

PINN aplicada a sistemas de Compressão de Gás Natural

Matheus Marinho Bezerra, Rodrigo Lima Meira,
Leonardo Silva de Souza, Márcio André Fernandes
Martins

8 de outubro de 2025



COBEQ

25º Congresso Brasileiro
de Engenharia Química

ENBEQ

20º Encontro Brasileiro sobre
Ensino de Engenharia Química

Realização



Organizaçāo



Patrocínio



Apocis





Contexto e Objetivo do Trabalho

Contexto Histórico na Indústria do Petróleo:

- **Importância do Transporte de Gás Natural:** movimentar o gás até consumidores finais (indústrias, usinas, centros urbanos) é um processo essencial, porém com alto custo operacional.
- **Limitações dos Modelos Tradicionais:** métodos numéricos apresentam elevado tempo computacional (Marfatia e Li 2022), enquanto modelos aproximados sacrificam precisão.
- **Avanços com Redes Neurais:** desde os anos 90, redes neurais têm sido aplicadas no setor (Mohaghegh et al. 1996), buscando equilíbrio entre precisão e eficiência.
- **Physics-Informed Neural Networks (PINNs):** propostas por Raissi, Perdikaris e Karniadakis 2017, integram dados experimentais às leis físicas, aumentando a precisão e reduzindo o tempo de simulação.

Objetivo Principal

Construir uma **PINN** (Physics Informed Neural Network) que modele o comportamento dinâmico de um sistema de compressão de gás natural.



Sistema de Compressão e Gás Natural

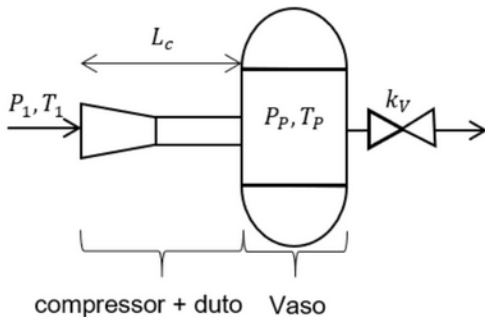


Figura 1: Sistema de Compressão retirado de Meira 2022

Composição do gás

O gás natural utilizado é rico em metano, com composição baseada em Chaczykowski 2009:

- CH₄: 98,34% C₂H₆: 0,61%
- C₃H₈: 0,15% iC₄H₁₀: 0,03%
- nC₄H₁₀: 0,03% CO₂: 0,80%
- Traços de: iC₅H₁₂, nC₅H₁₂, N₂

A equação de estado de Soave 1972 foi utilizada para modelar o comportamento termodinâmico do gás:

$$P = \frac{RT}{V - b} - \frac{a(T)}{V(V + b)}$$

com:

- $a(T)$: fator de correção das forças intermoleculares
- b : correção do volume molecular



Equações e Variáveis do Modelo de Meira 2022

Equações que descrevem a dinâmica do sistema:

$$\frac{d\dot{m}}{dt} = \frac{A_1}{L_c} (P_2 - P_P) \quad (1)$$

$$\frac{dV_P}{dt} = -\frac{V_P^2}{v_{PM}} \left(\dot{m} - \alpha k_v \sqrt{P_P - P_{out}} \right) \quad (2)$$

$$\begin{aligned} \frac{dT_P}{dt} = & \frac{V_P \dot{m}}{v_P M} \left(\frac{h_c - h_p}{C_V} \right) + \\ & + \frac{R_a T_P}{C_V} \left[T_P \left(\frac{\partial Z_P}{\partial T} \right)_{V_P} + Z_P \right] \frac{V_P}{v_P M} \left(\dot{m} - \alpha k_v \sqrt{P_P - P_{out}} \right) \end{aligned} \quad (3)$$

$$0 = f(x, z, u) \quad (\text{equações algébricas}) \quad (4)$$

Variáveis estimadas pelo modelo:

- \dot{m} : vazão mássica
- T_P, V_P, P_P : variáveis no plenum
- P_2, T_2, V_2 : saída do compressor
- T_{2s}, V_{2s} : pós-compressão isentrópica
- T_{imp}, V_{imp} : impelidor
- T_{dif}, V_{dif} : difusor

Observação: Variáveis em azul correspondem às entradas da rede neural, obtidas por medição.



Estrutura da Rede Neural Proposta

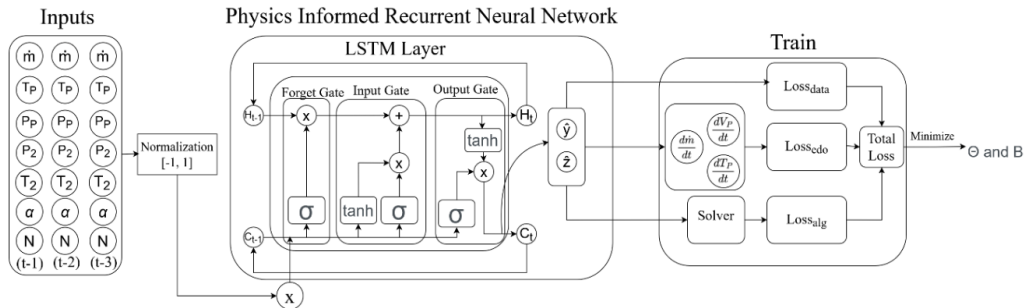


Figura 2: Diagrama da arquitetura da PINN.



Função de Loss e Hiperparâmetros da Rede

A função de perda é composta por quatro parcelas:

$$\text{Loss} = \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_{d,i}^* - y_{d,i}^*)^2}_{\text{Mensuráveis diferenciais}} + \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_{a,i}^* - y_{a,i}^*)^2}_{\text{Mensuráveis algébricas}} + \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{d\hat{x}_i}{dt} - \frac{d\hat{x}_i^{an}}{dt} \right)^2}_{\text{Consistência com as EDOs}} + \underbrace{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{z}_i - z_i)^2}_{\text{Variáveis algébricas estimadas}}$$

Onde:

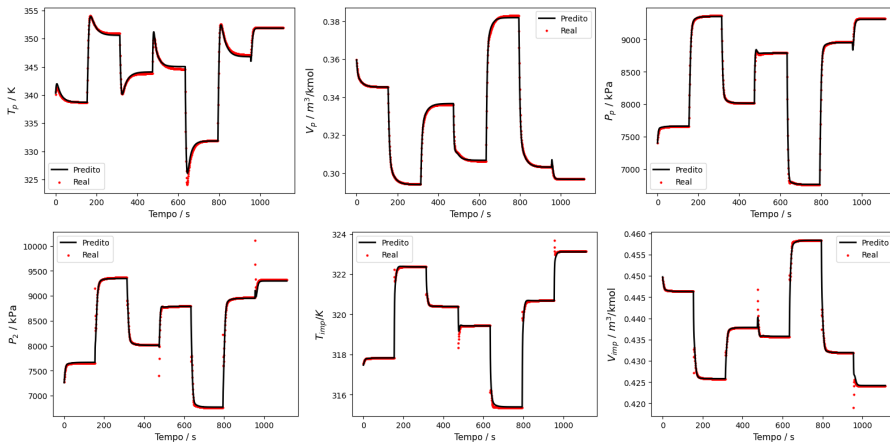
- \hat{y}_d^* : variáveis diferenciais mensuráveis (ex: \dot{m} , T_P);
- \hat{y}_a^* : variáveis algébricas mensuráveis (ex: P_2 , T_2);
- \hat{x}_i : variáveis diferenciais com derivada temporal avaliada numericamente;
- \hat{z}_i : variáveis algébricas previstas pela rede;
- z_i : variáveis algébricas calculadas pelo solver externo.

Hiperparâmetros do Modelo

Parâmetro	Valor
Nº de camadas (LSTM)	1
Learning Rate inicial	$1 \cdot 10^{-4}$
Tamanho do mini batch	64
Neurônios por camada	100
Nº de épocas	200
Otimizador	Adam



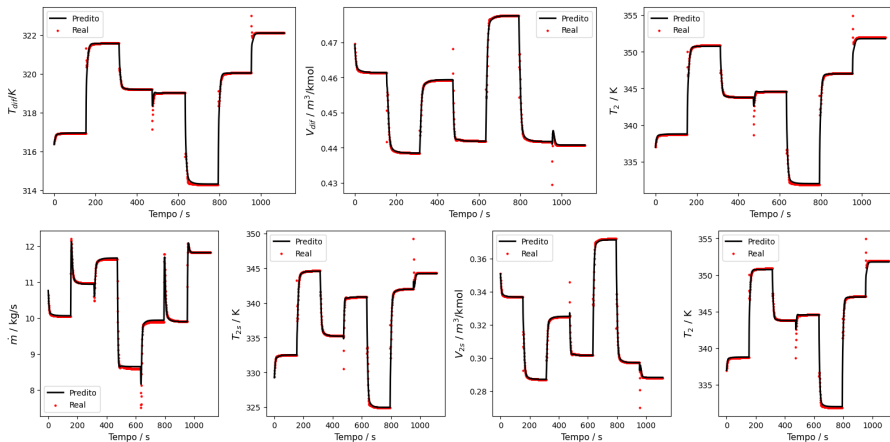
Resultados de Previsão – Parte 1



Figuras 3 e 4: Comparação entre os valores previstos pelo modelo e os dados reais para as variáveis associadas ao plenum (T_P , V_P , P_P), saída do compressor (P_2) e impelidor (T_{imp} , V_{imp}).



Resultados de Previsão – Parte 2



Figuras 5 e 6: Comparação entre os valores previstos pelo modelo e os dados reais para as variáveis do difusor (T_{dif} , V_{dif} , T_2), do plenum (\dot{m}), e da pós-compressão isentrópica (T_{2s} , V_{2s}), além da saída do compressor (P_2).



Distribuição do Tempo de Simulação

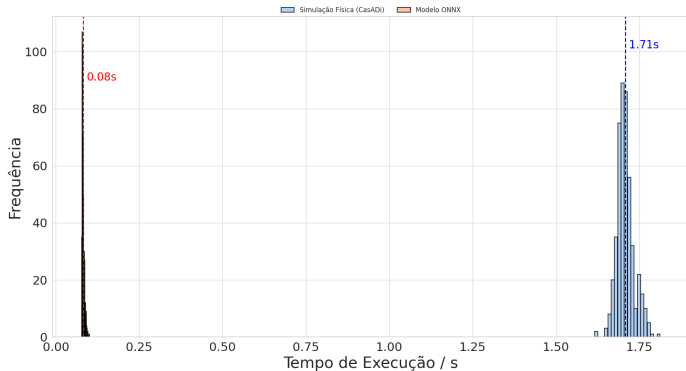


Figura 5: Distribuição do tempo de simulação dos experimentos/modelos.



Conclusão

- A técnica PINN apresentou um desempenho superior em termos de tempo de execução quando comparada aos métodos tradicionais. Enquanto manteve previsões com boa precisão.
- Em média, a PINN foi:
 - aproximadamente 20 vezes mais rápida que o **IDAS**.

Agradecimentos

Agradeço à Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP), no âmbito do PRH 35.1, PRH 41/UFBA pelo suporte financeiro e apoio ao desenvolvimento deste trabalho.



ENBEQ
20º Encontro Brasileiro sobre
Ensino de Engenharia Química



COBEQ
25º Congresso Brasileiro
de Engenharia Química



Realização



Organização



Patrocínio







Apoio







Bibliografia I

-  Chaczykowski, M. (2009). “Sensitivity of pipeline gas flow model to the selection of the equation of state”. Em: *Chemical Engineering Research and Design* 87.12, pp. 1596–1603. ISSN: 0263-8762.
-  Marfatia, Zaid e Xiang Li (2022). “Data-Driven Natural Gas Compressor Models for Gas Transport Network Optimization”. Em: *Digital Chemical Engineering* 3, p. 100030. ISSN: 2772-5081.
-  Meira, Rodrigo Lima (2022). “Modelagem rigorosa em regime dinâmico e controle preditivo de sistemas de transporte de fluidos compressíveis integrados a compressores centrífugos”. Tese (Doutorado em Engenharia Industrial). Universidade Federal da Bahia.
-  Mohaghegh, Shahab et al. (1996). “Petroleum reservoir characterization with the aid of artificial neural networks”. Em: *Journal of Petroleum Science and Engineering* 16.4, pp. 263–274.



Bibliografia II

-  Raissi, Maziar, Paris Perdikaris e George Em Karniadakis (2017). "Physics Informed Deep Learning (Part I): Data-driven Solutions of Nonlinear Partial Differential Equations". Em: *arXiv preprint arXiv:1704.03718*.
-  Soave, G. (1972). "Equilibrium constants from a modified Redlich-Kwong equation of state". Em: *Chemical Engineering Science* 27.6, pp. 1197–1203. ISSN: 0009-2509.