

# REDES NEURAS ARTIFICIAIS PARA IDENTIFICAÇÃO DA FRAÇÃO MOLAR DE PENTANO NA COMPOSIÇÃO DO GLP

LEANDRO L. S. LINHARES\*, JOSÉ M. A. JÚNIOR\*, FÁBIO M. U. ARAÚJO\*

\*Universidade Federal do Rio Grande do Norte  
Departamento de Engenharia de Computação e Automação  
Natal, RN, Brasil

Emails: luttiane@dca.ufrn.br, medeiros\_eng@yahoo.com.br, meneghet@dca.ufrn.br

**Abstract**— An artificial neural networks application in the industry of chemical processes is presented in this work. The chosen system was a simulated debutanizer column in LPG (Liquefied Petroleum Gas) production. This column separates LPG, its top product, and natural petrol, its bottom product. The LPG, ideally, is composed by propanes and butanes. However, in practice, the LPG is contaminated by a certain quantity of pentanes. This quantity must be controlled to maintain the LPG in quality specification, but the pentane value is difficult to measure on-line because of limitations as time delay, reliability and high cost. Therefore, is proposed a multilayer neural network to infer the i-pentane measurements based on secondary variables. The NNARX identification structure was applied in this work. The results confirm the functionality of the chosen technic, mapping the i-pentane dynamic with a satisfactory level of reliability.

**Keywords**— systems identification, artificial neural networks, debutanizer column

**Resumo**— Este trabalho apresenta uma aplicação de redes neurais artificiais na indústria de processos químicos. O sistema escolhido foi uma coluna debutanizadora de produção de GLP (Gás Liquefeito de Petróleo). Esta coluna tem como função separar o GLP da gasolina natural. O GLP é idealmente formado por propanos e butanos. Entretanto, na prática o GLP é contaminado por certa quantidade de pentanos. Esta quantidade deve ser controlada para manter o GLP dentro das especificações de qualidade. O valor deste composto é de difícil medição *on-line* devido a limitações como longos intervalos de medição, baixa confiabilidade e alto custo. Por esta razão, é proposto a utilização de uma rede neural de múltiplas camadas para inferir a fração molar de i-pentano no GLP a partir de variáveis secundárias da coluna. A estrutura de identificação utilizada é a NNARX. Os resultados comprovam a funcionalidade da técnica adotada, mapeando a dinâmica do i-pentano com um nível satisfatório de confiabilidade.

**Keywords**— identificação de sistemas, redes neurais artificiais, coluna debutanizadora

## 1 Introdução

Devido ao avanço tecnológico dos computadores nas últimas décadas, a técnica de redes neurais artificiais vem obtendo cada vez mais espaço em diversas áreas da engenharia. Entre as diversas aplicações das redes neurais podemos citar, como exemplos, a classificação de padrões, o mapeamento de funções, a filtragem de sinais e o controle e identificação de sistemas dinâmicos (Haykin, 1999). Nesta última aplicação, é possível adquirir modelos dinâmicos a partir do conhecimento das entradas e saídas de um determinado processo, baseando-se apenas em dados experimentais. Esta metodologia de identificação de sistemas é chamada de identificação *black-box*.

Não é difícil encontrar trabalhos que comprovam a eficiência das redes neurais artificiais aplicadas à identificação e controle de processos (Narendra, 1996; Yang and Chai, 1997; Nørgaard et al., 2001). Especificamente na identificação de processos químicos, o objetivo de inferir a composição e a qualidade de produtos em linhas de produção é uma aplicação em potencial das redes neurais artificiais (Nikravesh et al., 1996; Souza Jr, 1993; Bawazeer and Zilouchian, 1997). A inferência de características pouco acessíveis do sistema permite que esse possa ser controlado de maneira mais eficiente. Este tipo de controle é

denominado controle inferencial.

O controle inferencial é utilizado em sistemas de controle onde as variáveis primárias não são facilmente obtidas devido a limitações de medição (Yang and Chai, 1997). Isto faz com que haja dificuldades significativas no controle destas variáveis. Entretanto, em muitas plantas existem variáveis secundárias que são facilmente medidas. Se as variáveis secundárias são controláveis, então mudanças nas variáveis manipuladas podem ser usadas para inferir efeitos de distúrbios. Um exemplo, onde as variáveis primárias são dificilmente obtidas devido aos longos intervalos de medição e ao alto custo de cromatógrafos, são as plantas de processamento de gás natural.

Nas plantas de processamento de gás natural, o gás *in natura*, proveniente dos campos de elevação, passa por um processo inicial de remoção de água e de elementos oxidantes. Após este processo, o gás é levado para colunas de destilação fracionada, onde ele é decomposto em diversos subprodutos. Um dos principais subprodutos, do ponto de vista econômico, é o GLP (Gás Liquefeito de Petróleo). A coluna de destilação responsável pela produção do GLP e da gasolina natural (C5+) é conhecida como coluna debutanizadora.

Neste trabalho, uma rede neural de múltiplas camadas é utilizada na identificação de parte

da dinâmica de uma coluna debutanizadora simulada. O objetivo é estimar a fração molar do i-pentano presente na composição de GLP a partir de variáveis secundárias da planta.

Na prática, a composição do GLP pode ser obtida através de instrumentos, tais como o cromatógrafo. Entretanto, mesmo os mais modernos cromatógrafos apresentam um tempo de medição que acaba por inviabilizar o controle da composição do GLP de forma mais eficiente. Além disso, os cromatógrafos são equipamentos de alto custo.

Uma alternativa é a criação de modelos que representem a dinâmica das colunas debutanizadoras, como por exemplo o modelo utilizado na coluna simulada neste trabalho. Contudo, o desenvolvimento de modelos para sistemas complexos como o de produção de GLP exige um grande esforço, levando bastante tempo para se atingir uma sintonia que faça com que o modelo represente de forma satisfatória o sistema real.

Desta forma, este trabalho pretende investigar a eficiência das redes neurais artificiais no processo de medição da composição do GLP, tendo em vista a sua simplicidade de implementação e a possibilidade de se obter uma medição mais rápida e simples.

Na próxima seção é apresentada uma breve explanação sobre a coluna debutanizadora utilizada neste trabalho. Em seguida, na seção 3, conceitos básicos sobre redes neurais artificiais de múltiplas camadas e a estrutura de identificação NNARX são descritos. A seção 4 apresenta os procedimentos utilizados na identificação neural. Os principais resultados obtidos são mostrados e comentados na seção 5. A conclusão deste trabalho é encontrada na seção 6.

## 2 Coluna Debutanizadora

Em plantas de processamento de gás natural, a coluna debutanizadora é a responsável pela produção do GLP. Ela recebe como carga o LGN (Líquido de Gás Natural), composto, normalmente, por C3+. A debutanizadora se destina a separar, por destilação, o GLP da gasolina natural, sendo esta última composta principalmente por C5+. Como resultado da destilação, o GLP e a gasolina natural correspondem, respectivamente, aos produtos de topo e de fundo da coluna debutanizadora.

A coluna debutanizadora é aquecida fazendo com que os componentes leves evaporem, formando o produto de topo da coluna. Porém, em decorrência deste aquecimento, uma pequena parte dos componentes pesados presentes na coluna, principalmente o pentano, pode também transformar-se em vapor. Para que o GLP não saia de suas especificações de qualidade, a fração molar de pentano no GLP deve ser mantida den-

tro de uma pequena faixa da composição total do GLP. Por outro lado, se a coluna for resfriada em demasia, os produtos leves podem não ser totalmente evaporados, sendo depositados e retirados junto ao produto de fundo. Desta forma, além de tirar o GLP de suas especificações, isto representaria uma perda econômica, uma vez que o valor de mercado da gasolina natural é menor que o valor do GLP.

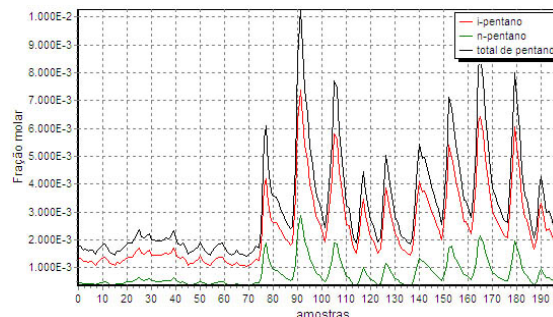


Figura 1: Frações molares de i-pentano, n-pentano e pentano total no GLP.

O pentano presente na composição do GLP é formado pela soma das frações molares do i-pentano e n-pentano. Neste trabalho, optou-se por estimar apenas a fração molar do i-pentano, pois estes compostos químicos apresentam a mesma tendência de variação em função das condições de operação. Além disso, o i-pentano está presente no GLP em maior porcentagem. A Fig. 1, obtida a partir de uma simulação na coluna debutanizadora, demonstra as relações entre os compostos citados.

A coluna implementada, Fig. 2, é alimentada pelo resultado da mistura do LGN (Líquido de Gás Natural), produto de fundo de uma coluna deetanizadora ideal, com uma vazão controlada de etano. Na debutanizadora, uma parte do produto de fundo sai para a produção de gasolina natural e outra parte passa pelo processo de aquecimento no trocador de calor E-100, retornando, em seguida, para a coluna. A vazão do óleo térmico utilizado pelo trocador no processo de aquecimento é controlada pelo TIC-102.

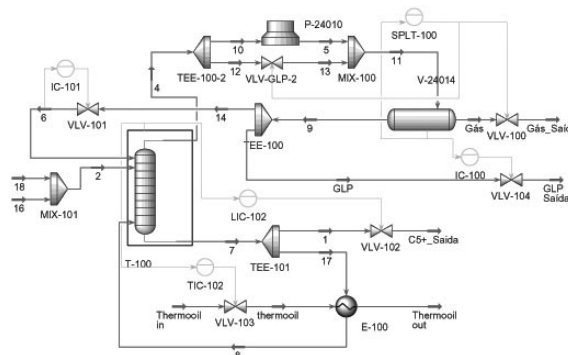


Figura 2: Coluna debutanizadora simulada.

Com relação ao produto de topo da coluna, ele é enviado, a princípio, para um vaso de condensado, podendo antes passar ou não por um condensador a ar P-24010 (*air-cooler*). A vazão que passa pelo *air-cooler*, ou que vai direto para o vaso de condensado, depende da atuação do controlador de pressão *split ranger* (SPLT-100) sobre a válvula de *bypass* VLV-GLP-2. Deste vaso, uma parte do GLP pode ser enviada para a linha GLP\_Saída com o intuito de ser comercializado; e outra parte volta para a coluna debutanizadora através de uma linha de refluxo (linha 14). O processo de refluxo é controlado pelo FIC-101, aumentando ou diminuindo a vazão de GLP proveniente do vaso condensado. Dependendo da pressão no interior do vaso condensado e da temperatura da coluna, uma parte do GLP pode ser enviado para queima pela linha Gás\_Saída, processo conhecido como *flare*.

### 3 Redes Neurais Artificiais - RNAs

Existem várias arquiteturas de redes neurais, tais como, as redes de funções de base radial, redes recorrentes, redes de Kohonen, etc. Porém, somente será abordada aqui a arquitetura das redes de múltiplas camadas. Este tipo de arquitetura consiste em uma RNA organizada em camadas, onde só há conexão entre neurônios de camadas vizinhas. Uma rede neural de múltiplas camadas é dita totalmente conectada quando todos os nós de todas as camadas estão conectados com todos os nós das camadas vizinhas. São nessas conexões, ou pesos sinápticos, que reside a capacidade de armazenamento de informações de uma RNA.

Uma rede neural possui pelo menos uma camada de entrada e uma de saída. Entretanto, para que a rede possa aprender problemas com um mínimo de complexidade deve existir ao menos uma camada intermediária, denominada camada oculta. Cybenko (1989), demonstrou que qualquer função contínua pode ser aproximada por uma RNA com apenas uma camada oculta formada por neurônios com funções de ativação sigmoidais e camada de saída formada por neurônios lineares.

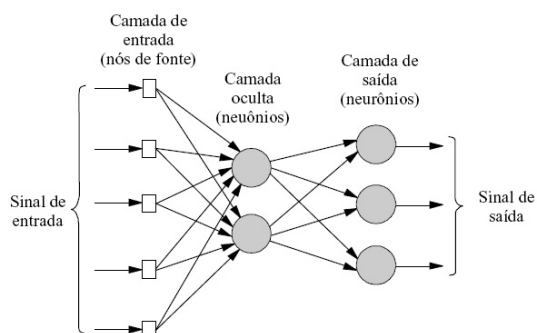


Figura 3: Rede neural de múltiplas camadas totalmente conectada.

Para efetuar o treinamento de uma rede de múltiplas camadas, uma das alternativas é utilizar o algoritmo da retropropagação do erro (*back-propagation*). Esta é a mais usual técnica de aprendizado supervisionado. Neste tipo de aprendizado a rede adquire informações a partir de um conjunto de pares de entrada-saída fornecidos à rede através da figura de um supervisor (Braga et al., 2000).

#### 3.1 Modelo de Identificação Neural

Um dos procedimentos realizados para identificar a dinâmica presente em sistemas reais é a escolha de um modelo ou estrutura de identificação a ser utilizado. De uma forma geral, o problema da seleção de um modelo de identificação pode ser dividido em duas partes: selecionar uma família de estruturas de modelagem apropriada para descrever a dinâmica do sistema, como por exemplo, estruturas lineares, redes neurais de múltiplas camadas, redes de funções de base radial e *wavelets*; e em seguida selecionar um subconjunto desta família de estruturas de modelagem (Nørgaard et al., 2001). Na família das redes neurais de múltiplas camadas, podem-se ser adotadas estruturas, tais como, NNFIR, NNARX, NNARMAX, NNOE, NNSSIF e algumas variações e hibridizações destas estruturas.

O modelo de identificação utilizado para estimar a fração molar do i-pentano no GLP foi o modelo NNARX (*Neural Network AutoRegressive with eXogenous inputs*). Devido à ausência de realimentação nesse modelo, o NNARX não possui problemas relativos à estabilidade, sendo a estrutura preferida quando o sistema a ser modelado é determinístico ou o nível de ruído é insignificante (Nørgaard et al., 2001).

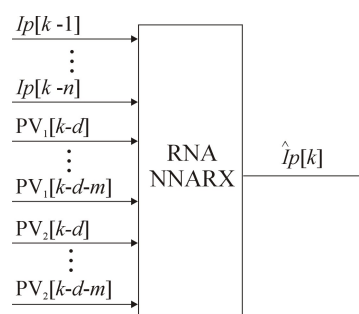


Figura 4: Estrutura do identificador neural.

A Fig. 4 apresenta a estrutura de identificação utilizada neste trabalho. Pode-se notar a aplicação de regressores neste modelo, fazendo com que a saída presente da rede neural esteja relacionada com valores passados da vazão de refluxo do GLP,  $PV_1$ , a temperatura do prato sensível,  $PV_2$ , e da variável a ser estimada  $I_p$ , a fração molar do i-pentano presente no GLP. Onde,  $n$  e  $m$  representam os regressores aplicados às variáveis

de entrada do sistema de identificação neural e  $d$  o atraso de transporte.

A utilização de regressores é de fundamental importância, uma vez que a estrutura é projetada com o intuito de identificar a dinâmica existente em um sistema físico. As variáveis de entrada da estrutura de identificação  $PV_1$  e  $PV_2$  correspondem às variáveis de processo dos controladores FIC-101 e TIC-102. Alterações de valores destas variáveis influenciam dinamicamente em todo o comportamento do sistema de produção, desta forma, terminam por afetar o percentual de i-pentano na composição do GLP. A aplicação de regressores às entradas de uma rede neural de múltiplas camadas é que confere à estrutura NARX a capacidade de aprendizado da dinâmica de sistemas físicos.

Neste trabalho, para estimar o valor do i-pentano presente na composição de GLP, a identificação da dinâmica do i-pentano é realizada tomando-se como base variáveis secundárias do sistema. A escolha da vazão de refluxo do GLP e da temperatura do prato sensível foi efetuada a partir do conhecimento do sistema como um todo. Através do nível de experiência adquirido da planta, observou-se que estas variáveis possuem grande influência na fração molar do i-pentano presente no produto final do sistema.

#### 4 Procedimentos de Identificação

Um sistema básico de identificação, independentemente da estrutura de modelagem utilizada, é formado por quatro etapas: coleta de dados experimentais, seleção da estrutura de modelagem, estimativa do modelo dinâmico e validação do modelo.

A primeira etapa do processo tem como objetivo coletar do sistema a ser identificado conjuntos de dados que descrevam o seu comportamento dentro de sua amplitude de operação. A idéia consiste em variar os sinais de entrada do sistema e verificar a influência desta variação nos sinais de saída do mesmo.

Para a obtenção das amostras experimentais a serem utilizadas nas etapas de treinamento e validação do treinamento da rede neural, responsável pela identificação do *i-pentano*, foram aplicados sinais PRBS (*Pseudo Random Binary Signal*) aos *set points* dos controladores FIC-101 e TIC-102 com o objetivo de variar as suas PVs, que são, respectivamente, a vazão de refluxo do GLP e a temperatura do prato sensível da coluna. Os valores destas variáveis secundárias e a influência de suas variações no i-pentano são utilizados para o treinamento da rede neural de identificação. A Fig. 5 apresenta um exemplo de variação das variáveis secundárias citadas decorrente dos sinais PRBS aplicados aos *set points* dos controladores FIC-101 e TIC-102.

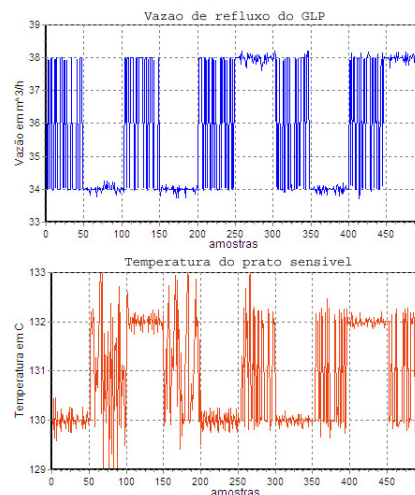


Figura 5: Variação das PVs dos controladores FIC-101 e TIC-102.

Os sinais foram aplicados aos *set points* dos controladores FIC-101 e TIC-102, respeitando os limites de segurança da planta. Nesta etapa, foram coletados grupos de dados de 100, 200 e 500 amostras com período de amostragem de 3 minutos.

Discutimos anteriormente a questão da escolha de uma estrutura de modelagem. Devido ao comportamento não-linear da coluna debutanizadora, optou-se por utilizar uma rede neural de múltiplas camadas em conjunto com a estrutura NNARX. A rede é formada pela camada de entrada, camada oculta com neurônios utilizando funções de ativação sigmoidais e camada de saída constituída por um único neurônio linear. A saída da rede neural fornece a fração molar estimada do i-pentano.

Na etapa de estimação do modelo dinâmico, a partir dos dados experimentais coletados e da estrutura de modelagem selecionada, é possível mapear o sistema em análise. Na estrutura NNARX, isto consiste em efetuar o treinamento de uma RNA de múltiplas camadas. Neste trabalho, para o treinamento das redes, foi utilizado o *backpropagation*, como proposto por Gabriel Filho (2003). Nesta etapa, o grupo de dados selecionado para cada treinamento foi dividido igualmente e de maneira uniforme em pontos destinados ao treinamento e pontos destinados à validação do treinamento. Os dados de entrada e de saída do sistema foram normalizados para valores entre 0.1 e 0.9 (Vieira et al., 2005) com o intuito de facilitar a realização do treinamento pelo *backpropagation*.

Após o modelo dinâmico do sistema ser estimado é necessário investigar se este atende aos requisitos exigidos pelo sistema. A etapa de validação do modelo está intimamente relacionada com a utilização prática do modelo estimado. Na validação final da identificação efetuada para o i-pentano, foram gerados sinais mais aleatórios

que os sinais PRBS e aplicados aos *set points* dos controladores FIC-101 e TIC-102, variando, portanto, as suas PVs. A fração molar do i-pentano resultante desta variação é então comparada com a fração molar do i-pentano estimada pela RNA. Caso o valor estimado pela RNA ainda não seja aceitável, deve-se retornar para alguma das etapas anteriores com o intuito de aprimorar o modelo de estimação.

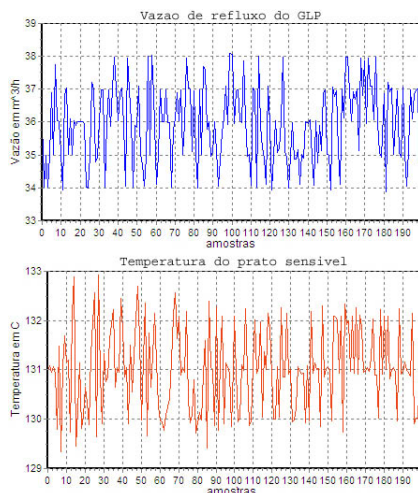


Figura 6: Variação das PVs utilizadas na validação do modelo.

## 5 Resultados

Os resultados foram obtidos utilizando-se uma rede neural de múltiplas camadas formada por três camadas. O objetivo é encontrar uma configuração (número de neurônios e ajuste dos pesos sinápticos) que seja capaz de identificar a dinâmica do i-pentano em uma coluna debutanizadora a partir da variação da vazão de refluxo de GLP e da temperatura do prato sensível. A coluna foi simulada computacionalmente no *software* de processos químicos denominado HYSYS. A estrutura de identificação neural utilizada foi a NNARX. O treinamento e validação das redes neurais estudadas foram realizados através de software desenvolvido no ambiente de programação *Borland C++ Builder 6*.

Foram testadas diversas configurações de rede, variando-se o número de neurônios por camada, o número de regressores e a utilização dos grupos de dados para o treinamento e validação final do modelo encontrado.

Os melhores resultados foram obtidos a partir do grupo de dados de 500 amostras e com a aplicação de dois ou três regressores ao sistema. O melhor resultado obtido de estimativa da fração molar do i-pentano foi conseguido com uma RNA 9:10:1 (9 nós de fonte, 10 neurônios na camada oculta, 1 neurônio de saída) com a aplicação de

2 regressores. Nas Figs. 7 e 8 são apresentados, respectivamente, o gráfico de treinamento e o de validação do treinamento para esta rede. O erro médio quadrático (EMQ) de treinamento e de validação do treinamento foram de 0.000837 e 6.123E-8. Na Fig. 8, a curva da fração molar do i-pentano desejada, em vermelho, é resultante das variações apresentadas na Fig. 5.

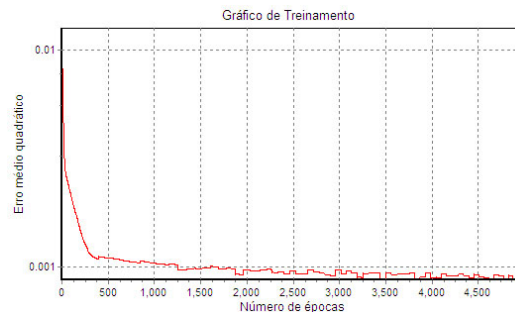


Figura 7: Gráfico do erro de treinamento.

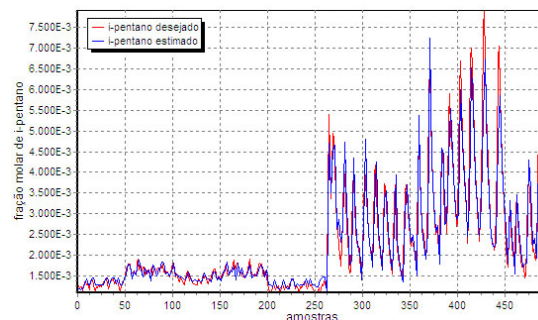


Figura 8: Gráfico de validação do treinamento.

Em seguida, para a validação do estimador obtido, foi apresentado à rede um grupo de dados distinto do utilizado no processo de treinamento da RNA. O erro médio quadrático entre o valor desejado da fração molar do i-pentano e o estimado pela RNA foi de 1.087E-7.

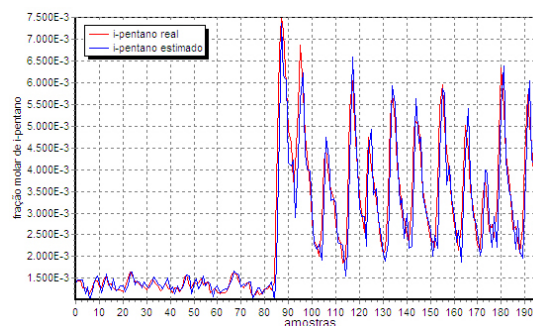


Figura 9: Gráfico de validação do modelo.

Na Fig. 9, a curva da fração molar do i-pentano desejada é resultante das variações apresentadas na Fig. 6. Como podemos notar, a inferência da fração molar do i-pentano realizada

pela RNA foi muito próxima da desejada. Satisfazendo as expectativas deste trabalho.

A Tabela 1 apresenta alguns dos resultados encontrados, onde  $N$  é o número de regressores. Os resultados obtidos com a utilização de 2 e 3 regressores foram bastante próximos. A diferença de grandeza existente entre o EMQ de treinamento e os demais EMQs ilustrados pela tabela é explicável. No primeiro caso, o EMQ foi calculado sobre os valores normalizados da fração molar do i-pentano. Nos demais casos, o EMQ foi obtido a partir dos valores obtidos via simulação, não normalizados.

Tabela 1: Comparação de resultados obtidos.

N	Arquitetura	EMQ Treinamento	EMQ Validação	EMQ Validação Final
3	12:8:1	6.620E-4	6.672E-8	1.168E-7
3	12:12:1	6.170E-4	7.293E-8	1.154E-7
3	12:14:1	6.690E-4	7.734E-8	1.363E-7
2	9:6:1	8.99E-4	6.253E-8	1.165E-7
2	9:10:1	8.37E-4	6.123E-8	1.087E-7
2	9:13:1	9.22E-4	7.001E-8	1.294E-7

## 6 Conclusão

Neste trabalho foi utilizada a técnica de redes neurais artificiais para inferir a fração molar do i-pentano na composição do GLP em uma coluna debutanizadora. Isto foi realizado tomando como base o valores de variáveis secundárias da coluna. Os resultados obtidos demonstram que a aplicação de redes neurais para a identificação do i-pentano, mas também dos demais componentes que formam o GLP, é bastante viável. Desta forma, estimativas de tais componentes podem ser utilizadas em conjunto com estratégias de controle que tenham como objetivo manter a boa qualidade do GLP em produção. Em um próximo passo, visando aplicações reais, análises estatísticas preliminares e questões de condicionamento de dados devem ser levadas em consideração.

## Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES pelo apoio financeiro e, também, aos colegas da Petrobrás UN-RNCE pelas valiosas idéias trocadas durante o desenvolvimento deste trabalho.

## Referências

Bawazeer, K. and Zilouchian, A. (1997). Prediction of products quality parameters of a crude fractionation section of an oil refinery using neural networks, *Proceedings of the american control conference on neural networks* **1**: 157–162.

Braga, A. P., Carvalho, A. P. L. and Ludermir, T. B. (2000). *Redes neurais artificiais: teoria e aplicações*, Editora LTC. Rio de Janeiro, Brasil.

Cybenko, G. (1989). Approximation by superpositions of a sigmoidal function, *Mathematics of Control, Signals, and Systems* **2**(4): 303–314.

Gabriel Filho, O. (2003). Controlador híbrido indireto baseado em redes neurais - parte 1: desenvolvimento e implementação, *VI Simpósio Brasileiro de Automação Inteligente* pp. 183–188.

Haykin, S. (1999). *Neural networks: a comprehensive foundation*, 2 edn, Prentice Hall.

Narendra, K. S. (1996). Neural networks for control: Theory and practice, *Proceedings of The IEEE* **84**: 1385–1406.

Nikravesh, M., Fareli, A. E. and Standford, T. G. (1996). Model identification of nonlinear time variant process via artificial neural network, *Computers and chemical engineering* **20**: 1277–1290.

Nørgaard, M., Ravn, O., Poulsen, N. K. and Hansen, L. K. (2001). *Neural networks for modelling and control of dynamic systems*, Springer-Verlag London Limited. London, England.

Souza Jr, M. B. (1993). *Redes neuronais multicamadas aplicadas a modelagem e controle de processos químicos*, PhD thesis, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.

Vieira, W. G., Sodré, C. H., Barcellos, K. B. and Dantas, L. C. (2005). Process identification with artificial neural network applied to experimental data from a continuous distillation column, *VII Congresso Brasileiro de Redes Neurais, Natal-RN*. Divulgação digital CD -ISSN 1808-8589.

Yang, Y. and Chai, T. (1997). Soft sensing based on artificial neural network, *Proceedings of the american control conference* **20**: 674–678. Albuquerque, EUA.