

# *Instrumentação A*

*Relatório*

## **Sistema de Aquisição de Temperatura, Pressão e Fração Molar para Estimativa da Densidade do Gás Natural através de Rede Neural Artificial**

**Bernardo Schaffazick Caetani, Diego Almiron Escouto e Thales Ramsés Viegas de Oliveira**

Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Departamento de Engenharia Elétrica, Curso de Engenharia Elétrica, Disciplina de Instrumentação A, Prof. Dr. Tiago Oliveira Weber

E-Mails: bcaetani.poa@gmail.com (B.S.C); diego.escouto@ufrgs.br (D.A.E);  
thalesramsés@gmail.com (T.R.V.O.)

*Data Início: 24/04/2022 ; Data Final: 06/05/2022*

---

**Resumo:** O gás natural é uma fonte de energia que tem ganhado espaço nos últimos anos, principalmente por ser um combustível fóssil abundante, barato e menos poluente do que o carvão e o petróleo. Entretanto, o armazenamento do gás natural exige, para fornecer a mesma quantidade de energia, um volume consideravelmente maior do que os outros combustíveis. A fim de aumentar a densidade energética do gás natural armazenado, tem-se desenvolvido técnicas que consistem no princípio da adsorção. Essas técnicas conseguem aumentar consideravelmente a densidade de gás natural armazenado. A fim de controlar, monitorar e fornecer informações importantes a respeito da quantidade de energia disponível em um tanque de armazenamento de gás natural, foi desenvolvido um sistema de aquisição de temperatura, pressão e fração molar do gás natural armazenado para, a partir dos dados obtidos, estimar a densidade do mensurando através de uma Rede Neural Artificial. Com os dados coletados e estimados, é possível o cálculo de parâmetros energéticos como número de metano e índice de Wobbe, além de avisos de segurança e vazamento. Os sensores e sistemas de aquisição projetados conseguem relacionar o mensurando com a saída em tensão através de polinômios com valores de  $R^2$  acima de 0,997. Já a rede neural projetada consegue estimar a densidade real do gás natural com um  $R^2$  de 0,99531. Tanto a rede neural quanto o sistema de aquisição se mostraram capazes de fornecer informações aproximadas das grandezas que se deseja obter, sendo satisfatórias para esta aplicação, que não exige alta precisão.

**Abstract:** Natural gas is an energy source that has gained space in recent years, mainly because it is an abundant, cheap and less polluting fossil fuel than coal and oil. However,

the storage of natural gas requires, to provide the same amount of energy, a considerably larger volume than other fuels. In order to increase the energy density of stored natural gas, techniques based on the adsorption principle have been developed. These techniques can considerably increase the density of stored natural gas. In order to control, monitor and provide important information about the amount of energy available in a natural gas storage tank, a temperature, pressure and molar fraction acquisition system of the stored natural gas was developed to, from the data obtained, to estimate the density of the measurand through an Artificial Neural Network. With the collected and estimated data, it is possible to calculate energy parameters such as methane number and Wobbe index, in addition to safety and leakage warnings. The sensors and acquisition systems designed can relate the measurand with the voltage output through polynomials with  $R^2$  values above 0.997. The designed neural network can estimate the real density of natural gas with an  $R^2$  of 0.99531. Both the neural network and the acquisition system proved to be capable of providing approximate information of the quantities to be obtained, being satisfactory for this application, which does not require high precision.

**Palavras-chave:** densidade de gases; rede neural artificial; gás natural; adsorção; armazenamento.

---

## 1. Introdução

A sociedade moderna depende de fontes confiáveis e baratas de energia para garantir desenvolvimento socioeconômico. Recursos como petróleo, carvão e gás são escassos<sup>1</sup>, estáveis, relativamente baratos e bastante disputados pelo mercado global de energia (ROGNER, 2012). Dentre esses, o gás natural é o menos utilizado, fornecendo menos de um quarto da energia consumida em escala global (FARAMAWY *et al.*, 2016).

Contudo, nos últimos anos, tem sido notado um rápido aumento na utilização do gás natural por diversos motivos. Um desses motivos é a crescente pressão pela substituição de energias altamente poluentes como carvão e petróleo, por alternativas que emitem menor quantidade de gases de efeito estufa por quilowatt gerado, como energia solar, eólica, nuclear e até mesmo gás natural (MA, 2017). O gás natural é relativamente limpo pois o metano (componente majoritário do gás natural) é o combustível com maior razão H/C (hidrogênio/carbono) (BURCHELL & ROGERS, 2020). É importante salientar que, segundo Faramawy *et al.*, mesmo o gás natural não sendo classificado como fonte de energia limpa, o mesmo é menos poluente quando comparado aos outros combustíveis fósseis. Ou seja, substituir petróleo e carvão por gás natural é uma solução para reduzir as emissões de carbono sem prejudicar a indústria, a economia e o comércio.

Algumas regiões do mundo de alta relevância na economia globalizada, tais como China (MA, 2017) e Europa (BALITSKIY *et al.*, 2016), são altamente dependentes da energia provida do gás natural. Ambas as regiões são extremamente industrializadas, além de apresentarem elevada densidade e quantidade populacional. Dessa forma, há uma grande demanda, principalmente nessas regiões, por gás natural e todas as instalações e equipamentos associadas a sua produção, controle e distribuição, não só para produção industrial, mas também para aquecimento e fornecimento de energia à população.

Além da indústria, o gás natural também tem grande importância para o mercado automotivo, visto que o mesmo é um combustível mais limpo que a gasolina. Entretanto, uma desvantagem que o

---

<sup>1</sup> relativamente escassos, embora exista a estimativa de que o petróleo e derivados possam acabar em algumas décadas, novas fontes são descobertas todo ano

gás natural apresenta é que o mesmo não consegue ser armazenado em densidades tão altas quanto a de outros combustíveis, o que faz com que a densidade energética do combustível também não seja tão alta, o que exige um maior espaço de armazenamento para uma mesma quantidade de energia produzida. A gasolina, por exemplo, apresenta densidade energética cerca de três vezes maior que a do metano, mesmo quando o gás natural está submetido a pressões altas de cerca de 25 MPa. Além da baixa densidade energética, manter o gás a pressões altas é custoso e pode apresentar riscos à segurança. Diversos estudos relacionados ao armazenamento do gás natural e ao aumento de sua densidade energética foram realizados nas últimas décadas. Uma das técnicas que têm se mostrado promissoras consiste na utilização do fenômeno da adsorção, onde o gás, em contato com monolitos ou materiais porosos de carbono, é adsorvido e consegue atingir densidades energéticas elevadas, mesmo submetido a pressões relativamente baixas e a temperatura ambiente (BURCHELL & ROGERS, 2020).

Isto posto, este trabalho tem como objetivo o projeto e simulação de sistemas de mensuração da temperatura, da pressão e da fração molar do gás natural em condições próprias de tanques que se aproveitam do fenômeno da adsorção para realizar o armazenamento do gás em condições de pressão comuns para esse tipo de aplicação (aproximadamente 3,5 MPa) e a temperatura ambiente (BURCHELL & ROGERS, 2020). Além disso, também é realizado o desenvolvimento de uma Rede Neural Artificial para estimar a densidade real do gás armazenado com os dados coletados pelos sensores projetados, reduzindo o custo do sistema de medição ao mesmo tempo possibilitando a aproximação de parâmetros como viscosidade (SCHLEY *et al.*, 2004), índice de Wobbe, valor calorífico e número de metano (SWEELSEN *et al.*, 2020), usados para monitoramento e avaliação da qualidade energética e da energia disponível.

## 2. Fundamentação Teórica

### 2.1. Composição do gás natural

A composição do gás natural é dependente, não só das condições em que o mesmo é armazenado, mas principalmente de sua origem geológica. Os principais constituintes do gás natural são hidrocarbonetos leves, como metano, etano, propano e diferentes tipos de butanos, além de apresentarem quantidades pequenas de pentanos, hexanos e heptanos (geralmente menos de 1% do volume do gás natural). Também são encontrados gases como nitrogênio ( $N_2$ ), dióxido de carbono ( $CO_2$ ), sulfeto de hidrogênio ( $H_2S$ ), além de diversos outros constituintes gasosos em menor quantidade (FARAMAWY *et al.*, 2016).

Algumas substâncias que compõem o gás natural e sua respectiva participação percentual no volume total do gás foram mostradas por Atilhan *et al.* (2012) na Tabela 1.

**Tabela 1.** Amostras de gás natural.

<b>Amostra</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>	<b>4</b>	<b>5</b>
<b>Metano</b>	84,99%	90,26%	80,34%	84,70%	85,09%
<b>Etano</b>	5,53%	5,83%	5,19%	5,58%	5,53%
<b>Propano</b>	2,01%	2,11%	1,88%	1,96%	2,01%
<b>2-metilpropano</b>	0,40%	0,41%	0,38%	0,42%	0,40%
<b>Butano</b>	0,59%	0,64%	0,57%	0,55%	0,61%
<b>2-metilbutano</b>	0,17%	0,21%	0,19%	0,21%	0,17%
<b>Pentano</b>	0,15%	0,16%	0,14%	0,16%	0,14%
<b>Octano</b>	0,15%	0,16%	0,15%	0,15%	0,15%
<b>Tolueno</b>	0,09%	0,11%	0,09%	0,10%	-
<b>Metilciclopentano</b>	0,10%	0,11%	0,09%	-	0,10%
<b>Nitrogênio</b>	3,50%	-	6,60%	3,71%	3,50%
<b>Dióxido de Carbono</b>	2,33%	-	4,38%	2,46%	2,30%

**Fonte -** ATILHAN *et al.*, 2012.

## 2.2. Adsorção

A adsorção é o fenômeno onde um líquido ou gás é sobreposto em uma superfície de contato, e se conecta de forma física ou química a esta superfície. O modelo de adsorção de Langmuir prevê que um modelo onde a temperatura não varia e a pressão tem uma influência se a conexão entre a superfície ocorre ou não. Interações químicas em geral tendem a alterar de forma permanente componentes e sistemas, então o ideal em instrumentação é utilizar interações físicas que não comprometem a repetibilidade dos processos de medição.

A adsorção também pode acontecer em camadas do material sobre ele mesmo, criando estruturas de fractais. A adsorção física de gases é facilitada por baixas temperaturas e altas pressões. (ROUQUEROL *et al.*, 2014).

## 2.3. Capacitância

A capacitância é a impedância de um componente de circuito que se comporta como um condensador de carga, ou ainda, definido como a razão entre a carga armazenada em um dos dois condutores que constituem o capacitor e a diferença de potencial existente entre os mesmos (BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011). A Equação 1 define a capacitância em função do material entre os condutores ( $k$ ), o meio em que se encontra ( $\epsilon_0$ ) e sua geometria (área das placas e distância entre as placas).

$$C = k \cdot \epsilon_0 \cdot \frac{A}{d} \quad (1)$$

Onde  $C$  é a capacitância em Farad,  $\epsilon_0$  é a permissividade elétrica do vácuo ( $\approx 8,85$  pF/m) e  $k$  é a constante dielétrica ou permissividade relativa do isolante utilizado. Outra forma de se expressar a capacitância é pela Equação 2.

$$C = \frac{Q}{V} \quad (2)$$

Para análises de corrente alternada (AC) no domínio da frequência, a capacitância produz uma impedância negativa e imaginária inversamente proporcional à frequência angular e à capacitância como visto na Equação 3.

$$Z_c = 1/j\omega C \quad (3)$$

#### 2.4. Comportamento de gases reais

O comportamento dos gases ideais pode ser descrito pela Equação 4, chamada de equação de Clapeyron (BAHADORI, 2018).

$$\rho = \frac{P \cdot MM}{R \cdot T} \quad (4)$$

Onde:

**$\rho$** : Densidade do gás

**$MM$** : Massa molecular

**$R$** : Constante universal dos gases perfeitos

**$T$** : Temperatura

**$P$** : Pressão

No entanto, para gases reais, seu comportamento é não-ideal e a compressibilidade do gás ( $Z$ ) deve ser considerada como visto na Equação 5 (ATKINS & PAULA, 2008). Onde  $Z$  é uma função não-linear dependente da pressão e temperatura do gás.

$$\rho = \frac{P \cdot MM}{R \cdot T \cdot Z(P,T)} \quad (5)$$

##### 2.4.1. Compressibilidade

Gases reais não têm o volume ideal proposto pela Equação de Clapeyron (Equação 4). Eles têm sua capacidade de compressão limitada e menor do que a proposta, e ela varia em função da sua fração molar, pressão e temperatura (ISLAM, 2021).

$$Z = \frac{V_{real}}{V_{ideal}}, Z = f(Y_i, P, T) \quad (6)$$

#### 2.5. Temperatura e Pressão pseudo-reduzidas

Um gás composto pela mistura de diferentes gases, tem como ferramenta o uso de uma regra de mistura média para estimar a temperatura crítica ( $T_{pc}$ ) e a pressão crítica ( $P_{pc}$ ) que esta mistura de gases pode ser exposta.

### 2.5.1. Temperatura pseudo-crítica

A temperatura acima da qual um gás em seu estado de vapor não pode ser facilmente liquefeito, independentemente da magnitude da pressão aplicada ao seu sistema. A temperatura pseudo-crítica para um gás real é determinada pela equação 7, onde  $Y_i$  representa a fração molar do componente  $i$  do gás real (GUO, 2019).

$$T_{pc} = \sum_{i=1}^n Y_i \times T_{ci} \quad (7)$$

### 2.5.2. Pressão pseudo-crítica

A pressão de vapor necessária para liquefazer um gás em seu estado de vapor existente em sua temperatura pseudo-crítica. A temperatura para um gás real é determinada pela Equação 8, onde  $Y_i$  representa a fração molar do componente  $i$  do gás real (GUO, 2019).

$$P_{pc} = \sum_{i=1}^n Y_i \times P_{ci} \quad (8)$$

### 2.5.3. Temperatura pseudo-reduzida

Pode ser definida como a razão entre a temperatura do gás ( $T$ ) e a temperatura pseudo-crítica ( $T_{pc}$ ), como visto na Equação 9. Sua unidade é adimensional ou K/K, uma vez que  $T$  e  $T_{pc}$  têm unidade em Kelvin (GUO *et al.*, 2017).

$$T_{pr} = \frac{T}{T_{pc}} \quad (9)$$

### 2.5.4. Pressão pseudo-reduzida

Pode ser definida como a razão entre a pressão do gás ( $P$ ) e a pressão pseudo-crítica (expressa na mesma unidade de pressão), como visto na Equação 10. Sua unidade é adimensional ou MPa/MPa, uma vez que  $P$  e  $P_{pc}$  têm unidade em MPa (GUO *et al.*, 2017).

$$P_{pr} = \frac{P}{P_{pc}} \quad (10)$$

## 2.6. Massa molecular média

A massa molecular média do gás real é calculada pela Equação 11. Sua unidade é a massa atômica (u) que equivale a  $1,66 \times 10^{-24}$  g (GUO *et al.*, 2008).

$$MM_{média} = \sum_{i=1}^n Y_i \times MM_{média i} \quad (11)$$

## 2.7. Gravidade Específica

A gravidade específica para um gás é definida como a razão entre a densidade de um gás e a densidade típica do ar quando ambos estão sob condições ambientes – para que a compressibilidade do gás não ideal seja próxima do ideal. Esta relação é vista na Equação 12, sua unidade é adimensional (BAHADORI, 2018).

$$\gamma_g = \frac{\rho_g}{\rho_{ar}} \quad (12)$$

A Equação 12 implica na Equação 13, onde a gravidade específica em condições ambiente depende apenas das massa moleculares. Esta relação é útil do ponto de vista que a massa molecular é tipicamente conhecida (BAHADORI, 2018).

$$\gamma_g = \frac{MM_g}{MM_{ar}} \quad (13)$$

A gravidade específica permite estimar outros parâmetros específicos de gases como pressão pseudo-crítica (Ppc), temperatura pseudo-crítica (Tpc) e massa molecular através das Equações 13, 14 e 15 (GUO, 2019).

$$T_{pc} = 170,491 + 307,344 \cdot \gamma \quad [^{\circ}\text{R}] \quad (14)$$

$$P_{pc} = 709,604 - 58,718 \cdot \gamma \quad [\text{psia}] \quad (15)$$

## 2.8. Concentração

A fração molar é um tipo de concentração e é definida pela razão da massa molecular total do gás numa mistura pela massa molecular daquele gás, como visto na Equação 16. Outra definição é que a fração molar é um peso percentual da massa de um gás pelo qual deve ser multiplicada a massa molecular daquele gás para se obter a massa molecular dele na mistura, como visto na Equação 16 (GUO, 2019). Na química, algumas concentrações levam em consideração o volume. Mas como o volume do gás varia livremente, faz mais sentido utilizar concentrações em função da massa dos elementos contidos nele.

$$Y_{gás} = \frac{MM_{gás \text{ em uma mistura}}}{MM_{gás}} \quad (16)$$

Uma consideração importante é que a soma de todas as frações parciais de todos os gases numa mistura deverá ser 1. O que implica na limitação de determinação de concentrações caso não sejam consideradas todas as frações devidamente. Então conhecidas as frações molares de um gás é possível estimar sua pressão pseudo-crítica, temperatura pseudo-crítica e massa molecular de um gás

## 2.9. Sensor

De acordo com o VIM, um sensor é um componente usado para medir um comportamento em um sistema que é afetado diretamente por um fenômeno, corpo ou substância que contém a grandeza a ser medida.

### 2.9.1. Largura de Banda de Interesse do Sinal do Sensor

Para que haja uma variação no sinal medido, existe um tempo até que o sensor se adapte, ou seja, existe um *delay* até que suas características transduzam o mensurando. Este tempo é chamado de tempo de resposta, e a banda de interesse do mensurando é o inverso do tempo de resposta.

## 2.10 Sistema de Aquisição de Sinal

Segundo Balbinot & Brusamarello, sistema de aquisição de dados é qualquer arranjo que permita transformar os sinais analógicos em digitais para permitir a interpretação e manipulação por sistemas digitais.

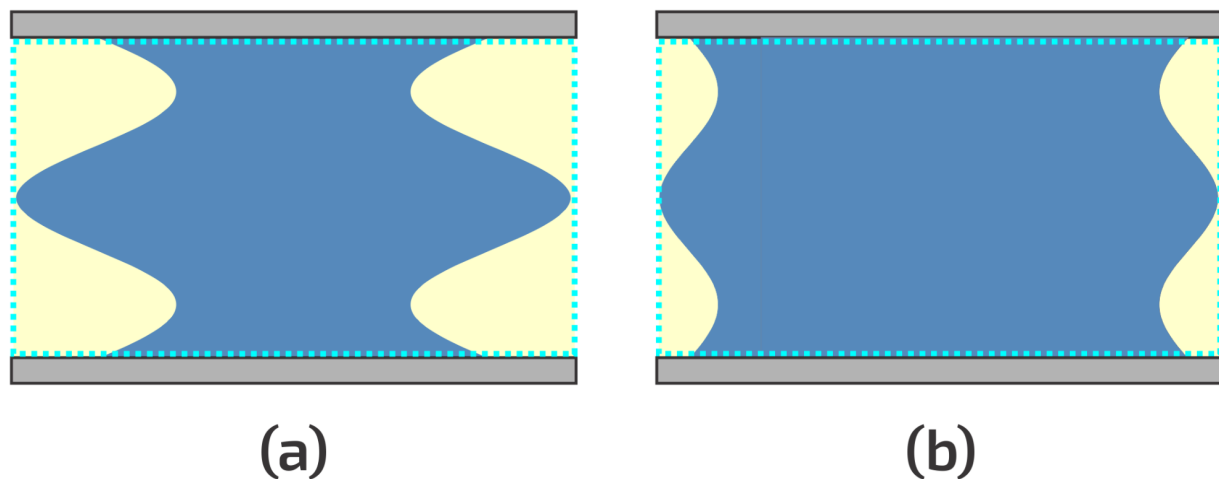
## 2.11. Sensor Capacitivo de Concentração

Um método proposto para a medição da composição do gás natural se baseia na combinação do princípio da adsorção e do conceito de capacitância. Utilizando uma determinada quantidade de um polímero específico como dielétrico, sob determinadas condições físicas (pressão e temperatura) do sistema, o contato superficial de um material sobre o dielétrico ocorre e a constante dielétrica e a permissividade elétrica variam, portanto a capacitância de um material varia (BOERSMA, 2018).

O polímero compõe, em conjunto com dióxido de silício ( $\text{SiO}_2$ ), o dielétrico de uma capacitância de um semiconductor integrado. Os polímeros são geralmente escolhidos por sua porosidade, que aumenta a área da superfície de contato, aumentando a interação de adsorção. Ao variar a geometria, a quantidade de polímero e o material do polímero é possível obter diferentes *chips* integrados com capacidades de adsorção diferentes para gases diferentes e então construir uma matriz que permite estimar a concentração dos gases (SWEELSEN, 2020).

**Figura 1.** Desenho de adsorção num dielétrico:

**a)** dielétrico com polímero de alta porosidade. **b)** dielétrico com polímero de baixa porosidade.



Fonte - Autores.

A região pontilhada é o dielétrico de um capacitor, a região azul é um polímero entre 2 placas (em cinza). A região em amarelo da figura 1 representa de forma macroscópica, como o aumento de porosidade aumenta a área da superfície de contato e permite que mais gás ocupe o dielétrico do capacitor. Sendo, a área da superfície de contato, o comprimento da superfície lateral da área azul.

A equação de capacitância para um *chip* pode ser escrita como a capacitância em função da concentração de cada gás. O coeficiente  $\alpha$  representa a correlação entre a resposta do *Chip* e um determinado gás. A resposta do *chip* é uma capacitância da ordem de 0,1 pF. Adicionalmente  $\beta$  é o *offset* de capacitância do *chip* em seu estado natural (sem contato com o gás), e  $\tau$  é o coeficiente de variação da resposta em função da temperatura (SWEELSEN, 2020).

A resposta do *Chip* é a capacitância  $Ch$  expressa na Equação 17.



$$Ch = \alpha_1 C_{\text{gás1}} + \alpha_2 C_{\text{gás2}} + \alpha_3 C_{\text{gás3}} + \alpha_4 C_{\text{gás4}} + \alpha_5 C_{\text{gás5}} + \alpha_6 C_{\text{gás6}} + \alpha_7 C_{\text{gás7}} + \beta + \tau T \quad [\text{pF}] \quad (17)$$

Podemos então definir um vetor  $K$  que contém todos os parâmetros para um determinado *chip*. E escrever uma equação vetorial onde a capacitância  $Ch$  é o produto do vetor  $K$  e do vetor de concentrações e *offsets* (temperatura e capacitância base).

A obtenção do vetor  $K$  é dada por uma variação de misturas com concentrações previamente conhecidas. E a sensibilidade  $\alpha$  para cada gás em cada *chip* pode ser ajustada. Por exemplo, a sensibilidade ao Metano em um *chip* é calibrada pela geometria e porosidade do dielétrico, o que permite que a adsorção aconteça com mais facilidade.

Sendo conhecida a temperatura do *chip* quando é mensurada a capacitância, um *chip* de referência não revestido mostra alguma dispersão na medição que não está relacionada a nenhuma concentração de gás. Afinal, se o *chip* de referência tiver correlação nula com os gases que compõem o gás natural, sua resposta depende apenas de sua capacitância de *offset* e variação de temperatura. Este *chip* de referência permite como o nome sugere ter uma referência elétrica de alguma anomalia elétrica que o gás possa estar causando no sistema de medição.

Estendendo a equação vetorial proposta para uma equação matricial temos a Figura 2.

**Figura 2.** Equação Matricial de Concentração.

$$\begin{bmatrix} Ch_1 \\ Ch_2 \\ Ch_3 \\ Ch_4 \\ Ch_5 \\ Ch_6 \\ Ch_7 \\ Ch_8 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_1 \\ K_2 \\ K_3 \\ K_4 \\ K_5 \\ K_6 \\ K_7 \\ K_8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} CH_4 \\ C_2H_6 \\ C_3H_8 \\ n-C_4H_{10} \\ i-C_4H_{10} \\ n-C_5H_{12} \\ i-C_5H_{12} \\ 1 \\ T \end{bmatrix}$$

**Fonte - Autores.**

Uma vez realizada a parametrização da matriz  $K$  e sendo mensurada a temperatura de cada *chip* no momento da medição da capacitância, é possível fazer a regressão de múltiplas variáveis da equação matricial. A concentração de cada gás é calculada utilizando-se a Equação (18).

$$[C] = [ [K]^T [K] ]^{-1} [K]^T [Ch] \quad (18)$$

## 2.12. Sensor térmico de resistência de platina

O sensor térmico de resistência de platina normalmente é mencionado como um RTD<sup>2</sup>, que são sensores cuja resistência elétrica é utilizada para determinar a temperatura em que o objeto se encontra. A platina é o RTD mais utilizado por diversas razões, principalmente pela linearidade da resistividade do material em função da temperatura e por ser um material quimicamente inerte. Além

<sup>2</sup> Resistance Temperature Detector, ou Detector de Temperatura de Resistência em português

disso, quando é necessária medição em altas temperaturas, a platina também é indicada por possuir alto ponto de fusão (aproximadamente  $1.768^{\circ}\text{C}$ ) (BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011).

Mesmo o RTD de platina possuindo resistência elétrica praticamente linear em função da temperatura, esta relação não é perfeita e a equação utilizada pelo padrão IEC 751 que relaciona as duas grandezas é um polinômio de ordem maior que um. O grau do mesmo é dependente da faixa de temperatura sendo mensurada. Para uma faixa de temperatura de  $0^{\circ}\text{C}$  a  $200^{\circ}\text{C}$ , a aproximação polinomial mais utilizada é mostrada pela Equação 19. Já para temperaturas no intervalo de  $0^{\circ}\text{C}$  a  $850^{\circ}\text{C}$ , a relação é descrita pela Equação 20 (BRUSAMARELLO, 2012).

$$R(T) = R_0 \cdot [1 + AT + BT^2 + C(T - 100^{\circ}\text{C})T^3] [\Omega], \text{ com } T \in [-200; 0]^{\circ}\text{C} \quad (19)$$

$$R(T) = R_0 \cdot (1 + AT + BT^2) [\Omega], \text{ com } T \in [0; 850]^{\circ}\text{C} \quad (20)$$

Onde  $R_0$  é a resistência do RTD de platina a  $0^{\circ}\text{C}$  e  $T$  é a temperatura em  $^{\circ}\text{C}$ . Os valores dos coeficientes A, B e C fornecidos por Weber são:

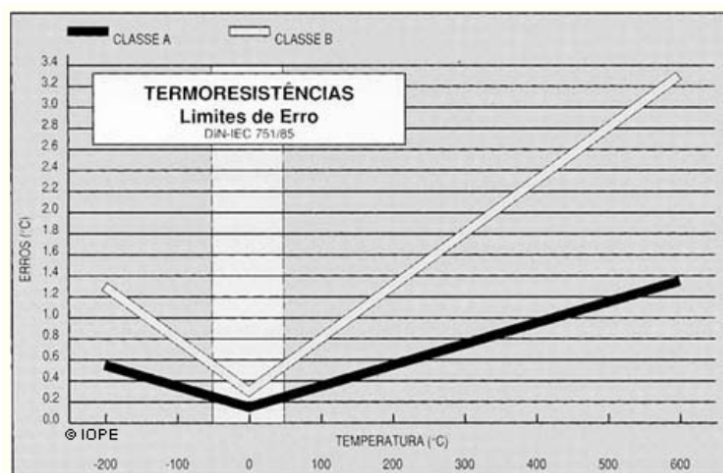
$$A = 3,9083 \cdot 10^{-3} [^{\circ}\text{C}^{-1}] \quad (21)$$

$$B = -5,775 \cdot 10^{-7} [^{\circ}\text{C}^{-1}] \quad (22)$$

$$C = -4,183 \cdot 10^{-12} [^{\circ}\text{C}^{-1}] \quad (23)$$

Para identificação dos RTDs, utiliza-se uma nomenclatura específica, que consiste na sigla do material que constitui o RTD com o valor de sua resistência a  $0^{\circ}\text{C}$  ( $R_0$ ). Por exemplo, o Pt100 é um RTD feito de platina (Pt) com uma resistência a  $0^{\circ}\text{C}$  de aproximadamente  $100\Omega$ . Além disso, RTDs de platina, de acordo com o padrão IEC 751, são subdivididos em duas categorias, sendo elas classe A e classe B. A classe A de termômetros de resistência de platina apresenta menor tolerância, tanto no valor absoluto de  $R_0$  quanto nos valores dos coeficientes que modelam o comportamento da resistência em função da temperatura, do que a classe B. O comportamento de tolerância para RTDs de platina das classes A e B é exposto na Figura 3.

**Figura 3.** Comportamento da tolerância para sensores de platina das classes A (preto) e B (branco).



Fonte - IOPE, 2022.

Um problema comum para sensores do tipo RTD é o efeito do aquecimento do mesmo devido ao efeito Joule, o que pode causar um desvio entre a temperatura do mensurando e a temperatura do

RTD. Esse comportamento costuma ser expresso com auxílio da constante de dissipação térmica, mostrada pela Equação 24, onde  $P_1$  é a menor potência dissipada pelo RTD,  $P_2$  é a maior potência dissipada pelo RTD,  $R_1$  é o valor da resistência quando o RTD dissipa a potência  $P_1$  e  $R_2$  é o valor da resistência quando o RTD dissipa a potência  $P_2$ . Além disso,  $s$  é a sensibilidade do RTD em uma determinada temperatura, definida pela Equação 25 (BRUSAMARELLO, 2012).

$$\delta = \frac{s(P_2 - P_1)}{(R_2 - R_1)} \left[ \frac{W}{^\circ C} \right] \quad (24)$$

$$s = \frac{\partial R(T)}{\partial T} \left[ \frac{\Omega}{^\circ C} \right] \quad (25)$$

A relação entre a constante de dissipação térmica e o desvio de temperatura resultante é mostrado pela Equação 26.

$$\Delta T = \frac{P}{\delta} [^\circ C] \quad (26)$$

Onde  $P$  é a potência elétrica dissipada no RTD.

Outro efeito que precisa ser considerado ao realizar medições de temperatura com RTDs é o tempo necessário para que o resistor atinja o equilíbrio térmico com o mensurando. Costuma-se expressar esse intervalo de tempo na forma de uma constante de tempo. A constante de tempo  $\tau$  do RTD é definida como sendo o tempo necessário para que o sensor atinja 63,2% da diferença total de temperatura entre o mensurando e o sensor. Ou seja, caso o RTD esteja em uma temperatura  $T_1$  com um valor de resistência  $R_{T1}$  e o mensurando esteja em uma temperatura  $T_2$ , a constante de tempo pode ser calculada como o instante em que a condição da Equação (27) é cumprida.  $R_{T2}$  é o valor da resistência do RTD quando o mesmo está com temperatura  $T_2$ .

$$R(t = t_{90}) = R_{T1} + 0,9 \cdot (R_{T2} - R_{T1}) [\Omega] \quad (27)$$

Existe também um parâmetro conhecido como tempo de resposta  $t_{RTD}$  do sensor, que é definido como sendo cinco vezes a constante de tempo, como mostra a Equação 28. O tempo de resposta do RTD é definido como sendo o tempo necessário para que o sensor atinja 99,3% da diferença total de temperatura entre o mensurando e o sensor.

$$t_{RTD} = 5\tau \quad (28)$$

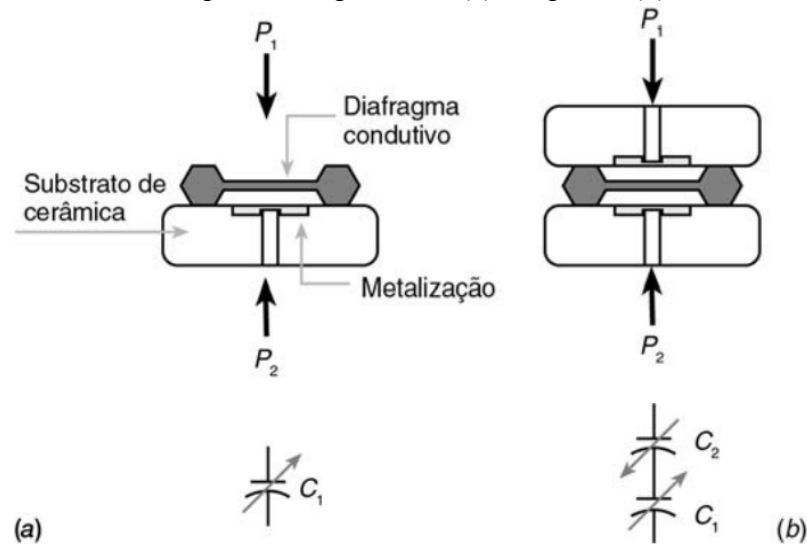
A constante de tempo e consequentemente o tempo de resposta de um sensor RTD depende de diversas variáveis, como o material cuja temperatura está sendo mensurada, seu estado físico, sua propagação térmica e, no caso de fluidos, o fluxo do mesmo. Dessa forma, é necessário que, para correta caracterização do sensor para determinada aplicação, a constante de tempo e o tempo de resposta sejam obtidos através de medições.

### 2.13. Sensor de pressão capacitivo

Sensores de pressão capacitivos possuem capacitância dependente da pressão aplicada. Sua estrutura física consiste em pelo menos um terminal metálico inserido em um substrato de cerâmica, um diafragma condutivo e um dielétrico os separando. A forma mais simples desse tipo de sensor é o sensor de pressão capacitivo simples. Colocando-se um segundo substrato de cerâmica com terminal

metálico do lado oposto do diafragma, pode-se obter um sensor de pressão capacitivo diferencial. As duas estruturas (simples e diferencial) são mostradas na figura 4. O substrato de cerâmica atua como um isolante elétrico e mecânico, de modo a minimizar o efeito do ambiente externo no interior do sensor capacitivo. O diafragma condutivo e o terminal metálico funcionam como duas placas de um capacitor de placas paralelas (BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011).

**Figura 4.** Sensores de pressão capacitivos (a) simples e (b) diferencial.



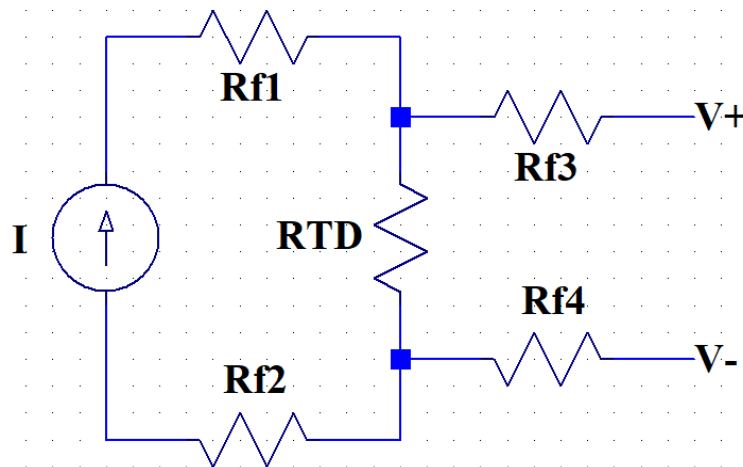
**Fonte -** BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011.

Quando o sensor de pressão capacitivo simples é submetido a uma certa pressão, o diafragma condutivo sofre uma deformação no sentido da força resultante. Essa deformação varia o comprimento do dielétrico e, segundo a Equação 1, causa uma modificação na capacitância do sensor. A relação entre a pressão aplicada e a capacitância do sensor não é linear, necessitando de processamento em *hardware* ou em *software* para linearização.

No caso do sensor diferencial, quando uma pressão é aplicada, a deformação do diafragma faz com que um dos capacitores tenha sua capacitância aumentada e o outro tenha sua capacitância diminuída. A vantagem da utilização do sensor de pressão capacitivo diferencial está no cancelamento de efeitos comuns indesejados que podem afetar o sistema.

#### 2.14. Medição a quatro fios

Quando se deseja mensurar valores de impedância elétrica, dependendo do módulo da impedância sendo mensurada e da distância entre o sensor e o circuito de aquisição de sinal, a resistência elétrica dos fios que conectam o sensor com o circuito de aquisição não pode mais ser considerada como desprezível sem incorrer em erro considerável na medição. Uma técnica que pode ser implementada de modo a fazer a correção na medição de impedância é a medição a quatro fios. A topologia é mostrada na Figura 5, onde  $R_{f1}$ ,  $R_{f2}$ ,  $R_{f3}$  e  $R_{f4}$  são as resistências dos fios que conectam o sensor com o restante do circuito de aquisição de sinal, RTD é um resistor dependente da temperatura que se deseja mensurar e  $V^+$  e  $V^-$  são as tensões que serão medidas pelo circuito (WEBSTER & EREN, 2014).

**Figura 5.** Esquema de medição a quatro fios.

Fonte - Autores.

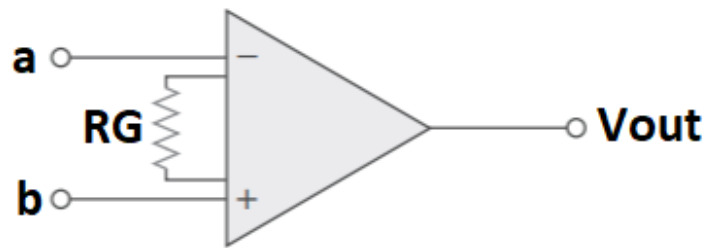
A medição a quatro fios consiste em aplicar uma corrente conhecida entre dois terminais conectados ao RTD e colocar uma alta impedância de saída nos dois terminais restantes, de modo a medir a tensão entre os dois nós. A alta impedância de saída nos terminais que se deseja mensurar a tensão faz com que exista uma fuga de corrente muito baixa nos fios representados por  $R_{f3}$  e  $R_{f4}$ , resultando em uma queda muito baixa de tensão nos fios, afetando fracamente o valor de tensão lido pelo equipamento. Outra vantagem da topologia é a linearidade entre o valor de impedância ou, nesse caso em específico, de resistência elétrica, e a tensão mensurada. Quando a impedância de saída dos terminais de medição de tensão tende ao infinito, a relação entre a resistência de um RTD e a diferença de potencial medida é representada pela Equação 29 (WEBER, 2022).

$$\Delta V = V_{(+)} - V_{(-)} = R_{RTD} \cdot I \quad [\text{V}] \quad (29)$$

### 2.15. Amplificador de Instrumentação

O amplificador de instrumentação (IA) é um dos circuitos mais úteis e versáteis para medições de precisão e controle de processos, amplificando sinais diferenciais e oferecendo alta impedância de entrada. Essas características fazem com que o amplificador de instrumentação seja um circuito mais resistente a ruídos e com melhor precisão na medição da tensão diferencial. Algumas aplicações típicas dos IAs são amplificadores de isolamento, amplificadores de termopares e sistemas de aquisição de dados (ALEXANDER & SADIKU, 2013).

Os IAs são utilizados extensivamente no condicionamento de pequenos sinais, por isso é muito comum se utilizar encapsulamentos integrados com essa configuração. As características, parâmetros de *datasheets* e modelos disponíveis no mercado variam de acordo com a aplicação em específico (BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011). A Figura 6 mostra o diagrama esquemático do amplificador de instrumentação que tem seu ganho  $G$  controlado por  $R_G$ .

**Figura 6.** Diagrama esquemático do amplificador de instrumentação.

**Fonte** - Adaptado de ALEXANDER & SADIKU, 2013.

A tensão de saída do amplificador de instrumentação é descrita pela Equação 30.

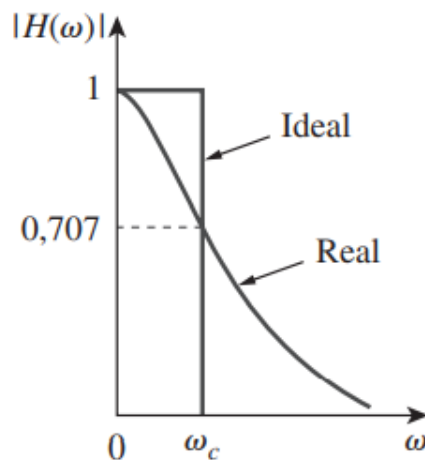
$$V_{OUT} = (V_b - V_a) \cdot G(R_G) \quad [V] \quad (30)$$

### 2.16. Filtros (Passa-Faixa e Passa-Baixa)

Um filtro é um circuito projetado para deixar passar sinais com frequências desejadas e rejeitar ou atenuar outros. Para falarmos de filtros é importante destacarmos dois conceitos importantes: a resposta em frequência e a função transferência. A resposta em frequência de um circuito é o comportamento do módulo e da fase do sinal de saída em função da frequência do sinal de entrada. A função de transferência  $H(\omega)$  de um circuito é a razão, dependente da frequência, entre uma saída fasorial  $Y(\omega)$  (a tensão ou corrente de um elemento) e uma entrada fasorial  $X(\omega)$  (fonte de tensão ou corrente).

A frequência de meia potência, equivalente à frequência de corte nos gráficos de Bode, no contexto de filtros é conhecida como frequência de corte  $\omega_C$ , e é obtida ajustando-se a amplitude de  $H(\omega)$  para  $1/\sqrt{2}$  e calculando a frequência correspondente. A frequência de corte também é denominada frequência de aumento de decaimento. O conteúdo espectral de um sinal portador de informações ocupa uma faixa de frequência com extensão finita. Sinais com frequência dentro da faixa de passagem são transmitidos com pouca ou nenhuma distorção, ao passo que aqueles que têm frequências dentro da faixa de rejeição são efetivamente rejeitados. Deste modo, o filtro pode ser do tipo passa-baixas, passa-altas, passa-faixa ou rejeita-faixa, dependendo se ele transmite frequências baixas, elevadas, intermediárias ou todas menos as intermediárias, respectivamente (VEEN & HAYKIN, 2001).

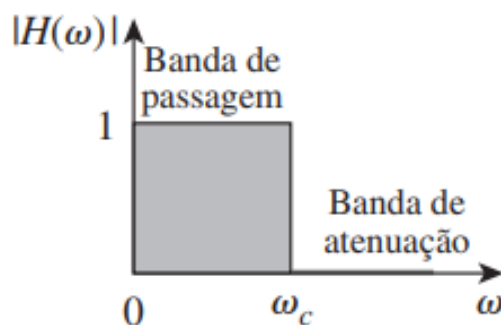
A Figura 7 mostra o comportamento do módulo da função de transferência real e ideal de um filtro passa-baixas.

**Figura 7.** Respostas de frequência ideal e real de um filtro passa-baixas.

Fonte - ALEXANDER & SADIKU, 2013.

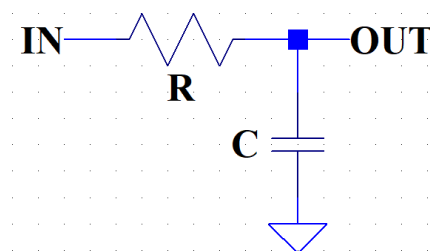
#### 2.16.1. Filtro Passa-Baixas

O filtro passa-baixas é um tipo de filtro que deixa passar frequências baixas e rejeita frequências altas, como mostra a Figura 8.

**Figura 8.** Comportamento de um filtro passa-baixas.

Fontes - ALEXANDER & SADIKU, 2013.

Um filtro passa-baixas passivo mais simples é formado por um circuito RC série, como mostra a Figura 9. A função de transferência para esse exemplo é dada pela Equação 31. Observe que  $H(0) = 1$  e que  $H(\infty) = 0$ .

**Figura 9.** Filtro passa-baixas passivo.

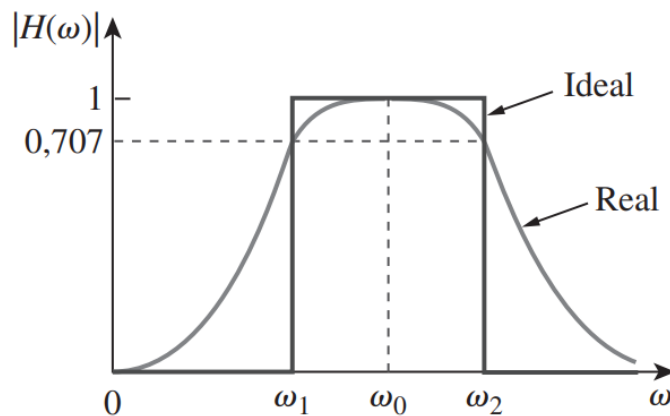
Fonte - Autores.

$$H(\omega) = \frac{1}{j\omega CR + 1} \quad (31)$$

### 2.16.2. Filtro passa-faixa

O filtro passa-faixa é um tipo de filtro que deixa passar frequências dentro de um intervalo de frequência definido e rejeita as frequências que não estão inseridas nesse intervalo, como mostra a Figura 10.

**Figura 10.** Comportamento real e ideal de um filtro passa-banda.



Fonte - ALEXANDER & SADIKU, 2013.

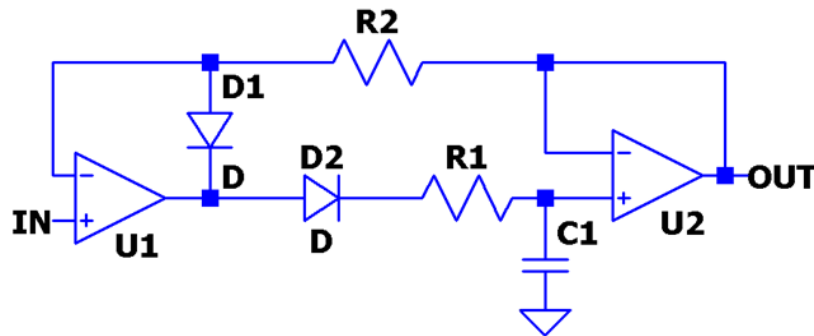
Dessa forma, o filtro passa-faixa é caracterizado por duas frequências de corte, a frequência de corte superior  $\omega_2$  e a frequência de corte inferior  $\omega_1$ . Outra forma análoga de se definir esse tipo de filtro consiste na definição de uma frequência central  $\omega_0$  e uma banda de passagem  $\omega_2 - \omega_1$  centrada em  $\omega_0$ .

### 2.17. Detector de Pico

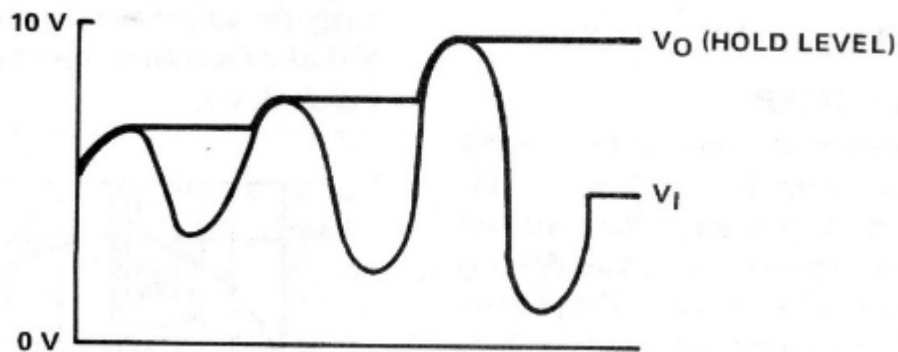
Detector de pico é uma topologia de amplificadores operacionais que permite medir a amplitude de uma senóide. Ela permite converter um sinal AC em um sinal DC, embora de forma crítica haja ainda um efeito de *ripple* AC ao redor de uma tensão DC.

O capacitor que armazena a carga que manterá o nível DC carregado. É interessante utilizar portas MOS como chaveamento de descarga do capacitor da topologia, sua alta impedância de entrada permite que ele não interfira no circuito quando seu *gate* não é polarizado.



**Figura 11.** Topologia Clássica do Detector de Pico

Fonte - KELLEY & ALONSO, 2022.

**Figura 12.** Sinal de Saída e Entrada do Detector de Pico

Fonte - Autor desconhecido<sup>3</sup>

## 2.18. ADC

No momento em que precisamos converter um sinal analógico para um sinal digital temos de pensar em projetos de sistemas de aquisição de dados. A afirmação anterior se faz verdadeira uma vez que precisamos interpretar e manipular estes sinais por meio de sistemas digitais. Dentro do processo de digitalização temos a etapa de *anti-aliasing* que nada mais é do que um filtro que retira frequências desnecessárias e prejudiciais ao nosso sistema. Este processo pode ser feito por meio da implementação de um filtro RC, por exemplo.

Se durante o tempo de conversão ( $t_c$ ) a amplitude do sinal de entrada (sinal analógico – V) mudar, o resultado da conversão corresponderá a algum dos valores da entrada durante o tempo que durou a conversão. Para que essa incerteza seja inferior ao 1 LSB<sup>4</sup> (bit menos significativo) do ADC (conversor analógico para digital) a relação da Inequação 32 deve ser respeitada,

<sup>3</sup> Imagem retirada de busca na internet por “detector de pico”, porém com autor desconhecido.

<sup>4</sup> least significant bit, em inglês.

$$\frac{dV}{dt} \leq \frac{M}{2^{n-1} \times t_c} \quad (32)$$

onde  $M$  representa a margem das tensões de entrada do ADC (normalmente indicada por  $M$  ou  $V_{MAX}$ ),  $n$ , a quantidade de bits do ADC,  $t_c$ , tempo de conversão do conversor ADC, e a derivada da tensão em relação ao tempo indica a velocidade máxima de alteração na entrada do ADC. (BALBINOT & BRUSAMARELLO, 2011).

No conversor ADC a resolução da amplitude é dada em termos do número de bits do instrumento (tipicamente 8, 12, 16 bits, ...), e o tamanho do passo da quantização ( $\delta$ ) é dado pela Equação 33.

$$\delta = \frac{\Delta V_{max}}{2^n - 1} \quad (33)$$

Para obter um sinal útil da variação de uma capacitância ou indutância, é necessário ter uma tensão ou corrente de excitação CA para o sensor e algum método para detectar as variações devido ao mensurando. Se a aplicação pretendida incluir um ADC, seu sinal de entrada deve ser dc e dentro de uma faixa de amplitude padrão.

### 2.19. Amostragem

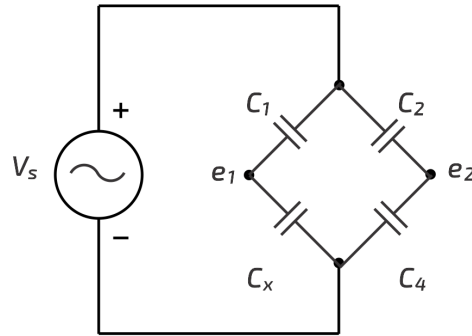
Segundo Balbinot & Brusamarello, a amostragem pode ser definida como um processo de discretização de um sinal analógico que tem como objetivo facilitar e/ou viabilizar a leitura e armazenamento deste sinal por meio de, por exemplo, um microprocessador.

O teorema de Nyquist diz que a taxa de amostragem precisa ser pelo menos duas vezes maior que a maior frequência do sinal. Ao respeitar esta regra, evita-se erros na representação do sinal do sensor/mensurando.

### 2.20. Ponte Capacitiva

A medição de ponte é um estilo clássico em engenharia elétrica de obtenção de parâmetros de impedâncias elétricas, podendo ser classificadas em pontes por detecção de nulo ou pontes por deflexão. Neste projeto, iremos utilizar pontes por deflexão para obter uma faixa de valores mensuráveis ao invés de obter apenas um valor altamente preciso (caso de uma ponte de detecção de nulo). A medição de ponte envolve geralmente uma fonte e conjunto de 3 impedâncias bem conhecidas, onde uma quarta tem seu valor determinado em função da fonte e do trio de impedâncias. A tensão diferencial, aquela entre  $e_1$  e  $e_2$ , permite relacionar todos os componentes da ponte (BARBOSA, 2019).

A ideia de uma ponte estritamente capacitiva é uma forma de criar um equivalente de Ponte de Wheatstone, porém para capacitores. A fonte de excitação da ponte é AC, e a relação de impedâncias típica é um divisor de impedância, e sua divisão é inversa ao de um resistor, ou seja, a tensão depende da impedância série a que se deseja calcular e não sua impedância sobre a impedância total do ramo onde se encontra.

**Figura 13.** Ponte Capacitiva.**Fonte - Autores.**

$$e_1 = \frac{C_1}{C_x + C_1} \cdot V_s \quad (34)$$

$$e_2 = \frac{C_2}{C_2 + C_4} \cdot V_s \quad (35)$$

A tensão de  $e_2$  possui amplitude constante Já a amplitude da tensão de  $e_1$  é dependente do valor da capacitância do mensurando, como mostram as Equações 34 e 35. A sensibilidade da tensão  $e_1$  pode ser definida como a derivada de  $e_1$  em relação a capacitância  $C_x$ . A fim de se escolher um valor de capacitância para  $C_1$  de modo a maximizar a sensibilidade do circuito, utiliza-se a relação descrita pela Equação 36, onde 's' é a sensibilidade. A partir desse cálculo, chega-se na Equação 37.

$$\frac{\partial |s|}{\partial C_1} = 0 \quad (36)$$

$$C_1 = C_x \quad (37)$$

### 2.21. Correlação linear de Pearson

O coeficiente de correlação linear de Pearson é um número que pode assumir qualquer valor real no intervalo de  $[-1; 1]$  e que mede o grau de linearidade entre duas variáveis. Quando o módulo do coeficiente de correlação linear de Pearson é próximo de 1, a relação entre as duas variáveis sendo analisadas é muito próxima a uma relação linear, com sua relação podendo ser aproximada sem grande erro pela equação de primeiro grau  $y = ax + b$ , onde 'a' e 'b' são constantes reais e 'x' e 'y' são as variáveis sendo analisadas. O sinal do coeficiente de correlação linear de Pearson avalia a inclinação da reta de correlação linear, ou seja, se elas são diretamente ou inversamente proporcionais (WINTER *et al.*, 2016).

### 2.22 Correlação monótona de Spearman

O coeficiente de correlação monótona de Spearman é um número real que pode assumir qualquer valor no intervalo de  $[-1; 1]$ . Esse coeficiente expressa a intensidade com que a relação entre duas variáveis pode ser expressa como uma função monótona. Em outras palavras, caso o módulo do coeficiente de correlação monótona de Spearman for próximo a unidade, significa que, caso a variável

‘x’ aumente, a variável ‘y’ também tenderá a aumentar (caso o coeficiente de Spearman seja positivo) ou diminuir (caso o coeficiente de Spearman seja negativo) (BORTOLOSSI, 2016).

### 2.23. Rede Neural Artificial

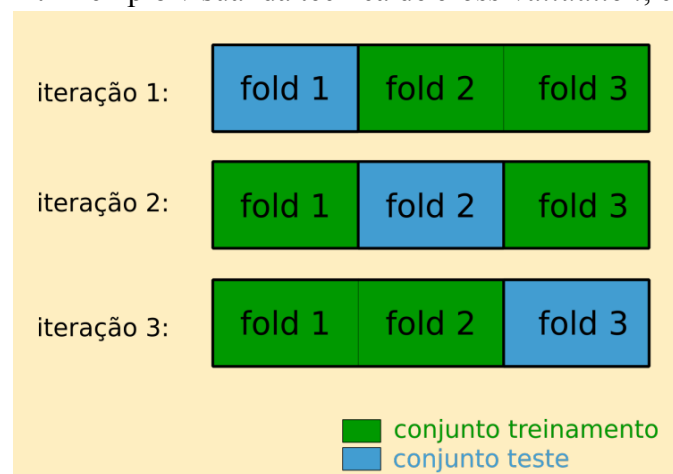
Uma rede neural artificial é um arranjo de células matemáticas computacionais, inspiradas em um cérebro, com capacidade de aprendizado de máquina e reconhecimento de padrões (HARDIK, 2020). Redes neurais artificiais geralmente são apresentadas como sistemas de "neurônios interconectados, que podem computar valores de entradas", simulando o comportamento de redes neurais biológicas. As redes neurais representam funções não lineares complexas com uma rede de unidades lineares de limiar. (RUSSEL & NORVIG, 2009)

### 2.24. Validação cruzada

A fim de evitar que, na análise dos hiperparâmetros adequados para a aplicação, alguma configuração seja favorecida pela distribuição dos dados no conjunto de treinamento, utiliza-se a técnica de validação cruzada ou *cross-validation*, que permite que se verifique os resultados sem que a divisão favoreça um dos conjuntos.

A técnica consiste em unir os conjuntos treinamento e validação em apenas um conjunto, chamado treino-validação e dividi-lo por um número inteiro ‘k’, formando ‘k’ subconjuntos do conjunto treino-validação chamados de *folds*. Então, escolhe-se apenas um dos ‘k’ *folds* para ser o conjunto validação e os *folds* restantes (k-1) são utilizados para treinar a rede neural. Feito isso, escolhe-se outro *fold* dos ‘k’ subconjuntos para ser o conjunto validação e os restantes são usados para treinamento. Esse processo se repete de modo que todos os ‘k’ *folds* são usados apenas uma vez para validação e k-1 vezes para treinamento (WEBER, 2022). O processo descrito é exemplificado pela Figura 14.

**Figura 14.** Exemplo visual da técnica de *cross-validation*, com k = 3.



Fonte - WEBER, 2022

### 2.25. R-quadrado, Soma dos Quadrados e Erro Médio Quadrático

Função de transferência é a representação matemática da relação entre a entrada e a saída de um sistema físico (LATHI, 2007). Na caracterização de funções de transferência, podem ser utilizados

parâmetros de qualidade de ajuste pertinentes à área de estatística, como  $R^2$  e erro médio quadrático (MONTGOMERY *et al.*, 2006).

$R^2$  ou R-quadrado define a pertinência percentual de termos estimados em relação a uma curva, exposta na notação decimal de 0 a 1. A soma dos quadrados é um parâmetro para visualizar o erro entre função e estimativa (soma dos quadrados de resíduos) ou entre função e média (soma dos quadrados total), sendo parâmetros que ajudam a mensurar o grau de erro da função de transferência. O erro médio quadrático é a média aritmética da soma dos quadrados dos resíduos e também permite mensurar o erro da função de transferência.

$$SQ_{resíduos} = \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2 \quad (38)$$

$$SQ_{total} = \sum_{i=1}^n (\bar{Y}_i - Y_i)^2 \quad (39)$$

$$EMQ = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2 \quad (40)$$

$$R^2 = 1 - \frac{SQ_{resíduos}}{SQ_{total}} \quad (41)$$

### 3. Metodologia Experimental

O experimento consiste no projeto, simulação e aquisição de informações essenciais para implementação de sensores de temperatura, pressão e fração molar do gás natural, na análise da base de dados e da relação das variáveis de entrada (massa molecular média e temperatura e pressão pseudo-reduzidas) com a densidade do gás e na implementação de uma Rede Neural Artificial (RNA) para estimativa da densidade real do gás natural para determinadas condições.

#### 3.1. Base de dados

Os dados utilizados no presente relatório foram extraídos do artigo de Wood & Choubinet (2020), no qual foram compilados os dados coletados por Assael *et al.* (2001), Schley *et al.* (2004), Langelandsvik *et al.* (2007) e Atilhan *et al.* (2012) em trabalhos anteriores. Os trabalhos reunidos por Wood & Choubinet (2020) tinham, no caso de Assael *et al.* (2001), Schley *et al.* (2004) e Langelandsvik *et al.* (2007), o objetivo de estudar a viscosidade em diferentes composições de gás natural. Já no caso de Schley *et al.* (2004), seu objetivo era realizar medições de pressão, densidade e temperatura do gás natural encontrado no norte do Qatar. O objetivo de Wood & Choubinet (2020) ao juntar diversos dados que continham propriedades como pressão, temperatura, composição, densidade, viscosidade era, a partir do cálculo de pressão pseudo-reduzida, de temperatura pseudo-reduzida e de massa molecular média do gás natural, estimar a densidade do gás através da utilização conjunta de uma rede neural artificial (RNA) e de uma caixa aberta transparente (TOB<sup>5</sup>).

Desta forma, a base de dados utilizada neste trabalho acadêmico contém quatro grandezas relacionadas aos gases, sendo elas a pressão pseudo-reduzida, a temperatura pseudo-reduzida, a massa molecular média e a densidade, reunindo um total de 4512 amostras. Essas grandezas foram medidas em seus respectivos trabalhos e apresentam incerteza do tipo B em seu valor apresentado. Analisando os artigos que foram compilados para a formação da base de dados, conseguimos extrair os valores de incerteza para as diferentes medições. Entretanto, como não é possível saber a origem de cada dado

<sup>5</sup> Transparent Open Box, sigla para “caixa aberta transparente” em inglês

individualmente, visto que foram todos mesclados, as incertezas para cada grandeza de todos os artigos foram comparados e então foi obtida a maior incerteza possível associada a cada variável. Tais incertezas são expostas na Tabela 2.

**Tabela 2.** Análise de Incertezas da Base de Dados

Grandeza	Incerteza Máxima Associada
Temperatura	$\pm 0,1\%$
Pressão	$\pm 0,25\%$
Concentração	$\pm 0.64\%$
Densidade	$\pm 0,3\%$

Fonte - Autores

Portanto, nossa base de dados possui três entradas, sendo elas temperatura pseudo-reduzida, pressão pseudo-reduzida e massa molecular média, e apenas uma saída, que é a densidade do gás. Como as variáveis de entrada e de saída do sistema são numéricas, temos um problema de regressão, onde se está tentando encontrar a função que melhor representa o comportamento da variável de saída para determinadas condições de entrada.

O intervalo das grandezas utilizadas são bastante abrangentes. Para determinar os valores mínimos e máximos dos intervalos, consultamos os trabalhos de Assael *et al.* (2001), Schley *et al.* (2004), Langelandsvik *et al.* (2007) e Atilhan *et al.* (2012). Dessa forma, os valores máximos e mínimos das grandezas disponíveis na base de dados principal, além das temperaturas e das pressões que resultaram nos valores pseudo-reduzidos, são expostos na Tabela 3.

**Tabela 3.** Valores mínimos e máximos das grandezas relacionadas à base de dados.

Grandeza	Valor Mínimo	Valor Máximo	Unidade
Temperatura	250	450	K
Pressão	0,1	65	MPa
Temperatura pseudo-reduzida	-3,89	0,02	-
Pressão pseudo-reduzida	2,68	29,3	-
Massa molecular média	16	130	u
Densidade	0,00038	0,753	g /cm <sup>3</sup>

Fonte - ASSAEL *et al.* (2001), SCHLEY *et al.* (2004), LANGELANDSVIK *et al.* (2007) e ATILHAN *et al.* (2012)

### 3.2. Análise da base de dados

A equação de Clapeyron (Equação 4) para gases ideais mostra que as três grandezas de entrada devem influenciar na densidade de forma perfeita, ou seja, com coeficientes de correlação com módulos unitários. Entretanto, para gases reais, é esperada certa imperfeição na correlação devido às forças moleculares de atração e de repulsão, traduzidos no fator de compressibilidade Z. Além disso, em sistemas reais, existe uma série de efeitos termodinâmicos, químicos, hidrodinâmicos e muitos outros, que acabam afetando as relações ideais dos gases. É possível entender melhor o comportamento de gases através da análise de correlação entre os fatores da base de dados.

Visando verificar quais variáveis de entrada alimentariam a rede neural artificial para estimar a densidade do gás natural, utilizou-se duas análises de correlação: a análise de correlação linear de

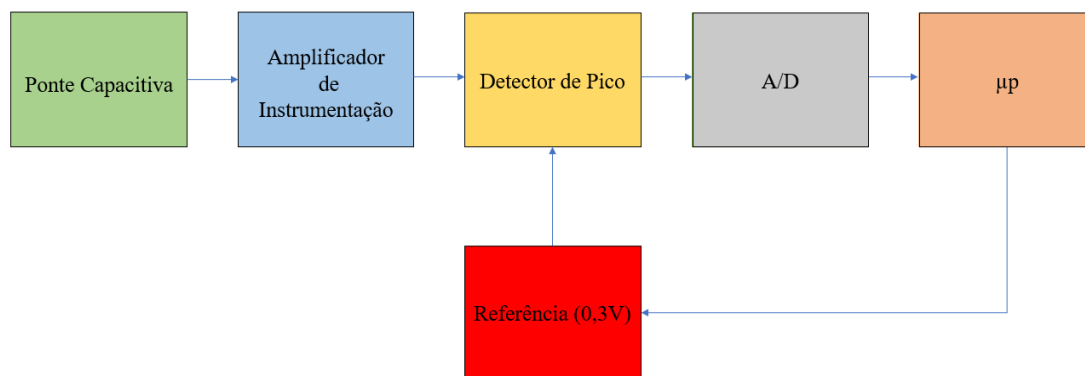
Pearson e a análise de correlação monótona de Spearman. Caso alguma variável de entrada não apresentasse algum grau relevante de correlação, a mesma seria descartada e não alimentaria a rede neural nem para treinamento nem para estimativa.

### 3.3. Sensor de fração molar e seu circuito de aquisição de sinal

Esta seção se dedica a explicar o processo de extração de dados essenciais para caracterização do sensor capacitivo de fração molar e para a construção do circuito de aquisição de sinal, tais como a faixa de variação do mensurando (composição do gás) e do sensor (capacitância), a sensibilidade do sistema, as respostas do eletrodo capacitivo para determinadas concentrações de gás e o tempo necessário para que uma mudança na composição do mensurando modifique a permissividade elétrica do dielétrico. Ademais, é explicada a escolha dos blocos utilizados para a mensuração da capacitância e a especificação dos componentes utilizados.

Para a correta determinação da fração molar do mensurando, um número de sensores capacitivos igual ou superior ao número de componentes do gás considerados é necessário, de modo a possibilitar a resolução do sistema de equações exposto na Figura 2. Para fins de simplificação, o projeto de um sensor capacitivo revestido com PIM (*Polymer of Intrinsic Microporosity*, ou polímero de microporosidade intrínseca em português) e seu circuito de aquisição de sinal é exposto, visto que o procedimento para *chips* capacitivos com diferentes revestimentos segue o mesmo processo. Alguns dos polímeros usados como revestimento por Sweelssen *et al.* são o PTAF, PIFB, MOF, C200, C800, Z26, Z38, etc.

**Figura 15.** Diagrama de blocos do circuito de aquisição de sinal do sensor capacitivo de fração molar.



**Fonte - Autores.**

#### 3.3.1. Caracterização dos sensores capacitivos de fração molar

No trabalho de Sweelssen *et al.*, o sensor capacitivo revestido com PIM foi caracterizado imergindo o instrumento a diferentes composições gasosas que simulam o gás natural em uma câmara fechada, com temperaturas que variam de 26 °C a 30 °C e a pressão constante de 4 bar. Vinte e duas misturas foram utilizadas, todas com composições já mensuradas com auxílio de um cromatógrafo de gás (Compact GC4.0). As misturas gasosas a que o *chip* capacitivo foi submetido para calibração consistem em apenas sete gases que tipicamente compõem uma grande parcela do gás natural, sendo eles o metano (CH<sub>4</sub>), o etano (C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>), o propano (C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>), o butano (ou n-butano) e seu isômero i-butano (C<sub>4</sub>H<sub>10</sub>) e o pentano (ou n-pentano) e seu isômero i-pentano (C<sub>5</sub>H<sub>12</sub>). Dessa forma, foram escolhidos polímeros de revestimento sensíveis a tais gases. Neste trabalho será abordado o sensor capacitivo revestido com PIM (Polímero de Microporosidade Intrínseca).

A fim de extrair a capacitância resultante do sistema revestido com PIM para uma determinada mistura, utilizou-se gráficos disponibilizados pelos autores. Dessa forma, os valores de capacitância

resultante para cada mistura gasosa foram obtidos com uma resolução de 2,5 fF, o que corresponde a uma incerteza padrão (considerando-se distribuição retangular) de aproximadamente 0,72 fF. A temperatura tem pouco impacto na resposta do eletrodo capacitivo, entre 1 e 2 fF/°C, variando para cada *chip* (com determinado revestimento). Entretanto, mesmo a temperatura tendo pouco impacto na capacitância, os autores a mensuraram e a levaram em consideração quando foram informadas as respostas do sistema, de forma a reduzir ainda mais sua influência indesejada na saída.

As vinte e duas misturas gasosas e sua composição são expostas na Tabela 4, onde é informada a porcentagem do volume total da mistura ocupada por determinado gás (% vol.). Além disso, também é informada a resposta do *chip* capacitivo quando a adsorção atinge o equilíbrio.

**Tabela 4.** Composição (% vol.) das misturas gasosas utilizadas para calibração e a resposta do sensor.

Mistura	CH <sub>4</sub> (%)	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> (%)	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> (%)	n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (%)	i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub> (%)	n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (%)	i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub> (%)	C (pF)
1	92,21	5,32	1,74	0,3	0,3	0,13	0	0,113
2	95,99	2,71	0,56	0	0,6	0,07	0,07	0,091
3	90,31	6,67	2,27	0,6	0	0	0,15	0,101
4	92,25	4,03	2,84	0,3	0,3	0,28	0	0,13
5	93,54	2,72	2,85	0	0,6	0,14	0,15	0,116
6	93,94	4,02	1,14	0,6	0	0	0,3	0,104
7	91,1	6,73	1,14	0,31	0,3	0,42	0	0,135
8	92,4	5,42	1,14	0	0,6	0,21	0,23	0,12
9	95,33	1,38	1,75	1,23	0,01	0	0,3	0,113
10	90,16	6,73	1,75	0,61	0,6	0	0,15	0,108
11	94,94	1,38	2,31	0	1,22	0,07	0,08	0,108
12	92,79	4,06	1,76	1,24	0,01	0,14	0	0,127
13	94,2	1,38	2,88	0,62	0,61	0	0,31	0,11
14	93,48	3,24	1,76	0	1,23	0,14	0,15	0,118
15	87,12	7,15	3,04	2,41	0,01	0,27	0	0,138
16	87,21	7,31	3,1	1	0,99	0	0,39	0,119
17	93,7	1,49	2,5	0	1,83	0,23	0,25	0,123
18	92,69	2,98	1,91	1,99	0,01	0,42	0	0,139
19	94,09	2,75	1,15	0,94	0,92	0,07	0,08	0,112
20	93,34	4,11	0,58	0	1,83	0,14	0	0,109
21	90	5,64	2,28	1,91	0,01	0	0,16	0,115
22	92,66	5,5	0	0,01	1,83	0	0	0,072

Fonte - SWEELSEN *et al.* 2020.



Analisando os valores de capacitância assumidos pelo sensor capacitivo revestido com PIM, podemos verificar que o mesmo assume, para essas vinte e duas misturas utilizadas, valores de capacitância no intervalo de 0,07 pF a 0,14 pF. Dessa forma, foi escolhido o intervalo de 0,01 pF a 0,2 pF para o projeto do sensor de capacitância abordado neste trabalho, de modo a fornecer uma certa margem de segurança, possibilitando o funcionamento do sensor quando submetido a gases com composições levemente diferentes. Observando a concentração dos gases individuais nas misturas utilizadas, pode-se verificar que a concentração de metano (% vol.) varia de 87% a 96%, a concentração de etano varia de 1% a 7%, e os outros hidrocarbonetos mais pesados variam de 0% até no máximo de 3%.

No trabalho de Sweelssen *et al.* não foi explicitada a constante de tempo relativa ao tempo que o fenômeno da adsorção demora para chegar ao equilíbrio no *chip* capacitivo. Entretanto, é possível concluir a partir dos testes expostos graficamente que os autores utilizaram um período de cerca de duas horas, com uma incerteza padrão de aproximadamente vinte minutos, para que o sistema entrasse em equilíbrio. Levando em consideração a resposta relativamente lenta do dielétrico do material capacitivo, a constante de tempo do circuito utilizado pelos autores pode ser considerada desprezível.

### 3.3.2. Análise da resposta do sensor capacitivo revestido com PIM

Relacionar a capacitância equivalente do sensor para uma determinada concentração de determinado gás é uma tarefa complexa, não linear e que é afetada por diversas variáveis controláveis e não controláveis. Para estimar a sensibilidade da capacitância do *chip* para determinadas concentrações gasosas, foi utilizado uma regressão linear múltipla com os dados coletados, onde os coeficientes expressam a sensibilidade estimada para cada hidrocarboneto em farad.

Aliado a isso, foram calculadas as matrizes de correlação de Pearson e de Spearman, com o objetivo de avaliar o impacto da variação da concentração de certo gás da mistura e verificar para quais hidrocarbonetos o revestimento PIM é mais sensível e mais adequado para mensuração.

### 3.3.3. Escolha dos blocos do circuito de aquisição de fração molar

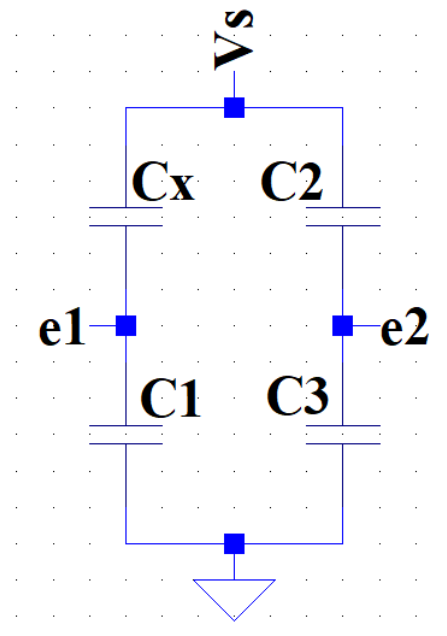
Diversos fatores foram considerados para o projeto do circuito e determinação de seus componentes, como disponibilidade comercial, precisão, resistência à variação de temperatura, além de outros mencionados no decorrer desta seção. Além disso, a redução no consumo de potência do sensor projetado é de extremo interesse, não apenas por questão de consumo energético e redução de custos, mas também a fim de minimizar o aquecimento do circuito (fator não controlável), visto que o mesmo é desenhado para funcionar ininterruptamente, melhorando a estabilidade do mesmo e a qualidade de mensuração.

#### 3.3.3.1. Ponte capacitiva

A fim de converter um valor de capacitância em um sinal de tensão, foi utilizado um circuito conhecido como ponte capacitiva, devido a simplicidade de sua implementação, de facilidade de manipulação de seus sinais de tensão de saída, do controle de corrente drenada da fonte de tensão (e consequente a potência exigida pelo bloco) e do controle da sensibilidade da amplitude da tensão em função da variação na capacitância. Ademais, o fato de que as tensões terminais da ponte ( $e_1$  e  $e_2$ ) manterem aproximadamente a mesma fase (aproximadamente noventa graus negativos, variando de acordo com a resistência intrínseca dos capacitores utilizados), o que facilita o processamento e reduz

a incerteza nos blocos sucessores à ponte. O circuito da ponte capacitiva projetada é mostrado na Figura 16.

**Figura 16.** Ponte capacitiva projetada no *LTSpice*.



**Fonte - Autores.**

Tendo em vista que a impedância de um capacitor é dependente de uma tensão alternada como nos informa a Equação 3, a ponte capacitiva foi alimentada por uma tensão senoidal de aproximadamente 3,3 V com frequência de 10 kHz. A fonte foi filtrada para remover frequências indesejadas e, com a queda de tensão devido ao filtro. Esse valor baixo de tensão se deve ao fato dos capacitores, por possuírem baixos valores de capacitância, não conseguirem armazenar uma quantidade considerável de carga sem que ocorra rompimento da rigidez dielétrica. Aliado a isso, a tensão em valores mais baixos reduz o consumo de potência do circuito e concede grande versatilidade ao projeto, podendo ser gerada por pilhas comuns em conjunto com um conversor de corrente contínua para corrente alternada ou por microprocessadores com conversores digital para analógico (DAC). A frequência de 10 kHz foi escolhida por ser facilmente encontrada comercialmente ou gerada através de osciladores ou processadores. Além disso, a mesma garante uma impedância relativamente alta na ponte, reduzindo a corrente consumida pelo bloco e consequentemente a demanda energética da ponte capacitiva.

O valor da capacitância em série com o capacitor variável ( $C_1$ ) foi escolhido de modo a deslocar o valor mínimo assumido pela tensão  $e_1$  para um valor mais baixo do que a tensão  $e_2$  (que é metade da tensão de alimentação da ponte), visando evitar valores negativos no bloco subsequente de amplificador de instrumentação, além de melhorar a sensibilidade da tensão de saída do circuito de aquisição para valores de capacitância próximos aos extremos da faixa definida. O valor definido foi de 0,22 pF. Os valores das capacitâncias  $C_2$  e  $C_3$  foram escolhidos como sendo ambos 0,22 pF de modo a manter o equilíbrio da tensão entre os dois divisores de tensão capacitivos da ponte. É importante que as capacitâncias sejam equivalentes ao valor médio assumido pelo *chip* capacitivo visto que os terminais  $e_1$  e  $e_2$  estão conectados ao circuito do amplificador de instrumentação, que possui certa impedância limitada. Ao fazer isso, garante-se que a impedância equivalente dos dois divisores capacitivos da ponte sejam similares.

### 3.3.3.2. Amplificador de instrumentação

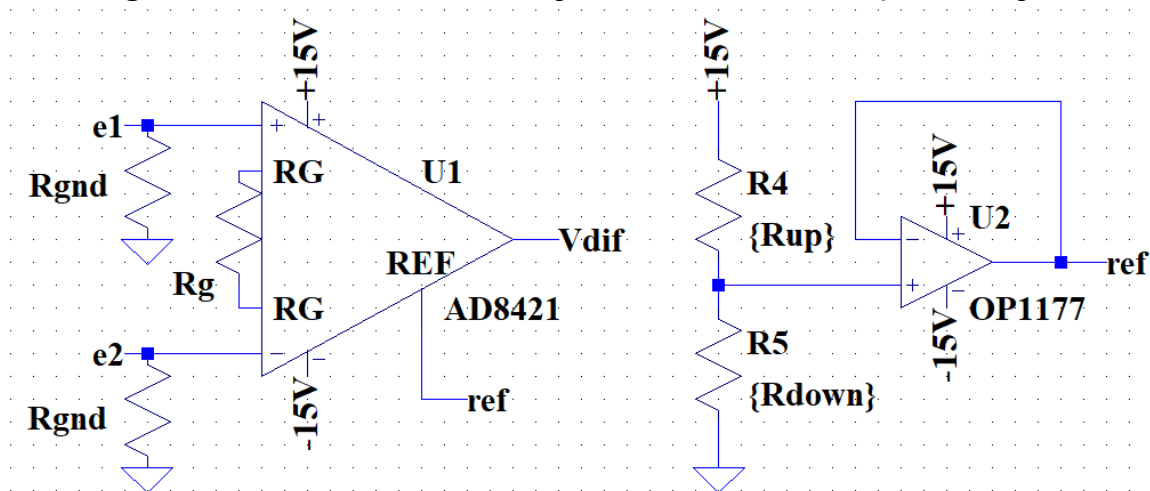
O bloco de amplificador de instrumentação tem como objetivo receber as duas tensões de saída senoidais  $e_1$  e  $e_2$  da ponte capacitiva e amplificar sua diferença. O fato de ser utilizada a diferença dos sinais de entrada garante maior resistência a possíveis ruídos do sensor capacitivo ou da fonte de alimentação. Para a realização do projeto, optou-se pelo modelo AD8421. Sua escolha foi devido a sua alta resistência a ruídos, pelo fato do controle do ganho ser realizado com a utilização de apenas um resistor e por sua alimentação contemplar uma ampla faixa de tensão, facilitando projeto e implementação. O ganho foi ajustado, de forma simulada, com o objetivo de garantir que a tensão de saída do circuito de aquisição ocupe uma faixa de tensão com variação total de 3 V (considerando 5% de margem de segurança inferior e superior), comumente utilizada em microcontroladores: o valor do resistor conectado ao AD8421 que cumpre esse propósito é de 4,5 k $\Omega$ . Para ajustar os valores de tensão de saída do bloco, o sinal diferencial de entrada é comparado com uma referência (ref) de 0,3 V. Esse valor de tensão é obtido a partir de um divisor de tensão, onde é aproveitada a tensão de alimentação de 15 V do AD8421. O divisor é isolado com auxílio de um *buffer*, implementado com o amplificador operacional OP1177, recomendado pela Texas Instruments, fornecedora do AD8421, principalmente pela sua baixa corrente de polarização, provocando pouco deslocamento da tensão ideal de referência, e pela sua alimentação similar ao AD8421 de  $\pm 15$  V.

Para fazer o contato elétrico entre o amplificador de instrumentação e as tensões terminais da ponte capacitiva, um resistor em paralelo ( $R_{gnd}$ ) é colocado, visando o descarregamento da carga armazenada nos capacitores da ponte, melhorando a estabilidade do circuito e reduzindo offset provocado pelo acúmulo de carga. O valor da resistência  $R_{gnd}$  precisa ser dimensionado corretamente, visto que, caso seu valor seja muito alto, a carga acumulada não conseguirá ser descarregada durante o semiciclo negativo da fonte de alimentação da ponte capacitiva. Além disso, caso seu valor seja muito pequeno, o resistor irá drenar a corrente que deveria carregar os capacitores da ponte, fazendo com que as tensões terminais assumam níveis muito baixos de tensão, prejudicando a sensibilidade do bloco a uma variação da capacitância. Para o dimensionamento do resistor  $R_{gnd}$ , foi utilizada a constante de tempo do circuito RC equivalente, visando o descarregamento do capacitor durante o semiciclo negativo. O cálculo é exposto na Expressão 42.

$$5\tau = 5 \cdot C_1 \cdot R_{gnd} \leq \frac{T_{10kHz}}{2} \quad (42)$$

Foi utilizada a constante de tempo  $\tau$  do circuito RC série multiplicada por 5 visto que esse é o tempo necessário para que a saída assuma 99,3% do valor final. Dessa forma, o valor de  $R_{gnd}$  calculado como 50 M $\Omega$ .

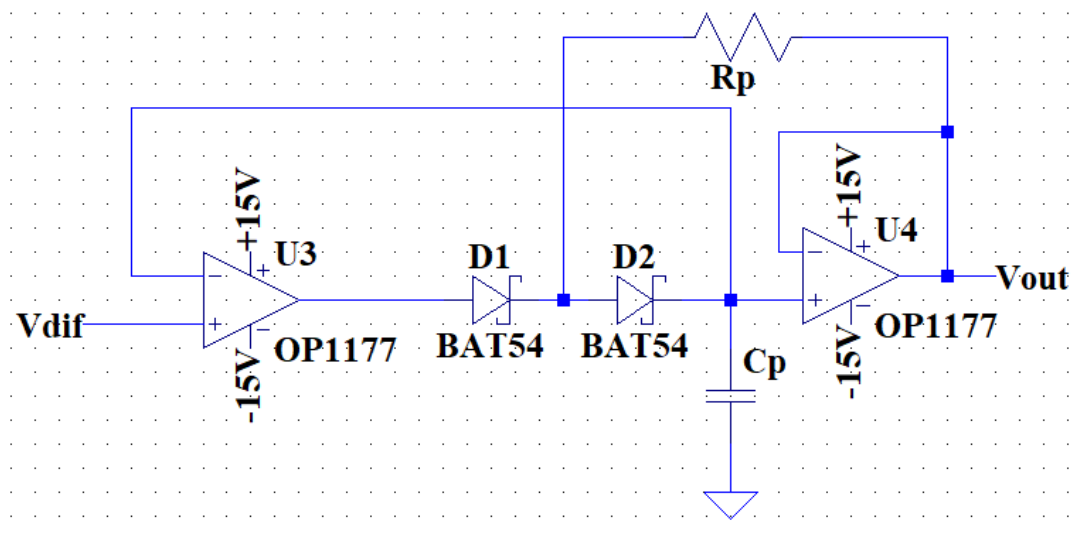
O circuito do bloco do amplificador de instrumentação é mostrado na Figura 17.

**Figura 17.** Circuito do bloco do amplificador de instrumentação no *LTSpice*.

Fonte - Autores.

### 3.3.3.3. Circuito detector de pico

Um circuito detector de pico é conectado ao terminal do amplificador  $V_{dif}$ . Sua função no projeto é transformar o sinal diferencial recebido, variável no tempo, em um sinal de corrente contínua. A saída do detector de pico é proporcional à amplitude da tensão de entrada. A tensão é mantida através do armazenamento da carga em um capacitor, fazendo com que o bloco exerça a função de *sample-and-hold* no processo de amostragem. O detector de pico projetado é mostrado na Figura 18.

**Figura 18.** Circuitos detectores de pico projetados no *LTSpice*.

Fonte - Autores.

A topologia escolhida para construção do detector de pico tem como objetivo minimizar o *ripple* da tensão de saída do bloco, reduzindo harmônicas e ruídos indesejados no projeto, causado pelo descarregamento do capacitor do circuito pelo amplificador operacional e pelo diodo que estão em contato com o mesmo.

O amplificador operacional que faz contato com o capacitor (que é o componente responsável por armazenar o nível de tensão de pico), exige uma baixa corrente de polarização, visto que, quanto maior a corrente de polarização exigida pelo *opamp*, mais rapidamente a carga armazenada no capacitor será drenada para o amplificador operacional, o que causa uma diminuição do nível de tensão do capacitor quando os diodos estão polarizados reversamente, de acordo com a Equação 2, aumentando o *ripple* na tensão de saída do bloco. Tendo isso em vista, o amplificador operacional escolhido foi o OP1177, novamente pela baixa corrente de *bias*. O *opamp* de entrada do bloco também foi definido como o OP1177 a fim de simplificar a implementação do projeto.

Como o projeto não demanda alta velocidade na informação do mensurando, visto que o tempo de resposta do sistema físico é relativamente demorado, a constante de tempo de carregamento do capacitor foi limitada apenas à frequência de 10 kHz recebida pela entrada do bloco. Ou seja, a constante de tempo do detector de pico precisa ser necessariamente pequena de modo que o capacitor consiga armazenar a tensão de pico da onda em um tempo menor ou igual a duração de meio semiciclo positivo da senóide de entrada, ou seja, 25  $\mu$ s. Para isso, foi definido que a capacitância do bloco  $C_p$  fosse de 240 nF. O valor de resistência do bloco  $R_p$  foi definido como 1 k $\Omega$ .

A fim de melhorar a resposta do sistema para pequenas variações na capacitância, foram escolhidos diodos Schottky BAT54, que possuem baixo tempo de recuperação após serem submetidos a tensão reversa. A rápida recuperação possibilita a detecção de picos levemente acima do armazenado pelo capacitor, melhorando a sensibilidade do sensor. Importante salientar que a corrente reversa do diodo não precisa ser levada em consideração no projeto do detector de pico, visto que a topologia utilizada faz com que a corrente drenada pelo diodo BAT54 do capacitor seja desprezível.

Uma adversidade da topologia escolhida é a necessidade de um circuito de controle, que tem como objetivo atuar como uma chave, descarregando a carga armazenada no capacitor de tempos em tempos. Isso é necessário para que o detector de pico consiga adaptar sua tensão de saída quando houver redução na amplitude do sinal senoidal recebido na entrada do bloco.

### 3.4. Sensor de pressão e seu circuito de aquisição de sinal

Segundo Luo *et al.*, sensores capacitivos de pressão fornecem alta sensibilidade, baixa influência da temperatura na sua resposta, pouco ruído e baixo consumo de energia, além de conseguir operar em uma ampla faixa de pressão. Dessa forma, foi escolhido implementar um sensor capacitivo de pressão para mensuração da pressão do tanque de armazenamento de gás natural. Decidiu-se realizar a medição da pressão absoluta visto que o tanque em que o gás é armazenado é completamente selado, de forma que variações na pressão atmosférica não afetam a pressão do gás natural armazenado e não se deseja mensurá-las.

O sensor capacitivo foi projetado para funcionar submetido a pressões no entorno de 3,5 MPa, adequadas para o armazenamento do gás natural utilizando-se a absorção do mesmo em monolito, segundo o trabalho de Burchell & Rogers. A faixa de pressões absolutas que o circuito de aquisição de sinal de pressão foi projetado para mensurar é de 3 MPa a 4 MPa, submetido à temperatura ambiente.

A fim de adquirir os valores de capacitância de um sensor capacitivo simples de pressão para a faixa de interesse do projeto, consultou-se o trabalho de Luo *et al.*, onde os autores construíram dois sensores de pressão capacitivos simples utilizando tecnologia MEMS (*Micro-electromechanical systems*, ou microssistemas eletromecânicos), ambos com diâmetro do diafragma de 100  $\mu$ m, um destes com diafragma de 3  $\mu$ m de espessura (C100t3) e outro com diafragma com espessura de 5  $\mu$ m (C100t5). Ambos os sensores são capazes de operar em uma faixa extensa de pressão aplicada, com pressões muito acima e muito abaixo da faixa desejada para a realização do sistema de medição de pressão para armazenamento do gás natural. Luo *et al.* caracterizaram os dois instrumentos em duas formas de operação, com e sem contato do diafragma no substrato, avaliando a sensibilidade em cada

modo. É importante salientar que o sensor consegue operar com contato visto que há uma camada de alumina ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ), material isolante, que reveste o eletrodo.

Dessa forma, foi escolhido para realização do sistema de medição de pressão o sensor capacitivo projetado por *Luo et al.* C100t3 no modo com contato entre o diafragma e o substrato. Foi escolhido o sensor com menor espessura visto que, quanto menor a espessura do diafragma, maior o deslocamento do mesmo quando uma pressão é aplicada (quando comparado com instrumento similar mas de maior espessura submetido à mesma pressão). Além disso, segundo os dados fornecidos, quando o sensor capacitivo opera na região de contato sua sensibilidade aumenta consideravelmente. Essas escolhas foram feitas visando maximizar a sensibilidade do sensor para uma determinada variação de pressão.

O capacitor C100t3 apresenta uma capacitância, quando não há pressão aplicada ao sensor, de 412,9 fF ( $C_0$ ). A sensibilidade média ( $\bar{s}$ ) desse dispositivo, quando o mesmo opera com contato, é de aproximadamente 5,3 fF/MPa. Dessa forma, é possível estimar o comportamento da capacitância em função da pressão em MPa através da Equação 43. Entretanto, o comportamento da capacitância em função da pressão não é linear. A aproximação foi utilizada visto que uma faixa muito pequena de pressão foi considerada, quando comparada a faixa de pressões medidas por *Luo et al.*, sendo possível a utilização de uma equação linear sem incorrer erros expressivos para o sistema de aquisição.

$$C(P) = C_0 + \bar{s} \cdot P = 412,9 + 5,3 \cdot P \quad [\text{fF}] \quad (43)$$

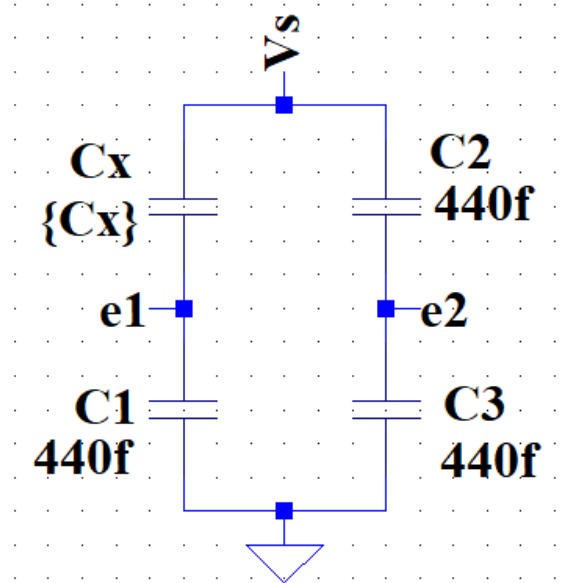
Com a Equação 43, os valores de capacitância correspondentes aos valores mínimos e máximos de pressão que o circuito de aquisição projetado se compromete a mensurar (3 MPa e 4 MPa) são de 428,8 fF e 434,1 fF respectivamente. A fim de garantir certa margem de segurança, a faixa de capacitância escolhida para ser efetivamente medida pelo sistema de aquisição é de 428 fF a 435 fF.

#### 3.4.1. Escolha dos blocos do circuito de aquisição de pressão

Os valores de capacitância assumidas pelo sensor capacitivo C100t3 projetado por *Luo et al.*, são da mesma ordem de grandeza das capacitâncias assumidas pelo sensor de fração molar do gás natural, projetado por *Sweelssen et al.*, mas os níveis de variação da capacitância do sensor de pressão são menores do que o de fração molar. Dessa forma, a topologia do circuito de aquisição de fração molar pode ser aproveitada para medir o sensor de pressão capacitivo simples, necessitando apenas de ajustes nos capacitores da ponte capacitiva, no ganho do amplificador de instrumentação e na tensão de referência que desloca a curva verticalmente.

##### 3.4.1.1. Ponte capacitiva

A ponte capacitiva utilizada para a mensuração do sensor capacitivo de pressão simples é mostrado na Figura 19.

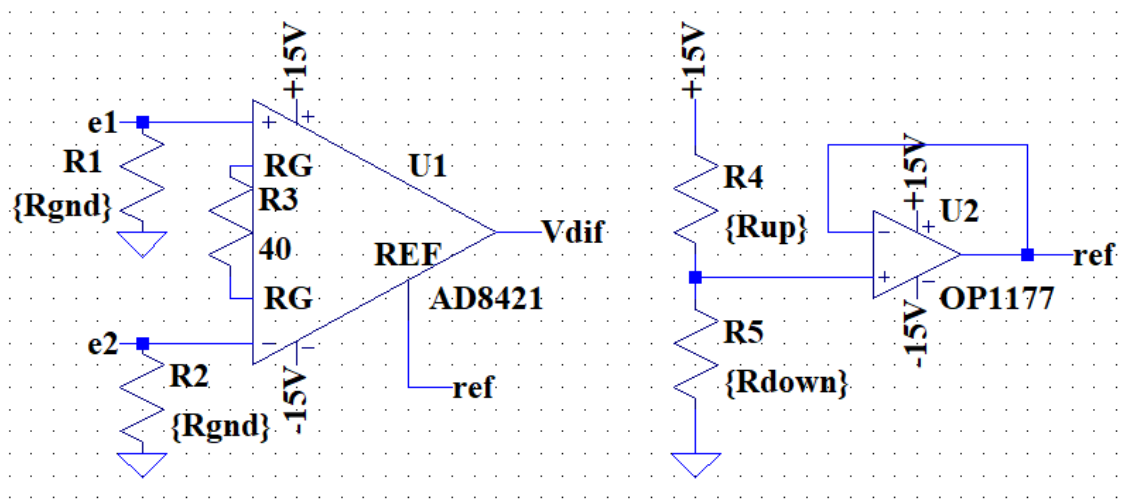
**Figura 19.** Ponte capacitiva utilizada para o circuito de aquisição de pressão.

**Fonte - Autores.**

Como o valor máximo da capacitância do sensor de pressão que se deseja mensurar é definido como 435 fF, a fim de melhorar a resolução do sistema de aquisição para capacitâncias próximas ao máximo definido, utilizou-se valores de capacitância  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  de 450 fF, mantendo a tensão  $e_2$  com módulo igual a metade da tensão de alimentação da ponte, ao mesmo tempo que  $e_1$  sofre um deslocamento vertical, o que facilita a diferenciação de capacitâncias  $C_x$  próximas ao limite superior da faixa definida. A alimentação da ponte capacitiva é a mesma do sistema de aquisição de fração molar, ou seja, 3,3 V com frequência de 10 kHz.

#### 3.4.1.2. Amplificador de instrumentação

O amplificador de instrumentação utilizado para obter a diferença amplificada das tensões terminais da ponte capacitiva  $e_1$  e  $e_2$  também foi definido como o AD8421. O ganho do bloco é de aproximadamente 250 vezes, o que corresponde a um resistor de ganho  $R_G$  de  $40\Omega$ . A tensão de referência, para realizar o deslocamento da curva para adequar a tensão de saída na faixa de 0 V a 3,3 V com 5% de margem de segurança superior e inferior é de 9 V. Utilizando a Expressão (42) para calcular o valor do resistor  $R_{gnd}$  obtém-se um valor de resistência de aproximadamente 20 M $\Omega$ . O bloco de amplificador de instrumentação equivalente para o sistema de aquisição de pressão é mostrado na Figura 20.

**Figura 20.** Circuito do bloco do amplificador de instrumentação do sistema de aquisição de pressão.

Fonte - Autores.

#### 3.4.1.3. Circuito detector de pico

O detector de pico utilizado para o sistema de aquisição de pressão possui resistência  $R_p$  de 1 k $\Omega$  e capacitância  $C_p$  de 1  $\mu$ F, de acordo com a Figura 18.

### 3.5. Sensor de temperatura e seu circuito de aquisição de sinal

O sensor de temperatura será utilizado para monitoramento do tanque de armazenamento do gás natural a temperatura ambiente (BURCHELL & ROGERS, 2020). Segundo o IBGE<sup>6</sup>, a temperatura na região sul do Brasil assume valores mínimos próximo a 0 °C no inverno e pode atingir temperaturas máximas de aproximadamente 40 °C no verão (NIMER, 1989). Dessa forma, a faixa de temperatura ambiente que o sensor de temperatura e seu circuito de aquisição foram projetados para funcionar é de -10°C até 50°C, incluindo-se uma faixa de segurança de 10°C para cada extremo da faixa avaliada pelo IBGE. Utilizando-se as Equações 19 e 20, podemos calcular que o valor de resistência do Pt100 assume valores (sem consideração da incerteza) entre 95  $\Omega$  e 120  $\Omega$  aproximadamente.

#### 3.5.1. Escolha do sensor de temperatura

A medição de temperatura é algo crítico no sistema de monitoramento de armazenamento do gás natural projetado, visto que a temperatura informada pelo sensor e seu circuito de aquisição serão utilizados para correção do efeito térmico nos sistemas de aquisição de fração molar e de pressão, além de a temperatura ser utilizada para o processamento da saída do sensor de fração molar, como mostra a Figura 2. Dessa forma, o sensor de temperatura escolhido foi o Pt100 classe A. O valor de 100  $\Omega$  foi escolhido de forma a minimizar o efeito dos fios que fazem o contato do sensor com o sistema de aquisição de sinal e também por ser um modelo facilmente encontrado comercialmente. A platina foi escolhida pelo fato de apresentar boa linearidade na faixa de temperatura escolhida. Além disso, foi selecionado RTD da classe A pela sua menor incerteza, necessária para possível implementação de correção do efeito da temperatura nos outros sistemas de aquisição.

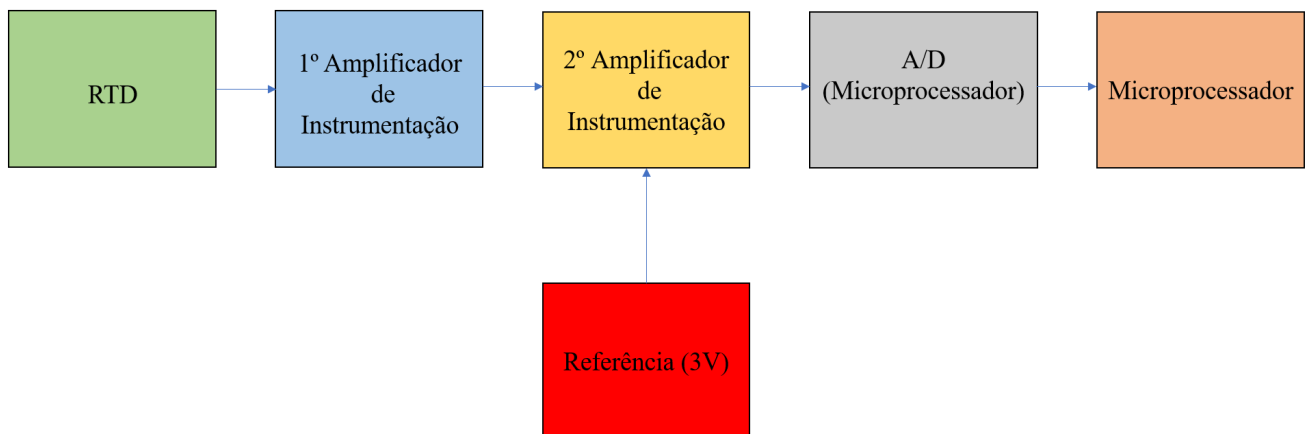
<sup>6</sup> Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística



### 3.5.2. Escolha dos blocos do circuito de aquisição de temperatura

A escolha dos blocos do circuito de aquisição de temperatura priorizou a realização de uma medida relativamente precisa, devido a dependência do sistema de medição como um todo da correta aquisição da temperatura e que permitisse uma versatilidade quanto a distância entre o circuito de aquisição e o sensor de platina. Além disso, desejou-se aproveitar toda a faixa de tensão disponível, a fim de diminuir a incerteza devido a resolução do conversor analógico/digital na medição. Os blocos de ajuste da faixa de tensão foram inspirados no documento “*Designing Gain and Offset in Thirty Seconds*”, da Texas Instruments. A Figura 21 mostra o diagrama de blocos do circuito de aquisição de sinal de temperatura.

**Figura 21.** Diagrama de blocos do circuito de aquisição de sinal de temperatura.

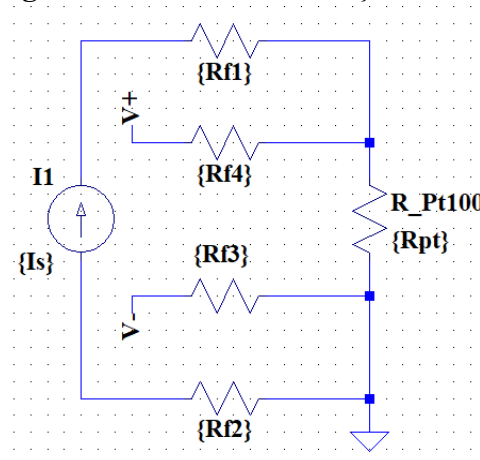


Fonte - Autores.

#### 3.5.2.1. Medição a 4 fios

A fim de fornecer uma medição precisa da temperatura e possibilitar uma maior distância entre o sensor de platina e o seu circuito de aquisição de sinal, foi escolhida a topologia a 4 fios para avaliar a resistência equivalente do Pt100. A corrente constante que alimenta o RTD é de aproximadamente 5mA. O circuito do bloco é mostrado na Figura 22.

**Figura 22.** Circuito de medição a 4 fios.



Fonte - Autores.

A fonte de alimentação foi escolhida como sendo 5mA de forma a ser um valor amplamente disponível comercialmente e por não ser um valor tão elevado a ponto de exigir uma potência

relativamente alta mas não muito baixo a ponte de exigir muita amplificação do sinal, o que acaba amplificando ruído da fonte de corrente. A fim de fornecer essa corrente, foi escolhido o regulador de corrente LM234. A resistência dos fios foi definida como sendo de  $10\Omega$ , ou seja, cerca de 10% da resistência do Pt100 na faixa de temperatura mensurada. O valor de resistência dos fios foi arbitrado de forma a superdimensionar o valor de sua resistência e avaliar a resposta do sistema para essas condições.

Considerando os valores máximos e mínimos que a resistência do Pt100 pode assumir para a faixa de temperatura desejada, pode-se calcular a faixa de tensão sobre o RTD com auxílio da Equação (29). Os valores de tensão mínimo e máximo foram calculados como aproximadamente 0,48V e 0,60V, ou seja, uma variação de cerca de 0,12V.

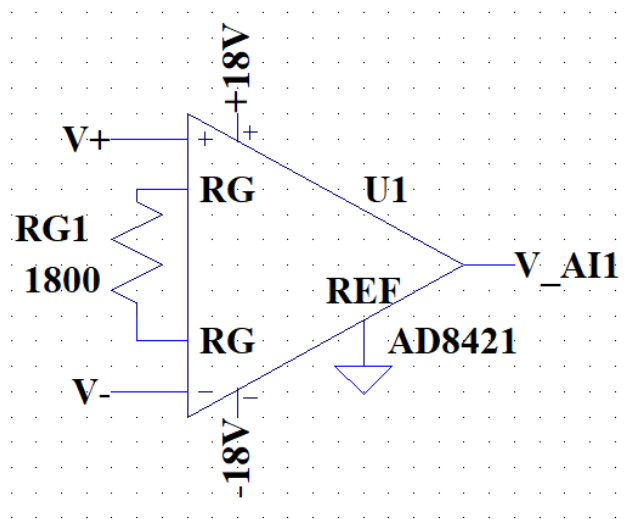
Os blocos subsequentes do sistema de aquisição de temperatura têm a função de amplificar o sinal, de modo que a variação da tensão ocupe a faixa completa de 0V a 3,3V com 5% de margem de segurança (superior e inferior), além de ajustar o valor mínimo assumido pela tensão, quando a temperatura é de  $-10^{\circ}\text{C}$ , para o limite inferior da banda de tensão definida. Dessa forma, para transformar a faixa de saída de 0,12 para a faixa desejada de aproximadamente 3V, precisa-se de uma amplificação total de cerca de 25 vezes (ganho desejado  $G_{\text{DESEJADO}}$ ). O ganho será dividido em dois estágios para evitar saturação dos componentes e para realizar o deslocamento vertical da curva de tensão em um desses estágios.

### 3.5.2.2. Primeiro amplificador de instrumentação

O primeiro amplificador de instrumentação tem a função de mensurar e amplificar a tensão sobre o RTD. Ou seja, as entradas do primeiro amplificador de instrumentação são as tensões  $V_+$  e  $V_-$  mostradas na Figura 22, calculam a diferença entre elas e multiplicam por um ganho controlado. O ganho escolhido foi de cerca de 6,5 (o que corresponde a um resistor de controle de ganho de cerca de  $1800\Omega$ ), ou seja, a tensão sobre o Pt100 é amplificada 6,5 vezes pelo bloco. Esse valor de ganho foi escolhido de modo que a tensão mínima de saída do bloco  $V_{\min AI1}$  seja um pouco acima de 3V, como mostra a Equação 44.

$$V_{\min AI1} = V_{\min RTD} \cdot G_1 = 0,48\text{ V} \cdot 6,5 = 3,12\text{ V} \quad (44)$$

A finalidade de fazer com que o valor mínimo de tensão de saída do primeiro amplificador de instrumentação esteja acima de 3V é realizar o deslocamento vertical da curva da tensão  $V_{AI1}$  com um valor inteiro de tensão, que é fácil de ser obtido com auxílio de um divisor de tensão. O bloco do primeiro amplificador de instrumentação é mostrado na Figura 23.

**Figura 23.** Bloco do primeiro amplificador de instrumentação.

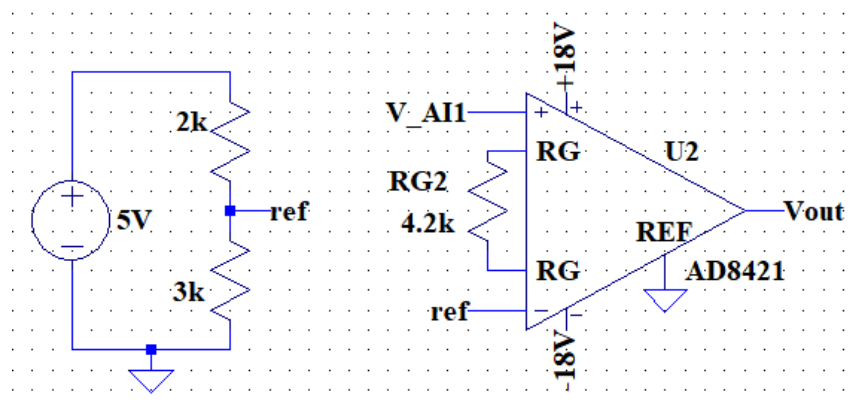
Fonte - Autores.

A saída do bloco é mostrada pela Equação 45.

$$V_{AI1} = (V_{(+)} - V_{(-)}) \cdot G_1 = (R_{RTD} \cdot I) \cdot G_1 = [R_{RTD}(T) \cdot 5mA] \cdot 6,5 \quad (45)$$

### 3.5.2.3. Segundo amplificador de instrumentação

O segundo bloco de amplificador de instrumentação é responsável por realizar o deslocamento vertical da curva de tensão  $V_{AI1}$  advinda do primeiro amplificador de instrumentação com a subtração de 3V. O bloco também é responsável por fornecer o restante do ganho necessário para que o sinal se adeque a faixa de saída de 3,3V com 5% de margem superior e inferior de segurança. O segundo amplificador de instrumentação é mostrado na Figura 24.

**Figura 24.** Bloco do segundo amplificador de instrumentação.

Fonte - Autores.

O deslocamento da curva é feito através da diferença entre a tensão de saída do primeiro amplificador de instrumentação e a tensão de 3V obtida através de um divisor de tensão de uma fonte de 5V, utilizada para alimentação de amplificadores operacionais de outros sensores (caso queira-se

trocar o valor nominal da fonte, basta trocar os alterar os resistores do divisor de tensão). Para definir o ganho do bloco, utilizou-se a Equação 46.

$$G_2 = \frac{G_{DESEJADO}}{G_1} = \frac{25}{6,5} \approx 3,85 \quad (46)$$

A saída do bloco é a saída do sistema de aquisição de sinal de temperatura  $V_{OUT}$ , e é caracterizada pela Equação 47.

$$V_{OUT} = (V_{AI1} - V_{ref}) \cdot G_2 = [(R_{RTD}(T) \cdot 5mA) \cdot 6,5 - 3V] \cdot 3,85 \quad (47)$$

Ambos blocos de amplificador de instrumentação foram construídos com o modelo de amplificador de instrumentação AD8421.

### 3.6. Filtros

A fim de melhorar a precisão do sensor projetado, além de sua estabilidade, duas etapas de filtragem são utilizadas no projeto. O objetivo da primeira etapa de filtragem é a redução da influência das principais harmônicas geradas pela fonte de excitação da ponte capacitiva (10 kHz a 20 kHz). De modo prático, o filtro da saída é uma escolha de *design* que “economiza” as etapas de filtragem ao usar 1 filtro para duas funções diferentes. O primeiro objetivo do segundo filtro é realizar a remoção do sinal de excitação na saída do circuito, removendo o *ripple* causado por ele, o segundo objetivo é forçar a rejeição de sinais AC com metade da frequência de amostragem.

Ambos os filtros foram projetados com o auxílio da ferramenta *Filter Design Tool* da Texas Instruments e o *design* foi validado pelas simulações AC do LTSpice. A ferramenta da Texas tem algumas limitações e pode considerar os circuitos bem mais próximos de um OpAmp ideal do que de fato são, por isso a simulação do LTSpice foi essencial para validar se existe um ganho (positivo<sup>7</sup> ou não) e se de fato o circuito atende aos parâmetros de *design* desejados. As topologias foram escolhidas de modo a maximizar o fator de qualidade (Q) do filtro. A ordem dos filtros é definida conforme a frequência de corte, frequência de parada e rejeição desejada. A velocidade com que ocorre o corte na frequência deve ser balanceada para que a ordem do filtro não seja elevada e para que de fato haja um OpAmp que consiga excursionar o sinal.

Como nosso objetivo é remover apenas a magnitude do sinal, ou seja, não há preocupação com a fase, os tipos de filtro foram definidos conforme causavam a melhor queda de amplitude e causando pouco *ripple*. O tipo Chebyshev foi escolhido para fazer o passa-baixa e o Butterworth para o passa-faixa. O *design* de ambos os filtros foi adaptado para valores de capacitância e resistência comercial. No caso das resistências, algumas foram adaptadas para valores de 2 resistências comerciais em série.

Os 3 sistemas de aquisição de sinal do projeto compartilham características em comum, então foi tomada a escolha de *design* de realizar 2 filtros que pudessem ser reutilizados para todos os sistemas de aquisições. Todos os sensores tem tempo de resposta alta e frequência de interesse baixa, aqueles que têm ponte capacitiva são excitados pela mesma frequência de 10 kHz, então ao fazer o *sampling* com 2 kHz, é possível projetar os mesmos filtros para todos eles.

<sup>7</sup> ganho em dB

Para o passa-baixa, a rejeição em 1 kHz é aproximadamente 72 dB e em 10 kHz é 132 dB. E para o passa-faixa, a rejeição em 1 kHz é -120 dB, em 10 kHz o ganho é 12,71 mdB, e em 100 kHz a rejeição é -120 dB.

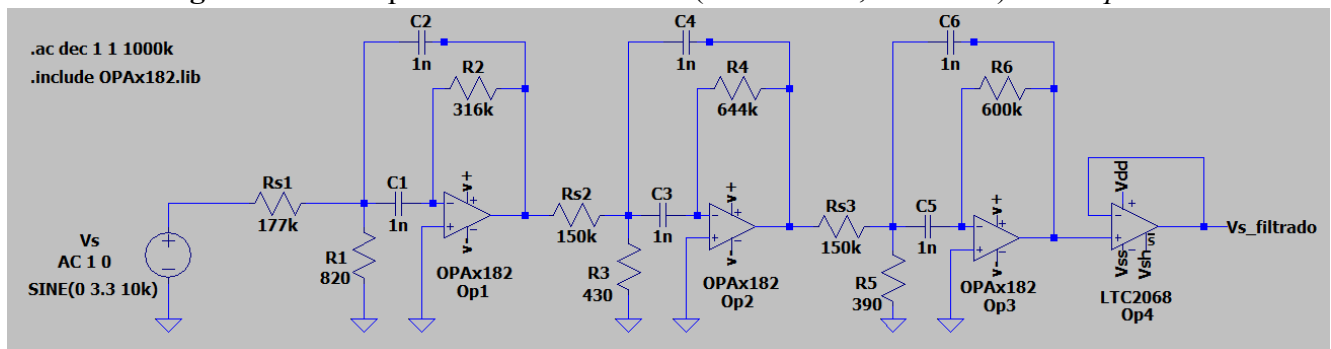
### 3.6.1. Filtro passa-banda de entrada

Dessa forma, foi projetado um filtro passa-banda de Butterworth de sexta ordem, com frequência central de 10 kHz, largura de banda de 100 Hz e ganho simulado de aproximadamente 12,71 mdB (1,0015 V/V). O circuito do filtro de entrada é mostrado na Figura 26.

Para implementação, optou-se pelo amplificador operacional OPAx182. Sua escolha foi devido a sua capacidade de fornecer a corrente de saída necessária para o circuito de ponte e também por ser *rail-to-rail*, excursionando todo o sinal da fonte de entrada recebido sem distorções. Na sequência, foi colocado um *buffer* na saída do filtro, utilizando o LTC2068, para evitar que haja forte interação entre o circuito de ponte capacitiva e o filtro. A alimentação do OPAx182 é de 10V *rail-to-rail* e do LTC2068 é 5V *rail-to-rail*.

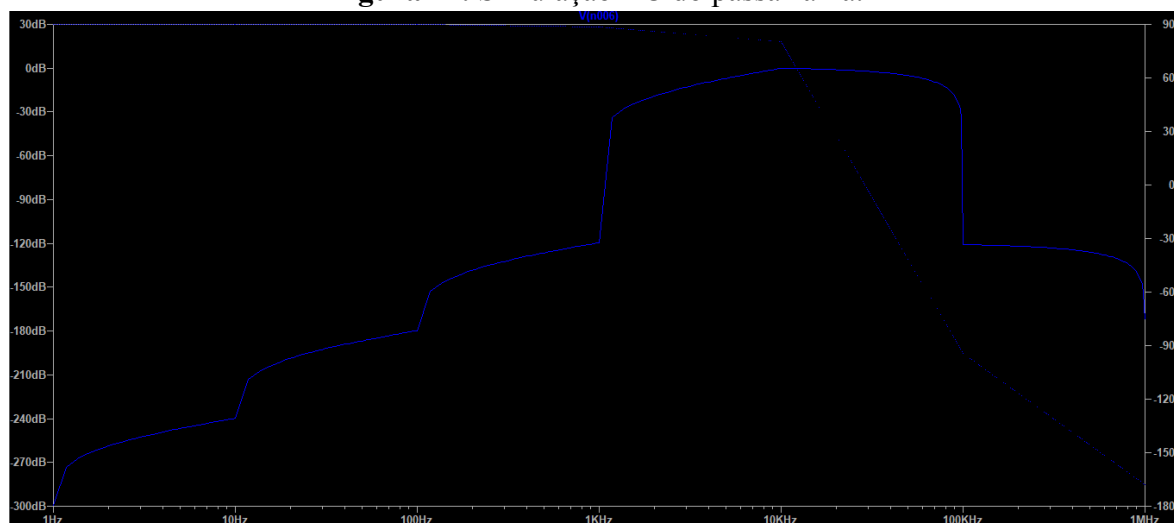
Vale salientar que este filtro só é necessário para circuitos de ponte com excitação AC, que não é o caso do sistema de aquisição de temperatura.

**Figura 26.** Filtro passa-banda de entrada (Butterworth, 6ª ordem) no LTSpice.



Fonte - Autores.

Figura 27. Simulação AC do passa-faixa.

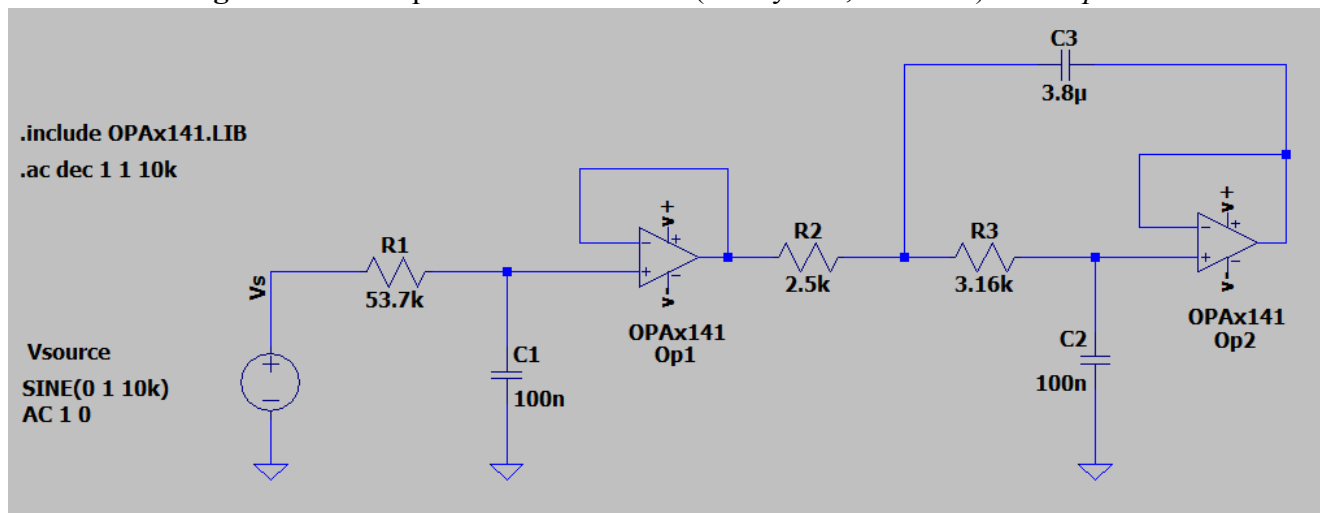


Fonte - Autores.

### 3.6.2. Filtro passa-baixas de saída

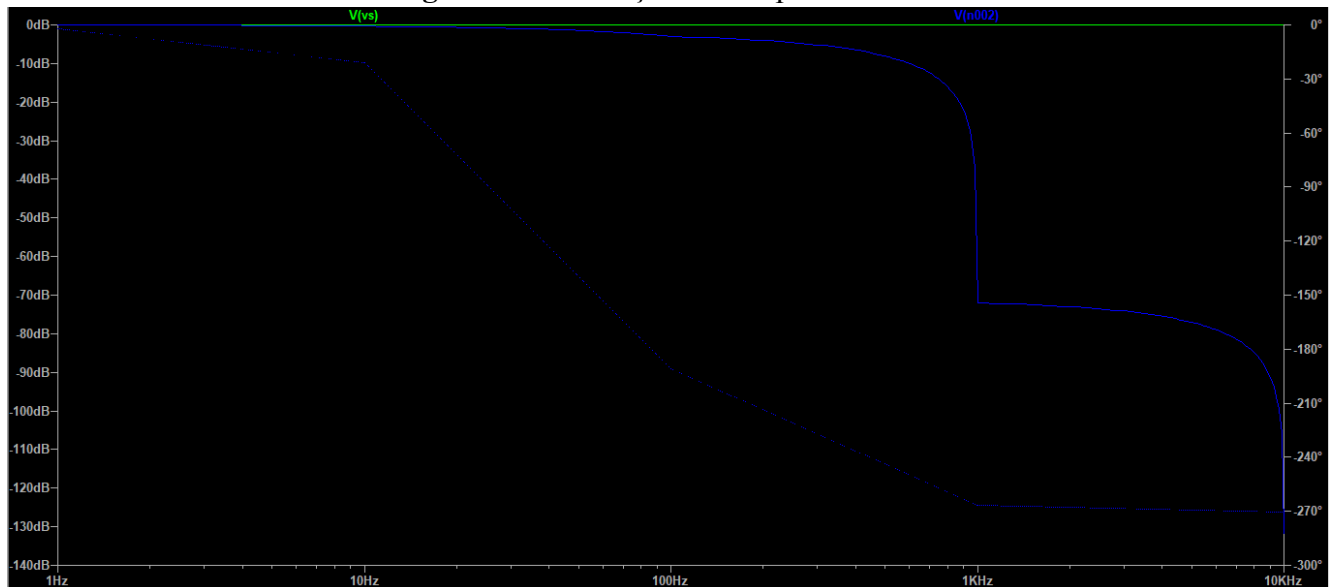
Para implementação, optou-se pelo amplificador operacional OPAx141. Sua escolha foi devido a sua capacidade de fornecer a corrente de saída necessária, boa proximidade com o filtro ideal projetado. Sua alimentação é de 5 V *rail-to-rail*.

Figura 28. Filtro passa-baixas de saída (Chebyshev, 4ª ordem) no LTSpice.



Fonte - Autores.

Figura 29. Simulação AC do passa-baixa.



Fonte - Autores.

### 3.7. Conversor analógico-digital

O conversor AD e sua resolução precisam ser especificados após a análise da variação da tensão analógica de saída do sensor e da avaliação da resolução cuja aplicação necessita. Também é indicado verificar o efeito que a tolerância dos componentes utilizados no projeto afeta a saída, além de outros fatores ambientais, como temperatura e umidade. Entretanto, para fins de simplificação do projeto como um todo, será utilizado um conversor AD com resolução de 12 bits, comuns em microprocessadores.

No caso específico deste projeto, será utilizado o microprocessador ESP32. O mesmo foi escolhido pela sua alta versatilidade, utilização de tensões de 3,3V em seus pinos e em sua alimentação, ou seja, caso projetado devidamente, o ESP32 também é capaz de gerar um sinal senoidal (ou algo próximo) com a tensão de 3,3V e frequência de 10 kHz utilizadas no projeto, simplificando ainda mais sua implementação. Além disso, sua capacidade de processamento é alta o suficiente para conseguir computar os dados recebidos, visto que o mesmo opera normalmente em 160 MHz. Como o circuito apresenta variações de acordo com a temperatura a qual está submetido, ao se incluir um sensor de temperatura no sistema é possível fazer correções no valor de capacitância informado pelo sensor sem afetar significativamente o desempenho do processador. A frequência de *sampling* máxima do microprocessador é de 200 ksps, muito acima do exigido pelo sensor de fração molar, cuja resposta a uma variação na composição do gás é lenta.

Escolhemos a frequência de *sampling* como 2 kHz, assim metade da frequência de sampling seria 1 kHz, facilitando o *design* do passa-baixa na saída do circuito.

### 3.8. Ajuste dos dados adquiridos pelos sensores

Essa seção se dedica a informar como os dados advindos dos sensores e seus respectivos circuitos de aquisição serão manipulados a fim de fornecer os dados adequados para alimentação da rede neural projetada.

A rede neural projetada precisa ser alimentada com dados de pressão pseudo-reduzida, temperatura pseudo-reduzida e massa molecular média para conseguir estimar a capacitância do gás natural armazenado em um dado instante de tempo. Dessa forma, os dados adquiridos pelos sensores precisam ser manipulados.

Para conseguir informar a fração molar de cada subcomponente do gás natural, é necessário que diversos *chips* capacitivos com diversos revestimentos estejam operando. Quando os mesmos estiverem funcionando e com suas respostas devidamente calibradas para a faixa de temperatura e pressão de interesse, consegue-se calcular, através da matriz exposta na Figura 2 e com a Equação (18) a concentração de cada gás individualmente. A concentração de cada gás está associada à pressão parcial do mesmo, considerando que a temperatura e a pressão são homogêneas no tanque de armazenamento, ou seja, soma-se as concentrações e calcula-se a razão entre a concentração do gás individual e a soma das concentrações, o que resulta em um número menor ou igual a 1. Essa razão equivale, aproximadamente, à razão entre a pressão parcial desse mesmo gás com a pressão total do sistema, que está sendo mensurada. Alimentando-se o sistema com a pressão total do gás, consegue-se obter, Manipulando-se a Equação de Clapeyron, consegue-se obter as frações molares de cada gás individual.

Com os valores de fração molar obtidos, utiliza-se os mesmos para calcular a temperatura e pressão pseudo-críticas pela Equações (7) e (8) com auxílio de um *look-up table*, visto que as temperaturas e pressões críticas de cada gás são tabeladas e constantes. Feito isso, calcula-se, com as medições de temperatura e pressão, a temperatura e a pressão pseudo-reduzidas, através das Equações (9) e (10).

### 3.9. Rede Neural Artificial

#### 3.9.1 Divisão da base de dados em conjuntos de treinamento, de validação e de teste

A divisão da base de dados contendo 4.512 amostras é mostrada na Tabela 6.

**Tabela 6.** Divisão da base de dados.

Conjunto	Percentual da Base de Dados (%)	Número de Amostras
Treinamento	40	1.804
Validação	30	1.354
Teste	30	1.354
<b>Total</b>	<b>100</b>	<b>4.512</b>

**Fonte - Autores**

A divisão do conjunto treinamento foi efetuada a fim de fornecer dados suficientes para o treinamento adequado do modelo, mas não o bastante para acarretar *overfitting* e consumir dados demais, de modo que os conjuntos de teste e validação ficassem com poucos dados para verificação do modelo. Dessa forma, escolheu-se que 40% dos dados da base seriam utilizados para o treinamento e que o restante seria utilizado para verificar se o modelo está com boa generalização.

Dividiu-se o restante dos dados igualmente entre os conjuntos validação e teste visando fornecer um número considerável de dados para a verificação das escolhas de hiperparâmetro no caso da validação, e a comprovação da generalização final do modelo escolhido no caso do teste.



### 3.9.2. Escolha dos hiperparâmetros

O método que foi utilizado para definir os hiperparâmetros que melhor representavam o comportamento do sistema foi realizar um série de simulações onde, variando os hiperparâmetros, fazia-se o treinamento e a validação da rede com quatro *folds* na validação cruzada com método de avaliação de desempenho R quadrado e, obtendo, para cada configuração, os quatro resultados de R quadrado correspondentes a cada configuração de *folding*, fazia-se a média de seus valores, de modo a encontrar o R quadrado médio para cada configuração de hiperparâmetros. Além disso, foi estabelecido um limiar inferior de desempenho, onde todos os resultados com desempenho melhores do que esse limiar eram aceitos.

Após a realização dos testes, uma série de configurações apresentavam desempenho considerado satisfatório. A métrica utilizada para escolher qual das configurações utilizar nesse caso foi escolher a que apresentava menor número de neurônios utilizados no processamento, de modo a minimizar a possibilidade de *overfitting*, a complexidade, o tempo de processamento e a ocupação de memória de sua aplicação em *software*.

### 3.9.3. Avaliação dos resultados

Para avaliar os resultados da rede neural com os hiperparâmetros definidos, também foi utilizada a métrica do R quadrado. Verificou-se o desempenho da rede, não somente na estimativa do conjunto de teste, mas também na estimativa de toda a base de dados, de modo a avaliar a generalização da mesma. Para ambas estimativas, além dos respectivos R quadrados, foram calculados os erros médios quadráticos, a fim de se ter outra métrica para avaliar o desempenho final da rede neural projetada.

## 4. Resultados e Discussões

### 4.1. Análise das variáveis de entrada da base de dados

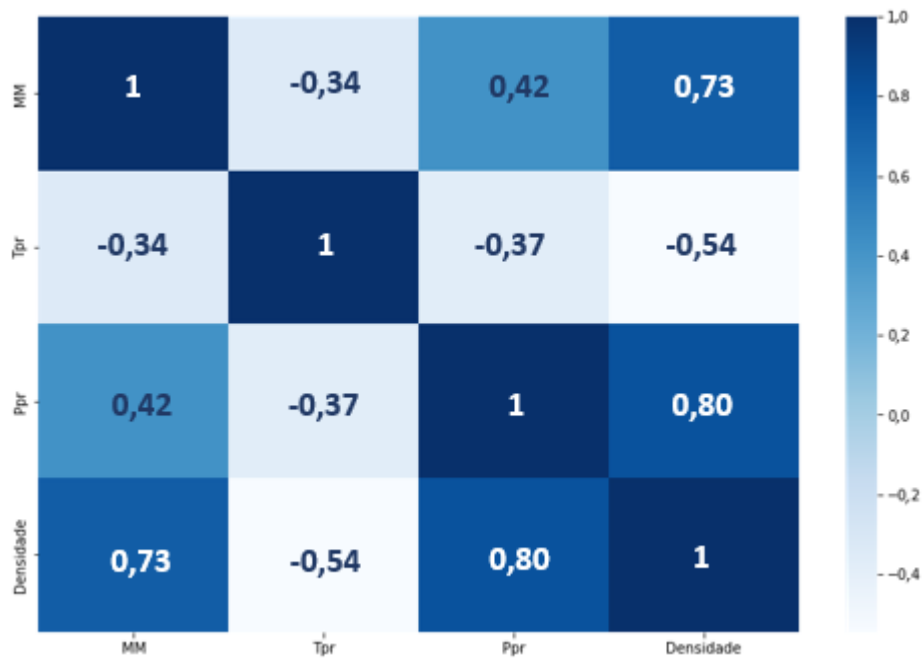
A análise de correlação pelo método do coeficiente de correlação de Pearson é vista na Figura 30, através da construção da matriz de correlação.

**Figura 30.** Matriz de Correlação de Pearson entre Fatores da Base de Dados

**Fonte -** Autores (Python)

Conforme a Figura 30, podemos observar que a massa molecular média ( $MM_m$ ) e a pressão pseudo-reduzida (Ppr) têm influência linear relevante na densidade do gás, com módulo dos coeficientes de correlação de Pearson maiores ou iguais a 0,7. Entretanto, a temperatura pseudo-reduzida (Tpr) não apresenta a mesma influência linear, apresentando um coeficiente de correlação linear com módulo abaixo de 0,2.

A fim de verificar a influência da temperatura na densidade de forma mais abrangente, também utilizamos a análise com o coeficiente de correlação monótona de Spearman. O resultado foi uma correlação monótona de Spearman de aproximadamente -0,54 entre a temperatura pseudo-reduzida e a densidade. Ou seja, há sim influência da temperatura na densidade do gás. Os resultados obtidos através da correlação de Spearman são expostos na Figura 31.

**Figura 31.** Matriz de Correlação de Spearman entre Fatores da Base de Dados

Fonte - Autores

Com essas considerações em vista, foi decidido fornecer para a rede neural artificial tanto a massa molecular média e a pressão pseudo-reduzida quanto a temperatura pseudo-reduzida, visto que as três grandezas afetam com intensidade relevante a saída do sistema.

#### 4.2. Resultados do sensor capacitivo de fração molar

Esta seção se dedica a informar os resultados dos cálculos, operações e simulações realizadas, tanto das propriedades físico-químicas do sistema como do desempenho do circuito projetado. Todas as simulações foram realizadas sem levar em consideração a tolerância dos componentes que constituem o circuito.

##### 4.2.1. Estimativa linear da capacitância do chip revestido com PIM

A regressão linear múltipla, cujo objetivo é estimar a capacitância resultante do chip capacitivo a partir das frações volumétricas de cada gás individual expostas na Tabela 4 é mostrada na Equação 16, onde os colchetes indicam a fração volumétrica (de 0% a 100%) de determinado gás.

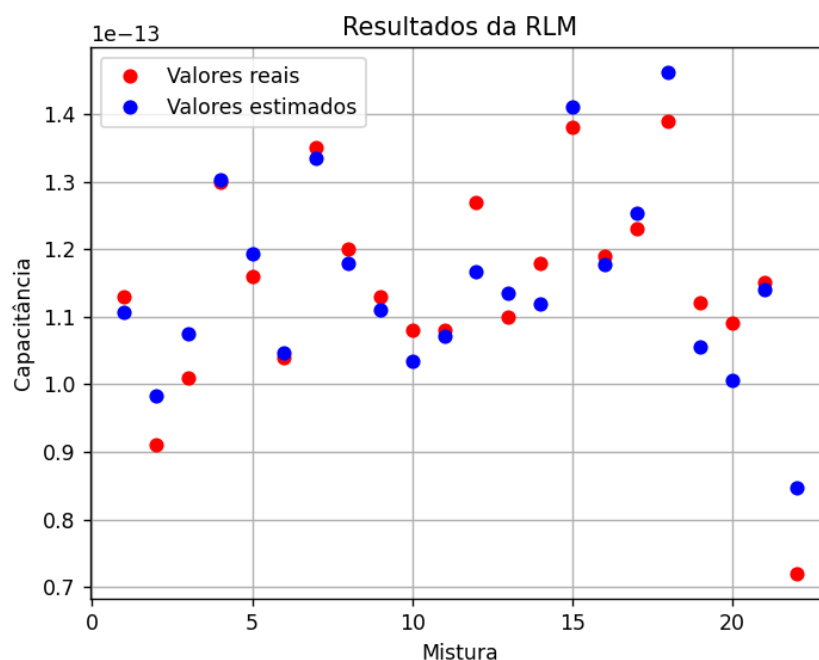
$$C_{PIM} = [CH_4] \cdot 87 + [C_2H_6] \cdot 87,8 + [C_3H_8] \cdot 650 + [nC_4H_{10}] \cdot 559 - [iC_4H_{10}] \cdot 110 \\ + [nC_5H_{12}] \cdot 9070 + [iC_5H_{12}] \cdot 2450 + 128 \quad [fF] \quad (48)$$

A Equação 48 estabelece uma relação entre a capacitância medida e os volumes parciais de cada componente do gás. Como existem seis volumes parciais para serem calculados, este sensor sozinho não consegue determiná-los, necessitando de ao menos seis chips similares, devidamente caracterizados e revestidos com diferentes polímeros para resolver o sistema de equações.

A regressão linear múltipla foi feita em *Python* com auxílio da biblioteca *numpy*. A mesma conseguiu estimar a capacitância resultante do sensor capacitivo com os dados da composição da

mistura de gases (para as vinte e duas misturas expostas) com um valor de R-quadrado de aproximadamente 0,87. Os valores de capacitância estimados pela Equação 48 são comparados com os valores informados por Sweelssen *et al.* na Figura 32.

**Figura 32.** Valores estimados pela regressão linear múltipla em comparação com os valores informados.



Fonte - Autores.

#### 4.2.2. Sensibilidade do chip revestido com PIM para cada componente do gás

As matrizes que avaliam as correlações linear e monótona de Pearson e de Spearman respectivamente foram calculadas em *Python* com auxílio da biblioteca *pandas*. As matrizes são expostas nas Tabelas 7 e 8.

**Tabela 7.** Matriz de correlação linear de Pearson.

	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	C (pF)
CH <sub>4</sub>	1	-0,87	-0,42	-0,5	0,23	-0,1	0	-0,34
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-0,87	1	-0,01	0,25	-0,23	0,05	-0,16	0,08
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-0,42	-0,01	1	0,36	-0,29	0,07	0,32	0,54
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-0,5	0,25	0,36	1	-0,61	0,11	-0,04	0,47
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,23	-0,23	-0,29	-0,61	1	-0,12	0,01	-0,4
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	-0,1	0,05	0,07	0,11	-0,12	1	-0,51	0,74
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0	-0,16	0,32	-0,04	0,01	-0,51	1	-0,12
C (pF)	-0,34	0,08	0,54	0,47	-0,4	0,74	-0,12	1

Fonte - Autores.

**Tabela 8.** Matriz de correlação monótona de Spearman.

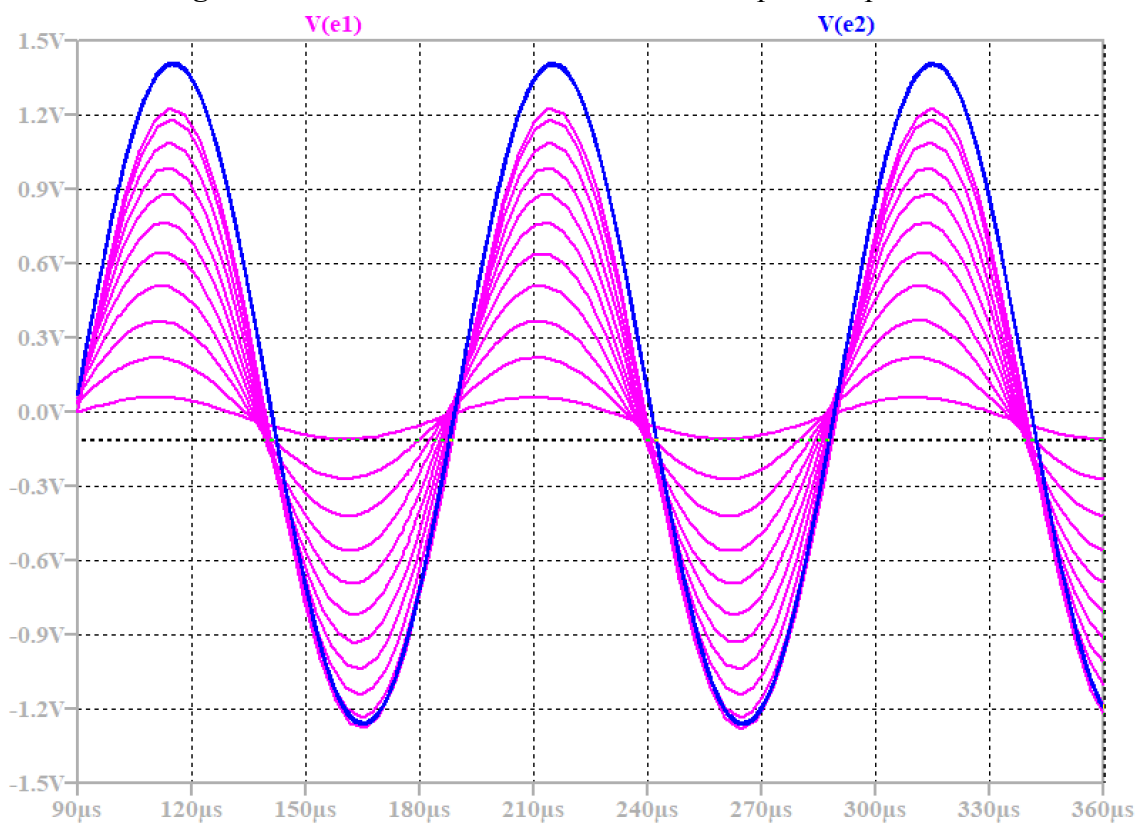
	CH <sub>4</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	C (pF)
CH <sub>4</sub>	1	-0,93	-0,24	-0,38	0,26	-0,11	0,21	-0,36
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	-0,93	1	-0,03	0,3	-0,21	-0,01	-0,22	0,16
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	-0,24	-0,03	1	0,32	-0,09	0,07	0,3	0,44
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	-0,38	0,3	0,32	1	-0,61	-0,17	0,02	0,32
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	0,26	-0,21	-0,09	-0,61	1	0,02	0,05	-0,2
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	-0,11	-0,01	0,07	-0,17	0,02	1	-0,56	0,77
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	0,21	-0,22	0,3	0,02	0,05	-0,56	1	-0,2
C (pF)	-0,36	0,16	0,44	0,32	-0,2	0,77	-0,2	1

**Fonte -** Autores.

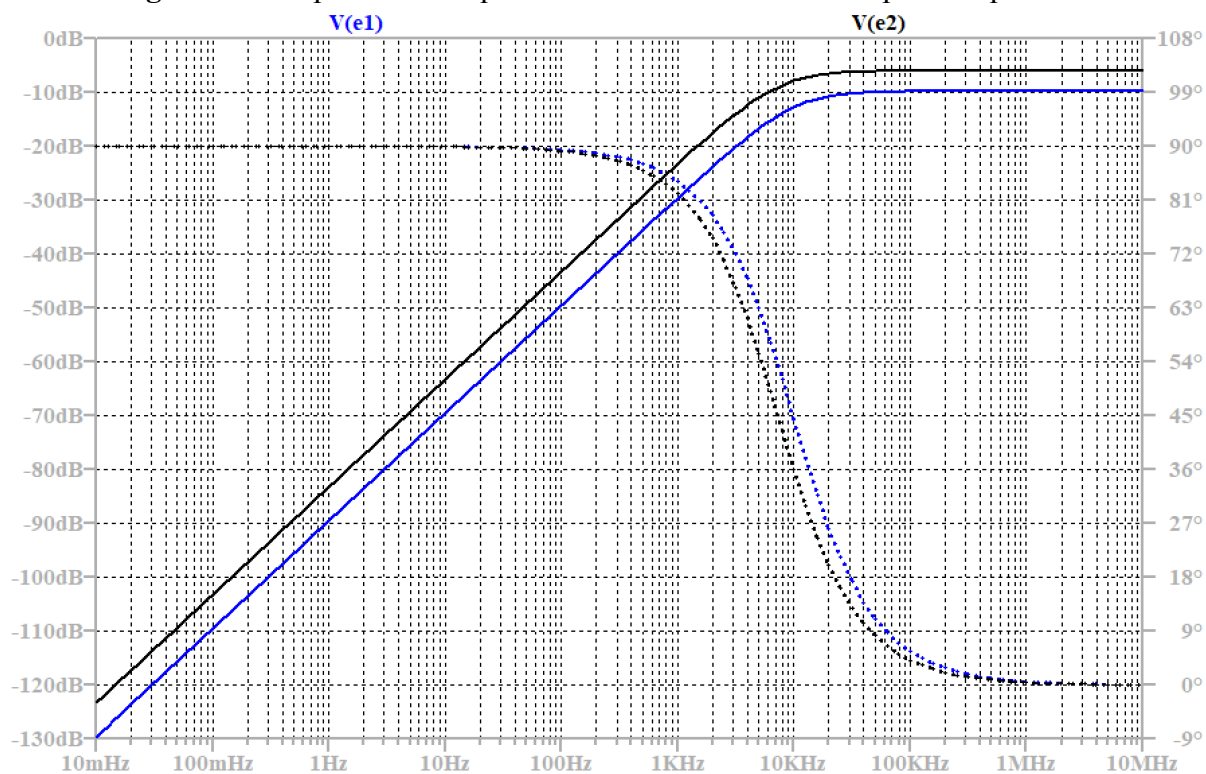
Através dos resultados obtidos, tanto pelas matrizes de correlação de Pearson e de Spearman, quanto pela regressão linear múltipla, podemos verificar que o revestimento PIM possui maior sensibilidade para as maiores moléculas dos hidrocarbonetos leves, principalmente propano, n-butano, i-butano, n-pentano e i-pentano. Entretanto, os testes realizados estão sujeitos às escolhas de misturas gasosas de Sweelssen *et al.*, além de serem utilizadas um número relativamente baixo de amostras de misturas gasosas para a calibração, sendo a validação experimental necessária para verificar a validade da análise realizada.

#### 4.2.3. Sistema de aquisição de fração molar

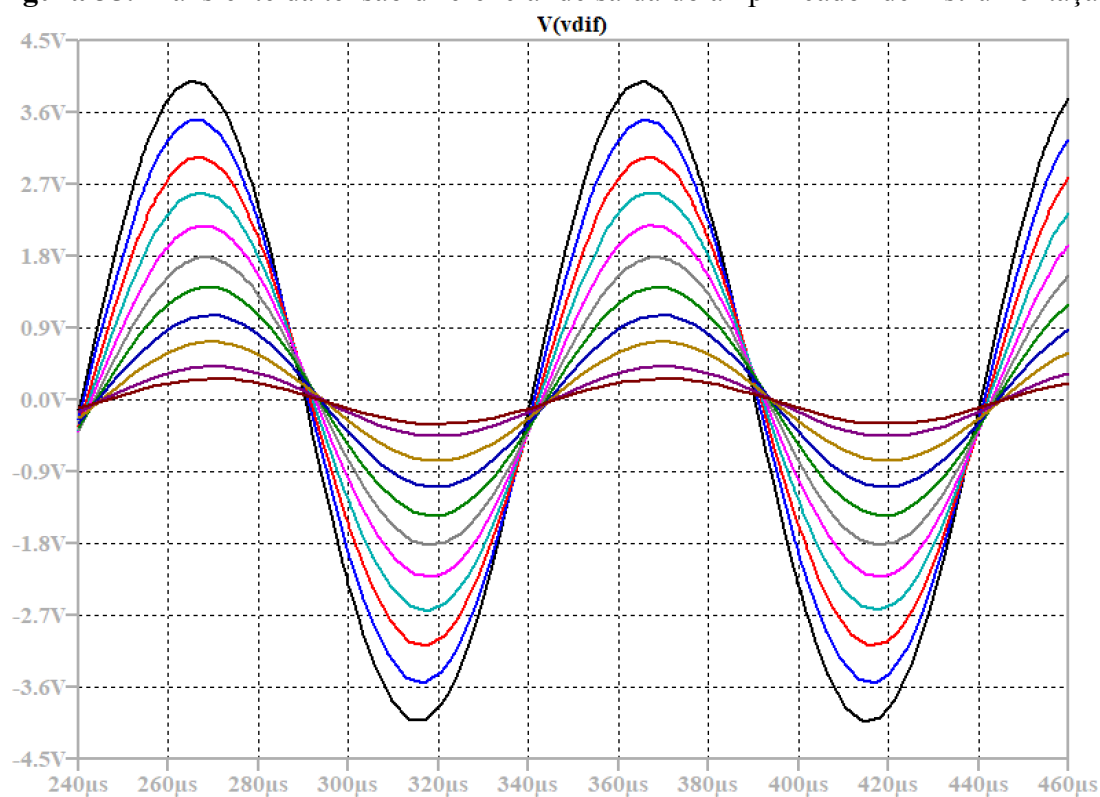
As respostas transientes do sistema de aquisição de fração molar foram obtidas variando-se a capacitância do sensor de 0.01 pF a 0.2 pF (inclusive), com passo de 0.02 pF. Já para obtenção das respostas em frequência dos blocos, fixou-se a capacitância do sensor em 0.105 pF, centro da faixa de interesse.

**Figura 33.** Transiente das tensões de saída da ponte capacitiva.

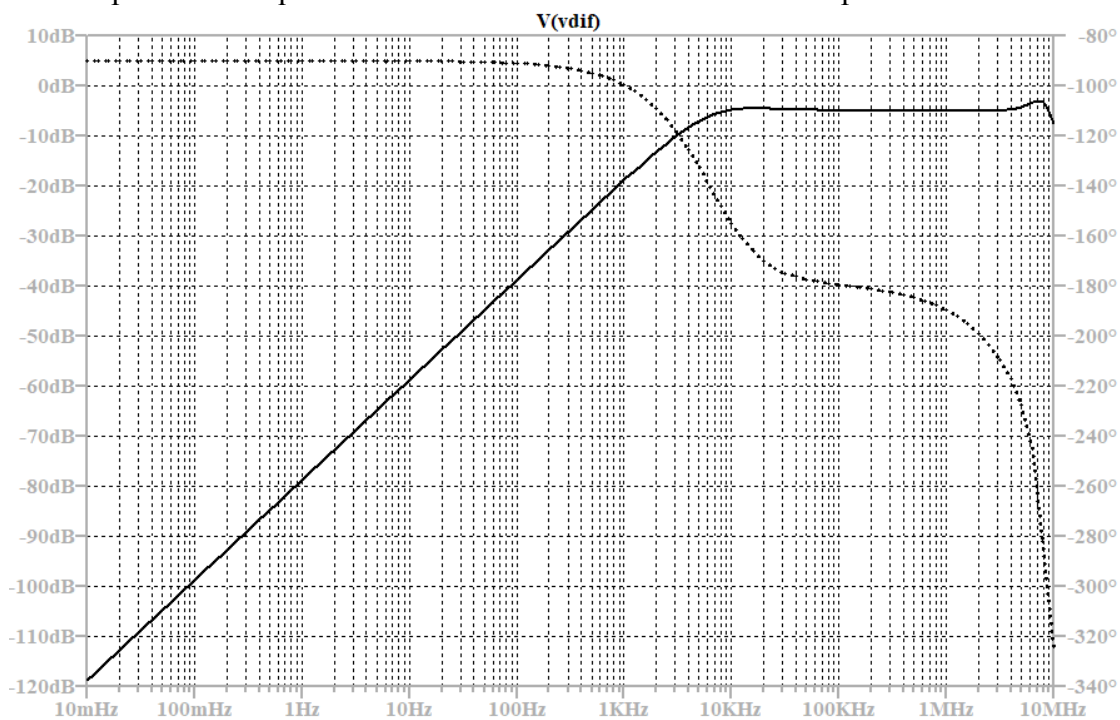
Fonte - Autores.

**Figura 34.** Resposta em frequência das tensões de saída da ponte capacitiva.

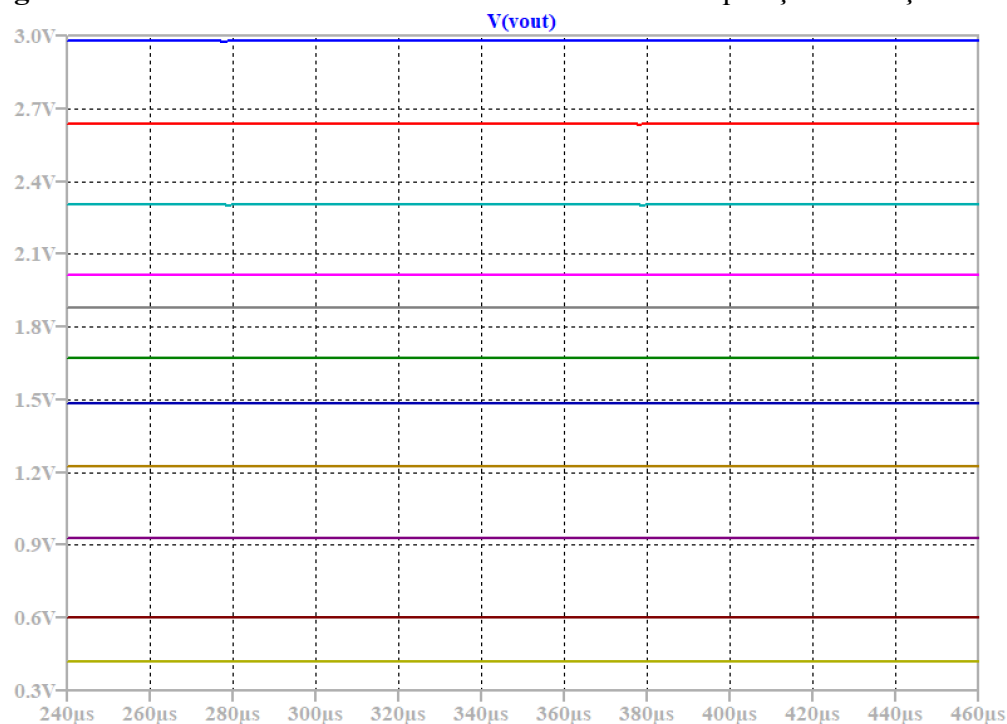
Fonte - Autores.

**Figura 35.** Transiente da tensão diferencial de saída do amplificador de instrumentação.

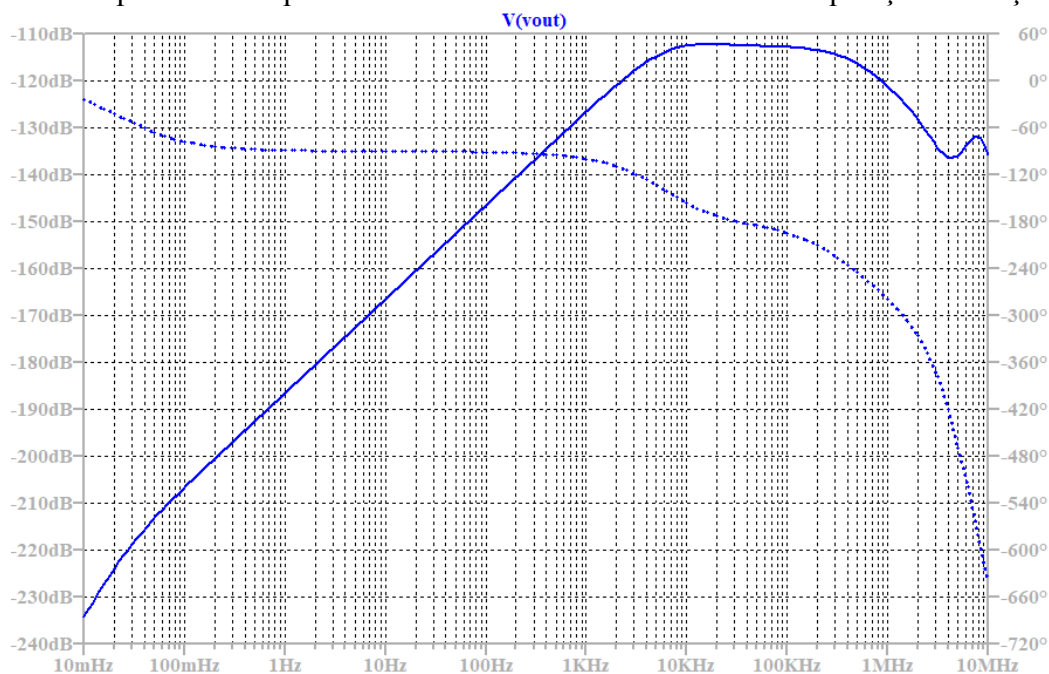
Fonte - Autores.

**Figura 36.** Resposta em frequência da tensão diferencial de saída do amplificador de instrumentação.

Fonte - Autores.

**Figura 37.** Transiente da tensão de saída do circuito de aquisição de fração molar.

Fonte - Autores.

**Figura 38.** Resposta em frequência da tensão de saída do circuito de aquisição de fração molar.

Fonte - Autores.

Observando os resultados da análise transiente e em frequência do sistema de aquisição de sinal de fração molar, podemos concluir que o sistema atua dentro da faixa de interesse de tensão e consegue distinguir corretamente as capacitâncias mensuradas. Também pode-se observar que é possível distinguir claramente os valores de capacitância com a utilização do sensor. Entretanto, para

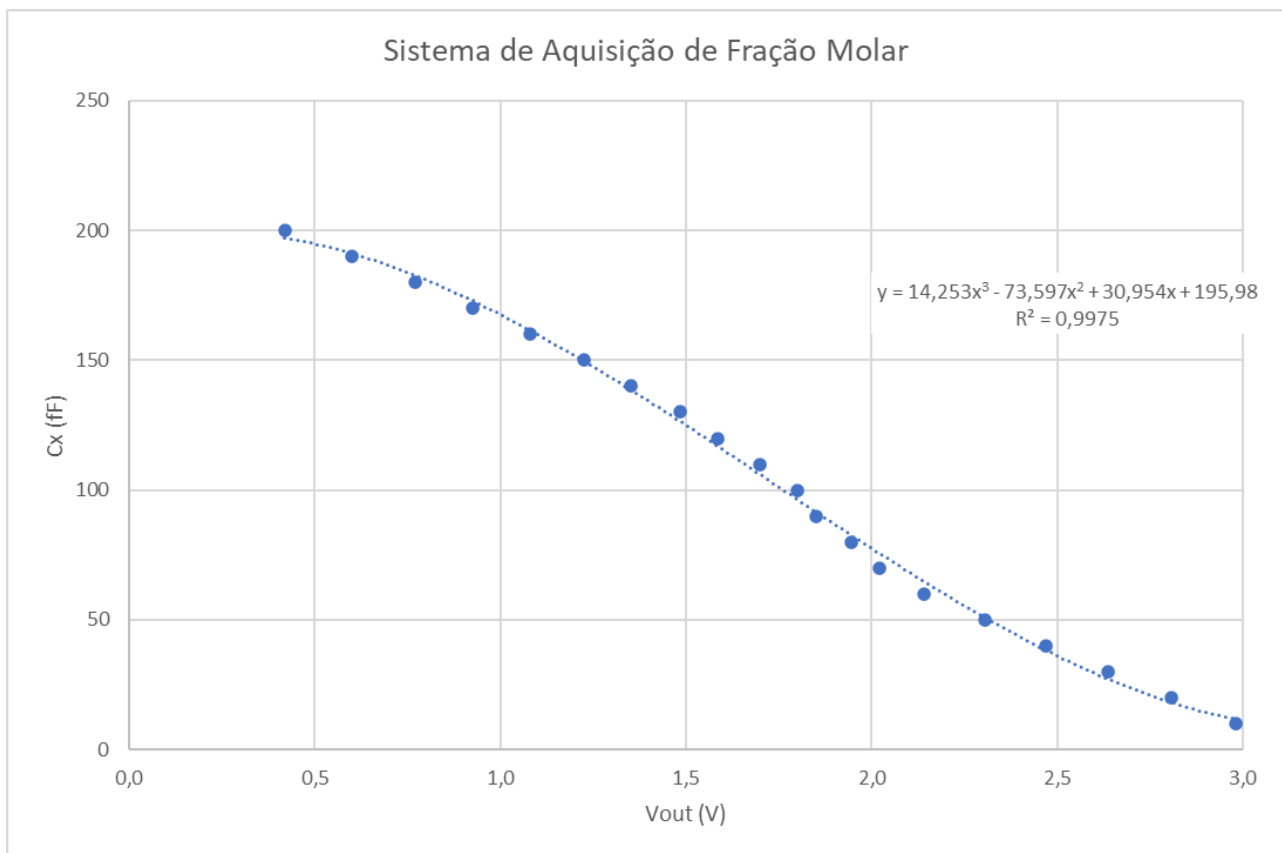


validação do sistema projetado, é essencial que este seja construído e testado fisicamente, de forma a considerar efeitos externos que não foram considerados no ambiente computacional,

Fazendo-se uma regressão polinomial, é possível relacionar a capacitância em fF com a tensão de saída através de um polinômio do terceiro grau, que consegue descrever o comportamento com um  $R^2$  de aproximadamente 0,9975, mostrado pela Equação 49.

$$C = 14,253 \cdot V_{OUT}^3 + 73,597 \cdot V_{OUT}^2 + 30,954 \cdot V_{OUT} + 195,98 \quad [\text{fF}] \quad (49)$$

**Figura 39.** Regressão polinomial relacionando a capacitância do sensor com a tensão de saída do seu sistema de aquisição.



**Fonte - Autores.**

A Figura 40 mostra o valor estimado de capacitância e o erro associado à estimativa quando se utiliza o polinômio para aproximar o comportamento do sistema.

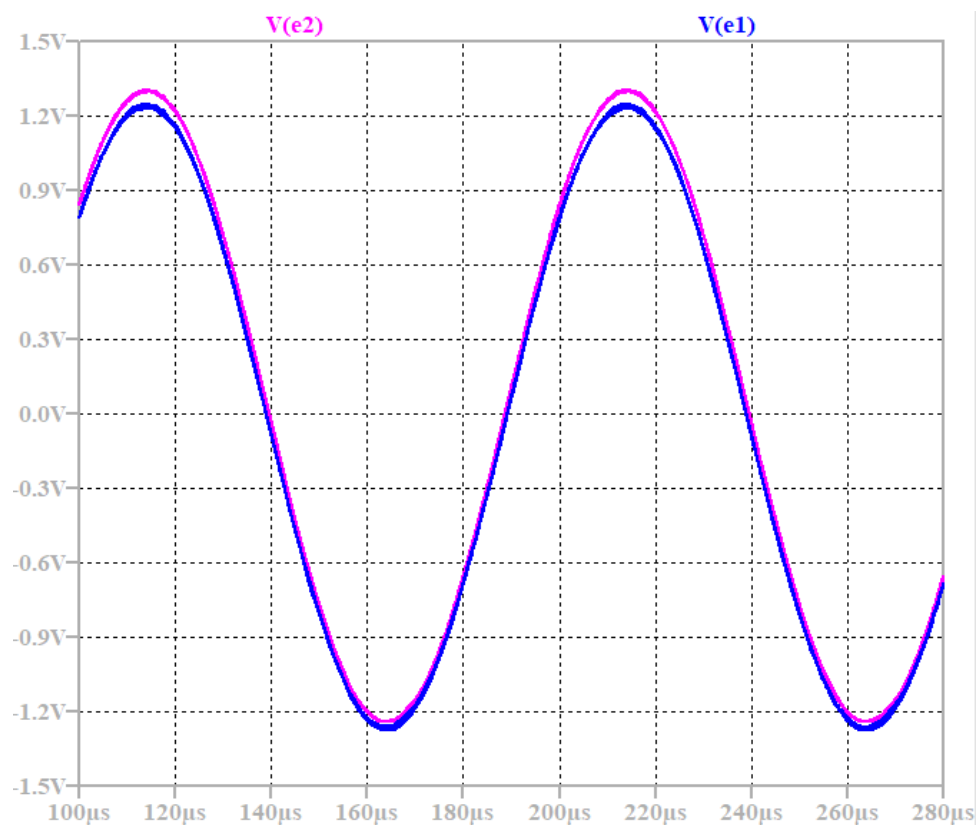
**Figura 40.** Valores de capacitância estimados pela regressão polinomial,

Vout (V)	Cx (fF)	Cestimado	Erro
2,98	10	12	18%
2,81	20	18	-9%
2,64	30	27	-9%
2,47	40	38	-4%
2,30	50	51	2%
2,14	60	65	8%
2,02	70	76	8%
1,94	80	83	3%
1,85	90	91	2%
1,80	100	96	-4%
1,70	110	106	-4%
1,59	120	117	-3%
1,49	130	126	-3%
1,35	140	138	-1%
1,22	150	150	0%
1,08	160	161	1%
0,92	170	173	2%
0,77	180	183	1%
0,60	190	191	1%
0,42	200	197	-1%

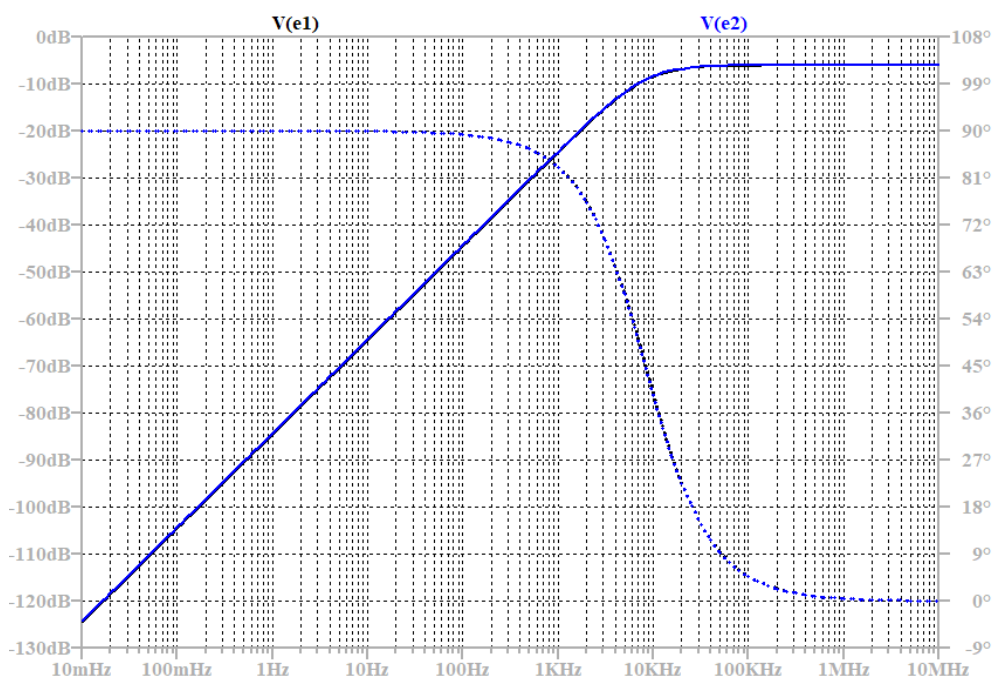
**Fonte -** Autores.

#### 4.3. Sistema de aquisição de pressão

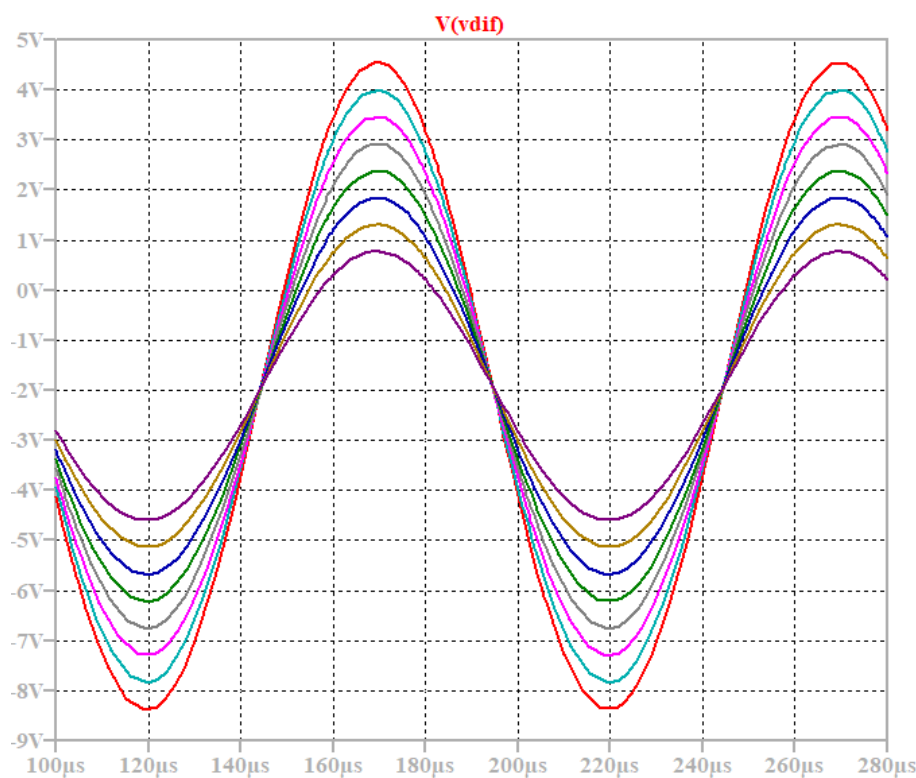
As respostas transientes do sistema de aquisição de pressão foram obtidas variando-se a capacitância do sensor de 428 fF a 435 fF, com passo de 1 fF. Já para obtenção das respostas em frequência dos blocos, fixou-se a capacitância do sensor em 431,5 fF, centro da faixa de interesse.

**Figura 41.** Transiente das tensões de saída da ponte capacitiva.

Fonte - Autores.

**Figura 42.** Resposta em frequência das tensões de saída da ponte capacitiva.

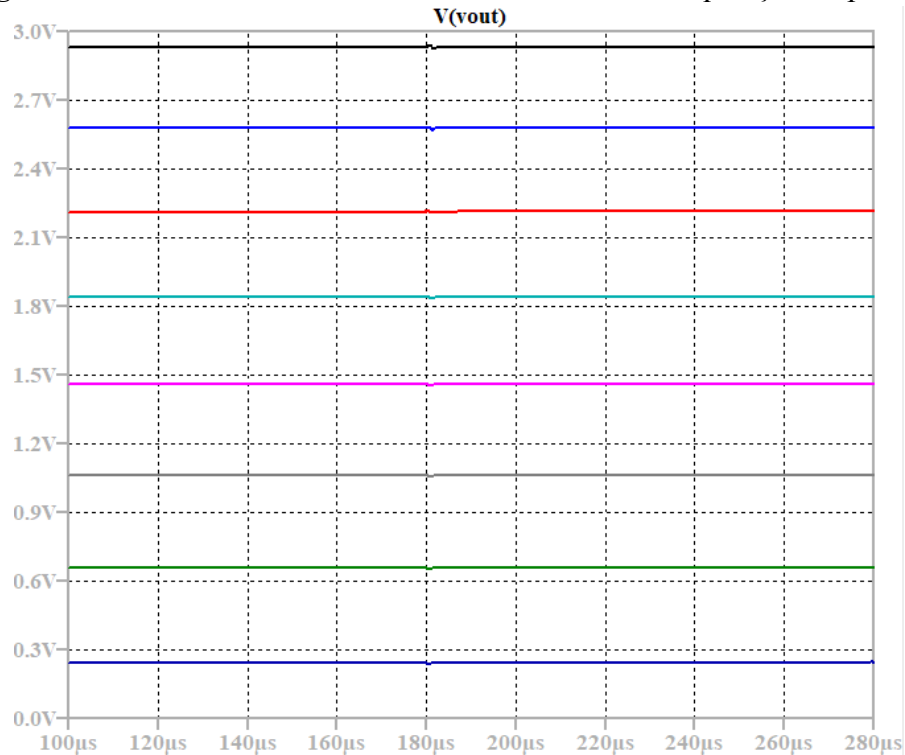
Fonte - Autores.

**Figura 43.** Transiente da tensão diferencial de saída do amplificador de instrumentação.

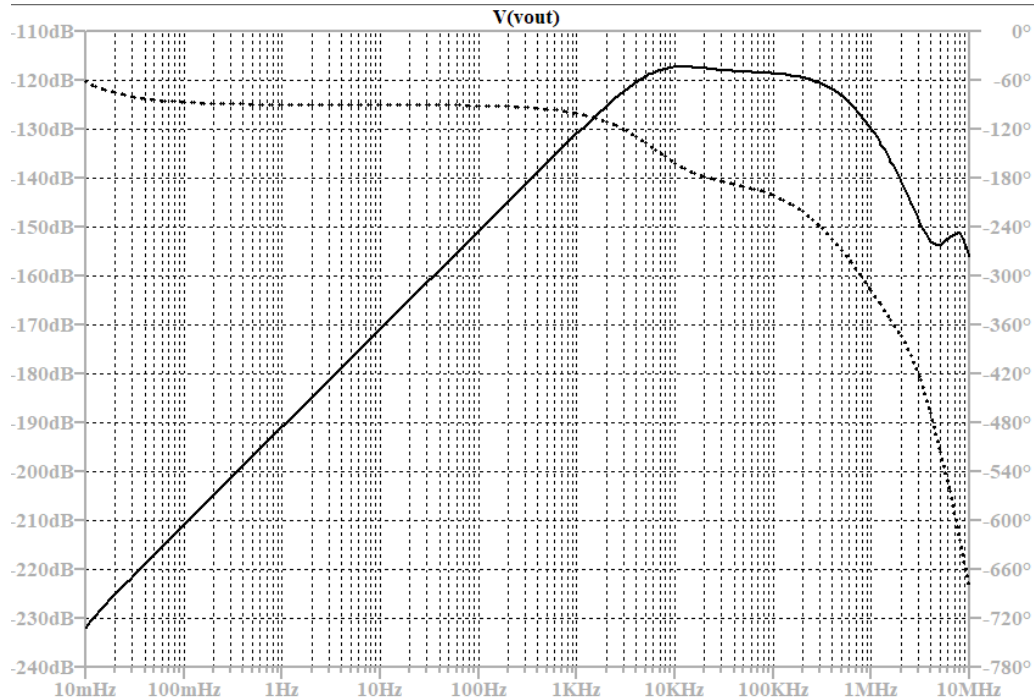
Fonte - Autores.

**Figura 44.** Resposta em frequência da tensão diferencial de saída do amplificador de instrumentação.

Fonte - Autores.

**Figura 45.** Transiente da tensão de saída do circuito de aquisição de pressão.

Fonte - Autores.

**Figura 46.** Resposta em frequência da tensão de saída do circuito de aquisição de pressão.

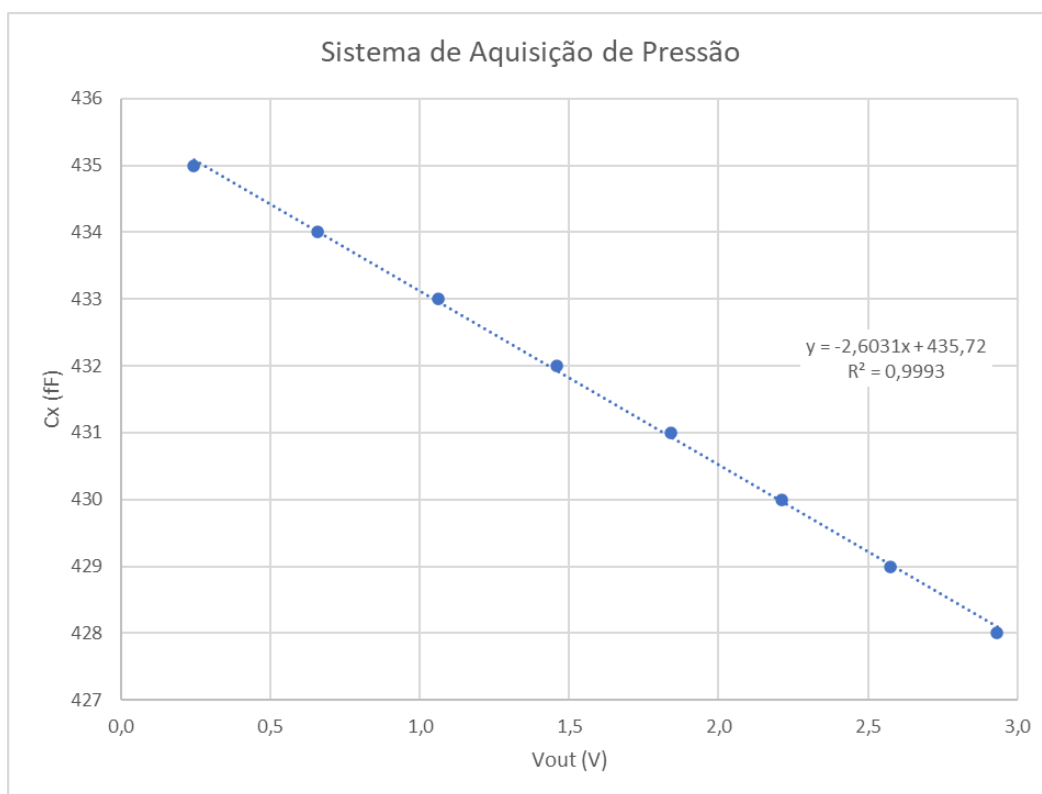
Fonte - Autores.

Pela análise transiente, consegue-se observar que o sistema de aquisição opera com tensões dentro da faixa de interesse, considerando margem de segurança determinada. É possível relacionar o comportamento da capacitância do sensor com a tensão de saída do circuito de aquisição através de um polinômio do primeiro grau com um  $R^2$  de aproximadamente 0,9993, mostrado na Equação (50).

$$C = 2,6031 \cdot V_{out} + 435,72 \quad [\text{fF}] \quad (50)$$

A Figura 47 mostra o comportamento linear do sistema de aquisição de sinal.

**Figura 47.** Regressão polinomial relacionando a capacitância do sensor com a tensão de saída do seu sistema de aquisição.



**Fonte - Autores**

A Figura 48 mostra o valor estimado de capacitância e o erro associado à estimativa quando se utiliza a equação linear para aproximar o comportamento do sistema.

**Figura 48.** Valores de capacitância estimados pela regressão linear,

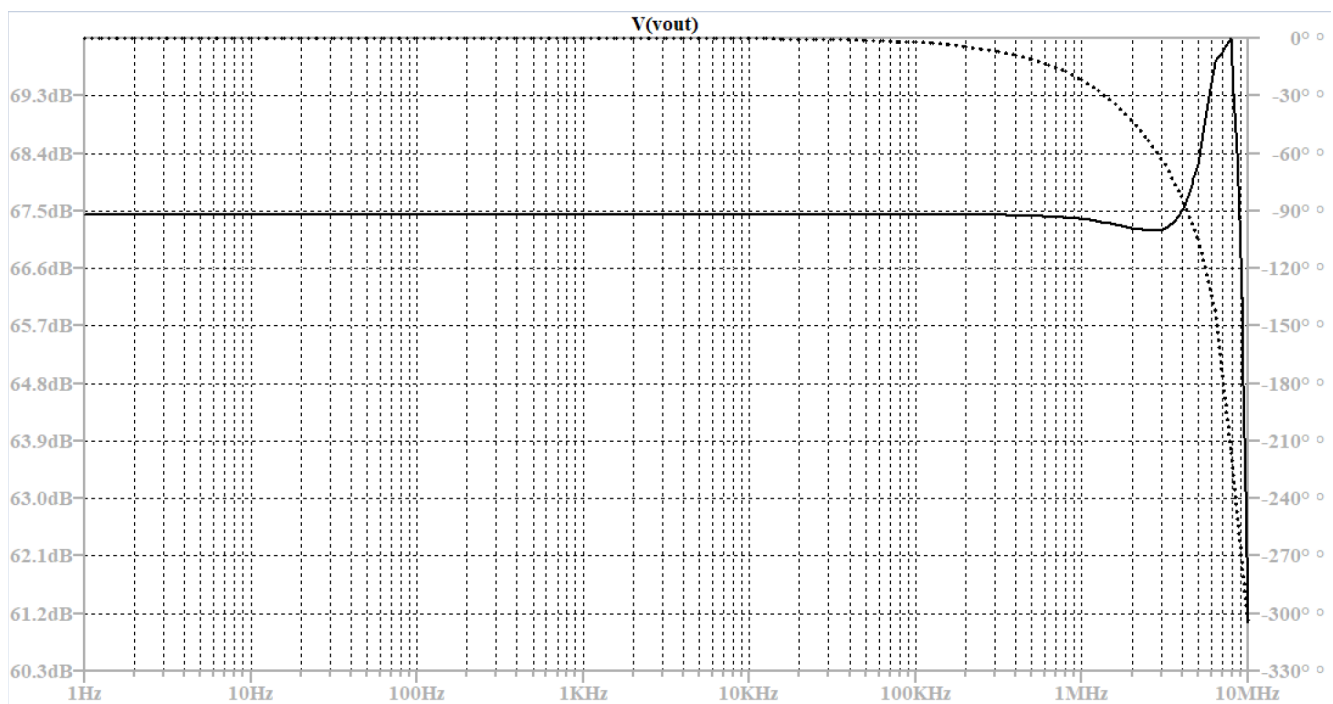
Vout (V)	Cx (fF)	Cestimado
2,93276	428	428
2,57656	429	429
2,21248	430	430
1,83948	431	431
1,45800	432	432
1,06291	433	433
0,65845	434	434
0,24336	435	435

**Fonte - Autores.**

#### 4.4. Sistema de aquisição de temperatura

Para avaliar o comportamento do circuito de aquisição de sinal de temperatura, utilizou-se simulações DC no *LTSpice*, visto que o circuito não possui, idealmente, componentes sensíveis a frequência, além de que todas as fontes de alimentação de tensão e corrente são contínuas. Para verificar esse comportamento, realizou-se uma análise AC para avaliar o comportamento do ganho e da defasagem do circuito como um todo. A resposta em frequência do circuito é mostrado na Figura 49, onde a linha pontilhada indica a fase e a temperatura foi fixada em 20°C.

**Figura 49.** Resposta em frequência do circuito de aquisição de temperatura.

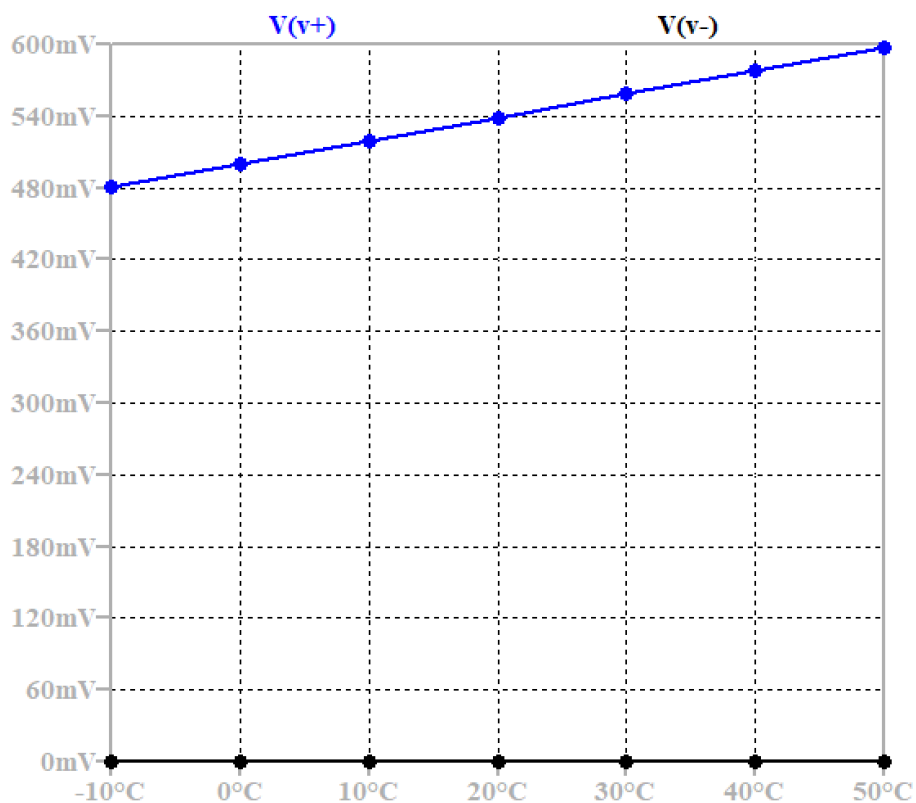


**Fonte - Autores.**

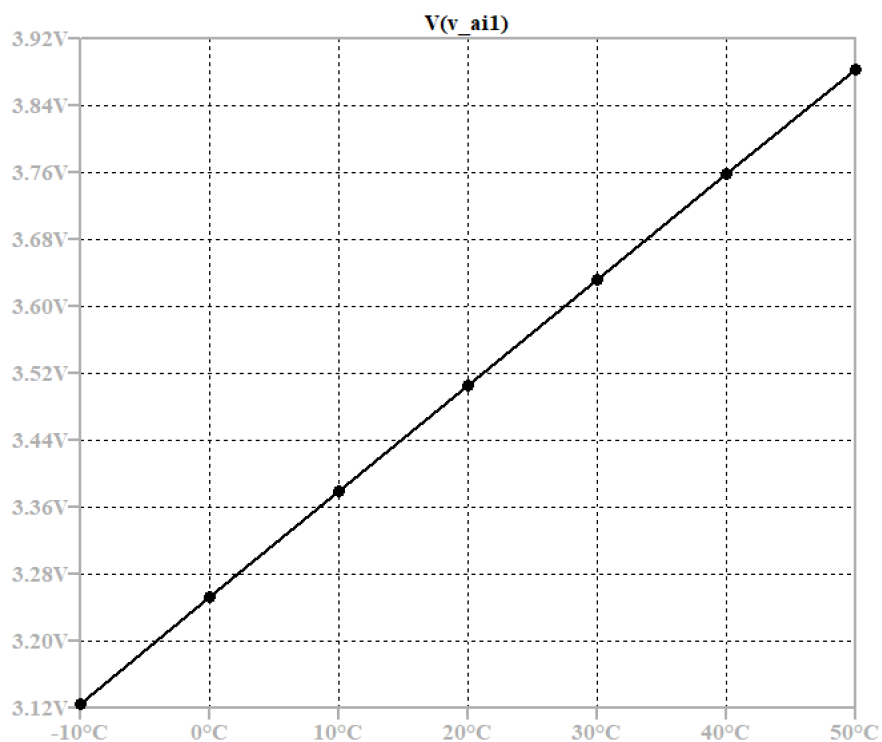
Analisando a resposta em frequência do circuito, podemos verificar que apenas existe uma rejeição em altas frequências, além de um ganho expressivo na faixa de frequência próxima a 10 MHz, algo que não é necessário ser considerado devido ao projeto do circuito.

Além disso, devido a natureza do sensor de platina, o tempo de resposta do RTD é relativamente alto, pois o sensor precisa entrar em equilíbrio térmico com o mensurando, além de que a temperatura ambiente não apresenta grandes variações em um espaço de tempo muito curto. Dessa forma, a variação da resistência do componente não insere componentes senoidais significativos no sistema.

Dessa forma, para avaliar o comportamento DC do circuito, a temperatura foi variada de -10°C a 50°C, com passo de 10°C. A tensão de saída de todos os blocos do sistema foi avaliada, e seu comportamento em função da temperatura é exposto nas Figuras 50, 51 e 52.

**Figura 50.** Tensão sobre o Pt100 em função da temperatura do mensurando.

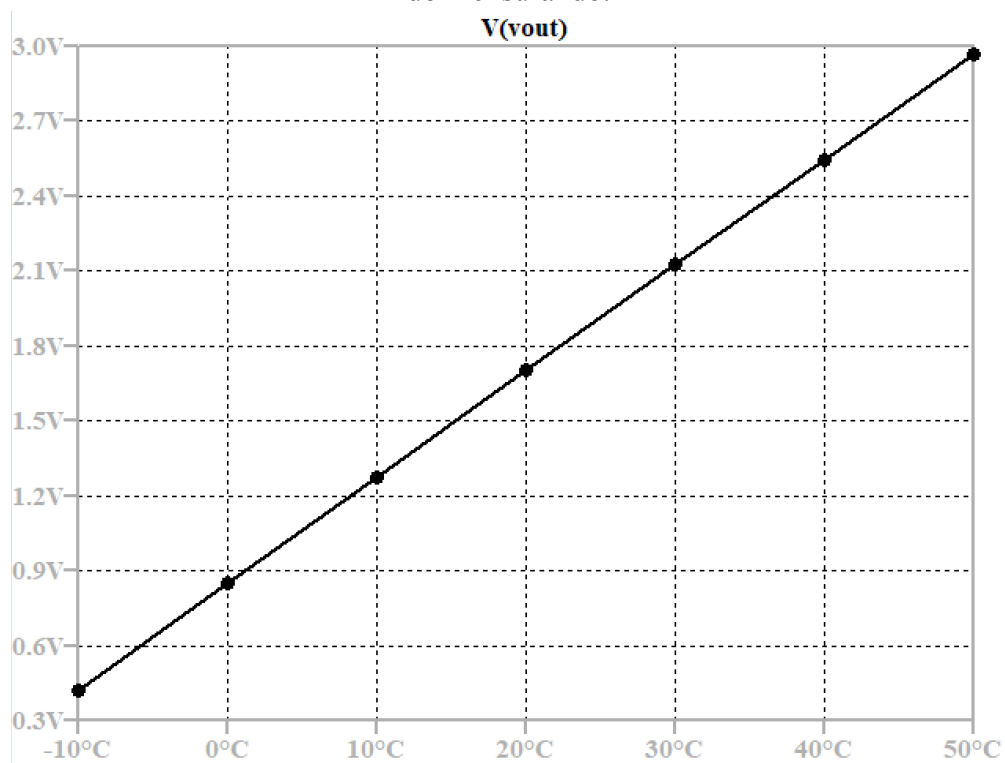
Fonte - Autores.

**Figura 51.** Tensão de saída do primeiro amplificador de instrumentação ( $V_{AI1}$ ) em função da temperatura do mensurando.

Fonte - Autores.



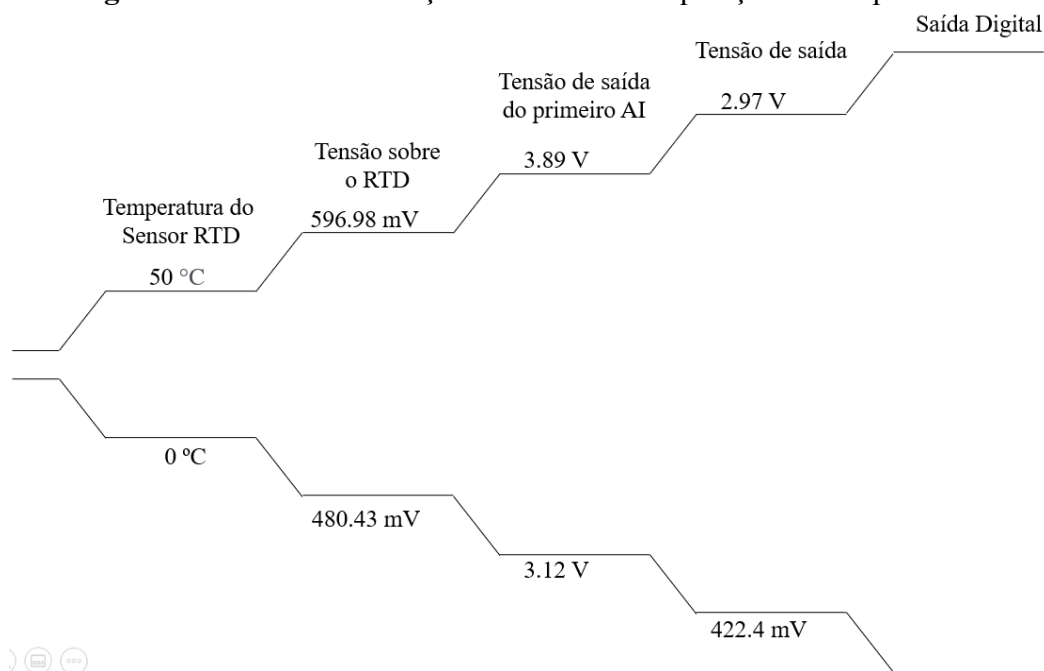
**Figura 52.** Tensão de saída ( $V_{OUT}$ ) do sistema de aquisição de temperatura em função da temperatura do mensurando.



Fonte - Autores.

A cadeia de medição do sistema de aquisição de temperatura é mostrada na Figura 53.

**Figura 53.** Cadeia de medição do sistema de aquisição de temperatura.



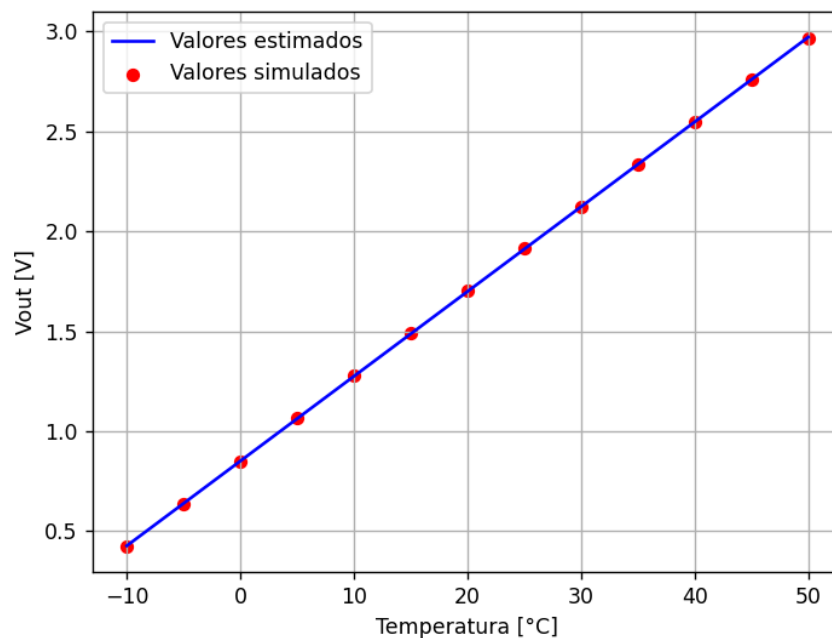
Fonte - Autores.

Como pode ser observado, a tensão de saída  $V_{OUT}$  do sistema de aquisição de temperatura assume o valor mínimo de tensão de aproximadamente 422,44 mV quando a temperatura do mensurando está em  $-10^{\circ}\text{C}$ , e o valor máximo de cerca de 2,9689 V quando a temperatura do mensurando está em  $50^{\circ}\text{C}$ . Para avaliar o comportamento da tensão de saída em função da temperatura matematicamente, foi realizada uma regressão linear. O método foi escolhido devido a alta linearidade do sistema de medição. Dessa forma, a Equação 51 é o resultado da regressão linear, onde  $T$  é a temperatura em graus Celsius, onde se obteve um valor de  $R^2$  de aproximadamente 0,999993928.

$$V_{OUT} = 0,0424403 \cdot T + 0,850311 \quad [\text{V}] \quad (51)$$

A Figura 54 mostra graficamente a precisão da Equação 51.

**Figura 54 .** Valores de tensão de saída estimados em comparação com os valores simulados.



**Fonte -** Autores.

Observando os coeficientes da Equação 51, podemos verificar que a sensibilidade da tensão de saída do sistema de aquisição de temperatura é de aproximadamente  $0,0424403 \text{ V}/^{\circ}\text{C}$ . Utilizando-se o conversor analógico-digital do ESP32 configurado para operação com 12 bits, é possível obter através da Equação (33) uma resolução de aproximadamente  $805,9 \mu\text{V}$  ou, em termos de temperatura, resolução de cerca de  $19 \text{ m}^{\circ}\text{C}$ , o que corresponde a uma incerteza de aproximadamente  $5,48 \text{ m}^{\circ}\text{C}$ .

A frequência de amostragem do sensor é na escala de segundos, visto que a o RTD de platina demanda um tempo de resposta, para que a sua temperatura seja similar ao do mensurando e que a variação da temperatura ambiente é relativamente suave. Entretanto, para se definir uma frequência exata de amostragem, é necessário que o tempo de resposta do Pt100 seja medido com o RTD interagindo diretamente com o gás natural.

Tendo em vista que a frequência de amostragem é relativamente baixa, é possível realizar o desligamento do circuito por alguns segundos entre a coleta das amostras, de modo a reduzir o consumo de potência e o auto aquecimento do circuito de aquisição de do sensor de platina, o que garante melhor precisão ao sistema de medição como um todo.

#### 4.5. Resultados da rede neural

A otimização dos hiperparâmetros se mostrou melhor ao implementar uma metodologia de *one factor at a time*, onde se faz a análise de um parâmetro de cada vez. Um dos parâmetros mais importantes para a rede neural é o *solver* que calcula os pesos de regressão, seguido do número de camadas e a configuração dos neurônios de cada camada escondida.

De forma geral, foi utilizado um *search grid* para comparar valores, medindo o  $R^2$  do conjunto validação e fazendo a média para um *k-folding* ( $k=4$ ). Ao calibrar qual *solver* balanceia melhor a regressão, também foram testados diversos tamanhos de números de camadas e números de neurônios por camada, partindo de 1 a 3 camadas, e 2 a 10 neurônios por camada, passando por todas as combinações possíveis para essas especificações. Depois foi extraída uma tabela com o  $R^2$  médio para cada *solver* e o tamanho da configuração correspondente. Ao ranquear estes 819 valores da rede por *solver*, é possível ver que 5 neurônios em 1 camada de *lbfgs* tem melhor resultado que qualquer combinação de 30 neurônios de *adam* e *sgd*, sendo respectivamente 0,974 *versus* 0,902 e 0,968. Previamente a este teste havia sido definido qual função de ativação tem melhor combinação com o *solver*, de forma a maximizar o desempenho do *solver*, no caso do *lbfgs* foi o *tanh*.

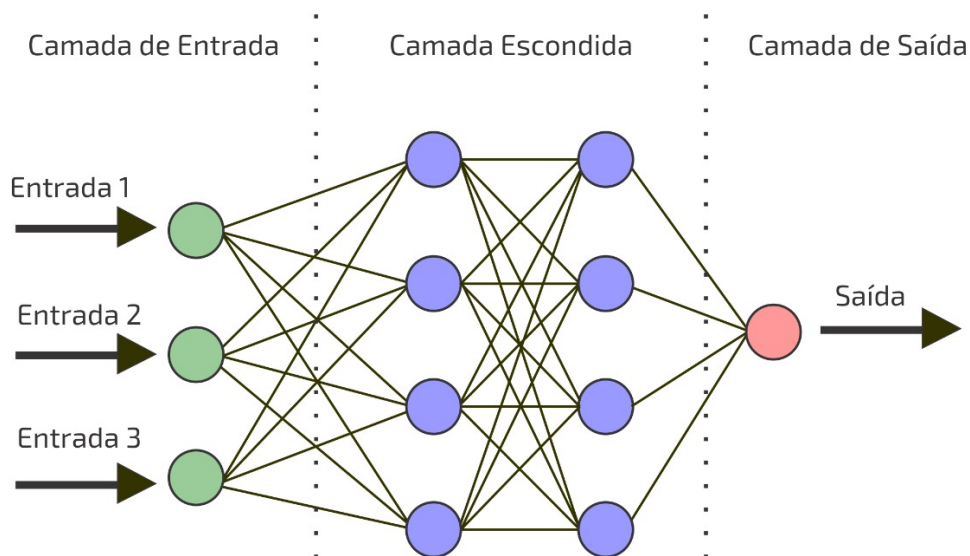
Após estas definições foi analisado o *ranking* de  $R^2$  médio de *lbfgs* assim como os 50 primeiros candidatos em busca de uma razão elevada de  $R^2$  médio por número de neurônios e camadas. Se escolheu a configuração (4,4) que tem uma excelente razão e que se imagina que tenha uma boa generalização. Os demais hiperparâmetros foram otimizados 1 a 1 e tiveram praticamente nenhuma otimização no desempenho da rede. Taxa de aprendizado foi testada *constant versus adaptive*. *Batch size* foi testado de 1 a 1.000, de década em década. Taxa de aprendizado inicial foi testado para 0,1; 0,3; 0,5 e 0,7. E tolerância foi testada de década em década, de 0,1 a 0,000001.

**Tabela 9.** Hiperparâmetros escolhidos

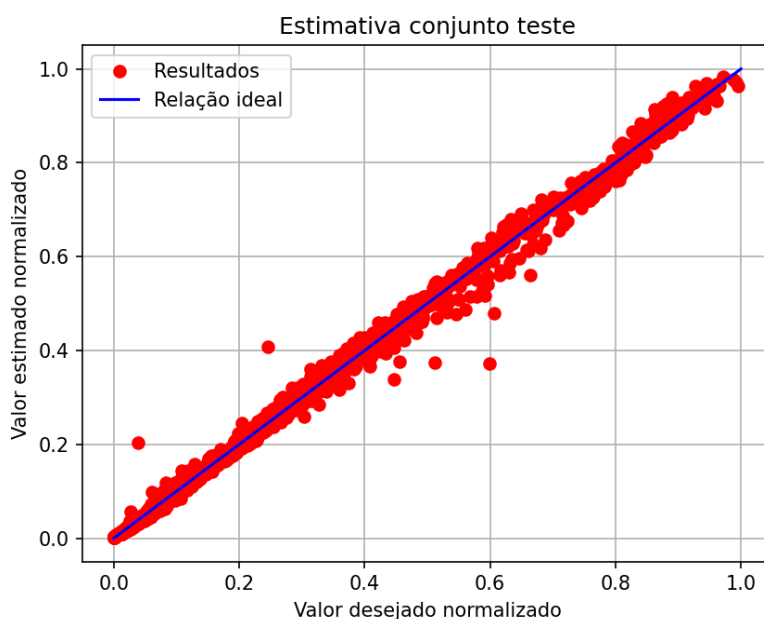
Tipo	Multilayer Perceptron (MLP)
<i>Solver</i>	lbfgs
Número de camadas	2
Número de neurônios (Camada escondida 1)	4
Número de neurônios (Camada escondida 2)	4
Função de ativação	tanh
Taxa de aprendizado	constante
Taxa de aprendizado inicial	0,1
Tolerância	0,00001
Tamanho de <i>batch</i>	1

Fonte - Autores

O modelo mostrado escolhido atingiu um valor de R-quadrado na estimativa do conjunto validação de aproximadamente 0,99553, com um erro médio quadrático correspondente de aproximadamente  $0,00031 \text{ (g/cm}^3\text{)}^2$ . Para se ter uma ideia da generalização da rede, comparou-se o resultado de R-quadrado obtido para o conjunto validação para o R-quadrado obtido para o conjunto treinamento. No conjunto treinamento, o modelo escolhido atingiu um valor de R-quadrado de aproximadamente 0,99566, com um erro médio quadrático associado de cerca de  $0,00029 \text{ (g/cm}^3\text{)}^2$ . A Figura 55 mostra graficamente a estrutura definida para a rede neural artificial.

**Figura 55.** Rede Neural Artificial do Projeto.**Fonte - Autores.**

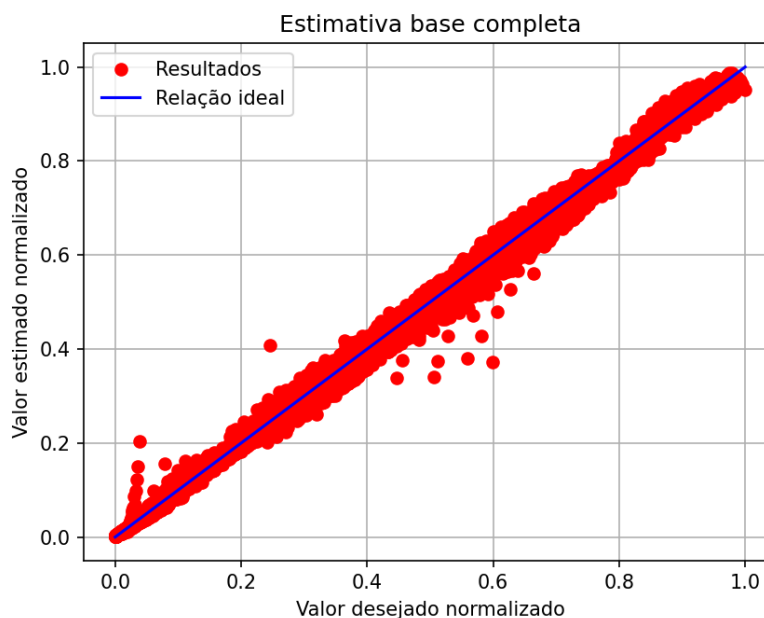
Ao utilizar o modelo exposto na Tabela 9 para estimar as saídas do conjunto de teste, obtemos um valor de R-quadrado de aproximadamente 0,99531, o que corresponde a um erro médio quadrático de cerca de  $0,00032 \text{ (g/cm}^3\text{)}^2$ . A relação entre os valores de densidade reais normalizados e os valores de densidade estimados pela rede neural artificial (também normalizados) é mostrada graficamente na Figura 56, comparadas com uma curva ideal onde o modelo consegue prever perfeitamente a saída a partir das variáveis de entrada.

**Figura 56.** Relação entre a densidade real e a densidade estimada pela rede neural no conjunto teste.**Fonte - Autores**

Com os resultados obtidos pela estimativa do modelo do conjunto teste, podemos verificar que o comportamento da rede está adequado, ou seja, consegue generalizar bem o comportamento fundamental do sistema estudado. Ademais, analisando os valores de R quadrado obtidos para os três conjuntos, conseguimos mais uma evidência de que o modelo treinado está satisfatório, visto que os três valores de R quadrado são muito próximos, mas, como esperado, o R quadrado do conjunto treinamento é maior do que o R quadrado dos conjuntos validação e teste. Comportamento similar também ocorre com os valores de erro médio quadrático, onde o erro médio quadrático da estimativa do conjunto treinamento é menor do que os erros médios quadráticos dos conjuntos de validação e de teste.

A fim de realizar uma última avaliação do desempenho do modelo em estimar a densidade real do gás natural a partir da pressão pseudo-reduzida, da temperatura pseudo-reduzida e da massa molecular média, realizou-se a estimativa, após o treinamento do modelo, de toda a base de dados, compreendendo os três conjuntos: treinamento, validação e teste. O resultado de R quadrado obtido na estimativa da base de dados completa foi de aproximadamente 0,99531, com erro médio quadrático em torno de  $0,00032 \text{ (g/cm}^3\text{)}^2$ . Os resultados da estimativa da base de dados comparados com os valores reais de densidade (ambos normalizados) estão expostos graficamente da Figura 57, comparadas com uma curva ideal onde o modelo consegue prever perfeitamente a saída a partir das variáveis de entrada.

**Figura 57.** Relação entre a densidade real e a densidade estimada pela rede neural para toda a base de dados.



Fonte - Autores

Com essa última avaliação, onde foram estimadas todas as saídas da base de dados com o modelo treinado, conseguimos verificar a capacidade de generalização do modelo e que o mesmo está adequado para atender as especificações demandadas inicialmente da rede neural artificial.

## 5. Conclusões

A rede neural artificial treinada para estimar a densidade real do gás natural a partir da massa molecular média e da temperatura e da pressão pseudo-reduzidas consegue atingir níveis satisfatórios de desempenho no problema de regressão. Através da análise dos resultados dos conjuntos treinamento, validação e teste, conseguimos concluir que seu treino não incorreu em problemas de *overfitting* ou de *underfitting*, conseguindo atingir os objetivos definidos mantendo a simplicidade e baixo custo computacional da rede.

A qualidade de estimativa da rede neural projetada poderia ser melhorada através de equipamentos de medição mais precisos, aumento no tamanho da rede e mudanças matemáticas no seu processamento. Entretanto, o mesmo acarretaria aumento da complexidade e de custos associados a sua implementação.

O sistema de aquisição como um todo conseguiu atingir níveis satisfatórios de precisão e resolução, adequados para a baixa exigência da aplicação. Os sensores de fração molar e de pressão, como se tratam de capacitâncias baixas e com pouca variação, podem ser melhorados com topologias que mensuram defasagem, que conseguem obter uma resolução de medição da ordem de  $10^{-17}$  F.

É preciso levar em consideração que a simulação computacional não levou em consideração possíveis ruídos e outros fatores que podem afetar o sistema quando implementado fisicamente. Dessa forma, para a verificação do projeto do sistema de aquisição, é necessário que os sistemas de aquisição sejam validados em um tanque de armazenamento de gás natural com características como pressão, temperatura, composição e densidade controlados, e que os instrumentos sejam devidamente calibrados.

## Referências Bibliográficas

1. Rogner, HH. Energy Resources. In: Toth, F. (eds) Energy for Development. Environment & Policy, vol 54. 2012. Springer, Dordrecht. [https://doi.org/10.1007/978-94-007-4162-1\\_12](https://doi.org/10.1007/978-94-007-4162-1_12). Acesso em: 08/04/2022.
2. Faramawy, S. Zaki, T. Sakr, A. A. -E. Natural gas origin, composition, and processing: A review. 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jngse.2016.06.030> Acesso em: 08/04/2022.
3. Ma, X. Natural gas and energy revolution: A case study of Sichuan–Chongqing gas province. Volume 4; 2017. pp. 91-99. ISSN 2352-8540. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ngib.2017.07.014>. Acesso em: 08/04/2022.
4. Balitskiy, S. Bilan, Y. Strielkowski, W. Štreimikienė, D. Energy efficiency and natural gas consumption in the context of economic development in the European Union, Renewable and Sustainable Energy Reviews, Volume 55, 2016. Páginas 156-168, ISSN 1364-0321. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.rser.2015.10.053>. Acesso em: 08/04/2022.
5. Wood, D. A. Choubineh, A. Transparent machine learning provides insightful estimates of natural gas density based on pressure, temperature and compositional variables. 2020. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2468256X20300031>. Acesso em: 08/04/2022.

6. Burchell, T. Rogers, M. Low Pressure Storage of Natural Gas for Vehicular Applications. 2020. Disponível em: <https://www.osti.gov/servlets/purl/770962>. Acesso em: 28/04/2022.
7. Schley, P. Jaeschke, M. Küchenmeister, C. Vogel, E. Viscosity measurements and predictions for natural gas Int. J. Thermophys. 2004, pp. 1623-1652. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10765-004-7726-5>. Acesso em: 08/04/2022.
8. Schley, P. Jaeschke, M. Küchenmeister, C. Vogel, E. Viscosity measurements and predictions for natural gas Int. J. Thermophys., 2004, pp. 1623-1652; Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10765-004-7726-5>. Acesso em: 08/04/2022.
9. Sweelssen, J. Blokland, H. Rajamäki, T. Sarjinen, R. Boersma, A. A Versatile Capacitive Sensing Platform for the Assessment of the Composition in Gas Mixtures. 2020, 15 p. Disponível em: <https://www.mdpi.com/2072-666X/11/2/116>. Acesso em: 17/04/2022.
10. Atilhan, M. Aparicio, S. Karadas, F. Hall, K.R. Alcalde, R. Isothermal PpT measurements on Qatar's north field type synthetic natural gas mixtures using a vibrating-tube densimeter J. Chem. Thermodyn., 53. 2012, 8 p. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021961412001590>. Acesso em: 08/04/2022.
11. Rouquerol, F. Sing, K.S.W. Llewellyn, P. Maurin, G. Adsorption by Powders and Porous Solids Principles, Methodology and Applications. 2ª Edição. Elsevier Ltd. 2014.
12. Balbinot, A. Brusamarello, V.J. Instrumentação e Fundamentos de Medidas, 2.ed.; LTC; Rio de Janeiro; Volume 1; 2011.
13. Vocabulário Internacional de Metrologia: Conceitos fundamentais e gerais e termos associados (VIM 2012). Duque de Caxias, RJ : INMETRO, 2012.
14. Boersma, A. Sweelssen, J. Blokland, H. Multiparameter Sensor Array for Gas Composition Monitoring. 2018, 5 p. Disponível em: [https://www.researchgate.net/publication/329397354\\_Multiparameter\\_Sensor\\_Array\\_for\\_Gas\\_Composition\\_Monitoring](https://www.researchgate.net/publication/329397354_Multiparameter_Sensor_Array_for_Gas_Composition_Monitoring). Acesso em: 17/04/2022.
15. Brusamarello, V. Instrumentação Industrial Aplicada à Indústria do Petróleo. Encontro III PROMINP. 2012. Disponível em: [http://www.producao.ufrgs.br/arquivos/disciplinas/492\\_professor\\_valner\\_aula\\_prominp\\_iii-1.pdf](http://www.producao.ufrgs.br/arquivos/disciplinas/492_professor_valner_aula_prominp_iii-1.pdf). Acesso em: 28/04/2022.
16. Weber, T.O. Notas de Aulas, Disciplina de Instrumentação A, UFRGS. 2022
17. Webster, J.G. Eren, H. Measurement, Instrumentation, and Sensors Handbook - Spatial, Mechanical, Thermal, and Radiation Measurement. 2ª edição. 2014, CRC Press
18. Islam, M. R. Reservoir Development - A volume in Sustainable Oil and Gas Development Series. 2021. 1ª Edição. Gulf Professional Publishing. DOI: 10.1016/C2019-0-00936-3.

19. Bahadori, A. Fundamentals of Enhanced Oil and Gas Recovery from Conventional and Unconventional Reservoirs. 2018. 1ª Edição. Gulf Professional Publishing. DOI: 10.1016/B978-0-12-813027-8.00001-1
20. Guo, B. Well Productivity Handbook - Vertical, Fractured, Horizontal, Multilateral, Multi-fractured, and Radial-Fractured Wells, 2ª edição. 2019. Gulf Professional Publishing. <https://doi.org/10.1016/C2018-0-03220-X>
21. Guo, B. Liu, X. Tan, X. Petroleum Production Engineering 2017. 2ª Edição. Gulf Professional Publishing. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/book/9780128093740/petroleum-production-engineering>. Acesso em 04/05/2022.
22. Guo, B. Sun, K. Ghalambor, A. Well Productivity Handbook. 2008. 1ª Edição. Gulf Publishing Company. <https://doi.org/10.1016/C2013-0-15529-8>. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/book/9781933762326/well-productivity-handbook>. Acesso em 04/05/2022.
23. Kelley, H. Alonso, G. LTC6244 High Speed Peak Detector. Analog Devices. 2022. Disponível em: <https://www.analog.com/en/technical-articles/ltc6244-high-speed-peak-detector.html>. Acesso em: 04/05/2022.
24. Alexander, C. K. Sadiku, M. N. O. Fundamentos de Circuitos Elétricos. 5ª edição. The McGraw-Hill Companies, Inc. 2013.
25. Veen, B. V. Haykin, S. Sistemas e Sinais. 1ª edição. Bookman. 2001.
26. Assael, M. J. Dalaouti, N. K. Vesovic, V. Viscosity of Natural-Gas Mixtures: Measurements and Prediction. v. 1.3 2001. 11 p. DOI: <https://doi.org/10.1023/A:1006784814390>. Acesso em: 26/04/2022.
27. Barbosa, C. R. H. Circuitos de Pontes. Notas de Aula de ENG1027: Instrumentação Eletrônica. PUC-RIO. v. 1.5, 2019, 58 p. Disponível em: <http://ef.mec.puc-rio.br/wp-content/uploads/2019/11/2.4b-Circuitos-de-Pontes-rev.pdf>. Acesso em: 17/04/2022.
28. Winter, J. C. F. Gosling, S. D. Potter, J. Comparing the Pearson and Spearman Correlation Coefficients Across Distributions and Sample Sizes: A Tutorial Using Simulations and Empirical Data. 2016, Vol. 21, No. 3, 273–290. Disponível em: <https://www.gwern.net/docs/statistics/order/2016-dewinter.pdf>. Acesso em: 10/04/2022.
29. Bortolossi, H. J. Pré-Cálculo, Disciplina de Pré-Cálculo, v. 1.6, 2016, 16 p. Disponível em: <http://www.professores.im-uff.mat.br/hjbortol/disciplinas/2016.2/gma00116/arquivos/gma00116-slides-03.pdf>. Acesso em: 11/04/2022.
30. Hardik, S. A Full Overview of Artificial Neural Networks (ANN). 2020. Disponível em: <https://learn.g2.com/artificial-neural-network>. Acesso em: 10/04/2022.



31. Russel, S. J. Norvig, P. Artificial Intelligence: A Modern Approach. 2009, Pearson Education Inc.
32. Lathi, B.P. Sinais e Sistemas Lineares. Porto Alegre: Bookman. 2007, 340 p. ISBN 85-60031-13-8.
33. Montgomery, D. C.; Peck, E. A & Vining, G. G. Introduction to linear regression analysis, 3rd ed, Wiley-Interscience, 2006.
34. IOPE. Característica da Termoresistência. 2022. Disponível em: [http://www.iopeservice.iope.com.br/p\\_temp\\_termor\\_b.php](http://www.iopeservice.iope.com.br/p_temp_termor_b.php). Acesso em: 01/05/2022.
35. Langelandsvik, L. Solvang, S. Rousselet, M. Metaxa, I. Assael, M. Dynamic viscosity measurements of three natural gas mixtures: comparison against prediction models Int. J. Thermophys., 28 (2007), pp. 1120-1130. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10765-007-0270-3>. Acesso em: 08/04/2022.
36. Atilhan, M. Aparicio, S. Karadas, F. Hall, K.R. Alcalde, R. Isothermal  $P\rho T$  measurements on Qatar's north field type synthetic natural gas mixtures using a vibrating-tube densimeter J. Chem. Thermodyn., 53 (2012), pp. 1-8 Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0021961412001590>. Acesso em: 08/04/2022.
37. Atkins, P. W. Paula, J. (2008). “Físico-Química”, Vol. 1, Livros Técnicos e Científicos, 8ª ed., Rio de Janeiro.
38. Luo, X. Gianchandani, Y.B. A 100  $\mu\text{m}$  diameter capacitive pressure sensor with 50 MPa dynamic range, v. 1.4, 2016, 11 p. DOI: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0960-1317/26/4/045009/pdf>. Acesso em: 01/05/2022
39. Balbinot, A. Brusamarello, V.J. Instrumentação e Fundamentos de Medidas, 2.ed.; LTC; Rio de Janeiro; Volume 1; 2011.
40. Nimer, E. Climatologia do Brasil. 2ª ed. ISBN 85-240-0282-4. IBGE, 1989.
41. Analog Devices, Datasheet do AmpOp OP1177, v. 1.6, 2018, 24 p. Disponível em: [https://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/op1177\\_2177\\_4177.pdf](https://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/op1177_2177_4177.pdf). Acesso em: 04/03/2022
42. Analog Devices, Datasheet do Amplificador de Instrumentação OP AD8421, v. 1.6, 2020, 31 p. Disponível em: AD8421: <https://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/ad8421.pdf>. Acesso em: 03/05/2022
43. Texas Instruments, Datasheet do Amplificador JFET OPA141, V. 1.4, 2022, 32 p. Disponível em: [https://www.ti.com/lit/ds/symlink/opa141.pdf?ts=1651920497874&ref\\_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F](https://www.ti.com/lit/ds/symlink/opa141.pdf?ts=1651920497874&ref_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F). Acesso em: 02/05/2022

44. Texas Instruments, Datasheet do Amplificador Operacional OPA182, v. 1.4, 2022, 44 p.: [https://www.ti.com/lit/ds/symlink/opa2182.pdf?ts=1651927287525&ref\\_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F](https://www.ti.com/lit/ds/symlink/opa2182.pdf?ts=1651927287525&ref_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F). Acesso em: 02/05/2022
45. Analog Devices, Datasheet do Amplificador Operacional, v 1.7, 2020, 30 p. Disponível em: <https://www.analog.com/media/en/technical-documentation/data-sheets/ltc2066-2067-2068.pdf>. Acesso em: 30/04/2022
46. Texas Instruments, Designing Gain and Offset in Thirty Seconds, v. 1.2, 2002, 15 p. Disponível em: [https://www.ti.com/lit/an/sloa097/sloa097.pdf?ts=1651715690682&ref\\_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F](https://www.ti.com/lit/an/sloa097/sloa097.pdf?ts=1651715690682&ref_url=https%253A%252F%252Fwww.google.com%252F). Acesso em: 29/04/2022

# Correlação

May 7, 2022

## Bibliotecas

```
[1]: import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import seaborn as sns;
```

## Dataframe e Matriz de Correlação Pearson

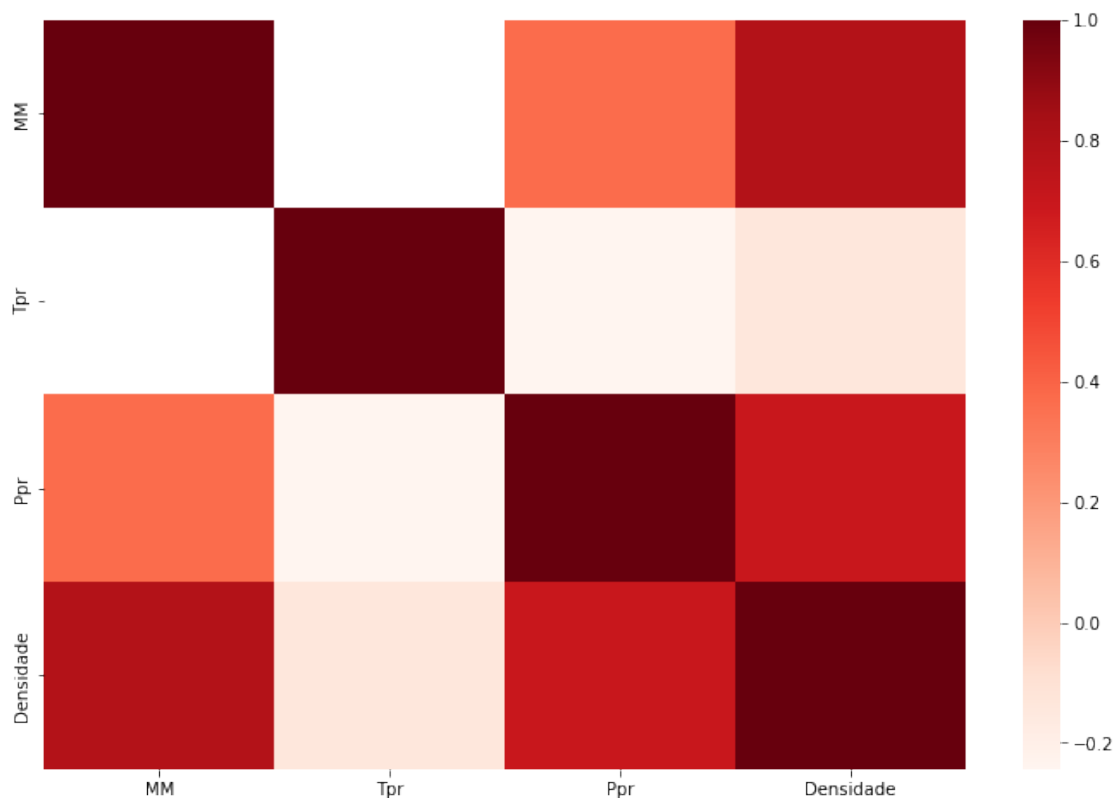
```
[2]: df = pd.read_excel('dataset.xlsx')
df=df.drop(columns=['Ordem'])
corr = df.corr()
print(f'Correlação: {corr}')
```

Correlação:		MM	Tpr	Ppr	Densidade
MM	1.000000	0.019609	0.369999	0.785697	
Tpr	0.019609	1.000000	-0.243773	-0.138795	
Ppr	0.369999	-0.243773	1.000000	0.703230	
Densidade	0.785697	-0.138795	0.703230	1.000000	

## Mapa de calor da Matriz de Correlação Pearson

```
[3]: kot = corr[((corr>=.1) | (corr <= -.1))]
plt.figure(figsize=(12,8))
sns.heatmap(kot, cmap="Reds")
```

```
[3]: <AxesSubplot:>
```



## Matriz de Correlação de Spearman

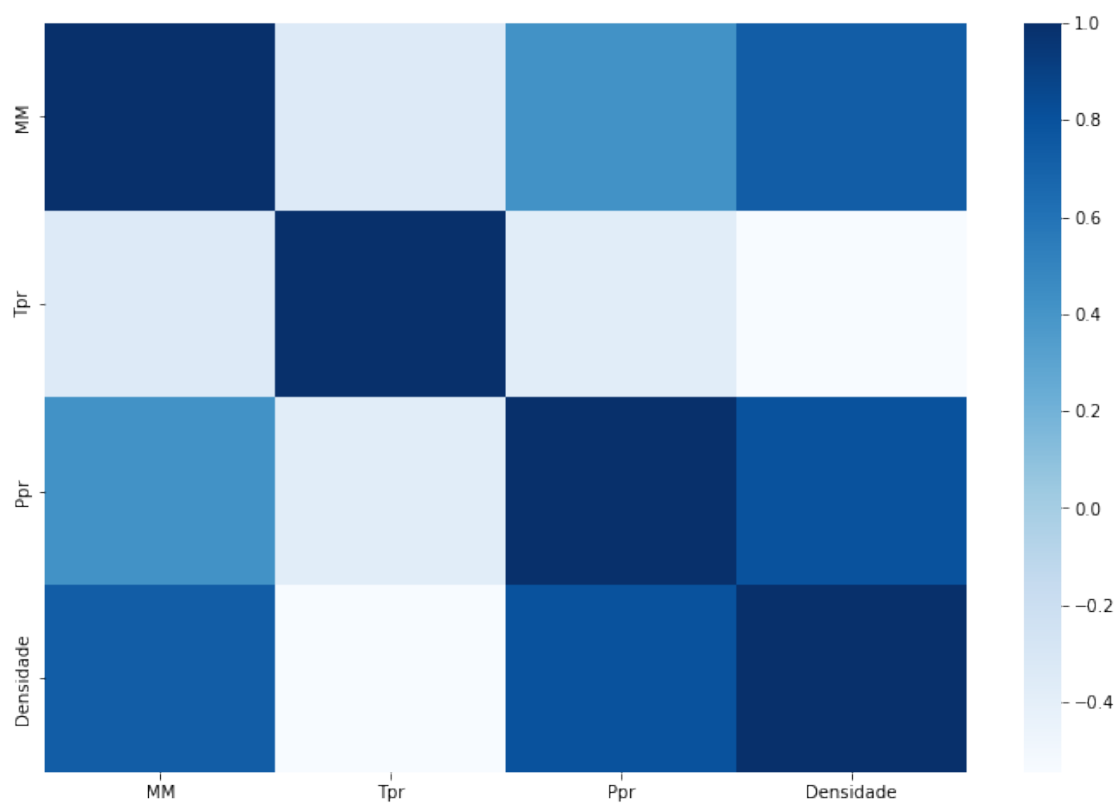
```
[4]: corr2=df.corr(method='spearman')
      print(f'Correlação: {corr2}')
```

```
Correlação:
           MM      Tpr      Ppr  Densidade
MM      1.000000 -0.33990  0.417672  0.731036
Tpr     -0.339900  1.00000 -0.371360 -0.545080
Ppr      0.417672 -0.37136  1.000000  0.795755
Densidade 0.731036 -0.54508  0.795755  1.000000
```

## Mapa de calor da Matriz de Correlação Spearman

```
[5]: kot = corr2[(((corr2>=.1) | (corr2 <= -.1)))]
      plt.figure(figsize=(12,8))
      sns.heatmap(kot, cmap="Blues")
```

```
[5]: <AxesSubplot:>
```



# RNA Densidade de Gases

May 7, 2022

## Bibliotecas

```
[1]: from cmath import sin
from glob import glob
from matplotlib.cbook import flatten
from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D
import matplotlib.pyplot as plt
import numpy as np
import pandas as pd
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
from sklearn.metrics import accuracy_score, mean_squared_error, r2_score
from sklearn.preprocessing import OneHotEncoder, MinMaxScaler, StandardScaler
from sklearn import datasets
from sklearn.model_selection import GridSearchCV, cross_val_score, \
    train_test_split
from numpy import ndarray
from math import pi
import time
from datetime import datetime, timedelta
```

## Dataset

```
[2]: t1 = datetime.now()
df = pd.read_excel('dataset gases randomizado.xlsx')
#df = df.sample(frac=1, random_state = 0)
values = df.to_numpy()
print('\n\t[ Inicializando Operação ] \n')
```

[ Inicializando Operação ]

## Entradas, saídas, mínimos e máximos

```
[3]: entradas = values[:, :]
e1, e2, e3 = entradas[:, 1], entradas[:, 2], entradas[:, 3]
saida = values[:, 4]

e1_max, e1_min = np.max(e1), np.min(e1)
e2_max, e2_min = np.max(e2), np.min(e2)
e3_max, e3_min = np.max(e3), np.min(e3)
s_max, s_min = np.max(saida), np.min(saida)
```



## Normalizando os vetores para a Rede Neural

```
[4]: scaler_e1 = MinMaxScaler(feature_range=(0,1))
scaler_e2 = MinMaxScaler(feature_range=(0,1))
scaler_e3 = MinMaxScaler(feature_range=(0,1))
scaler_s = MinMaxScaler(feature_range=(0,1))
e1_scaled = scaler_e1.fit_transform(e1.reshape(-1, 1))
e2_scaled = scaler_e2.fit_transform(e2.reshape(-1, 1))
e3_scaled = scaler_e3.fit_transform(e3.reshape(-1, 1))
s_scaled = scaler_s.fit_transform(saida.reshape(-1, 1))
```

## Folding Size

```
[5]: Teste = 30 / 100
Validacao = 30 / 100
Treinamento = 40 / 100
assert(Teste + Validacao + Treinamento == 1)
```

## Divisão de Folding

```
[6]: e1_train_val, e1_test, e2_train_val, e2_test, e3_train_val, e3_test, \
    ↪ s_train_val, s_test = train_test_split(e1_scaled, e2_scaled, e3_scaled, \
    ↪ s_scaled, test_size=Teste, random_state=0)
e1_train, e1_val, e2_train, e2_val, e3_train, e3_val, s_train, s_val = \
    ↪ train_test_split(e1_train_val, e2_train_val, e3_train_val, s_train_val, \
    ↪ test_size=Validacao/(Validacao+Treinamento), random_state=0)
e1_train, e2_train, e3_train = np.array(e1_train), np.array(e2_train), np.
    ↪ array(e3_train)
```

## Função para determinar os melhores hiperparâmetros

```
[7]: def sem_grid(v):
    clf = MLPRegressor(solver='lbfgs', hidden_layer_sizes=(v),
                        activation='tanh',
                        learning_rate='constant',
                        learning_rate_init=0.1,
                        tol = 0.00001,
                        max_iter=5000,
                        batch_size=1,
                        momentum=0,
                        random_state=0)
    print(f'\nConfiguração: {v}')
```

```

# Treinamento
→ =====
print('Treino')
xyz_train = np.array((e1_train.flatten('F'), e2_train.flatten('F'), e3_train.
→flatten('F')))
clf.fit(np.transpose(xyz_train), np.ravel(s_train))
predict_train = clf.predict(np.transpose(xyz_train))
mse = mean_squared_error(s_train, predict_train)
print(f'Erro médio quadrático: {mse}')
r_2 = r2_score(s_train, predict_train)
print(f'R^2: {r_2}')

# Validação
→ =====
print('Validação')
xyz_val = np.array((e1_val.flatten('F'), e2_val.flatten('F'), e3_val.
→flatten('F')))
predict_val = clf.predict(np.transpose(xyz_val))
mse = mean_squared_error(s_val, predict_val)
print(f'Erro médio quadrático: {mse}')
r_2 = r2_score(s_val, predict_val)
print(f'R^2: {r_2}')

# Teste
→ =====
print('Teste')
xyz_test = np.array((e1_test.flatten('F'), e2_test.flatten('F'), e3_test.
→flatten('F')))
predict_test = clf.predict(np.transpose(xyz_test))
mse = mean_squared_error(s_test, predict_test)
print(f'Erro médio quadrático: {mse}')
r_2 = r2_score(s_test, predict_test)
print(f'R^2: {r_2}')

# Teste do modelo em toda a base de dados
print(f'Teste final: ')
xyz = np.array((e1_scaled.flatten('F'), e2_scaled.flatten('F'), e3_scaled.
→flatten('F')))
predict_final = clf.predict(np.transpose(xyz))
mse = mean_squared_error(s_scaled, predict_final)
print(f'Erro médio quadrático: {mse}')
r_2 = r2_score(s_scaled, predict_final)
print(f'R^2: {r_2}')

#ipdb.set_trace()

```

```

plt.figure(0)
plt.plot(s_test, predict_test, 'ro', label='Resultados')
plt.plot([0, 1], [0, 1], 'b', label='Relação ideal')
plt.title('Estimativa conjunto teste')
plt.ylabel('Valor estimado normalizado')
plt.xlabel('Valor desejado normalizado')
plt.grid()
plt.legend()

plt.figure(1)
plt.plot(s_scaled, predict_final, 'ro', label='Resultados')
plt.plot([0, 1], [0, 1], 'b', label='Relação ideal')
plt.title('Estimativa base completa')
plt.ylabel('Valor estimado normalizado')
plt.xlabel('Valor desejado normalizado')
plt.legend()
plt.grid()
plt.show()

```

## Função para testar hiperparâmetros e K-Folding

```

[8]: def grid():
    param_grid = [
        { 'solver' : ['lbfgs'],
          'activation' : ['tanh'],
          'hidden_layer_sizes' : [(4, 4)],
          'learning_rate_init' : [0.1],
          'tol' : [0.0001],
          'max_iter' : [5000],
          'batch_size' : [1],
          'learning_rate' : ['constant']
        }
    ]
    clf = GridSearchCV( MLPRegressor(), param_grid, scoring='r2', cv=4)
    xyz_train_val = np.array((e1_train_val.flatten('F'), e2_train_val.
    →flatten('F'), e3_train_val.flatten('F')))
    clf.fit(np.transpose(xyz_train_val), np.ravel(s_train_val))
    print('\n\t[ Resultados ] \n')
    print(f'Melhores parâmetros: {clf.best_params_}')
    print(f'Resultados: {clf.cv_results_["std_test_score"]}')
```

## Programa Principal

```
[9]: def main():  
  
    #grid()  
  
    sem_grid(((4, 4)))  
  
    t2 = datetime.now()  
    delta_t = t2 - t1  
    print(f'\nTempo de execução: {str(delta_t)}\n')  
  
if __name__ == '__main__':  
    main()
```

Configuração: (4, 4)

Treino

Erro médio quadrático: 0.0003784145107849125

R<sup>2</sup>: 0.9942456200088887

Validação

Erro médio quadrático: 0.000412440337728133

R<sup>2</sup>: 0.9939681348541611

Teste

Erro médio quadrático: 0.0004963895997128416

R<sup>2</sup>: 0.9929077246052752

Teste final:

Erro médio quadrático: 0.0004240282608047567

R<sup>2</sup>: 0.9937480974188038



Tempo de execução: 0:00:04.559210