

6º CONGRESSO BRASILEIRO DE PESQUISA E DESENVOLVIMENTO EM PETRÓLEO E GÁS



TÍTULO DO TRABALHO: Aplicação do Inferenciador Filtro de Kalman Estendido na estimação das variáveis de saída de um reator de hidrotratamento

AUTORES: M.C.S. CAMELO, D.V.A. COSTA, S. LUCENA, P.R.O. SOUZA, R.L.T.C. LIRA

INSTITUIÇÃO: Universidade Federal de Pernambuco

Este Trabalho foi preparado para apresentação no 6º Congresso Brasileiro de Pesquisa e Desenvolvimento em Petróleo e Gás- 6º PDPETRO, realizado pela Associação Brasileira de P&D em Petróleo e Gás-ABPG, no período de 09 a 13 de outubro de 2011, em Florianópolis-SC. 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 6ºPDPETRO.

Aplicação do Inferenciador Filtro de Kalman Estendido na estimação das variáveis de saída de um reator de hidrotratamento.

Abstract

In the last years has increased the environmental restrictions, in order to aim this refineries have changed their refining scheme. Thus, it is necessary to develop technologies to process waste oil fractions, such as the process of hydrotreating of diesel and the process of delayed coking. In this context, we highlight the use of advanced control strategies, which include the use of different mathematical tools, such as example we have the Kalman filter and neural networks. In This paper was developed a extended Kalman filter, where it aims to estimate the concentrations of sulfur compounds, olefins and temperature in the hydrotreating reactor output. The measures necessary to implement the filter were provided by a virtual plant, which consists of a three-phase mathematical model of process. While the EKF used a pseudo homogeneous model in the propagation step.

Introdução

O processo de hidrotratamento de combustíveis ao longo dos últimos anos tem sido objeto de estudado de vários grupos de pesquisa. Na literatura há diversos trabalhos que tratam da modelagem e simulação dessa unidade, porém são poucos os que mostram a aplicação desses modelos na construção de ferramentas úteis em estratégias de controle avançado, tais como os estimadores de estado.

Os estimadores de estado ou inferenciadores são ferramentas que possuem a característica de estimar determinadas variáveis do processo de difícil medição através do valor de outras variáveis que possuem o valor medido mais facilmente em um menor tempo de amostragem. Dentre os estimadores de estado destacam-se as redes neurais artificiais e o Filtro de Kalman, os quais ainda necessitam de bastantes estudos em relação a sua aplicação em processos petroquímicos.

Dentre os estimadores citados o Filtro de Kalman tem como característica utilizar um modelo matemático do processo para que a estimação de estado possa ser realizada. O mesmo pode ser aplicado a sistemas lineares dinâmicos ou discretos no tempo. Porém o seu uso para sistemas não-lineares é feito mediante aproximações como o Filtro de Kalman Estendido (EKF), que possui basicamente o mesmo algoritmo utilizado para sistema linear apresentando como diferença a linearização do modelo em torno da estimativa mais recente.

Metodologia

Filtro de Kalman Estendido ("*Extended Kalman Filter*" ou EKF)

Diferentemente de modelos caixa preta (como é o caso das redes neurais), o Filtro de Kalman tem como base um modelo fenomenológico do processo juntamente com um modelo das medidas, conformando dessa forma um modelo na forma espaço de estados. Assim, considere-se um sistema

não linear contínuo-discreto a ser utilizado pelo EKF; contínuo para o vetor de estado e discreto para as medidas, que são obtidas numa base de tempo discreta como mostrado na equação 1.

$$\left\{ \begin{array}{l} \dot{x} = f(x, u, t) + w(t) \\ z_k = h(x(t_k)) + v_k \quad k = 1, 2, \dots \end{array} \right\} \quad (1)$$

As equações que compõem o EKF estão agrupadas na etapa de propagação e de correção.

Etapa de Propagação

As equações da primeira etapa são computadas (isto é, integradas numericamente) nos intervalos de tempo nos quais não se dispõe das medidas. Este bloco também é chamado, na literatura especializada, de etapa de predição. Dele fazem parte:

- 1) Um modelo do processo na forma de Espaço de Estados. Este modelo é constituído por EDO's e deve conter as equações cruciais que regem o processo. Quanto melhor for a sua representatividade do processo, melhor será o desempenho do EKF. O estado propaga-se segundo a equação:

$$\dot{\hat{x}} = f(\hat{x}(t), u) \quad (2)$$

- 2) A equação diferencial sobre a matriz de covariância do erro de estimação, a qual é definida pela equação 3, Equação de Riccati:

$$\dot{P}(t) = P(t)F^T(\hat{x}(t)) + F(\hat{x}(t))P(t) + Q(t) \quad (3)$$

onde F é a matriz jacobiana igual a $F = \left(\frac{\partial f(x, u, t)}{\partial x} \right)_{x=\hat{x}_k}$.

Etapa de Correção

Também chamada de etapa de atualização. Com a chegada das medidas num instante t_k , as equações desta etapa fazem a correção do estado neste instante:

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{x}_k^+ = \hat{x}_k^- + K_k [Z_k - h(\hat{x}_k^-)] \\ K_k = P_k^- H_k^T (\hat{x}_k^-) [H_k(\hat{x}_k^-) P_k^- H_k^T (\hat{x}_k^-) + R_k]^{-1} \end{array} \right\} \quad (4)$$

É feita também a atualização da matriz P:

$$P_k^+ = [I - K_k H_k(\hat{x}_k^-)] P_k^- \quad (5)$$

Os sobrescritos – e + indicam as variáveis antes e após a correção, respectivamente. O termo K_k na equação 5 é chamado na literatura de *ganho de Kalman*, e H_k é a matriz jacobiana igual a $H_k = \left(\frac{\partial h}{\partial x} \right)_{x=\hat{x}_k^-}$.

Como se pode ser visto pelas equações acima o EKF utilizado esta na sua forma contínua/discreta: contínua para a propagação *do estado e da covariância do erro entre duas medidas*, e discreta para a correção quando da disponibilidade das medidas. Uma característica importante na estimação realizada pelo EKF, é que, esta é diretamente relacionada aos valores atribuídos as matrizes P, Q e R, que representam:

- matriz P, matriz de covariância do erro na estimação. À qual foi atribuído inicialmente o valor zero para todas as variáveis, exceto os elementos da diagonal principal.
- matriz Q, matriz de covariância do erro do modelo.
- matriz R, matriz de covariância que estipula a magnitude esperada do ruído associado a medida.

Modelos matemáticos do processo de Hidrotratamento

Na construção do inferenciador o modelo matemático do processo utilizado na etapa de propagação foi um modelo pseudohomogêneo do reator, este modelo considera que as reações de hidrotratamento ocorrem em uma única fase. O balanço de massa e energia desse modelo é mostrado nas equações 6 e 7 respectivamente. O índice i na equação 6 representa os compostos sulfurados, nitrogenados, oxigenados e olefinas. O modelo pseudo-homogêneo presente neste trabalho é um modelo dinâmico unidimensional, o qual exclui os termos de dispersão axial dos balanços de massa e energia e que foi adaptado para um formato em EDO's, podendo ser pensado como consistindo de tanques do tipo mistura perfeita em série:

$$\frac{dC_{i,n}}{dt} = \frac{F_l C_{i,(n-1)} - F_l C_{i,n}}{\varepsilon_l V_T} - R_{i,n} \quad (6)$$

$$\frac{dT_n}{dt} = \left[\left(\frac{F_l \rho_l c_{pl}}{V_T} + \frac{F_g \rho_g c_{pg}}{V_T} \right) (T_{n-1} - T_n) + \varepsilon_l \sum_{i=1}^5 R_{i,n} (-\Delta H_i) \right] \times \frac{1}{\varepsilon_l \rho_l c_{pl} + \varepsilon_g \rho_g c_{pg}} \quad (7)$$

Já as medidas das variáveis do processo que são necessárias na etapa de correção foram tomadas de uma planta virtual, em que a mesma consiste em um modelo matemático heterogêneo do reator de hidrotratamento de óleo Diesel. O balanço de massa na fase gás é mostrado na Equação 8, nesta fase estão presentes os componentes: hidrogênio, ácido sulfídrico e amônia.

$$\frac{u_G}{RT} \frac{dp_i^G}{dt} = \frac{u_G}{RT} \frac{dp_i^G}{dz} - k_i^G a_L \left(\frac{p_i^G}{H_i} - C_i^L \right) \quad (8)$$

As equações 9 e 10 representam o balanço na fase líquida, a primeira considera a absorção dos componentes gasosos na fase líquida, e a última representa os demais componentes presentes na fase líquida, tais como os compostos sulfurados, compostos nitrogenados, compostos aromáticos e olefinas.

$$\varepsilon_L \frac{dC_i^L}{dt} = -u_L \frac{dC_i^L}{dz} + k_i^L a_L \left(\frac{p_i^G}{H_i} - C_i^L \right) - k_i^S a_S (C_i^L - C_i^S) \quad (9)$$

$$\varepsilon_L \frac{dC_i^L}{dt} = -u_L \frac{dC_i^L}{dz} - k_i^S a_S (C_i^L - C_i^S) \quad (10)$$

O balanço de massa para a fase sólida é apresentado na equação 11.

$$\varepsilon_p (1-\epsilon) \frac{dC_i^L}{dt} = k_i^S a_S (C_i^L - C_i^S) \pm \rho_B \eta_j r_j (C_i^L, \dots, T_S) \quad (11)$$

O balanço de energia leva em consideração apenas as fases líquida, equação 12, e sólida, equação 13.

$$\varepsilon_G \rho_G c_{pG} \frac{dT_L}{dt} = -u_L \rho_L c_{pL} \frac{dT_L}{dz} + h_{LS} a_S (T_L - T_S) \quad (12)$$

$$(1-\epsilon) \rho_S c_{pS} \frac{\partial T_S}{dt} = h_{LS} a_S (T_L - T_S) + \sum_j \rho_B r_j (C_i^L, \dots, T_S) (-\Delta H_R) \quad (13)$$

As variáveis que tiveram seus valores medidos e fornecidos ao EKF na etapa de correção foram à concentração de compostos sulfurados, olefinas e temperatura na saída do reator. Sabe-se que é comum em processos reais o tempo de amostragem da temperatura, ser menor que o tempo de amostragem em relação a concentração. Por isso, a medida da concentração foi tomada a cada segundo e a medida de temperatura foi tomada a cada intervalo de 300 s.

Resultados e Discussão

As variáveis estimadas foram à concentração de compostos sulfurados, olefinas e temperatura na saída do reator. Como o valor medido das concentrações não está disponível a todo instante, considerou-se o valor destas variáveis constantes até que outra medida fosse disponibilizada para o EKF, com isto o valor da concentração estimada pelo EKF assumiu o valor medido até que outra medida estivesse disponível.

Na Figura 1 mostra-se o perfil de concentração de compostos sulfurados na saída do reator observa-se que a estimativa realizada pelo EKF depende fortemente do valor medido no processo. Já a Figura 2 mostra a ampliação do perfil obtido na Figura 1, nessa figura é possível observar que os valores estimados estão tão próximos dos valores medidos e que a estimativa não apresentou ruídos o que mostra que modelo interno do filtro consegue representar bem a estimativa da concentração de compostos sulfurados.

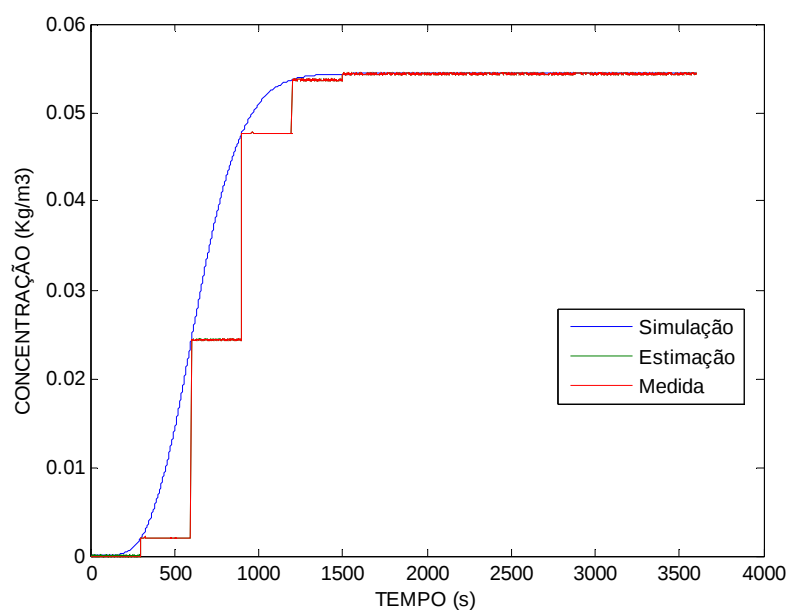


Figura 1: Perfil de concentração de compostos sulfurados ao longo do tempo na saída do reator.

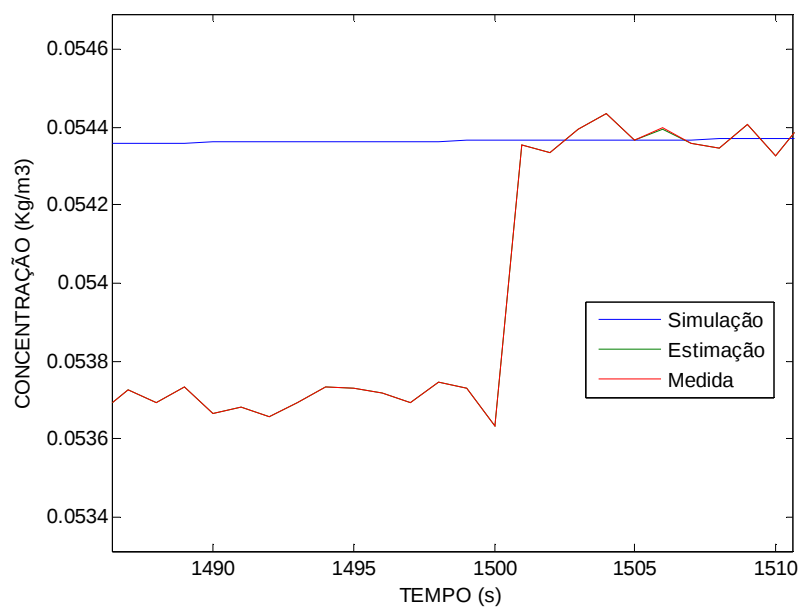


Figura 2: Perfil de concentração de compostos sulfurados ampliado ao longo do tempo na saída do reator.

O modelo matemático pertencente à etapa de propagação do filtro não representou tão bem o perfil de concentração de olefinas na saída do reator, com isso ao se atribuir um maior erro ao modelo matemático na etapa de propagação resultou em uma estimativa com bastante ruído, como pode ser visto na Figura 3. Apesar disso os valores estimados mostraram-se bastante próximos dos valores medidos obtidos na simulação.

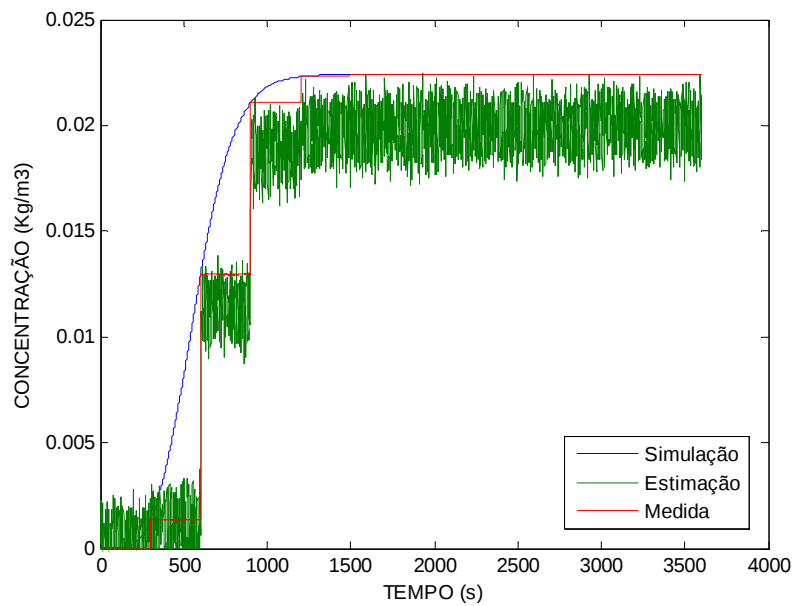


Figura 3: Perfil de concentração de olefinas ao longo do tempo na saída do reator.

A estimação da temperatura é mostrada na Figura 4, tal estimação apresenta valores bastante próximos do valor real da planta, porém devido ao valor atribuído ao erro da medida, os valores estimados e medidos mostram-se bastante ruidosos.

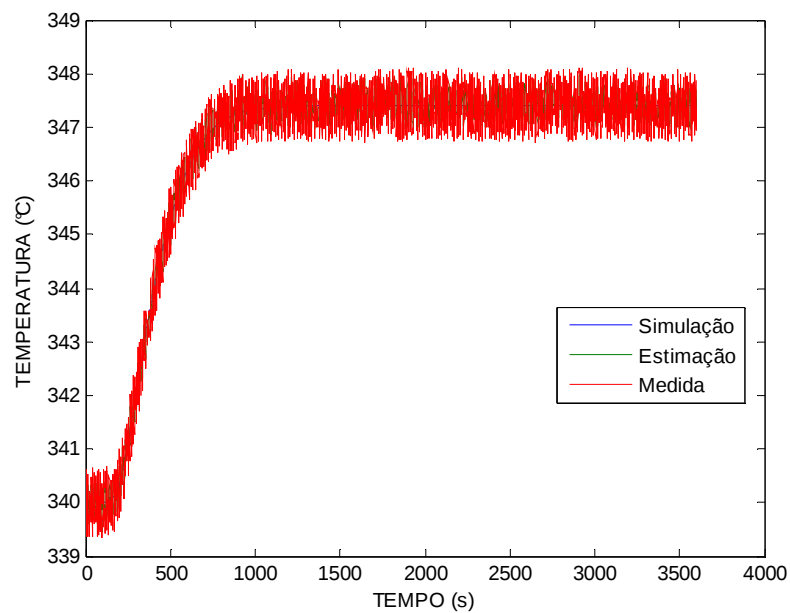


Figura 4: Perfil de temperatura ao longo do tempo na saída do reator.

Conclusões

Dentre as variáveis que foram inferenciadas as que mostraram melhores resultados foram à temperatura e a concentração de compostos sulfurados. É importante ressaltar também a influência dos erros associados ao modelo e as medidas, representados respectivamente pelas matrizes Q e R, nos valores obtidos na inferência. O estudo realizado neste trabalho mostra o EKF como uma possível ferramenta no desenvolvimento de estratégias de controle avançado do processo devido aos bons resultados obtidos neste trabalho. Uma sugestão para trabalhos futuros é a implementação do EKF com dados obtidos em uma planta real, afim de verificar o comportamento do mesmo em tal situação.

Agradecimentos

Ao Prh-28 e ao LACO-UFPE

Referências Bibliográficas

BHASKAR, M.; VALAVARASU, G.; MEENAKSHISUNDARAM, A.; BALARAMAN, K. S. Three-Phase Reactor Model to Simulate the Performance of Pilot-Plant and Industrial Trickle-Bed Reactors Sustaining Hydrotreating Reactions. *Ind. & Eng. Chem. Research*. 43, 6654–6669, 2004.

LEU, G., BARATTI, R.. An extended Kalman filtering approach with a criterion to set its tuning parameters; application to a catalytic reactor. *Computers and Chemical Engineering*. V.23, p. 1839-1849, 2000.

LUCENA, S. Commande non linéaire d'un réacteur biologique semi-continu de production de levures. 1996. Tese, Doutorado em Engenharia Química, Institut National Polytechnique de Lorraine, Nancy, França.

MEDEROS, F. S., ANCHEYTA, J. Mathematical modeling and simulation of hydrotreating reactors: Cocurrent versus countercurrent operations. *Applied Catalysis*, 332, 8–21, 2007.

SALAU, NINA PAULA GONÇALVES. Abordagem Sistemática para Construção e Sintonia de Estimadores de Estados Não-lineares. Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2009. Tese (Doutorado).

TARHAN, M. O. *Catalytic Reactor Design*, New York: McGraw-Hill, Inc, 1983.

TONEL, GIOVANI, Avaliação dos Estimadores EKF, CEKF e MHE para Aplicações em Linha em Processos. Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Porto Alegre, 2008. Dissertação (Mestrado).