

# PINN aplicada a sistemas de Compressão de Gás Natural

Matheus Marinho Bezerra, Rodrigo L. Meira,  
Leonardo S. de Souza, Márcio A. F. Martins



**COBEQ**  
25º Congresso Brasileiro  
de Engenharia Química



**ENBEQ**  
20º Encontro Brasileiro sobre  
Ensino de Engenharia Química

Realização



Organização

UFMG



Patrocínio

CONFEDERAÇÃO CREA



Apoio





# 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

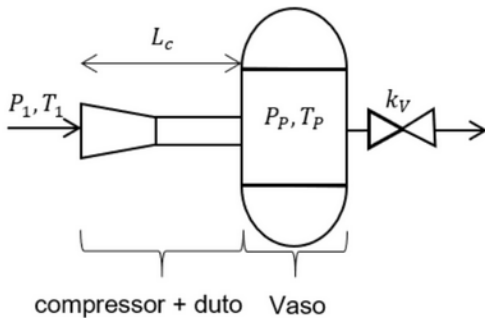


Figura 1: Sistema de Compressão retirado de Meira et al. (2021)

## Composição do gás

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

- CH<sub>4</sub>: 98,34%    C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>: 0,61%
- C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>: 0,15%    iC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>: 0,03%
- nC<sub>4</sub>H<sub>10</sub>: 0,03%    CO<sub>2</sub>: 0,80%
- Traços de: iC<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, nC<sub>5</sub>H<sub>12</sub>, N<sub>2</sub>

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 et al. (2021)

**Equações diferenciais que descrevem a dinâmica do sistema:**

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

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

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

**Principais variáveis algébricas estimadas:**

- $P_2, T_2, V_2$ : saída do compressor
- $T_{2s}, V_{2s}$ : pós-compressão isentrópica
- $V_1$ : sucção do compressor
- $V_{imp}, T_{imp}$ : impelidor
- $V_{dif}, T_{dif}$ : difusor
- $P_P$ : pressão no plenum

**Símbolos:**

- $\dot{m}$ : vazão mássica;  $V_P, T_P, Z_P$ : volume molar, temperatura e fator de compressibilidade no plenum;  $R_a$ : constante dos gases;  $M$ : massa molar;  $h_c, h_p$ : entalpias;  $C_V$ : calor específico a volume constante.



# Estrutura da Rede Neural Proposta

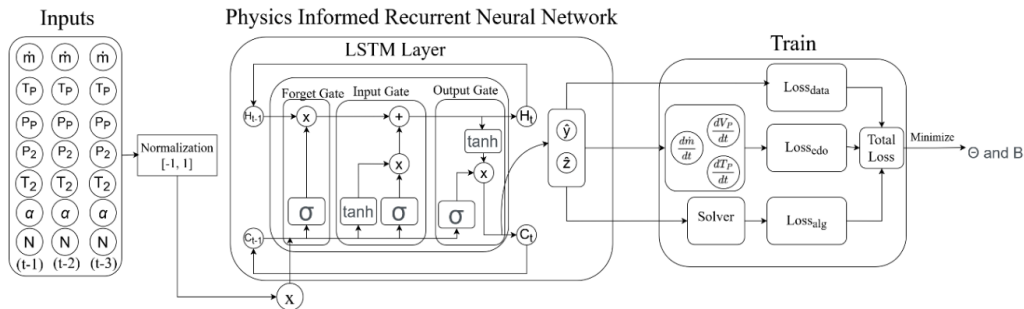


Figura 2: Diagrama da arquitetura da PINN.



## Função de Loss e Hiperparâmetros da Rede

A equação geral da função de perda utilizada foi:

$$\text{Loss} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i^* - y_i^*)^2 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left( \frac{d\hat{y}_{i,\text{num}}}{dt} - \frac{d\hat{y}_{i,\text{an}}}{dt} \right)^2 + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{z}_i - z_i)^2$$

Onde:

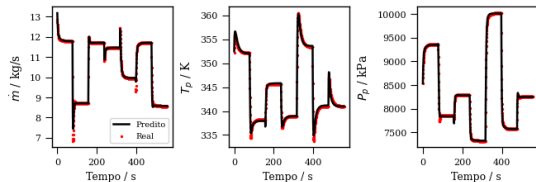
- $\hat{y}^*$ : variáveis previstas mensuráveis (saída da rede);
- $y^*$ : variáveis reais mensuráveis (target);
- $\hat{z}$ : variáveis algébricas previstas pela rede;
- $z$ : variáveis algébricas calculadas pelo solver extemp.

### Hiperparâmetros do Modelo

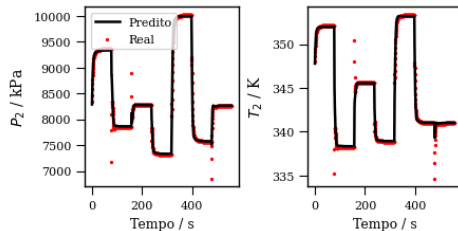
Parâmetro	Valor
Nº de camadas (LSTM)	1
Learning Rate inicial	$1 \cdot 10^{-4}$
Tamanho do mini batch	64
Neurônios por camada	100
Nº de épocas	200
Otimizador	Adam



# Resultados de Previsão e Erro Quadrático Médio



Comparação entre o modelo de rede neural e os dados simulados para vazão mássica, temperatura no plenum ( $T_P$ ) e pressão no plenum ( $P_P$ ).



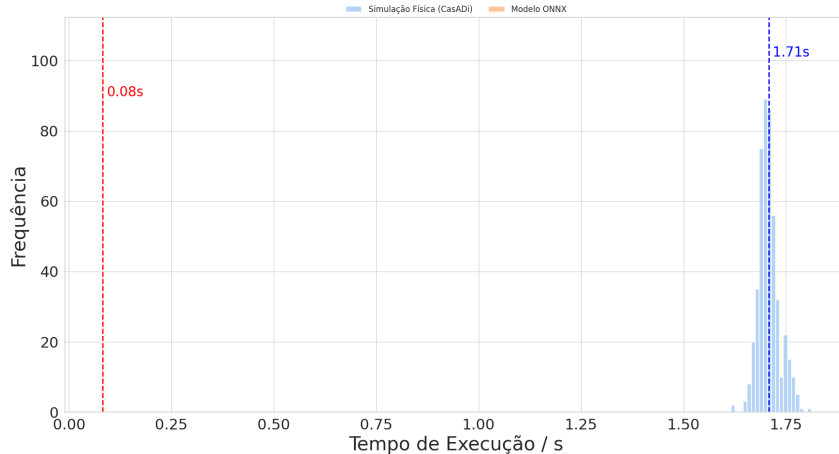
Comparação entre o modelo de rede neural e os dados simulados para a pressão ( $P_2$ ) e a temperatura ( $T_2$ ) na saída do compressor.

## Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) das demais variáveis

$V_P$	$T_{imp}$	$V_{imp}$	$T_{dif}$	$V_{dif}$	$T_{2s}$	$V_{2s}$
0.012762	0.050806	0.045487	0.049855	0.031096	0.037175	0.037160



# Distribuição do Tempo de Simulação



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, 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

UFMG



Patrocínio

CONFEE CREA






Apoio





## Bibliografia I

-  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.
-  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.
-  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*.