

5º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO:

Desenvolvimento de uma rede neural artificial para estimação da composição dos produtos em uma torre de destilação

AUTORES:

Leandro O. Werle, Joel G. Teleken, Cintia Marangoni, Claudia Sayer e Ricardo A. F. Machado

INSTITUIÇÃO:

Universidade Federal de Santa Catarina - UFSC

Este Trabalho foi preparado para apresentação no 5º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás- 5º PDPETRO, realizado pela Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás-ABPG, no período de 15 a 22 de outubro de 2009, em Fortaleza-CE. Esse Trabalho foi selecionado pelo Comitê Científico do evento para apresentação, seguindo as informações contidas no documento submetido pelo(s) autor(es). O conteúdo do Trabalho, como apresentado, não foi revisado pela ABPG. Os organizadores não irão traduzir ou corrigir os textos recebidos. O material conforme, apresentado, não necessariamente reflete as opiniões da Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás. O(s) autor(es) tem conhecimento e aprovação de que este Trabalho seja publicado nos Anais do 5ºPDPETRO.

Desenvolvimento de uma rede neural artificial para estimação da composição dos produtos em uma torre de destilação

Abstract

Typical production objectives in distillation process require the delivery of products whose compositions meet certain specifications. The reliable and precise measurement of the composition is one of the main difficulties in distillation towers. In order to determine these properties, laboratory analyses or process analyzers are employed. However, several problems rise from those methods as, for instance, the long time lag between sample collection and the availability of the results of the analyses. In order overcome this difficulty inferential models may be used. In this study an artificial neural network (ANN) was developed for the estimation of product compositions in a distillation column. The used neural system consists of a Multilayer Feedforward Network trained with a backpropagation learning algorithm. The Levenberg-Marquardt (LM) algorithm was used for the optimization. Data required for the construction, training and validation of the artificial neural network, was obtained through simulations with commercial software HYSYS[®] 3.1. The validation of the simulations was carried out with experimental results of a pilot distillation, processing an ethanol/water mixture. Prediction results of the developed neural network model showed a good agreement with simulation results of product composition.

Introdução

A destilação é um dos processos de separação mais empregados na indústria química e petroquímica. Os sistemas de controle destas unidades devem assegurar a composição dos produtos com a especificação desejada. As perturbações geralmente ocorrem na corrente de alimentação e o controle da qualidade dos produtos se torna difícil porque as colunas geralmente não possuem medidores de composição *on-line*, em função da complexidade e elevado custo destes equipamentos.

Para avaliação da qualidade dos produtos geralmente são utilizadas análises de laboratório e analisadores de processo. Porém as deficiências desses métodos são o elevado tempo para obtenção das respostas e a baixa confiabilidade, respectivamente. Desta forma, torna-se impossível projetar um sistema de controle efetivo. A medição confiável e precisa da composição, ou das propriedades dos produtos é uma das principais dificuldades em torres de destilação. Uma solução para este problema é o uso de medidas secundárias e modelos inferências para estimar a composição.

Existem na literatura vários trabalhos (SZIGETI *et al.*, 2000; SINGH *et al.*, 2007; GUPTA *et al.*, 2008) que tratam este problema, propondo o uso de modelos inferenciais para estimar a composição. Alguns fazem a inferência direta da composição através de medidas de temperatura (sistemas binários), outros empregam modelos matemáticos fenomenológicos ou empíricos para a predição. Porém, na grande maioria tratam-se de estudos simulados que não possuem dados experimentais para validação.

O objetivo deste trabalho é estimar a composição dos produtos em todos os estágios de uma coluna de destilação. Com esse propósito construiu-se uma rede neural artificial desenvolvida a partir de dados de composição e temperaturas, obtidos através de simulações. O grande diferencial deste projeto é o fato da rede ser validada experimentalmente em uma coluna de destilação baseada em ação distribuída de controle com aquecimentos em pontos intermediários (MARANGONI e MACHADO, 2007; WERLE, 2007).

Metodologia

Esta seção será dividida em três subseções distintas. Na primeira será apresentada uma breve descrição e caracterização da unidade piloto e as rotinas analíticas utilizadas nos experimentos, dos quais foram obtidos os dados para validação da rede. Na segunda é descrito o *software* comercial usado para realização das simulações que geraram dados necessários para o treinamento, e, por fim, a terceira seção apresenta as ferramentas empregadas para construção e definição da arquitetura da rede neural.

Descrição da Unidade Experimental - A unidade de destilação foi construída de forma modular (aço inox 304). Cada módulo (com 0,15 m de altura e 0,20 m de diâmetro) contém um prato perfurado (diâmetro de 0,006m, com passo triangular), conforme ilustra a Figura 1. Os valores da altura e comprimento do vertedouro são 0,03 e 0,10m, respectivamente. A coluna é composta de 13 pratos, sendo a alimentação no prato 4 (quatro).

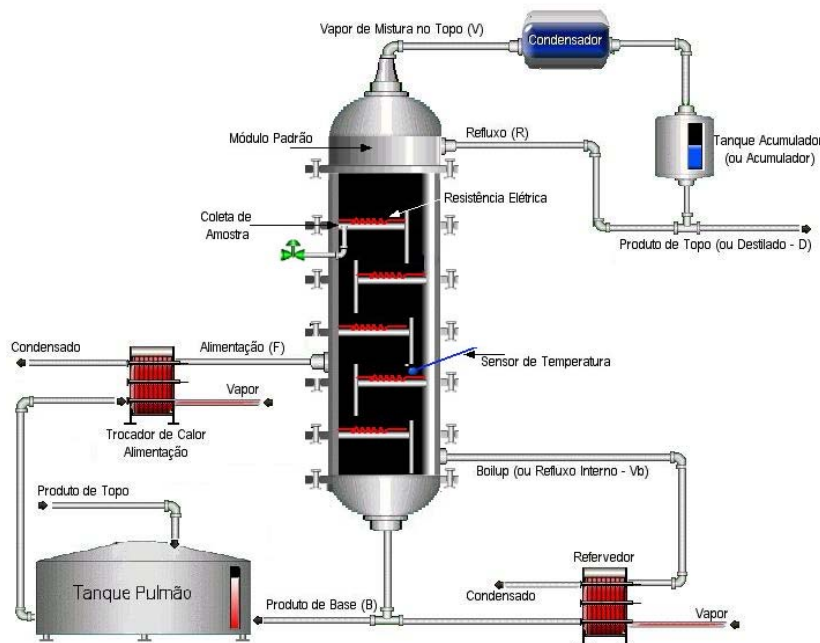


Figura 1. Ilustração esquemática dos equipamentos da unidade piloto de destilação.

Os experimentos foram realizados processando uma mistura de etanol/água com composições volumétricas iniciais de álcool etílico na alimentação em torno de 10% (v/v). A temperatura da alimentação foi controlada em 92°C. A vazão de alimentação foi de 300 L.h⁻¹ e as pressões da base e do topo foram 120 e 106 kPa, respectivamente. A vazão de destilado ficou em torno de 10 L.h⁻¹ com valor médio de razão de refluxo (R/D) igual a 6. Os resultados obtidos com os ensaios experimentais foram utilizados como base para a realização das simulações no estado estacionário.

Simulações - O *software* utilizado para simulação em estado estacionário foi o HYSYS® da Hyprotech versão 3.1. O objetivo da utilização deste simulador foi a geração de dados para a rede neural, pois o conjunto de dados experimentais não seriam suficientes para treinamento da rede. Nas simulações foi utilizado um sistema binário, composto por água e etanol com exatamente as mesmas condições experimentais. As condições de alimentação foram variadas em determinados intervalos, conforme detalhado na Tabela 1. O modelo termodinâmico para a fase líquida foi o UNIQUAC e, a fase vapor foi considerada ideal, principalmente devido à baixa pressão de operação da coluna. Para validação do modelo, compararam-se os perfis de temperatura e valores de composição na base e do topo simulados, com dados experimentais.

Para cada simulação foram fixadas as condições da corrente de alimentação, como sendo: temperatura, vazão e fração de vapor em zero, assumindo a condição de alimentação da coluna somente na fase líquida. Respeitando-se as limitações para manter a alimentação apenas na fase líquida, foram realizadas 880 simulações (ampla faixa operacional) com condições distintas de alimentação. Outras condições da coluna mantidas constantes nas simulações foram as condições do topo, tais como vazão de destilado (10 L/h) e razão de refluxo ($R/D=6$), de acordo com dados experimentais obtidos.

Tabela 1- Intervalos adotados para as combinações usadas nas simulações.

<i>Variáveis</i>	<i>Intervalos</i>	<i>Valores usados</i>
Vazão - Q (L/h)	$250 \leq Q \leq 450$	250/300/375/450
Temperatura - T (°C)	$25 \leq T \leq 94$	25 a 90 ($\Delta T=5$) e 91 a 94 ($\Delta T=1$)
Composição de etanol - X (v/v)	$0,1 \leq X \leq 0,9$	$\Delta X=0,05$

Para etapa de validação gerou-se um conjunto aleatório de dados (T, Q, X) para corrente de alimentação em condições diferentes das quais a rede foi treinada. A partir destes valores foram realizadas mais 180 simulações com o intuito de validação da rede. Estas novas simulações representam um percentual de 20% dos dados de treinamento.

Desenvolvimento da Rede Neural - Visando avaliar os diversos métodos de treinamento e aprendizado, foi feito uso das facilidades do ambiente do pacote MATLAB 7.6, versão R2008a[®]. A rede foi construída utilizando-se como entradas para a rede: vazão, temperatura e composição volumétrica de etanol (todas da corrente da alimentação), além de 15 temperaturas dos estágios de equilíbrio da coluna (13 pratos, base e topo), obtidas através de simulações. Como saída da rede neural tem-se a composição molar de etanol em cada um dos estágios (15).

A arquitetura do sistema neural utilizado é constituída de uma rede do tipo *multilayer feedforward networks* e utiliza o algoritmo de aprendizado *backpropagation*. A determinação do número de neurônios na camada intermediária foi feita através de tentativas, sempre buscando redes com poucos neurônios escondidos e com uma boa capacidade de generalização. O algoritmo de otimização para o treinamento foi o *Levenberg-Marquardt* (LM). Segundo Hagan *et al* (2003), este procedimento pode ser muito adequado uma vez que o desempenho da rede é avaliado pelo erro médio quadrático, e esses algoritmos são utilizados para minimizar funções que são a soma dos quadrados de outras funções não-lineares, além de permitirem rápida convergência.

O software STATISTICA[®] 7.0 serviu como base na escolha do método de avaliação de desempenho utilizado na rede neural. As medidas de desempenho que avaliaram a qualidade das previsões foram Erro Percentual (PE), Erro Percentual Médio (MPE) e o Erro Percentual Médio Absoluto (MAPE).

Resultados e Discussão

A estimativa da composição pela rede neural será apresentada nesta seção. Será descrita a rede neural e os resultados de predição da rede serão comparados com os simulados, tanto na etapa de treinamento, quanto na validação.

Validação das Simulações - Realizou-se experimentos na unidade piloto, os dados experimentais foram comparados com os valores obtidos através de simulações. O objetivo desta etapa foi validar as simulações a partir dos perfis de temperaturas experimentais e dados de composições dos produtos de base e topo, obtidos durante experimentos em estado estacionário, nos quais amostras foram retiradas e o etanol presente nas mesmas foi quantificado através de um densímetro do tipo *Gay-Lussac* para álcoois.

Na Figura 2 é apresentada a comparação entre os resultados obtidos durante os experimentos e os obtidos através de simulações conduzidas no HYSYS®. Todos os resultados apresentados fazem referência aos estágios 0 e 14, como sendo o refeedor e o acumulador, respectivamente. Os demais estágios são os pratos da coluna. As condições de alimentação em que os experimentos foram realizados estão ilustradas pela legenda da Figura 2, observa-se que ambos foram conduzidos com fração molar de etanol de 0,1 e temperatura de 94°C, apenas a vazão de alimentação foi variada.

A Tabela 2 ilustra a comparação entre valores de fração de etanol obtidos através de simulações e o resultado obtido experimentalmente.

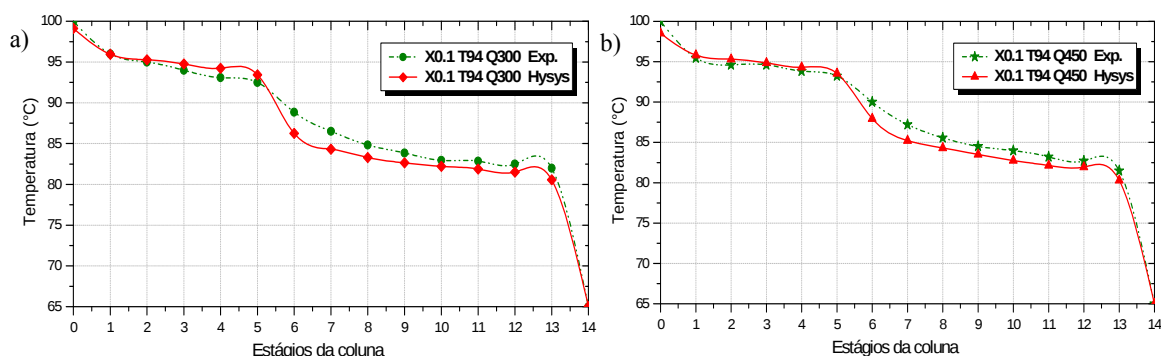


Figura 2 - Comparação entre os perfis de temperatura experimentais e simulados.

Tabela 2 - Comparação entre os valores de composições de etanol na base e topo obtidos experimentalmente e através das simulações.

Condição da Alimentação	HYSYS®		Experimental	
	$X_{base}(v/v)$	$X_{topo}(v/v)$	$X_{base}(v/v)$	$X_{topo}(v/v)$
$X(v/v)=0,1$ $T=94^{\circ}C$ $Q=300(L/h)$	0,05	0,89	0,04 ($\pm 0,01$)	0,88 ($\pm 0,01$)
$X(v/v)=0,1$ $T=94^{\circ}C$ $Q=450(L/h)$	0,06	0,89	0,05 ($\pm 0,01$)	0,87 ($\pm 0,01$)

A comparação entre os perfis obtidos a partir dos resultados experimentais e simulados mostrados na Figura 2 indica a concordância entre os dados, com erro máximo de 3% no estágio 6 da coluna. Da mesma forma, os valores da Tabela 2 também indicam valores próximos entre simulados e experimentais para frações de etanol da base e topo. A pequena diferença obtida pode ser decorrente do método de quantificação utilizado na parte experimental, o emprego do densímetro pode acarretar certa imprecisão ($\pm 1\%$), a escala do alcoômetro utilizado foi de 0 a 100°GL. Os resultados obtidos nesta etapa são considerados muito bons, validando assim, as simulações realizadas.

Arquitetura da Rede Neural - Vários testes foram realizados considerando RNA's com diferentes números de camadas e de neurônios, bem como algoritmos distintos de treinamento e aprendizado. Algumas destas arquiteturas são ilustradas na Tabela 3.

Tabela 3 – Topologias das melhores redes testadas para a predição da composição dos produtos.

Identificação	Arquitetura (entrada [camadas ocultas] saída)	Função de Transferência	Desempenho (MSE)
RNA 2	(18 [10 10 10] 15)	Sigmoide-Tang.Hiperbólica-Linear	$3,25 \times 10^{-3}$
RNA 4	(18 [8 8 8] 15)	Sigmoide-Sigmoide-Linear	$4,10 \times 10^{-5}$
RNA 9	(18 [10 10 5] 15)	Sigmoide-Sigmoide-Linear	$5,33 \times 10^{-4}$

A rede neural desenvolvida que apresentou menor erro e melhor desempenho assegurando rápido treinamento e evitando o excesso de parametrização foi de cinco camadas [18, 8,8,8, 15], sendo uma

camada de entrada (18 entradas) e três camadas intermediárias com 8 neurônios em cada e uma camada de saída (15 saídas). As camadas intermediárias são compostas por duas funções de ativação do tipo *sigmóide* e uma função de ativação *linear*.

Desempenho da Rede Neural - Para o treinamento foi utilizado um conjunto de dados constituídos de 880 pontos, sendo que estes geraram uma matriz $X = \langle 880 \times 18 \rangle$ para dados de entrada da rede e, outra matriz $Y = \langle 880 \times 15 \rangle$ para os dados de saída. O treinamento foi considerado concluído quando a rede alcançou o valor da função objetivo determinado com erro médio quadrático - MSE (*Mean-Squared Error*) de 1×10^{-4} ou atingiu um número máximo de 1.000 épocas, na fase de aprendizagem. A rede convergiu para a meta da função pretendida na 13ª época, ou seja, após 13 interações. A resposta de saída da rede neural foi comparada com a saída das simulações e o resultado pode ser observado pela análise da Figura 3, em algumas das condições que a rede foi treinada.

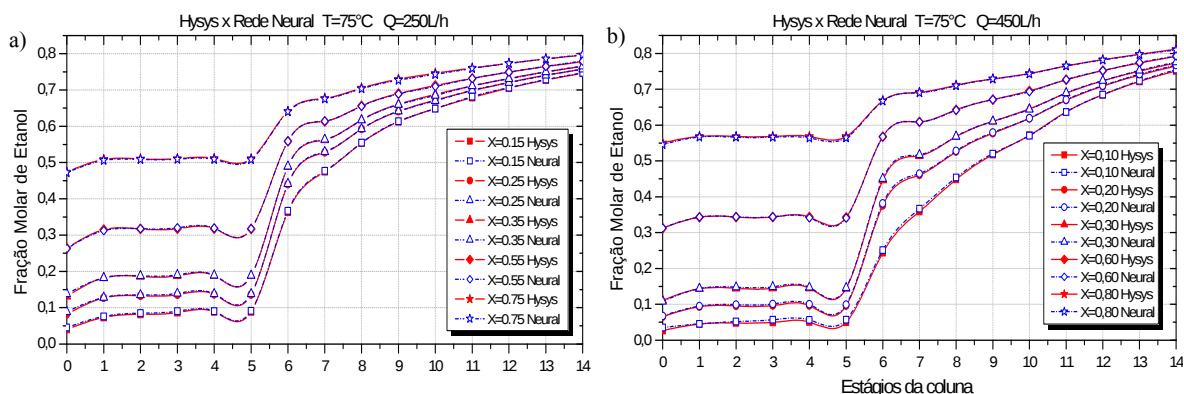


Figura 3 - Comparação entre a inferência da rede neural e dados obtidos através de simulações para a fração de etanol nos estágios da coluna, na etapa de treinamento.

A análise dos resultados obtidos ilustrados na Figura 3 mostra concordância entre os valores de composição simulados, obtidos com o uso do *software* HYSYS® e os valores inferidos pela rede neural para diversas situações em que a rede foi treinada.

A robustez e a confiabilidade das respostas obtidas da rede treinada foram então avaliadas por intermédio da validação dos dados. Foi obtido um novo conjunto de dados de entrada simulados (constituídos de 180 pontos), obtidos independentemente dos dados de treinamento. A comparação entre o resultado de composição simulado do HYSYS® e o estimado pela rede é mostrada na Figura 4 para algumas das condições avaliadas. Sendo que neste caso, as condições de alimentação estão representadas pela legenda das figuras.

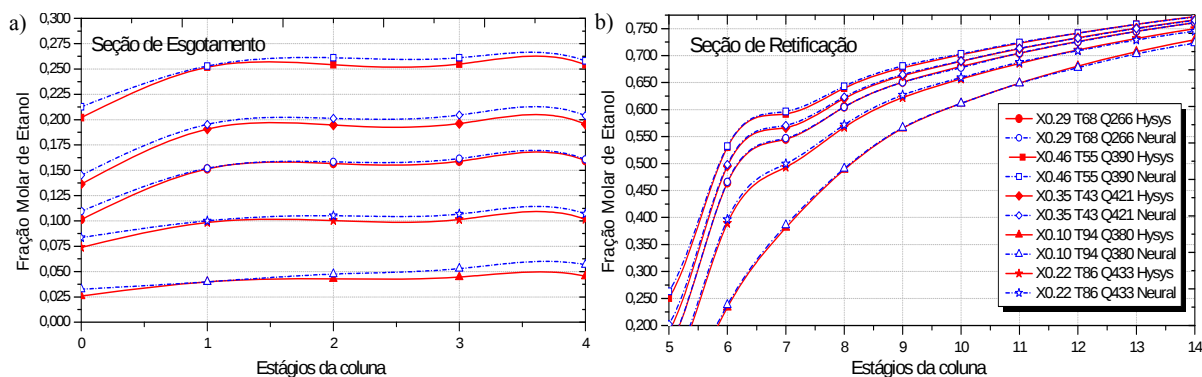


Figura 4 - Comparação entre a inferência da rede neural e as simulações na etapa da validação
a) retificação b) esgotamento.

Pode-se afirmar, pela análise dos resultados que a rede obteve resultados satisfatórios para estimar as composições dos produtos ao longo de todos os estágios. No entanto, percebe-se que a rede é mais precisa em captar a composição dos produtos na seção de retificação. Na seção seguinte será empregado um critério para avaliação da rede, onde será quantificado o erro em cada um dos estágios.

Critério de Avaliação da Rede Neural - Na Figura 5, em cada ponto é ilustrado o MPE e MAPE, calculados para cada estágio de equilíbrio em todas as condições em que a rede foi treinada (880) e validada (180). Ou seja, para cada condição diferente da alimentação (T, Q e X), calculou-se o erro entre o valor inferido da rede neural e o valor encontrado nas simulações, para cada estágio.

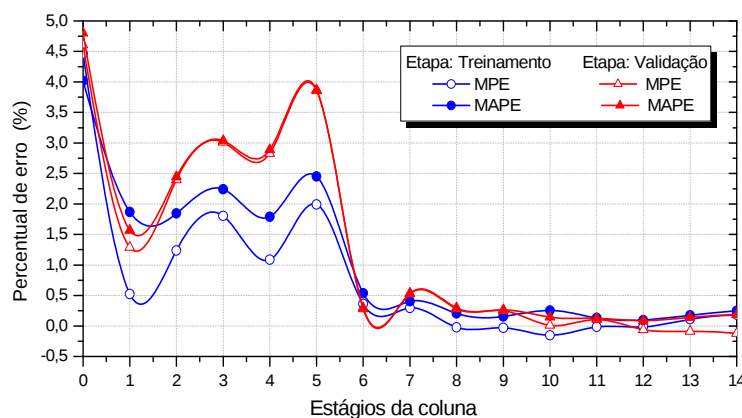


Figura 5 - Percentual de erro médio (MPE) e de erro médio absoluto (MAPE), calculados para cada estágio de equilíbrio, para as etapas de treinamento e validação.

Observa-se pela análise da Figura 5, que os maiores percentuais de erros foram encontrados na seção de esgotamento, mais especificamente na base e na região do prato da alimentação, tanto para etapa de treinamento quanto para validação. Esse comportamento pode ser explicado pelo fato de nesta região da coluna ocorrem maiores flutuações de composição e temperatura decorrentes de mudanças das condições de alimentação, as quais por sua vez, ocasionam mudanças na carga térmica para manter a composição de topo constante. Justamente por manter as condições de topo fixas nas simulações, observa-se que o erro vai diminuindo gradativamente, e se aproxima de zero, na seção de retificação.

Outro fator a ser destacado é a semelhança do comportamento entre o erro médio e o erro médio absoluto na etapa da validação, isto significa que a inferência da composição feita pela rede foi pouco oscilatória entre valores acima e abaixo dos simulados no HYSYS®. O fato de obterem-se erros maiores na etapa da validação já era esperado, pois as situações enfrentadas pela rede são distintas daquelas para as quais ela foi treinada, o que faz com ela faça interpolações para inferir o valor da composição de saída.

Conclusões

O modelo neural desenvolvido foi considerado adequado e capaz de estimar a composição dos produtos em diferentes condições de operação da coluna. As predições da rede foram muito similares às saídas simuladas pelo HYSYS® com erros aceitáveis. Através deste modelo a medição da composição pode ser feita de forma precisa e rápida, tornando possível projetar um sistema de controle mais efetivo. Desta forma, a rede neural desenvolvida pode ser empregada para suprir umas das principais dificuldades em torres de destilação que é estimação da composição em tempo real.

A determinação da metodologia construtiva de redes, bem como do algoritmo de otimização empregado na rede neural (*Levenberg-Marquardt*), mesmo em estado estacionário, serão de grande valia para a continuidade do projeto e servirá de base para testes futuros.

Em etapa posterior, a rede será treinada em modo dinâmico. A proposta futura é desenvolver um sensor por *software* e utilizar a composição inferida dos produtos da coluna de destilação como variável controlada *on-line*.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro da Agência Nacional do Petróleo, Gás e Biocombustíveis – ANP – e da Financiadora de Estudos e Projetos – FINEP – por meio do Programa de Recursos Humanos da ANP para o Setor Petróleo e Gás – PRH-34-ANP/MCT e do CNPq – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

Referências Bibliográficas

GUPTA, S., RAY, S., SAMANTA, A.N. Nonlinear control of debutanizer column using profile position observer. *Computers & Chemical Engineering* (2008), doi:10.1016/j.compchemeng.2008.12.009.

HAGAN, M. T., DEMUTH, H.B., BEALE, M. *Neural Network Design*, 7th International Student Edition. Vikas Publishing House, 2003.

MARANGONI, C., MACHADO, R. A. F. Distillation tower with distributed control strategy: Feed temperature loads. *Chemical Engineering and Technology*. v.30, pp.1292-1297, 2007.

SZIGETI, F.; RIOS-BOLIVAR, A., RENNOLA, L.. Dual composition control of a binary distillation columns based on nonlinear state observer. *Proceedings of the 39th IEEE Conference on Decision and Control* Sydney, Australia December, 2000.

SINGH, V., GUPTA, I., GUPTA, H.O. ANN-based estimator for distillation using Levenberg–Marquardt approach. *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. v.20, p.249-259, 2007

WERLE, L. O. Minimização dos Transientes através do Aquecimento Distribuído em uma Coluna de Destilação. Dissertação. (Mestrado em Engenharia Química). Universidade Federal de Santa Catarina, UFSC. Florianópolis, 2007.