

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE DUAS COLUNAS DE DESTILAÇÃO EM SÉRIE PARA PURIFICAÇÃO DO BENZENO UTILIZANDO REDES NEURAIAS

Isvi Raquel de Figueirêdo Souza ¹
Bruno Santos Conceição ²
Cesar Vagner Santos Costa ³
Luiz Mário Nelson de Góis ⁴
Regina Ferreira Vianna ⁵

RESUMO

A separação de misturas em componentes puros tem bastante importância entre os processos químicos, sendo a coluna de destilação um dos separadores mais utilizados na indústria química. A obtenção dos compostos de forma separada é necessária para que cada um seja utilizado de forma específica, sendo exigido um alto grau de pureza das correntes recuperadas. A modelagem e simulação de sistemas torna o aprendizado e o aperfeiçoamento técnico-científico mais facilitado, sendo a rede neural artificial (RNA) uma das mais modernas alternativas utilizadas para tal. Assim, este trabalho teve como objetivo desenvolver uma RNA capaz de prever a purificação do Benzeno. Para isso, foram simuladas duas colunas de destilação em série no Aspen Plus™ para coleta de dados a serem utilizados como dados de entrada da RNA desenvolvida a partir da ferramenta NeuralTools™ no Excel®. A rede de três nós desenvolvida teve boa convergência, porém algumas alterações de generalização, sendo necessária uma maior quantidade de dados para treinamento.

Palavras-chave: Simulação, Modelagem, Redes Neurais Artificiais, Purificação, BTX.

INTRODUÇÃO

A separação de misturas em componentes puros tem bastante importância entre os processos químicos. Dentre os processos de separação, a destilação baseia-se em uma adição de temperatura para proporcionar a evaporação parcial da mistura líquida de acordo com a diferença de pontos de ebulição a uma dada pressão, com o intuito de separar determinado

¹ Doutoranda do Curso de Engenharia Química da Universidade Federal da Bahia - UFBA, isvi.raquel@gmail.com;

² Graduando pelo Curso de Engenharia Química da Universidade Federal da Bahia - UFBA, bruno030307@hotmail.com;

³ Graduado no Curso de Engenharia Industrial Mecânica do Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Bahia - IFBA, cvcost@hotmail.com;

⁴ Doutor pelo Curso de Engenharia Química da Universidade Federal da Bahia - UFBA, lmario@ufba.br;

⁵ Professor orientador: PhD, Universidade Federal da Bahia - UFBA, rf.viannag@gmail.com.

componente e agregar valor ao produto final, a depender do grau de purificação (HENLEY; SEADER, 1981; SCHNEIDER *et al.*, 2014).

A coluna de destilação é um equipamento que permite que correntes de vapor e líquido sejam postas em contato, promovendo a transferência de massa entre as fases através dos vários estágios de equilíbrio que constituem os pratos existentes na coluna. Nas colunas convencionais existe uma corrente de entrada, a de alimentação, e duas correntes de saída, a do destilado e a de fundo, enquanto que em colunas complexas pode haver mais de uma corrente de entrada ou mais de duas saídas.

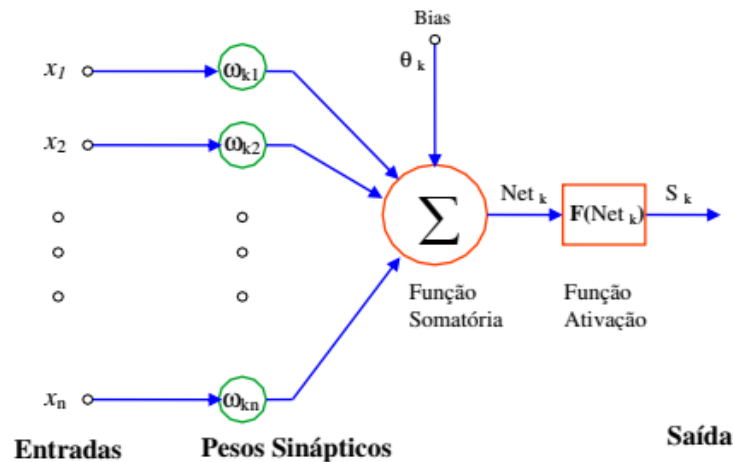
A mistura de hidrocarbonetos aromáticos - benzeno, tolueno e xilenos - oriunda da reforma catalítica da nafta, também chamada de “BTX”, possui alto valor agregado por gerar matérias-primas essenciais às indústrias de plástico, tintas, adesivos, entre outras. Assim, é necessária a obtenção dos compostos de forma separada para que cada um seja utilizado de forma específica, sendo exigido um alto grau de pureza das correntes recuperadas (LISTIKI, FRANCHI, 2014).

A modelagem e simulação de sistemas tornam o aprendizado e o aperfeiçoamento técnico-científico mais facilitado, ao passo que modelos de processos podem ser implementados de forma a otimizá-los, obtendo maior valor. A rede neural artificial (RNA) é uma técnica matemática que pode substituir modelos determinísticos na predição e interpolação de resultados quando é disponível um conjunto de dados de entrada e saída de um processo de transformação (HAYKIN, 2001).

Uma rede neural artificial típica é formada por uma camada de entrada de dados, uma camada oculta onde ocorrem modificações dos dados de entrada, e uma camada de saída que geram os resultados. Assemelha-se a neurônios do sistema nervoso humano, ou seja, os dados são transmitidos e reconhecidos na medida em que se repetem. A principal vantagem das RNAs é que os modelos são relativamente simples e possuem enorme poder de processamento, velocidade e generalidade (NEVES, 2016).

Os neurônios (ou nós) são as unidades principais de processamento de uma RNA, sendo elementos processadores interligados que trabalham em paralelo para desempenhar uma determinada tarefa. Na FIGURA 1, observam-se os principais elementos do neurônio, sendo x as entradas, ω_{kn} os parâmetros ou os pesos da rede (a memória da rede), θ_k o termo polarizador (bias), Net_k a combinação linear dos pesos, F a função de ativação e S_k a saída do neurônio.

Figura 1 – Modelo de um neurônio da rede neural.



Fonte: Sanchez, 2009.

Assim, o modelo de neurônio artificial é representado pela Equação 1 (ROCHA, 2013):

$$S_k = F\left(\sum_{j=1}^p \omega_{kj} \cdot x_j + \theta_k\right) \quad (1)$$

Em termos de arquitetura, podem ser classificadas como Perceptron e Multilayer Perceptron (MLP). A rede Perceptron consiste em uma camada de entrada e uma de saída e destina-se somente a problemas linearmente separáveis, já a MLP possui camadas ocultas capazes de aprender tarefas mais complexas, progressivamente, a partir do processo de aprendizagem, como reconhecimento de imagens, controle e classificação de padrões (SANCHEZ, 2009).

Em 2016, Osuolale e Zhang utilizaram redes neurais artificiais agregadas para modelar e otimizar a eficiência energética de uma coluna de destilação, utilizando o Aspen HYSYS para simular o processo e gerar dados para a rede. Os autores estudaram o processo de separação de múltiplos componentes e conseguiram obter uma melhoria de 32,4% de eficiência energética. Xi, Yang e Yan (2017) desenvolveram uma rede neural para modelar uma coluna de destilação de petróleo e otimizá-la economicamente, a partir de um algoritmo específico, obtendo bons resultados.

Em 2020, Shin, Smith e Hwang desenvolveram um modelo de rede neural artificial para prever o comportamento futuro de uma despropanizadora quando uma perturbação ou

mudanças de ponto de ajuste fossem introduzidas na coluna, a partir de dados simulados pelo Aspen HYSYS, mostrando boa concordância.

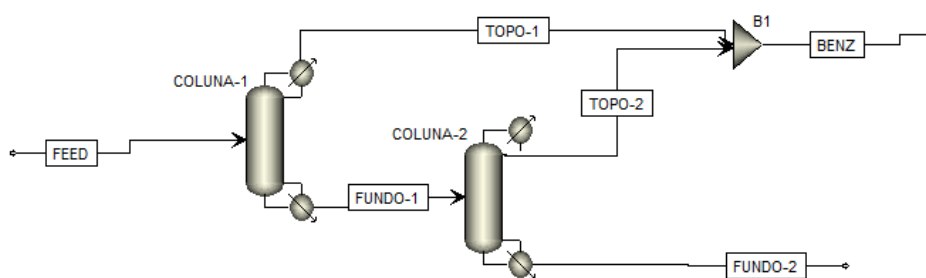
A avaliação de colunas de destilação envolve processos não-lineares, dinâmicos e complexos para modelagem fenomenológica. As redes neurais artificiais, inspiradas no neurônio animal, foram desenvolvidas para realizar atividades complexas, a partir do aprendizado de máquina e reconhecimento de padrões, possibilitando realizar previsões em menos tempo, diminuindo os custos. De acordo com esse cenário, o objetivo principal deste estudo foi avaliar o grau de purificação do benzeno através da rede neural artificial desenvolvida através do *software* Neural Tools™, acoplado ao Microsoft Excel®, utilizando um banco de dados simulado por duas colunas de destilação no simulador comercial Aspen Plus™.

METODOLOGIA

SIMULAÇÃO

A Figura 2 mostra o trem de separação proposto neste trabalho para obter benzeno com um alto nível de pureza. A alimentação saturada de benzeno, tolueno e xilenos entra na primeira coluna à pressão atmosférica, onde ocorre o primeiro “corte” do benzeno que sai pelo topo-1. A segunda coluna tem o objetivo de realizar mais um “corte” de benzeno para garantir sua pureza e maior rendimento no topo-2. O método de resolução escolhido foi o Radfrac, que consiste em um método rigoroso baseado na resolução do sistema de equações MESH, ou de conservação (M-Balanco de Massa, E-Equilíbrio Termodinâmico, S-Somatório de frações, mássicas ou molares, e H-Balanco de energia) aplicadas a cada prato, com o intuito de obter o perfil de temperatura, vazões e composições da coluna. Além disso, ele tem a capacidade de projetar pratos e enchimentos para a coluna.

Figura 2 – Proposta de trem de separação para a purificação do benzeno



Fonte: Própria

Dado que a mistura BTX é uma mistura de hidrocarbonetos apolar, não ideal e a pressão de trabalho das colunas não é menor que 1 atm, o modelo termodinâmico escolhido para cálculo de parâmetros das substâncias presentes foi a equação de estado Redlich-Kwong (RK).

As especificações informadas ao simulador para as colunas de destilação são listadas na Tabela 1.

Tabela 1 - Configuração das colunas coluna-1 e coluna-2

Parâmetros	Coluna-1	Coluna -2
Número de pratos	30	30
Razão de refluxo (base mássica)	2	1
Pressão de operação (atm)	1	1
Tipo de condensador	Parcial - vapor	Total
Tipo de refeedor	Kettle	Kettle
Prato de alimentação	20	20
Pureza de benzeno (base mássica)	99%	99%

Fonte: Própria

A corrente de entrada (corrente feed) entra na coluna 1 a uma temperatura de 80° C, uma pressão de 1 atm e uma vazão de 13000 kg/h. A composição da corrente feed está na Tabela 3. A composição mássica dessa corrente é 50% de benzeno, 38,6% de tolueno, 3,8% de o-xileno, 3,8% de m-xileno e 3,8% de p-xileno.

Ao simular o sistema de colunas, o simulador gerou, entre outros dados, as seguintes características geométricas das colunas (Tabela 2):

Tabela 2- Características geométricas das colunas coluna-1 e coluna-2

Característica	Coluna-1	Coluna -2
Altura da coluna (m)	17,0688	17,0688
Variação de pressão total (bar)	0,110	0,11
Diâmetro da coluna (m)	3	2
Espaçamento de bandeja (m)	0,61	0,61
Tipo de bandeja	Peneira	Peneira
Diâmetro do orifício da bandeja (m)	0,0127	0,0127
% Máxima de inundação por jato	14,1159	14,092

Fonte: Própria

Essas colunas foram usadas para gerar um conjunto de dados, a ser utilizado na construção da rede neural, que relacionasse as características da corrente de entrada com a pureza do benzeno no final do processo de destilação.

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Para desenvolver a rede neural foi utilizado o *Software* NeuralTools™ no programa Microsoft Excel®. Para dar início a sua construção foi criado um banco de dados com 252 linhas e 13 colunas com dados de 8 variáveis entrada (Temperatura de Alimentação (°C), Vazão de Alimentação (kg/h), Fração mássica do Benzeno, Fração mássica do Tolueno, Fração mássica do o-xileno, Fração mássica do m-xileno, Fração mássica do p-xileno e Pureza do Benzeno) e 4 variáveis de saída (Temperatura da Corrente Benzeno (°C), Vazão Mássica do Benzeno (kg/h), Vazão Mássica do Tolueno (kg/h) e Pureza calculada do Benzeno) simulados pelo Aspen Plus™ 9.

Para o treinamento da rede foram montados cenários no simulador comercial, como mostrado na Tabela 3.

Tabela 3 – Range dos dados de entrada utilizados para simulação Aspen Plus™

Variáveis	Range
Temperatura (°C)	5-270
Vazão (kg/h)	100-16000
Fração Mássica de Benzeno	0,4-0,81
Fração Mássica de Tolueno	0,075-0,42
Fração Mássica de o-Xileno	0,004-0,106
Fração Mássica de p-Xileno	0,004-0,106
Fração Mássica de m-Xileno	0,004-0,106
Pureza do Benzeno	0,989 e 0,999

Fonte: Própria

No NeuralTools™, só é possível escolher uma variável dependente, sendo assim, a variável **Pureza calculada do Benzeno** foi a escolhida como variável numérica dependente, enquanto que as outras onze (11) variáveis foram classificadas como variáveis numéricas independentes.

Em seguida, foi realizado o treinamento da rede a partir da opção de testar a melhor rede para o conjunto de dados utilizados. No NeuralTools™, é possível avaliar redes MLFN (Multilayer Feedforward with Back-propagation) de 2 a 6 neurônios e GRN/PN (probabilística).

A rede MLFN usa uma técnica chamada *back-propagation* para ajustar os pesos para cada neurônio ou conexão. Assim, para cada vetor de entrada, um vetor de saída esperado é determinado usando os pesos atuais. A aprendizagem é mais lenta do que no modelo GRN/PN (probabilístico), mas o modelo MLFN pode convergir, frequentemente, quando o GRN/PN não converge ou não produz resultados adequados. O modelo MLFN possui pontos fortes nos problemas de classificação e previsão. Sendo assim, foram treinados e testados esses dois tipos de redes disponíveis, para avaliar qual a que melhor modelava os dados utilizados.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A simulação do processo de separação foi implementada no Aspen PlusTM, a partir das configurações de operação e design das colunas. O treinamento no NeuralToolsTM, realizado após simulação no Aspen PlusTM, mostrou que a melhor rede a ser utilizada foi a MLFN de três (3) neurônios e uma (1) camada oculta (Quadro 1).

Quadro 1 – Treinamento da melhor rede neural pelo NeuralToolsTM

Resumo	
Informações da rede	
Nome	Rede treinada em Purificação do benzeno
Configuração incluída na busca	GRNN, MLFN 2 a 6 nós
Melhor configuração	Previsor numérico de MLFN (3 nós)
Variáveis categóricas independentes	0
Variáveis numéricas independentes	11 (temperatura de entrada, vazão, x_i benzeno, x_i tolueno, x_i o-xileno, x_i m-xileno, x_i p-xileno, temperatura da coluna, vazão de benzeno, vazão de tolueno, Pureza do benzeno)
Variável dependente	Var. numérica (Pureza Calculada do benzeno)

Fonte: Própria

Rocha (2013) também utilizou o NeuralToolsTM em sua pesquisa, e conseguiu como melhor rede, a de quatro (4) nós e uma camada oculta. De acordo com Sanchez (2009), a determinação do número de neurônios da camada de entrada leva em conta a complexidade do problema e a dimensionalidade do espaço de observação, de onde são gerados os sinais de

entrada. O número de neurônios da camada de saída é determinado pela dimensionalidade da resposta desejada. Determinar o número de camadas ocultas, o número de neurônios das camadas e a determinação dos pesos de conexão e as funções de ativação é uma atividade basicamente empírica baseado na experiência do especialista.

Ochoa-Estopier, Jobson e Smith (2013) utilizaram 619 linhas para treinamento, teste e validação de uma MLFN de 50 neurônios com uma camada oculta, para avaliar uma coluna de destilação de óleo bruto. Nesse estudo foi utilizado o MATLAB, que possibilitou a escolha de 6 variáveis dependentes, o que aumenta consideravelmente sua complexidade.

Ao observar os valores de erro do modelo da rede, leva-se em conta o erro médio quadrático. No Quadro 2, percebe-se que esse erro, apesar de ainda pequeno (0,0005886) foi maior no teste do que no treinamento (0,0003108), revelando que apesar de o modelo estar bom, ainda tinha como melhorar.

Quadro 2 – Estatística do treinamento e teste da rede

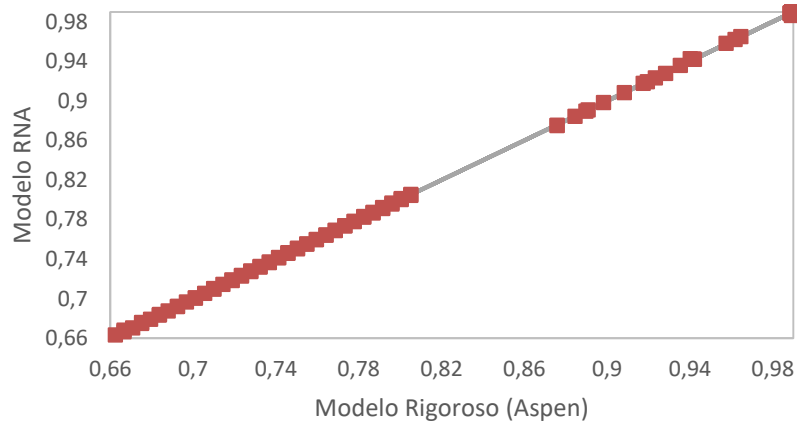
Treinamento	
Número de casos	202
Tempo de treinamento	02:00:00
Número de tentativas	41441637
Motivo da parada	Parada automática
Erro médio quadrático	0,0003108
Teste	
Número de casos	50
Erro médio quadrático	0,0005886

Fonte: Própria

O tempo de treinamento de duas horas foi sugerido pelo próprio programa e mantido. É importante saber o tempo adequado para treinamento, pois a rede pode ficar super treinada, no caso de longo tempo, e começar a modelar também os ruídos do sistema. Em outros casos, quando o tempo é muito curto, a rede não consegue ter boa generalização, ou seja, não consegue prever resultados adequados para dados fora do banco formado para treinamento.

O teste da rede revelou uma boa adequação dos dados de pureza calculados por ela aos calculados pelo simulador (Figura 3).

Figura 3 – Pureza do benzeno calculada pelo simulador e pela RNA

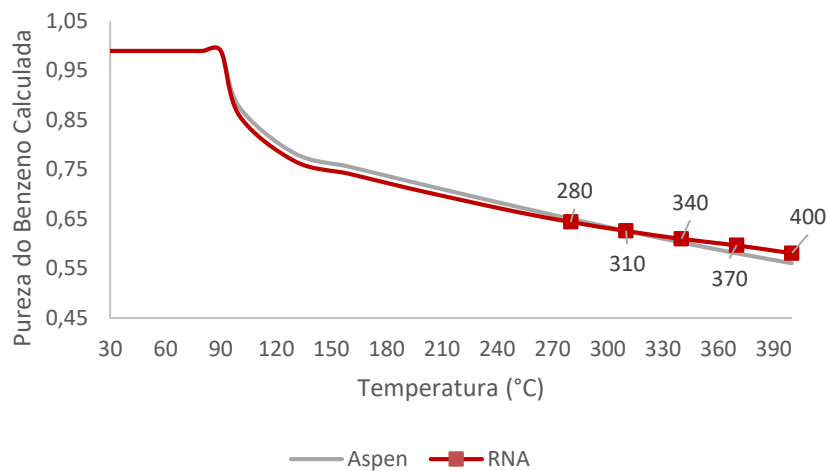


Fonte: Própria

Para avaliar a generalização da rede foram simulados dados que também estavam fora da faixa treinada:

Cenário 1: temperatura de 30 a 400 °C, vazão de alimentação de 100kg/h e composição de 50% de Benzeno, 38,6% de Tolueno e 3,8% de o-Xileno, p-Xileno e m-Xileno (Figura 4).

Figura 4 – Pureza do benzeno calculada pela RNA no Cenário 1



Fonte: Própria

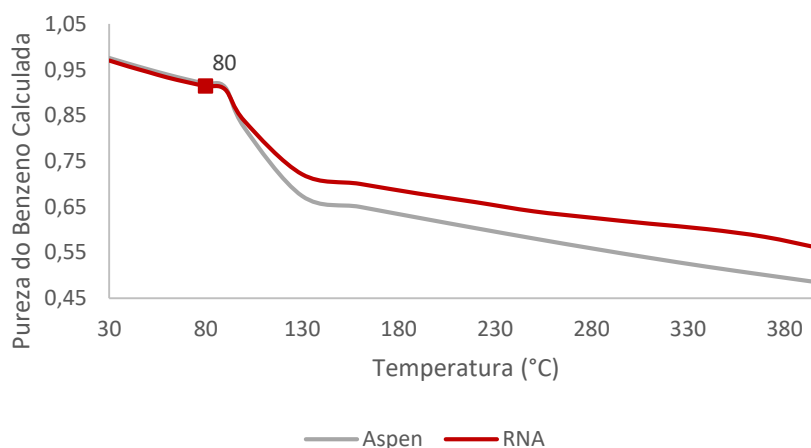
Pode-se observar na Figura 4 que, neste cenário, a rede conseguiu realizar a previsão de forma adequada. Ao passo que a temperatura de alimentação passa de 80 °C, a temperatura da coluna também aumenta, impactando negativamente na pureza do benzeno no destilado, pois o tolueno começa a vaporizar também, juntando-se ao benzeno no destilado. O NeuralTools™

revelou que dentre as variáveis independentes, a que mais impactou na variável dependente foi a temperatura da coluna, por volta de 17,22%.

A composição desse cenário foi treinada várias vezes na faixa de temperatura de 5 a 270°C e com a vazão de alimentação de 13000 kg/h. Ao extrapolar a faixa de temperatura treinada e fixar a vazão de entrada com outro valor (100 kg/h), percebe-se que a rede consegue prever a variável dependente de forma aceitável, porém já com uma mudança de padrão, mostrando boa generalização e extrapolação da rede.

Cenário 2: temperatura de 30 a 400 °C, vazão de alimentação de 100 kg/h e composição de 43% de Benzeno, 42% de Tolueno e 5% de o-Xileno, p-Xileno e m-Xileno (Figura 5).

Figura 5 – Pureza do benzeno calculada pela RNA no Cenário 2



Fonte: Própria

No cenário 2, a composição escolhida foi treinada apenas uma vez, modificando a vazão de alimentação treinada e a temperatura de alimentação. Nesse caso, percebe-se que ao variar a temperatura de alimentação até 80 °C, o modelo neural representou bem os dados simulados. Essa foi a temperatura do único ponto, com esta composição, que foi treinado pela rede.

A partir de 80°C, o modelo não consegue mais prever de forma adequada a pureza do benzeno, mostrando um problema de generalização com dados extrapolados. A partir dessa temperatura de alimentação, a temperatura da coluna também começa a ficar elevada. Como para esses dados de composição, não foram treinados com outras temperaturas de alimentação, a rede não conseguiu criar o padrão de comportamento ideal. De acordo com Rocha (2013), usar dados fora do intervalo de treinamento pode ser uma tarefa arriscada.

Esse fato revela a necessidade de aumentar a quantidade de linhas da rede para se obter uma melhor generalização, pois de acordo com Rocha (2013), esta é diretamente dependente do número de dados de treinamento, ou seja, quanto maior o número de linhas da rede melhor será a generalização.

Para Werle (2012), a generalização depende da arquitetura da rede, quanto à quantidade de neurônios e de variáveis de entrada, e do tempo de treinamento. Redes super-treinadas geralmente têm muitos neurônios e/ou foram treinadas por um longo período de tempo e acabam aprendendo os ruídos do banco de dados, impactando negativamente na generalização.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

O processo de purificação do benzeno foi satisfatoriamente simulado no Aspen Plus™, a partir de duas colunas de destilação. Com os dados simulados foi possível criar uma rede neural artificial que prevê a purificação do benzeno a partir de dados de entrada (temperatura, vazão, composição e pureza estipulada do benzeno) e saída (temperatura da coluna, vazão mássica do benzeno, vazão mássica do tolueno e a pureza calculada do benzeno) do simulador comercial.

Foram utilizadas 252 linhas em uma pequena rede neural de 3 neurônios em uma camada oculta, mostrando boa convergência a partir do erro médio quadrático dos dados treinados (0,0003108) e testados (0,0005886). Para redes que seja necessária somente uma variável dependente, esta aplicação para Excel® mostra-se ser suficiente, apresentando um ambiente mais amigável.

Apesar de boa convergência, o modelo teve problemas com a generalização de dados extrapolados. Ao prever o resultado, utilizando dados que estavam fora da faixa treinada, o modelo não conseguiu manter o erro médio no cenário 2, aumentando ao passo que os valores da variável se distanciavam dos dados de treinamento.

Tal fato está de acordo com a literatura, quanto ao uso cuidadoso de extrapolação de dados, já que dados fora do intervalo treinado podem gerar resultados não confiáveis. Sendo assim, sugere-se aumentar o banco de dados de treinamento, determinar critérios de parada de treinamento e avaliar as variáveis de entrada para melhor representar o fenômeno estudado.

REFERÊNCIAS

HAYKIN, S. **Redes neurais: princípios e prática**. 2. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001, 900 p.

HENLEY, E. J.; SEADER, J. D. **Equilibrium-stage separation operations in chemical engineering**. Estados Unidos: John Wiley & Sons, 1981, 742 p.

LISTIK, E.; FRANCHI, M. G. S. **Design, dimensionamento e análise econômica de um sistema de separação de uma mistura BTX oriunda da reforma catalítica da nafta**. 2014. 104 f. Monografia (Graduação em Engenharia Química) - Universidade de São Paulo, São Paulo, 2014.

NEVES, T.G. **Redes neurais artificiais aplicadas ao controle inteligente de colunas extrativas**. 2016. 76 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2016.

OCHOA-ESTOPIER, L. M.; JOBSON, M.; SMITH, R. Operational optimization of crude oil distillation systems using artificial neural networks. **Computers and Chemical Engineering**, Manchester, v.59, p.178-185, 2013.

OSUOLALE, F. N.; ZHANG, J. Energy efficiency optimisation for distillation column using artificial neural network models. **Energy**, Newcastle, v.106, p.562-578, 2016.

ROCHA, H. T. F. **Utilização de redes neuronais artificiais na gestão de processos de digestão anaeróbica**. 2013. 196 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Instituto Superior de Engenharia do Porto, Porto, 2013.

SANCHEZ, E. C. M. **Controle por aprendizado acelerado e neuro-fuzzy de sistemas servo-hidráulicos de alta frequência**. 2009. 130 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

SCHNEIDER, L.T.; BONASSA, G.; OLIVEIRA, C.; TELEKEN, J.T.; CREMONEZ, P.A.; TELEKEN, J.G. Otimização do processo de destilação em planta piloto para produção de bioetanol hidratado. *In*: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 10., 2014, Florianópolis. **Anais...** Florianópolis: 2018. Disponível em: <https://proceedings.science/cobeq/cobeq-2014/papers/otimizacao-do-processo-de-destilacao-em-planta-piloto-para-a-producao-de-etanol-hidratado>. Acesso em: 13 nov. 2019.

SHI, B.; YANG, X.; YAN, L. Optimization of a crude distillation unit using a combination of waveletneural network and line-up competition algorithm. **Chinese Journal of Chemical Engineering**, Wuhan, v.25, p.1013-1021, 2017.

SHIN, Y.; SMITH, R.; HWANG, S. Development of model predictive control system using na artificial neural network: A case study with a distillation column. **Journal of Cleaner Production**, anchester, v.277, p.1-14, 2020.

WERLE, L. O. **Analísadores virtuais baseados em modelo neural para monitoramento e controle de colunas de destilação com aquecimento distribuído**. 2012. 262 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) - Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2012.