DESENVOLVIMENTO DE SOFT-SENSOR PARA A INDÚSTRIA DO REFINO -ESTUDO DE CASO PARA A UNIDADE DE RECUPERAÇÃO DE GASES DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO

Carlos J. Pombo*, Fernando E. Fadel*, José A. Pinto*, Marcos F. Brito*, Karla Figueiredo†

* Universidade Petrobras - Rua General Canabarro, 500 - Maracanã Rio de Janeiro, RJ, Brasil

[†] Universidade do Estado do Rio de Janeiro - Rua São Francisco Xavier, 524 - Maracanã Rio de Janeiro, RJ, Brasil

Emails: cjpombo@petrobras.com.br, fernandofadel@petrobras.com.br, aurel@petrobras.com.br, marcosfernando@petrobras.com.br, karla@uerj.br

Abstract— Proper measurement of physical and chemical properties in industrial processes is a critical issue in order to produce quality products without, however, violating the economical, performance and environmental aspects. However, direct measurement of such process variables is not always available, frequently demanding the use of high-cost, complex, critical maintenance process analyzers. Comparatively, the use of artificial-intelligence based process variable inference is, in this case, an alternative to be considered. This work has developed and used a neural-network based inference model for inferring a single process variable, more specifically, the C_3 +content in an absorbing tower from a typical catalytical cracking process unit, using a set of historical process data available from a Plant Information Database System. The use of linear and non-linear variable selection techniques and their impact on results has been addressed and compared. A comparison study between the best obtained neural network and an polynomial inference model based on thermodynamic analysis and linear regression techniques, currently in use in the refinery's premises, is also performed.

Keywords— Neural Networks, LSE, Inference, Catalytical Cracking

Resumo— A medição de grandezas físico-químicas em processos industriais é cada vez mais importante na obtenção de produtos de boa qualidade sem, no entanto, violar as restrições econômicas, de desempenho e ambientais. No entanto, medições diretas destas variáveis de processo nem sempre estão diretamente disponíveis, ou ainda, requerem o uso de equipamentos e analisadores geralmente onerosos, complexos e de manutenção crítica. O uso da inferência de variáveis de processo baseada em inteligência artificial é, para este caso, uma alternativa a ser considerada. Este trabalho visou o desenvolvimento e aplicação de uma rede neural artificial destinada para a inferência de uma variável de processo, mais examente, o teor de C_3 + numa torre absorvedora integrante do conjunto de equipamentos de uma unidade de craqueamento catalítico a partir de um conjunto de dados do histórico de processo. O uso de técnicas lineares e não-lineares para seleção das variáveis relevantes e seu efeito no resultado final da rede são avaliados. Um estudo comparativo entre a melhor rede neural obtida e uma técnica concorrente de inferência polinomial baseada em análise termodinâmica do processo e regressão linear, atualmente em uso na unidade, também foi realizado.

Palavras-chave— Redes Neurais, Inferência, LSE, Craqueamento Catalítico

1 Introdução

Nos últimos anos tem crescido a preocupação com o meio ambiente, com o uso racional de recursos e com a qualidade dos produtos fabricados. As novas políticas públicas, em sintonia com os anseios da sociedade, vêm impondo legislações ambientais e limites de emissão de poluentes cada vez mais restritivos. Nesse contexto, surge a necessidade de políticas de controle de processos mais eficientes. Para atender a essas novas necessidades, é necessário monitorar um número cada vez maior de variáveis de processo (Fortuna et al., 2005). Algumas dessas variáveis apresentam dificuldades de medição, sendo que os principais entraves são o custo, confiabilidade, tempo de análise e tempo morto, este último, inclusive, dependente da localização dos sensores utilizados na aquisição dos dados (Kresta et al., 1994).

Para garantir o controle da torre absorvedora nas refinarias de petróleo, faz-se necessária a monitoração constante da qualidade dos produtos (variáveis de processo) durante a operação da planta. As análises de laboratório são as técnicas que oferecem maior exatidão, mas geralmente são muito lentas e capazes de fornecer algumas poucas medições por dia. Por outro lado, os analisadores em linha se constituem numa alternativa mais direta e atraente mas, via de regra, são equipamentos complexos, caros e dependentes de manutenção constante (Barbosa et al., 2003).

Para contornar os inconvenientes acima apresentados, surgem as técnicas baseadas em inferências, também denominadas de software-based sensors ou soft sensors (Barbosa et al., 2003; King, 2004; Tham, 1991). O termo inferência se deve ao fato de que uma variável secundária ou parâmetro, o qual pode ser medido mais facilmente, é usado para estimar o valor de uma variável primária ou de processo que, por sua vez, não é passível de ser medida diretamente (Tham, 1991).

O objetivo deste trabalho é obter uma modelo

de inferência para o teor de C_3+ (hidrocarbonetos de cadeia a partir de três átomos de carbono) na corrente de topo da torre absorvedora que faz parte do sistema de recuperação de gases de uma unidade de Craqueamento Catalítico Fluidizado (Fluidized Catalytic Cracking ou FCC). Para essa inferência é utilizado um modelo de redes neurais do tipo perceptrons de múltiplas camadas (MLP). Também é feita uma comparação do desempenho da inferência obtida com um modelo polinomial do processo atualmente em uso.

2 Inferência em Controle de Processos

Um modelo inferencial é normalmente utilizado em controle de processos quando a medição da variável física a ser controlada não está diretamente disponível em tempo real. As razões para esta incapacidade de medição podem ser diversas, mas principalmente: custo, confiabilidade, longos tempos de análise e/ou tempos mortos *inter* e intramedições, tanto para sensores como analisadores.

Mais especificamente, o controle de processo de destilação em refinarias de petróleo requer a avaliação da qualidade do produto ao longo de toda operação da planta (Almeida et al., 2006). A análise de laboratório, a técnica mais acurada, é muito demorada, fornecendo tão somente alguns valores por dia. A utilização de analisadores em linha, por outro lado, é muito dispendiosa, além de requerer uma manutenção rigorosa e permanente dos equipamentos envolvidos.

Um modelo inferencial em controle de processos consiste de um sistema de controle não-convencional baseado na medição das variáveis disponíveis o qual realizará, de alguma maneira, a estimativa do valor de uma variável não diretamente disponível, sendo esta então a variável a ser controlada. Geralmente é específico ao processo, necessitando ser desenvolvido, customizado e sintonizado para cada aplicação em particular.

Dois grandes desafios existem no desenvolvimento de modelos inferenciais empíricos: o estabelecimento da estrutura do modelo da inferência, devendo ser abordada da maneira mais genérica possível e sem quaisquer tipos de restrições, em nome de uma maior flexibilidade, sem no entanto sacrificar em termos de exatidão e representatividade. O segundo desafio, por sua vez, envolve critérios de projeto e seleção das variáveis de referência cujos dados dever-se-ão constituir em um só conjunto mínimo, porém capaz de refletir toda a gama de condições de processo existentes (Kresta et al., 1994).

Mais ainda, é bem conhecido na literatura que um desempenho considerado satisfatório para estimadores inferenciais somente é possível se as variáveis secundárias (variáveis medidas) tiverem grande influência sobre a variável a ser inferida (Zamprogna et al., 2005). Portanto, faz-se ne-

cessário um criterioso pré-tratamento de toda informação disponível, privilegiando as variáveis de maior influência para com a variável a ser estimada.

3 Técnicas de Seleção de variáveis

As técnicas de seleção de variáveis permitem determinar, a partir de um conjunto n-dimensional de variáveis de entrada de um processo, quais as variáveis que possuem melhor relação para com as variáveis de saída, bem como o grau de influência de cada uma neste contexto. A escolha ótima de um subespaço de variáveis de entrada permite, no caso do projeto de uma rede neural, a distribuição hierarquica das variáveis nas entradas dos neurônios da rede, melhorando a generalização da predição fornecida, além de uma redução significante do esforço computacional requerido (Baffi et al., 2000; Contreras, 2002).

Uma vantagem adicional da pré-seleção de variáveis está em desacoplar a convergência ou não da rede neural, do conjunto de variáveis utilizado para treinamento, visto que a seleção e classificação da importância do subespaço de variáveis de entrada utilizado já foi previamente validado (Hyvärinen and Oja, 1997). Devido as propriedades não-lineares apresentadas pelo processo industrial de absorção de C_3+ , principalmente no que se refere presença de tempos mortos, utilizouse neste trabalho um método de seleção de variáveis denominado LSE - Least Squares Estimator (Chung and Duan, 2001; Jang, 2001; Miller, 1990).

O estimador por mínimos quadrados (LSE) é um método independente de modelo o qual busca descrever o comportamento das variações da saída em função das variações das entradas. Assim, é possível linearizar relações não-lineares através de uma regressão multivariada, cujos coeficientes são determinados por meio de otimização por mínimos quadrados (Corrêa, 2005). Também foi empregado o algoritmo de seleção de variáveis por análise da correlação linear cruzada como alternativa à análise de significância entre variáveis feita pelo algoritmo LSE.

3.1 Descrição do Modelo em Estudo

O sistema é composto basicamente por duas torres, Torre 1 (absorvedora primária) e Torre 2 (absorvedora secundária) como mostrado na Figura 1. O objetivo desta torre é retirar o excesso de C₃+ presente no gás natural que irá servir de combustível para os demais equipamentos da refinaria. O gás natural entra pela Torre 1, é lavado em contra-corrente com nafta combinada (mistura de naftas estabilizada e instabilizada) para remover o C₃+, segue para a Torre 2 onde é lavado em contra-corrente com óleo diesel de reciclo (LCO) para retirar alguma nafta que porventura foi car-

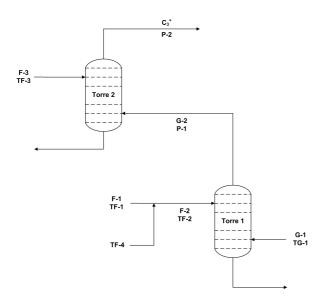


Figura 1: Diagrama simplificado da torre absorvedora

regada da Torre 1. Na saída da Torre 2, corrente de topo, tem-se o gás combustível com um teor mínimo esperado de C_3+ .

Segundo as informações do operador do processo em estudo, as variáveis de processo utilizadas para o controle do C₃+ são as pressões P1 e P2, a temperatura TF2 e vazão de nafta combinada F2 na entrada da Torre 1. Por experiência, verifica-se que o teor de C₃+ na saída da torre absorvedora é mais sensível à alterações na variável de vazão de nafta combinada (F2). Em relação às pressões do sistema (P1 e P2), é observado que, apesar de melhorar a absorção do C₃+, elas aumentam também a absorção de C₂, o que obriga o operador a aumentar a retificação na unidade deetanizadora conectada na entrada desta unidade, acarretando um aumento na vazão de gás para a própria torre absorvedora e dessa forma prejudicando a eficiência da absorção. Com relação à temperatura da nafta combinada (TF2), apesar de não existir nesta planta controle desta temperatura, observa-se que o aumento também traz maiores perdas de C₃+ para o gás combustível.

3.2 Aquisição de Dados

Os dados para construção do modelo são coletados através de doze diferentes sensores de pressão, vazão e temperatura posicionados nas duas torres absorvedoras (ver Tabela 1). Foi disponibilizado um total de dezesseis meses não-consecutivos de operação da planta. Os dados são oriundos de um servidor de histórico de processo denominado $Plant\ information\ (P.I.),$ que é responsável por coletar e armazenar tais dados. A análise atual de teor de C_3+ , por sua vez, se dá em laboratório sob períodos regulares de 24 horas.

Existem dados disponíveis de 01/02/2005 até 30/09/2005, fornecendo um total de 155 análises

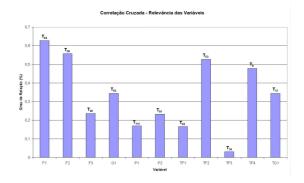


Figura 2: Relevância das Variáveis - Correlação Cruzada

laboratoriais e de 01/02/2006 até 30/09/2006, fornecendo um total de 133 análises laboratoriais. Dessa forma, tem-se total geral de 288 diferentes segmentos de dados para o teor de C₃+ disponíveis, a priori, para a inferência. Verificou-se, no entanto, que existem 66 segmentos com valores espúrios ou discrepantes (atribuídos a erros de leitura, falha de sensores, etc). Os dados referentes a estes dias foram descartados, restando apenas 222 segmentos para o estudo. Cada segmento, por sua vez, contém as últimas duas horas de medições do processo anteriores à coleta da amostra para análise laboratorial.

3.3 Modelagem da Rede Neural

Foi feita a separação dos 222 segmentos de dados disponíveis em 150 para treinamento, 50 para validação e 22 para teste. Os dados de teste foram separados de forma continua e os demais valores foram embaralhados antes de fazer a divisão, de modo a mitigar algum viés cronológico porventura presente neste conjunto de dados.

Para as variáveis de vazão F1, F2, F3 e G1, avaliou-se o número de elementos temporais de maior relevância na composição da média representativa da variável de entrada. Esses elementos, por sua vez, foram determinados a partir das técnicas de correlação e LSE, sendo utilizados os n-melhores instantes de tempo os quais melhor descrevem a variável de saída a partir destes métodos de seleção de variáveis. Uma descrição mais detalhada das sistemáticas adotadas para ambos métodos de seleção dos elementos temporais pode ser encontrada em Pombo et al. (2007). As outras variáveis foram representadas apenas por suas médias, já que apresentavam pouca variação nos segmentos temporais especificados.

As figuras 2 e 3 mostram os resultados obtidos para seleção das variáveis de entrada a partir dos métodos de Correlação Linear Cruzada e LSE, respectivamente. Observa-se ainda nestas figuras que estão ilustrados apenas os pontos de máximo de correlação/relevância em seus respectivos instantes de tempo.

Variável	Descrição	Range	Unidade
G-1	Vazão da entrada de gás	0 a 45829	Nm^3/dia
TG-1	Temperatura de entrada de gás	0 a 300	$^{\circ}C$
G-2	Vazão de saída do topo da torre 1	0 a 34031	Nm^3/dia
P-1	Pressão de topo da torre 1	0 a 20	kgf/cm^2
P-2	Pressão de topo da torre 2	0 a 20	kgf/cm^2
F-1	Vazão de entrada da nafta	0 a 5500	m^3/dia
TF-1	Temperatura de entrada da nafta	0 a 500	$^{\circ}C$
F-2	Vazão de entrada da nafta combinada na torre 1	0 a 9280	m^3/dia
TF-2	Temperatura da vazão de nafta combinada	0 a 200	$^{\circ}C$
F-3	Vazão de entrada do óleo diesel	0 a 3840	m^3/dia
TF-3	Temperatura de entrada do óleo diesel	0 a 500	$^{\circ}C$
TF-4	Temperatura de entrada da nafta	0 a 300	$^{\circ}C$
C ₃ +	Teor de C ₃ + na saída de gás combustível	N.D.	%vol.

Tabela 1: Descrição das treze variáveis monitoradas da torre absorvedora

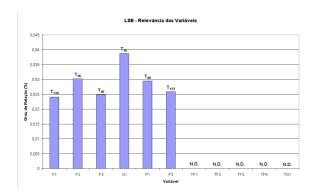


Figura 3: Relevância das Variáveis de Entrada - LSE *(N.D. - Não Disponível)

Para o treinamento da rede foi feita uma busca do melhor resultado a partir de sorteios do conjunto de dados de treinamento e validação, cada sorteio associado a redes de 1 a 30 neurônios, bem como cada rede com seus pesos inicializados aleatoriamente 20 vezes. Como critério de parada verificou-se o cálculo do MAPE (Mean Absolute Percent Error ou Erro Médio Absoluto Percentual) de cada iteração, quando este valor começa a aumentar comparado com o MAPE anterior interrompe-se imediatamente o treinamento - o "early stopping" tal como descrito em Corrêa (2005).

4 Comparativo entre Métodos de Seleção de Variáveis

Foram feitos treinamentos de redes, como descrito anteriormente, para média dos n-melhores instantes de tempo de significância para as variáveis F1, F2, F3 e G1, n assumindo os valores 1, 3, 4, 5, 6 e 7. A Tabela 2 contém os resultados obtidos para análise por correlação cruzada e a Tabela 3 para a análise via LSE. Para este estudo comparativo, foram utilizadas três métricas para avaliação do desempenho da rede neural: o erro absoluto, erro

médio absoluto percentual (MAPE) e a correlação linear entre os dados inferidos pela rede neural e as medições de laboratório.

Comparando os resultados obtidos com os métodos de LSE e correlação cruzada, observa-se que o primeiro consegue descrever o sistema utilizando menos neurônios e com erros absoluto e percentual menores. Estes resultados sugerem, portanto, que a rede obtida a partir dos dados selecionados pelo algoritmo LSE apresenta maiores desempenho e capacidade de generalização. As melhores redes estão destacadas em negrito nas Tabelas 2 e 3, sendo a melhor configuração geral obtida a partir do método LSE e com a média dos três melhores instantes de tempo, possuindo sete neurônios na camada escondida. Verificou-se também que os melhores resultados são obtidos a partir do uso da função log-sigmóide na camada escondida e de uma função linear na camada de saída, respectivamente.

5 Comparativo de Desempenho entre Inferências

Foi também realizado um teste comparativo entre um modelo de inferência baseado num polinômio (Borges and Gregório, 2006) obtido a partir de técnicas de regressão linear e análise termodinâmica, e a melhor rede encontrada para o problema em estudo. Este polinômio é atualmente a solução em uso na inferência do teor de C_3+ na unidade de craqueamento catalítico em estudo. A Equação 1 traz este polinômio:

$$Teor\ C_3 + = Bias + A* \quad \frac{TF1}{P1*\frac{G1}{F1}} \quad + B* \quad \frac{TF4}{P1*\frac{F2-F1}{G1}} \quad + (\cdots)$$

$$+(\cdots)+C*\left(\tfrac{TF2}{P1}\right)+D* \quad \tfrac{TF3}{P2*\tfrac{G2}{F3}} \quad +E*\left(\tfrac{TF3}{P2}\right)+F*TG1 \quad \left(1\right)$$

em que os coeficientes lineares A, B, C, D, E e F são obtidos a partir de técnicas de regressão

Correlação Linear Cruzada								
Configuração da Rede		Teste		Validação		Treinamento		
n	Neurônios	Erro	MAPE	Correlação	Erro	MAPE	Erro	MAPE
1	12	3,2492	15,1382	0,9607	2,8141	12,4844	2,7522	21,6957
3	5	3,3797	16,4871	0,9199	2,8048	15,7307	2,6838	16,2670
4	12	3,2931	13,4412	0,9389	2,7485	12,4036	2,6713	17,0200
5	10	3,3789	16,0248	0,9205	2,7114	15,4789	2,6049	14,7913
6	10	3,1789	11,7056	0,9441	2,6529	13,5870	2,6680	18,6514
7	10	3,3049	16,6289	0,9146	2,6682	12,2791	2,5284	14,5801
Médias	9,8333	3,2975	14,9043	0,9196	2,9028	15,1629	2,7309	18,8731

Tabela 2: Comparativo entre diferentes configurações de rede a partir do método de análise de correlação linear

LSE								
Configuração da Rede		Teste		Validação		Treinamento		
n	Neurônios	Erro	MAPE	Correlação	Erro	MAPE	Erro	MAPE
1	13	3,1699	13,9974	0,9336	2,9947	14,9887	2,7426	21,7562
3	7	3,0355	13,2661	0,9554	2,8692	12,9544	2,7935	19,4633
4	8	3,1909	12,1871	0,9438	2,8116	14,6461	2,7151	16,5970
5	6	3,1862	12,7341	0,9353	2,9293	16,9728	2,7303	17,9438
6	14	3,2876	14,7492	0,8550	2,8496	14,3471	2,6649	18,4753
7	7	3,3608	13,8369	0,8946	2,9618	17,0684	2,7387	19,0030
Médias	9,1667	3,2052	13,4618	0,9331	2,7334	13,6606	2,6515	17,1676

Tabela 3: Comparativo entre diferentes configurações de rede a partir do método LSE

linear, com a unidade sob condição normal de operação e regime de carga entre 7000 e 7800 Nm^3/h . O mesmo conjunto de dados foi empregado no desenvolvimento de ambos modelos de inferência.

Para facilitar a comparação, a Figura 4 traz o gráfico da concentração medida em laboratório (verde) comparada com a concentração calculada a partir do polinômio linear (azul) e da rede neural (vermelho). Verifica-se que ambos modelos de inferência seguem a tendência de variação dos valores medidos, porém, a rede neural apresenta uma estimativa mais precisa que aquela obtida a partir do polinômio linear baseado em análise termodinâmica e regressão linear.

6 Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

Uma das maiores dificuldades encontradas para o desenvolvimento do presente trabalho foi a pequena quantidade de dados históricos disponíveis a serem apresentados a rede para a elaboração de todo o estudo de caso. Estudos similares indicam um mínimo de 500 amostras para o processo de aprendizagem, validação e testes de redes neurais. Apesar da carência de dados, conseguiu-se treinar uma rede capaz de inferir razoavelmente o teor de C_3+ na saída de gás combustível de uma torre absorvedora com um erro menor que aquele obtido pelo polinômio atualmente em uso (Borges and Gregório, 2006).

De forma geral, verifica-se que as redes neurais apresentam uma grande capacidade de generalização e especial adequabilidade a processos nãolineares. Baseado nos resultados apresentados e lembrando que o processo em estudo é essencialmente não-linear, constatou-se que a partir de um método de seleção de variáveis com características não-lineares é possível obter, para este processo, uma inferência de melhor desempenho.

Agradecimentos

Este trabalho contou com o apoio do Dr. Miguel Borges e do Dr. Sérgio Gregório da gerência de Automação e Otimização (AOT) do Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello da Petrobras - Petróleo Brasileiro S.A. (CENPES), pela aquisição dos dados de processo e, sobretudo, pelo inestimável suporte em todas as etapas de elaboração deste trabalho.

Referências

Almeida, L., Barbosa, C., Vellasco, M. and Pacheco, M. (2006). Inferência on-line da qualidade de produtos de destilação usando redes neurais mlp e filtro kalman estendido, *Technical report*, Departamento de Engenharia Elétrica da Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro.

Baffi, G., Martin, E. B. and Morris, A. J. (2000). Non-linear dynamic projection to latent structures modeling, *Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems* 1(52): 5–22.

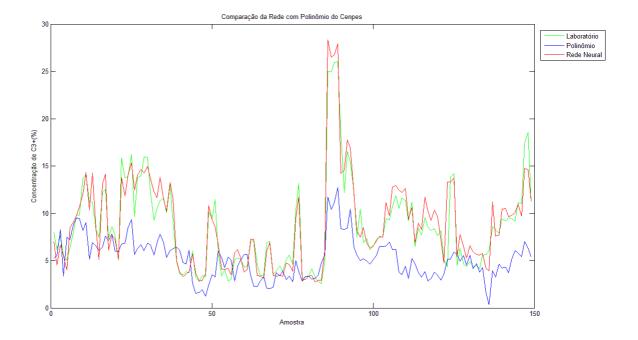


Figura 4: Comparativo de desempenho: Medida em Laboratório versus Polinômio versus Rede Neural

Barbosa, C., Vasconcellos, L., Berlim, R., Vellasco, M. and Pacheco, M. (2003). An integrated intelligent sytem for the inference of distillation column product quality, Inteligência Computacional Aplicada (ICA),Departamento de Engenharia Elétrica, PUC-RJ.

Borges, M. and Gregório, S. (2006). Inferência do c3+ no gás combustível, Comunicação Privada, Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello - CENPES.

Chung, F. and Duan, J. (2001). On multistage fuzzy neural network modeling, *IEEE Transactions on Robotics and Automation* **8**: 125–816.

Contreras, R. J. (2002). Técnicas de seleção de características aplicadas a modelos neuro-fuzzy hierárquicos bsp, Master's thesis, Departamento de Engenharia Elétrica da Pontífica Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Corrêa, L. G. C. (2005). Inferência da qualidade de produtos de destilação utilizando redes neurais artificiais e filtro de kalman estendido, Master's thesis, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Fortuna, L., Graziani, S. and Xibilia, M. (2005). Soft sensors for product quality monitoring in debutanizer distillation columns, *Control Engineering Practice* **13**: 499–508.

Hyvärinen, A. and Oja, E. (1997). One-unit learning rules for independent component analysis, *MIT Press* pp. 480–486.

Jang, J. (2001). Ansis: Adaptive-network-based fuzzy inference system, *IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics* **23**(3): 665–685.

King, M. (2004). How to lose money with inferential properties, *Hydrocarbon Processing* **81**: 47–52.

Kresta, J., Malin, T. and MacGregor, J. (1994). Development of inferencial process models using pls, *Computers Chem. Engng* **18**(7): 597–611.

Miller, A. (1990). Subset Selection in Regression, Ed. Chapman Hall, London, U.K.

Pombo, C. J., Fadel, F., Pinto, J. and Brito, M. (2007). Inferência da concentração de c3+ em uma torre absorvedora através de redes neurais, Master's thesis, Universidade do Estado do Rio de Janeiro.

Tham, M. (1991). Soft - sensors for process estimation and inferential control, *J. Proc. Cont.* 1: 3–14.

Zamprogna, E., Barolo, M. and Seborg, D. (2005).
Optimal selection of soft sensor inputs for batch distillation columns using principal component analysis, *Journal of Process Control* 15: 39–52.