



**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA**

**REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS APLICADAS AO
CONTROLE INTELIGENTE DE COLUNAS EXTRATIVAS**

Thiago Gonçalves Das Neves

Orientadores:

Romildo Pereira Brito

Marcella Feitosa de Figueirêdo

Campina Grande

Abril/2016

THIAGO GONÇALVES DAS NEVES

**REDES NEURAIS ARTIFICIAIS APLICADAS AO
CONTROLE INTELIGENTE DE COLUNAS EXTRATIVAS**

Dissertação apresentada ao curso de Pós-Graduação de Engenharia Química, da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Orientadores:

Romildo Pereira Brito

Marcella Feitosa de Figueirêdo

**Campina Grande
2016**

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCG

N511r Neves, Thiago Gonçalves das.
 Redes neurais artificiais aplicadas ao controle inteligente de colunas
 extrativas / Thiago Gonçalves das Neves. – Campina Grande, 2016.
 76 f. : il. color.

 Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal
 de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia.
 "Orientação: Prof. Dr. Romildo Pereira Brito, Prof.^a Dr.^a Marcella
 Feitosa de Figueirêdo".
 Referências.

 1. Destilação Extrativa. 2. Redes Neurais Artificiais. 3. Controle.
 I. Brito, Romildo Pereira Brito. II. Figueirêdo, Marcella Feitosa de.
 III. Título.

CDU 66.048.62(043)

THIAGO GONÇALVES DAS NEVES

**REDES NEURAIS ARTIFICIAIS APLICADAS AO CONTROLE INTELIGENTE DE
COLUNAS EXTRATIVAS**

COMISSÃO EXAMINADORA

CONCEITO

Prof. Romildo Pereira Brito (Doutor)

APROVADO

(Orientador)

Prof.^a Marcella Feitosa de Figuerêdo (Doutora)

APROVADO

(Orientadora)

Prof. José Nilton Silva (Doutor)

APROVADO

(Examinador Interno)

Prof. Ariston Araújo de Moraes Júnior (Doutor)

APROVADO

(Examinador Externo)

Dedico este trabalho a Deus, aos meus pais Maria Orfélia e Pedro Raimundo, ao meu irmão Wagner e à minha esposa Savana pela força, fé e confiança que a mim foram concedidas durante esta caminhada.

AGRADECIMENTOS

Quero expressar a minha mais sincera gratidão ao orientador Professor Romildo Pereira Brito pelas contribuições na realização deste trabalho. Seus incentivos, desde o início do curso de graduação, me encorajaram a buscar o conhecimento todos os dias.

À minha orientadora Marcella Feitosa, pelo valioso apoio durante o desenvolvimento deste trabalho e por estar sempre disposta a ajudar.

Ao apoio financeiro do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq).

Aos colegas de trabalho do LARCA pelas proveitosas discussões.

Aos funcionários e demais professores da Universidade Federal de Campina Grande, àqueles que, com prazer, mostraram-me o poder do conhecimento.

Aos amigos, que me acompanharam até aqui, especialmente para aqueles cuja amizade se fortaleceu com o tempo.

À minha esposa Savana, pelo amor, incentivo e paciência que teve comigo.

À minha família, por sempre ter torcido por mim. Vocês me ensinaram a lutar pelos meus sonhos.

Agradeço a Deus por minha existência.

RESUMO

Em colunas de destilação, as rígidas especificações de qualidade do produto final exigem que o sistema de controle das colunas de destilação possua alto grau de desempenho. Nos casos em que ocorrem distúrbios na alimentação em colunas extrativas é muito difícil manter a composição do produto em seu valor referência, visto que, após o distúrbio, os *setpoints* dos controladores deixam de corresponder exatamente às especificações dos produtos. O presente trabalho teve como objetivo o desenvolvimento e a implementação de um *Soft Sensor* inteligente para fins de controle em uma coluna extrativa de produção de etanol anidro, usando o etilenoglicol como solvente. Para fazer a previsão dos novos *setpoints* diante perturbações, foi utilizado o conceito de Redes Neurais Artificiais, que se mostrou como uma solução rápida e viável. Os resultados mostraram que para a faixa de distúrbios considerada, o *Soft Sensor* foi capaz de prever a nova condição de regime, por meio da determinação inteligente *dos* novos *setpoints* de controladores presentes na instrumentação original da coluna. O controle apresentou desempenho satisfatório, mantendo o produto no topo e no fundo da coluna dentro das especificações.

Palavras-chave: Destilação extrativa; Redes Neurais Artificiais; Controle.

ABSTRACT

In high purity distillation columns, the strict quality specifications of the final product require that the distillation columns control system have a high degree of performance. In cases where disturbances occur in the extractive columns feed, it is very difficult to maintain the composition of the product in its reference value, since, after the disturbance, the setpoints of the controllers fail to correspond exactly to the products specifications. The aim of this work is the development and implementation of an intelligent Soft Sensor for control purposes in an extractive column for anhydrous ethanol production, using ethylene glycol as solvent. To forecast the new setpoints before disturbance, the concept of Artificial Neural Networks was used, which proved to be a fast and feasible solution. The results showed that for range considered disturbances, the Soft Sensor was able to predict the new system condition, by intelligently determining the new setpoints of the controllers present in the original instrumentation of the column. The control showed satisfactory performance, keeping the products at the top and bottom of the column within specifications.

Keywords: Extractive distillation; Artificial Neural Networks; Control.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Especificações das correntes de entrada do processo.....	27
Tabela 2 – Especificações da coluna extrativa.....	27
Tabela 3 – Comparação de métodos para determinação do prato ótimo de medição de temperatura...	37
Tabela 4 – Resumo dos resultados das RNA.	44

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Variação da temperatura do prato 22 de uma coluna extrativa para manter as composições dos produtos dentro das especificações.....	13
Figura 2 – Intervalos de discretização.....	23
Figura 3 – Modelo de um neurônio artificial. (Fonte: Adaptado de Silva et al., 2010)	24
Figura 4 – Fluxograma simplificado do processo de destilação extrativa para desidratação do etanol.	26
Figura 5 – Procedimento de coleta dos dados e otimização do processo usando o Aspen Plus™.	30
Figura 6 - Preparação e adequação dos dados.....	30
Figura 7 – Diagrama de blocos representativo do aprendizado de uma RNA.	35
Figura 8 – Estratégia de controle baseada em Redes Neurais Artificiais.....	37
Figura 9 – Comunicação entre os Softwares.....	39
Figura 10 - Diagrama ternário em base molar à pressão de 1 atm.....	40
Figura 11 - Perfil de concentrações na coluna de desidratação de etanol a) da fase líquida e b) da fase vapor.	41
Figura 12 - Perfis de temperatura e pressão na coluna de desidratação de etanol.....	42
Figura 13 – Diagrama a) pseudo-binário para o sistema etanol/água/etilenoglicol e b) ampliação da região de formação de azeótropo sem solvente à pressão de 1 atm.....	43
Figura 14 - Desempenho da melhor RNA.....	45
Figura 15 - Acompanhamento do processo de validação.....	46
Figura 16 – Erros absolutos para as variáveis a) razão de refluxo, b) temperatura do prato 22 e c) razão de alimentação entre solvente e azeótropo.	47
Figura 17 – Erros absolutos para as variáveis a) razão de refluxo, b) temperatura do prato 22 e c) razão de alimentação entre solvente e azeótropo, com duas RNA no retreinamento.	48
Figura 18 – Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para um distúrbio de a) -3,5% e b) + 3,5% na composição de alimentação do azeótropo.	49
Figura 19– Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para um distúrbio de a) -10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.	50
Figura 20 – Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para distúrbios de -3,5%, -10% e +75% na composição, vazão e temperatura de alimentação do azeótropo, respectivamente.....	50
Figura 21 – Carga térmica do refeedor para um distúrbio de a)-10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.....	51
Figura 22 – Resposta dinâmica da composição de etanol na base para um distúrbio de a) -3,5% e b) + 3,5% na composição de alimentação do azeótropo..	51
Figura 23– Resposta dinâmica da composição de etanol na base para um distúrbio de a) -10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.	52
Figura 24 – Resposta dinâmica da composição de etanol na base para distúrbios de -3,5%, -10% e +75% na composição, vazão e temperatura de alimentação do azeótropo, respectivamente.....	52
Figura 25 – Comparação do controle com mudança de setpoints utilizando uma RNA e duas RNA para diferentes distúrbios na composição da alimentação do azeótropo.....	53

NOMENCLATURA

Σ	Somatório
AZEOTROP	Mistura azeotrópica etanol/água
b_i	Bias do neurônio i.
COL1	Coluna extrativa de purificação de etanol
d_j	Saída desejada
DRUM1	Tanque de refluxo
e	Erro entre o processo e o setpoint
EG	Etilenoglicol
EG+H2O	etilenoglicol e água
E_j	Erro absoluto para cada amostra j
ETOH	Etanol
EXCH1	Trocador de calor
F	Vazão molar da alimentação do azeótropo
F_{obj}	Função objetivo
FR^{EOH}	Fração molar recuperada de etanol no destilado
ISE	Valor quadrático dos erros instantâneos
K_c	Ganho da parte proporcional
K_i	Ganho integral
MLP	<i>Multi layer perceptron</i>
MSE	Mean Square Error (Erro médio quadrático)
NRTL	Non-Random Two Liquid (modelo para cálculo do coeficiente de atividade)
PI	Controlador tipo Proporcional-integral
PID	Controlador tipo Proporcional-Integral-Derivativo
PUMP1	Bomba
Q_R	Consumo energético do refeedor
RNA	Rede Neural Artificial
RR	Razão de refluxo
S/F	Razão de alimentação entre solvente e azeótropo
SCADA	<i>Supervisory Control And Data Acquisition</i>

SPLIT1	Divisor
SQP	Sequential Quadratic Programming (Programação quadrática sequencial)
T	Temperatura
T_{22}	Temperatura do prato 22
$u(t)$	Saída do controlador em função do tempo
u_i	saída do i -ésimo neurônio
u_s	Saída do controlador em estado estacionário
w_{i0}	Peso conectado ao neurônio i cujo valor é definido como ± 1
w_{ij}	Peso conectado a entrada j do neurônio i .
x	Fração molar na fase líquida
x^{EOH}	Fração molar do etanol
x_j	Entrada j de um determinado neurônio.
y	Fração molar na fase vapor
y_d	Setpoint
y_i	Saída do neurônio i
$\varphi(.)$	Função de ativação
τ_d	Tempo da ação derivativa do controlador
τ_i	Tempo de ação integral do controlador

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	12
2. OBJETIVOS.....	15
2.1. Objetivo Geral.....	15
2.2. Objetivos específicos.....	15
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	16
3.1. Destilação extrativa.....	16
3.2. Controle.....	19
3.3. Redes Neurais Artificiais.....	23
4. SIMULAÇÃO EM REGIME PERMANENTE.....	26
5. DESENVOLVIMENTO DO SOFT SENSOR.....	29
5.1. Coleta de dados.....	29
5.2. Escolha da topologia da rede.....	31
5.3. Treinamento da rede.....	31
6. SIMULAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE.....	36
6.1. Estratégias de controle.....	36
6.2. Comunicação Aspen/Matlab com auxílio do Elipse Scada.....	38
7. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	40
7.1. Regime permanente.....	40
7.2. Escolha da RNA.....	44
7.3. Controle da destilação extrativa.....	49
8. CONCLUSÕES.....	54
9. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	55
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	56
APÊNDICE - ARTIGO SUBMETIDO À REVISTA <i>CONTROL ENGINEERING PRACTICE</i>	60

1. INTRODUÇÃO

Destilação é o mais importante processo de separação, sendo utilizada em 95% das separações de fluidos na indústria química e é responsável por 3% do consumo da energia mundial (HUMPHREY E SIEBERT, 1992; ENGELIEN E SKOGESTAD, 2004).

A técnica da destilação permite o aumento do valor agregado dos produtos, possibilitando o cumprimento das exigências cada vez mais restritas do mercado, quer seja em termos econômicos, quer seja na minimização da geração de poluentes (NORILER, 2003).

Quando a destilação convencional não possibilita a separação de uma mistura azeotrópica, geralmente utiliza-se a destilação azeotrópica homogênea ou heterogênea. A destilação azeotrópica heterogênea requer a adição de um terceiro componente, para formar um novo azeótropo heterogêneo com um dos componentes presentes inicialmente na mistura (DIAS, 2008). Estes azeótropos limitam a separação em uma única coluna de destilação e uma coluna adicional é obrigatória para cruzar este limite destilação (TAVAN, 2013).

Já a destilação extrativa é um processo de separação que requer na presença de um agente de separação não volátil; O solvente é adicionado à mistura azeotrópica para alterar a volatilidade do componente chave sem a formação adicional de azeótropos (BLACK E DISTLER, 1972; PERRY, 2008; FIGUEROA, 2011).

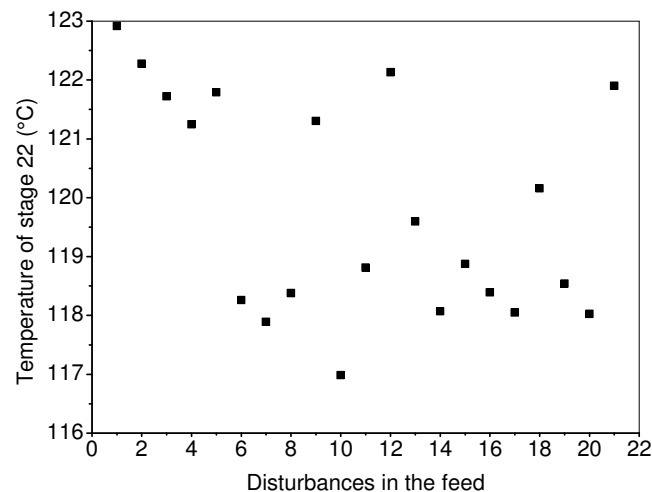
O controle de colunas de destilação é considerado uma tarefa complexa, pois geralmente é não estacionário, interativo, não-linear e sujeito a restrições e distúrbios. Uma das maiores restrições no processo de destilação estão relacionadas à forma de obtenção dos valores das composições dos produtos em tempo real. A variável composição é, geralmente, uma grandeza não diretamente mensurável e, conseqüentemente, de difícil controle.

Mejdell e Skogestad (1991) em seus trabalhos sobre controle de colunas de destilação relatam que uma das maiores dificuldades que enfrentam é a medição da composição dos produtos. Dentre as alternativas existentes de analisadores físicos para medir a composição, uma das mais empregadas é a cromatografia gasosa; porém essa técnica apresenta grandes atrasos na obtenção das medidas e alto custo operacional.

Gil e Rodríguez (2012) mostram um processo de destilação extrativa, no qual uma configuração de controle é desenvolvida utilizando um controle de temperatura, ou seja, a composição é controlada sem sua medição direta. De acordo com os autores, os maiores *offsets* são encontrados para distúrbios na composição do azeótropo. Considerando uma coluna de destilação extrativa com 24 estágios para produção de etanol anidro com elevado grau de pureza, a Figura 1 mostra o valor desejável da temperatura do prato sensível 22

(*Temperature of stage 22*), com objetivo de manter as composições dos produtos dentro das especificações diante distúrbios aleatórios na composição, vazão e temperatura da alimentação (*Disturbances in the feed*). De acordo com a Figura 1, percebe-se que dificuldades serão encontradas para o controle do processo quando a opção é fixar a temperatura do prato sensível.

Figura 1 – Variação da temperatura do prato 22 de uma coluna extrativa para manter as composições dos produtos dentro das especificações.



Diante disto, uma alternativa viável para o controle da composição do produto em colunas extrativas seria a mudança de *setpoints* diante perturbações na alimentação. Esta técnica inexiste na literatura consultada, sendo, portanto, uma quebra de paradigmas, visto que as diversas metodologias disponíveis para selecionar a melhor configuração de controle da composição utilizam *setpoints* fixos dos controladores da planta. Ademais, estudos sobre dinâmica e controle para colunas de destilação extrativa possuem características distintas, tornando o controle mais complexo (ZHONGZHOU et al., 2010; UDUGAMA et al., 2015).

Segundo Kano et. al. (2000), distúrbios na composição ou na vazão de alimentação, em colunas multicomponentes, é muito difícil manter a composição do produto em seu valor referência através do controle de temperatura, visto que após o distúrbio, a temperatura do prato sensível deixa de corresponder exatamente à composição dos produtos.

Uma alternativa viável para o controle da composição do produto seria a mudança de *setpoints* perante perturbações na alimentação. Para fazer a previsão dos novos *setpoints*, o ideal seria a utilização de um modelo fenomenológico preciso. Porém, em uma coluna de destilação, o número de equações diferenciais é muito grande e pode tornar inviável esse

método. Além disso, esse tipo de modelagem pode exigir “*reparametrização*” frequente para eliminar qualquer incompatibilidade do modelo do processo com o tempo.

Uma solução mais rápida e que não gera um modelo interno com variáveis de estado, mas sim um modelo externo com variáveis de entrada e saída, seria a utilização de analisadores virtuais (*Soft Sensor*), que predizem a variável desejada através de modelos matemáticos utilizando variáveis secundárias como parâmetros de entrada. A maioria dos analisadores virtuais introduzidos no mercado por líderes mundiais, como a *Siemens* e a *Honeywell*, são *softwares* baseados em tecnologia de Redes Neurais Artificiais (RNA). Dentre as principais características dessa tecnologia está sua potencialidade de interpolação, antecipação e processamento paralelo (ZANATA, 2005; DIEHL, 2009).

As RNA fornecem uma abordagem alternativa para a modelagem do processo, e têm recebido muita atenção por causa de sua ampla gama de aplicabilidade e sua capacidade para lidar com problemas complexos e não lineares. A principal vantagem na utilização das RNA é que os modelos são computacionalmente simples, e possuem enorme poder de processamento, velocidade e generalidade.

2. OBJETIVOS

2.1. Objetivo Geral

O presente trabalho teve como objetivo desenvolver um controle inteligente baseado em RNA, capaz de manter as especificações do destilado e do produto de base de uma coluna de destilação extrativa de produção de etanol anidro, utilizando etilenoglicol como solvente, por meio da determinação inteligente dos *setpoints* de controladores presentes na instrumentação original da coluna.

2.2. Objetivos específicos

Os objetivos específicos são:

- Modelagem em regime estacionário e transiente do processo;
- Aplicação de Redes Neurais Artificiais, com o uso da ferramenta *Neural Network Toolbox* do *Matlab*[®] para a construção do controle inteligente;
- Desenvolvimento da comunicação entre o *Matlab*[®] e *Aspen*[™] (usando o Elipse SCADA) para simular o processo em regime transiente.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1. Destilação extrativa

Uma mistura de dois ou mais componentes, cujas composições do líquido e do vapor em equilíbrio são iguais a uma determinada pressão e temperatura, é considerada uma mistura azeotrópica, onde o ponto de ebulição da mistura tem temperatura diferente dos componentes puros que a compõe. Como são misturas em que durante a ebulição mantém a temperatura constante, têm sido por muitas vezes confundidas com substâncias puras. Para um azeótropo, uma variação na pressão muda não apenas a temperatura de ebulição, mas também a composição da mistura.

Uma metodologia para a identificação de um dado sistema, principalmente das altas não-idealidades, tais como miscibilidade parcial na fase líquida e azeótropos ternários, é de fundamental importância para a escolha do tipo de processo mais adequado para a separação de uma dada mistura (ITO, 2002).

Um azeótropo, independentemente de ser de mínimo ou de máximo de temperatura de ebulição, pode ser homogêneo ou heterogêneo. Quando uma mistura azeotrópica formar apenas uma fase líquida em equilíbrio com a fase vapor, a mistura é azeotrópica homogênea. Se o comportamento de múltiplas fases líquidas for exibido na condição azeotrópica, o azeótropo é heterogêneo. Neste caso, a composição da fase vapor é igual à composição global das duas (ou mais) fases líquidas, pois há um equilíbrio entre uma fase vapor e duas fases líquidas (VAN NESS et al., 2005).

A presença de azeótropos impõe fronteiras à destilação que delimitam as regiões às quais as separações possíveis estão limitadas. É crítico conhecer essas fronteiras de destilação para o projeto dos processos de separação baseados na destilação (RODRIGUEZ-DONIS et al., 2001), haja vista que os produtos obtidos por tais processos dependem da composição da mistura inicial.

A existência de um azeótropo na mistura etanol/água fez com que diferentes técnicas de separação fossem empregadas na obtenção de etanol praticamente puro. Algumas destas técnicas são apresentadas a seguir:

- Desidratação química;
- Desidratação por destilação a vácuo;
- Destilação com variação de pressão;

- Destilação azeotrópica;
- Destilação extrativa;
- Pervaporação;
- Adsorção;
- Entre outros.

Neste trabalho utilizar-se-á a destilação extrativa como técnica de separação da mistura azeotrópica etanol/água. Vários trabalhos disponíveis na literatura reforçam a técnica da destilação extrativa como uma alternativa viável (BRITO, 1997; DIAS, 2008; FIGUEROA, 2011; FIGUEIREDO et al., 2015).

Segundo Junqueira (2010), as simulações das destilações extrativa e azeotrópica para a desidratação do bioetanol utilizando a modelagem de estágios de equilíbrio indicaram que a destilação azeotrópica apresenta consumo energético cerca de quatro vezes superior ao da destilação extrativa.

O terceiro componente adicionado como solvente, pode ser líquido, sais dissolvidos, uma mistura de sal dissolvida em solvente líquido, líquidos iônicos ou polímeros ramificados. Este solvente adicionado deve ser recuperado por destilação e é retornado para a posição adequada na coluna.

Para a separação de etanol e água, os glicóis são as substâncias mais indicadas como agentes extrativos. Os glicóis são mais seletivos que outras substâncias orgânicas, com a glicerina apresentando maior seletividade e o etilenoglicol aparecendo como segundo agente mais efetivo.

Um dos solventes mais usados para a desidratação de etanol é o etilenoglicol (DIAS et al., 2009). A relação solvente/alimentação deve ser cuidadosamente escolhida, para não elevar a quantidade de energia requerida, aumentando a vazão de líquido na coluna, diminuindo a eficiência e, portanto, aumentando a quantidade de estágios requeridos (WOLF e BRITO, 1995).

O etilenoglicol é mais utilizado devido a sua temperatura normal de ebulição. Enquanto a glicerina tem ponto normal de ebulição de 290 °C, o etilenoglicol ferve a 180 °C. Então, as desvantagens de utilizar uma substância com temperatura de ebulição tão elevada se fazem sentir tanto na primeira coluna de recuperação do solvente quanto na coluna principal, as quais deverão operar em temperaturas significativamente maiores, exigindo vapor de

aquecimento em pressões mais altas. Em segundo lugar, a viscosidade da glicerina é muito maior (PERRY, 2008).

Shealy et al. (1987) estudaram o equilíbrio líquido-vapor do sistema etanol/água/dimetilformamida, com o objetivo de verificar a possibilidade de utilizar a dimetilformamida em substituição ao etilenoglicol. Embora apresente a vantagem de possuir uma temperatura normal de ebulição mais baixa do que a do etilenoglicol, a dimetilformamida tem tendência a sofrer hidrólise, impedindo a sua utilização como solvente na destilação extrativa. Além disso, esta só é efetivada quando a concentração de etanol na mistura a ser separada já é elevada, passando a provocar a diminuição da volatilidade relativa em soluções ricas em água.

Conforme Rocha (1998), a destilação extrativa com sais apresenta uma série de dificuldades operacionais, sendo a principal delas o fato de que os sais são corrosivos. O aumento da concentração de sal no fundo da coluna seguido pela redução na mesma pode causar problemas no refeedor como, por exemplo, corrosão, incrustação e precipitação do sal.

Figuroa (2011) verificou que o uso dos líquidos iônicos como solventes no processo de desidratação de etanol, além de possibilitar a obtenção de etanol com alta pureza, também fez com que o processo fosse altamente eficiente, alcançando percentagens de recuperação de etanol superiores a 98%. Outra vantagem dos líquidos iônicos foi que a contaminação do etanol anidro produzido é nula. Porém, o custo dos líquidos iônicos é um fator limitante para realizar, na atualidade, a implementação deste processo em escala industrial. Outros solventes empregados são: a gasolina (CHIANESE e ZINNAMOSCA, 1990) e o tetraetilenoglicol (RAVAGNANI et al., 2010).

De acordo com Oliveira et al. (2009), os resultados das simulações mostraram que o processo de separação da mistura etanol- água utilizando tetraetilenoglicol é possível, estando de acordo com o mapa de curvas residuais obtido. Todavia, o gasto energético deste processo é maior quando comparado com os resultados utilizando etilenoglicol. A substituição do etilenoglicol por tetraetilenoglicol justifica-se pela menor toxicidade do último.

Apesar da grande quantidade de solventes que podem ser usados na destilação extrativa, neste trabalho foi usado etilenoglicol como terceiro componente via destilação extrativa na obtenção de álcool anidro.

Após a seleção do solvente, o próximo passo no projeto da destilação extrativa é a determinação das condições nas quais as unidades (coluna principal e recuperação do solvente) são operadas. Nesta etapa devem-se definir as variáveis tais como: pressão, número

de estágios, posição das alimentações, taxa de refluxo e, particularmente, a razão solvente/alimentação. Em regra geral, quanto maior a proporção do solvente, maior será o efeito sobre o equilíbrio de fases, com exceção dos casos onde o aumento de temperatura (temperatura de ponto de bolha) provocado pela presença do solvente ocorra em sentido contrário.

3.2. Controle

Os processos químicos geralmente estão variando no tempo, seja por interferências externas seja por mudanças na operação. Desta forma, é fundamental o monitoramento e ser hábil para introduzir mudanças nas variáveis chaves dos processos que estão relacionadas a taxas de produção, segurança e qualidade dos produtos. O presente trabalho foca em manter a qualidade dos produtos através da previsão dos melhores *setpoints* para os controladores existentes na planta através da utilização de redes neurais artificiais.

A maneira de se realizar o controle de qualidade dos produtos e intermediários é muito diversa. Na indústria química/petroquímica, especificamente, encontra-se medições contínuas dos processos como temperatura, vazões e pressões. Mas outras medições, como concentrações de correntes, viscosidades, índices de fluidez de polímeros necessitam de técnicas laboratoriais para serem realizadas. Durante o processo, é necessário o contínuo controle das propriedades que garantem a qualidade do produto. Nesse caso, é necessário realizar amostragens das correntes do processo em determinada frequência, para que se garanta a qualidade final do produto.

Colunas de destilação, em geral, constituem uma fração significativa do investimento de capital e do custo de produção de plantas químicas e refinarias. A disponibilidade de técnicas práticas para auxílio ao desenvolvimento de sistemas de controle eficazes e confiáveis para uma operação eficiente e segura é, portanto, muito importante. Além disso, a destilação é uma operação unitária de alto consumo energético, necessitando alcançar e manter as condições operacionais ótimas. O objetivo do controle *Feedback* é cancelar ou minimizar os efeitos de distúrbios sobre as variáveis controladas através de variações mínimas nas variáveis manipuladas. Outras vezes esta operação tem sido considerada como desafiante aplicação de otimização e controle avançado, haja vista que o ponto de operação ótimo normalmente localiza-se próximo às restrições e a operação da coluna

O controle em um processo deve atender três necessidades básicas: manter os balanços de massa e energia, atingir a qualidade desejada e atender às restrições do processo. Porém, o

processo também deve ser rentável e o controle adequado à operação. Dessa maneira, a proposta principal de um sistema de controle é rejeitar os efeitos das variações não controladas e restabelecer a qualidade a um ponto desejado (SEBORG et al., 2004).

Uma lei de controle é um conjunto de regras que são utilizadas para determinar os comandos a serem enviados a um sistema baseado no estado desejado de um sistema. Leis de Controle são utilizadas, por exemplo, para ditar como uma temperatura de um determinado estágio de uma coluna de destilação é corrigida para uma temperatura desejada, definida de *setpoint*, enviando comandos para um atuador.

Segundo Lucas (2012), os processos químicos exigem, cada vez mais, rígidas especificações de qualidade do produto final, além de rigorosas regulamentações ambientais. Isso fez com que várias pesquisas tenham surgido com o objetivo de aumentar o grau de desempenho dos sistemas de controle das colunas de destilação. Para tanto, é necessário um bom conhecimento do comportamento do processo. Uma das linhas de pesquisa que estão sendo bastante exploradas são as Redes Neurais Artificiais (RNA), as quais oferecem uma abordagem alternativa para a modelagem do processo, pois não requerem um conhecimento a priori dos fenômenos envolvidos. As RNA conseguem “aprender” através de padrões pré-existentes que descrevem a relação entre as entradas e saídas em qualquer fenômeno do processo dado. Dessa forma a rede adquire "conhecimento" do ambiente, e conseguem lidar com problemas complexos e não lineares, processando informações rapidamente, e reduzindo o esforço de engenharia necessário para o desenvolvimento do modelo.

As metodologias disponíveis para selecionar a melhor configuração de controle da composição são muitas e geralmente usam critérios baseados em modelos de estado estacionário e modelos dinâmicos (LUYBEN, 2006).

O controle de colunas de destilação é bem complexo, tornando ainda mais difícil o controle para colunas de destilação extrativas, tais como aquelas que produzem etanol anidro, cujas colunas exigem alta pureza e possuem características distintas (UDUGAMA et al., 2015; ZHONGZHOU et al., 2010).

A informação de entrada para o controlador é o erro entre o valor desejado (*setpoint* - y_d) e o valor real da variável de saída do processo. O esforço do controlador sempre será o de diminuir esse erro, mantendo variável de saída do processo sob controle, motivo pelo qual ela é também denominada variável controlada.

A lei PID traduz a ideia de que a variável manipulada será alterada proporcionalmente (P) ao erro que aparece a cada instante, ao acúmulo, integral (I), do erro ao longo do tempo e à taxa de variação do erro da variável controlada (D), ou seja:

$$u(t) = k_c(y_d - y(t)) + \frac{k_c}{\tau_i} \int_0^t (y_d - y(t))dt + k_c \tau_d \cdot \frac{d(y_d - y(t))}{dt} + u_s \quad (1)$$

ou

$$u(t) = k_c e(t) + \frac{k_c}{\tau_i} \int_0^t e(t)dt + k_c \tau_d \cdot \frac{de(t)}{dt} + u_s \quad (2)$$

onde, $u(t)$ é a saída do controlador em função do tempo, u_s é a saída do controlador no regime permanente, K_c é o ganho da parte proporcional do controlador, τ_i é o tempo da ação integral do controlador, τ_d é o tempo da ação derivativa do controlador e $e(t)$ é o erro entre o processo e *setpoint*. O valor numérico dessas três constantes deve ser determinado de maneira que o controlador tenha um bom desempenho, evitando instabilidades no processo. Esse é o problema de controle clássico, o problema de sintonia do controlador PID.

A ação proporcional de um controlador pode ser descrita, de uma forma sucinta, como um amplificador operacional puro, que multiplica o valor do erro do sistema pela constante K_c para obter o valor da variável de saída. A ação proporcional pura consegue diminuir o sinal de erro presente no sistema, mas não consegue anulá-lo.

Para eliminar o erro em estado estacionário permanentemente, utiliza-se a ação integral, que age através da integral do erro no tempo. Isso também pode ser explicado pela integral levar em conta o histórico do processo, ou seja, modifica a saída de controle de acordo com o histórico do erro. Diferentemente da ação proporcional que modifica a saída de controle apenas baseada no erro atual.

É importante notar que a ação integral age somente para eliminar o erro característico de um controle puramente proporcional, e tal ação traz consigo consequências. Uma das mais notórias é o aumento do *overshoot* com o aumento da parcela de ganho integral inserida no controlador. Analogamente a ação proporcional, há duas maneiras mais comuns de se especificar a ação integral. Uma delas, é o ganho integral k_i ; e a outra é o tempo de integral τ_i . A relação entre as duas ações pode ser vista na Equação 3:

$$k_i = \frac{k_c}{\tau_i} \quad (3)$$

Assim como a ação integral, a derivativa não pode ser aplicada isoladamente, e sim acompanhada de uma ação proporcional, constituindo-se assim um controle PD (proporcional e derivativo).

A variação na saída do controlador devido à ação derivativa pode ser descrita como uma ação proporcional a velocidade da variação do sinal de erro, ou seja, a parcela derivativa do controlador tem o intuito de reduzir a velocidade das variações da variável de processo, evitando que a mesma aumente ou diminua muito bruscamente. Devido a isso, a ação derivativa também é conhecida como ação antecipatória.

Segundo Silva (2013), a implementação digital da Equação 2, contínua no domínio do tempo, requer a sua discretização. Tomando um intervalo de tempo Δt , que traduz a periodicidade com que o controlador calcula uma nova ordem de comando, sendo o índice k que representa o instante de tempo e corresponde ao instante em que o valor t tem unidades de tempo, de um modo genérico, o erro nos dois instantes anteriores, e_{k-1} e e_{k-2} pode ser expresso por:

$$\int_{t_{k-2}}^{t_{k-1}} e_{(t)} dt \cong \left[e_{(t_{k-2})} \cdot (t_{k-1} - t_{k-2}) + \frac{(e_{(t_{k-1})} + e_{(t_{k-2})})}{2} \right] \quad (4)$$

Da mesma forma o erro nos dois instantes anteriores, e_k e e_{k-1} , pode ser expresso por:

$$\int_{t_{k-1}}^{t_k} e_{(t)} dt \cong \left[e_{(t_{k-1})} \cdot (t_k - t_{k-1}) + \frac{(e_{(t_k)} + e_{(t_{k-1})})}{2} \right] \quad (5)$$

Podemos escrever a Equação 2 na forma discreta para o ponto k a $k-1$ como segue:

$$m_{c(t_k)} = k_c e_{(t_k)} + \frac{k_c}{\tau_i} \sum_{k-n}^k e_{(t)} \Delta t + k_c \tau_d \frac{(e_{(t_k)} - e_{(t_{k-1})})}{\Delta t} \quad (6)$$

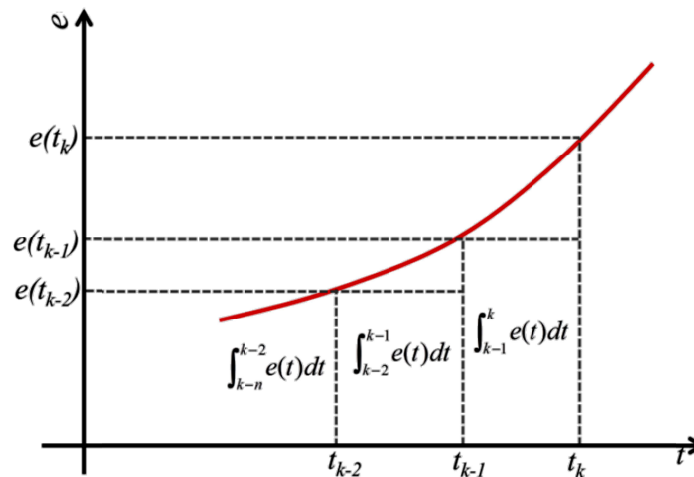
$$m_{c(t_{k-1})} = k_c e_{(t_{k-1})} + \frac{k_c}{\tau_i} \sum_{k-n}^{k-1} e_{(t)} \Delta t + k_c \tau_d \frac{(e_{(t_{k-1})} - e_{(t_{k-2})})}{\Delta t} \quad (7)$$

A variação entre os pontos k a $k-1$ pode ser escrita por:

$$\Delta m_c = k_c (e_{(t_k)} - e_{(t_{k-1})}) + \frac{k_c}{\tau_i} \left[\frac{(e_{(t_k)} + e_{(t_{k-1})})}{2} \right] \Delta t + k_c \tau_d \frac{[e_{(t_k)} - 2e_{(t_{k-1})} + e_{(t_{k-2})}]}{\Delta t} \quad (8)$$

As duas parcelas das equações 4 e 5 estão mostradas na Figura 2.

Figura 2 – Intervalos de discretização.



A Equação 8 é uma das equações digitais que possibilita implementar a lei de controle PID num computador ou num microprocessador. A operação de um sistema de controle de uma coluna de destilação de forma incorreta terá como consequência a ocorrência de instabilidades no processo. Estas instabilidades podem afetar a pureza do produto, capacidade de produção da coluna, aspectos econômicos da operação, podendo ainda afetar a segurança do processo e danificar a coluna de destilação (FRANCHI, 2010).

3.3. Redes Neurais Artificiais

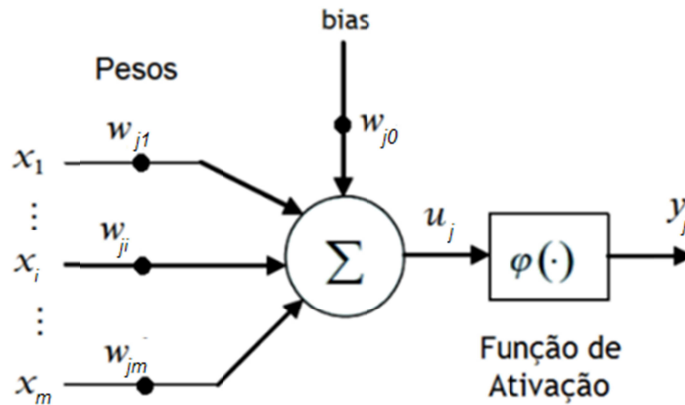
Um *Soft Sensor* utiliza algoritmos matemáticos, capazes de estimar em tempo real, variáveis desejadas através de outras variáveis disponíveis, medidas instantaneamente (JAMES et al., 2000). A denominação da nomenclatura *Soft Sensor* está relacionada a uma das principais aplicações desta técnica que é a substituição de sensores físicos pelo analógico via *software*.

O algoritmo de estimação utilizado neste trabalho utiliza um modelo de redes neurais artificiais (RNA) para a modelagem não-linear de um processo destilação extrativa. Segundo Haykin (2001), uma RNA é um processador paralelamente distribuído constituído por unidades de processamento simples, nós ou neurônios, que têm a tendência natural de armazenar conhecimento experimental e torná-lo disponível para uso.

As RNA consistem de camadas de neurônios, onde cada neurônio é a unidade básica de processamento. A arquitetura da rede é estruturada de uma forma que os neurônios estão interconectados. O neurônio artificial (*perceptron*) mais utilizado é baseado no modelo proposto por McCulloch e Pitts (1943). De acordo com a Figura 3, verifica-se uma

representação esquemática de uma RNA, onde os sinais se propagam da esquerda para a direita, sendo que o neurônio da camada j está à direita dos neurônios camada i .

Figura 3 – Modelo de um neurônio artificial. (Fonte: Adaptado de Silva et al., 2010)



O neurônio artificial ilustrado na Figura 3 é composto pelas seguintes partes:

- Um conjunto de sinapses, que são as entradas do neurônio (ou saídas de neurônios de camadas anteriores) ponderadas por um peso. Identifica-se o peso conectando a entrada x_i do neurônio j pelo símbolo w_{ji} . Faz parte desse conjunto um peso w_{j0} , denominado *bias*. Essa entrada é constante para o neurônio j cujo valor é definido como ± 1 .
- Um somatório (Σ) que simula o corpo do neurônio biológico e determina o nível de excitação do neurônio artificial.
- Uma função de ativação $\varphi(\cdot)$ que produz um valor de saída se o nível de excitação atingir um determinado limiar e restringe esse nível caso contrário, evitando-se assim a saturação da rede.

Matematicamente, a saída do j -ésimo de acordo com a Figura 3 neurônio é dada pelas seguintes expressões:

$$u_j = \sum_{i=1}^m w_{ji} x_i + w_{j0} \quad (9)$$

$$y_j = \varphi(u_j) \quad (10)$$

onde m indica o número neurônios na camada i , ou o número de entradas do neurônio j .

No projeto de um sistema neural primeiramente faz-se a coleta de dados históricos relativos ao processo. Os dados coletados devem ser significativos e não devem cobrir apenas as operações normais ou rotineiras, mas também as exceções e as condições nos limites do domínio do problema.

Normalmente, os dados coletados são separados em duas categorias: dados de treinamento, que serão utilizados para o treinamento da rede e dados de teste, que serão utilizados para verificar sua performance sob condições reais de utilização. Além dessa divisão, pode-se usar também uma subdivisão do conjunto de treinamento, criando um conjunto de validação, utilizado para verificar a eficiência da rede quanto a sua capacidade de generalização durante o treinamento, e podendo ser empregado como critério de parada do treinamento.

Depois de determinados estes conjuntos, eles são geralmente colocados em ordem aleatória para prevenção de tendências associadas à ordem de apresentação dos dados. Além disso, pode ser necessário pré-processar estes dados, através de normalizações, escalonamentos e conversões de formato para torná-los mais apropriados à sua utilização na rede.

Uma vez obtido o conjunto de dados o passo seguinte é a escolha da RNA. Nesta etapa é definida qual a arquitetura, a quantidade de neurônios e camadas da RNA, as funções de ativação que foram utilizadas para as camadas e o algoritmo de treinamento.

Para escolher a melhor topologia, pode-se iniciar com múltiplas camadas pequenas para realizar a tarefa em questão, e então adicionando um novo neurônio ou uma nova camada de neurônios ocultos quando for incapaz de satisfazer as especificações de projeto.

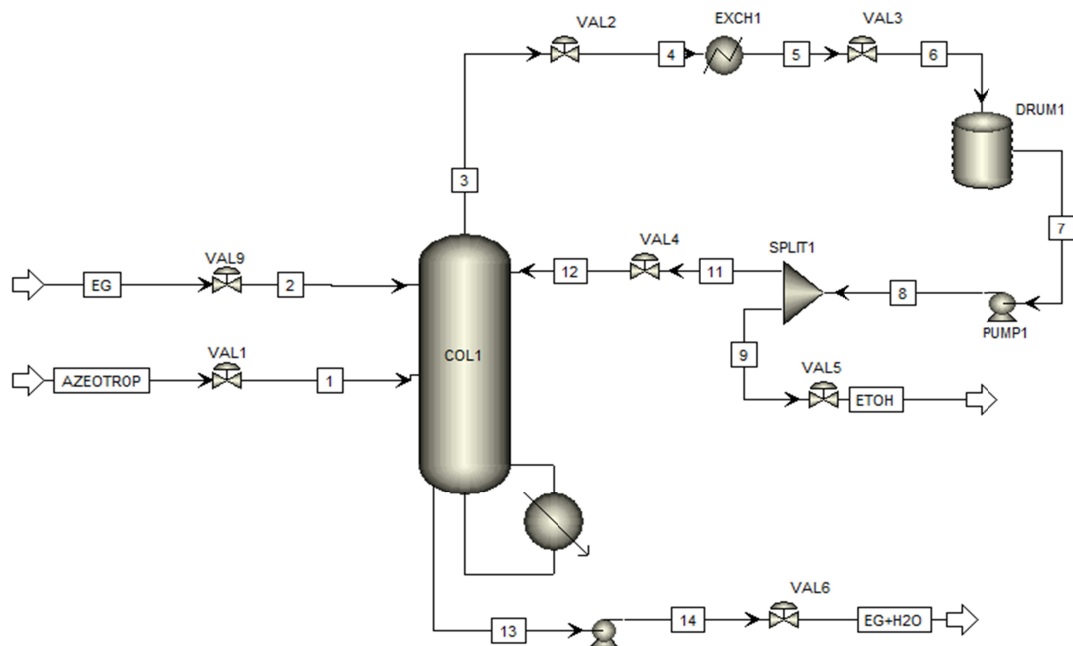
O algoritmo de treinamento define como será realizado o processo de aprendizagem da rede, ou seja, após um conjunto de padrões de entrada ser apresentado à rede, uma nova informação é obtida e modificações são realizadas nos parâmetros da rede, a fim de que o modelo represente o conhecimento sobre o conjunto de dados apresentado, de maneira que respostas adequadas sejam fornecidas pela rede para a solução do problema.

Existem dois métodos básicos de aplicação do algoritmo de treinamento, o aprendizado por lote e o aprendizado sequencial. No aprendizado por lote, os pesos somente são ajustados após a apresentação de todos os padrões, ou seja, cada padrão é avaliado com a mesma configuração de pesos. No aprendizado incremental, os pesos são atualizados após a apresentação de cada novo padrão. Por fim, os dados de teste são utilizados para verificar o quanto a rede conseguiu aprender durante a etapa de treinamento, servindo como método para seleção da melhor estrutura a ser utilizada na modelagem.

4. SIMULAÇÃO EM REGIME PERMANENTE

Para a realização das simulações do processo de obtenção de etanol anidro no regime permanente foi utilizado o simulador *Aspen Plus*TM. A Figura 4 mostra o fluxograma do processo.

Figura 4 – Fluxograma simplificado do processo de destilação extrativa para desidratação do etanol.



De acordo com o fluxograma do processo da Figura 4, na coluna extrativa de purificação de etanol (COL1) são introduzidas as correntes de alimentação da mistura azeotrópica etanol/água (AZEOTROP) e, em estágio superior, a corrente do solvente etilenoglicol (EG). Estas duas correntes entram em contato, onde a corrente de topo sai o etanol praticamente puro (ETOH) e na corrente de base (EG+H₂O) a mistura de etilenoglicol e água. O vapor que sai no topo da coluna é condensado no trocador de calor (EXCH1), seguindo para um tanque de refluxo (DRUM1), cujo acumulador de líquido evita a cavitação da bomba (PUMP1), além de atenuar possíveis variações na qualidade do produto. Após a passagem pela bomba, a corrente de topo condensada é enviada a um divisor (SPLIT1), sendo uma parte utilizada como refluxo e a outra é retirada como produto (ETOH).

Para a simulação da coluna foi usado a rotina *RadFrac*, que consiste de um modelo rigoroso para cálculo de operações com múltiplos estágios de fracionamento. O modelo permite a manipulação das eficiências dos estágios para aproximação de dados de sistemas

reais, o dimensionamento de pratos, a avaliação de perfis hidráulicos e térmicos, entre outros. O modelo termodinâmico escolhido para a representação da fase líquida é o *non-random two liquids* (NRTL), por corresponder aos resultados experimentais obtidos por Meirelles et al. (1992). Para a fase vapor, foi utilizada a equação de Redlich-Kwong e a eficiência de estágio foi considerada 100% para todas as simulações.

A simulação da obtenção de etanol anidro através da destilação extrativa utilizada neste trabalho foi baseada em trabalhos da literatura, os quais estão apresentados nas Tabelas 1 e 2 (MEIRELLES et al., 1992; BRITO, 1997; DIAS, 2008; OLIVEIRA, 2009; JUNQUEIRA, 2012; GIL e RODRÍGUEZ, 2012).

Tabela 1 – Especificações das correntes de entrada do processo.

Variáveis	Azeótropo	Solvente
Temperatura (°C)	40	80
Pressão (atm)	2,5	2,5
Vazão molar (kmol.h ⁻¹)	100	76,94
Composição molar de etanol	0,85	0,0
Composição molar de água	0,15	0,0
Composição de etileno glicol	0,0	1,0

Tabela 2 – Especificações da coluna extrativa.

Variáveis	Especificações
Número de estágios	24
Razão refluxo	0,377
Pressão no topo (atm)	1,0
Pressão na base (atm)	1,2
Estágio de alimentação do solvente	4
Estágio de alimentação do azeótropo	12
Vazão de destilado (kmol.h ⁻¹)	85,4

Para que o controle inteligente tenha um bom desempenho, é preciso dispor de um vasto conjunto de dados, os quais representarão diversas condições operacionais da planta. Esses dados serão utilizados para o treinamento das Redes Neurais Artificiais.

Para obtenção dos dados fora do regime nominal, foram feitos distúrbios para mais e para menos em relação ao valor inicial das seguintes variáveis: temperatura, vazão e composição do azeótropo, com amplitude de no máximo 10%, 20% e 3%, respectivamente. Essas perturbações nos indicam como determinadas variáveis se comportam diante distúrbios que a coluna está sujeita a sofrer.

Para as diferentes combinações de distúrbios, foram observados quais os valores ótimos das variáveis que serão controladas para que o refeedor opere na condição de consumo mínimo de carga térmica, mantendo o produto dentro das especificações. Esse procedimento foi possível utilizando a ferramenta *Model Analysis Tools/Optimization* do *Aspen PlusTM*, cuja ferramenta utiliza o método da Programação Quadrática Sequencial (SQP), que consiste basicamente em resolver o problema de otimização iterativamente, onde a solução em cada passo é obtida pela solução de uma aproximação do problema não-linear, onde a função objetivo é substituída por uma aproximação quadrática e as restrições substituídas por aproximações lineares.

Definiu-se a função objetivo (F_{obj}) a ser minimizada, como sendo o consumo energético do refeedor (Q_R) da coluna de destilação (Equação 11), a partir da manipulação das variáveis de decisão razão de refluxo, vazão de solvente e vazão de destilado. Na ferramenta *Model Analysis Tools/Constraint*, são inseridas as restrições do processo como a fração molar do etanol (x_D^{EOH}) e fração molar recuperada (FR^{EOH}) no destilado, de acordo com as Equações 12 e 13, respectivamente.

$$F_{obj} = Q_R \quad (11)$$

Sujeito à

$$x_D^{EOH} \geq 0,995 \quad (12)$$

$$FR^{EOH} \geq 0,999 \quad (13)$$

5. DESENVOLVIMENTO DO SOFT SENSOR

5.1. Coleta de dados

Ao contrário da previsão de propriedades finais, a modelagem inversa têm sido utilizada com sucesso em diferentes aplicações, nas quais são selecionadas as condições de saídas desejadas do processo, e os valores de algumas entradas do processo são determinados para determinadas circunstâncias (MORALES, 2015).

Neste trabalho, as condições de saída desejadas são as composições dos produtos de topo e base da coluna extrativa, e as variáveis de entradas a serem determinadas serão os *setpoints* dos controladores.

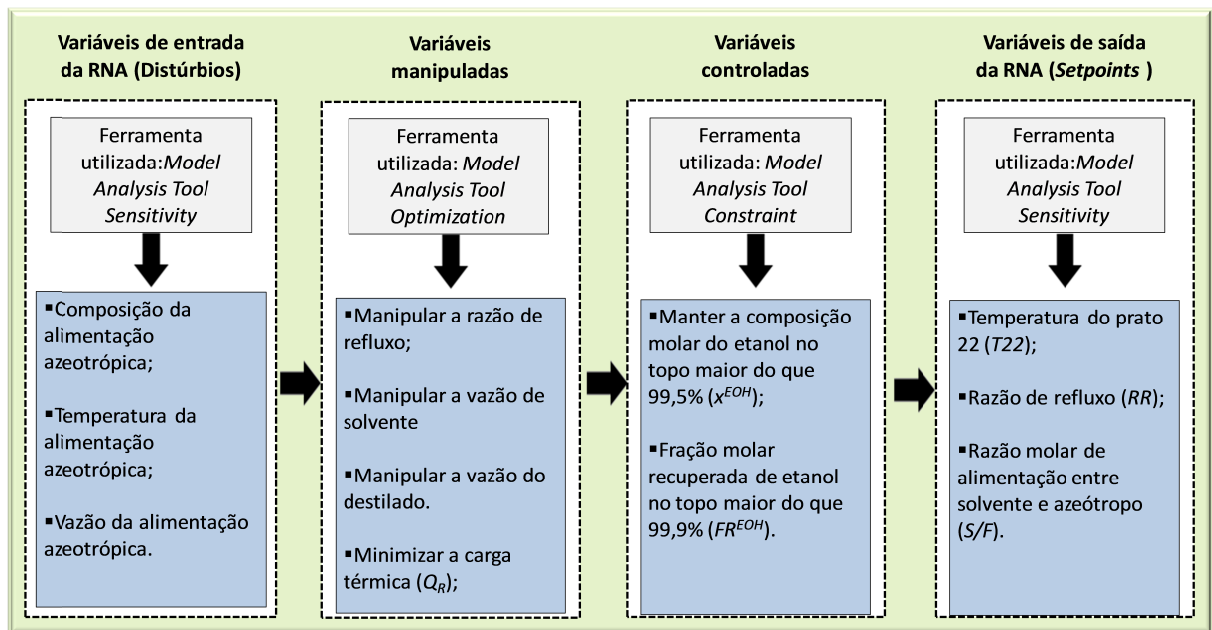
No desenvolvimento do *Soft Sensor*, o primeiro passo consiste na coleta de dados pertinentes ao problema com auxílio da ferramenta *Model Analysis Tool Sensitivity* do Aspen Plus™. Os dados obtidos para treinar as RNA foram obtidos a partir das simulações em regime permanente:

- *Dados de entrada*: composição molar do etanol no azeótropo (x^{EOH}), temperatura (T) e vazão molar (F) da alimentação do azeótropo – variáveis excitadas;
- *Dados de saída*: temperatura do prato 22 (T_{22}), razão de refluxo (RR) e razão de alimentação entre o solvente e azeótropo (S/F).

De acordo com as condições estabelecidas no Aspen Plus™, podemos considerar um modelo inverso por rede, o qual envolve o treinamento de uma rede que descreve o modelo inverso do processo, isto é, através dos distúrbios (entradas da RNA), é possível prever os valores dos *setpoints* (saída da RNA) necessários para manter as especificações do produto e minimizar a carga térmica (variáveis controladas). Isso é possível quando variáveis são manipuladas para cada conjunto de distúrbios de acordo com a Figura 5.

Foi realizada uma coleta de 5300 padrões de entrada com suas respectivas respostas desejadas. Deste total, 50% foi utilizado para treinamento, 10 % para validação e 40 % para teste da RNA.

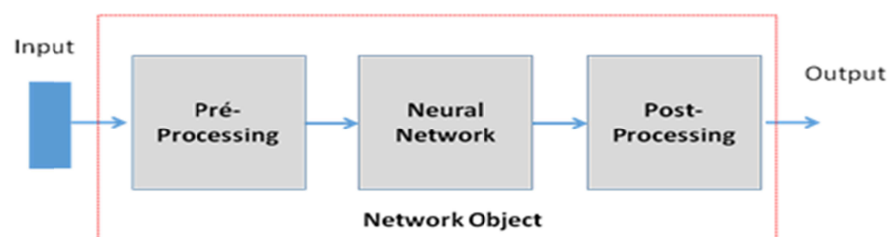
Figura 5 – Procedimento de coleta dos dados e otimização do processo usando o Aspen Plus™.



Na prática nem todas as entradas e saídas apresentam a mesma ordem de grandeza. Para contornar esse problema, realizou-se um pré-processamento através da normalização das entradas e saídas, ajustando o conjunto de dados para o intervalo [0, 1]. A padronização dos dados faz com que os valores apresentados à rede não se afastem dos limites dinâmicos da função de ativação, além de aproximar a faixa de variação dos dados de entrada como os pesos iniciais, o que contribui para a convergência do algoritmo de treinamento (ZHANG et al., 1998). Dessa forma, a saída da rede deve passar pelo processo inverso da normalização para que os valores voltem as suas ordens de grandezas originais.

No *Matlab*® o pré-processamento é feito automaticamente quando se utiliza a *Neural Network Toolbox*™. Portanto, pode-se pensar que a RNA apresenta um bloco de pré-processamento (*pré-processing*) que aparece entre as entradas (*input*) e a primeira camada da Rede Neural (*Neural Network*) e um bloco de pós-processamento (*Post-Processing*) que aparece entre a última camada e a saída (*output*), conforme mostra a Figura 6.

Figura 6 - Preparação e adequação dos dados.



5.2. Escolha da topologia da rede

Optou-se por selecionar dois tipos diferentes de arquiteturas e avaliá-las segundo o seu desempenho com os dados do problema. As redes selecionadas foram:

- Rede *Feedforward Multi layer perceptron (MLP)*: é um tipo com mais de uma camada de neurônios sem realimentação, ou seja, a informação é distribuída na rede em um só sentido. É uma rede capaz de aproximar qualquer função com um número finito de descontinuidades, desde que possua número suficiente de neurônios nas camadas ocultas.
- Rede recorrente de Elman: é um tipo de rede que tem na camada de alimentação uma adição de uma realimentação das saídas desta camada para a entrada da mesma. Isso faz com que ela seja capaz de armazenar informações passadas.

A RNA criada nesse trabalho é composta, além da camada de entrada e de saída, por duas camadas ocultas. Foi usada para todas as camadas a função de ativação tangente sigmoideal (*tansig*), pois apresentou bons resultados em relação a outras testadas. O número de neurônios das camadas escondidas é muitas vezes definido empiricamente, porém o número de neurônios da camada de entrada e da camada de saída é definido de acordo com o problema.

5.3. Treinamento da rede

Quanto ao modo de treinamento, foi utilizado o modo sequencial padrão devido ao menor armazenamento de dados, além de ser menos suscetível ao problema de mínimos locais, devido à pesquisa de natureza estocástica que realiza. No treinamento sequencial padrão, os pesos são atualizados após a apresentação de cada exemplo de treinamento. Uma Época consiste no intervalo correspondente à apresentação de todos os vetores-exemplo do conjunto de treino à camada de entrada da RNA.

Seja o sinal de erro na saída do neurônio j da camada de saída na iteração n (isto é, na apresentação do n -ésimo vetor de treinamento) definido por

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (14)$$

sendo d_j a saída desejada para o neurônio j .

Define-se o valor instantâneo do erro quadrático para o neurônio j de acordo com $e_j^2(n)/2$.

O valor instantâneo da soma dos erros quadráticos $\mathcal{E}(n)$ é obtida somando $e_j^2(n)/2$ sobre todos os neurônios da camada de saída. A soma instantânea dos erros quadráticos na camada de saída é então escrita de acordo com a Equação 15.

$$\mathcal{E}(n) = \sum_{j \in C} \frac{e_j^2(n)}{2} \quad (15)$$

sendo C o conjunto que inclui todos os neurônios na camada de saída

O algoritmo backpropagation aplica a correção $\Delta w_{ij}(n)$ ao peso sináptico, tendo como base a direção contrária do gradiente local $\Delta \mathcal{E}(n)/\Delta w_{ij}(n)$ da superfície do erro $\mathcal{E}(w)$ relativo ao peso sináptico.

A correção $\Delta w_{ij}(n)$ aplicada a $w_{ij}(n)$, ditada pela Regra Delta Generalizada, é definida por

$$\Delta w_{ji}(n) = w_{ji}(n+1) - w_{ji}(n) = -\eta \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (16)$$

onde η é a constante que determina a razão de aprendizado do algoritmo *backpropagation*. O uso do sinal negativo impõe a movimentação contrária à direção apontada pelo gradiente na superfície de erro definida no espaço de pesos sinápticos

De acordo com a regra da cadeia do cálculo diferencial, o gradiente local pode ser expresso pela Equação 17.

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} \frac{\partial u_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} \quad (17)$$

De acordo com a Equação 15:

$$\mathcal{E}(n) = \sum_{j=1}^M \frac{e_j^2(n)}{2} = \frac{1}{2} \{e_1^2(n) + e_2^2(n) + \dots + e_j^2(n) + \dots + e_M^2(n)\} \quad (18)$$

onde M é o número de neurônios da camada de saída.

Derivando a Equação 18 em relação à $e_j(n)$ obtém-se a Equação 19.

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \quad (19)$$

Derivando a equação 14 com relação à $y_j(n)$.

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \quad (20)$$

Derivando a equação 10 da variável de saída $y_j = \varphi(u_j)$ com relação à $u_j(n)$, tem-se:

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} = \varphi'(u_j) \quad (21)$$

onde $\varphi'(u_j)$ é a derivada da função de ativação.

Derivando a Equação 9 em relação à $w_{ji}(n)$ resulta em

$$\frac{\partial u_j}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial}{\partial w_{ji}} \left[(x_1(n)w_{j1}(n) + w_{j0}) + (x_2(n)w_{j2}(n) + w_{j0}) + (x_3(n)w_{j3}(n) + w_{j0}) + \dots + (x_i(n)w_{ji}(n) + w_{j0}) + \dots + (x_m(n)w_{jm}(n) + w_{j0}) \right] = x_i \quad (22)$$

Substituindo as Equações 19, 20, 21 e 22 na Equação 17:

$$\frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial u_j(n)} \frac{\partial u_j(n)}{\partial w_{ji}(n)} = e_j(n)(-1)\varphi'(u_j)x_i(n) \quad (23)$$

Substituindo a Equação 23 na Equação 16:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \frac{\partial \mathcal{E}(n)}{\partial w_{ji}(n)} = \eta e_j(n)(-1)\varphi'(u_j)x_i(n) \quad (24)$$

Assim, a correção dos erros (w_{ij}) depende dos erros associados ao neurônio da camada j , da derivada da função de ativação a ele associada, da constante de aprendizado e da saída dos neurônios da camada i imediatamente anterior.

A popularidade do algoritmo *backpropagation* resulta de sua relativa simplicidade de implementação e do fato de ser um poderoso dispositivo para armazenar o conteúdo de informação (adquirido pela rede MLP a partir do conjunto de dados) nos pesos sinápticos da rede.

O algoritmo de treinamento utilizado neste trabalho foi o *Levenberg-Marquart*, pois é uma variação do *backpropagation* padrão que utiliza a derivada segunda como forma de otimização do mesmo. Segundo Silva et al. (2010), este algoritmo é capaz de conduzir o treinamento de redes neurais artificiais de forma mais rápida que algoritmos tradicionais.

Considerando a função erro usada na MLP, a equação usada no método de Gauss-Newton para a atualização dos pesos da RNA e conseqüente minimização da função erro é:

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) - \mathbf{H}^{-1} \nabla f(\mathbf{w}) \quad (25)$$

onde \mathbf{w} é o vetor do pesos. O gradiente $\nabla f(\mathbf{w})$ pode ser representado pela Equação 26.

$$\nabla f(\mathbf{w}) = \mathbf{J}^T \mathbf{e} \quad (26)$$

onde \mathbf{e} é um vetor que armazena o erro relativo a todos os padrões de entrada da RNA. A matriz hessiana pode ser calculada pela Equação 27.

$$\mathbf{H} = \mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mathbf{S} \quad (27)$$

onde \mathbf{J} é a matriz Jacobiana.

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} \frac{\partial e_1}{\partial w_{j1}} & \frac{\partial e_1}{\partial w_{j2}} & \dots & \frac{\partial e_1}{\partial w_{jm}} \\ \frac{\partial e_2}{\partial w_{j1}} & \frac{\partial e_2}{\partial w_{j2}} & \dots & \frac{\partial e_2}{\partial w_{jm}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial e_n}{\partial w_{j1}} & \frac{\partial e_n}{\partial w_{j2}} & \dots & \frac{\partial e_n}{\partial w_{jm}} \end{bmatrix} \quad (28)$$

A Jacobiana \mathbf{J} é a transposta da matriz de gradiente $\nabla \mathbf{e}$ com m linhas e M colunas e

$$\mathbf{S} = \sum_{j=1}^M e_j \nabla^2 e_j \quad (29)$$

Pode-se supor que \mathbf{S} é um valor pequeno, se comparado ao produto da matriz Jacobiana, logo, a matriz Hessiana pode ser representada por:

$$\mathbf{H} \approx \mathbf{J}^T \mathbf{J} \quad (30)$$

A atualização dos pesos apresentado na Equação 25 pode ser expressa pela Equação 31.

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) - (\mathbf{J}^T \mathbf{J})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{e} \quad (31)$$

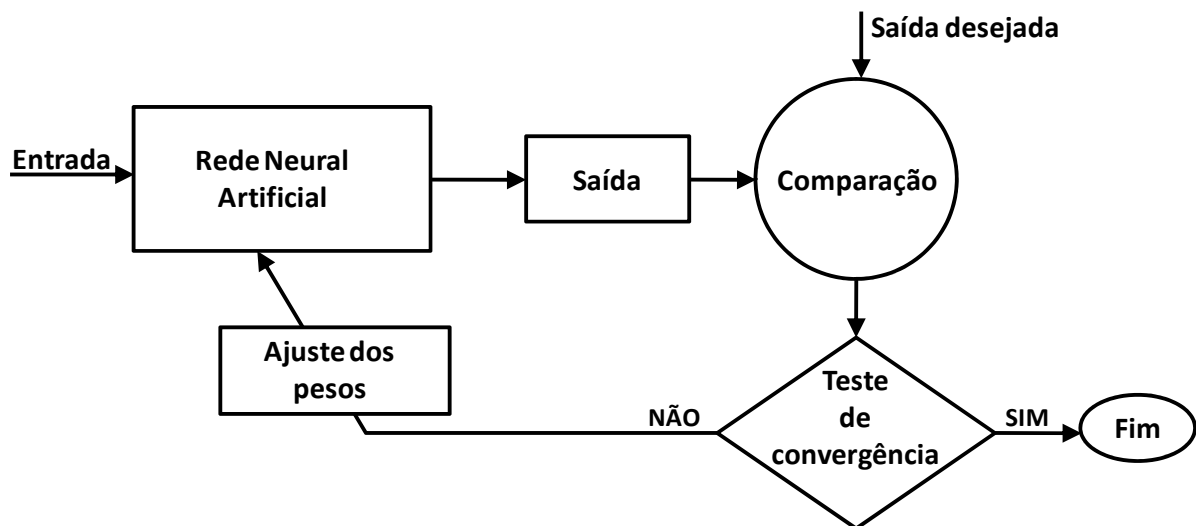
Para superfícies genéricas nada garantirá que a Hessiana é positiva definida e em uma determinada iteração o valor da função poderá aumentar. Nesse ponto, o algoritmo de Levenberg-Marquardt apresenta uma modificação e, portanto, a atualização dos pesos é realizada de acordo com a Equação 32.

$$\mathbf{w}(n+1) = \mathbf{w}(n) - (\mathbf{J}^T \mathbf{J} + \mu \mathbf{I})^{-1} \mathbf{J}^T \mathbf{e} \quad (32)$$

Sendo que \mathbf{I} é a matriz identidade e μ , um parâmetro que torna a matriz Hessiana definida positiva. Quando o μ é zero, este é apenas o método de Newton, usando a matriz Hessiana aproximada. Quando μ é grande, o método aproxima-se do gradiente descendente. O método de Newton é mais rápido e preciso perto de um mínimo de erro, de modo que o objetivo é o de mudar para o método de Newton tão rapidamente quanto possível. Assim, μ diminuiu após cada etapa de sucesso (redução na função de desempenho) e é aumentado apenas quando um passo preliminar seria aumentar a função de desempenho. Desta forma, o desempenho da função vai ser sempre reduzida em cada iteração do algoritmo (BISHOP, 1994; LIU, 2010).

Durante a etapa de treinamento os pesos e bias são iterativamente ajustados para minimizar a função de desempenho da rede conforme ilustra a Figura 7.

Figura 7 – Diagrama de blocos representativo do aprendizado de uma RNA.



A função desempenho informa o grau de convergência das RNA; através desta, é possível saber o quanto as RNA estão aprendendo os padrões apresentados durante o treinamento. A função de desempenho mais comumente usada é o erro médio quadrático (*Mean Square Error - MSE*) dada por:

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^n (d_j - y_j)^2 \quad (33)$$

onde d_j é a saída desejada, y_j é a saída gerada pela rede e N é o número de padrões apresentados. Portanto, esta é uma função que calcula o erro entre a saída gerada pela rede e a saída desejada. Portanto as iterações de treino são terminadas quando o valor do *MSE* atinge um valor suficientemente baixo.

6. SIMULAÇÃO EM REGIME TRANSIENTE

Após o procedimento de otimização do estado nominal, o arquivo do processo estacionário do *Aspen Plus*TM foi revisado em relação à pressão (*Pressure Check*). No caso de alguma incompatibilidade entre pressões no processo, o *software* abre uma janela com a localização e todas as informações que devem ser corrigidas para que o sistema seja regido pelas diferenças de pressão. Com essa revisão correta, o arquivo encontra-se preparado para ser exportado ao *Aspen Plus Dynamics*TM, no qual o arquivo é aberto, e são realizadas sugestões de controle básico pelo próprio programa.

6.1. Estratégias de controle

Inicialmente, um esquema básico de controle regulatório é determinado:

- Controle na alimentação para garantir um fluxo constante;
- A pressão de topo da coluna pela manipulação de carga térmica do condensador;
- O nível do vaso de refluxo manipulando a vazão de destilado;
- O nível de base manipulando o fluxo da base.

Posteriormente, adicionaram-se os seguintes controladores com mudança inteligente de *setpoints* utilizando RNA:

- Razão de refluxo, manipulando a vazão de refluxo (ARIFIN E CHIEN, 2008);
- Temperatura do prato 22 da coluna, manipulando a carga térmica do refeedor.
- Razão de alimentação entre o solvente e azeótropo, manipulando a vazão de solvente (GIL E RODRÍGUEZ, 2012).

A razão de refluxo é uma variável importante, pois influencia no teor de solvente do interior da coluna, o qual é de extrema importância no diz respeito à eficiência de separação e consumo de energia (FIGUEIRÊDO et al., 2015).

A RNA desenvolvida recebe os dados da temperatura, vazão e composição da alimentação do azeótropo. Em seguida, a RNA calcula a temperatura do prato 22, razão de refluxo e razão de alimentação entre solvente e azeótropo, os quais serão os *setpoints* dos controladores presentes na planta, cuja finalidade é manter o produto de topo e de base da coluna de destilação dentro das especificações. Dessa forma, distúrbios na alimentação são

alimentados no *Soft Sensor*, o qual fornece uma resposta *feedforward*. A configuração do controle proposto está resumida na Figura 8.

Para a aplicação do controle de temperatura foi identificado o prato mais sensível para esta aplicação, baseados nos seguintes métodos: pratos sucessivos, método da simetria de sensibilidade, máxima sensibilidade e decomposição por valores singulares (SVD) da matriz de sensibilidade. A Tabela 3 mostra os resultados obtidos. A análise de sensibilidade foi feita em malha aberta com perturbações em $\pm 5\%$ da carga térmica do reboiler. Em cada análise, foram determinados os dois pratos mais sensíveis.

De acordo com a Tabela 3, pode-se perceber que o prato 22 apresentou melhores resultados de sensibilidade, sendo escolhido como o “prato de controle”.

Figura 8 – Estratégia de controle baseada em Redes Neurais Artificiais.

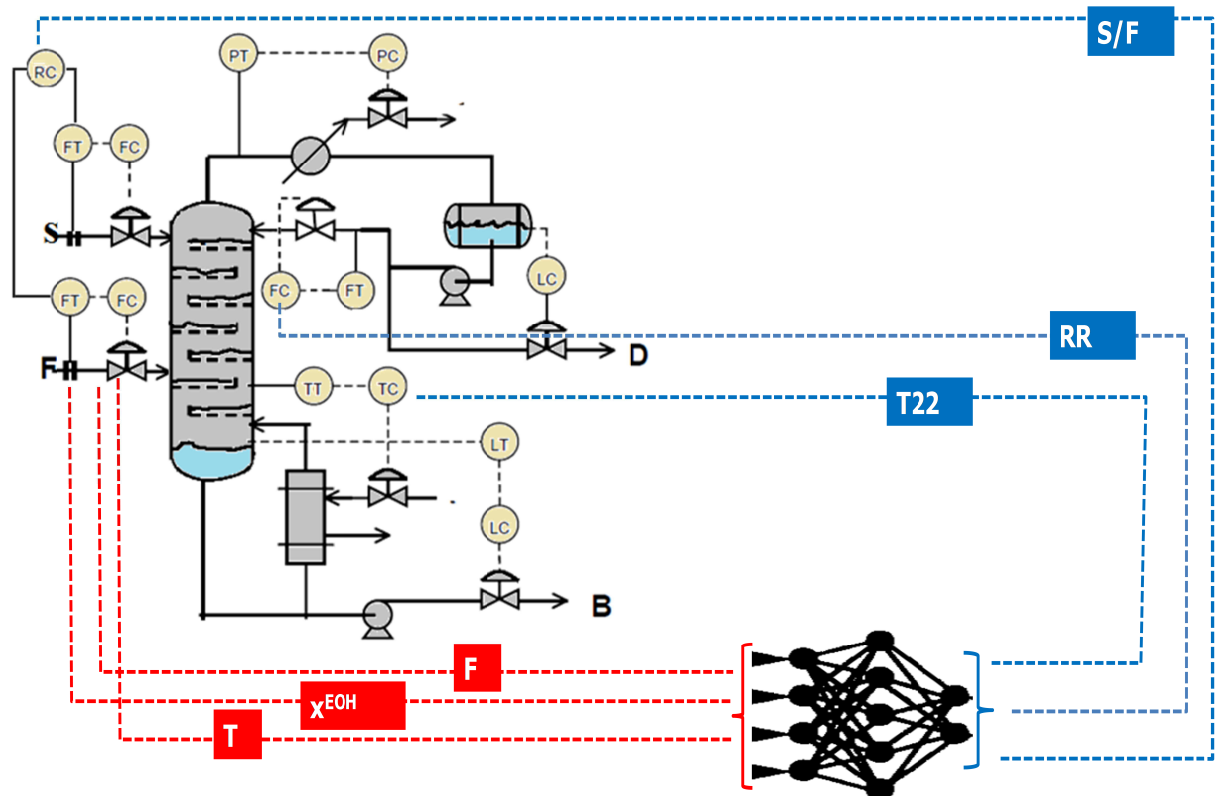


Tabela 3 – Comparação de métodos para determinação do prato ótimo de medição de temperatura.

Método	Estágio escolhido
Pratos sucessivos	22 ou 23
Simetria de sensibilidade	Inconclusivo
SVD da matriz de sensibilidade	22 ou 21
Método da máxima sensibilidade	22 ou 23

Os controladores de fluxo são do tipo proporcional-integral (PI), com as configurações recomendadas por Luyben (2002): $K_c = 0,5$ e $\tau_i = 0,3$ min. Os controladores de pressão e temperatura são do tipo proporcional-integral (PI), com $K_c = 20$ e $\tau_i = 12$ min; os valores padrões usados no *Aspen Plus Dynamics*TM.

6.2. Comunicação Aspen/Matlab com auxílio do Elipse Scada

A integração entre os sistemas *Aspen*TM, *software* utilizado para a simulação e controle e *Matlab*[®], *software* para o desenvolvimento da RNA, foi realizada com auxílio do software Elipse SCADA. O termo SCADA (*Supervisory Control And Data Aquisition*) na automação é utilizado para denominar sistemas de supervisão, controle e aquisição de dados, composto por um ou mais computadores, monitorando e/ou controlando um processo (MORSI; EL-DINO, 2014). Neste tipo de aplicação específica, *Aspen*TM e *Matlab*[®] funcionam como softwares clientes da comunicação e o SCADA como servidor. A Figura 9 apresenta um diagrama de bloco da comunicação entre os *Softwares*.

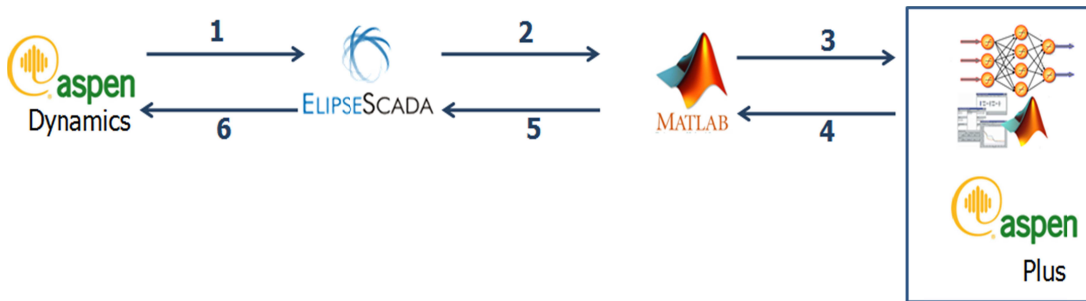
Em seguida definiram-se as variáveis de entrada e de saída do *Aspen*TM:

- Variáveis de saída (*Output Variable*) – Os dados são lidos da memória do *software* cliente (*Aspen*TM) e armazenados na memória do servidor (SCADA) em variáveis chamadas de *tagname*. Neste caso, as variáveis de saída do *Aspen*TM serão as variáveis de entrada da RNA.
- Variáveis de entrada (*Input Variable*) – O valor contido em um determinado *tagname* é escrito em um determinado endereço de memória do *software* cliente (*Aspen*TM). Neste caso, as variáveis de entrada, serão as saídas da RNA para mudança dos *setpoints* dos controladores presentes.

O *Matlab*[®] também funcionará como *software* cliente da comunicação e o SCADA como servidor. A função básica do SCADA será prover uma infra-estrutura de suporte aos grupos criados no *software* cliente (*Matlab*[®]). Além disso, cabe também a ele gerenciar aspectos relacionados à conexão com uma fonte de dados que neste caso será o *Aspen*TM. Ou seja, depois de já treinada a rede neural no *Matlab*[®], servirá como modelo matemático que tem como dados de entrada algumas variáveis provenientes do *Aspen*TM que são fornecidas ao *Matlab*[®] com o auxílio do SCADA (Figura 9).

Deve-se observar que o *Aspen Plus Dynamics*TM fornece dados para o *software* Elipse SCADA (1), em seguida tais dados são utilizados pelo *Matlab*[®] (2), o qual acessa sua ferramenta *Neural Networks Toolbox* (NNT) e fornece os dados que capturou do *Aspen Plus*TM como entrada da Rede Neural Artificial (3). Depois de treinada com os dados do *Aspen Plus*TM, a RNA retorna uma resposta (4). O valor da saída da RNA é disponibilizado no Elipse SCADA (5). O *Aspen Plus Dynamic*TM utiliza os dados provenientes do *Matlab*[®] com o auxílio do Elipse SCADA para modificar os *setpoints* dos controladores (6). Este mecanismo (1-2-3-4-5-6-1-2-3-4-5-6...) ocorre de forma dinâmica.

Figura 9 – Comunicação entre os Softwares.

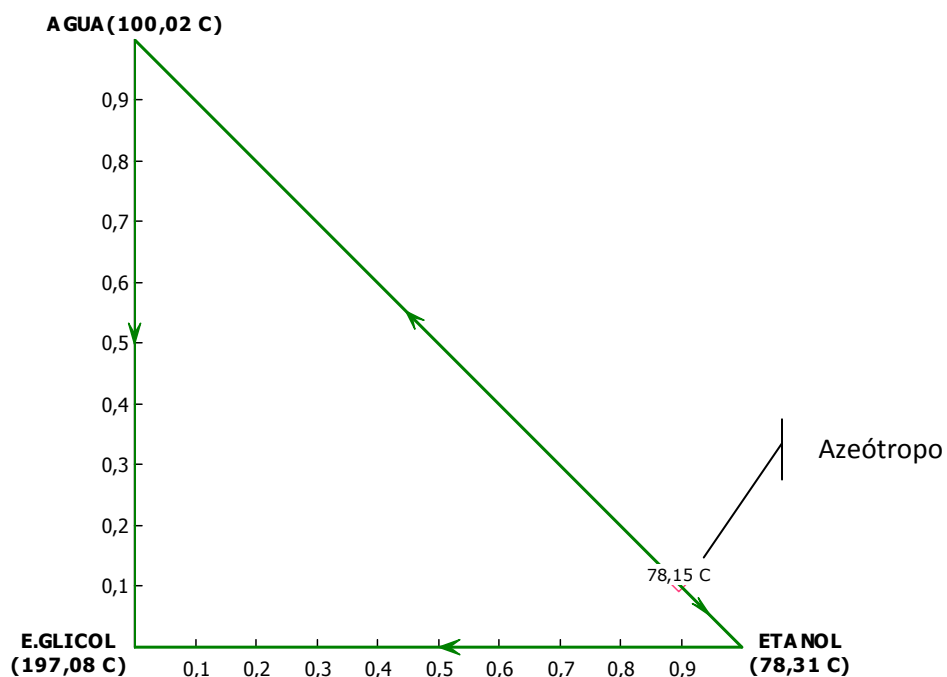


7. RESULTADOS E DISCUSSÕES

7.1. Regime permanente

Utilizando ferramentas de análise de propriedades do *Aspen PlusTM*, foi realizada a avaliação do comportamento do equilíbrio líquido-líquido-vapor da mistura etanol/água/etilenoglicol.

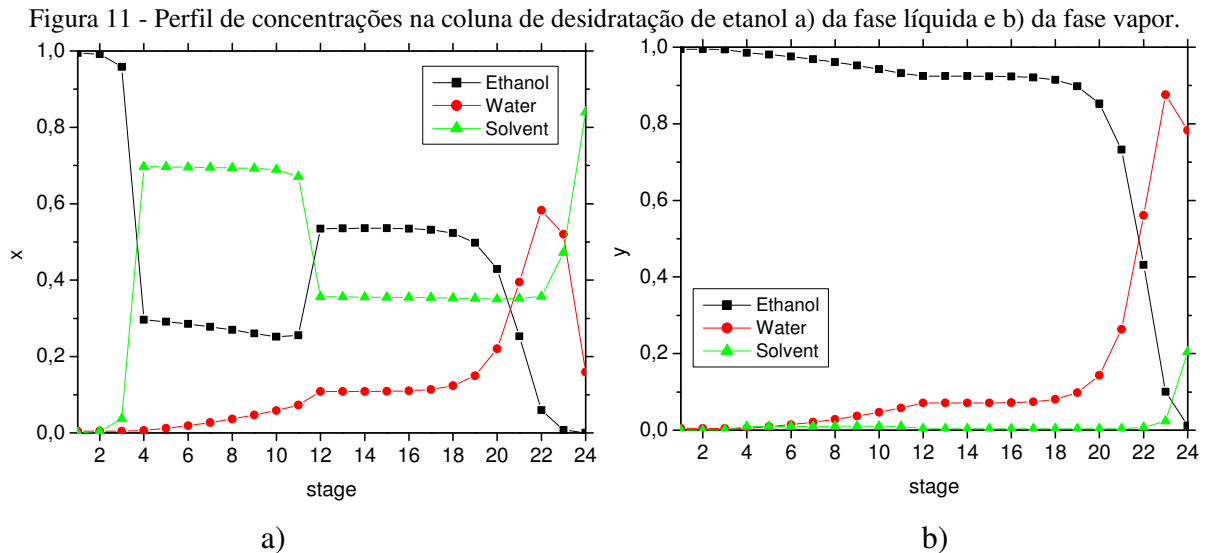
Figura 10 - Diagrama ternário em base molar à pressão de 1 atm.



A identificação da possível formação de azeótropos foi investigada na pressão de operação da coluna de destilação, mostrando que a mistura de etanol/água à pressão atmosférica forma um azeótropo de mínimo ponto de ebulição em 78,15 °C e que não há formação de um novo azeótropo com a adição do etilenoglicol. Além disso, é bastante rara a contaminação do produto de topo de uma coluna extrativa pelo solvente, devido à baixa pressão de vapor do solvente.

Em comparação com a destilação azeotrópica heterogênea, a destilação extrativa é mais estável operacionalmente, não forma novos azeótropos, e não forma uma segunda fase líquida. Segundo Bastidas (2010), a destilação extrativa representa a alternativa mais interessante com relação aos custos de energia e aos custos de investimento de capital.

O conhecimento dos perfis de concentração permite uma análise quantitativa e qualitativa da distribuição do etanol (*ethanol*), água (*water*) e solvente (*solvent*) na coluna de destilação extrativa. A Figura 11 mostra a concentração em cada estágio (*stage*) da destilação extrativa.



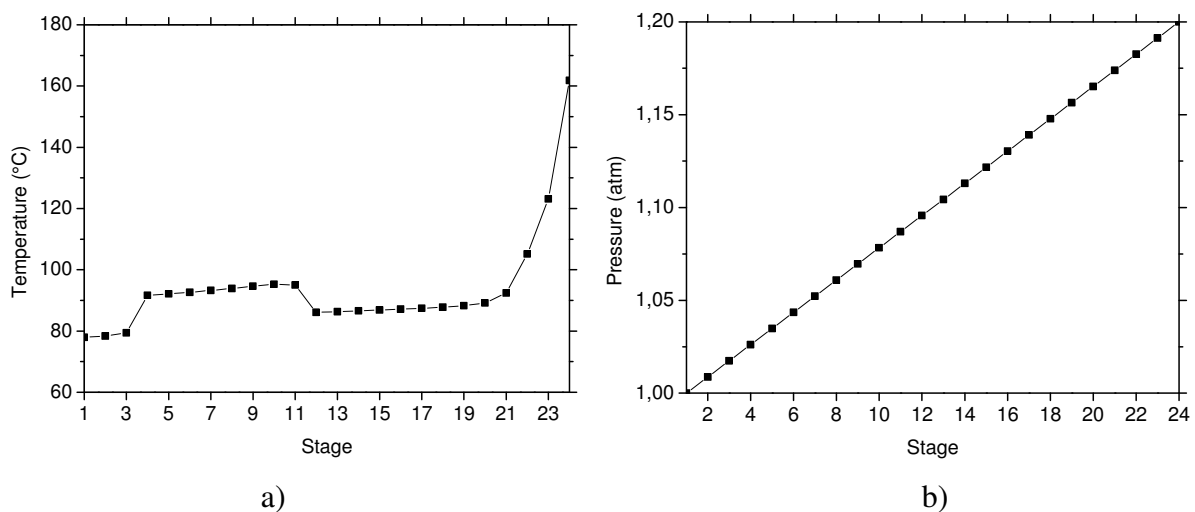
De acordo com a Figura 11, a primeira seção (seção de retificação) situada acima da introdução do solvente apresenta fração molar líquida (x) insignificante do mesmo e, conseqüentemente, é inefetiva para a separação da água e do etanol. Isso se dá porque nessa faixa de concentrações a volatilidade relativa desses componentes, sem a presença do etilenoglicol é praticamente igual a 1. De fato observa-se que as concentrações de etanol e água acima da introdução do solvente são praticamente constantes. A segunda região (seção extrativa), situada entre as alimentações do solvente e da mistura etanol/água apresenta uma concentração praticamente constante de solvente na fase líquida, enquanto os demais componentes sofrem pequenas alterações de um ponto a outro. Verifica-se que o solvente sofre uma redução brusca em sua concentração logo abaixo da introdução da mistura etanol/água. Isso pode ser explicado pelo fato da alimentação provocar a diluição do solvente nesta parte da coluna. Estes componentes por sua vez têm suas frações molares aumentadas nesta região da coluna. A água representa um máximo de concentração no final da coluna, próximo ao refeedor.

A baixa volatilidade do solvente aumenta, de forma acentuada, a vazão de líquido na coluna, sem um correspondente aumento de vapor. Por isso, deve-se ter maior cuidado no projeto das áreas de contato entre o líquido e o vapor, de forma a assegurar uma operação

estável e eficiente. Pois as altas taxas de escoamento de líquido reduzem o tempo de contato entre as fases em cada estágio da coluna, prejudicando a eficiência do processo.

A simulação confirma que fração de vapor (y) de agente extrativo ao longo da coluna é insignificante, relativamente aos outros componentes, com exceção do refeedor. A Figura 12 mostra tanto o perfil de temperatura (*temperature*) quanto o perfil de pressão (*pressure*) ao longo da coluna extrativa. Essa distribuição do solvente acaba por influenciar a temperatura criando uma região de máximo entre as duas alimentações (azeótropo e solvente).

Figura 12 - Perfis de temperatura e pressão na coluna de desidratação de etanol.



O refeedor atinge, em consequência da grande quantidade de solvente, altas temperaturas, o que pode exigir vapor de aquecimento a pressões relativamente mais elevadas.

A característica do perfil de concentração do solvente permite que a destilação extrativa seja tratada como se constituísse um sistema pseudobinário. A presença insignificante do agente extrativo na fase vapor, bem como as suas concentrações praticamente constantes em cada seção da coluna indica que ele é um componente que permanece à margem do processo de transferência de massa, isto é, ele próprio não se transfere, influenciando o processo apenas pelo seu efeito sobre o equilíbrio de fases e pelas suas propriedades físico-químicas, que podem afetar tanto o coeficiente de transferência de massa do filme líquido quanto à formação da área interfacial efetiva. Dessa forma, o sistema ternário original pode ser reduzido ao sistema binário água/etanol conforme descreve a Equações 34 e 35.

$$x_1' = \frac{x_1}{x_1 + x_2} = \frac{x_1}{1 - x_3} \quad (34)$$

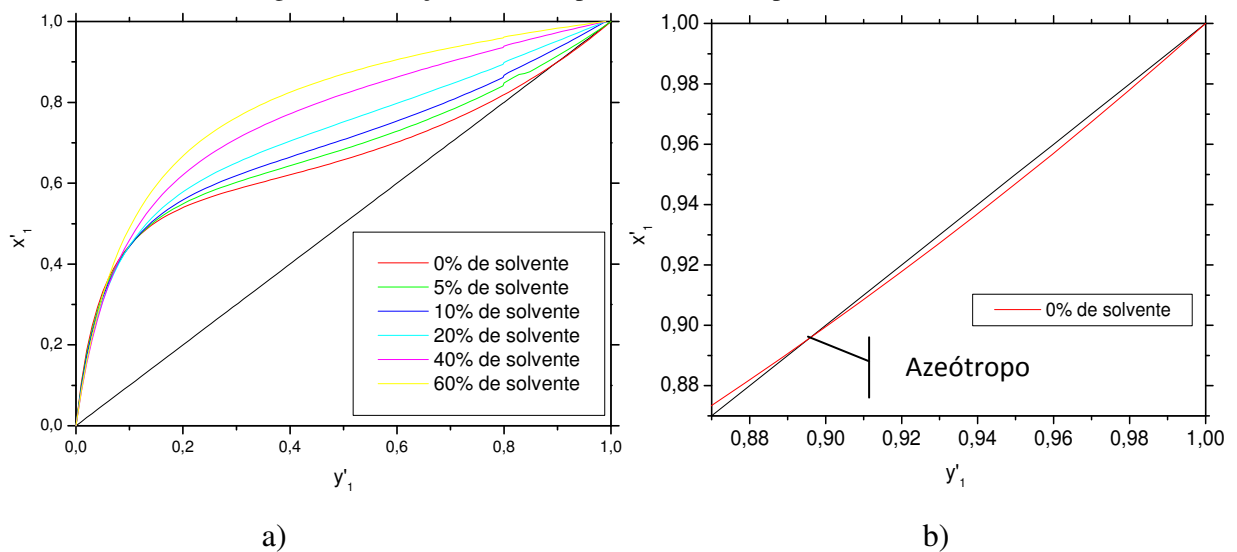
x_1 , x_2 e x_3 é a fração molar da fase líquida de etanol, água e solvente, respectivamente. E o apóstrofo indica a fração molar da fase líquida livre de solvente. Analogamente,

$$y_1' = \frac{y_1}{y_1 + y_2} = \frac{y_1}{1 - y_3} \quad (35)$$

y_1 , y_2 e y_3 é a fração molar da fase vapor de etanol, água e solvente, respectivamente. E o apóstrofo indica a fração molar da fase vapor livre de solvente.

De acordo com os resultados do *Aspen Plus*[®], na Figura 13b é possível verificar a formação de um ponto azeotrópico com uma fração molar de 89% de etanol sem a utilização de solventes. O sistema etanol/água/etilenoglicol foi também estudado, tendo seus diagramas pseudobinário (em base livre de solvente), representados na Figura 13a.

Figura 13 – Diagrama a) pseudo-binário para o sistema etanol/água/etilenoglicol e b) ampliação da região de formação de azeótropo sem solvente à pressão de 1 atm.



O diagrama pseudobinário, representado na Figura 13a, mostra como a volatilidade relativa é afetada pela razão de alimentação entre o solvente e azeótropo (S/F). Sem solvente, a mistura apresenta um ponto azeotrópico. Pode-se dizer o solvente tem a função de quebrar o azeótropo, e à medida que se vai aumentando essa quantidade, o comportamento da mistura assemelha-se a uma mistura binária ideal.

7.2. Escolha da RNA

A Tabela 4 descreve os melhores resultados de alguns tipos de redes *feedforward* MLP e recorrentes de Elman. O número de camadas ocultas e neurônios por camada é apresentado como o nome que identifica a rede neural. Por exemplo, a rede “2 3” indica que a RNA apresenta dois neurônios na primeira camada escondida e três neurônios na segunda camada escondida.

De acordo com a Tabela 4, a rede escolhida como a melhor opção foi a rede recorrente de Elman “10 4 8 10” com 4 camadas ocultas. De fato, observa-se que esta RNA apresenta o menor erro médio (MSE), o que indica que a rede converge para resultados bons, e o maior erro obtido com o conjunto de teste é pequeno comparativamente aos demais. Redes neurais recorrentes podem reutilizar a informação transformada, produzindo mapeamentos dinâmicos. A presença de realimentação de informação permite criar conexões internas e dispositivos de memória capazes de processar e armazenar informações temporais e sinais sequenciais (NERRAND et al., 1993).

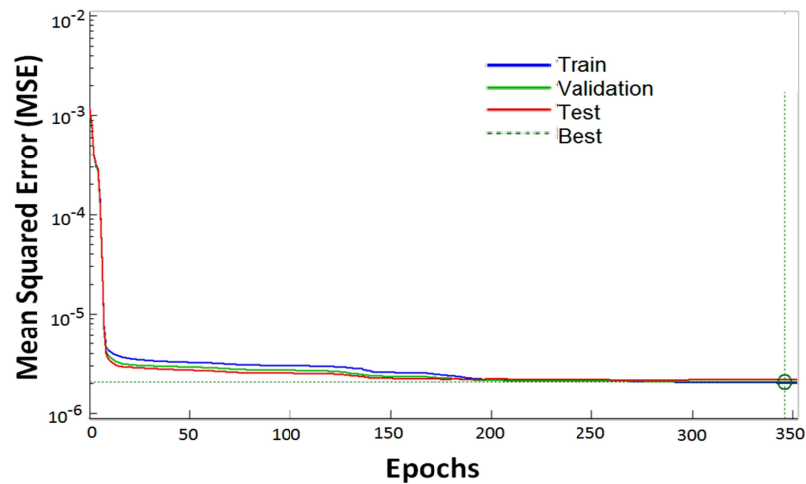
Tabela 4 – Resumo dos resultados das RNA.

Número de camadas ocultas	Número de neurônios por camada	Redes Feedforward MLP		Redes Recorrentes de Elman	
		MSE	Erro máximo	MSE	Erro máximo
2	“2 3”	3.21×10^{-6}	0.0298	3.05×10^{-6}	0.0277
2	“5 6”	3.13×10^{-6}	0.0193	2.85×10^{-6}	0.0193
2	“10 10”	3.03×10^{-6}	0.0194	2.97×10^{-6}	0.0208
3	“10 5 6”	2.94×10^{-6}	0.0223	3.55×10^{-6}	0.0221
3	“10 6 9”	2.97×10^{-6}	0.0204	2.84×10^{-6}	0.0197
3	“9 8 8”	2.76×10^{-6}	0.0199	2.51×10^{-6}	0.0183
4	“10 4 8 10”	2.44×10^{-6}	0.0185	2.01×10^{-6} **	0.0171**
4	“5 6 7 2”	2.64×10^{-6}	0.0187	2.58×10^{-6}	0.0190
4	“10 10 8 5”	2.49×10^{-6}	0.0206	2.22×10^{-6}	0.0182
4	“8 9 10 6”	3.10×10^{-6}	0.0189	3.14×10^{-6}	0.0192

** Melhores resultados

Figura 14 apresenta o gráfico da performance do treinamento (Train), validação (Validation) e teste (Test) para a rede neural escolhida.

Figura 14 - Desempenho da melhor RNA.



Pode-se perceber que erro médio quadrático (MSE) decresce com o aumento do número de épocas (*Epochs*) durante o treinamento: ele começa com um valor grande, decresce rapidamente e então continua diminuindo lentamente conforme a rede segue seu em direção a um mínimo local na superfície de erro. Tendo como objetivo uma boa generalização, é difícil perceber o melhor momento para parar o treinamento, se olharmos apenas para a curva de aprendizagem. É possível que a rede acabe sendo excessivamente ajustada aos dados de treinamento, se a sessão de treinamento não for encerrada no ponto certo.

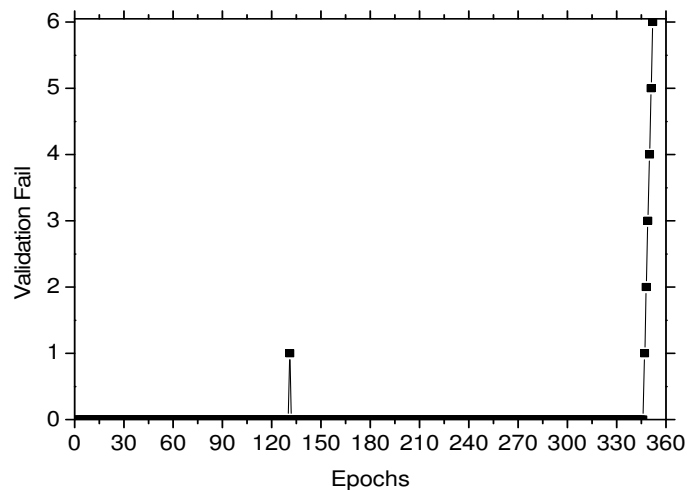
Podemos identificar o excesso de treinamento através do uso da validação cruzada representada pela curva verde na Figura 14. A sessão de treinamento é interrompida periodicamente (após um determinado número de épocas), e a rede é testada com um subconjunto de validação após cada período de treinamento. Mais especificamente, o processo periódico de estimação de validação prossegue como segue:

- Após um período de estimação (treinamento), os pesos sinápticos e os níveis de bias do *perceptron* de múltiplas camadas são todos fixos, e a rede opera no seu modo direto, para frente. O erro de validação é então medido para cada exemplo do subconjunto de validação.
- Quando a fase de validação é completada, o treinamento é reiniciado para um novo período, e o processo é repetido.

Quando olhamos para a curva de aprendizagem (Figura 14) pode parecer que poderíamos melhorar o desempenho indo além do ponto do mínimo na curva de aprendizagem de validação. Na realidade, entretanto, o que a rede aprende após este ponto é essencialmente o ruído contido nos dados de treinamento.

Observando os resultados na Figura 14 pode-se supor que a partir da época 346 a rede só aprenderia detalhes irrelevantes do conjunto de treinamento. O erro para dados de treinamento seria cada vez menor, mas o erro para dados novos (validação) seria cada vez mais alto. Neste projeto foi usado o seguinte critério de parada: Interromper o treinamento quando o erro de validação subir por 6 iterações consecutivas (*Validation Fail*), conforme mostra a Figura 15.

Figura 15 - Acompanhamento do processo de validação.



De acordo com a Figura 15 o erro com relação aos dados de validação subiu uma vez entre o número de épocas 100 e 150, em seguida começou a decrescer novamente. Este erro voltou a crescer a partir da época 347, sendo interrompido o treinamento quando este subiu por 6 iterações consecutivas. Logo, O método consiste em acompanhar a evolução do aprendizado nas curvas correspondentes aos subconjuntos de dados de treinamento e de validação.

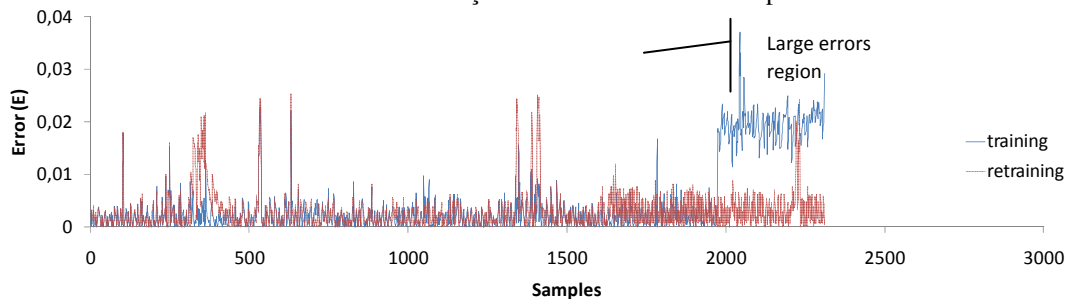
Na fase de testes da rede neural melhor classificada, utilizaram-se um conjunto de dados com 2311 vetores, diferentes daqueles empregados na fase de treinamento (*training*) e validação. Percebeu-se que para um determinado conjunto de pontos, os erros encontrados eram bastante superiores com relação aos demais, ou seja, nessa região de altos erros (*large*

erros region) a rede não estava suficientemente treinada. O erro absoluto (*Error*) de cada neurônio j (E_j) de cada amostra n (*Samples*) foi obtido de acordo com a Equação 36.

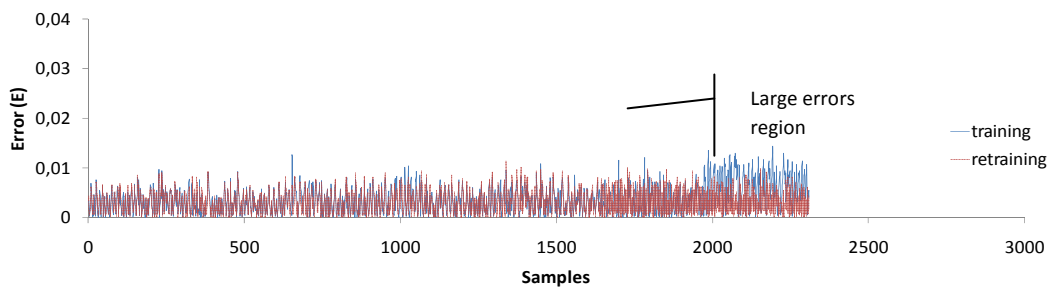
$$E_j(n) = \frac{|d_j(n) - y_j(n)|}{d_j(n)} \quad (36)$$

Para resolver esse problema, foi realizado um novo treinamento (*retraining*) da RNA com um acréscimo de 500 pontos ao redor da região deficitária. Dessa forma o *Soft Sensor* poderia melhorar o seu funcionamento. A Figura 16 mostra os erros encontrados para a rede de Elman escolhida.

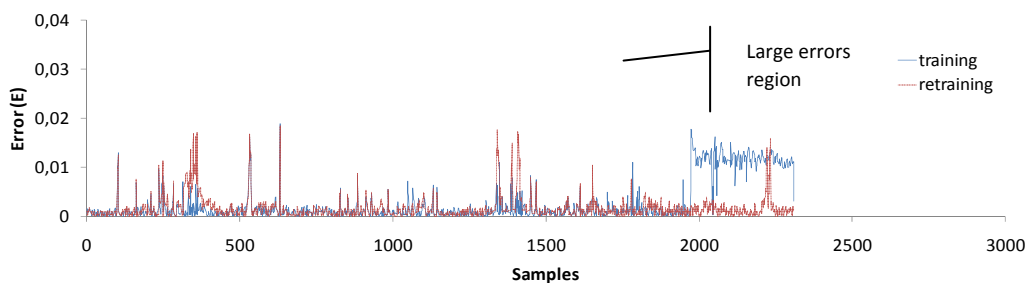
Figura 16 – Erros absolutos para as variáveis a) razão de refluxo, b) temperatura do prato 22 e c) razão de alimentação entre solvente e azeótropo.



(a)



(b)



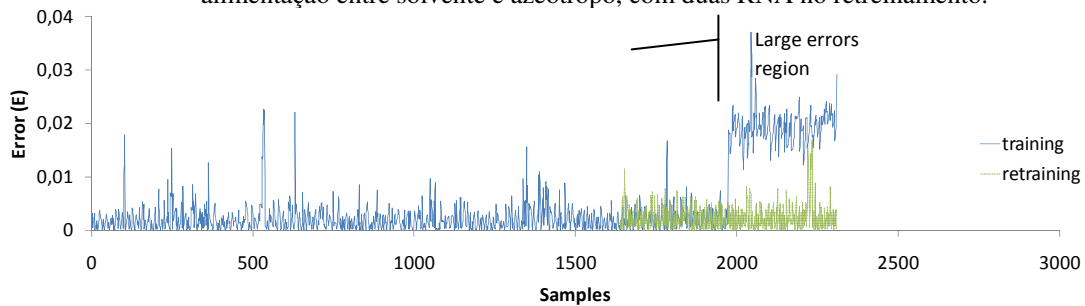
(c)

Fazendo uma análise dos resultados expostos na Figura 16, nota-se que o aumento do número de dados de treinamento conseguiu reduzir o erro na região deficitária, porém houve

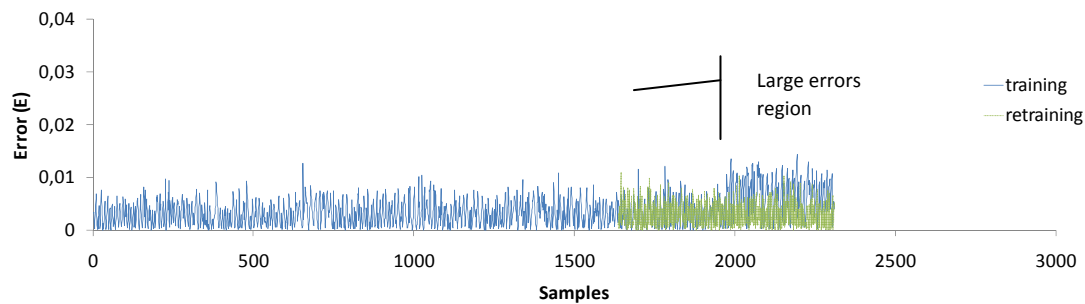
uma perda considerável na qualidade de estimação dos outros pontos, indicando que a condição obtida com o treinamento inicial foi perdida em parte.

Uma alternativa foi criar e treinar uma nova rede neural com as mesmas características da melhor rede já escolhida, atuando exclusivamente na região deficitária também com o acréscimo de novos pontos ao redor dessa região evitando o aumento de novos erros (Figura 17).

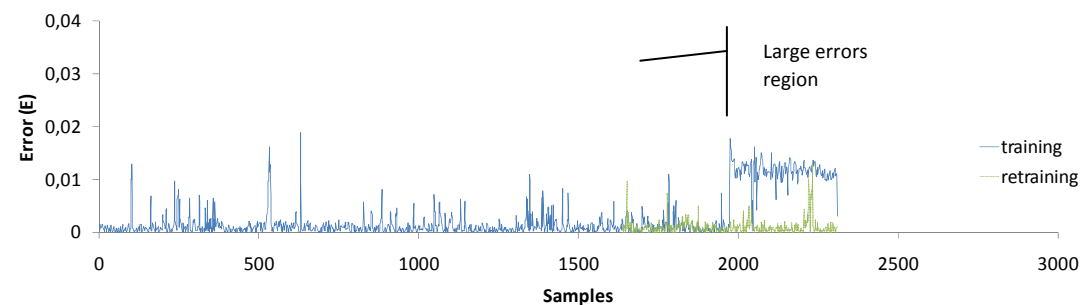
Figura 17 – Erros absolutos para as variáveis a) razão de refluxo, b) temperatura do prato 22 e c) razão de alimentação entre solvente e azeótropo, com duas RNA no retreinamento.



(a)



(b)



(c)

A Figura 17 mostra que o retreinamento utilizando duas redes neurais pode melhorar a região de maiores erros sem prejudicar as demais. Na utilização online para previsão dos *setpoints*, as RNA nunca atuam simultaneamente, pois cada uma é programada para atuar em regiões distintas e específicas onde é possível obter os menores erros.

7.3. Controle da destilação extrativa

Processo de destilação extrativa é a etapa final na produção de etanol. A coluna é alimentada com uma mistura etanol/água proveniente de uma coluna de retificação. As alterações nas condições desta coluna podem originar perturbações na composição de alimentação da coluna extrativa, assim como perturbações no fluxo e na temperatura.

A RNA escolhida foi testada para prever o melhor *setpoint* dos controladores presentes na coluna extrativa, com objetivo de manter a composição dos produtos dentro das especificações; ou seja, mantendo a composição molar do etanol no topo em 99,5% e uma perda pela base da coluna menor do que 0,1%. Logo, com os dados de entrada (distúrbios), o *Soft Sensor* calcula as variáveis de saída (*setpoints* dos controladores) baseadas no estado estacionário.

As Figuras 18, 19 e 20 mostram o comportamento da composição do etanol no destilado (x_D^{Ethanol}) diante distúrbios na alimentação em função do tempo (*time*), comparando o desempenho do sistema de controle com (*With ANN*) e sem o uso do controlador inteligente baseado em redes artificiais (*Without ANN*).

Figura 18 – Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para um distúrbio de a) -3,5% e b) +3,5% na composição de alimentação do azeótropo.

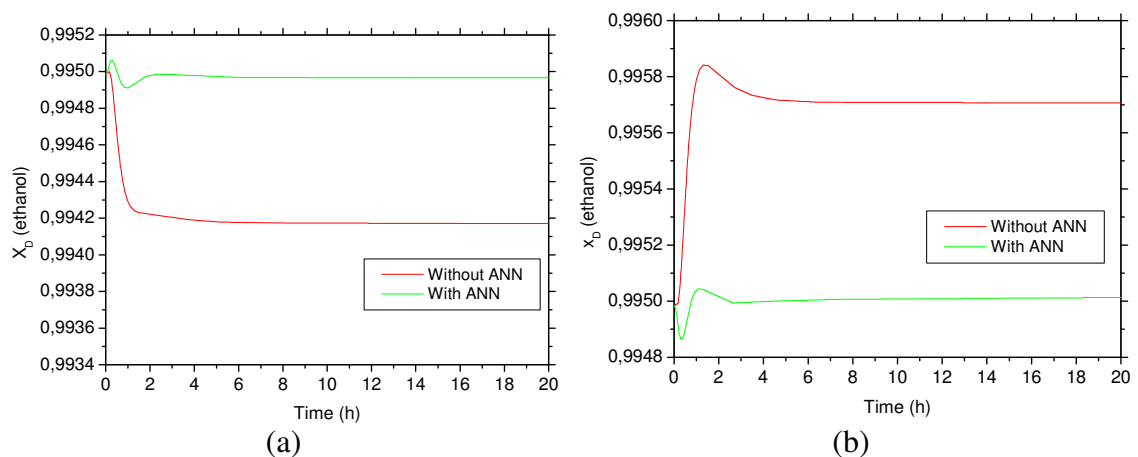


Figura 19– Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para um distúrbio de a) -10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.

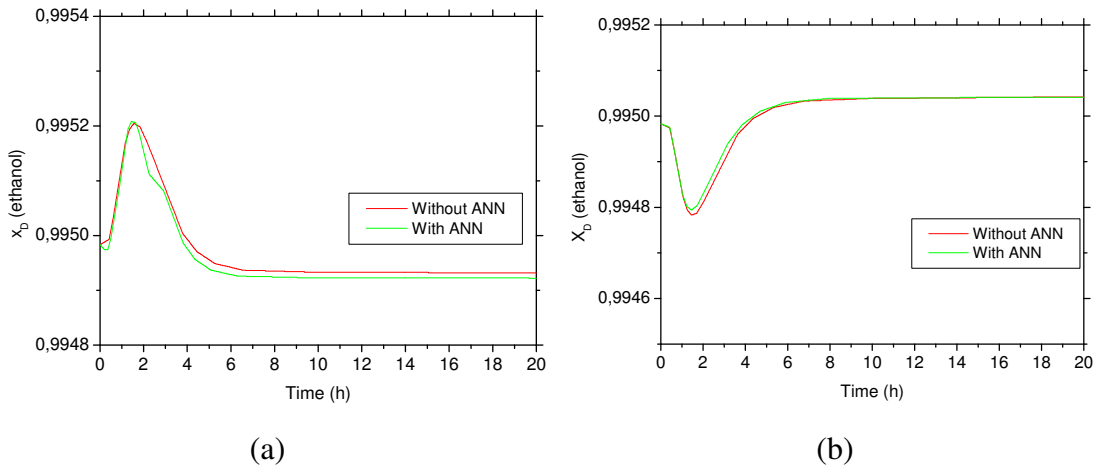
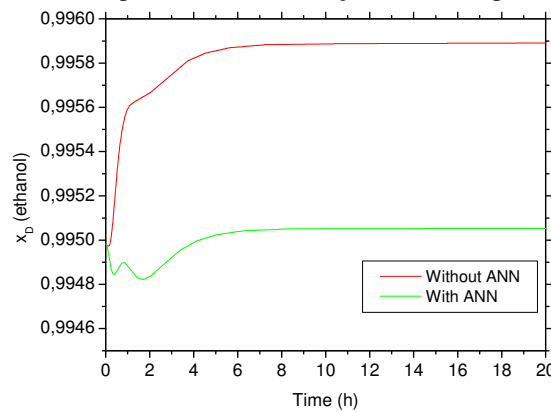


Figura 20 – Resposta dinâmica da composição de etanol no topo para distúrbios de -3,5%, -10% e +75% na composição, vazão e temperatura de alimentação do azeótropo, respectivamente.

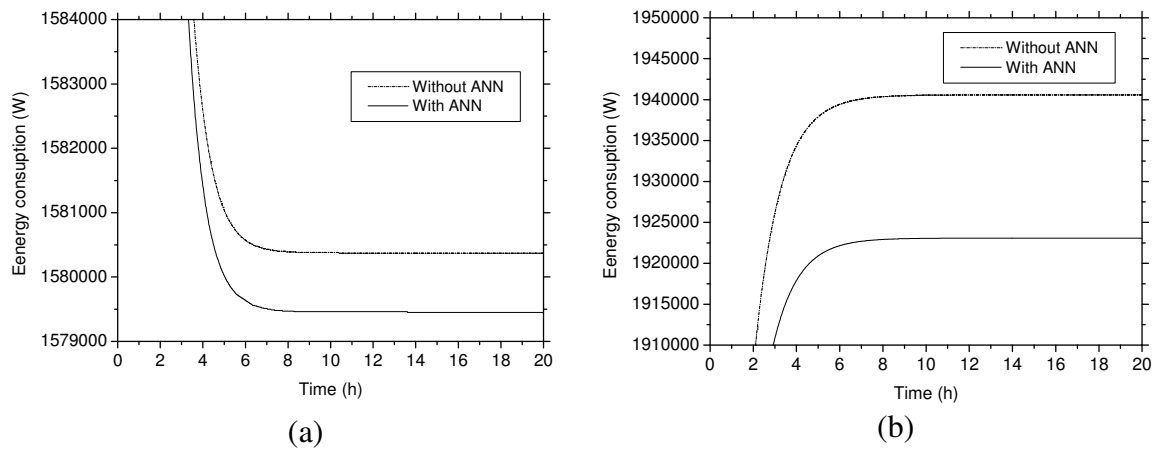


É importante perceber que o controle se torna mais difícil quando os distúrbios são simultâneos, fazendo com que as especificações dos produtos fiquem mais difíceis de serem atendidas. Logo, a estratégia de controle convencional, não foi capaz de manter a composição do produto dentro das especificações. Neste sistema, como as não-linearidades são muito grandes, o sistema tem dificuldades para controle da composição dos produtos em diferentes pontos de operação. Isto faz com que uma nova sintonia deva ser realizada para cada distúrbio.

O uso do controle inteligente tornou possível o sistema rejeitar bem as perturbações. Em todos os casos apresentados, o sistema de controle inteligente se mostrou suficiente para manter o processo nas condições desejadas. Deve-se lembrar que esse tipo de controle não só apresentou um desempenho satisfatório, mas também apresentou eficiência energética, ou seja, garantiu a qualidade dos produtos com o mínimo de consumo de energia (*energy consumption*) no refeedor; condição definida durante o treinamento da RNA. Por exemplo,

para distúrbios somente na vazão de alimentação, a estratégia convencional pode manter a qualidade do produto dentro das especificações, porém com um gasto energético maior com relação ao controle inteligente conforme mostra a Figura 21.

Figura 21 – Carga térmica do refeedor para um distúrbio de a)-10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.



As Figuras 22, 23 e 24 mostram o comportamento da composição do etanol na base da coluna (x_B^{Ethanol}) diante distúrbios na alimentação.

Figura 22 – Resposta dinâmica da composição de etanol na base para um distúrbio de a) -3,5% e b) +3,5% na composição de alimentação do azeótropo..

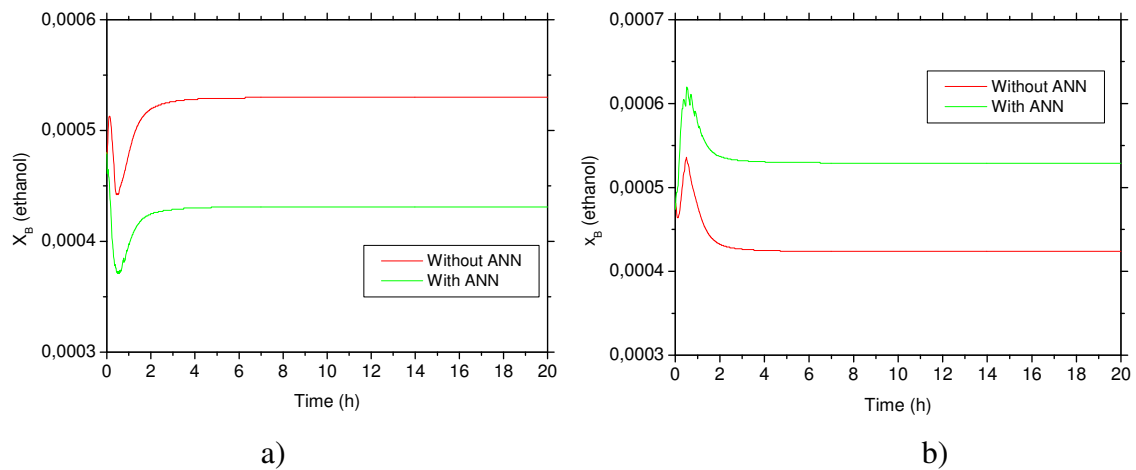


Figura 23– Resposta dinâmica da composição de etanol na base para um distúrbio de a) -10% e b) +10% na vazão de alimentação do azeótropo.

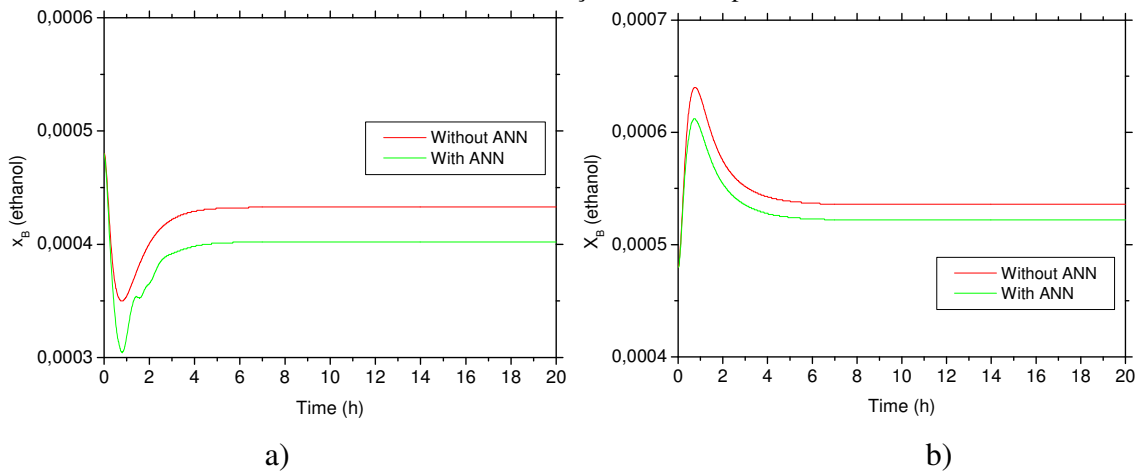
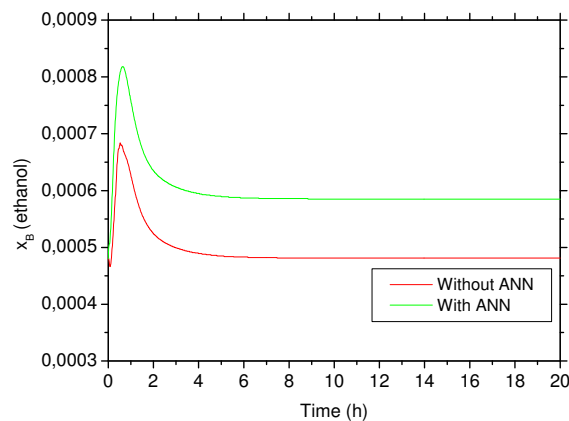


Figura 24 – Resposta dinâmica da composição de etanol na base para distúrbios de -3,5%, -10% e +75% na composição, vazão e temperatura de alimentação do azeótropo, respectivamente.

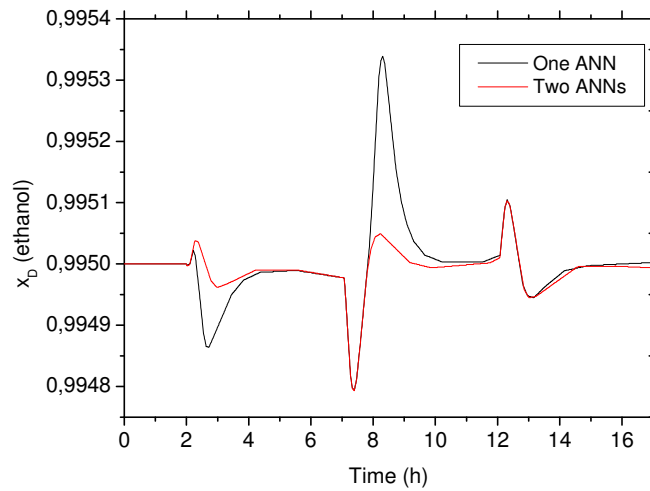


Para todas as simulações, a composição do produto de fundo não teve variações significativas, com a composição molar do etanol se mantendo em valores abaixo de 0,1%. Ou seja, não houve perdas de etanol pela base.

Observa-se que a abordagem de controle utilizando RNA requer medição da perturbação, ou seja, desde que o sistema está operante, os *setpoints* dos controladores têm sido automaticamente ajustados de acordo com os distúrbios da planta, permitindo o sistema de controle reagir antes que a qualidade do produto seja afetada.

A Figura 25 mostra que o erro de desempenho utilizando duas RNA (*two ANN*) é menor com relação ao uso de apenas uma rede (*one ANN*). Um erro de desempenho decorre do fato de que qualquer ajuste promovido por um sistema de controle leva um tempo para se concluir e, ao longo desse tempo, acumulam-se erros (e) de controle (valor desejado – *setpoint* – menos valor medido).

Figura 25 – Comparação do controle com mudança de setpoints utilizando uma RNA e duas RNA para diferentes distúrbios na composição da alimentação do azeótropo.



Para o transiente de ajuste como um todo, pode-se integralizar também o valor quadrático dos erros instantâneos (ISE) representado pela Equação 37, do que resulta um erro acumulado, global, integrado.

$$ISE = \int_0^{\infty} [e(t)]^2 dt \quad (37)$$

O valor do ISE para a simulação descrita na Figura 25 foi de $9,02 \times 10^{-8}$ e $2,4 \times 10^{-8}$ utilizando uma rede neural e duas redes neurais, respectivamente.

8. CONCLUSÕES

Observou-se que as perturbações introduzidas na coluna afetaram o desempenho da mesma, conseqüentemente afetou a composição dos produtos. Porém, foi constatado que o *Soft Sensor* foi capaz de prever a nova condição de regime diante as perturbações, fazendo mudanças nos *setpoints* dos controladores presentes na planta para manter o produto no topo e no fundo da coluna dentro das especificações.

Essa nova abordagem de controle é simples conceitualmente e pode ser implantada facilmente na indústria química, pois melhora o desempenho do controlador convencional, quando este adquire características *feedforward*. Sendo assim possível eliminar gastos adicionais com energia e custos complementares associados à obtenção de produtos fora de especificações.

A utilização do *software* SCADA se mostrou como uma alternativa interessante, pois como *software* de supervisão recebe do *Aspen*TM os sinais de algumas variáveis do processo e, de forma análoga, envia sinais para as variáveis manipuladas do sistema atuando nos elementos finais de controle. Além disso, a integração entre ferramentas computacionais de diferentes fabricantes se integradas de forma correta podem propiciar o surgimento de uma plataforma de comunicação que proporcionam uma interface mais amigável para operadores e engenheiros.

O sucesso de um *Soft Sensor* utilizando a técnica de redes neurais artificiais depende de uma análise consistente de um sistema complexo, implicando em dificuldades para definir qual topologia melhor responde às necessidades do problema proposto e na escolha de quais dados são relevantes para o processamento. A técnica utilizada neste trabalho mostra que é possível obter boa precisão na estimativa dos valores dos novos *setpoints* utilizando duas RNA sem aumentar o esforço computacional.

9. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Com o intuito de ampliar esse estudo, são feitas algumas sugestões para pesquisas futuras:

- Estudar outras variáveis no processo de destilação extrativa que possam substituir a composição do azeótropo como entrada do modelo baseado em RNA, pois composição é uma variável não diretamente mensurável;
- Fazer um estudo experimental do sistema de destilação extrativa, com controle inteligente, através da construção do processo em escala laboratorial;
- Testar a viabilidade da utilização das Redes Neurais Artificiais na detecção e diagnóstico de falhas em processo químico industriais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARIFIN, S., CHIEN, I. L. Design and control of an isopropyl alcohol dehydration process via extractive distillation using dimethyl sulfoxide as an entrainer. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 3, p. 790–803, 2008.
- BASTIDAS, P.A.; GIL, I.D.; RODRIGUEZ, G. Comparison of the Main Ethanol Dehydration Technologies through Process Simulations. *In 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering–ESCAPE-20*, Ischia, Italy, 2010.
- BISHOP, C. M. *Neural Networks for Pattern Recognition*. Clarendon Press, Oxford. 1995.
- BLACK, C., DISTLER, D. Dehydration of aqueous ethanol mixtures by extractive distillation. Extractive and azeotropic distillation. *Advances in Chemistry Series*, v. 115, p. 1–15, 1972.
- BRITO, R. P. *Processo de Destilação Extrativa: Modelagem Dinâmica, Simulação e Avaliação de Nova Configuração*. 202 f. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1997.
- CHIANESE, A.; ZINNAMOSCA, F. Ethanol dehydration by azeotropic distillation with a mixed-solvent entrainer. *The Chemical Engineering Journal*, v. 43, p. 59-65, 1990.
- DIAS, M. O. *Simulação do processo de produção de etanol a partir do açúcar e do bagaço, visando a integração do processo e a maximização da produção de energia e excedentes do bagaço*. 253 f. Tese (Mestrado) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas 2008.
- DIAS, M.; ENSINAS, A.; NEBRA, S.; MACIEL FILHO, R.; ROSSELL, C.; WOLF, M. Production of bioethanol and other bio-based materials from sugarcane bagasse: Integration to conventional bioethanol production process. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 87, p. 1206-1216, 2009.
- ENGELIEN, K.; SKOGESTAD, S. Selecting appropriate control variables for a heat integrated distillation system with prefractionator. *Comput Chem Eng.*, v. 28, n. 5, p. 683–691, 2004.
- FIGUEIRÊDO, M. F.; RAMOS, W. B.; BRITO, K. D.; Brito, R. P. Effect of Solvent Content on Controllability of Extractive Distillation Columns. *Computer Aided Chemical Engineering*. v. 202, p. 1607-1612, 2015.
- FIGUEROA, J. E. J. *Análise e otimização do processo de obtenção de etanol anidro, empregando líquidos iônicos*. 199 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2011.
- FIGUEROA, J. E. J. *Análise e otimização do processo de obtenção de etanol anidro, empregando líquidos iônicos*. 199 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2011.
- FRANCHI, C. M., *Aplicação de estratégias de controle em coluna de destilação*, Tese de Doutorado, Universidade Estadual de Maringá – UEM, 2010.

- GIL, I. D.; GOMEZ, J. M.; RODRÍGUEZ, G. Control of an extractive distillation process to dehydrate ethanol using glycerol as entrainer. *Computers and Chemical Engineering*, v. 39, p. 129-142. 2012.
- HAYKIN, S. *Redes Neurais: Princípios e prática*. Tradução: Paulo Martins Engel. Bookman, 2ª edição. Porto Alegre, 2001.
- HUMPHREY, J. L.; SIEBERT, A. F. Separation technologies: An opportunity for energy savings. *Chem Eng. Prog.*, v. 88, p.32-41, 1992.
- ITO, V. M. *Otimização de Coluna de Destilação Complexas*. 146 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2002.
- JAMES, S. C.; LEGGE, R. L.; BUDMAN, H. On-line estimation in bioreactors: A review. *Reviews in Chemical Engineering*. v. 16, n. 4, p.311-340, 2000.
- JUNQUEIRA, T. L. Simulação de colunas de destilação convencional, extrativa e azeotrópica no processo de produção de bioetanol através da modelagem de não equilíbrio e da modelagem de estágio de equilíbrio com eficiência. 165 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2010.
- JUNQUEIRA, T. L.; DIAS, M. O. S.; MACIEL, M. R. Wolf; MACIEL FILHO, R.; ROSSELL, C. E.V. . Simulation of anhydrous bioethanol production process using efficiency correlations for conventional and extractive distillation. *Distillation & Absorption*, p. 521-526, 2012.
- KANO, M; MIYAZAKI, K.; HASEBE, S.; HASHIMOTO, I. Inferential control system of distillation composition using dynamics partial least squares regression. *Journal of Process Control*, v. 10, n. 2, p. 157-166, 2000.
- LIU, H. On the levenberg-marquardt training method for feed-forward neural networks. *In Proceedings of the 2010 International Conference on Natural Computation, ICNC'10*, volume 1. 2010.
- LUCAS, M. *Sensor virtual inteligente para estimação de composição em colunas de destilação*. 204f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade de São Paulo, São Carlos-SP, 2012.
- LUYBEN, W. L. Evaluation of criteria for selecting temperature control trays in distillation columns. *Journal of Process Control*, v. 16, n. 2, p. 115–134, 2006.
- LUYBEN, W. L. *Plantwide dynamic simulators in chemical processing and control*. New York: Marcel Dekker, 2002.
- MEIRELLES, A.; WEISS, S.; HERFURTH, H. Ethanol dehydration by extractive distillation. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v.56, p.181-188, 1992.
- MEJDELL, T.; SKOGESTAD, S. Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 30, n. 12, p. 2555-2564, 1991.

- MORALES, L. I.; CONDE-GUTIÉRREZ, R. A.; HERNÁNDEZ, J. A.; HUICOCHEA, A.; JUÁREZ-ROMERO, D.; SIQUEIROS, J. Optimization of an absorption heat transformer with two-duplex components using inverse neural network and solved by genetic algorithm. *Applied Thermal Engineering*. v. 85, p. 322-333, 2015.
- MORSI, I.; EL-DIN, L. M. SCADA system for oil refinery control. *Measurement*. v. 47, p. 5-13, 2014.
- NERRAND, O., ROUSSEL-RAGOT, P., PERSONNAZ, L., DREYFUS, G. Neural Networks and Nonlinear Adaptive Filtering: Unifying Concepts and New Algorithms. *Neural Computation*, v. 5, n. 2, p. 165-199, 1993.
- NORILER, D. *Modelagem matemática e simulação numérica do escoamento líquido-vapor num prato de destilação*. 114 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 2003.
- OLIVEIRA, A. C.; GON, T. C. R.; MARRAFON, R. D.; REIS, M. H. M.. *Simulação do processo de destilação extrativa para produção de álcool anidro com diferentes solventes*. In: VIII CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA EM INICIAÇÃO CIENTÍFICA, 2009, Uberlândia. VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, 2009.
- PERRY, R. H.; CHILTON, C. H. *Manual de Engenharia Química*. 8. ed. Rio de Janeiro, Guanabara Dois, 2008.
- RAVAGNANI, M. A. S. S.; REIS, M. H. M.; MARCIEL FILHO, R. e WOLF-MACIEL, M. R. Anhydrous ethanol production by extractive distillation: A solvent case study. *Process Safety and Environmental Protection*, v. 88, n. 1, p. 67-73, 2010
- ROCHA, M. S. A. *Modelagem e simulação de colunas de destilação extrativa salina em regime transiente*. 114 f. Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas-SP, 1998.
- RODRIGUEZ-DONIS, I.; GERBAUD, V and JOULIA, X. Entrainer selection rules for the separation of azeotropic and close-boiling-temperature mixtures by homogenous batch distillation process. *Ind. Chem. Eng. Res.*, v. 40, p. 2729-2741, 2001.
- SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A., *Process dynamics and control*, 2nd edition, New York: John Wiley & Sons, 2004.
- SHEALY, G. S.; HAGEWIESCHE, D.; SANDLER, S. I. Vapor-Liquid Equilibrium of Ethanol/Water/N,N-Dimethylformamide. *J. Chem. Eng. Data*, v.32, n. 3, p. 366-969, 1987.
- SILVA, I.N.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. *Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas – curso prático*. Artiber editora. 2010.
- SILVA, J. N., *Determinação da região robusta de estabilidade e de desempenho inspirada nos princípios da estatística clássica*, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Campina Grande – UFCG, 2013.

- TAVAN, Y.; HOSSEINI, S. H. A novel integrated process to break the ethanol/water azeotrope using reactive distillation – Part I: Parametric study. *Separation and Purification Technology*. v. 118, p. 455-462, 2013.
- UDUGAMA, I. A.; MUNIR, T.; KIRKPATRICK, R.; YOUNG, B. R.; YU, W. High purity, high recovery, multi-component methanol distillation control. *Computer Aided Chemical Engineering*. v. 37, p. 1613-1618, 2015.
- VAN NESS, H.C., SMITH, J.M.; ABBOTT, M.M. *Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics*. 7 ed. Singapura: MacGraw-Hill International Editions, 2005.
- WOLF, M.; BRITO, R. Evaluation of the dynamic behavior of an extractive column for dehydration of aqueous ethanol mixtures. *Computer & Chemical Engineering*, v. 19, p. 405-408, 1995.
- ZANATA, D. R. P. *Desenvolvimento de sensor virtual empregando rede neurais para a medição da composição em uma coluna de destilação*. 229f. Dissertação de mestrado – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. 2005.
- ZHANG, G.; PATUWO, B. E.; HU, M. Y. Forecasting with neural network: the state of art. *Internacional of Forecasting*. v. 14, p. 35-62, 1998.
- ZHONGZHOU, C., M. A. HENSON, M. A.; BELANGER, P.; MEGAN, L. Nonlinear Model Predictive Control of High Purity Distillation Columns for Cryogenic Air Separation. *IEEE Transactions: Control Systems Technology*. v.18, n. 4, p. 811-821, 2010.

APÊNDICE - ARTIGO SUBMETIDO À REVISTA *CONTROL ENGINEERING PRACTICE*

INTELLIGENT CONTROLLER FOR HIGH PURITY EXTRACTIVE DISTILLATION COLUMNS

T. G. Neves, M. F. Figueirêdo, J. A. Monteiro, W. B. Ramos, and R. P. Brito

Federal University of Campina Grande – Chemical Engineering Department
Av. Aprígio Veloso, 882, Campina Grande – PB, 58429-900, Brazil

Abstract

This work aims to develop and implement an intelligent controller to use in an extractive distillation column that produces anhydrous ethanol using ethylene glycol as solvent. The concept of Artificial Neural Networks was used to predict new setpoints after disturbances, and proved to be a fast and feasible solution. The results showed that the intelligent controller is able to predict the new system condition for any disturbances from feeding the column by intelligently determining the new set-point of the controllers present in the original instrumentation of the column.

Keywords: Ethanol; Extractive Distillation; Artificial Neural Networks; Control; set-points.

1. Introduction and Problem Definition

The control of distillation columns is considered a complex task, as it is interactive, non-linear, is often not stationary and it is subject to restrictions. One of the major restrictions in the distillation process is related to the way the values of the product compositions are obtained, since the variable composition is generally not directly measurable and hence difficult to control (Mansouri et al., 2015).

Mejdell and Skogestad (1991) report in their work that one of the greatest difficulties faced in distillation column control is measuring the composition of the products, with gas chromatography being one of the most used techniques among the alternatives of physical analyzers; but this technique presents long delays in obtaining measurements and has high

operational costs. Furthermore, studies on dynamics and control for high purity distillation columns have different characteristics, making the control more complex (Zhongzhou et al., 2010; Udugama et al., 2015).

Some studies present an indirect method to measure the composition in real time. In these cases, a mathematical model of the process is constructed to infer the composition of the products through variables such as temperature, with low cost measurers, good accuracy and a fast response (Kano et al., 2003; Kalbani and Zhang, 2015).

When disturbances in the feed composition or feed flowrate in multicomponent columns occur, it is very difficult to maintain the composition of the product in its reference value through temperature control, since the temperature of the sensitive stage no longer exactly matches the product composition after these disturbances.

Gil and Rodríguez (2012) studied a conventional process of extractive distillation, where a control configuration was developed using temperature control with the composition being controlled without a direct measurement. According to the authors, the larger offsets are observed for disturbances in the azeotrope composition. Conventional extractive distillation uses a solvent that has a high boiling point, higher than the boiling point of the components to be separated. The addition of this solvent does not cause formation of a new azeotrope nor two liquid phases, unlike azeotropic distillation, which is one of the main separation methods together with extractive distillation for the production of anhydrous ethanol (Doherty and Malone, 2001; Figueiredo et al., 2015).

Considering an extractive distillation column with 24 stages for the production of high purity anhydrous ethanol, Figure 1 shows the desired temperature value of the sensitive stage (stage 22, counting from top to bottom), in order to maintain the compositions of the products within specifications when disturbances (flowrate, temperature and composition) in the feeding occur. According to Figure 1, it is possible to observe that difficulties are found to control the process when the option is to keep the temperature of the sensitive stage constant.

Therefore, a viable alternative to control the product composition in high purity extractive columns would be by changing the set-points when feed disturbances occur. This technique has not been found in the consulted literature, thus being a break of paradigms, as the various methodologies available to select the best composition control system use controllers with constant set-points.

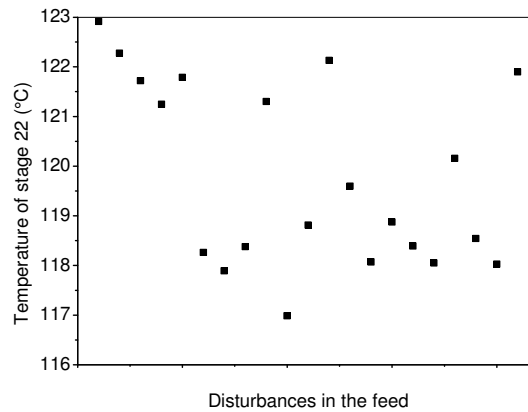


Figure 1 – Temperature of stage 22 of an extractive column to maintain the compositions of the products within specifications.

To predict new set-points before disturbances, it would be ideal to use a precise phenomenological model. However, the number of differential equations is very large in a distillation column, making this method impractical.

Artificial Neural Networks (ANN) offer an alternative approach to process modeling, since they do not require a priori knowledge of the phenomena involved. The ANN can "learn" through pre-existing patterns that describe the relationship between inputs and outputs in any phenomenon of the given process. Thus, the network receives "knowledge" of the environment and can handle complex and non-linear problems, processing information quickly and reducing the effort required for the development of the model (Haykin, 2009). ANN has received much attention due to its wide range of applicability and its ability to handle complex and non-linear problems. The main advantage in the use of ANN is that models are computationally simple, and have enormous processing power, speed and generality.

This study aims to develop an intelligent control system based on ANN, capable of maintaining the specifications of the distillate and bottom product of an extractive distillation column for anhydrous ethanol production, using ethylene glycol as solvent, through the intelligent determination of the set-points of the controllers present in the original instrumentation of the column.

2. Steady State Simulation

The software Aspen Plus™ was used to perform the steady state simulation. According to the process flowsheet in Figure 2, an azeotropic mixture of ethanol/water feed stream (AZEOTROP) is introduced to the extractive column for ethanol purification (COL1) and, at

a higher stage, the solvent of ethylene glycol feed stream (EG). These two streams come into contact and substantially pure ethanol comes out of the overhead stream (ETOH), whereas a mixture of ethylene glycol and water leaves the bottom stream (EG+H₂O). The vapor leaving the top of the column is condensed in a heat exchanger (EXCH1), and then flows to a reflux vessel (DRUM1). After the pump (PUMP1), the condensed overhead product is sent to a splitter (SPLIT1), with a portion being used for the reflux and the other is withdrawn as product (ETOH).

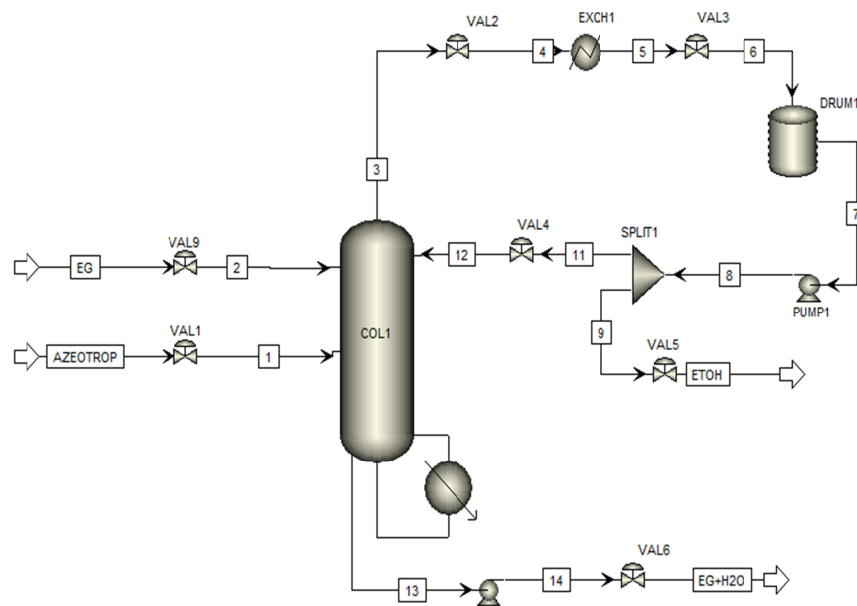


Figure 1 – Simplified flowchart of the extractive column for ethanol dehydration.

The RadFrac™ routine was used for modeling the column, which consists of a rigorous model for calculating the operations with multistage fractionation. The model allows for manipulating the efficiencies of the stages to approach real systems data, scaling trays, and evaluating hydraulic and thermal profiles, among others. The thermodynamic model chosen to represent the liquid phase is non-random two liquids (NRTL) which corresponds to experimental results; for the vapor phase, the Redlich-Kwong equation was used (Dias, 2009; Meirelles et al., 1992). The stage efficiency was considered 100% for all simulations.

The data for the simulation of obtaining anhydrous ethanol by extractive distillation used in this work are shown in Tables 1 and 2, and were based on literature reports (Meirelles et al., 1992; Dias, 2009; Junqueira, 2012; Gil and Rodríguez, 2012).

For an intelligent controller to perform well, it is necessary to have a wide range of data, which represent various operating conditions of the plant. This data will be used for training the ANN.

Table 1 – Process input streams' specifications.

Variables	Azeotrope	Solvent
Temperature (°C)	40	80
Pressure (atm)	2.5	2.5
Mole flowrate (kmol/h)	100	76.94
Mole composition of ethanol	0.85	-
Mole composition of water	0.15	-
Mole composition of ethylene glycol	-	1.0

Table 2 – Extractive column specifications.

Variables	Specifications
Number of stages	24
Reflux ratio	0.377
Top pressure (atm)	1.0
Bottom pressure (atm)	1.2
Solvent feed stage	4
Azeotrope feed stage	12
Distillate flowrate (kmol/h)	85.4

To obtain data outside the nominal regime, disturbances were applied to the following the variables of the azeotrope stream: temperature, flowrate and composition. For the different disturbance combinations, optimal values of the variables to be controlled for the reboiler to operate at minimum energy consumption were observed, thereby maintaining the product within specifications. This procedure was possible using the Model Analysis Tools/Optimization tool from Aspen Plus™, which uses the Sequential Quadratic Programming (SQP) method. The SQP method basically consists in solving the optimization problem iteratively, where the solution at each step is obtained by an approximate solution of the non-linear problem, and the objective function is replaced by a quadratic approximation and constraints are replaced by linear approximations.

The energy consumption of the distillation column reboiler (Q_R) was defined as the objective function (F_{obj}) to be minimized (Equation (1)), manipulated by the decision variables reflux ratio, solvent flowrate and distillate flowrate. The Model Analysis Tools/Constraint tool was used to insert the process constraints mole fraction of ethanol (x^{EOH}) and recovered mole fraction (FR^{EOH}) in distillate, according to Equations (2) and (3), respectively.

$$F_{obj} = Q_R \quad (1)$$

Subject to

$$x^{EOH} \geq 0.995 \quad (2)$$

$$FR^{EOH} \geq 0.999 \quad (3)$$

3. Intelligent Controller Using Artificial Neural Networks

During the development of intelligent controllers, the first step consists of collecting data relevant to the problem. The data used to the ANN training was obtained from the steady state simulations using Aspen Plus™:

- Input data: ethanol molar composition (x^{EOH}), temperature (T) and azeotrope feed flowrate (F) in azeotrope stream – excited variables;
- Output data: temperature of stage 22 (T_{22}), reflux ratio (RR) and solvent azeotrope feed ratio (S/F).

The second step was to choose the best network architecture. This step selects the number of layers, the number of units in each one of them, the type of activation function and the training algorithm. It was decided to select two different types of architectures and evaluate them according to their performance related to the problem data. The selected networks were:

- Feedforward backpropagation network: network without feedback, where information is distributed to the network in only one direction.
- Elman recurrent network: this network has an added feedback in its feed layer of the outputs of this layer to the input thereof. This makes it capable of storing passed information.

The ANN created in this work consists of two hidden layers, in addition to the input and output layer. In this step, the tangent sigmoid activation function (tansig) was used for all layers, since it showed good results with respect to the other one tested. The number of hidden neuron layers was set empirically, however the number of neurons in the input layer and output layer is determined in accordance with the problem.

It was possible to train the network from the steady state data collected from Aspen Plus™. The ANN training method used in this work was the Levenberg-Marquart algorithm, as it is a variation of the standard backpropagation that uses the second derivative as a means of optimization. According to Silva et al. (2010), the algorithm is able to conduct the training of artificial neural networks faster than traditional algorithms. During the training step, the

weights and bias are iteratively adjusted for each set of received data to minimize the network performance function, as shown in Figure 3.

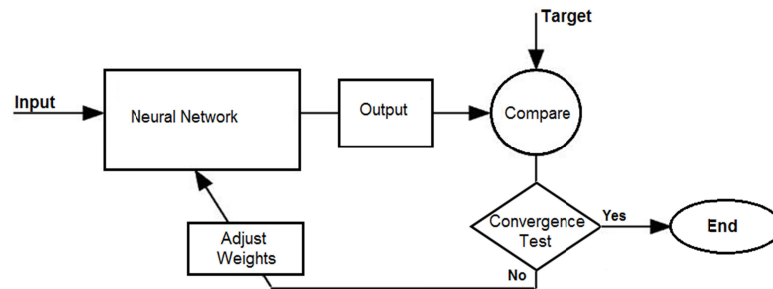


Figure 3 – Block diagram representing a learning ANN.

The performance function reports the degree of ANN convergence; this makes it possible to know how well the ANNs are learning the patterns presented during the training. The commonly used error function is *MSE* (Mean Square Error) given by:

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (d_j - y_j)^2 \quad (4)$$

where d_j is the desired output, y_j is the output generated by the network and n is the number of patterns presented. Therefore, this function was used to calculate the error between the output generated by the network and the desired output.

Unlike forecasting final properties, the modeling adopted with neural networks is predicting intermediate variables. This means that it is possible to predict the values of the set-points (ANN output) required to maintain product specifications (desired process outputs) through disturbances in the transient state identified by the ANN.

4. Dynamic simulation

The steady state process file from Aspen Plus™ was reviewed after the optimization procedure of the nominal state in relation to pressure (Pressure Check), and then it was exported to Aspen Plus Dynamics™, in which there are suggestions for basic control.

A basic scheme of regulatory control must be initially determined:

- Feed flowrate control to ensure a constant flow;
- Top pressure of the column by manipulating the condenser duty;
- Reflux vessel level by manipulating the distillate flowrate;
- Sump level by manipulating the bottom product flowrate.

Subsequently, the following controllers were added:

- Reflux ratio by manipulating the reflux flowrate (Arifin and Chien, 2008);
- Temperature of stage 22 by manipulating the reboiler heat duty;
- Ratio between the solvent and azeotropic feed flowrates (S/F) by manipulating the solvent flowrate (Gil and Rodríguez, 2012).

The developed ANN receives the following data from azeotropic feed: temperature, flowrate and composition. Then the ANN estimates the temperature of stage 22, reflux ratio and the S/F ratio, with values that will be the set-points of the controllers present in the plant, and whose purpose is to keep the overhead and bottom products of the distillation column within specifications. Thus, feeding disturbances are fed into the model using the ANN, which provides a feedforward response. The configuration of the proposed control configuration is summarized in Figure 4.

To apply the temperature control, a sensitive stage was identified based on the following methods: successive stages, symmetry of sensitivity, maximum sensitivity and singular value decomposition (SVD); Table 4 shows the obtained results. The sensitivity analysis was made in open loop with disturbances of $\pm 5\%$ in the reboiler heat duty. The two most sensitive stages were determined in each analysis.

According to Table 3, it can be seen that the stage 22 showed the best results regarding sensitivity, being chosen as the "control stage."

The flowrate controllers are proportional-integral (PI) with $K_c = 0.5$ and $\tau_i = 0.3$ min (Luyben, 2002). The pressure and temperature controllers are proportional-integral (PI) with $K_c = 20$ and $\tau_i = 12$ min (Aspen Plus Dynamics™ default values).

The integration between Aspen™ and Matlab® was performed using the Elipse SCADA software. The term SCADA (Supervisory Control and Data Acquisition) in automation is used to describe supervision, control and data acquisition systems, consisting of one or more computers, monitoring and/or controlling a process (Morsi and El-Din, 2014). In this type of specific application, Aspen™ and Matlab® work as communication client software and Elipse SCADA as a server. Figure 5 shows a block diagram of the communication between the software.

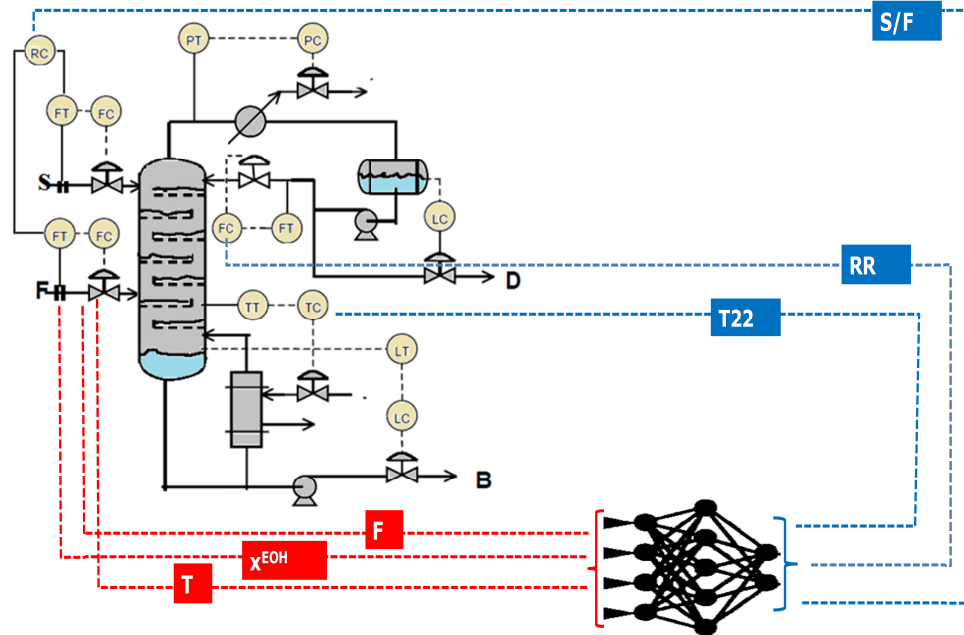


Figure 4 – Diagram of the intelligent control using ANN.

Table 3 – Comparison of methods for determining the optimal stage for temperature measurement.

Method	Chosen stage
Successive stages	22 or 23
Symmetry of sensitivity	Inconclusive
SVD from the sensitivity matrix	22 or 21
Maximum sensitivity	22 or 23

It should be noted that Aspen Plus Dynamics™ provides data to the Ellipse SCADA software (1); then such data is used by Matlab® (2); which accesses its Neural Networks Toolbox (NNT) tool and provides the data captured from Aspen Plus™ as input to the ANN (3); which was trained with Aspen Plus™ data and returns a response (4). The value of the ANN output is available on Ellipse SCADA (5). Then Aspen Plus Dynamics™ uses the data from Matlab® with the support of Ellipse SCADA to modify the set-points of the controllers (6). This mechanism (1-2-3-4-5-6-1-2-3-4-5-6 ...) occurs dynamically.

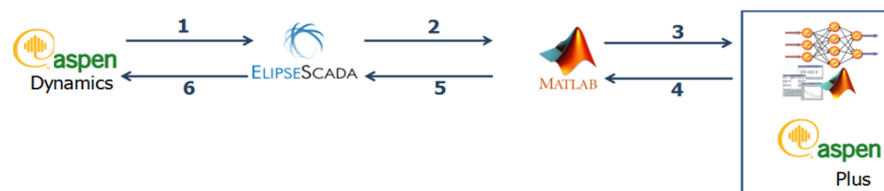


Figure 5 – Communication between the software.

5. Choosing the Artificial Neural Network

Table 4 gives the best results of some types of feedforward, MLP networks and recurrent Elman. The number of hidden layers and neurons per layer is presented as the name that

identifies the neural network. For example, the network "2 3" indicates that the ANN has two neurons in the first hidden layer, and three neurons in the second hidden layer.

Table 4 – Summary of the results of the ANN.

Number of hidden layers	Number of neurons per layer	Feedforward MLP networks		Recurrent Elman Networks	
		MSE (x10 ⁶)	Maximum error	MSE (x10 ⁶)	Maximum error
2	"2 3"	3.21	0.0298	3.05	0.0277
2	"5 6"	3.13	0.0193	2.85	0.0193
2	"10 10"	3.03	0.0194	2.97	0.0208
3	"10 5 6"	2.94	0.0223	3.55	0.0221
3	"10 6 9"	2.97	0.0204	2.84	0.0197
3	"9 8 8"	2.76	0.0199	2.51	0.0183
4	"10 4 8 10"	2.44	0.0185	2.01**	0.0171**
4	"5 6 7 2"	2.64	0.0187	2.58	0.0190
4	"10 10 8 5"	2.49	0.0206	2.22	0.0182
4	"8 9 10 6"	3.10	0.0189	3.14	0.0192

** Best results.

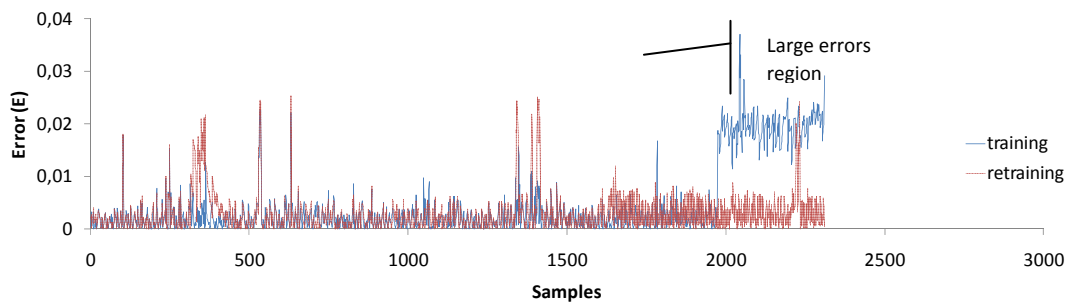
According to Table 4, the network chosen as the best option was the Elman recurrent network "10 4 8 10" with 4 hidden layers. In fact, it is observed that this ANN has the lowest mean squared error (MSE), which indicates that the network led to good results, and the largest error obtained in the test set is small compared to the others. Recurrent neural networks can reuse the transformed information, producing dynamic mappings. The presence of feedback information allows for creating internal connections and memory devices capable of processing and storing temporal information and sequential signals (Nerrand et al., 1993).

During the testing phase of the highest ranked neural network, we used a data set with 2311 vectors, different from those used in the training and validation phase. For a given set of points, we observed that the errors found were quite higher compared to the others; therefore, the network in this region was not sufficiently trained. The absolute error (E) for each sample (j) was obtained according to Equation (5).

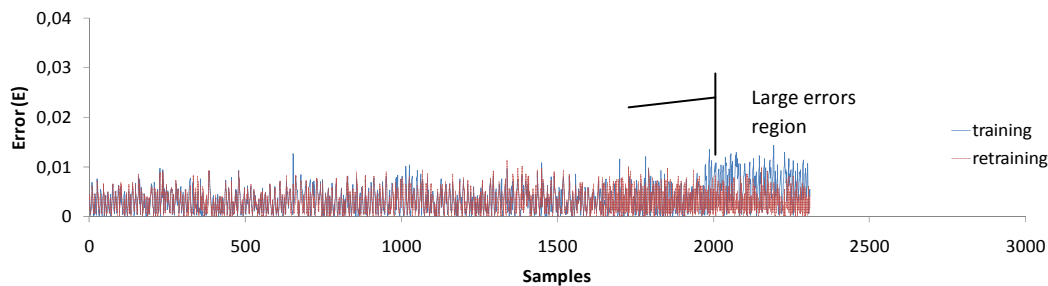
$$E = \frac{|d_j - y_j|}{d_j} \quad (5)$$

To solve this problem, a new ANN training was performed with an increase of 500 points around the deficit region. Thus, it was possible to improve its operation and avoid new errors. Figure 6 shows the errors found for the chosen Elman network.

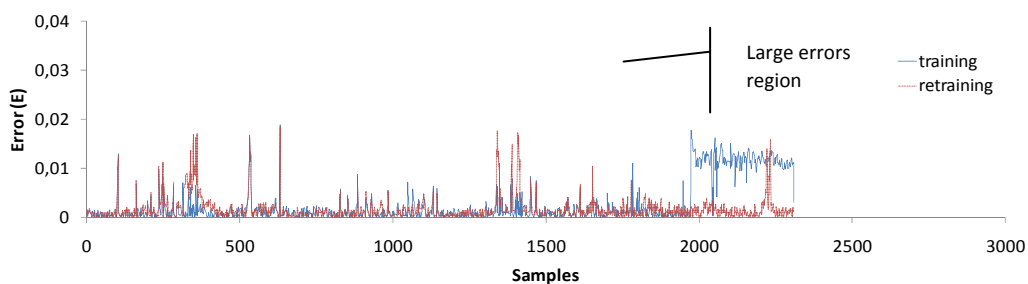
In analyzing the results shown in Figure 6, it can be noted that the increase in the number of training data managed to reduce the error in the deficit region, but there was a considerable loss in the estimation quality of other points, indicating that the condition obtained with the initial training was lost. An alternative was to create and train a new ANN with the same features of the best network already chosen, acting exclusively in the deficit region, and also with the addition of new points around this region (Figure 7).



(a)



(b)

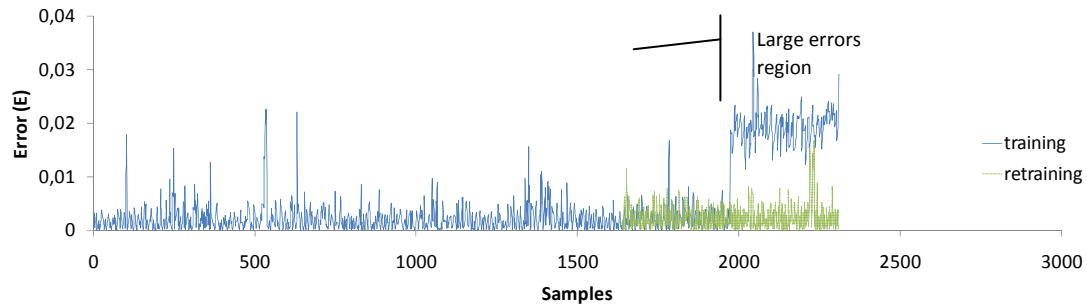


(c)

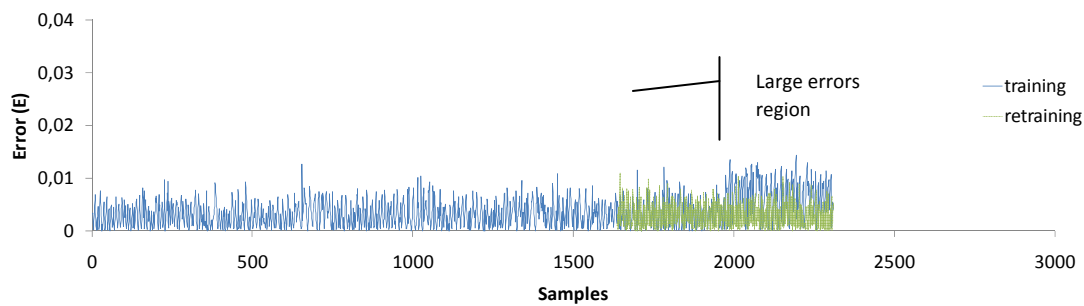
Figure 6 – Absolute errors for the variables (a) reflux ratio, (b) temperature of stage 22 and (c) S/F ratio.

Figure 7 shows that the retraining using two neural networks can improve the large errors region without damaging the other, and this reflects better control of product composition as is shown next. To predict the set-points in on-line use, the two ANNs never act

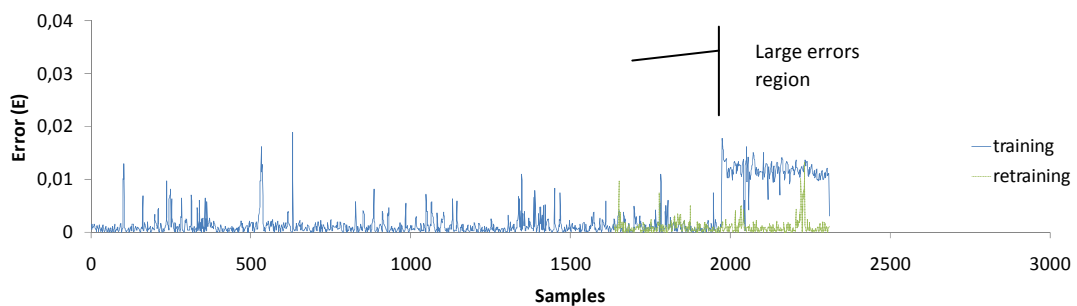
simultaneously, since each is programmed to operate in distinct and specific regions where the smallest errors are observed.



(a)



(b)



(c)

Figure 7 – Absolute errors for the variables (a) reflux ratio, (b) temperature of stage 22 and (c) S/F ratio, with two ANN in the retraining.

6. Control System Performance

The intelligent controller developed was tested with the aim to maintain the ethanol composition at the top at 99.5 mol%, and a loss lower than 0.1 mol% at the bottom stream of the column for disturbances in the azeotropic feed stream.

Figures 8, 9 and 10 show the ethanol composition behavior of the top product from disturbances in feed stream, by comparing the performance of the control system with and without the use of the intelligent controller.

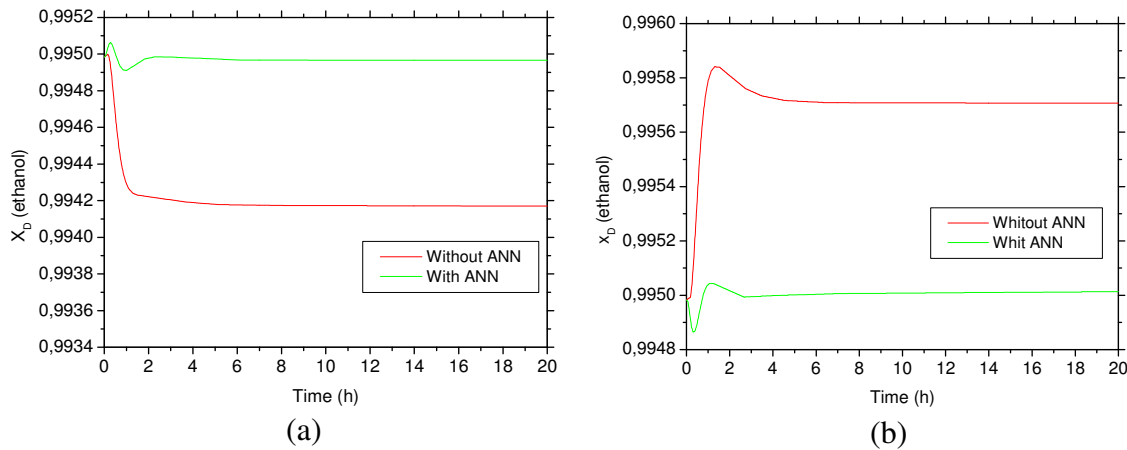


Figure 8 – Dynamic response to a disturbance of -3.5% (a) and + 3.5% (b) in the azeotrope feed composition.

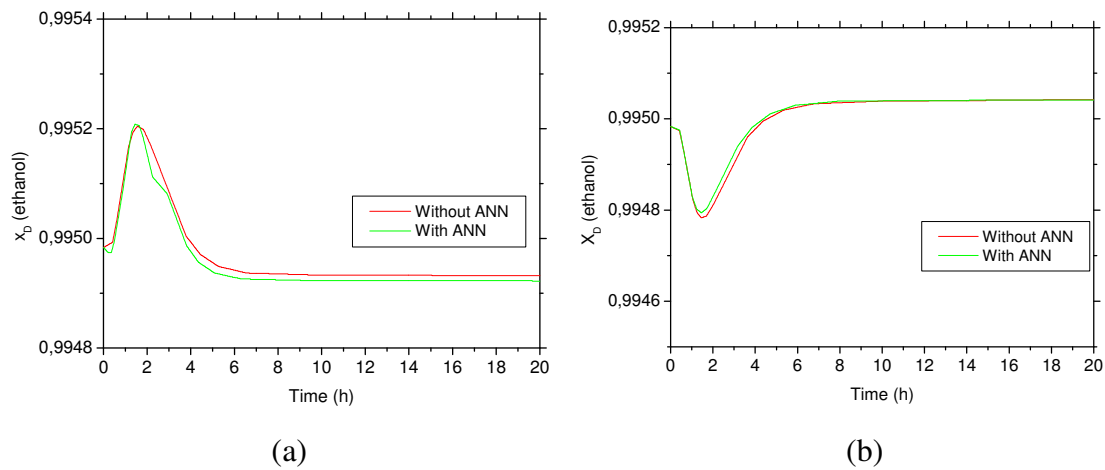


Figure 9 – Dynamic response to a disturbance of -10% (a) and + 10% (b) in the azeotrope feed flowrate.

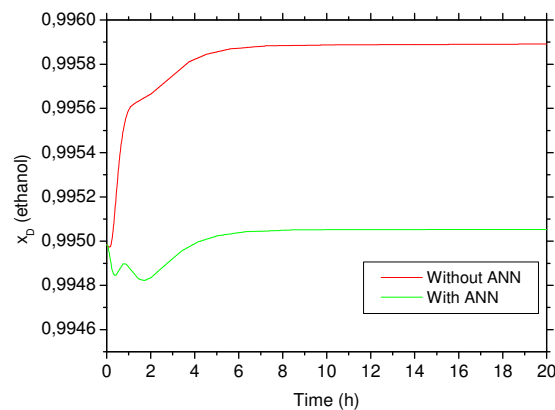


Figure 10 – Dynamic response for -3,5%, -10% e +75% simultaneous disturbances in composition, flowrate and temperature, respectively, of the azeotrope feed.

It is important to highlight that the control becomes more difficult when the disturbances are simultaneous, so that product specifications are more difficult to reach. Hence, the control without ANN was not able to maintain the composition of the product within specifications.

With ANN, the system can reject disturbances well. The intelligent control system proved to be enough to keep the process under the desired conditions in all cases presented.

It must be emphasized that this type of control not only presented satisfactory performance, but also presented energy efficiency, meaning it guarantees the quality of the products with minimum heat duty and the optimized condition during training the ANN. For example, for disturbances only in the feed flowrate, the control without ANN can maintain the quality of the product within specifications, but with greater energy consumption when compared to using the intelligent control, as shown in Figure 11.

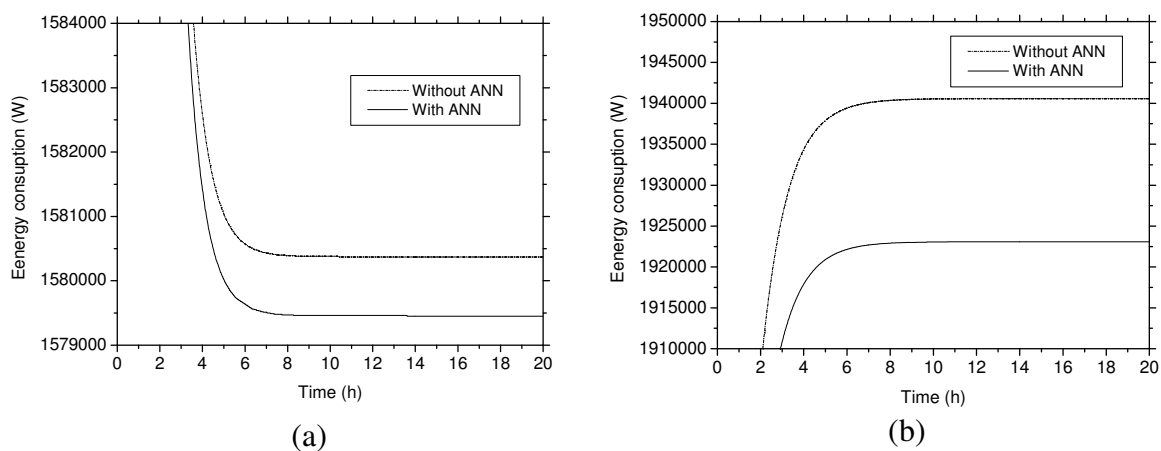


Figure 11 – Dynamic response of reboiler heat duty for disturbances of -10%(a) and + 10%(b) in the azeotrope feed flowrate.

Figure 12 shows that the performance of the intelligent control using two ANN is smaller compared to the use of only one network. A performance error stems from the fact that any adjustment promoted by a control system takes a while to complete, and during that time, accumulate control errors (desired value - set-point - less measured value).

For the transient adjustment as a whole, the value of the instantaneous error (ISE), represented by Equation (6), can also be obtained, resulting in a cumulative global error, which depends on the values of the controller action constants.

$$ISE = \int_0^{\infty} [e(t)]^2 dt \quad (6)$$

The value of ISE for the simulation depicted in Figure 12 was 9.02×10^{-8} and 2.4×10^{-8} , using one and two neural networks, respectively.

For all the simulations, the bottom product composition had no significant changes, with the ethanol composition remaining below 0.1%.

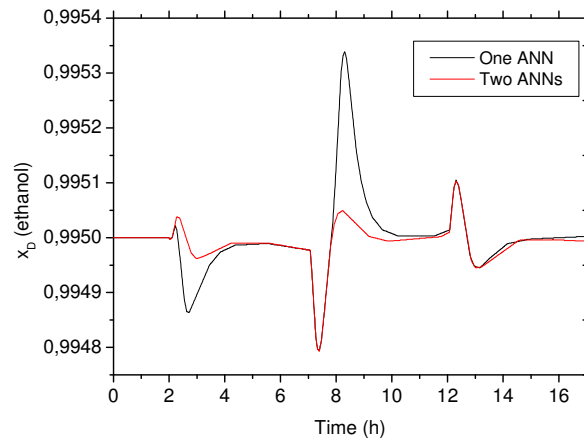


Figure 12 – Comparison of control with set-point change using one ANN and two ANN for different disturbances in the azeotropic feed composition.

7. Conclusions

The success of an intelligent controller using ANN depends on a consistent analysis of the system in order to define which topology best meets the needs of the proposed problem and in choosing which data are relevant for processing. The technique used in this study shows that it is possible to obtain good accuracy in estimating the values of the new set-points using two ANN without increasing the computational effort.

The intelligent controller using ANN was able to predict the new condition from disturbances in the azeotropic feed, making changes in the set-points of the controllers to keep the product at the top and bottom of the column within specifications.

This new control approach is conceptually simple and can easily be implemented in the chemical industry as it improves the performance of the conventional controller when it acquires feedforward characteristics. Furthermore, it is possible to eliminate additional energy costs and additional costs associated with products that are not within specifications.

The use of SCADA software proved to be an interesting alternative, because as a supervisory software it receives the signals of some process variables from Aspen™ (simulating an industrial plant), and similarly sends signals to the manipulated variables of the system, acting in the final control of elements. In addition, the integration of computational tools from different manufacturers, if properly integrated, can promote the emergence of a communication platform that provides a friendly interface for operators and engineers.

Acknowledgments

The authors thank the Brazilian National Council for Scientific and Technological Development (CNPq) for their financial support.

References

- Arifin, S., Chien, I. L. Design and control of an isopropyl alcohol dehydration process via extractive distillation using dimethyl sulfoxide as an entrainer. *Industrial and Engineering Chemistry Research*, v. 47, n. 3, p. 790–803, 2008.
- Dias, M.; Ensinas, A.; Nebra, S.; Maciel Filho, R.; Rossell, C.; Wolf, M. Production of bioethanol and other bio-based materials from sugarcane bagasse: Integration to conventional bioethanol production process. *Chemical Engineering Research and Design*, v. 87, p. 1206-1216, 2009.
- Doherty, M.F., Malone, M.F. *Conceptual Design of Distillation Systems*. New York: McGraw Hill, 2001.
- Figueirêdo, M. F.; Ramos, W. B.; Brito, K. D.; Brito, R. P. Effect of solvent content on controllability of extractive distillation columns. *Computer Aided Chemical Engineering*, v. 202, p. 1607-1612, 2015.
- Gil, I. D.; Gomez, J. M.; Rodríguez, G. Control of an extractive distillation process to dehydrate ethanol using glycerol as entrainer. *Computers and Chemical Engineering*, v. 39, p. 129-142. 2012.
- Haykin, S. *Neural networks and learning machines*. Third Ed., Pearson, Upper Saddle River, NJ, 2009.
- Junqueira, T. L.; Dias, M. O. S.; Maciel, M. R. Wolf; Maciel Filho, R.; Rossell, C. E.V. Simulation of anhydrous bioethanol production process using efficiency correlations for conventional and extractive distillation. *Distillation & Absorption*, p. 521-526, 2012.
- Kalbani, F. A.; Zhang, J. Inferential active disturbance rejection control of a distillation column. *9th IFCH Symposium on Advanced Control of Chemical Processes*, v. 48, n. 8, p. 403-408, 2015.
- Kano, M.; Showchaiya, N.; Hasebe, S.; Hashimoto, I. Inferential control of distillation compositions: selection of model and control configuration. *Control Engineering Practice*, v. 11, n. 8, p. 927-933, 2003.
- Luyben, W. L. *Plantwide dynamic simulators in chemical processing and control*. New York: Marcel Dekker, 2002.

- Morsi, I.; El-Din, L. M. SCADA system for oil refinery control. *Measurement*, v. 47, p. 5-13, 2014.
- Mansouri, S. S.; Sales-Cruz, M.; Huusom, J. K.; Woodley, J. M.; Gani, R. Integrated process design and control of reactive distillation processes. In S. Skogestad (Ed.), *Proceedings of the 19th Nordic Process Control Workshop*. [17] Norwegian University of Science and Technology. v. 48, n. 8, p. 1120-1125, 2015
- Mcculloch, W.S.; Pitts, W. A logical calculus of the ideas immanent innervous activity. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, v. 5, n. 4, p.115-133, 1943.
- Meirelles, A.; Weiss, S.; Herfurth, H. Ethanol dehydration by extractive distillation. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, v.56, p.181-188, 1992.
- Mejdell, T.; Skogestad, S. Composition estimator in a pilot-plant distillation column using multiple temperatures. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 30, n. 12, p. 2555-2564, 1991.
- Nerrand, O., Roussel-Ragot, P., Personnaz, L., Dreyfus, G. Neural networks and nonlinear adaptive filtering: unifying concepts and new algorithms. *Neural Computation*, v. 5, n. 2, p. 165-199, 1993.
- Silva I.N.; Spatti, D. H.; Flauzino, R. A. *Redes Neurais Artificiais para Engenharia e Ciências Aplicadas – Curso Prático*. Artiber editora. 2010.
- Udugama, I. A.; Munir, T.; Kirkpatrick, R.; Young, B. R.; Yu, W. High purity, high recovery, multi-component methanol distillation control. *Computer Aided Chemical Engineering*. v. 37, p. 1613-1618, 2015
- Zhongzhou, C., M. A. Henson, M. A.; Belanger, P.; Megan, L. Nonlinear model predictive control of high purity distillation columns for cryogenic air separation. *IEEE Transactions: Control Systems Technology*. v.18, n. 4, p. 811-821, 2010.