

DETERMINAÇÃO DE REGIÕES ÓTIMAS DE OPERAÇÃO EM UM PROCESSO QUÍMICO ATRAVÉS DE REDES NEURAIS

GUSTAVO M. DE ALMEIDA, MARCELO CARDOSO

*Departamento de Engenharia Química, Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais
Rua Espírito Santo, 35/6º Andar, Centro, 30.160-030, Belo Horizonte, MG, Brasil
E-mails: {galmeida, mcardoso}@deq.ufmg.br*

SONG W. PARK

*Departamento de Engenharia Química, Escola Politécnica, Universidade de São Paulo
Av. Prof. Luciano Gualberto, 380/Tv. 3, B. Cidade Universitária, 05.508-900, São Paulo, SP, Brasil
E-mail: songwon.park@poli.usp.br*

Abstract— The phenomenological modeling of industrial chemical processes is arduous in general, due to time consumption or lack of knowledge. This fact explains the growing employment of data-driven techniques for this task. Another important aspect to be considered, due to the possibility of multiple operating states, is the need of finding the most efficient regions, according to some criteria. Based on these two requirements, this study aims at obtaining response surfaces in order to visualize the influence of some specific operating variables over the response and also to determine optimal regions concerning economic and safety aspects. For that, a neural network model was previously identified to the process under analysis. The case study is based on real data and refers to a boiler that belongs to a cellulose mill in Brazil.

Keywords— Response surface, optimization, chemical process, neural networks, industrial data analysis.

Resumo— A modelagem fenomenológica de processos químicos industriais é geralmente uma tarefa árdua, seja devido ao tempo de equacionamento ou ao conhecimento insuficiente. Neste contexto, o emprego de métodos baseados em dados históricos do próprio processo é crescente. Um outro aspecto importante a se considerar em indústrias químicas, devido à possibilidade de múltiplos estados de operação, é a necessidade de se encontrar aquelas regiões onde a eficiência operacional é maior, segundo algum critério de interesse, seja econômico, de segurança, ou ambiental. Baseado nestas duas demandas, o objetivo deste estudo é obter gráficos de superfície de resposta, a fim de se visualizar a influência de variáveis operacionais e de se especificar regiões ótimas de operação, segundo aspectos econômicos e de segurança. Para tal, identificou-se, em uma etapa preliminar, um modelo neural para o processo sob análise. Trabalhou-se com um caso real, a partir de um banco de dados referente à operação de uma caldeira, pertencente a uma fábrica de produção de celulose no Brasil.

Palavras-chave— Superfície de resposta, otimização, processos químicos, redes neurais, banco de dados industrial.

1 Introdução

A modelagem fenomenológica de processos químicos industriais é uma tarefa cada vez mais árdua, ao se caminhar, por exemplo, em direção à integração de unidades de processamento e ao fechamento de circuitos de água. Estes fatores são responsáveis por aumentar o número de variáveis a se considerar, e a dependência, geralmente não linear, entre elas. Neste contexto, uma modelagem, diretamente a partir de dados históricos, é cada vez mais usual. Nesta direção, pode-se citar diversas aplicações de redes neurais em processos químicos (Bulsari, 1995).

O objetivo deste estudo é, não apenas realizar um mapeamento entre variáveis de entrada e de saída, porém, empregar a modelagem neural para se obter gráficos de superfície de resposta, de modo a se determinar regiões (faixas) ótimas de operação, segundo um critério de interesse em particular. A motivação para se definir estas regiões é geralmente de ordem econômica, de segurança ou ambiental. Para o primeiro aspecto, pode-se buscar, por

exemplo, obter um menor custo de produção ou uma menor variabilidade para o produto final. Este procedimento também é útil para se aumentar o conhecimento sobre o processo em análise. O estudo de caso diz respeito à operação de uma caldeira de recuperação química, um equipamento exclusivo do setor de celulose. A variável de interesse é a geração de vapor. A organização deste texto é conforme a seguir. A seção seguinte é uma descrição sobre o estudo de caso e, a seção 3, sobre a metodologia. A seção 4 diz respeito à apresentação e discussão de resultados, e a seção 5, às considerações finais.

2 Estudo de Caso

O estudo de caso é referente a uma caldeira de recuperação química, pertencente a uma fábrica de produção de celulose tipo Kraft, no Brasil. Este equipamento é exclusivo deste setor industrial e um de seus objetivos é gerar vapor superaquecido, geralmente por volta de 6,5 MPa e 450,0 °C. A maior parte deste vapor é usada para a geração de energia elétrica, através de turbogeradores e, a parcela restante, para a realização de operações de troca

térmica em etapas do processo fabril. O calor para a geração de vapor é proveniente principalmente do processo de combustão da matéria orgânica presente no combustível líquido, o licor preto, ao se ter a produção de uma infinidade de compostos químicos gasosos a uma temperatura elevada, até cerca de 1200,0 °C. Estes gases, em direção à parte superior do equipamento, irão aquecer uma linha de água, inicialmente por volta de 120,0 °C, através de uma série de trocadores de calor, de modo a se produzir o vapor. A temperatura de saída destes gases é por volta de 200,0 °C. O fluxo desta água é em contracorrente ao dos gases (Adams et al., 1997). A injeção do ar de combustão, necessário para se ter a queima da matéria orgânica, é próxima à do licor-combustível, a partir de três níveis: primário, secundário e terciário. Outra parcela de contribuição de calor para se gerar o vapor é aquela associada a este ar, por estar entre 100,0 e 150,0 °C. A Fig. 1 contém a ilustração de uma caldeira de recuperação química, com destaques para o processo de combustão do licor e a consequente produção de gases quentes, e para o circuito de troca de calor entre os gases e a água, inicialmente líquida.

O banco de dados é composto por 16 variáveis, com um período de operação de 1 mês, e um intervalo de amostragem de 1 minuto. Portanto, têm-se 44.640 registros por variável. A Tabela 1 contém as informações sobre as variáveis (com identificação na Fig. 1). Há duas medições de vazão para cada nível de ar de combustão, uma de cada lado do equipamento; como exemplo, F_{AP} é a representação de duas variáveis, isto é, para a vazão de ar primário, no lado direito e no lado esquerdo, da caldeira.

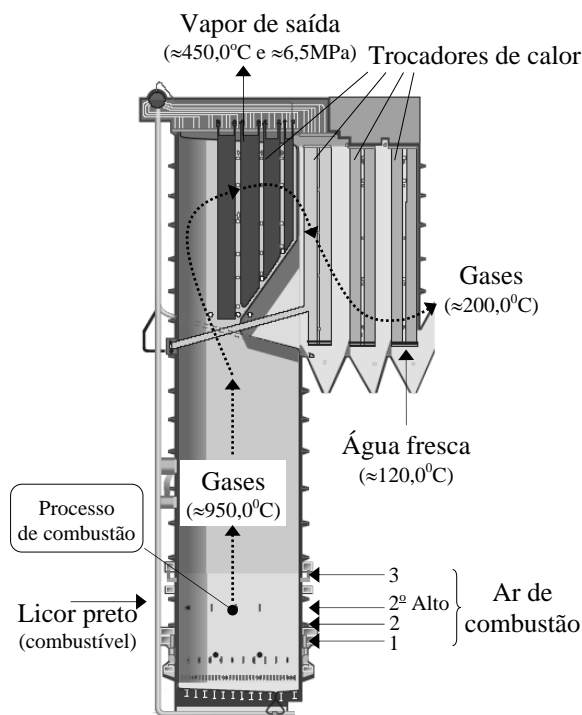


Fig. 1. Ilustração de uma caldeira de recuperação química (Tacla, 2002), com a identificação das variáveis deste estudo de caso.

Tabela 1. Variáveis operacionais para a caldeira de recuperação química deste estudo de caso.

Descrição	Sigla [†]	Unidade [‡]
<i>Variáveis de Entrada</i>		
Licor Preto (combustível)	F_{LP}	m^3/h
Sólidos Secos (no licor)	$\%_{SS}$	%
Nível de Ar Primário ^{††}	F_{AP}	t/h
	T_{AP}	°C
Nível de Ar Secundário ^{††}	F_{AS}	t/h
	T_{AS}	°C
Nível de Ar Secundário Alto ^{††}	F_{ASA}	t/h
Nível de Ar Terciário ^{††}	F_{AT}	t/h
Vapor de Saída	T_{VS}	°C
	P_{VS}	MPa
Água Fresca	T_{AF}	°C
<i>Variável de Interesse</i>		
Vapor de Saída	F_{VS}	t/h

[†]F = vazão, T = temperatura, P = pressão, % = percentual.

[‡] m^3/h = metro cúbico por hora, % = percentual, t/h = tonelada por hora, °C = graus Celsius, e MPa = megaPascal.

^{††}Têm-se duas medições de vazão para cada nível de ar de combustão, uma de cada lado do equipamento.

A seleção destas variáveis é a partir do conhecimento disponível, conforme a Equação 1, em que, Q_{SS} e Q_{AR} são as quantidades disponíveis de energia térmica para se gerar o vapor, associadas aos gases oriundos do processo de combustão da matéria orgânica presente no licor, e ao ar de combustão pré-aquecido, respectivamente, em kJ, ΔH é a diferença de entalpia entre as condições inicial e final, dadas pela água fresca e pelo vapor de saída, respectivamente, em kJ/kg, e η é a eficiência térmica do equipamento em relação à transformação da água em vapor superaquecido (Adams et al., 1997). O conjunto de variáveis entre parênteses é aquele usado para se calcular o respectivo fator; como exemplo, Q_{SS} é função da vazão de licor (F_{LP}) e do percentual de sólidos secos presente neste combustível ($\%_{SS}$).

$$F_{VS} = \frac{(Q_{SS} + Q_{AR}) \cdot \eta}{\Delta H}, \text{ em que,} \quad (1)$$

$$Q_{SS} = f(F_{LP}, \%_{SS}),$$

$$Q_{AR} = f(F_{AP}, F_{AS}, F_{ASA}, F_{AT}, T_{AP}, T_{AS}), \text{ e,}$$

$$\Delta H = f(T_{VS}, P_{VS}, T_{AF}).$$

A carga de sólidos secos presente no licor-combustível é a principal fonte de calor para a geração de vapor. Esta carga é dada pelo produto entre a vazão de licor e o percentual de sólidos secos, isto é, $F_{LP} \cdot \%_{SS}$, em t/h. Quanto maior o seu valor, maior a quantidade de calor disponível, dado por Q_{SS} . No entanto, pode-se ter uma variação na vazão de vapor (F_{VS}), mesmo para uma carga de sólidos fixa, como é possível constatar pela Fig. 2(a). Tem-se também, para uma mesma carga, uma faixa operacional considerável para algumas variáveis, como por exemplo, para a vazão de ar terciário (F_{AT}),

conforme a Fig. 2(b). Portanto, deste modo específico, o objetivo deste estudo é determinar regiões ótimas (faixas) de operação, para uma carga de sólidos secos em particular, ao se analisar a influência de algumas variáveis sobre a geração de vapor, através de gráficos de superfície de resposta. A obtenção destes gráficos é após a identificação de um modelo neural para a vazão de vapor de saída. Trabalhou-se com a carga de sólidos secos de maior frequência no processo, de acordo com o banco de dados, igual a 95,4 t/h. O número de conjuntos de registros resultante deste filtro é 530, cada um com 16 registros, um para cada variável (ver Tabela 1).

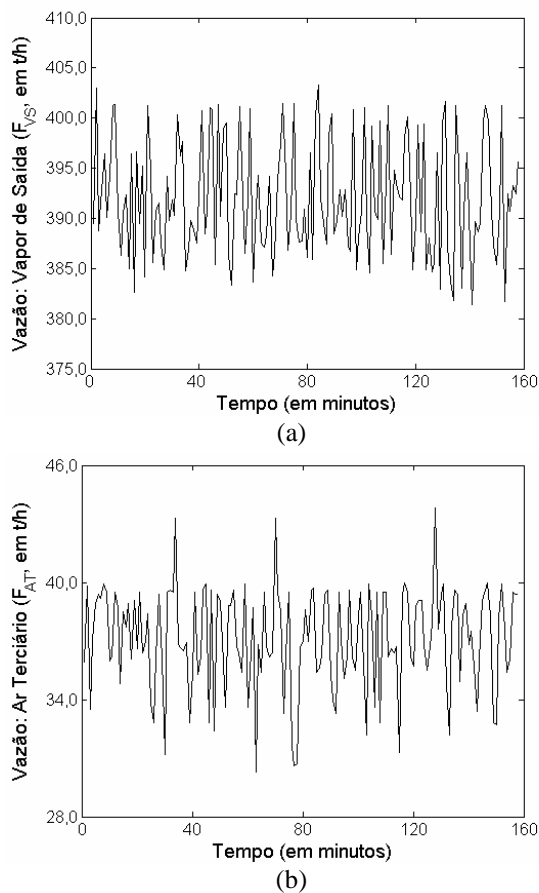


Fig. 2. Gráfico temporal para (a) a vazão de vapor de saída (F_{VS}) e (b) a vazão de ar terciário (F_{AT}), ao se fixar a carga de sólidos secos, presente no licor-combustível, em 95,4 t/h.

3 Metodologia

A metodologia tem duas etapas: obtenção de um modelo neural e construção de gráficos de superfície de resposta. Após a aplicação do filtro, baseado na carga de sólidos secos igual a 95,4 t/h, fez-se uma inspeção visual sobre os dados, com o objetivo de se eliminar aqueles, anômalos. Na sequência, dividiu-se o banco de dados em dois conjuntos: de treinamento, com 70,0% do total de conjuntos de registros, usado para se obter um modelo neural para a vazão de vapor de saída (F_{VS}), e de teste, para se validá-lo. Utilizou-se a rede neural tipo feed-forward, com uma

camada oculta única, cuja função de transferência é uma sigmóide. Testou-se, inicialmente, o algoritmo de aprendizagem back-propagation, porém, optou-se pelo BFGS, um método quase-Newton, em função de sua performance superior (Haykin, 1999). Fixou-se o número de épocas em 1500, um valor suficiente, a partir de constatações experimentais. Variou-se o número de neurônios ocultos de 2 a 25 e selecionou-se aquele modelo neural cujo Erro Quadrático Médio (EQM), dado pela diferença entre o valor real de vazão de vapor, medido na unidade industrial, e o valor teórico, segundo o modelo neural, é o menor. Este cálculo é sobre o conjunto de dados de teste. Utilizou-se, nesta primeira etapa, o Toolbox de Redes Neurais para Matlab (Demuth e Beale, 1997). Na sequência, construiu-se gráficos de superfície de resposta para cenários de interesse, ao se fixar algumas variáveis de entrada e se variar outras, com o propósito de se observar o comportamento da vazão de vapor de saída.

4 Resultados e Discussão

4.1 Identificação de um Modelo Neural

Inicialmente, devido à presença de dados anômalos, eliminou-se 4 dos 530 conjuntos de registros. Em seguida, dividiu-se o banco de dados resultante em conjunto de treinamento, com 368 exemplos (70,0 % do total), e conjunto de teste, com 158. Após a obtenção de 24 modelos neurais, ao se variar o número de unidades elementares na camada oculta de 2 a 25, selecionou-se aquele com 9 neurônios, por apresentar o menor Erro Quadrático Médio (EQM), igual a $0,1627 (t/h)^2$. Este cálculo é sobre o conjunto de dados de teste. A Fig. 3 é um esquema deste modelo neural, com quinze variáveis de entrada (conforme a Tabela 1) e uma de saída, a vazão de vapor. De modo a atestar a sua qualidade, construiu-se: o gráfico de paridade entre os dados reais (os registros de medições na fábrica) e aqueles teóricos (a saída do modelo neural), e o histograma para os resíduos, conforme a Fig. 4. Pode-se observar, tanto uma correspondência satisfatória entre os dados reais e teóricos, ao se ter um coeficiente de correlação linear (r) igual a 0,9976, quanto uma distribuição aproximadamente normal, com média zero, para os resíduos, que são os resultados desejáveis em uma etapa de validação de modelo. Calculou-se também o Erro Absoluto Médio, cujo valor é inferior a 0,5 t/h. Este resultado é expressivo, uma vez que a vazão média de vapor é de 392,0 t/h.

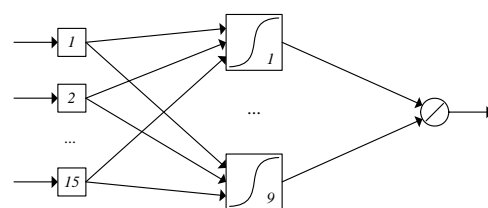


Fig. 3. Modelo neural final, com 9 neurônios ocultos.

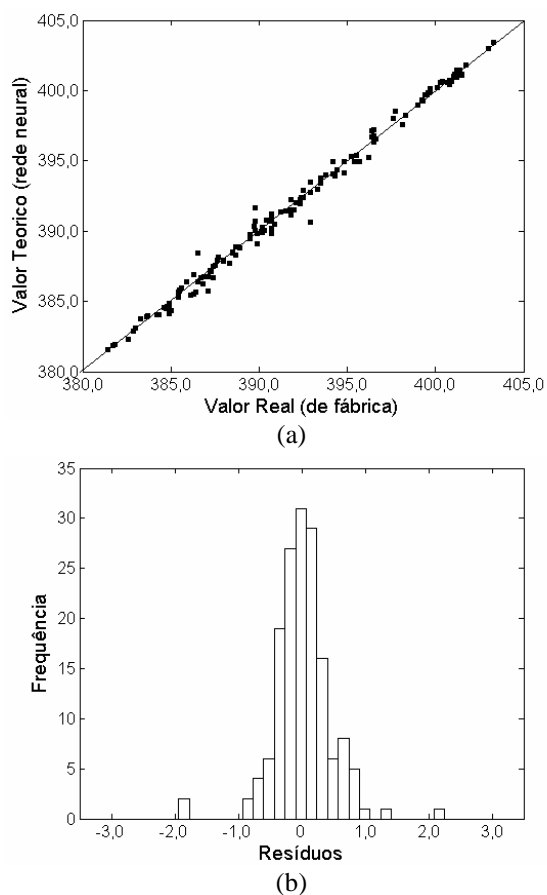


Fig. 4. (a) Relação de paridade entre os registros de fábrica (valor real) e a saída do modelo neural (valor teórico), para a vazão de vapor, e (b) histograma com a distribuição dos resíduos, dado pela diferença entre ambos.

4.2 Determinação de Regiões Ótimas de Operação

O objetivo desta etapa é determinar regiões, a partir de gráficos de superfície de resposta, onde se tem uma maior geração de vapor pela caldeira. Para tal, baseado no conhecimento e na experiência sobre o funcionamento de caldeiras de recuperação química, agrupou-se as variáveis operacionais de acordo com a descrição a seguir. O *grupo 1* contém as variáveis cuja influência sobre a geração de vapor se tem o interesse de analisar:

- o percentual de sólidos secos ($\%_{SS}$),
- a vazão de ar secundário (F_{AS}),
- a vazão de ar secundário alto (F_{ASA}),
- a vazão de ar terciário (F_{AT}),
- e a temperatura do segundo nível de ar (T_{AS}),

enquanto que o *grupo 2* contém aquelas cuja variação é livre, isto, sem restrições:

- a vazão de licor preto (F_{LP}),
- a vazão de ar primário (F_{AP}),
- a temperatura do ar primário (T_{AP}),
- a temperatura da água fresca (T_{AF}),
- e a pressão do vapor de saída (P_{VS}).

Tabela 2. Cenários para se analisar a geração de vapor.

Cenário	Variáveis Analisadas	Variáveis Fixas	Fig. 5
1	F_{AS} , T_{AS}	F_{ASA} , F_{AT} , $\%_{SS}$	(a)
2	F_{ASA} , F_{AT}	F_{AS} , T_{AS} , $\%_{SS}$	(b)
3	$\%_{SS}$, F_{ASA}	F_{AS} , T_{AS} , F_{AT}	(c)
4	$\%_{SS}$, F_{AS}	F_{ASA} , F_{AT} , T_{AS}	(d)

Além disso, restringiu-se a temperatura do vapor de saída (T_{VS}) em $450,0 \pm 5,0$ °C, por questões de ordem econômica e de segurança. Por fim, ao se observar pontos discrepantes para a vazão de vapor (F_{VS}), em alguns gráficos de superfície de resposta, limitou-se a sua faixa entre 380,0 e 405,0 t/h. A Tabela 2 contém os quatro cenários analisados, oriundos de combinações entre as variáveis pertencentes ao primeiro grupo. Como exemplo, no cenário 1, pode-se verificar a influência da vazão e da temperatura do ar secundário (F_{AS} e T_{AS} , respectivamente), sobre a geração de vapor (F_{VS}), ao se fixar as vazões de ar secundário alto (F_{ASA}) e de ar terciário (F_{AT}), e o percentual de sólidos secos no licor-combustível ($\%_{SS}$), e sem quaisquer restrições para as variáveis do segundo grupo. O valor de operação de uma variável fixa é dado pelo seu valor médio. Conforme o objetivo estabelecido inicialmente, a carga de sólidos secos presente no licor é a mesma em todos os cenários, igual a 95,4 t/h.

Na Fig. 5(a), pode-se observar que, ao se fixar, as vazões de ar secundário alto e de ar terciário (F_{ASA} e F_{AT} , respectivamente), e o percentual de sólidos secos ($\%_{SS}$), a vazão de vapor (F_{VS}) é maior, para uma vazão de ar secundário (F_{AS}) maior, à uma temperatura (T_{AS}) mais baixa, inferior a 110,0 °C. A partir de análises deste tipo, pode-se então determinar regiões onde o desempenho da caldeira em relação à geração de vapor é maior. Na Fig. 5(b), por exemplo, pode-se observar que tal eficiência é maior, ao se operar, de modo simultâneo, com maiores vazões de ar secundário alto (F_{ASA}) e de ar terciário (F_{AT}). Neste cenário, fixou-se, a vazão e a temperatura do ar secundário (F_{AS} e T_{AS} , respectivamente), além do percentual de sólidos presente no licor-combustível ($\%_{SS}$). O resultado na Fig. 5(c) é interessante por ser contrário àquele esperado. Sabe-se que quanto maior o percentual de sólidos ($\%_{SS}$), maior a geração de vapor (F_{VS}), uma vez que quantidade de água presente no licor é menor. De acordo com o gráfico, quanto maior este percentual, menor a quantidade de vapor. Este resultado é um indicativo de que, para se obter altas vazões de vapor, tem-se que garantir, além de uma alta carga de sólidos ($\%_{SS}$), outras condições. As variáveis fixas, neste cenário, são, as vazões de ar secundário e de ar terciário (F_{AS} e F_{AT} , respectivamente), e a temperatura do ar secundário (T_{AS}). Pela Fig. 5(d), pode-se sugerir que, uma das condições operacionais a se garantir, é o aumento da

vazão de ar secundário (F_{AS}), variável fixa no cenário anterior. As variáveis fixas, neste último cenário, são, a vazão de ar secundário alto (F_{ASA}) e as temperaturas do ar terciário e do ar secundário (F_{AT} e T_{AS} , respectivamente).

5 Conclusão

Após a identificação de um modelo neural, construiu-se gráficos de superfície de resposta para diferentes cenários de interesse, com o objetivo de se visualizar regiões ótimas de operação, responsáveis por uma geração de vapor, mais alta e estável. A caldeira de recuperação química deste trabalho é pertencente a uma fábrica de produção de celulose localizada no Brasil. Uma sugestão é estender este estudo para outros valores de carga de sólidos secos (além daquele de 95,4 t/h), também frequentes durante a operação deste equipamento.

Pode-se destacar algumas vantagens ao se empregar a técnica de redes neurais, em relação à modelagem fenomenológica, conforme a descrição a seguir. A equação para o cálculo da vazão de vapor é conhecida (Equação 1), porém, ao se trabalhar com dados industriais, portanto, com ruídos, pode-se ressaltar o uso de redes neurais, por apresentar uma performance superior de predição. Uma segunda vantagem é o fato de ser possível realizar o mapeamento entre a entrada e a saída apenas a partir de variáveis operacionais (vazões, temperaturas, percentuais, entre outras), cujo intervalo de amostragem em fábricas, pelo naquelas de grande porte, é suficientemente pequeno; neste estudo, igual a 1 min. Uma vez que a dinâmica de operação em uma caldeira de recuperação química é significativamente rápida, é imprescindível ter dados em um intervalo de tempo condizente, de modo a se obter gráficos de superfície de resposta representativos de suas operações. No caso de se empregar a equação, é necessário ter registros de poder calorífico para a carga de sólidos secos, variável indispensável para se calcular a quantidade de energia térmica presente no licor-combustível (Q_{SS}) e cuja variabilidade é considerável; porém, por ser um dado de laboratório, a sua frequência de amostragem é inferior àquela desejável. Um outro parâmetro, cuja determinação em um intervalo de amostragem pequeno é difícil, é a eficiência térmica do equipamento (η). Um terceiro aspecto positivo é que, após a identificação de um modelo neural satisfatório, pode-se usá-lo para simular cenários de interesse, atividade geralmente inviável na prática; como por exemplo, variar a distribuição de ar de combustão entre os níveis de injeção para se verificar a sua influência sobre a geração de vapor. Portanto, pode-se destacar a utilidade de uma modelagem neural para se obter gráficos de superfície de resposta, com o objetivo de se determinar regiões ótimas de operação em processos químicos industriais.

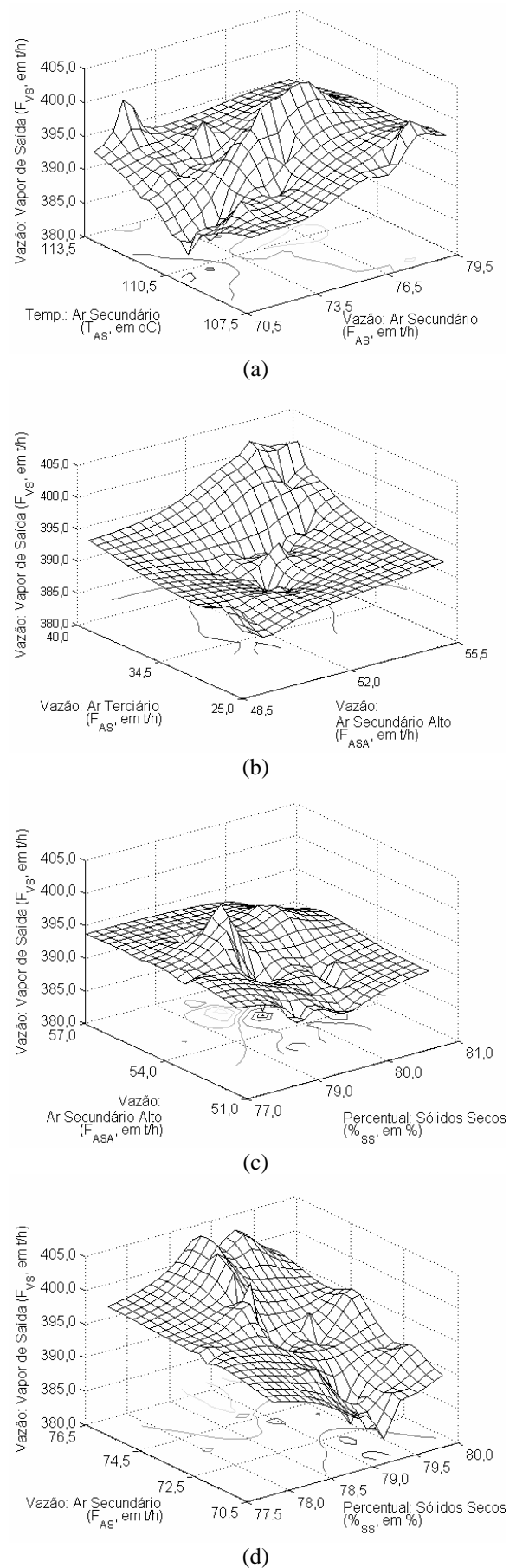


Fig. 5. (a-d) Gráficos de superfície de resposta para quatro cenários de interesse (ver Tabela 2) em caldeiras de recuperação química, para se determinar regiões de maior geração de vapor.

Agradecimentos

Os autores agradecem à unidade industrial de produção de celulose, no Brasil, pela cessão de um banco de dados referente à operação de uma de suas caldeiras de recuperação química.

Referências Bibliográficas

- Adams, T.N., Frederick, W.J., Grace, T.M., Hupa, M., Iisa, K., Jones, A.K., Tran, H. (1997). *Kraft recovery boilers*, Atlanta, GA: Tappi Press.
- Bulsari, A.B. (1995). Neural networks for chemical engineers - Book 6, In: Computer-Aided Chemical Engineering, Lappeenranta: Elsevier Science B.V.
- Demuth, H., Beale, M. (1997). *Neural networks toolbox user's guide - For use with Matlab*, The MathWorks, Inc., vol. 3.
- Haykin, S. (1999). *Neural networks: A comprehensive foundation*, Upper Saddle River, N.J.: Prentice Hall.
- Tacla, C. (2002). Caldeiras de Recuperação, *In Curso de Especialização em Papel e Celulose, Programa de Educação Continuada em Engenharia (USP)*, CDROM, São Paulo, Brasil.
- Vakkilainen, E.K. (2005). *Kraft recovery boilers - Principles and practice*, Helsinque: Valopaino Oy.