



# 2º CONGRESSO BRASILEIRO DE P&D EM PETRÓLEO & GÁS

## MODELAGEM EMPÍRICA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO UTILIZANDO REDES NEURAS DE WAVELETS PARA OTIMIZAÇÃO E CONTROLE DE PROCESSOS

Letícia Gomes Moura<sup>1</sup>, Carlos Claumann<sup>1</sup>, Julio E. Normey Rico<sup>2</sup> e Nestor Roqueiro<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Engenharia Química e Engenharia de Alimentos, Universidade Federal de Santa Catarina 88040-900 CTC-UFSC Florianópolis-SC Brasil, nestor@enq.ufsc.br

<sup>2</sup> Departamento de Automação e Sistemas, Universidade Federal de Santa Catarina 88040-900 CTC-UFSC Florianópolis-SC Brasil, julio@das.ufsc.br

**Resumo** - Neste trabalho estuda-se a modelagem empírica de colunas de destilação. O modelo desenvolvido utiliza uma rede neural baseada em *wavelets* e para seu treinamento são utilizados dados provenientes de um simulador rigoroso de processos. O modelo de simulação implementado é composto por uma coluna de destilação e os equipamentos a ela associados. A rede neural utilizada tem estrutura e métodos de treinamento inovadores e está em processo de desenvolvimento. Os resultados obtidos mostram que a rede utilizada reproduz de forma muito precisa o comportamento dinâmico do processo e que poderá ser utilizada como preditor para fins de otimização e controle.

Palavras-Chave: Redes neurais, Identificação, Coluna de destilação, *Wavelets*.

**Abstract** – In this work a empirical modeling procedure of distillation columns is presented. The developed model uses a neural net based on *wavelets* and for its training a data-base from a rigorous process simulator is used. The implemented simulation model is composed by a distillation column and its related equipments. The presented neural net has a original structure and innovative training methods and it is in development process. The obtained results show that the used net reproduces satisfactorily the dynamic behavior of the process and that could be used as predictor for optimization and control.

Keywords: Neural networks, Identification, Distillation column, *Wavelets*.

## 1. Introdução

A destilação é de longe a mais importante técnica de separação da indústria de processos químicos em todo o mundo. Nos EUA contam-se 40.000 colunas de destilação que consomem 3% de toda a energia utilizada naquele país [Ram 1995]. Por estas razões, melhorar o processo e seu controle pode ter um impacto significativo na redução de consumo de energia, na melhora da qualidade do produto e na proteção dos recursos ambientais. No entanto a modelagem e o controle de colunas de destilação é difícil porque o processo é não-linear, dinâmico, acoplado e ainda está sujeito a restrições de operação e perturbações. Todas estas características limitam a efetividade de controladores lineares [Dut 1999].

As estratégias de controle baseadas em modelo requerem o desenvolvimento de modelos de sistemas não-lineares e para estes não existe uma metodologia geral para obtenção. Pearson relata que o desenvolvimento de modelos é uma das etapas mais demoradas de projeto industrial [Pea 2003].

Na etapa de aplicação industrial, o tempo de cálculo é fator determinante para a escolha do modelo [Dut 1999][Saf 1999]. Controladores não-lineares, baseados em modelagem fenomenológica prático a prático, podem ser desenvolvidos, porém, por razões práticas, controladores precisam fornecer uma resposta razoável dentro de um determinado intervalo de tempo; e, ademais, exigências computacionais limitam a adoção industrial de controladores com modelagem rigorosa [Dut 1999] [Luy 1990].

Os métodos para controle e otimização dependem ainda de medidas precisas de variáveis que, em muitos processos industriais, são medidas *off-line* em laboratórios de qualidade. A dificuldade de aquisição de informação sobre estas variáveis pode ser atribuída a vários fatores: pouca automatização das análises laboratoriais; necessidade de manutenção constante do sistema de medição; e, mesmo quando medidas em tempo real são possíveis, o custo de instalação de um sensor adicional pode não ser atrativo [Fie 2002]. Esses compostos-chave frequentemente refletem a qualidade do produto final e, por isso, são de grande interesse econômico. Nestes casos, uma estimativa da variável pode ser obtida a partir de um modelo inferencial [Bha 2001][Bar 2002][Wan 1996].

Ainda que modelos inferenciais sejam largamente utilizados na indústria, apenas poucas técnicas de modelos inferenciais são discutidas na literatura [Bha 2001]. Barbosa *et al.* [Bar 2002], do CENPES, comparam redes neurais quando utilizados como sensores inferenciais de colunas de destilação. Kresta [Bha 2001] e Wang [Wan 1996] também utilizam inteligência artificial em sensores.

O potencial de aplicação de redes neurais em processos industriais é vasto. A habilidade das redes neurais de capturar e modelar processos severamente não-lineares, dinâmicos ou ainda acoplados faz delas ferramentas poderosas em controle baseado em modelos e monitoração.

A utilização de redes neurais como solução potencial para problemas complexos não é novidade. Nos últimos 50 anos, muitos estudos têm sido realizados com o intuito de alcançar o nível de sofisticação do cérebro humano para processar informação [Wil 1991]. A habilidade das redes neurais de modelar funções não-lineares é utilizada em muitas aplicações industriais, tais como: identificação de sistemas, controle de processos, detecção de falhas, reconhecimento de padrões [Ram 1995][Pea 2003][Hus 1999]. Como modelo empírico, as redes neurais têm a vantagem de não se necessitar conhecimento prévio do processo, pois são capazes de estabelecer a relação dinâmica de causa e efeito e encontrar relações complexas entre variáveis [Kor 2002][Len 2001][Hus 1999][Sav 1996][Ara 1998][Su 1993]. A partir de informação (dados) do processo – etapa de treinamento –, as redes neurais são capazes de reproduzir o comportamento do processo – etapa de previsão. As redes neurais tradicionalmente utilizadas (multicamada com treinamento *backpropagation*) apresentam algumas características indesejadas que foram superadas parcialmente pelas redes de base radial e *wavenets* descritas na literatura [Roq 1995][Cla 1999].

A adoção de redes neurais nas diversas possibilidades ilustradas acima se encontra em estágio incipiente na indústria de processos no Brasil. A modificação de sensores e estratégias de controle em processos em funcionamento raramente ocorre, pois acarreta em custos de interrupção de produção, de aquisição de novos equipamentos, de treinamento de operadores, sem falar no risco embutido na inovação. A adoção de novas tecnologias, ainda que vantajosas, implica na possibilidade de situações desconhecidas, por isso a avaliação prévia é exaustiva.

O potencial da utilização de redes neurais na modelagem do refino de petróleo encontra-se ilustrado em trabalho recente de inferência de produtos de destilação utilizando dados experimentais obtidos na refinaria REPAR, operada pela PETROBRAS S.A. [Bar 2002].

No presente trabalho, uma modificação das redes de *wavelets* que apresenta melhores características de desempenho em malha aberta é utilizada para modelagem de coluna de destilação, objetivando-se superar os obstáculos apresentados pelas redes precursoras. O objetivo aqui é desenvolver a metodologia de adoção das redes neurais e viabilizar a sua utilização no processo de refino do Petróleo e analisar o comportamento dinâmico da rede proposta como preditor.

A utilização de modelos não lineares provenientes da inteligência artificial tem sido objeto de muita investigação e avanço. Os modelos que utilizam funções de ativação são chamados de redes neurais. Estas são compostas de camadas de neurônios interconectados através de pesos. Desde o surgimento das Redes Neurais (NNs) como uma ferramenta computacional poderosa para descrição de mapeamentos complexos, elas foram objeto de interesse para aplicações em engenharia. Há vasta literatura sobre diversos tipos de redes neurais [Saf 1997].

Apesar do potencial das redes neurais, muitos problemas restam a serem resolvidos antes que larga utilização delas venha a ocorrer [Hai 1999] [Saf 1997]. Algumas funções de ativação utilizadas são funções cujo suporte é igual

ao domínio definido para as variáveis de interesse e, portanto, não é possível realizar um aprendizado da rede de forma localizada. A classe e o número de funções define a estrutura da rede e pode ser necessário determiná-las de forma empírica, por tentativa e erro ou por heurística. A convergência do algoritmo de aprendizado não é normalmente garantida.

Tentativas foram feitas para resolver estes, e outros problemas, considerando estrutura rigorosa para as NNs. A teoria de *wavelets* foi utilizada por Bakshi&Stephanopoulos [Bak 1993] para implementar este tipo de redes denominadas wavenets. Uma abordagem ampla encontra-se nos trabalhos de Roqueiro [Roq 1995] e Claumann [Cla 2002]. A modelagem de uma coluna de destilação usando redes neurais baseadas na teoria de wavelets foi apresentada recentemente em [Saf 1999] onde utiliza-se um modelo híbrido empírico-fenomenológico. O trabalho aqui apresentado utiliza apenas a modelagem empírica da coluna de destilação evitando a complexa determinação de modelos fenomenológicos. Para isso é utilizada uma rede neural baseada em *wavelets* com estrutura e métodos de treinamento inovadores. No treinamento são utilizados dados provenientes de um simulador rigoroso de uma coluna de destilação. Os resultados preliminares mostram que a rede utilizada reproduz de forma muito precisa o comportamento dinâmico do processo e poderá ser utilizada como preditor para fins de otimização e controle.

O artigo está organizado da seguinte forma: na Seção 2 apresenta-se o processo a ser identificado. A Seção 3 apresenta a estrutura da rede neural utilizada para modelagem empírica da coluna de destilação. Já a Seção 4 traz os resultados obtidos e, por fim, as conclusões e perspectivas.

## 2. O Processo

Como fonte de informação do processo de destilação para treinar a rede neural foi utilizado um simulador comercial rigoroso (Indiss). O Indiss é um programa computacional para simulação de processos industriais. É capaz de fazer simulações dinâmicas de processos variados. Presta-se como uma ferramenta para: projeto e desenvolvimento de processos; otimização de sistemas de controle e procedimentos de operação; treinamento de operadores ou ainda para ensino em cursos técnicos e de engenharia.

O processo simulado corresponde a uma planta de operação industrial de refino de frações leves de petróleo. O diagrama da Figura 1 traz a representação do sistema utilizado, que tem como unidade principal uma coluna de destilação com 12 metros de altura e 30 pratos.

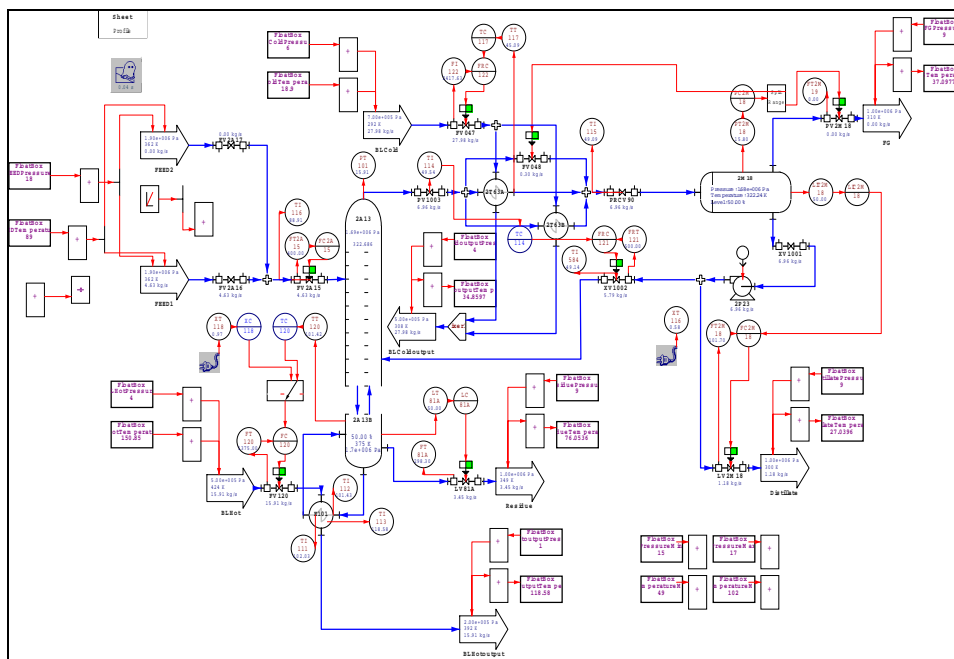


Figura 1. Diagrama de processo do simulador INDISS.

## 3. A Rede

Uma ilustração da rede de *wavelets* utilizada na identificação de um sistema dinâmico pode ser vista na Figura 2. Neste exemplo, a rede possui apenas uma saída:  $y(k+1)$ , a variável predita no tempo  $(k+1)$  e duas entradas: a variável de perturbação  $u(k)$  e a saída no instante atual  $y(k)$ . Os pesos da camada de entrada recebem o valor 1.

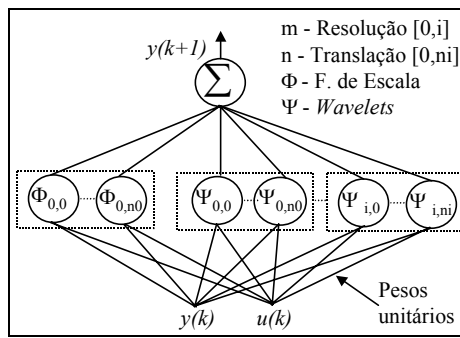


Figura 2. Rede de *wavelets* utilizada na identificação de processos.

Na Figura 3, mostra-se uma ilustração da rede de *wavelets* utilizada como simulador do processo (o mesmo do caso anterior).

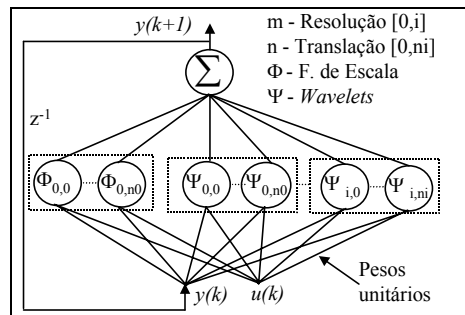


Figura 3. Rede de *wavelets* utilizada como simulador do processo.

Esta estrutura de rede tem como uma de suas principais características o fato de ser um modelo linear nos parâmetros e possibilitar o ajuste utilizando método de mínimos quadrados, uma vantagem significativa dado que a solução é única. O treinamento da rede é realizado como visto na Figura 2 a partir de um conjunto de dados, obtendo-se um mapeamento estático. Esta rede, assim treinada, é utilizada como preditor ou simulador dinâmico, realimentando convenientemente a sua saída sobre a entrada que representa a saída passada. A identificação de sistemas utilizando redes neurais consiste, basicamente dos seguintes passos, sumarizado por Claumann [Cla 2002]:

a) Obtenção do Grupo de Dados de Treinamento: aplicando um conjunto de perturbações ao processo que se deseja modelar, gera-se um conjunto de dados para treinamento. Os alvos são as saídas do processo no tempo discreto  $(k+1)$ . As entradas da rede são os valores atrasados das saídas e das perturbações, ou seja, correspondem aos tempos discretos  $(k), (k-1), (k-2)$ .

b) Determinação da melhor estrutura da rede: Esta etapa é relativa ao estudo do conjunto de variáveis de entrada que melhor identifica o processo. um critério simples para indicar o melhor conjunto seria aquele que produzisse um pequeno erro quadrático com o menor número de variáveis de entrada.

c) Validação: o procedimento mais comum para validar modelos é utilizar um novo grupo de dados (dados-teste) relacionando as entradas às saídas. O desempenho da rede deve ser avaliado com relação a um grupo de dados diferente do utilizado no treinamento (validação cruzada). Alternativamente, pode-se validar o modelo através de simulação, ou seja, utiliza-se o(s) primeiro(s) ponto(s) de grupo dados de validação (condição inicial) como entrada à rede. Para os demais, utilizam-se apenas os dados das variáveis de perturbação como informação externa e faz-se a realimentação das saídas da rede. Na validação por simulação, pode-se utilizar tanto o grupo de dados de treinamento quanto um de teste.

A avaliação de desempenho da rede é realizada utilizando o Erro Médio Quadrático (EMQ) entre os dados reais do processo e os valores preditos pela rede.

## 4. Resultados

A coluna de destilação foi simulada e a vazão de entrada foi perturbada de forma aleatória. A composição e temperatura de topo foram registradas e estes dados utilizados para identificação do processo usando a rede neural proposta. Redes com diversas configurações foram implementadas, modificando o número de níveis de aproximação [Bak 1993] e o número de entradas da rede (acrescentando variáveis  $y$  e  $u$  com mais atrasos,  $k-1, k-2, \dots$ , etc). Resultados

de simulações com a rede proposta podem ser observados nas Figuras 4 e 5, neste caso foram utilizados níveis crescentes de *wavelets* (Prev1, Prev2, Prev3) e um único atraso nas variáveis de entrada da rede.

Figura 4. Resposta de diversas redes de *wavelets*: previsão da composição de topo.

Figura 5. Resposta de diversas redes de *wavelets*: previsão da temperatura de topo.

É evidente que a rede neural está realizando uma predição muito boa do comportamento dinâmico das variáveis escolhidas e que uma rede com um único nível apresenta resultados satisfatórios. Outras variáveis de entrada e saída foram escolhidas e realizadas simulações com resultados semelhantes. Incrementando o número de variáveis independentes de entrada ( $u(k)$ ) a qualidade da predição apresenta pequena melhoria, porém, o tempo necessário para treinamento aumenta significativamente.

## 5. Conclusão

No presente trabalho, uma rede neural com características especiais está sendo avaliada. Dada as vantagens das redes neurais em termos de simplicidade e velocidade de predição, são elas ferramentas poderosas em várias áreas da Indústria de Processos, inclusive a de Petróleo e Gás. Os resultados obtidos demonstram que a rede neural é um modelo empírico dinâmico muito bom da coluna de destilação, ainda que esta seja um sistema multicomponente, acoplado e não-linear. Além disso, a rede é de simples utilização e prevê o processo com boa acurácia. Observa-se que a rede é treinada com muita rapidez para poucas variáveis. Na medida que as variáveis independentes crescem, esta velocidade diminui muito rapidamente, dado o número de parâmetros a ajustar. Esta rede pode ser utilizada como modelo para projeto de controladores, otimização de operação e desenvolvimento de sensores por software. Neste sentido, algumas trabalhos estão sendo iniciados.

## 6. Agradecimentos

Os autores agradecem a Agência Nacional de Petróleo através do Programa PRH 36, a RSI pela licença do software INDISS e ainda ao CNPQ CTPETRO n. 460214-01-2 pela compra do computador utilizado.

## 7. Referências Bibliográficas

- [Ara 1998] ARAHAL, M.R.; BERENGUEL, M.; CAMACHO, E.F.. Neural identification applied to predictive control of a solar plant. *Control Engineering Practice* 6 (1998) 333-344.
- [Bak 1993] BAKSHI, B. R. e STEFANOPOULOS. G (1993) - Wave- Net: a Multiresolution, Hierarchical Neural Network with Localized Learning. *AIChE J.*, 39, 1, 57-81.
- [Bar 2002] BARBOSA, C.H. *et al.* Inference of Distillation Column Products Quality Using Bayesian Networks. *Neural networks, IJCNN, '02. Proceedings of the International Joint Conference on* (2002) 86-91.
- [Bha 2001] BHARTIYA, S.; WHITELEY, J.R.. Development of inferential measurements using neural networks. *ISA Transactions* 40 (2001) 307-323.
- [Cla 1999] CLAUMANN, C.A. Modelagem e controle de processos não lineares: Uma aplicação de algoritmos genéticos no treinamento de redes neurais recorrentes. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química/UFSC (1999).
- [Cla 2002] CLAUMANN, C.A. Desenvolvimento e aplicações de redes neurais *wavelets* e da teoria de regularização na modelagem de processos. Exame de Qualificação para o Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química/UFSC (2002).
- [Dut 1999] DUTTA, P.; RHINEHART, R.R.. Application of neural network control to distillation and an experimental comparison with other advanced controllers. *ISA Transactions* 38 (1999) 251-278.
- [Fie 2002] FIEG, George. Composition control of distillation columns with a sidestream by using gas chromatographs. *Chemical Engineering and Processing* 41 (2002) 123-133.
- [Hai 1999] HAIKIN, S. *Neural Networks: A Comprehensive Foundation*. Ontario: IEEE Computer, Society Press (1999).
- [Kor 2002] KORRES, D.M. *et al.* A neural network approach to the prediction of diesel fuel lubricity. *Fuel* 81 (2002) 1243-1250.
- [Len 2001] LENNOX, B. *et al.* Industrial application of neural networks – an investigation. *J. Process Control* 11 (2001) 497-507.
- [Luy 1990] LUYBEN, W.L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineerings*, 2<sup>nd</sup> ed, McGraw-Hill Publishing Co., New York (1990).
- [Pea 2003] PEARSON, R.K.. Selecting nonlinear model structures for computer control. *J. Process Control* 13 (2003) 1-26.
- [Ram 1995] RAMCHANDRAN, S.; RHINEHART, R.R.. A very simple structure for neural network control of distillation. *J. Process Control*, v.5, n.2 (1995) 115-128.
- [Roq 1995] ROQUEIRO, N. Redes de *wavelets* na modelagem de processos não lineares. Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ (1995).
- [Saf 1997] SAFATI, A.A.; ROMAGNOLI, J.A.. Application of Wavelet-based Neural Networks to the Modeling and Optimisation of an Experimental Distillation Column. *Engng Applic. Artif. Intell.*, v.10 (3) (1997) 301-313.
- [Saf 1999] SAFATI, A.A.; NOORAI, A.; ROMAGNOLI, J.A.. A hybrid model formulation for a distillation column and the on-line optimisation study. *J. Process Control*, 9 (1999) 125-134.
- [Sav 1996] SAVKOTIC-STEVANOVIC, J. Neural net controller by inverse modeling for a distillation plant. *Computer Chem. Engng.* v 20 (1996) S925-S930.
- [Su 1993] SU, Hong-Te; McAVOY, T.J.. Neural Model Predictive Control of Nonlinear Chemical Processes. *IEEE, Proceedings of the International Symposium on Intelligent Control* (1993) 358-363.
- [Wan 1996] WANG, X. *et al.* Designing a soft sensor for a distillation column with the fuzzy distributed radial basis function neural network. *IEEE Proceedings of the Conference on Decision and Control* (1996) 1714-1719.
- [Wil 1991] WILLIS, M. J. *et al.* Artificial neural networks in process engineering. *IEEE Proceedings-D*. v.138, n.3 (1991) 256-266.
- RSI, [www.rsi-france.com](http://www.rsi-france.com), 2002.
- The MathWorks, [www.mathworks.com](http://www.mathworks.com), 2002.