

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



TÍTULO DO TRABALHO:

Uso do software Hysys na geração de dados dinâmicos para treinamento de uma rede neural visando a aplicação em sensor virtual para torres de destilação

AUTORES:

Polliana Corrêa Moraes, Leandro Osmar Werle, Ricardo Antônio Francisco 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.

Uso do software Hysys na geração de dados dinâmicos para treinamento de uma rede neural visando a aplicação em sensor virtual para torres de destilação

Abstract

The reliable and precise measurement of the composition is one of the main difficulties in distillation towers. In order to try to supply this difficulty it is common sometimes the use of inferential models, as an example, artificial neural network (ANN), which can be used in virtual sensors, supporting the control system. This model will be applied in a pilot distillation unit, which is composed of 13 trays, processing an ethanol-water mixture. The significant novelty aspect of this project is the fact that the network can be validated experimentally in a distillation column in which the control is based on a distributed action with heating on intermediate plates (MARANGONI e MACHADO, 2007; WERLE, 2007). The objective of this work is to acquire the necessary data for construction, training and validation of the artificial neural network which will be used in the virtual sensor, for this, Hyprotech commercial software Hysys[®] in dynamic process was used as a plant in order to generate these data. The validation of the data obtained through these simulations was carried out with actual real data of the pilot plant. The results obtained from the temperature profiles and composition of the simulated data matched the experimental results obtained in the pilot plant, assuring the reliability of the simulations. The behavior analysis of the simulated data has also shown effective, with coherent results and effects within the expected for such mixture.

Keywords: software Hysys[®] dynamic data, artificial neural network, simulation.

Introdução

A destilação é o processo de separação mais utilizado na indústria química, com grande aplicação na área petroquímica. Seu principal objetivo é separar um composto do volume de uma mistura para agregação de valor ao produto final. O valor dos produtos depende exclusivamente de sua qualidade (pureza). Isto torna o controle da qualidade uma das tarefas mais importantes na operação de uma coluna de destilação. Os três objetivos, qualidade, rentabilidade e produção estão interconectados (PARISOTTO *et al*, 2007).

A variação freqüente da composição na alimentação das colunas de destilação em refinarias resulta no ajuste de inúmeras variáveis, dificultando seu controle. Dessa forma, colunas de destilação requerem um sistema de controle ajustado para rejeitar rapidamente perturbações. A medição confiável e precisa da composição dos produtos é uma das principais dificuldades em torres de destilação.

A crescente demanda em produtos, com qualidades cada vez mais rigorosas, tem levado as unidades industriais a operarem seus processos cada vez mais próximos de suas restrições. Isto faz com que a engenharia de controle de processos necessite cada vez mais de modelos realistas, em estado estacionário e dinâmico, para analisar melhor a estabilidade, robustez e desempenho dos sistemas de controle dos processos químicos (BRAVO, 2005).

A utilização de *softwares* comerciais para simulação de colunas de destilação constitui uma ferramenta poderosa para projetos de otimização e controle do processo. Atualmente, com a elevada capacidade de cálculo, ótima interface gráfica e baixo custo, os programas de simulação são altamente difundidos. Dentre os softwares mais conhecidos destaca-se o Hysys[®] o simulador utiliza um método de resolução iterativo amplamente utilizado em fracionadoras.

Muitos trabalhos na literatura utilizam *softwares* comerciais como uma ferramenta capaz de fornecer uma visão geral do processo. Caballero e Grossmann (2004) utilizaram o Hysys® como modelo rigoroso na simulação de uma sequência de destilações convencionais. Já Langston *et al.* (2005) utilizam o *software* para simular uma destilação extrativa. De acordo com Julio (2008) quando comparado o simulador comercial Aspen Plus com o Hysys® em termos de recursos computacionais exigidos para cada simulador, o mesmo consome mais do dobro da memória do processador do que o Hysys®, para uma simulação equivalente, ressaltando a vantagem do *software*.

Segundo a *Aspentech*, o Hysys® é o simulador de processos com maior acolhimento nas indústrias de refinação de petróleo e de processamento de gás natural. O fato que contribui para esse sucesso é a facilidade de utilização do simulador, em particular a forma com que um modelo de estado estacionário pode ser colocado em modo dinâmico, com o auxílio da ferramenta *Dynamics Assistant* do Hysys® que facilita a especificação inicial do modelo (JULIO, 2008).

Neste trabalho, o simulador Hysys® foi utilizado como ferramenta importante pela confiabilidade que o mesmo possui, pois é amplamente usado na indústria de petroquímica. O principal objetivo deste trabalho foi o de utilizar o *software* como gerador de um banco de dados, os quais serão necessários para a construção, treinamento e validação da rede neural que será empregada em um sensor virtual para aplicação em uma coluna de destilação. As simulações se justificam neste caso, pela necessidade de se obter um grande conjunto de dados para treinamento da rede neural, os quais não se tinham experimentalmente.

Metodologia

Esta seção será dividida em duas subseções distintas. Na primeira será apresentada uma breve descrição e caracterização da unidade piloto localizada no Laboratório de Controle de Processos da Universidade Federal de Santa Catarina onde foram realizados os experimentos, dos quais foram obtidos os dados para validação das simulações realizadas. Na segunda será descrito o *software* comercial Hysys® utilizado para a realização das simulações que geraram o banco de dados para o treinamento da rede neural.

Unidade Experimental - A unidade opera em regime contínuo processando uma mistura de etanol/água e, para tanto, existe um tanque (pulmão) onde é produzida a alimentação do processo, recebendo os produtos de base e topo. A unidade piloto de destilação ilustrada na Figura 1.



Figura 1 – Ilustração da unidade piloto de destilação.

A mistura é aquecida na base por um trocador de calor a placas e resfriada no topo por um condensador total. A coluna possui 13 estágios de equilíbrio, em módulos com 0,15 m de altura e 0,20 m de diâmetro. As dimensões do vertedouro são 0,03 m de altura e 0,10 m de comprimento. Os pratos são perfurados (diâmetro de 0,006 m, com passo triangular).

Os experimentos foram conduzidos na unidade piloto para geração de dados experimentais, os quais serão utilizados para validação das simulações.

Simulações - As simulações foram realizadas com o *software* Hysys® da Hyprotech versão 7.0, tanto em modo estacionário quanto dinâmico. O modelo termodinâmico para a fase líquida escolhido foi UNIQUAC (*UNI*versal *QU*asi*C*hemical) e, a fase vapor foi considerada ideal, devido à baixa pressão de operação da coluna.

Primeiramente, em simulações no estado estacionário, foram gerados dados de temperatura para cada estágio da coluna. Estes dados simulados foram comparados com dados experimentais também em estado estacionário para validar as simulações. Na segunda etapa, através das simulações dinâmicas foram gerados dados de temperatura e composição em todos os estágios de equilíbrio, porém ao longo do tempo. Foi realizada uma perturbação na vazão da alimentação e os dados do período transiente que foram gerados serão usados para o treinamento da rede neural.

Na Figura 2 é ilustrada a interface do simulador para uma coluna de destilação operando nas condições idênticas as adotadas experimentalmente.

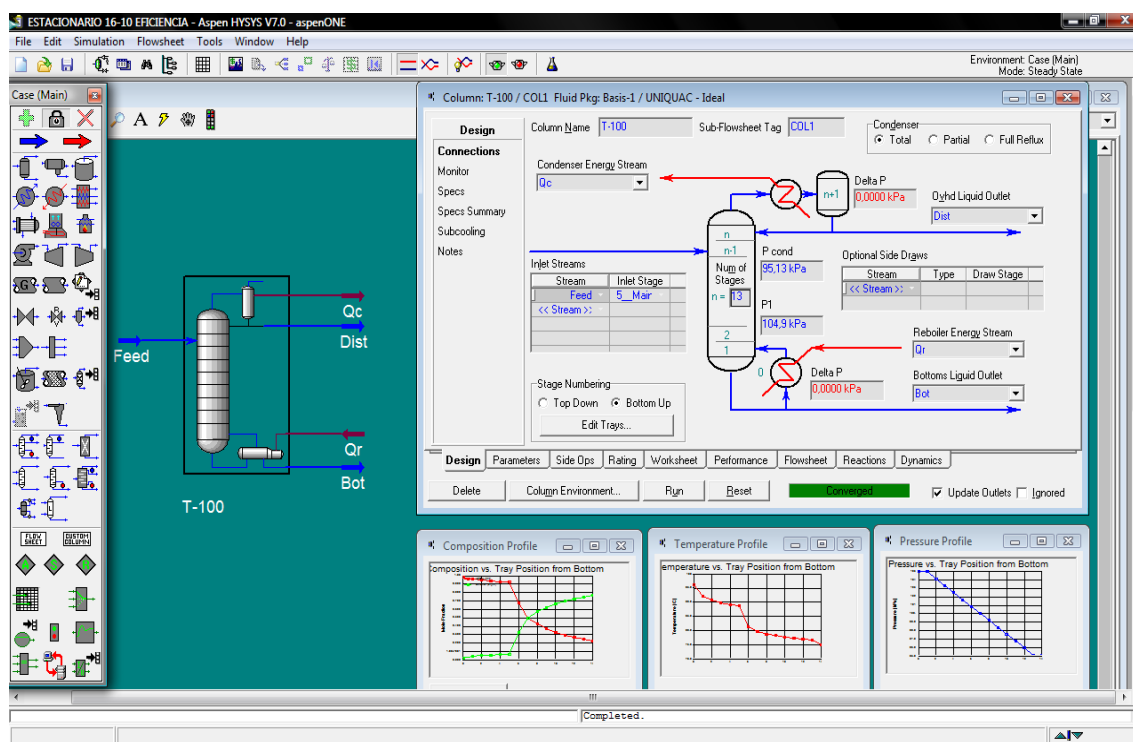


Figura 2 – Interface do *software* Hysys® 7.0 em modo estático.

Na Tabela 1 encontram-se os dados dos parâmetros operacionais utilizados para as simulações baseados nos experimentos.

Tabela 1 – Parâmetros operacionais utilizados nas simulações.

Parâmetros operacionais	
Prato de alimentação (a partir da base)	4
Fração volumétrica de etanol da alimentação (v/v)	0,10
Vazão volumétrica de alimentação (m^3/h)	0,30
Temperatura de alimentação ($^{\circ}C$)	94,00
Razão de refluxo (R/D)	8,46
Pressão do topo (KPa)	95,13
Pressão da base (KPa)	104,92

O simulador utilizado caracteriza-se por apresentar uma linguagem de simulação avançada e dispõe de uma biblioteca de componentes padronizados, que podem ser interligados e ajustados, conforme o processo. O simulador pode ser utilizado em modo estacionário ou dinâmico e apresenta ainda uma interface de fácil manipulação. Na transição do modo estático para o modo dinâmico, podem-se adicionar gráficos de tendências para acompanhar o desempenho dos controladores.

Resultados e Discussão

Com a realização dos experimentos na unidade piloto foi possível obter dados para a validação das simulações, que foi feita através da comparação com os dados experimentais de perfis de temperatura. A seguir será apresentada uma simulação realizada para demonstrar essa etapa de validação.

Na Figura 3 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 ao estágio 0 e 14, como sendo o refeedor e o acumulador, respectivamente. Os demais estágios são os pratos da coluna. As condições da corrente de alimentação em que o experimento foi realizado estão ilustradas pela legenda da Figura 3 e são idênticos aos usados na simulação, apresentados na Tabela 1, da seção anterior.

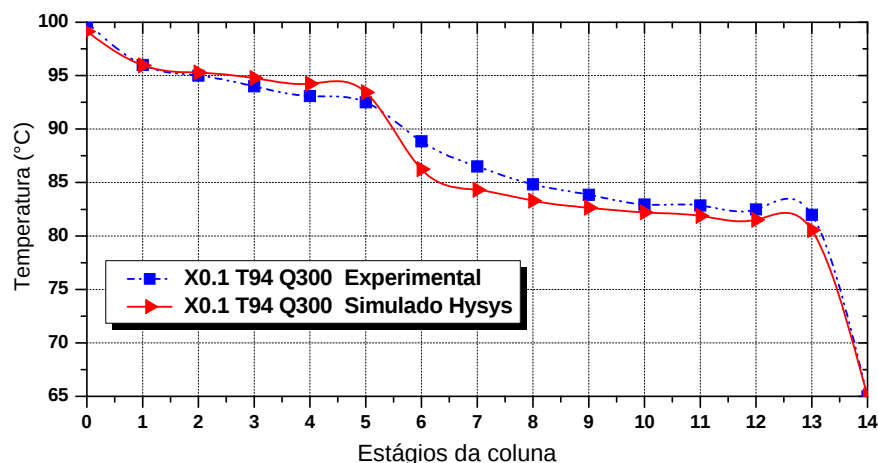


Figura 3 – Comparação entre os perfis de temperatura experimentais e simulados.

A comparação entre os perfis obtidos a partir dos resultados experimentais e simulados mostrados na Figura 3 indica a concordância entre os dados, com erro máximo de 4% no estágio 6 da coluna. A diferença obtida entre os perfis de temperatura é considerada pequena, em função da complexidade e

acoplamento que o processo de destilação apresenta. Em função disto, alguns parâmetros experimentais são difíceis de serem reproduzidos através de simuladores na sua totalidade.

De modo geral, a comparação entre os perfis de temperatura obtidos a partir dos resultados experimentais e simulados indica um perfil com temperaturas um pouco mais elevadas no experimento do que na simulação, principalmente na seção de retificação. Porém o comportamento foi similar, apresentando a mesma tendência. Os resultados obtidos nesta etapa foram considerados muito bons, validando assim, a simulação realizada.

Após esta etapa, utilizou-se o simulador Hysys® em seu modo dinâmico, observa-se que, de acordo com sua sistemática, a construção de um modelo dinâmico inicia-se com a obtenção do modelo estático (obtido anteriormente), dimensionamentos de válvulas e elementos de controle e, por fim, acrescentando os controladores onde se deseja controlar as variáveis de processo. No Hysys® a transição de uma simulação em estado estacionário para dinâmica (transiente) é facilitada por um assistente “*Dynamics Assistant*”, que propõe as alterações necessárias para iniciar a simulação dinâmica. Antes de comutar para modo dinâmico, recomenda-se que sejam adicionadas válvulas em todas as saídas de cada “T” e que cada uma delas seja do tipo anti-retorno (*check valve*).

Foram realizadas simulações utilizando o modo dinâmico do *software* Hysys®, partindo-se da simulação em estado estacionário, após realizados todos os ajustes necessários. No modo dinâmico foram obtidos os perfis das variáveis ao longo do tempo. Os valores destas variáveis ficam armazenadas e posteriormente podem ser utilizadas em programas como *Excel*® e *Origin*® por exemplo, para elaboração de gráficos e melhor análise dos resultados.

Com a simulação em modo dinâmico, foi aplicada uma perturbação na vazão volumétrica da alimentação alterando esta corrente de 0,30 m³/h para 0,45 m³/h, conforme ilustrado na Figura 4. As condições de topo da coluna, tais como vazão de destilado e razão de refluxo, foram mantidas constantes.

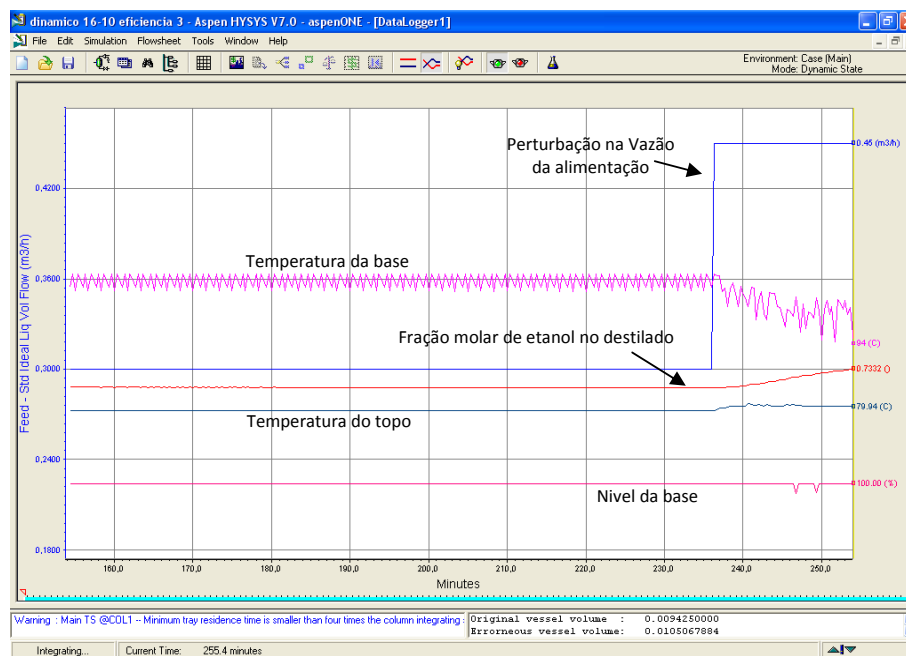


Figura 4 – Tela do *software* no momento da aplicação da perturbação na vazão da alimentação.

Na Figura 5 ilustra a interface do Hysys[®] no modo dinâmico na qual se pode observar o emprego dos controladores e as variáveis controladas e manipuladas. A variação dos valores destas correntes ao longo do tempo, como por exemplo, a fração molar de etanol no destilado, as temperaturas da base e topo e o nível da base da coluna, também podem ser observados no detalhe do gráfico desta figura.

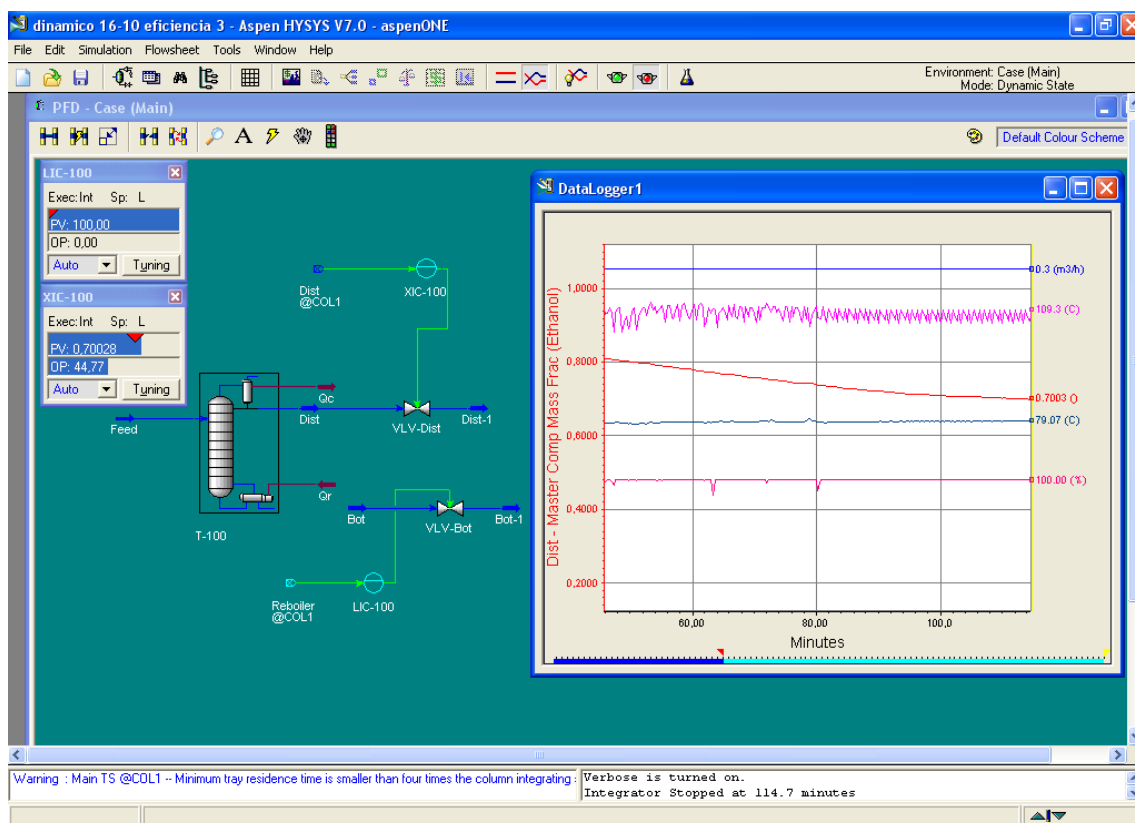


Figura 5 – Interface dinâmica do software Hysys[®] 7.0.

Os valores de composição e temperaturas obtidos ao longo do tempo através destas simulações, serão utilizados como um banco de dados para o treinamento de uma rede neural dinâmica, que será empregada como sensor virtual na coluna de destilação piloto. Com isso, o sensor será capaz de prever os valores da composição dos produtos em tempo real e utilizá-los em um sistema de controle aprimorado.

Conclusões

Os resultados obtidos dos perfis de temperatura simulados foram condizentes com os resultados experimentais obtidos na planta piloto em estado estacionário, validando e dando confiabilidade as simulações. As simulações neste caso se justificam pela grande necessidade de dados para o treinamento da rede, que não se tem experimentalmente.

A análise dos comportamentos dos dados simulados em modo dinâmico também apresentou resultados coerentes, com e efeitos dentro do esperado para a mistura em questão. Com isso, verificou-se que o emprego do software Hysys[®] é eficaz e pode ser usado com sucesso para geração de banco de dados, para o treinamento e validação de redes neurais.

Em etapa posterior, os dados gerados a partir destas simulações dinâmicas serão usados para treinamento de uma rede neural recorrente. 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

BRAVO, C. O. A. - Desenvolvimento de um simulador e controle preditivo de uma coluna de destilação piloto. Dissertação (Engenharia Elétrica) – Universidade Federal de Santa Catarina, 2005.

CABALLERO, J. A.; GROSSMANN, I. E. Design of distillation sequences: from conventional to fully thermally coupled systems. *Computers & Chemical Engineering*, v. 28, p. 2307-2329, 2004.

FOUST, A. S., WENZEL, L. A., CLUMP, C. W., MAUS, L., ANDERSEN, L. B. *Princípios das Operações Unitárias*. 2ªed, Ed. Guanabara Dois, 1982.

JULIO, A. D. C. Sistemas de informação aplicados à Engenharia de Processos Químicos: Comparação de simuladores de processo: Aspen vs. HYSYS. Dissertação. (Mestrado em Engenharia Química). Instituto Superior Técnico, Universidade Técnica de Lisboa. Portugal, 2008.

LANGSTON, P., HILAL N., SHINGFIELD.S., WEBB.S., Simulation and optimization of extractive distillation with water as solvent", *Chemical Engineering and Processing*, 44, 345–351. 2005.

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

PARISOTTO, I. G. B., DE OLIVEIRA, D. L., WERLE, L. O., MACHADO, R. A. F. – Avaliação do estado estacionário de um processo de destilação utilizando-se uma abordagem de controle com ação distribuída. VII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, 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.