

Copyright 2004, Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás - IBP

Este Trabalho Técnico Científico foi preparado para apresentação no 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás, a ser realizado no período de 2 a 5 de outubro de 2005, em Salvador. Este Trabalho Técnico Científico foi selecionado e/ou revisado pela Comissão Científica, para apresentação no Evento. O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pelo IBP. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões do Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás, Sócios e Representantes. É de conhecimento e aprovação do(s) autor(es) que este Trabalho será publicado nos Anais do 3º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo e Gás

ELABORAÇÃO DE MODELO DE INFERÊNCIA PARA CONTROLE DE UNIDADE DE DESTILAÇÃO ATMOSFÉRICA DE PETRÓLEO

Eduardo Frozza¹, Luiz Fernando de Lima Luz Jr²

¹ Universidade Federal do Paraná, Departamento de Eng. Química, Centro Politécnico, Jardim das Américas, Curitiba – PR, Caixa postal 19011, eduardofrozza@ufpr.br

² Universidade Federal do Paraná, luzjr@ufpr.br

Resumo – O controle da qualidade dos produtos obtidos na destilação atmosférica do petróleo é fundamental para a rentabilidade de um processo de refino. No entanto, esse controle não pode ser realizado por técnicas convencionais dada a inviabilidade de se medir on-line as propriedades dos produtos em questão. Para contornar essa situação, emprega-se o controle inferencial, que se baseia na utilização de modelos de inferência para estimar as propriedades que não podem ser medidas. Um modelo detalhado, em estado estacionário, de uma unidade de destilação atmosférica de petróleo foi elaborado no simulador comercial Aspen Plus[®]. Esse modelo foi utilizado na geração de um extenso banco de dados, contendo variáveis como temperaturas, vazões, pressões, propriedades de correntes, entre outras, para diversas condições distintas de operação da unidade de destilação. A partir desse banco de dados, utilizou-se regressão linear multivariável para se obter modelos de inferência que permitissem o cálculo da temperatura correspondente a um volume destilado de 95% na curva TBP das correntes de diesel, querosene e nafta pesada. Cada um desses modelos é alimentado com um conjunto de variáveis de entrada, distinto, composto por temperaturas e vazões do processo. Entre todos os modelos, foi possível identificar um mais adequado ao emprego no controle inferencial da qualidade de cada um desses três produtos.

Palavras-Chave: controle inferencial, modelos de inferência, destilação atmosférica de petróleo, TBP

Abstract – Quality control of the products obtained in petroleum atmospheric distillation is fundamental for a refining process profitability. Nevertheless, this type of control can not be performed by the use of conventional techniques, due to the unfeasibility of such product's property measurement. In order to avoid this problem, inferential control is employed, which is based on the use of inference models for the estimation of properties. A rigorous, steady state model for a petroleum atmospheric distillation unit has been prepared in simulation software Aspen Plus^(R). This model was employed to generate a large data bank, containing variables such as temperatures, stream flows, pressures, stream properties, within others, for different operation conditions of the distillation unit. From this data, multivariable linear regression was used in order to fit several inference models that allow the calculation of the temperature corresponding to 95% liquid volume distillate in diesel, kerosene and heavy naphta's TBP curve. Each model is fed by a distinct input set, composed by process temperatures and flows. Among all these models, it was possible to identify one that is the most adequate to be employed in each o these three product's inferential control.

Keywords: inferential control, inference models, crude atmospheric distillation, TBP

1. Introdução

O controle da qualidade das frações obtidas a partir de uma unidade de destilação atmosférica de petróleo é complexo, uma vez que não se podem medir alterações das composições das diversas correntes de saída em tempo rápido o suficiente para garantir um bom desempenho do controle. Na verdade, em muitos casos semelhantes, são empregados analisadores em linha, mas estes nem sempre têm seu emprego justificado do ponto de vista econômico. Além disso, a medida da composição de uma mistura complexa é geralmente demorada. A solução, então, é inferir essas variáveis a partir de outras mais facilmente medidas, como temperaturas, vazões e pressões, ou seja, adotar o controle inferencial.

No controle inferencial de colunas de destilação, a qualidade dos produtos (geralmente, a pureza de uma determinada corrente) é inferida a partir de medidas de temperaturas ao longo da coluna, além de alguns outros parâmetros, como razão de refluxo, cargas térmicas, vazões etc. Essa abordagem foi primeiramente proposta por Babu e Brosilow (1978).

O controle inferencial baseia-se, portanto, em modelos de inferência, que relacionam as variáveis de interesse (difíceis ou impraticáveis de serem medidas, como a composição da corrente de topo de uma coluna de destilação) com um conjunto de variáveis fáceis de medir (temperaturas nos pratos, razão de refluxo, entre outras). Esse modelo de inferência pode ser analítico ou empírico. Os modelos analíticos são utilizados quando as variáveis controladas e secundárias podem ser correlacionadas a partir de relações matemáticas, como balanços de massa e energia. Marlin (1995) exemplifica que a conversão de um reator pode ser calculada em função da variação de temperatura proveniente do balanço material e energético.

Por outro lado, em sistemas mais complexos, como colunas de destilação, um modelo analítico que amarre a variável controlada às medidas secundárias não é viável. Nesses casos, essa correlação deve ser feita pelo ajuste de expressões empíricas, por meio de regressão linear, por exemplo. Os dados para a regressão do modelo podem corresponder a um conjunto histórico de medidas feitas na planta. Entretanto, simuladores estacionários e dinâmicos podem ser empregados com grande eficiência na geração desse conjunto de dados.

Este trabalho está focado na determinação de um modelo de inferência empírico a partir de dados obtidos por simulação computacional.

2. Materiais e Métodos

A metodologia de trabalho consistiu de três etapas: (a) elaboração de um modelo estacionário para a simulação computacional do processo, (b) emprego do modelo para a geração de um banco de dados e (c) ajuste e teste de modelos obtidos por regressão linear multivariável. Este trabalho é baseado exclusivamente em dados de simulação por computador.

2.1. Elaboração do Modelo Estacionário

O passo inicial do trabalho foi a elaboração, no simulador Aspen Plus®, de um modelo estacionário que representasse a unidade de destilação atmosférica de petróleo. No software Aspen Plus®, foi elaborado o fluxograma da Figura 1, para simulação em estado estacionário.

O objeto de estudo é a unidade de destilação atmosférica (CRUDE), representada na Figura 1 como a coluna à direita do fluxograma. No entanto, foi modelada também uma unidade de pré-flash (PREFLASH), para simular com maior realismo os distúrbios sofridos pelo sistema.

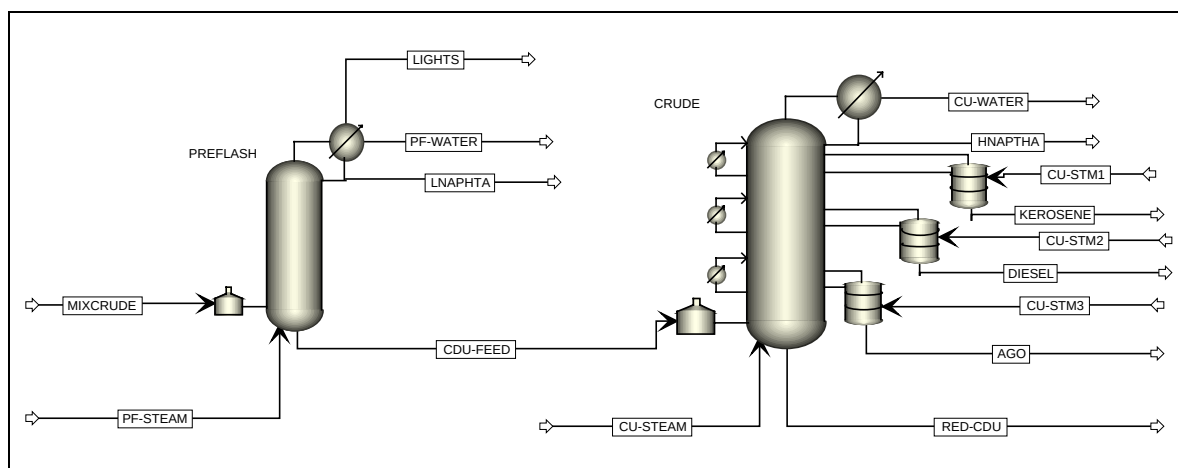


Figura 1. Fluxograma do processo, elaborado em Aspen Plus®

Na torre de pré-flash, o *blend* de alimentação (composto por dois petróleos distintos: ÓLEO1 e ÓLEO2) é pré-fracionado, sendo os gases retirados no topo. Em seguida, na coluna de destilação atmosférica, o petróleo é separado em quatro produtos: nafta pesada, querosene, diesel e gasóleo atmosférico, além do resíduo de fundo. Os três últimos produtos são ainda retificados em colunas de *stripping*, para retirada de contaminantes leves.

2.2. Geração de Dados

Para a geração de dados, variáveis importantes do sistema foram variadas de forma a compor um extenso conjunto de dados de entrada para o simulador. Esses dados de entrada foram então alimentados ao simulador, que fez os cálculos para as diferentes condições de processo propostas, gerando um conjunto de dados de saída. Mais especificamente, os dados de saída de interesse para o trabalho são as temperaturas ao longo da coluna e a temperatura correspondente a 95% de volume destilado na curva TBP dos produtos (nafta pesada, querosene e diesel).

Ao todo, foram feitas 2160 simulações do sistema, no estado estacionário, abrangendo todas as combinações de variáveis apresentadas na Tabela 1.

Tabela 1. Variáveis da geração de dados

Variável	Unidades	Valores considerados
Fração volumétrica de ÓLEO1 na alimentação	-	0,40
		0,45
		0,50
		0,55
		0,60
Vazão de destilado na coluna de pré-flash	bbl/dia	6500
		7198
		7900
Temperatura no forno na coluna de pré-flash	°C	240
		250
		260
Sobre-flash gerado no forno da coluna de destilação atmosférica	-	0,05
		0,10
		0,15
Produção de nafta pesada	bbl/dia	15000
		17000
Produção de querosene	bbl/dia	5200
		6300
Produção de diesel	bbl/dia	13000
		15800
Produção de gasóleo atmosférico	bbl/dia	13900
		16900

De cada seis simulações, uma foi reservada à calibração do modelo de inferência, enquanto, as outras cinco foram empregadas na sua verificação.

2.3. Determinação dos Modelos

Usando-se o método de regressão linear multivariável, diversos modelos foram determinados para a predição das temperaturas correspondentes, a 95% de volume destilado na curva TBP das correntes de diesel, querosene e nafta pesada. Essas temperaturas são as variáveis de resposta dos modelos, e serão identificadas neste texto pela seguinte simbologia: T_{diesel} , $T_{querosene}$ e T_{nafta} . Como variáveis de entrada dos modelos, testaram-se diferentes subconjuntos, dentre as variáveis listadas na Tabela 2.

A Tabela 3 contém os conjuntos de variáveis de entrada considerados para a determinação de modelos para a predição de T_{diesel} , $T_{querosene}$ e T_{nafta} . Esses conjuntos já foram pré-selecionados, por apresentarem alto grau de explicação, tanto para os dados brutos (r^2), como para os dados ajustados ($r^2 - aj$). Os modelos são lineares de primeira ordem, ou seja, assumem o escopo da Equação 1.

$$Y = b + a_1 \cdot X_1 + a_2 \cdot X_2 + \Lambda + a_n \cdot X_n \quad (1)$$

Tabela 2. Variáveis de entrada dos modelos

Variável	Descrição
D	Fração volumétrica da alimentação da coluna atmosférica retirada no destilado (nafta pesada)
S_1	Fração volumétrica da alimentação da coluna atmosférica retirada no <i>stripper</i> 1 (querosene)
S_2	Fração volumétrica da alimentação da coluna atmosférica retirada no <i>stripper</i> 2 (diesel)
S_3	Fração volumétrica da alimentação da coluna atmosférica retirada no <i>stripper</i> 3 (gasóleo)
T_{13}	Temperatura no prato 13 da coluna (prato onde é retirada a corrente de querosene)
T_{19}	Temperatura no prato 19 da coluna (prato onde é retirada a corrente de diesel)
T_{24}	Temperatura no prato 24 da coluna (prato onde é retirada a corrente de gasóleo atmosférico)
S_1T_1	Temperatura na prato superior do <i>stripper</i> 1 (querosene)
S_2T_2	Temperatura no prato superior do <i>stripper</i> 2 (diesel)

Tabela 3. Conjuntos de variáveis de entrada para modelos de T_{diesel} , $T_{querosene}$ e T_{nafta}

Conjunto	Variáveis de entrada	r^2	$r^2 - aj$
Modelos de T_{diesel}			
1	T_{13}, T_{19}, T_{24}	0,982	0,982
2	$S_2, T_{13}, T_{19}, T_{24}$	0,994	0,994
3	$T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_1T_1$	0,993	0,993
4	T_{13}, T_{19}, S_2T_1	0,994	0,994
5	$T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_2T_1$	0,995	0,995
6	$D, T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_1T_1$	0,995	0,995
Modelos de $T_{querosene}$			
1	$S_2, T_{13}, T_{19}, T_{24}$	0,987	0,986
2	$S_1, S_2, T_{13}, T_{19}, T_{24}$	0,992	0,992
3	T_{13}, T_{24}, S_1T_1	0,989	0,989
4	$T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_1T_1$	0,991	0,990
5	T_{13}, T_{24}, S_2T_1	0,975	0,975
6	$T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_2T_1$	0,988	0,988
7	$S_2, T_{13}, T_{24}, S_1T_1$	0,992	0,992
8	$S_2, S_3, T_{13}, T_{24}, S_1T_1$	0,993	0,993
Modelos de T_{nafta}			
1	$S_1, S_2, T_{13}, T_{19}, T_{24}$	0,979	0,978
2	$S_1, S_2, S_3, T_{13}, T_{19}, T_{24}$	0,982	0,982
3	T_{13}, S_1T_1	0,943	0,942
4	T_{13}, T_{19}, S_1T_1	0,946	0,945
5	T_{13}, T_{24}, S_2T_1	0,820	0,818
6	$T_{13}, T_{19}, T_{24}, S_2T_1$	0,889	0,888
7	$D, S_3, T_{13}, T_{19}, S_1T_1$	0,982	0,982
8	$D, S_1, S_3, T_{13}, T_{19}, S_1T_1$	0,984	0,984

3. Resultados

Em cada caso, os modelos obtidos foram comparados com base nos desvios percentuais médios (E) apresentados para os conjuntos de calibração (E_{cal}) e verificação (E_{ver}). Para cada caso, o desvio percentual médio é calculado de acordo com a Equação 2.

$$E = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{T - T^*}{T^*} \right| \times 100 \quad (2)$$

Na Equação 2, T corresponde à variável calculada pelo modelo, enquanto T^* , à experimental (obtida por simulação). As Figuras 3, 4 e 5 comparam os desvios médios de calibração e verificação dos diferentes modelos para

predição de T_{diesel} , $T_{querosene}$ e T_{nafta} , respectivamente. A numeração empregada para identificar os modelos nos gráficos é a mesma da Tabela 3.

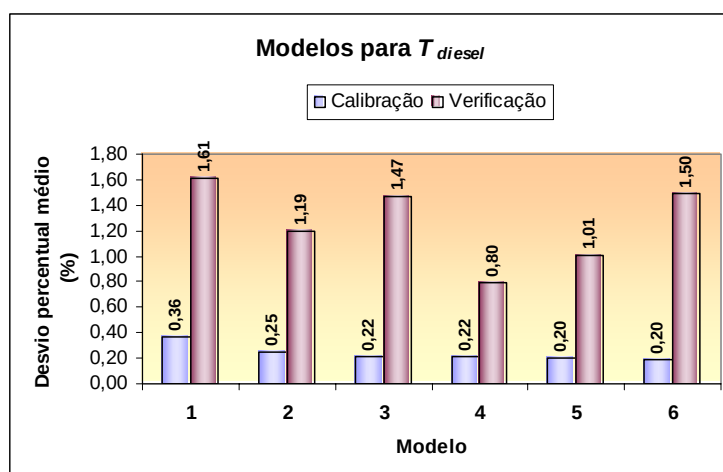


Figura 3. Comparação de desvios médios entre os modelos de T_{diesel} , considerando os conjuntos de dados de calibração e verificação

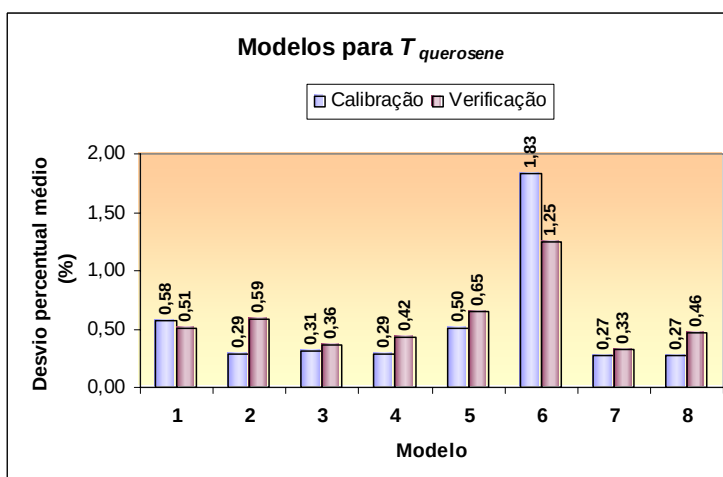


Figura 4. Comparação de desvios médios entre os modelos de $T_{querosene}$, considerando os conjuntos de dados de calibração e verificação

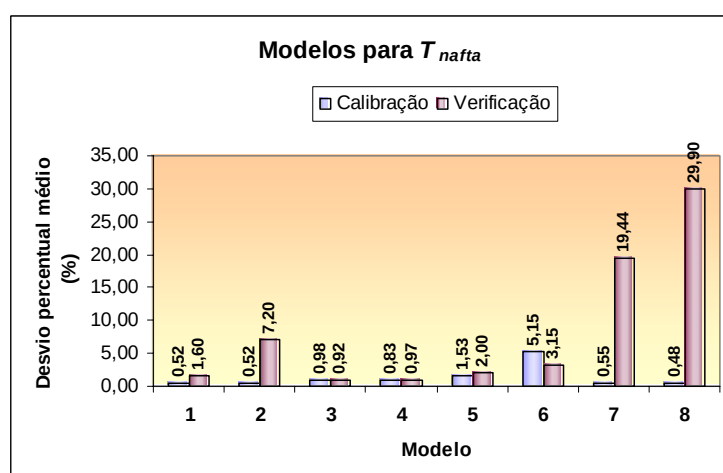


Figura 5. Comparação de desvios médios entre os modelos de T_{nafta} , considerando os conjuntos de dados de calibração e verificação

O primeiro fato que merece ser destacado a partir da análise das Figuras 3, 4 e 5 é que nem sempre um bom ajuste do modelo ao conjunto de dados de calibração conduz a um bom nível de explicação desse mesmo modelo quando se considera o conjunto de verificação. Exemplo disso é o modelo 6 para T_{diesel} . O desvio percentual médio da calibração ficou em 0,20%, bastante baixo. Por outro lado, na verificação esse desvio ampliou-se para 1,50%. Ainda com maior intensidade, o mesmo fato é observado para os modelos 2, 7 e 8 de T_{nafta} . A principal conclusão é que é fundamental selecionar um modelo que apresente um baixo desvio médio com relação aos dados de verificação. Isso já foi discutido por outros autores. Como indicam Babu e Brosilow (1978) e Kano et al (2000), geralmente é possível reduzir o desvio médio na calibração aumentando-se o número de variáveis independentes utilizadas no modelo. No entanto, o desvio de verificação não acompanha essa tendência.

Com base nesse critério, os modelos 4 para T_{diesel} , 7 para $T_{querosene}$ e 3 para T_{nafta} , foram considerados os mais apropriados para a inferência das características das correntes de diesel, querosene e nafta, a partir das variáveis de processo consideradas. Esses três modelos são representados pelas Equações 3, 4 e 5, respectivamente.

$$T_{diesel} (^{\circ}C) = 84,5 - 8,54 \cdot T_{13} (^{\circ}C) + 0,367 \cdot T_{19} (^{\circ}C) + 9,10 \cdot S_2 T_1 (^{\circ}C) \quad (3)$$

$$T_{querosene} (^{\circ}C) = 17,0 - 65,5 \cdot S_2 + 0,716 \cdot T_{13} (^{\circ}C) - 0,139 \cdot T_{24} (^{\circ}C) + 0,549 \cdot S_1 T_1 (^{\circ}C) \quad (4)$$

$$T_{nafta} (^{\circ}C) = 58,7 - 0,450 \cdot T_{13} (^{\circ}C) + 1,30 \cdot S_1 T_1 (^{\circ}C) \quad (5)$$

O emprego desses três modelos de inferência na malha de controle da unidade de destilação atmosférica de petróleo permite que a qualidade das correntes de diesel, querosene e nafta pesada seja controlada sem a necessidade de um analisador em linha. Os baixos desvios apresentados por esses modelos proporcionam uma inferência confiável da temperatura correspondente a 95% de destilado na curva TBP dessas correntes (variável difícil de medir) a partir de dados de processo facilmente medidos, como temperaturas e vazões.

4. Conclusão

Obteve-se um modelo empírico que permite a previsão da qualidade das correntes de diesel, querosene e nafta pesada a partir de medidas de temperaturas e vazões, foi alcançado. Nesse processo, o uso do simulador em regime estacionário permitiu que se contornasse com facilidade a inexistência de dados de planta.

Os modelos obtidos apresentaram desvios médios, durante a sua verificação, de não mais do que 1%, o que atesta a sua confiabilidade.

A metodologia utilizada neste trabalho é simples e pode ser aplicada na busca de modelos mais abrangentes, inclusive para se predizer as características da corrente de alimentação a partir de dados medidos na coluna de destilação.

5. Agradecimentos

Agradecimentos devem ser expressos à Agência Nacional de Petróleo – ANP – e à Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – por meio do programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor de Petróleo e Gás – PRH-ANP/MCT, devido à disponibilização de recursos operacionais e financeiros, por meio do PRH-24.

6. Referências

- BABU, J., BROSILOW, C. B. Inferential Control of Process: Part I – Steady State Analysis and Design. *AIChE Journal*, v. 24, n. 3, p. 485-492, 1978.
- KANO, M. et al, Inferential Control System of Distillation Compositions Using Dynamic Partial Least Squares Regression. *Journal of Process Control*, n. 10, p. 157-166, 2000.
- MARLIN, T. E. *Process Control: Designing Process and Control Systems for Dynamic Performance*, McGraw-Hill, 1995.