 & 3,15 \end{bmatrix}$$

- A é a matriz contendo os coeficientes das equações lineares de balanço do circuito (restrições);

$$\begin{cases} \bar{M}_1 - \bar{M}_2 - \bar{M}_3 = 0 \\ \bar{M}_3 - \bar{M}_4 - \bar{M}_5 = 0 \end{cases} \quad \text{ou:} \quad \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & -1 & -1 \end{bmatrix}}_A \cdot \begin{bmatrix} \bar{M}_1 \\ \bar{M}_2 \\ \bar{M}_3 \\ \bar{M}_4 \\ \bar{M}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

A função objetivo do problema seria:

$$F(\bar{M}_1, \bar{M}_2, \bar{M}_3, \bar{M}_4, \bar{M}_5) = \sum_{i=1}^5 \frac{1}{\sigma_i^2} (\bar{M}_i - \bar{M}_i)^2 \quad (7)$$

Utilizando a função auxiliar:

$$\phi = \sum_{i=1}^5 \frac{1}{\sigma_i^2} (\bar{M}_i - \bar{M}_i)^2 + 2\lambda_1 (\bar{M}_1 - \bar{M}_2 - \bar{M}_3) + 2\lambda_2 (\bar{M}_3 - \bar{M}_4 - \bar{M}_5) \quad (8)$$

A partir das derivadas parciais é fácil notar que as equações acima podem ser reescritas de uma maneira matricial e de forma mais genérica; substituindo, (11) em (12) se obtém (13).

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}_1} = \frac{2}{\sigma_1^2} (\bar{M}_1 - \bar{M}_1) + 2\lambda_1 = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}_2} = \frac{2}{\sigma_2^2} (\bar{M}_2 - \bar{M}_2) - 2\lambda_1 = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}_3} = \frac{2}{\sigma_3^2} (\bar{M}_3 - \bar{M}_3) + 2\lambda_1 + 2\lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}_4} = \frac{2}{\sigma_4^2} (\bar{M}_4 - \bar{M}_4) - 2\lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}_5} = \frac{2}{\sigma_5^2} (\bar{M}_5 - \bar{M}_5) - 2\lambda_2 = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_1} = 2(\bar{M}_1 - \bar{M}_2 - \bar{M}_3) = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda_2} = 2(\bar{M}_3 - \bar{M}_4 - \bar{M}_5) = 0 \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial \bar{M}} = -2Q^{-1}(\bar{M} - \bar{M}) + 2A^T \lambda = 0 \\ \frac{\partial \phi}{\partial \lambda} = 2AM = 0 \end{cases} \quad (10)$$

$$\begin{cases} -2Q^{-1}(\bar{M} - \bar{M}) + 2A^T \lambda = 0 \\ -2Q^{-1}(\bar{M} - \bar{M}) = 2A^T \lambda \\ (\bar{M} - \bar{M}) = -QA^T \lambda \\ \boxed{\bar{M} = \bar{M} + QA^T \lambda} \end{cases} \quad (11)$$

$$\boxed{\bar{M} = \bar{M} + QA^T \lambda} \quad (12)$$

$$2AM = 0$$

$$AM = 0$$

$$A(\bar{M} + QA^T \lambda) = 0$$

$$AM + AQA^T \lambda = 0$$

$$AQA^T \lambda = -AM$$

$$\boxed{\lambda = -(AQA^T)^{-1} AM} \quad (13)$$

$$\bar{M} = \bar{M} - QA^T (AQA^T)^{-1} AM$$

$$\boxed{\bar{M} = (I - QA^T (AQA^T)^{-1} A) \bar{M}} \quad (14)$$

Ou

$$\boxed{\bar{M} = P_m \bar{M}}$$

Substituindo o valor de λ obtido em (13) na equação (12) obtém-se a equação genérica para o balanço de massas dependendo das conexões do circuito, das incertezas das medições e das próprias medições. Na equação 14, P_m é comumente denominada de matriz de projeção (Edgard e Himmelblau, 1989). Teremos como resultado:

TABELA 1 – Resumo dos Dados do problema

	Original	Reconciliado	Desvio (σ)
\hat{M}_1	161	159,166809790332	8,05
\hat{M}_2	79	79,017655093471	0,79
\hat{M}_3	80	80,149154696862	0,8
\hat{M}_4	20	19,180938678682	2
\hat{M}_5	63	60,968216018180	3,15

A partir das Tabelas 1 e 2 pode-se verificar que os resultados da presente metodologia de ajuste aplicada, o mínimo ajuste é possível de maneira que os erros sejam distribuídos proporcionalmente em função das incertezas das medições e não aleatoriamente. Além disso, tem-se que ao final é possível determinar valores reconciliados que respeitem as equações de fechamento de balanço tanto global do sistema como individual dos elementos do circuito.

TABELA 2 – Erros Residuais da análise

	Imbalanço do elemento 1 ($\hat{M}_1 - \hat{M}_2 - \hat{M}_3$)	Imbalanço do elemento 2 ($\hat{M}_3 - \hat{M}_4 - \hat{M}_5$)	Valor da Função Objetivo $F(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3, \hat{M}_4, \hat{M}_5)$
Original ($M_j = M_i$)	2	-3	0
Reconciliado	$-1,0090 \cdot 10^{-12}$	0	0,670873752

3.2. Recuperação de Todas as Variáveis Reconciliadas Mesmo Havendo Algumas não Medidas

Em plantas industriais tem-se na maioria dos casos um conjunto de variáveis relacionadas ao processo e que merecem atenção especial de análise, entretanto nem sempre é possível medir todas elas. As Tabelas 3 e 4 mostram o resultado da metodologia aplicada no problema da Fig. 1. Tal problema foi modificado retirando a variável redundante e observável M_3 . Pode ser verificado na tabela que é possível recuperar M_3 usando uma equação de balanço do problema anterior, como por exemplo: $M_3 = M_4 + M_5$.

TABELA 3 – Resumo dos dados do problema sem a medição 3

	Original	Reconciliado	Desvio (σ)
\hat{M}_1	161	161,816675929532	8,05
\hat{M}_2	79	78,992134756412	0,79
\hat{M}_3	-	82,824541173119	-
\hat{M}_4	20	19,949589850420	2
\hat{M}_5	63	62,874951322699	3,15

TABELA 4 – Erros Residuais da análise sem a medição 3

	Imbalanço do elemento 1 ($\hat{M}_1 - \hat{M}_2 - \hat{M}_4 - \hat{M}_5$)	Valor da Função Objetivo $F(\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_4, \hat{M}_5)$
Original ($M_j = M_i$)	-1	0
Reconciliado	$1,421085471 \cdot 10^{-14}$	0,012602537

4. DETECÇÃO DE ERROS GROSSEIROS

Problemas operacionais freqüentemente observados em usinas em operação tais como, vazamentos, transbordos, movimentações manuais de material, instrumentação descalibrada, etc., geram o aparecimento de grandes erros no fechamento dos balanços de massas. Por exemplo, a presença de um erro grosseiro seria identificada através da reconciliação, onde o valor de um determinado fluxo medido supera os intervalos de confiança do mesmo, indicando assim alguma falha ocorrida na medição ou em algum outro ponto gerador de anomalias na planta.

Usualmente ao analisar-se um processo, em estado estacionário, as variáveis são arbitrariamente interpretadas como tendo comportamento normal, ou seja, sua função de distribuição de probabilidade pode ser caracterizada por uma média (μ) e um desvio padrão(σ). E o intervalo de confiança com 95% de chances de a variável ocorrer é $[-2\sigma +2\sigma]$. Entretanto, tal metodologia só é capaz de identificar quando ocorrem erros grosseiros únicos e não oferece resultados viáveis pra detectar múltiplos erros grosseiros.

O algoritmo preferido para detecção de erros grosseiros é o denominado MIMT (Modified Iterative Measurement Test) (Derya et al., 2000) que é uma metodologia iterativa de eliminação da medição mais suspeita com restrições feitas às variáveis ajustadas. O algoritmo consiste em retirar a medida reconciliada que estiver mais fora do intervalo de confiança e após isso reconciliar as demais medidas novamente. O método é aplicado ciclicamente até que todas as medidas reconciliadas sejam aceitáveis.

5. TRABALHOS FUTUROS

Existe a necessidade em proposições futuras de agrupar dados de diferentes naturezas com o objetivo de reconciliação. Por exemplo, é muito comum em plantas de beneficiamento de minérios a necessidade de se medir vazões mássicas (tph) e também o teor, percentual, do minério desejado. Em posse de tais resultados é desejável elaborar uma estratégia que possa realizar um balanço global utilizando esses resultados, pois ambos acham-se intimamente correlacionados.

Diversas abordagens estão sendo utilizadas para a detecção de erros grosseiros. Já foi demonstrado que a eliminação de medições mais suspeitas a cada passo do algoritmo MIMT pode, em alguns casos, não levar a identificação os verdadeiros erros grosseiros. Dentre as novas abordagens do problema podem ser destacadas aquelas que usam o MIMT modificado e outras que utilizam abordagens não estatísticas como as baseadas em inteligência artificial.

A tendência natural da análise de dados de processo objetivando otimização tende a passar pela análise dinâmica dos componentes, o que pode resultar em modelos matemáticos para o processo de maneira que seja possível simular o sistema mesmo em modo off-line. Além disso, em posse de modelos para o sistema pode-se projetar controladores digitais ou analógicos para melhoria de desempenho da planta ou mesmo para promover rejeição às perturbações inerentes ao processo.

6. CONCLUSÕES

No presente trabalho foi apresentada uma metodologia robusta para reconciliação e fechamento de dados de balanço de massas que pode ser aplicada nas operações diárias de usinas de beneficiamento mineral. Ela pode ser utilizada para a recuperação de todas as variáveis reconciliadas mesmo tendo algumas não medidas. A detecção de erros grosseiros de amostragem pode, também, ser utilizada como uma ferramenta robusta para trabalhos envolvendo a otimização de processos em usinas de beneficiamento de minérios.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Bagajewicz, M. J., "A brief review of recent developments in data reconciliation and gross error detection/estimation". Latin American Applied Research,30, p.335-342,2000.
- Derya B. Özyurt1, Ralph W. Pike., "Theory and practice of simultaneous data reconciliação and gross error detection for chemical processes". Computers and Chemical Engineering 28, p.381-40,2004.
- Edgar T.F., Himmelblau, D.M. Optimization of Chemical Processes, McGrawHill, p.302-309, 1989.
- Heyen, G., Maréchal, E., Kalitventzeff, B., Sensitivity Calculations and Variance Analysis In: Plant Measurement Reconciliation, Computers and Chemical Engineering, Vol. 20, Suppl., p. 539-54, 1996.

Serth, R. M. and Heenan, W. A., Gross Error Detection and Data Reconciliation in Steam Metering Systems. *AIChEJ.* 32, p.733,1986..