

# IDENTIFICAÇÃO MULTIVARIADA DO PROCESSO DE CRAQUEAMENTO CATALÍTICO DO PETRÓLEO USANDO REDES NEURAS ARTIFICIAIS

Vivianni M. L. Santos<sup>1</sup>, Maurício B. de Souza Jr<sup>2</sup> e Florival R. Carvalho<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidade Federal de Pernambuco, Departamento de Engenharia Química

R. Prof. Artur de Sá, S/N – Cidade Universitária, 50.740-521 - Recife – PE. Fone / FAX: (081) 271 3992

<sup>2</sup> Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de Química, Departamento de Engenharia Química, Sala E-207, Cidade Universitária, Ilha do Fundão, 21949-900, Rio de Janeiro-RJ. Fone: (021) 590 3192

**RESUMO.** Redes Neurais Artificiais (RNAs) vêm sendo usadas em diversas aplicações bem sucedidas. Isto se deve principalmente a sua capacidade de tratar problemas complexos e não lineares. Este trabalho consiste na identificação do processo de craqueamento catalítico do petróleo em leito fluidizado (CCF) usando RNAs. A unidade CCF possui forte interação entre as variáveis de operação e diversas restrições de operação. Para processos com estas características indica-se a utilização de estratégia de controle preditivo baseado em modelo. Neste trabalho foram utilizados dois modelos para geração dos dados para identificação: O primeiro representa uma unidade do tipo *syde by syde* e o segundo uma unidade do tipo *Kellog Orthoflow F*. Após o treinamento baseado no método série-paralelo, as redes foram submetidas ao desafio de aplicação em paralelo. A avaliação deste desempenho consistiu em um método mais rigoroso de validação. Os resultados da identificação com um número reduzido de degraus na faixa de operação salientaram a possibilidade de aplicação a partir de dados experimentais.

Palavras chaves: Redes Neurais Artificiais, Identificação, craqueamento catalítico.

**ABSTRACT.** Artificial Neural Networks (ANNs) have been used with successful in several applications. The reason for this is due mainly to its capacity to treat complex and nonlinear problems. This work consists in the identification of fluidized catalytic cracking (FCC) process using ANN – based techniques. The FCC unit presents great interaction among the operation variables and many operational constraints. For processes with these characteristics, model predictive control is indicated. Two models were used in this work to generate data for the identification: The first model represents a syde by syde type unit and the second the Kellog Orthoflow F type. The training was based on series-parallel method, then the neural networks were applied for use in parallel method. This evaluation is a more rigorous method of validation. The results of the identification with a decreased number of degrees within the interval of operation emphasize the possibility of application from measured data of the unit.

Key-words: Artificial Neural Networks, Identification, catalytic cracking.

## 1 INTRODUÇÃO

O processo de craqueamento catalítico do petróleo em leito fluidizado tem grande importância no cenário econômico mundial. Atualmente, no Brasil, há grande necessidade de desenvolvimento tecnológico na área petroquímica, devido à quebra do monopólio e consequente aumento da competitividade.

As diversas técnicas de controle existentes foram desenvolvidas para processo lineares ou processos não-lineares com características lineares. Entretanto a maior parte dos processos na engenharia química são inerentemente não-lineares e em particular o processo estudado neste trabalho, caracteriza-se principalmente pela natureza não linear e multivariável, com forte interação entre as variáveis manipuladas e controladas. Nessa

situação os esquemas convencionais baseados em controladores PIDs (Proporcional Integral Derivativo) independentes, podem não ser eficientes. Para processos com estas características indica-se a utilização de técnicas avançadas de controle, tal como o MPC (*Model Predictive Control*). Uma classe de controladores preditivos não lineares pode ser obtida pela utilização de RNAs (Santos *et al.*, 2000).

Neste trabalho, RNAs foram utilizadas para identificação do processo de craqueamento catalítico do petróleo utilizando dois modelos fenomenológicos. O primeiro, nomeado Modelo 1, mais simples, desenvolvido por Lee & Kugelman (1973), permitindo um estudo detalhado, com cálculo do ponto de operação ótimo, dentro dos padrões de estabilidade, utilizando-se o programa AUTO/97 (Doedel E. J. *et al.*, 1998) para obtenção dos diagramas de bifurcação e portanto as regiões de operação estáveis. O segundo,

nomeado Modelo 2, mais realístico, formado por 29 equações diferenciais ordinárias (EDOs), desenvolvido por Kurihara (1967), e validado por Moro (1992) com dados reais de operação. Os resultados mostraram que as RNAs capturaram o comportamento não linear do processo com relativamente poucos neurônios ou elementos de processamento.

## 2 IDENTIFICAÇÃO USANDO REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs)

Uma Rede Neural Artificial (RNA) é formada por uma densa rede de neurônios ou elementos de processamento interconectados, que operam paralelamente, processando informações a partir de entradas, para obtenção de uma resposta dinâmica. A função de ativação sigmoideal tem sido aplicada com sucesso (Rumelhart & McClelland, 1986), sendo adotada neste trabalho. Esta função restringe a saída da rede entre 0 e 1,0, entretanto os dados de treinamento foram normalizados entre 0,1 e 0,9, para que fosse evitada a ocorrência de pesos muito grandes e permitisse eventuais extrapolações.

Neste trabalho utilizou-se o método *backpropagation* de treinamento, minimizando a função objetivo através da técnica de gradiente conjugado (Leonard & Kramer, 1990).

Narendra & Parthasarathy (1990), sugeriram quatro classes de modelos para processos não lineares. O mais geral e portanto de maior dificuldade de implementação, é mostrado a seguir (equação 1), sendo utilizado neste trabalho.

$$y(k+1) = f[y(k), y(k-1), \dots, y(k-n+1); u(k), u(k-1), \dots, u(k-m+1)] \quad (1)$$

onde  $f$  e  $g$  são funções não lineares quaisquer,  $m$  e  $n$ , estão relacionados a ordem do sistema, e devem ser adotados com base na análise dos dados do processo, conhecimento prévio sobre o mesmo e experimentação.  $u(k)$  e  $y(k)$  representam respectivamente, a entrada e a saída de um processo SISO no tempo de amostragem  $k$ .

Analisando o comportamento das variáveis do processo, adotou-se  $n=m=1$ , visando diminuir a complexidade da rede e levando em consideração que a definição da estrutura da rede ainda é basicamente uma decisão experimental. Os resultados satisfatórios obtidos justificaram o não aumento destes parâmetros.

Narendra & Parthasarathy (1990) também propuseram que para a identificação de um processo, dois métodos são possíveis: método série-paralelo (msp) e o método paralelo (mp). No

método série-paralelo, a saída do processo é alimentada na RNA. Ao passo que no método paralelo, as saídas atrasadas da própria rede são alimentadas à mesma. No método *backpropagation* de treinamento os sinais para trás (redes recorrentes) não estão presentes. De modo que permite apenas o treinamento no esquema série-paralelo.

As RNAs foram treinadas adotando o esquema série-paralelo para predições de um passo adiante, e desafiadas como redes paralelas para predição dos estados estacionários para o Modelo 1.

Os critérios adotados para finalização do treinamento foram:

- 1) Norma do gradiente da função objetivo menor que  $10^{-8}$ ;
- 2) Impossibilidade do método do gradiente conjugado reduzir a função objetivo.

## 3 CRAQUEAMENTO CATALÍTICO DO PETRÓLEO E MODELAGEM

O processo de craqueamento do petróleo é constituído fundamentalmente de uma reação de quebra de moléculas de alto peso molecular e de baixo valor comercial, em moléculas de menor peso molecular e com alto valor comercial.

A modelagem das unidades de craqueamento catalítico depende da configuração geométrica do sistema reator/regenerador. O Modelo 1 é do tipo *syde by syde* (Fig. 1) e o Modelo 2 tem uma configuração do tipo *Kellog Orthoflow F* (Fig. 2).

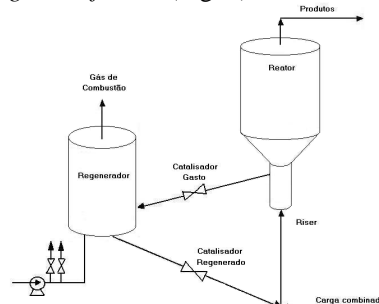


Figura 1: Modelo *syde by syde*.

O Modelo 1 é formado por quatro EDOs (Lee & Kugelman, 1973). Os Estados estacionários (EEs) foram inicialmente obtidos usando o método de *Newton-Raphson*, implementado no MapleV-Release5.

Dada sua facilidade de medida e ao fato de que no *riser* ocorre a maior parte das reações de craqueamento, estando portanto diretamente relacionada à determinação do rendimento dos produtos, a temperatura do *riser* recebeu atenção especial, levando ao desenvolvimento da identificação MISO (*Multiple Input - Single Output*) para o Modelo 1. A extensão para Modelo 2 envolveu também o desenvolvimento da identificação multivariada MIMO

(Multiple Input - Multiple Output), apresentada neste trabalho.

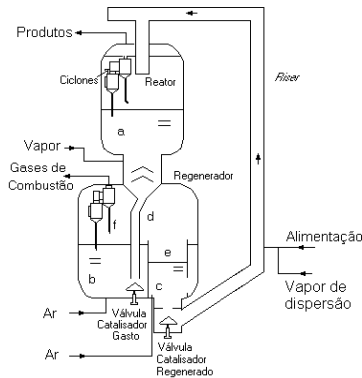


Figura 2: Modelo Kellogg Orthoflow F. a: reator (catal. gasto); b: fase densa do 1º estágio do regenerador; c: fase densa do 2º estágio do regenerador; d: fase diluída geral; e: fase diluída do 2º estágio; f: fase diluída do 1º estágio.

## 4 RESULTADOS PARA MODELO 1

### 4.1 Estudo do comportamento estacionário

Para o ponto cuja vazão de ar para o regenerador é igual a  $7,4117 \times 10^5$  (Tabela 1), as raízes do polinômio do denominador apresentaram parte real negativa, uma característica de um ponto estável. Este ponto foi escolhido para estudos posteriores mais detalhados.

Tabela 1 Variáveis de estado e vazões de entrada para Modelo 1.

Trg= 1354,3°F (1007,7K)	Crg= $2,99 \times 10^{-4}$ lb/lb
Trx= 1126,6°F (881,2K)	Fa= $7,4117 \times 10^5$ lb/h
Csc= $6,87 \times 10^{-3}$ lb/lb	Fc= $8,5846 \times 10^6$ lb/h

Estudar o comportamento de um sistema não linear através de sua linearização em torno dos pontos de equilíbrio é provavelmente a técnica mais geral e importante no estudo de tais sistemas, entretanto deve-se enfatizar o caráter local de estabilidade obtida por meio de uma linearização, gerando soluções aproximadas, válidas para pequenas distâncias a partir do ponto de equilíbrio. Disto veio a necessidade de obter um diagrama de fases completo do modelo dinâmico, constituído por vários pontos de equilíbrio. O aparecimento do caos em sistemas dinâmicos está sempre ligado à ocorrência de bifurcações (Crawford, 1991) de algum tipo. Por isso partiu-se para a obtenção das bifurcações dinâmicas do modelo usando o estado estacionário calculado inicialmente como entrada para o AUTO/97, software que permite este cálculo. O programa gerou ramos de soluções estáveis e instáveis, e também um ponto de

bifurcação de Hopf, que consiste na bifurcação de um equilíbrio para uma oscilação periódica (Fiedler-Ferrara & Prado, 1995). Dessa forma, obteve-se que os estados estacionários (EEs) estáveis previstos para as concentrações de coque no catalisador dentro da faixa de operação, estão restritos a faixa de vazão de ar  $6,647 \times 10^5$ - $8,590 \times 10^5$  lb/h (Figs. 3 e 4).

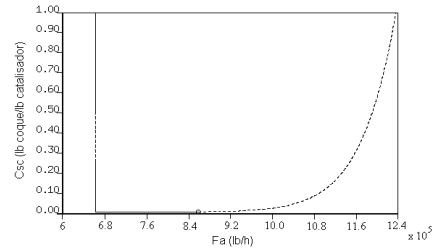


Figura 3: Bifurcação dinâmica para a concentração de coque no catalisador gasto.

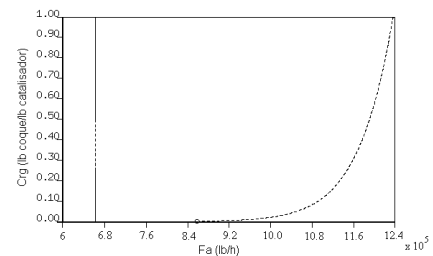


Figura 4: Bifurcação dinâmica para a concentração de coque no catalisador regenerado.

O padrão do AUTO/97 indica que quando a linha é cheia, os estados estacionários são estáveis, e quando tracejadas, os EEs são instáveis. Para um vazão de ar igual a  $8,590 \times 10^5$  lb/h existe um pequeno ramo de soluções oscilatórias estáveis (círculos cheios), que podem ser melhor visualizadas nas Figs. 5 e 6.

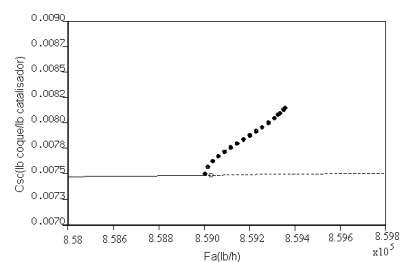


Figura 5: Bifurcação dinâmica para concentração de coque no catalisador gasto. ( $Fa=8,580 \times 10^5$ - $8,598 \times 10^5$  lb/h).

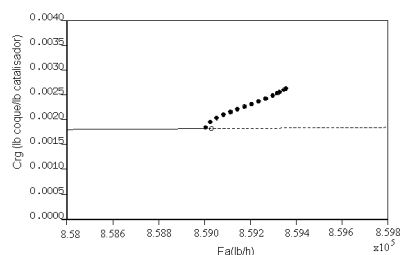


Figura 6: Bifurcação dinâmica para concentração de coque no catalisador regenerado. ( $Fa=8,580 \times 10^5$ - $8,598 \times 10^5$  lb/h).

O ponto estacionário escolhido (Tabela 1) está dentro desta faixa, e satisfaz as restrições do processo.

Os resultados obtidos são muito importantes para a determinação do ponto de operação, excluindo-se os pontos próximos dos limites ou fora deles. Como uma unidade funciona num dado ponto de operação, permitindo apenas pequenas perturbações indesejáveis, daí a necessidade de controle, as RNAs foram treinadas apenas próximo do ponto escolhido, ou seja, apenas para permitir a simulação na faixa de interesse para controle.

#### 4.2 Identificação usando RNAs

O programa elaborado para simulação gerou 1600 dados, dos quais 800 foram utilizados para treinar as RNAs e 800, para testá-las na faixa - 20%--+15%, a partir do estado estacionário inicial.

O treinamento foi realizado com 2 neurônios na camada de entrada, com dados da vazão de ar para o regenerador e da temperatura do *riser* (*Multiple Input*), e um neurônio na camada de saída (*Single Output*), com a temperatura do *riser* no tempo de amostragem seguinte. O número de neurônios na camada escondida (Nh) foi determinado variando-se o número de neurônios de 1 a 6. Com 1 neurônio na camada escondida, não foi possível convergência (Tabela 2).

Tabela 2: Resultados do treinamento.

RNA	Função Objetivo	Norma do Gradiente	Nº Iter*	Nº Pesos e Biases
(2:2:1)	$1,296 \times 10^{-2}$	$7,762 \times 10^{-9}$	491	9
(2:3:1)	$1,003 \times 10^{-2}$	$9,109 \times 10^{-9}$	994	13
(2:4:1)	$7,394 \times 10^{-3}$	$8,203 \times 10^{-9}$	2234	17
(2:5:1)	$7,238 \times 10^{-3}$	$9,357 \times 10^{-9}$	2693	21
(2:6:1)	$7,225 \times 10^{-3}$	$3,923 \times 10^{-9}$	2459	25

\*Iter= número de iterações.

Para determinar qual RNA produz a melhor generalização, utilizou-se inicialmente, o método da validação cruzada. Analisando os dados de treinamento e de teste, nota-se que apesar do uso de degraus dentro da mesma faixa para ambos, atingiu-se um ponto de máximo maior para os dados de teste, e portanto valor de temperatura fora da faixa conhecida pela rede. A predição deste ponto foi possível devido à normalização adotada. O valores máximos do treinamento e teste foram 1359,9°F e 1384,2 °F, respectivamente. Os resultados dos testes foram muito bons para todas as redes treinadas. Sendo que a rede com Nh=5 permitiu melhor extrapolação para o ponto de máximo. Para promover a escolha da melhor RNA, adotou-se também um método menos conservativo e desafiador, que é a predição da saída constante

pela RNA, a partir dos EEs iniciais e daqueles atingidos a cada incremento de vazão.

As RNAs com 4, 5 e 6 neurônios na camada escondida conduziram a resultados melhores que aquelas com 2 e 3 neurônios. Entretanto para a RNA com 6 neurônios na camada escondida, os estados estacionários se distanciam daqueles previstos pelo modelo, ou seja, a rede começa a perder sua capacidade de generalização. Isto pode ser verificado na Fig. 7, que ilustra os estados estacionários (EEs) previstos pelo modelo e pelas RNAs, aumentando e diminuindo a vazão de ar para o regenerador (Fa) a partir do EE inicial, e também nas Figs. 8 e 9 que mostram os EEs a partir daqueles atingidos a cada incremento da vazão.

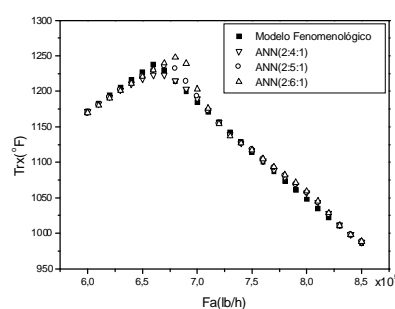


Figura 7: EEs Previstos pelo Modelo e pelas RNAs (2:4:1), (2:5:1) e (2:6:1), a partir dos EEs iniciais.

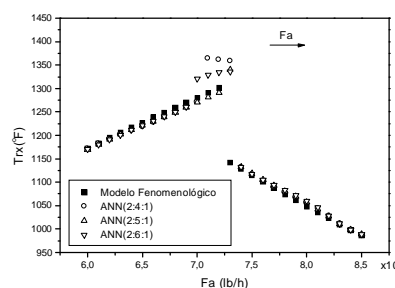


Figura 8: EEs Previstos pelo Modelo e RNAs (2:4:1), (2:5:1) e (2:6:1), a partir dos EEs atingidos a cada aumento de vazão.

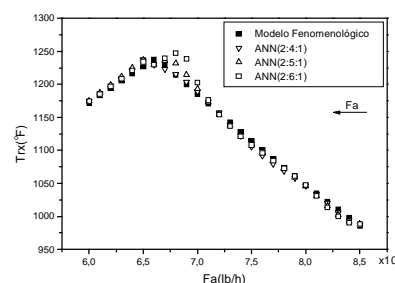


Figura 9: EEs Previstos pelo Modelo e RNAs (2:4:1), (2:5:1) e (2:6:1), a partir dos EEs atingidos a cada diminuição de vazão.

A análise das figuras e os resultados mostrados na Tabela 2 indicam melhores resultados com Nh=5. A estrutura da RNA *feedforward* final para predição da temperatura do *riser* é dada por RNA (2:5:1).

## 5 RESULTADOS PARA MODELO 2

Moro & Odloak (1995) propuseram 6 variáveis a serem controladas: temperatura do *riser*; severidade (conversão de reação estimada); temperatura da fase densa do 1º estágio de regenerador; temperatura da fase densa do 2º estágio de regenerador; o diferencial de pressão na válvula de catalisador regenerado e a velocidade de rotação do compressor de gás. Manipulando possivelmente as seguintes variáveis: vazão da carga para a unidade; vazão de ar para o regenerador; abertura da válvula de catalisador regenerado e a temperatura da carga. Um estudo preliminar usando identificação SISO, indicou que os dados utilizados para treinar as RNAs devem varrer toda a faixa de operação, mas que não são necessários muitos degraus na faixa. Resultados usando os dados das Figs. 10 e 11 mostraram-se iguais ou até melhores para aqueles obtidos a partir dos dados para os quais aplicou-se apenas 8 degraus (Fig. 11). Isto indica a possibilidade de treinamento da RNAs a partir de dados experimentais, que permitem perturbar o mínimo possível o funcionamento da unidade.

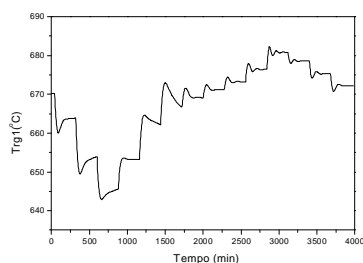


Figura 10: Dados gerados para treinamento, aplicando-se 14 degraus sucessivos (995 padrões – ANN-I).

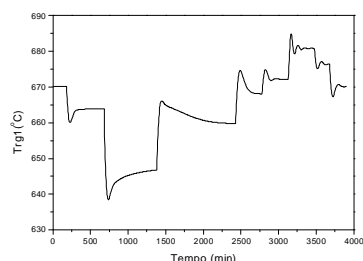


Figura 11: Dados gerados para treinamento, aplicando-se 8 degraus sucessivos. (975 padrões – ANN-II).

Usando-se o menor número de degraus e  $n=m=1$ , foi realizada a identificação MIMO para a predição das 4 principais variáveis de controle (conversão da reação; temperatura da fase densa do primeiro e segundo estágios de regenerador e a temperatura do *riser*), manipulando-se a vazão de ar para o regenerador. Moro (1992) validou o

modelo para um degrau de apenas 1,0%, visto que a unidade não aceitaria degraus maiores, sem que a qualidade dos produtos fosse alterada. Por isso, nessa etapa de identificação foi adotado um degrau igual àquele usado por Moro (1992) -  $\delta=2,4 \text{ kNm}^3/\text{h}$ .

Tabela 3 - Resultados do treinamento.

RNA	Função Objetivo	Norma do Gradiente	Nº Iter*	Nº Pesos e Biases
(5:3:4)	$1,216 \times 10^{-2}$	$9,82 \times 10^{-9}$	4396	34
(5:4:4)	$1,185 \times 10^{-2}$	$7,89 \times 10^{-9}$	2430	44
(5:5:4)	$1,061 \times 10^{-2}$	$7,24 \times 10^{-9}$	2863	54
(5:6:4)	$1,059 \times 10^{-2}$	$7,42 \times 10^{-9}$	6108	64
(5:7:4)	$1,769 \times 10^{-2}$	$9,29 \times 10^{-9}$	4278	74

\*Iter=Iterações.

Os resultados do treinamento variando-se o número de neurônios na camada escondida de 3 até 7 são mostrados na Tabela 3, acima. Com  $N_h=2$  ou 3, não foi possível convergência. Sua análise, como também a validação cruzada indica que  $N_h=5$  é suficiente. Os resultados da validação cruzada para predição das 4 variáveis principais de controle são mostrados nas Figs. 12, 13, 14 e 15.

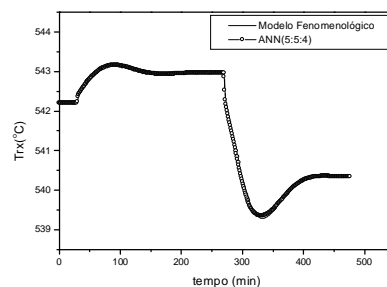


Figura 12: Temperatura do riser

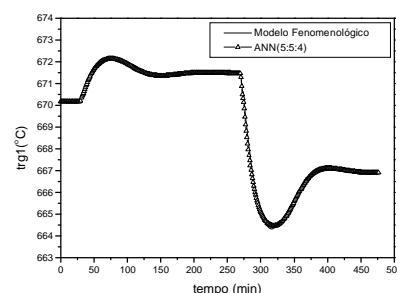


Figura 13 Temperatura fase densa do 1º estágio do regenerador.

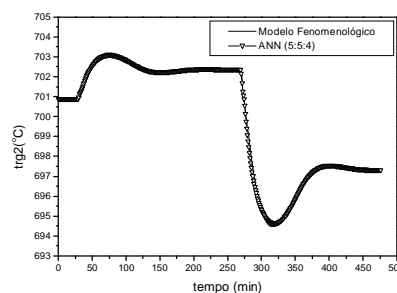


Figura 14: Temperatura fase densa do 2º estágio do regenerador.

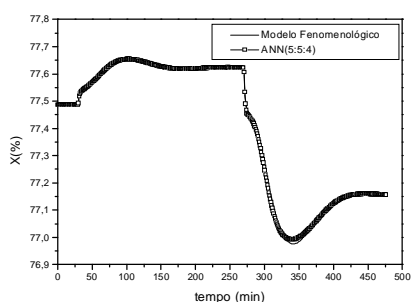


Figura 15: Conversão de reação.

## 6 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Os resultados da identificação indicam que as RNAs do tipo multicamadas foram capazes de prever o comportamento das variáveis principais do processo. Além de capturarem o comportamento não linear do processo, as RNAs também superaram desafios ainda maiores, predizendo os estados estacionários do Modelo 1 razoavelmente bem. A bifurcação dinâmica para as concentrações de coque nos catalisadores determinaram a região de operação possível, do ponto de vista da estabilidade operacional.

Os modelos baseados em RNAs mostraram descrever a natureza não linear do processo com uma configuração relativamente simples. O Modelo 2, formado por 29 equações diferenciais, pode então ser substituído por uma RNA e consequentemente reduzir bruscamente a demanda computacional, eliminando-se os cálculos de integrais por métodos numéricos a cada tempo de amostragem, que são acrescidos à medida que se utiliza modelos mais realísticos. A RNA tratada, uma vez treinada, gera resultados na ordem de milissegundos. Isto permite também o desenvolvimento de controladores baseados em RNAs, que por sua vez poderiam superar os controladores PIDs convencionais.

Devido às dificuldades encontradas para a medida das concentrações de coque nos catalisadores, sugere-se ainda o desenvolvimento da modelagem híbrido-neuronal. Isto poderia evitar a necessidade da condução das amostras para outros estados, onde estão situadas as fábricas de catalisadores, possuidoras dos recursos para obtenção da medida. RNAs podem ser utilizadas para estimar estas variáveis e dessa forma permitir estimativas *on-line* na unidade. Entre os trabalhos relativos ao emprego da técnica de modelagem híbrido-neuronal, pode-se citar o trabalho de Zbicinski *et al.* (1996), o de Martiez & Wilson (1998), e o de Safavi *et al.* (1999).

## 7 REFERÊNCIAS

- Crawford, J. D. (1991). Introduction to bifurcation Theory. *Rev. Mod. Phys.* Vol 63, 991.
- Doedel, E. J., T. F. Fairgrieve, B. Sandstede, A. R. Champneys, Y. A. Kuznetsov e X. Wang (1998). Continuation and Bifurcation Software for Ordinary Differential Equations. *Manual AUTO/97*.
- Fiedler Ferrara, N. & C. P. C. Prado (1995). *Caos - Uma Introdução*. Ed. Edgard Blircher Ltda. SP.
- Santos, V. M. L., F. R. Carvalho e M. B. De Souza Jr (2000). Predictive Control Based on Neural Networks: Na Application to a Fluid Catalytic Cracking Industrial Unit. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*.
- Kurihara, H. (1967). Optimal Control of Fluid Catalytic Cracking Processes. *ScD. Thesis*, MIT.
- Lee, W. & A. M. Kugelman (1973). Number of steady-state operating points and local stability of open-loop fluid catalytic cracker. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 12, 197-204.
- Leonard, J. & M. A. Kramer (1990). Improvement of the Backpropagation Algorithm for Training Neural Networks, *Computers chem. Engng.*, Vol. 14, Nº3, 337-341.
- Martiez, E. C. & J. A. Wilson (1998). Hybrid Neural Network-First Principles Approach to Batch Unit Optimisation. *Computers chem. Engng.*, Vol. 22, Suppl., S893-S896.
- Moro, L. F. L. (1992). Desenvolvimento de um Controlador Preditivo Multivariável para um Conversor Industrial de Craqueamento Catalítico. *Tese de mestrado*, USP, São Paulo.
- Moro, L. F. L. & D. Odloak (1995). Constrained multivariable control of fluid catalytic crackink converters. *J. Proc. Cont.*, Vol. 5, Nº 1, 29-39.
- Narendra, K. S. & K. Parthasarathy (1990). Identification and Control of Dynamical Systems Using Neural Networks, *IEEE Transactions no Neural Networks*, Vol. 1, March, 4-27.
- Rumelhart, D. E. & J. L. McClelland (1986). *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructure of Cognition*. 1, Foundations the Mit Press. Cambridge.
- Safavi, A. A., A. Nooraii e J. A. Romagnoli (1999). A Hybrid Model Formulation for a Distillation Column and the On-line Optimisation Study. *Journal of Process Control* 9, 125-134.
- Zbicinski, I., P. Strumillo e W. Kaminski (1996). Hybrid Neural Model of Thermal Drying in a Fluidized Bed. *Computers chem. Engng.*, Vol. 20, Suppl., S695-S700.

Agradecimentos: PROJETO RECOPE, CAPES.