

MODELAGEM VIA REDES NEURAIS ARTIFICIAIS DE UMA UNIDADE INDUSTRIAL DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO FLUIDO

Wagner Roberto de Oliveira Pimentel¹, Antonio Carlos Luz Lisboa², Daniel Ruy Ribeiro Moreira³

¹ Faculdade de Engenharia Química – FEQ - UNICAMP, Cidade Universitária "Zeferino Vaz" - Caixa Postal 6066 - CEP 13081-970 - Campinas - SP, wropimen@feq.unicamp.br

² Faculdade de Engenharia Química – FEQ - UNICAMP, Cidade Universitária "Zeferino Vaz" - Caixa Postal 6066 - CEP 13081-970 - Campinas - SP, lisboa@feq.unicamp.br

³ UN-RLAM (Refinaria Landulpho Alves) – Petrobras, Rodovia BA 523 - KM 04 – Mataripe, São Francisco do Conde – BA, CEP: 41800-000, danielruy@petrobras.com.br

Resumo – Neste trabalho é apresentado um modelo empírico baseado em redes neurais artificiais (RNA) para determinar o comportamento estacionário de uma unidade de craqueamento catalítico fluido (FCC). O FCC é um dos mais importantes processos de refino que produz, dentre outros produtos, gasolina e GLP. Devido a sua complexidade, a modelagem fenomenológica apresenta-se como um grande desafio. O modelo proposto é capaz de prever as vazões das correntes de saída do processo (gasolina, GLP, gás combustível, LCO e óleo decantado) levando em conta treze variáveis de entrada. O modelo de RNA utilizou arquiteturas do tipo *perceptron* de múltiplas camadas (MLP) usando o algoritmo de Levenberg-Marquardt para otimização dos pesos da rede. Para melhorar a capacidade de generalização das redes neurais foi utilizada a técnica de Regularização Bayesiana. Os resultados indicaram que a RNA é capaz de prever com precisão os dados medidos.

Palavras-Chave: redes neurais; craqueamento catalítico fluido; modelagem de processos.

Abstract – This work presents an empirical model based on an artificial neural network (ANN) which describes the steady state behavior of a fluidized bed catalytic cracking (FCC) unit. FCC is a major process in the petroleum refining. It produces, among others, gasoline and liquefied petroleum gas (LPG). Due to its enormous complexity, it is difficult to model it by only fundamental balances. The proposed model is able to predict the product streams flow rates (gasoline, LPG, light cycle oil, decanted oil) taking into account thirteen input variables. The ANN model used the Multi-Layers Perceptron (MLP) architecture employing the Levenberg-Marquardt algorithm to optimize the network weights. To increase the network generalization capacity, it was used the Bayesian regularization. The results indicate that the network is able to accurately predict the operating data.

Keywords: neural networks; fluid catalytic cracking; process modeling

1. Introdução

O craqueamento catalítico fluido é o mais importante processo usado na refinaria pois converte frações pesadas provenientes da destilação do petróleo (gasóleo e resíduos) em frações mais leves (derivados nobres) de maior valor comercial. A quantidade e características dos produtos do FCC dependem de diversos parâmetros tais como: temperatura de reação, vazão de carga, atividade catalítica, tempo de residência, etc. (Christensen et al., 1999).

Uma típica unidade de FCC consiste de dois reatores interconectados: um de leito de arraste (*riser*) e outro de leito fluidizado (regenerador). O reator *riser*, onde quase todas as reações de craqueamento endotérmico e deposição de coque no catalisador ocorrem, e o regenerador, onde ar é usado para eliminar - através de queima - o coque acumulado no catalisador. O calor produzido é carregado pelo catalisador do regenerador para o reator *riser*. Assim, além de reativar o catalisador, o regenerador fornece o calor requerido pelas reações de craqueamento endotérmico.

Observa-se que este processo é muito complexo pois existem fortes interações entre as variáveis operacionais do reator *riser* e do regenerador (Dewachtere et al, 1997). Além disso, há um grande grau de incerteza sobre a cinética das reações de craqueamento e desativação do catalisador por deposição de coque. De acordo com Michalopoulos et al. (2001), qualquer melhoria no projeto, operação ou controle deste processo pode resultar em substanciais benefícios econômicos.

Nesse contexto, o desenvolvimento e a aplicação de modelos que forneçam respostas rápidas e confiáveis torna-se uma parte importante em aplicações de otimização e/ou controle das unidades de FCC. O uso de modelos fenomenológicos para representar o processo de FCC apresenta-se como um grande desafio devido a complexidade existente no processo.

Para contornar este problema, as redes neurais artificiais (RNA) surgem como ferramentas para modelar processos químicos complexos. As RNA não fornecem um conhecimento detalhado do fundamento físico do problema, mas fornecem uma descrição da relação dinâmica entre as variáveis de entrada e saída.

O presente trabalho teve como objetivo modelar uma unidade industrial de FCC usando redes neurais artificiais. O modelo obtido é capaz de prever as vazões das correntes de saída (gasolina, GLP, gás combustível, gás ácido e óleo decantado) com treze variáveis de entrada. Os dados foram obtidos na unidade industrial de FCC da RLAM (Refinaria Landulpho Alves) da Petrobras. Foram utilizadas redes neurais do tipo *perceptron* de múltiplas camadas (redes MLP) com o algoritmo de Levenberg-Marquardt para otimização dos pesos da rede. A técnica de regularização Bayesiana foi utilizada para melhorar a capacidade de generalização da rede. O modelo pode ser utilizado como ferramenta para otimização das condições operacionais do processo visando maximizar ou minimizar uma dada vazão de saída de um dos produtos..

2. Redes Neurais Artificiais

As redes neurais artificiais são estruturas matemáticas baseadas no funcionamento do cérebro humano, numa tentativa de reproduzi-lo. A rede é formada por unidades computacionais básicas, os neurônios, interagindo através de conexões de intensidade variável, as sinapses; esta estrutura neural procura copiar a forma de ligação entre um neurônio e outro no cérebro humano. Cada neurônio possui várias entradas e saídas que se comunicam aos subsequentes através de ligações modificadas por pesos, que funcionam alterando a força da conexão sináptica.

As redes neurais artificiais são funções que estimam relações de entrada/saída de um sistema. Portanto, as redes são mais uma ferramenta a ser utilizada na modelagem de processos. Sua característica mais interessante é que não dependem de um modelo matemático que relacione a entrada do processo com a saída. Elas “aprendem” essa relação a partir de um processo de “treinamento” semelhante ao aprendizado de um cérebro humano. Estas abordagens podem ser vistas em Haykin (1999).

O neurônio computacional funciona de forma semelhante ao biológico, possuindo várias entradas e saídas. Saídas estas que são conectadas ao elemento adjacente através de conexões ponderadas de maneira similar às ramificações sinápticas. Cada conexão possui um peso correspondente que modifica os sinais de entrada. Os sinais ponderados são somados, modificados por uma função de ativação (sigmoide, seno hiperbólico, tangente hiperbólica, linear, etc) e enviados da saída para a entrada do próximo neurônio. O funcionamento do neurônio artificial pode ser resumido nos seguintes passos:

- os sinais são recebidos do neurônio anterior;
- os sinais são multiplicados por pesos correspondentes a cada ligação;
- os sinais ponderados são somados para caracterizar a combinação dos efeitos de cada entrada;
- a soma calculada é modificada por uma função de ativação ou transferência para compensar as inter-relações entre as entradas;
- os sinais ativados seguem para o neurônio subsequente.

Uma rede neural artificial funciona com vários neurônios trabalhando como descrito anteriormente, organizados em camadas, em seqüência. Os dados são alimentados na camada de entrada e a resposta da rede neural a este efeito é observada na saída. A Figura 1 mostra uma rede neural artificial do tipo *feedforward* na qual a informação propaga-se pela rede num único sentido. Podem existir uma ou mais camadas entre a entrada e a saída da rede,

chamadas de ocultas. O seu número é dado pela característica do sistema. Em processos químicos o uso de apenas uma camada oculta tem sido usado com sucesso.

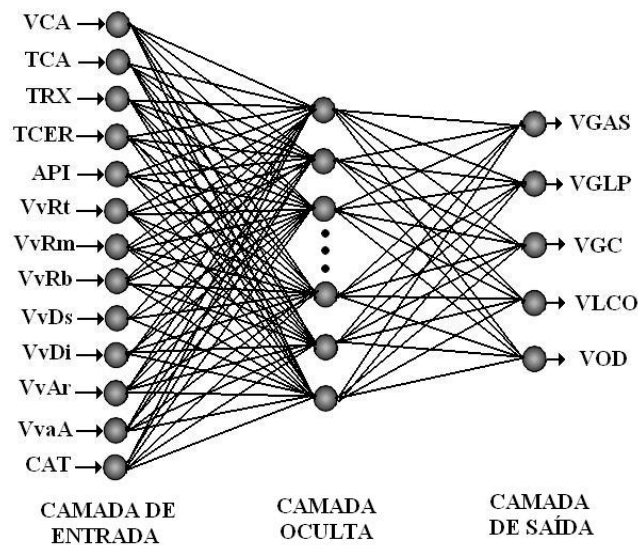


Figura 1. Arquitetura de uma rede neural do tipo feedforward com as variáveis de entrada e saída usadas para modelar o processo de FCC

A metodologia para a fase de treinamento das redes neurais artificiais foi basicamente consolidada por Rumelhart e McClelland (1986), e é conhecida como método da retropropagação (*backpropagation*). A fase de aprendizado e de treinamento é basicamente um problema de otimização e apresenta algumas dificuldades associadas à otimização de processos: convergência, existência de mínimos locais, esforço computacional, entre outros, e não existe até o momento um algoritmo comprovadamente eficiente para assegurar um treinamento ótimo. Existem diversas variações do algoritmo *backpropagation* com a finalidade de resolver partes dos problemas citados anteriormente. No presente trabalho foi utilizada uma variação do algoritmo *backpropagation* padrão que é o método de Levenberg-Marquardt (Demuth e Beale, 2002).

2.1 O método da Regularização Bayesiana para evitar sobre-ajuste

A Regularização Bayesiana envolve a modificação da função objetivo geralmente utilizada, que é o somatório dos erros quadráticos médio das respostas da rede (E_d)

$$F = E_d = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (e_i)^2 \quad (1)$$

O objetivo da modificação é melhorar a capacidade de generalização do modelo. A função objetivo na Equação 1 é expandida com a adição de um termo E_w o qual é a soma dos quadrados dos pesos da rede:

$$F = \alpha E_D + \beta E_w \quad (2)$$

onde α e β são os parâmetros a serem otimizados na estrutura Bayesiana de MacKay (1992). É assumido que os pesos e biases da rede são variáveis randômicas que seguem uma distribuição Gaussiana e os parâmetros estão relacionados às variâncias associadas com essas distribuições. É fato conhecido que a técnica de regularização ótima requer um certo custo computacional da matriz Hessiana. Para contornar esta desvantagem, Foresee e Hagan (1997) propuseram aplicar a aproximação Gauss-Newton a matriz Hessiana, a qual pode ser implementada se o algoritmo de otimização Levenberg-Marquardt é usado para a localização do ponto mínimo. Este minimiza a computação adicional requerida para a regularização.

3. Metodologia

O treinamento e validação do modelo de RNA foi baseado em dados industriais fornecidos pela Refinaria Landulpho Alves (RLAM) da Petrobras. O conjunto de dados envolve um ano e meio de produção diária desta refinaria resultando em 293 amostras. Antes da aplicação dos modelos de RNA, os dados passaram por uma análise exploratória utilizando a técnica de análise dos componentes principais (PCA) com a finalidade de remover amostras com comportamento anômalo (*outliers*). Os dados foram pré-processados usando o autoescalamento (subtrai o valor de uma

dada variável do valor médio das observações para esta variável e divide pelo desvio padrão da mesma). As funções de ativação utilizadas nas redes neurais artificiais são: 1) tangente hiperbólica para os neurônios na camada oculta e 2) função linear para os neurônios na camada de saída. A Tabela 1 mostra as variáveis de entrada e saída que foram consideradas na construção do modelo. Os resultados mostrados na próxima seção são apresentados em função da raiz quadrada do erro quadrático médio (*RMSE*), dado pela Equação 3:

$$RMSE = \sqrt{\frac{\sum_p \sum_m (y_m^p - d_m^p)^2}{p \cdot m}} \quad (3)$$

em que d_m^p é a saída desejada do neurônio de saída m para a amostra p e y_m^p é a saída fornecida pela rede neural.

4. Resultados

A análise exploratória através da técnica de PCA indicou a necessidade de remover 57 amostras do conjunto original dos dados visto que elas estavam acima do valor limite para o teste estatístico para T^2 de Hotelling. Para maiores detalhes sobre o uso da técnica de PCA na detecção de *outliers* para dados industriais consulte Pimentel (2005). Assim sendo, o número de amostras foi reduzido para 236 em que 50% foi usado para treinamento da rede, 25% para validação e 25% para teste (Haykin, 1999).

Tabela 1. Variáveis de entrada e saída para a unidade de FCC da RLAM – Petrobras.

VARIÁVEIS DE ENTRADA	SIGLA	VARIÁVEIS DE SAÍDA	SIGLA
Vazão de carga	VCA	Vazão de gasolina	VGAS
Temperatura da carga	TCA	Vazão de GLP	VGLP
Temperatura de reação	TRX	Vazão de gás combustível	VGC
Temperatura da fase densa	TCER	Vazão de LCO	VLCO
Densidade da carga	API	Vazão de óleo decantado	VOD
Vazão de vapor do retificador (topo)	VvRt		
Vazão de vapor do retificador (meio)	VvRm		
Vazão de vapor do retificador (base)	VvRb		
Vazão de vapor de dispersão (superior)	VvDs		
Vazão de vapor de dispersão (inferior)	VvDi		
Vazão de vapor de arraste (radial)	VvAr		
Vazão de vapor de arraste (axial)	VvAa		
Catalisador (atividade)	CAT		

A rede com melhor capacidade de generalização teve 21 neurônios na camada oculta e os resultados a seguir referem-se a esta rede com configuração (13:21:6). A Figura 2 mostra os valores de *RMSE* em função do número de neurônios na camada oculta. Observa-se que com 21 neurônios na camada oculta a rede apresentou o menor valor no conjunto de validação.

A Figura 3 mostra os gráficos obtidos para cada variável de saída quando os valores experimentais são confrontados com os preditos pela rede neural. Para um modelo ideal a reta de ajuste deverá ter coeficiente de correlação (R) igual a 1 e os coeficientes angulares (a) e lineares (b) iguais a 1 e 0, respectivamente. Na Figura 3 observa-se que os coeficientes obtidos estão muito próximos do ideal indicando que o modelo de RNA teve bons resultados tanto para treinamento quanto para teste. Isto fica mais evidente pelas retas de ajuste perfeito e a obtida pelo modelo de redes neurais que são quase coincidentes.

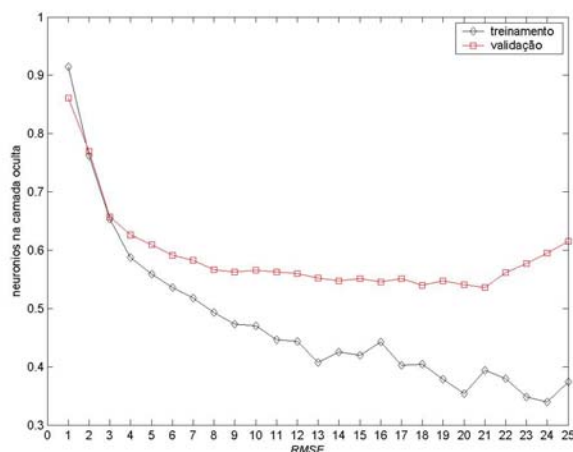


Figura 2: RMSE para treinamento e validação em função do número de neurônios na camada oculta

A Figura 4 mostra outra forma de avaliar o modelo de rede neural aqui considerado. Nesta figura estão os desvios (absolutos) obtidos pela diferença entre os valores medidos e preditos divididos pelo valor medido. Dentro das condições de medições da unidade, foi considerado um desvio abaixo de 10% como sendo aceitável para o modelo. Através da Figura 4 observa-se que o modelo foi capaz de prever 97,46% das amostras com desvio inferior a 10% para a variável vazão de gasolina (VGAS). Da mesma forma tem-se os seguintes resultados para as demais variáveis: vazão de gás liquefeito do petróleo (VGLP): 81,78%; vazão de gás combustível (VGC): 98,73%; vazão de óleo leve de reciclo (VLCO): 64,41%; vazão de óleo decantado (VOD): 63,14%. Estes resultados indicam que a rede neural teve um bom aprendizado e que também teve uma boa capacidade de generalização.

5. Conclusões

Um modelo baseado em redes neurais artificiais foi desenvolvido para uma unidade industrial de craqueamento catalítico fluido. Os resultados indicaram que predições precisas podem ser feitas por este modelo empírico, o que foi confirmado pelos resultados obtidos para o conjunto de validação. O comportamento altamente não-linear do processo de FCC pôde ser modelado com sucesso uma vez que o modelo apresentou um alto índice de amostras com desvios abaixo de 10% para todas as variáveis de saída consideradas.

6. Agradecimentos

Os autores agradecem a FAPESP pelo apoio financeiro e a PETROBRAS pelos dados da unidade industrial de FCC da RLAM.

7. Referências

- DEMUTH, H., BEALE, M. Neural Network Toolbox – For Use with Matlab, Version 4, The MathWorks Inc., 2002.
- DEWACHTERE, N. V., FROMENT, G. F., VASSALOS, I., MARKATOS, N., SKANDALIS, N. Advanced Modelling of Riser-type Catalytic Cracking Reactors, *Applied Thermal Engineering*, 17: 837-844, 1997.
- FORESEE, F. D., HAGAN, M. T. Gauss-Newton approximation to Bayesian regularization. *Proc. IJCNN 1997*. 1930-1935, 1997.
- HAYKIN, S. S. Neural Networks: A comprehensive Foudation, Prentice Hall, 1999.
- MACKAY, D. J. C. Bayesian interpolation. *Neural Computation*. vol. 4, pp. 415-447, 1992.
- MICHALOPOULOS, J., PAPADOKONSTADAKIS, S., ARAMPATZIS, G., LYGEROS, A. Modelling of an Industrial Fluid Catalytic Cracking Unit Using Neural Networks. *Trans.IchemE.*, vol. 79, part A, 137-142, 2001.
- RUMELHART, D. E., MCCLELLAND, J., L. Parallel Distributed Processing: Exploration in the Microstructure of Cognition, vol. 1. MIT Press, Cambridge, Massachussets, 1986.
- PIMENTEL, W. R. O. Aplicação de Redes Neurais Artificiais e de Quimiometria na Modelagem do Processo de Craqueamento Catalítico Fluido. *Tese de Doutorado*. Faculdade de Engenharia Química – UNICAMP, 2005.

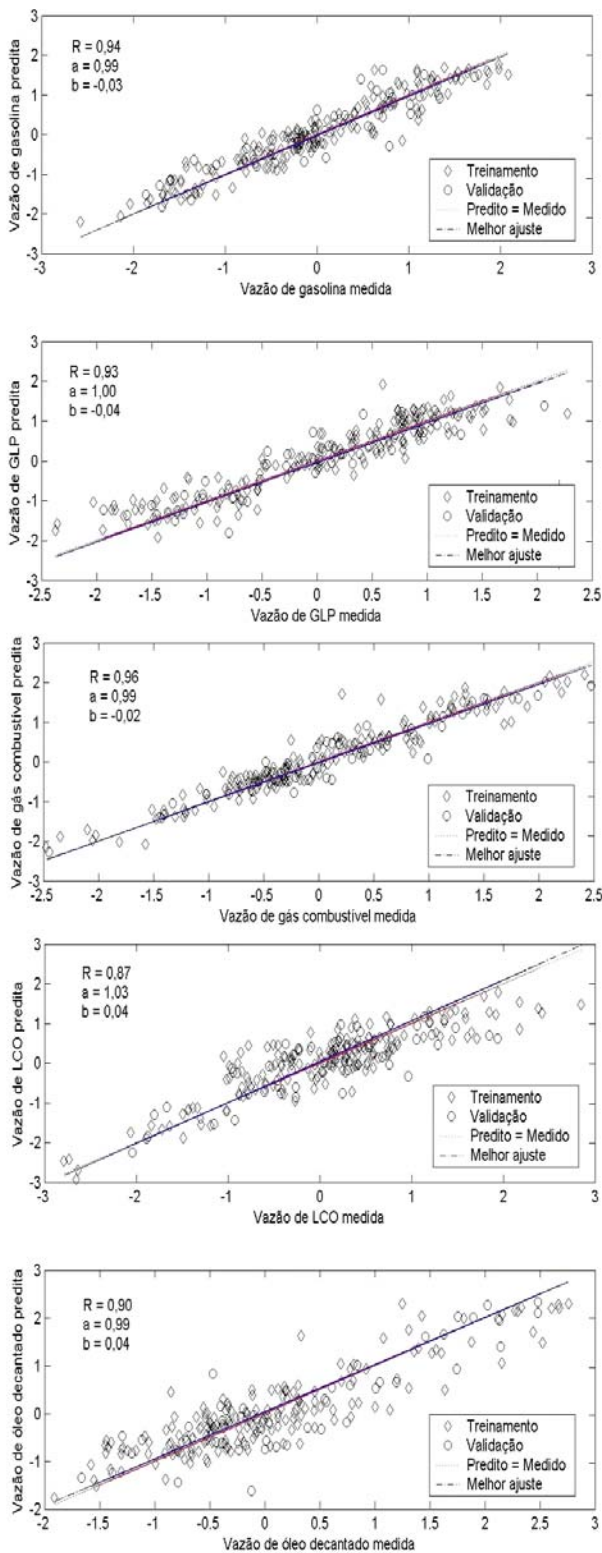


Figura 3. Gráficos dos valores medidos *versus* valores preditos pelo modelo de redes neurais das variáveis de saída do processo de FCC.

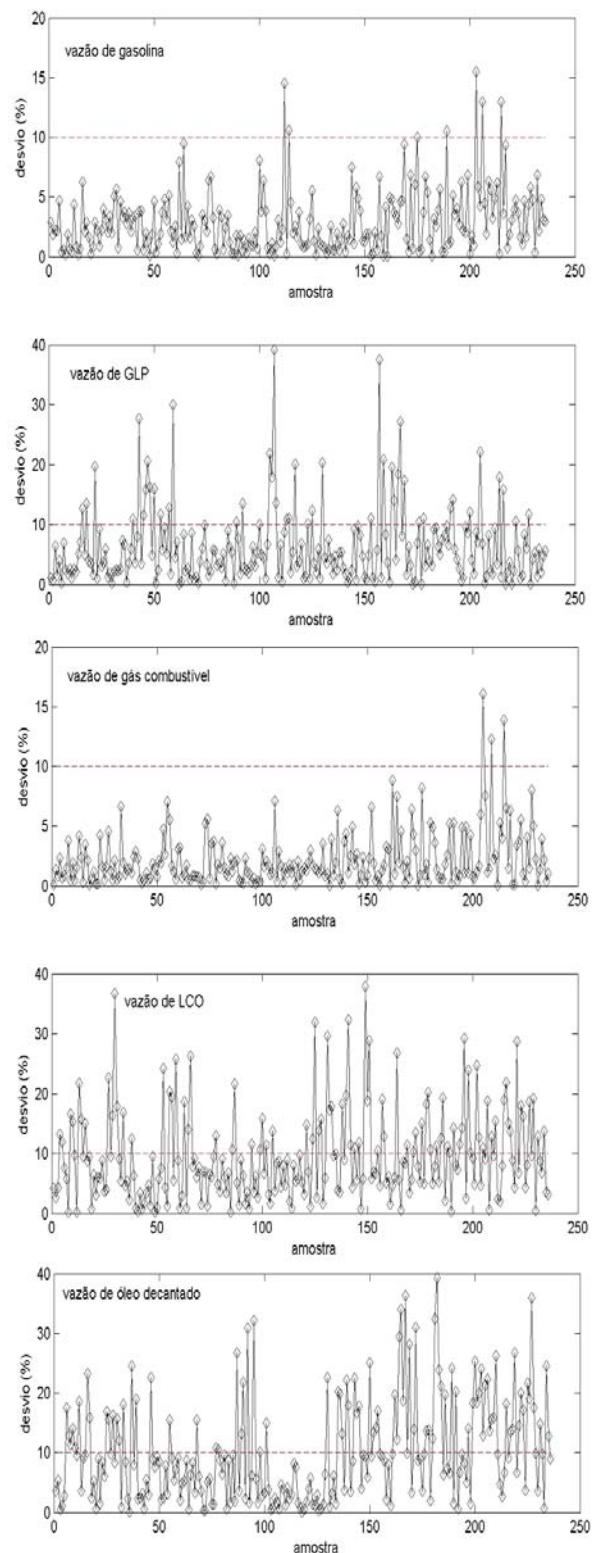


Figura 4. Desvios para cada variável de saída em função das amostras