



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
ESCOLA DE ENGENHARIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
ENG07053 - TRABALHO DE DIPLOMAÇÃO EM ENGENHARIA
QUÍMICA



Modelagem caixa-preta e otimização de uma caldeira de recuperação Kraft

Autor: Liège Pilling Baptista da Costa

Orientador: Prof. Dr. Marcelo Farenzena

Porto Alegre, julho 2017

Agradecimentos

Aos meus pais, Afonso e Simone, que dedicaram suas vidas a apoiar suas filhas. Obrigada por terem abdicado dos seus sonhos para que eu pudesse realizar os meus. Devo tudo que sou a vocês.

Ao meu namorado, Plínio, pela compreensão, carinho e paciência sem as quais teria sido difícil superar as adversidades. Muito obrigada por sacrificar noites e finais-de-semana me ajudando na elaboração deste trabalho.

À minha família e amigos que compreenderam os diversos momentos de ausência, mas que sempre se mantiveram meu lado.

Ao meu ex-colega e eterno amigo Rafael que sempre emprestou seu tempo para me escutar e aconselhar.

Aos meus mentores Fernando Toigo, Daniel Sidoruk, Ana Carolina Carvalho e Ângelo Magalhães que tanto contribuíram para o meu desenvolvimento profissional e na elaboração deste trabalho.

Aos meus colegas de estágio, Bruno Gonçalves, Cátia Duarte, Gabriel de Araújo, Nathalia Cardoso e João Pedro da Costa pela amizade, por compartilhar comigo conhecimentos e experiências e pelo suporte na realização deste e outros projetos.

À empresa CMPC Celulose Riograndense pela oportunidade de poder vivenciar o ambiente industrial, trocar experiências com engenheiros e operadores, desenvolver projetos e me desenvolver tanto como profissional quanto como pessoa.

Ao professor e mestre em engenharia, Olivert Soares Pinheiro, por compartilhar seu conhecimento e experiência, se colocando à disposição para esclarecer dúvidas e auxiliar no que fosse preciso.

Aos professores do Colégio Militar e da UFRGS que me proporcionaram toda a base de conhecimento que tenho e muito dos valores que cultivo.

Ao professor Dr. Mareclo Farenzena, pela excelente orientação, muita paciência e compreensão.

Muito obrigada!

Resumo

A caldeira de recuperação química tem papel de destaque na indústria de celulose ao utilizar um efluente com alto potencial poluidor, o licor negro, para gerar vapor, energia e ainda recuperar químicos que serão reutilizados no processo. Garantir um bom desempenho operacional é, portanto, primordial para assegurar a competitividade da indústria.

O objetivo deste trabalho é desenvolver um modelo estático para a produção de vapor em uma caldeira de recuperação Kraft e a partir dele, propor as condições ótimas de operação para maximizar a sua produção. Além disso, deseja-se avaliar as diferentes estratégias de modelagem, comparando-se a utilização de modelos de Regressão Linear Multivariável e modelos não lineares de Redes Neurais Artificiais. A metodologia aplicada mostrou-se eficiente, obtendo-se modelos para predição para o vapor com R^2 acima de 0,95 em ambos os métodos de modelagem, com erro percentual médio absoluto inferior a 2%.

A partir das variáveis que compõem o modelo escolheram-se aquelas cuja otimização possui implementação mais factível. O problema de otimização indicou que, a partir de uma redistribuição de ar na caldeira, há um potencial de ganho médio de 5% na eficiência de queima do licor negro quando a caldeira está operando com carga reduzida e de 3,5% quando está operando nas condições nominais.

Lista de Figuras

Figura 2.1: Processo de fabricação de celulose. Fonte: adaptado de FIGUEIRÊDO, 2009.	2
Figura 2.2: Modelo de um neurônio artificial. Fonte: HAYKIN, 2001.	5
Figura 2.3: Problema de ajuste do modelo. Fonte: adaptado de <i>scikit-learn.org</i> .	6
Figura 3.1: Queimador auxiliar de CNCG, óleo e metanol. Fonte: adaptado de VILLARROEL, 1998.	13
Figura 3.2: Distribuição do ar na fornalha. Fonte: adaptado de PINHEIRO, 2001.	14
Figura 3.3: Esquema de uma caldeira de recuperação. Fonte: adaptado BEYCHOK, 2012.	14
Figura 3.4: Diagrama do processo de preparação do conjunto de dados.	18
Figura 3.5: Variação do ar total de acordo com a carga de licor.	20
Figura 3.6: Variação da pressão do ar secundário com a sua vazão.	21
Figura 3.7: Variação da pressão do ar terciário com a sua vazão.	21
Figura 4.1: Período identificado como estacionário.	23
Figura 4.2: Resultado da seleção de variáveis usando <i>stepwise</i> .	24
Figura 4.3: Desempenho dos modelos no conjunto de validação.	25
Figura 4.4: Comparação do desempenho dos modelos no conjunto de treino e validação.	26
Figura 4.5: Histograma do erro percentual do modelo linear no conjunto de validação.	26
Figura 4.6: Histograma do erro percentual do modelo não linear no conjunto de validação.	27
Figura 4.7: Impacto da vazão de ar primário na geração de vapor segundo a RNA.	28
Figura 4.8: Impacto da vazão de ar secundário na geração de vapor segundo a RNA.	28
Figura 4.9: Impacto da vazão de ar secundário alto na geração de vapor segundo a RNA.	29
Figura 4.10: Impacto da vazão de ar terciário na geração de vapor segundo a RNA.	29
Figura 4.11: Impacto da pressão do ar secundário alto na geração de vapor segundo a RNA.	29
Figura 4.12: Impacto da pressão do ar terciário na geração de vapor segundo a RNA.	30
Figura 4.13: Histograma do ganho ajustado da geração de vapor após a otimização.	31
Figura 4.14: Ganho médio ajustado da geração de vapor após otimização de acordo com a carga de licor alimentada.	31
Figura 4.15: Distribuição otimizada do ar na caldeira de recuperação conforme a carga de licor alimentada.	32
Figura 4.16: Comparação da pressão de ar secundário alto atual e otimizada.	33
Figura 4.17: Comparação da pressão de ar terciário atual e otimizada.	33

Lista de Tabelas

Tabela 3.1: Variáveis candidatas ao modelo de geração de vapor.	15
Tabela 3.2: Limites das restrições para a distribuição do ar na caldeira.	21
Tabela 3.3: Quadro resumo do problema de otimização.	22
Tabela 4.1: Melhores ajustes dos parâmetros de Cao & Rhinehart para o problema proposto.	22
Tabela 4.2: Seleção de variáveis a partir da busca exaustiva.	25
Tabela 4.3: Análise do impacto das variáveis no modelo RLM.	27
Tabela 4.4: Variação dos parâmetros manipulados durante a otimização.	32

Lista de Abreviaturas e Siglas

CFD	Fluidodinâmica computacional
CNCG	Gases concentrados não condensáveis
DNCG	Gases não condensáveis diluídos
EE	Estado estacionário
PCA	Análise de componentes principais
PLS	Regressão de mínimos quadrados parciais
R ²	Coefficiente de determinação
RLM	Regressão linear multivariável
RMSE	Raiz do erro médio quadrático
RNA	Redes neurais artificiais
TRS	Compostos reduzidos de enxofre
VBA	Visual Basic for Applications
tss/d	Toneladas de sólido seco por dia

Lista de Símbolos

$F_{\text{água}}$	Vazão de água de alimentação
$T_{\text{água}}$	Temperatura da água de alimentação que entra no balão
F_{licor}	Carga de licor
C_{licor}	Teor de secos no licor
V_{licor}	Velocidade de injeção do licor
T_{licor}	Temperatura de entrada do licor
$F_{\text{óleo}}$	Fluxo de óleo
F_{met}	Fluxo de metanol
F_{DNCG}	Fluxo de DNCG para ar secundário alto
T_{DNCG}	Temperatura do DNCG
F_{ar_1}	Vazão de ar primário
P_{ar_1}	Pressão do ar primário
T_{ar_1}	Temperatura ar primário
F_{ar_2}	Vazão de ar secundário
P_{ar_2}	Pressão do ar secundário
T_{ar_2}	Temperatura do ar secundário
$F_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Vazão do ar secundário alto
$P_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Pressão do ar secundário alto
$T_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Temperatura do ar secundário alto
F_{ar_3}	Vazão do ar terciário
P_{ar_3}	Pressão do ar terciário
T_{ar_3}	Temperatura do ar terciário
$C_{\text{O}_2_{\text{res}}}$	Oxigênio residual
F_{vapor}	Fluxo de vapor gerado

Sumário	
1 Introdução	1
2 Revisão Bibliográfica	2
2.1 Processo Kraft	2
2.1.1 Caldeira de recuperação Kraft	3
2.2 Técnicas de modelagem	3
2.2.1 Regressão Linear Multivariável	4
2.2.1 Redes Neurais Artificiais	5
2.2.2 Modelagem de caldeiras de recuperação	7
2.3 Desenvolvimento de modelos caixa-preta	7
2.3.1 Identificação do estado estacionário	8
2.3.2 Seleção de variáveis	10
2.4 Algoritmos de otimização	11
2.4.1 Aplicações de problemas de otimização na indústria de celulose	12
3 Materiais e Métodos	12
3.1 Caso de estudo – Descrição da Unidade Industrial	12
3.2 Desenvolvimento do modelo	15
3.2.1 Identificação das variáveis e aquisição dos dados de processo	15
3.2.2 Identificação do estado estacionário	16
3.2.3 Tratamento de dados	17
3.2.4 Seleção das variáveis do modelo	17
3.2.5 Redução da amostra	18
3.2.6 Modelagem	18
3.3 Otimização do processo	19
4 Resultados	22
4.1 Detecção do estado estacionário	22
4.2 Seleção de Variáveis	23
4.3 Validação dos modelos	25
4.3.1 Análise de sensibilidade	27
4.4 Otimização	30
5 Conclusões e Trabalhos Futuros	33
6 Referências	35
Apêndice A	40
Apêndice B	41
Apêndice C	43

1 Introdução

O setor de celulose e papel é um consumidor intensivo de energia elétrica e térmica, tendo sido responsável por 4,9% do consumo de eletricidade no Brasil em 2015 (EPE, 2016). Nesse sentido, as questões envolvendo eficiência energética tornam-se essenciais para a competitividade dessas empresas não só pelo aspecto econômico, mas também ambiental.

Os esforços nas últimas décadas para o desenvolvimento de equipamentos com melhor performance e a busca por uma unidade fabril energeticamente integrada, fez com que os parques modernos sejam autossuficientes e até comercializem seu excedente de energia. Dentre esses equipamentos, destaca-se a caldeira de recuperação química que, através da geração de elevados volumes de vapor, permite a implementação de um sistema de cogeração de alto rendimento energético por meio de turbogeradores a condensação.

Apesar da evolução significativa nos últimos anos, iniciativas para a redução de custos e otimização de processos são sempre necessárias. Este trabalho busca, através de técnicas de modelagem e otimização, melhorar a eficiência de queima de uma caldeira de recuperação química em uma indústria de celulose. A metodologia proposta está baseada na construção de modelos caixa-preta obtidos através de um banco de dados do histórico operacional e a aplicação de programação não linear para otimizar as variáveis operacionais de forma a aumentar o rendimento da geração de vapor. Além disso, avaliaram-se diferentes técnicas de modelagem empírica, comparando-se a utilização de modelos de Regressão Linear Multivariável e Redes Neurais Artificiais.

O presente trabalho é dividido como segue: no Capítulo 2 a revisão bibliográfica apresenta o processo genérico de produção de celulose com destaque para o funcionamento da caldeira de recuperação química; técnicas de modelagem, fundamentando as metodologias caixa-preta utilizadas no trabalho e trazendo exemplos de trabalhos envolvendo modelagem em caldeiras de recuperação; as etapas de desenvolvimento de um modelo empírico estático, tendo destaque os métodos de detecção do estado estacionário; finalmente, a uma revisão sobre algoritmos de otimização e suas aplicações na indústria de celulose. O Capítulo 3 divide-se em caso de estudo, o qual descreve a planta industrial que foi objeto de estudo desse trabalho, e metodologia utilizada na geração dos modelos e otimização. O Capítulo 4 apresenta os resultados e discussões sobre o tratamento dos dados, performance dos modelos e retorno da otimização. O Capítulo 5 encerra este trabalho com as conclusões decorrentes da análise dos resultados e apresenta as ideias de trabalhos futuros.

2 Revisão Bibliográfica

2.1 Processo Kraft

A fabricação Kraft de celulose inicia-se com a transformação das toras em cavacos de madeira que seguem para a etapa de cozimento em um equipamento chamado digestor. Nele são adicionados sulfeto de sódio e hidróxido de sódio (licor branco), resultando na dissolução da lignina e na liberação das fibras. Esse processo deve ser controlado de forma a maximizar a remoção da lignina e minimizar a degradação dos carboidratos (celulose e hemicelulose), garantindo a qualidade do produto final (D'ALMEIDA, 1988).

Após o cozimento, as fibras celulósicas formam uma pasta marrom que prossegue para as demais etapas da chamada linha de fibras, enquanto que o licor branco carregado de lignina e outros extrativos da madeira (licor negro fraco) são enviados para o ciclo de recuperação química.

Na linha de fibras, a polpa marrom é transferida para o sistema de depuração, que remove materiais não fibrosos, e lavagem, que separa a polpa do licor negro residual. A celulose é então encaminhada para as etapas de deslignificação com oxigênio, e posterior branqueamento com peróxido de hidrogênio, soda cáustica e dióxido de cloro, onde a alvura desejada é atingida. Por fim, a polpa é enviada para as etapas de secagem e enfardamento.

No ciclo de recuperação química, o licor negro fraco é concentrado através um sistema de evaporação, aumentando o seu conteúdo de sólidos e, portanto, seu poder calorífico. Este licor é, então, queimado em uma caldeira de recuperação. A parcela orgânica do licor gera calor utilizado na geração de vapor, enquanto que a parcela inorgânica dá origem ao material fundido (*smelt*), constituído de carbonato de sódio (Na_2CO_3) e sulfeto de sódio (Na_2S).

O *smelt* é diluído com o licor branco fraco, formando o licor verde. Este, segue para a etapa de caustificação onde reage com cal (CaO), produzindo carbonato de sódio (CaCO_3) e o hidróxido de sódio (NaOH). Desta forma, recupera-se o licor branco usado no cozimento. A Figura 2.1 é um esquema simplificado do processo de fabricação de celulose.

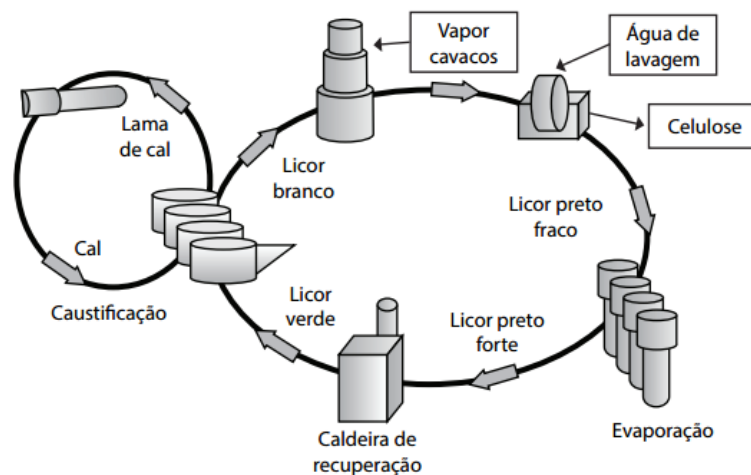


Figura 2.1: Processo de fabricação de celulose. Fonte: adaptado de FIGUEIRÊDO, 2009.

2.1.1 Caldeira de recuperação Kraft

A caldeira de recuperação química é a responsável pela viabilidade econômica e ambiental da fábrica. Por meio dela é possível recuperar os reagentes químicos para a produção do licor branco, gerar vapor e energia elétrica para atender os processos e ainda reduzir significativamente o fluxo de efluentes para o meio ambiente (D'ALMEIDA, 1988).

A caldeira de recuperação é composta basicamente por uma fornalha e equipamentos de troca térmica. A queima do licor na fornalha é complexa e envolve uma série de transformações, tais como: secagem, pirólise, oxidação e redução dos sais inorgânicos (COSTA et al., 2005). A água, presente nos tubos que recobrem a fornalha, recebe calor da queima de combustível é encaminhada para o balão superior na forma de vapor saturado.

Os gases de combustão da fornalha fluem até a região dos superaquecedores pelos quais passa o vapor advindo do balão, obtendo-se vapor superaquecido. A temperatura do vapor é controlada por meio de injeção direta de água através dos dessuperaquecedores (GRACE, 2008).

A distribuição de ar na fornalha tem forte influência na reação de redução do sulfato e na produção de vapor. Visto que a queima do licor exige um ambiente oxidante, para a combustão da sua carga orgânica, e, ao mesmo tempo, um ambiente redutor, para a redução da sua parte inorgânica, uma divisão do ar é necessária (ADAMS et al. 1997).

A alimentação do ar de combustão na fornalha é realizada em três níveis: primário, secundário e terciário. A função do ar primário é fornecer oxigênio para a combustão dos compostos de carbono. O ar secundário é o que mais tem efeito sobre a operação da caldeira. Seu objetivo é secar o licor, queimar compostos voláteis e controlar a altura e temperatura no leito. O controle adequado dessa temperatura aumenta a eficiência de redução do licor e reduz problemas relacionados à incrustação e à corrosão na região dos superaquecedores. Por fim, o ar terciário complementa a queima dos compostos voláteis e sela a fornalha, minimizando o arraste de material particulado. Outros níveis de ar podem ser adotados com a finalidade de reduzir as emissões atmosféricas. (VAKKILAINEN, 2005).

2.2 Técnicas de modelagem

Um modelo é uma abstração matemática de um processo real (SEBORG et al., 1989) em que, a partir de um conjunto de dados de entrada, obtém-se a resposta do processo (DENN, 1986). Dessa forma, o modelo é uma aproximação e não pode incorporar todas as características do processo real (GARCIA, 2005 e AGUIRRE, 2004). É usual dividir os modelos em três grupos relacionados ao nível de informação que eles contêm:

- Modelos “caixa-branca”: as equações são plenamente conhecidas a partir das características fenomenológicas do processo. Apesar de terem maior capacidade de extrapolação, nem sempre são viáveis devido ao esforço necessário para modelar um sistema partindo do equacionamento dos fenômenos envolvidos.
- Modelos “caixa-cinza”: são construídos utilizando os aspectos fenomenológicos conhecidos do sistema, enquanto que os parâmetros

desconhecidos são estimados a partir de dados experimentais ou de processo.

- Modelos “caixa-preta”: são construídos apenas a partir dos dados empíricos e suas equações são obtidas através de métodos matemáticos que relacionam as variáveis de entrada com as de saída.

A natureza multivariável e com distúrbios não medidos dos processos industriais torna difícil sua modelagem fenomenológica. Por outro lado, a grande disponibilidade e volume de dados históricos possibilita o desenvolvimento de modelos empíricos. Estes modelos representam com mais facilidade a realidade de uma planta industrial existente, pois, ao invés de basearem-se em definições teóricas e ideais, utilizam informações reais do processo (KADLEC et al. 2009).

KADLEC et al. (2009) cita algumas técnicas de desenvolvimento de modelos multivariáveis lineares e não lineares, como: regressão linear multivariável, análise de componentes principais, mínimos quadrados parciais, redes neurais artificiais, sistemas neuro-fuzzy e máquinas de suporte vetorial. Neste trabalho, serão abordadas as técnicas de regressão linear multivariável (RLM) e redes neurais artificiais (RNA).

2.2.1 Regressão Linear Multivariável

Na RLM uma variável dependente Y de ser predita assumindo que ela possui uma relação linear com diversas variáveis independentes $X_{i=1 \rightarrow n}$. De forma que:

$$Y = \beta + \sum_{i=0}^n \alpha_i X_i \quad (\text{Eq. 1})$$

onde β é o termo independente e α_i são os coeficientes lineares das variáveis independentes X_i . Os parâmetros de ajuste podem ser estimados pelo método dos mínimos quadrados aplicado a um conjunto de dados. Para testar o ajuste verifica-se a relação entre os valores Y observados e os preditos através do coeficiente de determinação (R^2) definido pela equação 4:

onde β é o termo independente e α_i são os coeficientes lineares das variáveis independentes X_i . Os parâmetros de ajuste podem ser estimados pelo método dos mínimos quadrados aplicado a um conjunto de dados. Para testar o ajuste verifica-se a relação entre os valores Y observados e os preditos através do coeficiente de determinação (R^2) definido pela equação 4:

$$SQ_{\text{tot}} = \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2 \quad (\text{Eq. 2})$$

$$SQ_{\text{exp}} = \sum_{i=1}^n (\hat{y}_i - \bar{y})^2 \quad (\text{Eq. 3})$$

$$R^2 = \frac{SQ_{\text{exp}}}{SQ_{\text{tot}}} \quad (\text{Eq. 4})$$

onde SQ_{tot} é a soma dos quadrados das diferenças entre cada valor observado (y_i) e a média das observações (\bar{y}). SQ_{exp} é soma dos quadrados da diferença entre o valor estimado de cada observação (\hat{y}_i) e a média das observações (\bar{y}).

2.2.1 Redes Neurais Artificiais

As redes neurais artificiais são uma ferramenta largamente utilizada na literatura para construção de modelos empíricos não lineares. Sua estrutura é baseada no funcionamento do cérebro humano cuja organização paralela e distribuída das unidades de processamento permite aprender padrões existentes em um conjunto de dados e generalizá-los (HAYKIN, 2001).

Uma rede é composta por camadas de neurônios (elementos de processamento) conectados entre si. A cada neurônio são apresentados os sinais de entrada ponderados por um peso que indica sua influência na saída da unidade. A soma desses sinais ponderados, acrescida de um *bias* (termo independente de ajuste), passa por uma função de ativação que limita o intervalo de amplitude do sinal de saída. Em redes com múltiplas camadas, a saída de cada neurônio da camada precedente será a entrada para os neurônios da camada posterior. Os pesos sinápticos e o nível de *bias* são os responsáveis por armazenar o conhecimento representado no modelo. A Figura 2.2 mostra uma representação do modelo de um neurônio.

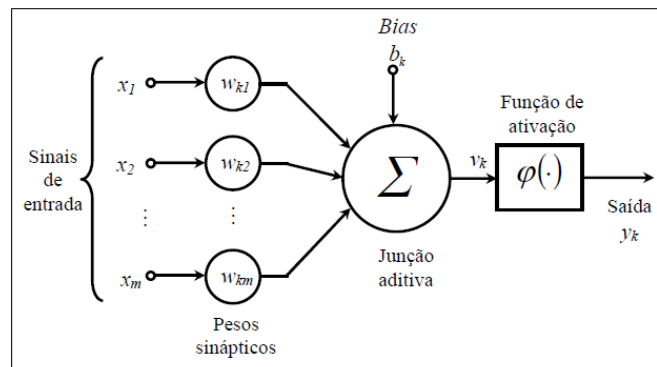


Figura 2.2: Modelo de um neurônio artificial. Fonte: HAYKIN, 2001.

A arquitetura é a maneira que os neurônios de uma rede estão estruturados e envolve a definição de parâmetros como: número de camadas da rede, número de neurônios das camadas intermediárias, função de ativação e a forma com que a informação flui através da rede (HAYKIN, 2001). Podem-se identificar três tipos de rede comumente utilizados:

- Redes alimentadas adiante (*feedforward*) de uma única camada: os valores de entrada estão diretamente associados a uma camada de neurônios que gera a saída do modelo. Devido a essa característica, são capazes de aprender apenas problemas linearmente separáveis (VELLASCO, 2007). O fluxo de dados segue sempre em direção à camada de saída.
- Redes alimentadas adiante (*feedforward*) de múltiplas camadas: compostas por múltiplas camadas escondidas de neurônios; são as redes mais difundidas na literatura. Segundo BARRON (1993), uma ou duas camadas ocultas com um número suficiente de nós, pois resolve a maior parte dos problemas encontrados.
- Redes recorrentes: suas saídas são realimentadas como sinais de entrada para neurônios da mesma camada ou camadas anteriores, sendo empregadas em sistemas dinâmicos variantes no tempo (HAYKIN, 2001).

A rede extrai informação dos dados a partir do processo de treinamento. Inicialmente, os dados disponíveis são divididos em um conjunto de treino, que será utilizado no processo de aprendizagem, e um conjunto de validação, que testa a capacidade de generalização do modelo.

Durante o treinamento há modificação dinâmica dos pesos sinápticos de forma a minimizar a raiz do erro médio quadrático (RMSE) dado pela equação 5. O algoritmo de aprendizado supervisionado mais utilizado é o *backpropagation*.

$$\text{RMSE} = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{n}} \quad (\text{Eq. 5})$$

Onde y_i são os valores observados, \hat{y}_i são os valores preditos e n é o tamanho da amostra analisada.

Segundo BRAGA et al. (2000), a capacidade de generalização depende de alguns fatores:

- Tamanho e representatividade estatística do conjunto de dados de treinamento;
- Arquitetura da rede neural;
- Complexidade do problema abordado.

Modelos com uma arquitetura complexa tendem a ficar sobreajustados (*overfitting*) aos dados de treinamento, o que reduz significativamente sua capacidade de generalização. Assim, o *overfitting* está associado a um número excessivo de neurônios ou camadas. É possível identificar esse problema, quando o RMSE é baixo no conjunto de treinamento e alto no conjunto de validação.

Por outro lado, se a complexidade do problema é grande frente ao modelo, a rede não é capaz de representá-lo de forma adequada, fato conhecido como subajuste ou *underfitting*. Neste caso, o RMSE é baixo tanto no conjunto de treino quanto no de validação. A Figura 2.3 representa esses fenômenos:

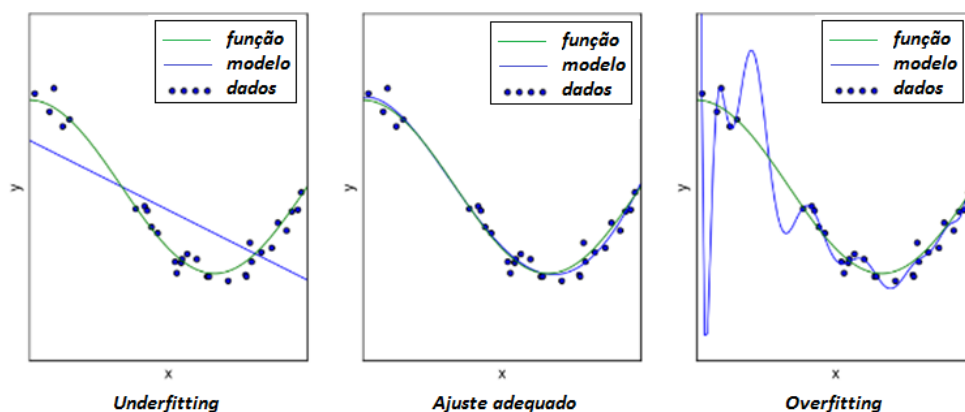


Figura 2.3: Problema de ajuste do modelo. Fonte: adaptado de *scikit-learn.org*.

2.2.2 Modelagem de caldeiras de recuperação

Dada à importância da caldeira de recuperação no processo de celulose e sua complexidade, cresce o número de estudos que visam reduzir perdas de ordem econômica, de segurança e ambiental fazendo uso de metodologias baseadas em modelos.

WIDARSSON e DOTZAUER (2008) realizaram estudos usando redes neurais probabilísticas para antever situações de vazamento em caldeiras de recuperação, ajudando a operação a identificar situações de falhas potenciais e agir de forma a evitá-las. MARTINELLI (2008) propõe uma ferramenta para monitorar variáveis de processo que, através da comparação com o modelo obtido via rede neural, detecte defeitos em diversas malhas de controle de uma caldeira de recuperação. ALMEIDA (2006) utilizou modelagem estatística através da técnica do modelo oculto de Markov para detecção de situações anormais em caldeiras de recuperação química.

SMITH et al. (2000) e REYES (2011) relacionaram as emissões de compostos reduzidos de enxofre (TRS) de uma caldeira de recuperação com variáveis de processo usando redes neurais. SAINLEZ e HEYEN (2013) compararam diferentes técnicas de treinamento supervisionado de RNAs para prever as emissões de óxidos de nitrogênio. CUNHA (2005) analisou a influência das condições de operação da caldeira no sistema de abate de material particulado através de um modelo neural.

COSTA et al. (2005) optaram por uma abordagem híbrida para a modelagem da caldeira de recuperação que reúne: minimização da energia livre de Gibbs, usada para descrição da eficiência de redução; rede neural, através da qual foi possível inferir a formação do particulado, e modelo linear, para prever a entalpia do vapor gerado.

POTRICH (2014) utilizou RNA para prever o percentual de carbono no licor verde como um parâmetro da eficiência de queima na caldeira. A rede não conseguiu generalizar o modelo devido aos poucos dados disponíveis.

Com o objetivo de desenvolver uma ferramenta de monitoramento do vapor gerado na caldeira, FILHO et al. (2009) realizaram uma modelagem neural que permitiu prever a vazão, a temperatura e a pressão de saída do vapor. Segundo os autores, esse modelo pode servir também como sinal para malhas de controle do nível do balão e da temperatura nos superaquecedores.

Uma classe de modelagem muito utilizada em caldeiras de recuperação é a Fluidodinâmica computacional (CFD). Na literatura é possível encontrar trabalhos que utilizam essa técnica para estudar o escoamento dos gases de combustão, distribuição do ar, arraste de gotas de licor, formação e deposição das cinzas e emissões atmosféricas. Dentre os autores que realizaram esse tipo de estudo, podemos citar: PÉREZ et al. (2016), LEPPÄNEN et al. (2014), FERREIRA (2013), MAAKALA (2013), FERREIRA et al. (2010) e FONTES et al. (2008). A CFD permite melhor compreensão dos fenômenos envolvidos, porém possui implementação mais complexa.

2.3 Desenvolvimento de modelos caixa-preta

Modelos empíricos são completamente dependentes dos dados e das condições operacionais do sistema utilizados na sua construção. Assim, a realização de algumas

etapas anteriores à modelagem é essencial para garantir a qualidade do conjunto de treinamento. Dentre eles pode-se citar (CAMILO e SILVA, 2009):

- Identificação das variáveis-chave: nesta etapa é feito um estudo do problema e a identificação dos dados relevantes para descrevê-lo a partir do conhecimento técnico sobre o sistema.
- Pré-tratamento dos dados: também conhecido como “limpeza”, envolve operações básicas como remoção de ruídos, tratamento de dados ausentes, eliminação de *outliers* (pontos aberrantes).
- Identificação dos estados estacionários: no desenvolvimento de modelos estáticos, faz-se necessário uma identificação dos regimes permanentes dentro do grupo de dados de processo. Metodologias estudadas para essa finalidade serão abordadas subseqüentemente.
- Transformação dos dados: consiste em tratar os dados de forma que eles possam ser compreendidos pelo algoritmo a ser utilizado. A normalização é um exemplo de transformação, sendo essencial para aplicação em redes neurais.
- Redução dos dados: um volume muito elevado de dados torna o treinamento do modelo lento e mais sujeito a problemas de ajuste. Nestes casos, as técnicas de redução devem ser aplicadas, mas sem perder a representatividade dos dados originais. A eliminação de dados redundantes é um exemplo.
- Seleção de variáveis: esta etapa consiste na identificação de um subconjunto de variáveis independentes que melhor explique a variável resposta (FERREIRA, 2012). A análise da significância permite verificar a influência de cada variável de entrada sobre a de saída, garantindo a melhor reprodutibilidade do modelo. Algumas técnicas de seleção de variáveis serão abordadas subseqüentemente.

2.3.1 Identificação do estado estacionário

A identificação do estado estacionário (EE) é uma fase importante no tratamento de dados em aplicações de modelagem, controle, otimização, análise de processo, detecção de falhas, reconciliação de dados, treinamento de redes neurais, entre outros (HUANG, 2010; JIANG, 2003). De modo geral, pode-se dizer que um processo está em EE quando as suas variáveis-chave permanecem estáveis ao longo do tempo, sem correlação umas com as outras (GARCIA, 2013).

Segundo MEJIA et al. (2010), os métodos para detecção de EE podem ser divididos entre os que utilizam a decomposição da série em segmentos e os que analisam a série temporal como um todo. Os últimos são baseados em indicadores calculados a partir de estatística, de estimativas das derivadas, de métodos gráficos e de aprendizagem de máquinas.

A maioria das metodologias executa seus cálculos sobre uma janela móvel ao longo da série temporal. Estes são mais utilizados para detecção *off-line* devido ao custo de

armazenamento de dados que se faz necessário. Por outro lado, há métodos que testam o processo em um ponto de amostragem, o que os torna mais viáveis para detecção em tempo real.

A abordagem mais clássica são as técnicas de regressão linear ao longo de uma janela de tempo, seguida pela avaliação da inclinação da curva, normalmente através do teste estatístico T. Se a inclinação for próxima à zero, há grande probabilidade de o período ser estacionário (MHAMDI, 2010 e GORE, 2011). A escolha do intervalo de análise está relacionada à dinâmica do sistema e é normalmente feita de forma empírica, o que se torna um problema em processos complexos (MEJIA, 2010).

CAO e RHINEHART (1995) sugerem uma modificação do teste F proposto por CROW et al. (1960), de maneira a substituir a definição de uma janela de temporal por filtros que ponderam os cálculos. O método se baseia na razão de duas variâncias, definidas como o desvio quadrático dos dados em relação à média e o desvio quadrático em relação a dados consecutivos. Idealmente, se a série estivesse em estado estacionário essa razão seria 1. Essa metodologia é largamente empregada em aplicações de detecção em tempo real.

GARCIA (2013) e MENEZES (2016) compararam as técnicas de Cao & Rhinehart e transformadas de Wavelets em trabalhos de otimização em tempo real. Ambos reportaram que os desempenhos dos métodos foram satisfatórios, sendo que método de Cao & Rhinehart possui uma implementação mais simples, porém é mais sensível a ruídos.

JIANG et al. (2003) utilizaram o método de detecção baseado em transformadas de Wavelets multiescala para a análise de processos industriais contínuos. Essa técnica que permite analisar sinais, simultaneamente, nos domínios do tempo e frequência e é bem consolidada na literatura.

MEJIA et al. (2010) realizaram um estudo comparativo entre o método tradicional de Cao & Rhinehart e uma nova abordagem proposta baseada na estimativa da autocorrelação local. O primeiro provou ter maior velocidade de processamento, no entanto requer o ajuste não trivial de quatro parâmetros. O segundo exige maior esforço computacional, mas tem menos parâmetros de ajuste.

Metodologia de Cao & Rhinehart

A metodologia de detecção do estado estacionário que será adotada neste trabalho é o teste estatístico F modificado proposto por CAO e RHINEHART (1995) bastante consolidado na literatura. Originalmente, o teste F baseia-se na razão entre a variância de duas populações de tamanho N e tem como hipótese nula a igualdade das variâncias. Cao & Rhinehart propõe a substituição do tamanho da janela temporal por filtros (λ) que permitam avaliar a estacionariedade ponto a ponto, sendo ideal para aplicações em tempo real. O método será descrito nessa seção.

Dada uma série temporal composta por $X_{i=1 \rightarrow N}$ valores, inicia o método pelo cálculo da média móvel ($X_{f,i}$) ponderada pelo parâmetro de ajuste (λ_1) variando de 0 a 1.

$$X_{f,i} = \lambda_1 X_i + (1 - \lambda_1) X_{f,i-1} \quad (\text{Eq. 6})$$

$X_{f,i}$ substitui à média \bar{x} no cálculo da variância (σ^2) convencional descrito abaixo:

$$\sigma^2 = \frac{1}{N-1} \sum_{i=1}^N (x_i - \bar{x})^2 \quad (\text{Eq. 7})$$

No entanto, esse cálculo também é computacionalmente exigente e necessita a definição de um tamanho de amostra N. Desta forma, o cálculo modificado da variância do conjunto substitui a janela por outro filtro de ajuste (λ_2) que varia de 0 a 1.

$$\sigma_{f,i}^2 = \lambda_2 (X_i - X_{f,i-1})^2 + (1 - \lambda_2) \sigma_{f,i-1}^2 \quad (\text{Eq. 8})$$

Já a segunda variância é baseada no quadrado da diferença de dois pontos sucessivos ponderado por um filtro (λ_3) que também possui valores de 0 a 1.

$$\delta_{f,i}^2 = \lambda_3 (X_i - X_{i-1})^2 + (1 - \lambda_3) \delta_{f,i-1}^2 \quad (\text{Eq. 9})$$

A relação entre as variâncias é determinada pela razão R_i de acordo com a equação 10:

$$R_i = \frac{(2 - \lambda_1) \sigma_{f,i}^2}{\delta_{f,i}^2} \quad (\text{Eq. 10})$$

Em teoria, para processos perfeitamente estacionários com média constante e presença somente de ruído branco não correlacionado, o valor de R deveria ser próximo à unidade. O valor crítico de R está relacionado ao intervalo de confiança desejado, de forma que se $R > R_{1-\alpha}$ o processo será considerado transiente. Os parâmetros sugeridos por CAO e RHINEHART (1995) são $R_{\text{crit}}=2$, $\lambda_1=0,2$, $\lambda_2 = \lambda_3=0,1$. No entanto, estudos realizados por BHAT e SARAF (2004) mostraram que usar valores de $\lambda_2 > \lambda_3$ reduz os erros do tipo I¹ e do tipo II².

2.3.2 Seleção de variáveis

A identificação das variáveis de relevância no processo é essencial para o seu controle e otimização eficientes. Segundo ROSSINI (2011), a seleção de variáveis estatisticamente significativas se justifica devido aos seguintes fatos:

- Um modelo composto por elevado número de variáveis pode apresentar problema de *overfitting*, prejudicando sua capacidade de generalização;
- A presença de variáveis não significativas no modelo pode introduzir ruídos aos dados;
- A identificação de variáveis-chave é normalmente baseada no conhecimento empírico de engenheiros e operadores, o que leva a resultados tendenciosos;
- Modelos mais enxutos facilitam a coleta e análise dos dados.

¹ Ocorre quando a análise não consegue rejeitar uma hipótese falsa, ou seja, é um falso positivo.

² Ocorre quando a análise rejeita uma hipótese verdadeira, ou seja, é um falso negativo.

Os algoritmos de seleção de variáveis podem ser divididos entre os que são independentes e os dependentes do modelo. Nas metodologias independentes do modelo são realizados testes estatísticos sobre subconjuntos das variáveis de forma a escolher o que melhor represente a variabilidade dos dados, como é o caso da Análise de Componentes Principais. Já na segunda categoria, são gerados modelos a partir de diferentes subconjuntos que são posteriormente comparados através de critérios de seleção, normalmente a minimização do erro. Neste tipo de abordagem destacam-se o uso de regressões multivariáveis, redes neurais e algoritmos genéticos, podendo se diferenciar pela forma como são executados (CONTRERAS, 2002). FACCHIN (2005) classifica as seleções dependentes do modelo em:

- Busca exaustiva: são gerados modelos testando-se todas as combinações possíveis das variáveis e escolhendo-se aquele que atenda melhor aos critérios de seleção. Apesar de ser um método bastante preciso, possui alto custo computacional;
- Seleção automática: o melhor conjunto de variáveis é obtido adicionando ou removendo sequencialmente variáveis ao modelo através de critérios estatísticos e observando-se a redução do erro de predição. São métodos mais rápidos do que a busca exaustiva, porém sofrem influência significativa de mínimos locais, podendo não alcançar o melhor subconjunto possível. Alguns exemplos desse tipo de abordagem são a seleção por adição (*forward selection*), por remoção (*backward elimination*) e a que permite adicionar ou remover através de teste de redundância das variáveis a cada passo (*stepwise regression*).
- Busca aleatória: são capazes de explorar uma região mais ampla de subconjuntos do que a seleção sequencial, aumentando-se a probabilidade de alcançar o máximo global. O algoritmo genético é um exemplo desse tipo de seleção em que alguns subconjuntos são gerados aleatoriamente, e seu desempenho em relação à predição da variável de saída é avaliado. Os conjuntos que apresentarem melhor resposta têm maior probabilidade de “passar a informação a diante” através das variáveis que os compõe. Novos subconjuntos são criados a partir dos anteriormente selecionados de forma que as variáveis mais “adaptadas” se propagam a cada evolução

ALMEIDA et al. (2004), comparam diferentes métodos de seleção de variáveis com objetivo desenvolver um modelo de redes neurais para uma caldeira de recuperação química. Foram testados os métodos de análise de componentes principais (PCA), regressão de mínimos quadrados parciais (PLS), algoritmos genéticos e os métodos automáticos baseados em regressão linear múltipla (*stepwise regression, backward elimination e forward selection*). Cada método obteve um conjunto diferente de variáveis, chegando-se a conclusão que os algoritmos sequenciais de seleção automática foram os mais adequados para a resolução desse problema.

2.4 Algoritmos de otimização

A simulação de processos permite que modelos possam ser utilizados para resolver problemas operacionais ao apontar as consequências de determinadas variáveis sobre o sistema e evitando a utilização da intuição e suposições (FIGUEIRÊDO, 2009). No entanto, não é possível determinar se os valores simulados são os ótimos para, por exemplo, a

maximização da produtividade (BRIGHENTI, 2006). Esta limitação é superada pela integração de técnicas simulação com as de otimização.

Segundo EMBIRUÇU E LIMA (1999), otimizar um processo consiste em encontrar os valores ótimos das variáveis manipuladas da unidade que proporcionam um melhor rendimento ou um maior lucro, normalmente sujeito a restrições operacionais. Os métodos dividem-se em:

- Programação Linear: quando a função objetivo e as restrições são funções lineares das variáveis de projeto. São exemplos o método SIMPLEX e Elipsoidais.
- Programação Não Linear: quando a função objetivo, ou pelo menos uma das restrições, é uma função não linear das variáveis de projeto. São exemplos: Método de Programação Linear Sequencial, Método de Programação Quadrática Sequencial, Método das Direções Viáveis e Método do Gradiente Descendente, entre outros.

2.4.1 Aplicações de problemas de otimização na indústria de celulose

O cenário competitivo das indústrias de celulose torna imprescindível a busca pela redução de custos e aumento da eficiência operacional. Neste contexto, ganham importância a utilização de métodos de modelagem e simulação, a solução de problemas de otimização e estratégias de controle avançadas.

SARIMVEIS et al (2003) propuseram a criação de uma ferramenta de suporte à gestão da geração de vapor e energia em uma fábrica de celulose. Para isso, eles desenvolveram um modelo através de balanços de massa e de energia na caldeira de recuperação, nas turbinas e nas válvulas redutoras de pressão. A modelagem serviu como restrição no problema de otimização cuja função objetivo era reduzir os custos da produção de vapor e eletricidade levando em conta os custos de combustível, preço da eletricidade e a demanda de produção.

ALMEIDA et al. (2007), obteve um modelo da caldeira via RNA para a geração de vapor e empregou a metodologia de superfície de resposta para identificar as regiões ótimas de operação nas quais a produção de vapor é mais elevada e estável. De forma semelhante, PINHEIRO (2011), partiu de um modelo neural para a geração de vapor e empregou algoritmo elipsoidal para otimizar as variáveis operacionais e maximizar a produção.

3 Materiais e Métodos

3.1 Caso de estudo – Descrição da Unidade Industrial

O presente trabalho foi desenvolvido a partir do estudo da nova caldeira de recuperação química (linha 2) da empresa CMPC Celulose Riograndense, localizada no município de Guaíba. Todas as informações contidas nessa seção foram baseadas no manual operacional da caldeira em questão.

A caldeira estudada possui capacidade de queimar 6.750 toneladas de sólido seco por dia (tss/d) de licor negro a um teor médio de 81% em sólidos secos, gerando vapor superaquecido de alta pressão. Além do licor, outras correntes são queimadas na

caldeira como forma de remediação de efluentes e recuperação energética. Os gases concentrados não condensáveis (CNCG) e o metanol, gerados nas etapas de cozimento e evaporação, são coletados e direcionados a um incinerador auxiliar. Já os gases não condensáveis diluídos (DNCG), gerados principalmente nos tanques de licor, são misturados ao ar secundário alto e queimados diretamente na caldeira. O fluxo de DNCG é relativamente constante, aumentado apenas quando é preciso queimar os gases excedentes da outra linha de produção presente na fábrica.

A caldeira conta ainda com um sistema de queimadores a óleo para situações de partida da unidade ou quando a queima de licor negro está reduzida. Em teoria para uma alimentação de licor inferior a 2000 tss/d é necessária a queima conjunta de óleo combustível, no entanto, no período analisado por este trabalho, foi possível verificar a queima exclusiva de licor apenas a partir de 4000 tss/d.

Os queimadores auxiliares estão acoplados à parede da fornalha na altura dos níveis de ar secundário e secundário alto. A Figura 3.1 representa este equipamento.

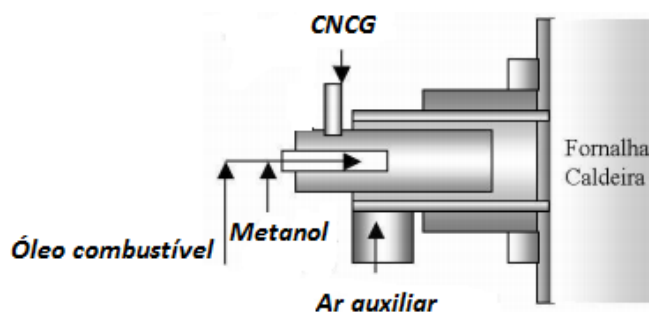


Figura 3.1: Queimador auxiliar de CNCG, óleo e metanol. Fonte: adaptado de VILLARROEL, 1998.

A alimentação do licor negro na fornalha é realizada na forma de spray por bocais nas paredes da mesma. A quantidade de bicos utilizados depende da carga de licor e da velocidade de injeção pretendida, podendo chegar a 16 bocais em operação. O tamanho da partícula é essencial para o desempenho da caldeira, uma vez que as gotas devem ser pequenas o suficiente para secarem rápido, e grandes o bastante para não serem arrastadas pelos gases. O controle desse tamanho depende da pressão nos bocais, da temperatura do licor e do teor de sólidos secos.

O sistema de ar é distribuído em três níveis, sendo que o nível secundário se subdivide em secundário e secundário alto. Cada nível de ar é pré-aquecido através de um estágio de troca térmica com água quente seguido dois estágios com vapor de média pressão.

O ar primário localiza-se na base da fornalha e influencia principalmente a eficiência de redução. Ele é introduzido em quantidade insuficiente para uma oxidação completa, atuando apenas na camada mais externa do leito, o que gera uma atmosfera deficiente em oxigênio e favorece a redução dos compostos inorgânicos. O ar primário, portanto, requer baixa pressão estática de forma a afastar o leito carbonizado da parede da fornalha com a mínima penetração possível na camada.

O nível secundário é o mais importante da caldeira, estando localizado logo abaixo dos bicos de injeção de licor. Uma pressão estática elevada neste nível é importante para manter a penetração do jato de ar e aumentar a turbulência, melhorando a mistura do ar

com os gases da fornalha. Além disso, é importante para a manutenção da temperatura e altura do leito.

O ar terciário localiza-se acima dos bicos do licor e tem a função de completar o processo de combustão e selar a fornalha reduzindo arraste de particulado. Este nível de ar exige altas pressões e é o responsável controle do oxigênio residual. A Figura 3.2 mostra uma ilustração da distribuição de ar na fornalha.

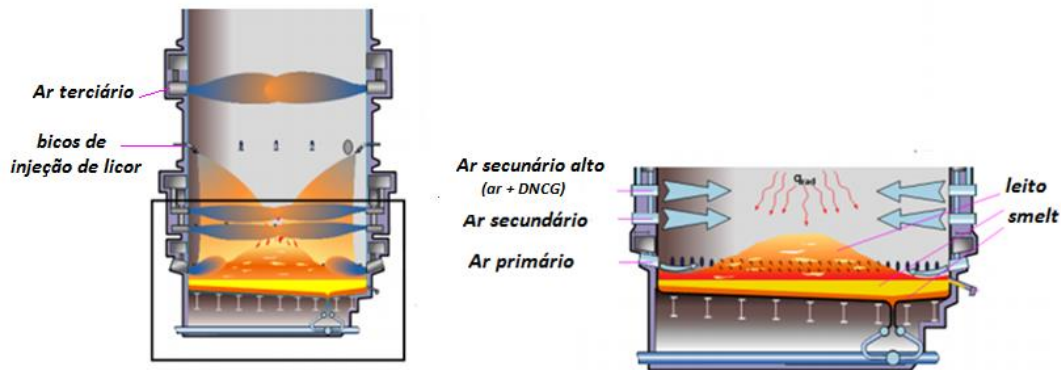


Figura 3.2: Distribuição do ar na fornalha. Fonte: adaptado de PINHEIRO, 2001.

A água desmineralizada que alimenta o sistema passa, antes de entrar no balão, por um processo de desaeração, pré-aquecimento com vapor e troca térmica com os gases de exaustão da caldeira em um economizador. A temperatura de saída da água do pré-aquecedor é limitada pela diferença entre a temperatura do balão e o economizador com o objetivo de evitar sua ebulição dentro desse último. A água de alimentação também é usada como reposição no sistema de dessuperaquecimento do vapor. Além disso, parte da água está sempre sendo retirada da caldeira através do sistema de purga que visa evitar o acúmulo de sais no sistema, precisando ser levada em conta no controle da vazão alimentada. Um esquema simplificado da circulação de água está representado na Figura 3.3.

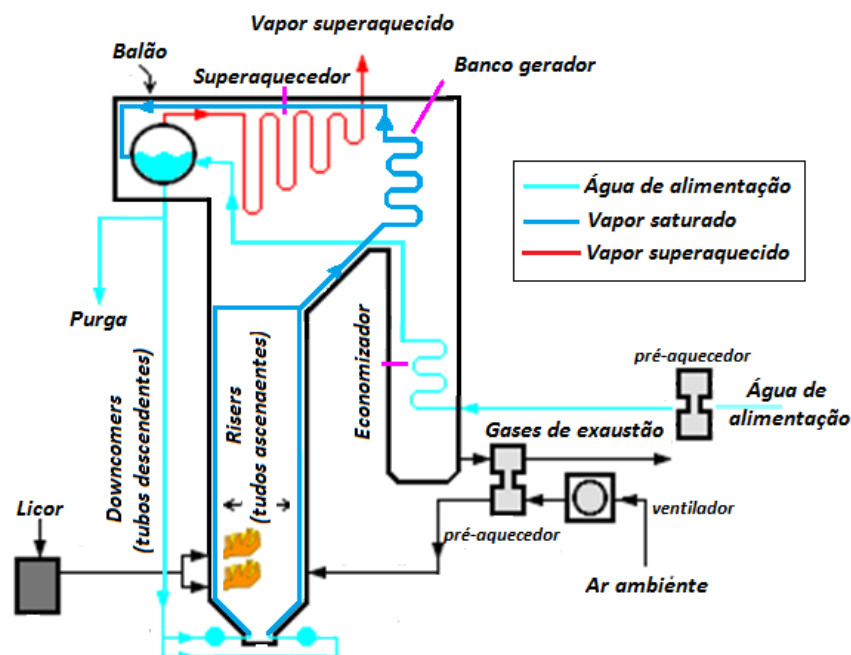


Figura 3.3: Esquema de uma caldeira de recuperação. Fonte: adaptado BEYCHOK, 2012.

3.2 Desenvolvimento do modelo

O desenvolvimento do modelo foi realizado seguindo o procedimento apresentado no Capítulo 2. Nesta seção, serão descritas as metodologias utilizadas para cada etapa.

3.2.1 Identificação das variáveis e aquisição dos dados de processo

A escolha preliminar das variáveis de entrada baseou-se no estudo do processo, em referência de trabalhos similares encontrados na literatura (PINHEIRO, 2011; ALMEIDA et al. 2007; POTRICH, 2014; REYES, 2011) e no conhecimento de operadores e de engenheiros. A Tabela 3.1 mostra as variáveis operacionais avaliadas.

Tabela 3.1: Variáveis candidatas ao modelo de geração de vapor.

Nº	Nomenclatura	Variáveis	Unidade
1	$F_{\text{água}}$	Vazão de água de alimentação	m^3/h
2	$T_{\text{água}}$	Temperatura da água de alimentação que entra no balão	$^{\circ}\text{C}$
3	F_{licor}	Carga de licor	tss/d
4	C_{licor}	Teor de secos no licor	%
5	V_{licor}	Velocidade de injeção do licor	m/s
6	T_{licor}	Temperatura de entrada do licor	$^{\circ}\text{C}$
7	$F_{\text{óleo}}$	Fluxo de óleo	t/h
8	F_{met}	Fluxo de metanol	Kg/h
9	F_{DNCG}	Fluxo de DNCG para ar secundário alto	Nm^3/min
10	T_{DNCG}	Temperatura do DNCG	$^{\circ}\text{C}$
11	F_{ar_1}	Vazão de ar primário	Nm^3/min
12	P_{ar_1}	Pressão do ar primário	mmH_2O
13	T_{ar_1}	Temperatura ar primário	$^{\circ}\text{C}$
14	F_{ar_2}	Vazão de ar secundário	Nm^3/min
15	P_{ar_2}	Pressão do ar secundário	mmH_2O
16	T_{ar_2}	Temperatura do ar secundário	$^{\circ}\text{C}$
17	$F_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Vazão do ar secundário alto	Nm^3/min
18	$P_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Pressão do ar secundário alto	mmH_2O
19	$T_{\text{ar}_2_{\text{alto}}}$	Temperatura do ar secundário alto	$^{\circ}\text{C}$
20	F_{ar_3}	Vazão do ar terciário	Nm^3/min
21	P_{ar_3}	Pressão do ar terciário	mmH_2O
22	T_{ar_3}	Temperatura do ar terciário	$^{\circ}\text{C}$
23	$C_{\text{O}_2_{\text{res}}}$	Oxigênio residual	%
24	F_{vapor}	Fluxo de vapor gerado	t/h

Os dados de todas as variáveis operacionais foram coletados através do Sistema PI (Sistema de Gerenciamento de Informações de Processo) da OSI soft, Inc. Como precisa gerenciar uma grande quantidade de informação, o software realiza um processamento desses dados antes de armazená-los. Esse sistema constitui-se dos mecanismos de exceção e compressão. O primeiro consiste em se estabelecer um valor mínimo de variação no parâmetro para que este seja armazenado, já o segundo estabelece uma faixa

de desvio na tendência dos dados acima da qual a informação é armazenada, ou seja, se o ponto está dentro do ângulo de desvio da variável anterior, é descartado.

Os parâmetros de exceção e compressão podem afetar significativamente a qualidade dos dados e foram utilizados para se definir o intervalo de amostragem. Uma vez que o sistema estabelece um tempo máximo de 3 minutos acima do qual o valor da variável é obrigatoriamente armazenado, este foi o tempo escolhido. O período analisado foi entre 03 /03 /2016 a 10 /04 /2017, somando 193.440 pontos.

3.2.2 Identificação do estado estacionário

O método de Cao & Rhinehart parte da premissa que não há autocorrelação nos dados analisados. A autocorrelação está fortemente presente em séries temporais de processos contínuos, visto que o valor de uma determinada variável controlada depende do seu valor passado. Uma forma de reduzir esse problema é reduzir a frequência de amostragem. Assim, um pré-tratamento se fez necessário onde o banco de dados, anteriormente amostrado a cada 3 min, foi inicialmente submetido a uma média móvel ponderada conforme a equação 11 e, em seguida, os valores das variáveis foram coletados com uma frequência de 30 min.

$$X_i = \frac{0,2X_{i-4} + 0,4X_{i-3} + 0,6X_{i-2} + 0,8X_{i-1} + X_i + 0,8X_{i+1} + 0,6X_{i+2} + 0,4X_{i+3} + 0,2X_{i+4}}{5} \quad (\text{Eq. 11})$$

onde X são valores de uma variável igualmente amostrados no tempo e o índice i representa sua posição na série temporal relativa à janela da média móvel realizada.

Uma vez obtido o novo banco de dados com 19.344 pontos, selecionou-se um conjunto de variáveis-chave de operação da caldeira, a partir do conhecimento operacional, sobre o qual seria aplicado o método. As variáveis selecionadas foram a vazão de água de alimentação (m³/h), a carga de licor (tss/d), o fluxo de óleo (t/h), o fluxo de metanol (Kg/h), a vazão de CNCG (Nm³/min), a vazão de ar total (Nm³/h) e o fluxo de vapor gerado (t/h).

Como já descrito no capítulo 2, o método exige o ajuste de quatro parâmetros, R_{crit} , λ_1 , λ_2 e λ_3 , relacionados ao nível de confiança e à dinâmica de cada problema cuja sintonia não é trivial. Optou-se, então, por realizar um ajuste empírico baseado em uma pré-seleção dos regimes do processo e buscando os parâmetros que minimizassem erros do tipo I e II.

A identificação preliminar dos estados estacionários foi realizada observando-se a mudança de set-point da carga de licor e o tempo para que essa se estabilizasse, plotando-se gráficos de todas as variáveis selecionadas e analisando seu comportamento. Essa pré-avaliação foi feita apenas a partir de agosto de 2016 devido à ausência de histórico do set-point da alimentação de licor negro em períodos anteriores.

Em seguida, o método de Cao & Rhinehart foi implementado em um algoritmo utilizando a linguagem *Visual Basic for Applications* (VBA) no Microsoft Excel® 2010 conforme consta no Apêndice A.

No código foi adotado R_{crit} igual a 2 tal qual sugerido por CAO e RHINEHART (1995) e testou-se diversas combinações dos filtros λ_1 , λ_2 e λ_3 , variando seus valores entre 0 e 1. Foi considerado que o processo está em estado estacionário quando, para todas as

variáveis, o valor de R fosse menor que R_{crit} . O resultado obtido pelo algoritmo foi então comparado ao esperado pela análise preliminar, permitindo obter a sintonia que represente o processo com menor erro do tipo I e do tipo II.

Depois de realizada a aplicação do método Cao & Rhinehart em todo o banco de dados com os parâmetros de ajuste encontrados, foi feita uma nova inspeção através de gráficos para confirmar a classificação dos regimes do processo. Assim, após a análise dos dados e excluindo-se os períodos em que a fábrica esteve parada, obteve-se 9.970 pontos em estado estacionário.

3.2.3 Tratamento de dados

O tratamento de dados foi realizado utilizando o Microsoft Excel® 2010 e consistiu na identificação de *outliers* e dados faltantes. Conforme indica a bibliografia esses pontos podem ser eliminados ou substituídos por valores médios. Como os dados já foram pré-tratados com a média móvel ponderada, decidiu-se eliminar os valores incoerentes e aplicar a média sempre que possível em dados faltantes. A identificação dos *outliers* foi feita filtrando-se todos os dados que excedessem o limiar estabelecido pela equação 12. O conjunto avaliado incluiu os pontos em regime transiente e estacionário com a fábrica em operação, ou seja, sem considerar períodos de partida e parada.

$$Limite = \mu \pm 4 * \sigma \quad (\text{Eq. 12})$$

sendo μ a média da população para cada variável e σ o desvio padrão.

3.2.4 Seleção das variáveis do modelo

Primeiramente, foi feita uma reavaliação das variáveis previamente selecionadas. Optou-se por se trabalhar com pontos operacionais em que não houvesse queima de óleo combustível por se tratar de uma exceção operacional que implica na mudança de diversos parâmetros. A vazão da água de alimentação também foi removida por ser uma realimentação da produção do vapor. A remoção dos períodos com queima de óleo reduziu a amostra de 9.915 para 8.256 pontos.

A seleção das variáveis foi realizada através de uma combinação da seleção automática com a busca exaustiva. Utilizando o algoritmo sequencial *stepwise regression* do *Statistics and Machine Learning Toolbox* do Matlab® 2009a foi possível determinar as principais variáveis que participariam do modelo. A cada passo, a ferramenta adiciona a variável que tenha maior correlação com a saída, realiza o teste de significância F e verifica o ajuste do RMSE. Posteriormente, o programa executa uma seleção por remoção, analisando a possível exclusão de uma variável redundante do modelo.

Uma vez definidas as variáveis com maior relevância, a seleção secundária baseou-se em uma busca exaustiva que testou todas as combinações possíveis das demais variáveis analisando a redução do erro percentual médio e o aumento do R^2 no modelo linear. A implementação desse método em Matlab pode ser verificada no Apêndice B.

A escolha de unir os dois procedimentos deve-se ao fato de que a seleção automática ser mais rápida, reduzindo o número de combinações a ser exploradas, mas possui algumas limitações, como: não garante a obtenção do melhor modelo possível, tem como resposta um único modelo final quando pode haver outros igualmente bons e com menos

variáveis, não leva em conta o conhecimento técnico sobre o processo, sendo às vezes necessário forçar determinados preditores ao modelo.

3.2.5 Redução da amostra

A eliminação de dados redundantes é importante, pois eles podem gerar *overfitting* e ainda gerar um R^2 superior ao real, induzindo a um erro de análise. Além disso, um conjunto reduzido aumenta a velocidade do treinamento. Para cumprir esse objetivo foi feita a média de todos os pontos identificados num mesmo período estacionário, reduzindo a amostra para 575 pontos. A Figura 3.4 é um resumo das etapas que culminaram na obtenção do conjunto de dados final.

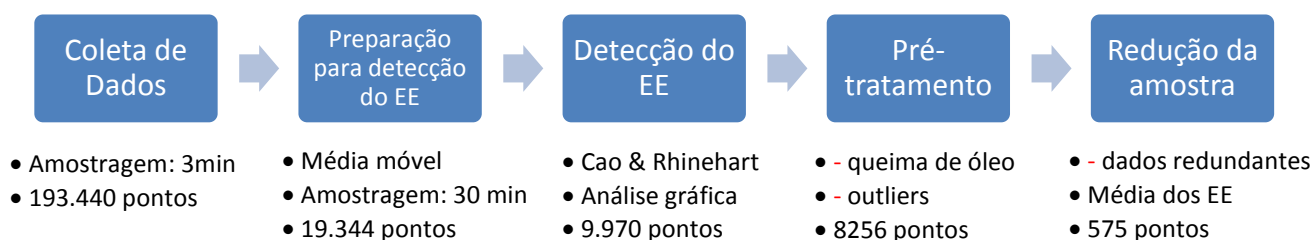


Figura 3.4: Diagrama do processo de preparação do conjunto de dados.

3.2.6 Modelagem

A partir do banco de dados composto pelas variáveis selecionadas, tratadas e reduzidas, procedeu-se ao desenvolvimento de um modelo linear usando RLM e um modelo não linear usando RNA. A amostra foi dividida em 70% para o conjunto de treino e 30% para o conjunto de teste. Posteriormente, fez-se uma simulação com todos os pontos em estado estacionário (8256 valores de cada variável) e comparou-se os valores gerados pelo modelo com os valores reais da variável de resposta através do R^2 e do erro médio percentual. Os algoritmos de treino e validação encontram-se no Apêndice C.

Regressão Linear Multivariável

Como já visto no Capítulo 2, a RLM pode ser descrita pela equação 13 como sendo a combinação linear de $X_{i=1 \rightarrow n}$ variáveis. Vetorialmente, para uma amostra de “ p ” pontos e “ n ” variáveis de entrada, o problema se resume à expressão:

$$Y (p \times 1) = X(p \times m) * b (m \times 1) \quad (\text{Eq. 13})$$

onde m corresponde às n variáveis de entrada acrescida do termo independente, portanto $m = n+1$. Y é o vetor coluna da variável resposta correspondente aos p instantes amostrais. A matriz X é composta pelas n variáveis de entrada acrescida de uma coluna unitária que será multiplicada pelo termo independente de ajuste. Finalmente, o vetor coluna b engloba os coeficientes da regressão.

Desta forma, uma vez carregadas as matrizes X e Y Matlab® 2009a, utilizou-se o operador “\” que fornece a inversa da matriz à esquerda para se realizar a divisão matricial e obter os coeficientes de regressão conforme a equação 14:

$$b = X \setminus Y \quad (\text{Eq. 14})$$

Rede Neural Artificial

Para gerar e treinar a rede foi necessário transformar os dados através da normalização das variáveis conforme a equação 15:

$$Z_{i_norm} = \frac{Z_i - Z_{\min}}{Z_{\max} - Z_{\min}} \quad (\text{Eq. 15})$$

onde Z_i é o valor da variável Z que se deseja normalizar, Z_{\min} e Z_{\max} são os limites da variável Z obtidos no conjunto de todos os dados (estacionário e transiente) depois de removidos os períodos de partida, parada e *outliers*.

A arquitetura de rede escolhida para este trabalho foi a *feedforward* com uma camada intermediária, função de ativação tangencial na entrada da camada intermediária e função de ativação linear na camada de saída. A função *newff* do Matlab® 2009a foi utilizada para gerar as redes enquanto que a função *train* foi destinada ao treinamento. Durante o treinamento o programa usou o algoritmo *backpropagation* com otimização de Levenberg-Marquardt que ajusta os pesos de cada neurônio com o objetivo de minimizar o erro a cada iteração. Por ser um problema de otimização, o ajuste dos pesos é dependente do chute inicial; por isso, optou-se por realizar 200 treinamentos para cada rede e escolher aquela que apresentasse melhor desempenho. Analisou-se, também, o impacto do número de neurônios na camada intermediária variando o mesmo de 1 até 20.

3.3 Otimização do processo

Para proceder ao problema de otimização utilizou-se a função *fmincon* do Matlab® 2009a ideal para casos de otimização não lineares restritos formulados da seguinte forma:

$$\min_x f(x) \text{ tal que: } \begin{cases} c(x) \leq 0 \\ c_{eq}(x) = 0 \\ Ax \leq b \\ A_{eq}x = beq \\ lb \leq x \leq ub \end{cases} \quad (\text{Eq. 16})$$

Onde se deseja minimizar a função objetivo $f(x)$ sujeita às restrições não lineares de desigualdade e igualdade, às restrições lineares de desigualdade e igualdade, e aos limites de cada variável, respectivamente. Sendo, b e b_{eq} vetores, A e A_{eq} matrizes, $c(x)$ e $c_{eq}(x)$ funções que retornam vetores, e lb e ub também vetores. A função de otimização retorna os valores das x_i variáveis que minimizam a função objetivo a partir de um chute inicial apresentado pelo usuário através do vetor x_0 . Neste trabalho, utilizou-se a média entre os limites de cada variável como valores iniciais.

Devido à presença de restrições não lineares, a função *fmincon* foi aplicada tanto para o modelo linear quanto para a rede neural e baseou-se no método de programação quadrática sequencial através do algoritmo *active set*.

A otimização teve a finalidade de maximizar a produção de vapor para uma determinada vazão de queima de licor negro. Para isso, definiu-se a função objetivo como

sendo $f(x) = -\text{fluxo de vapor gerado}$ que, por sua vez, é a saída dos modelos obtidos. Em cada otimização a carga de licor foi mantida fixa de forma que se pudesse avaliar a eficiência de queima dada pela equação 17.

$$\text{Eficiência} = \frac{\text{ton vapor gerado}}{\text{ton licor queimado}} \quad (\text{Eq. 17})$$

Além do fluxo de queima do licor, outras variáveis do modelo não podem ser manipuladas livremente. As quantidades de DNCG e metanol influenciam na geração de vapor por possuírem poder calorífico significativo, mas sua disponibilidade depende de outras etapas do processo, não sendo, portanto, variáveis de decisão para a otimização. As temperaturas das correntes de ar também são parâmetros críticos, pois os pré-aquecedores possuem capacidade limitada e ainda utilizam o próprio vapor gerado para aquecimento, sendo necessária a realização de uma análise de viabilidade que não consta no escopo deste trabalho.

Assim, optou-se por utilizar como variáveis de decisão aquelas cuja implementação fosse mais factível. A modificação da proporção do ar e pressões de ar na caldeira se encaixam nesse quesito por não terem custo de implementação significativo e ser possível testar o impacto das duas modificações na geração de vapor de forma simples e sem investimento adicional.

Para poder avaliar o ganho da otimização frente aos dados históricos do processo, utilizou-se os mesmos como ponto de partida, variando-se apenas os parâmetros de decisão sujeitos às devidas restrições e mantendo os demais constantes.

Os limites máximo e mínimo das variáveis foram obtidos a partir do histórico completo, compreendendo os dados em regime permanente e transiente. Uma análise através de histogramas mostrou as regiões que concentravam a maior parte dos pontos operacionais, definindo as fronteiras utilizadas.

As restrições foram obtidas através de gráficos de tendência acrescida de uma faixa de variação. Essa faixa foi determinada a partir da análise da distribuição dos resíduos baseada histogramas. A relação encontrada para as vazões de cada nível de ar separadamente e ar total (Figura 3.5) com a carga de licor alimentada foi linear. Já a relação obtida entre a pressão do ar secundário alto e sua respectiva vazão foi polinomial (Figura 3.6).

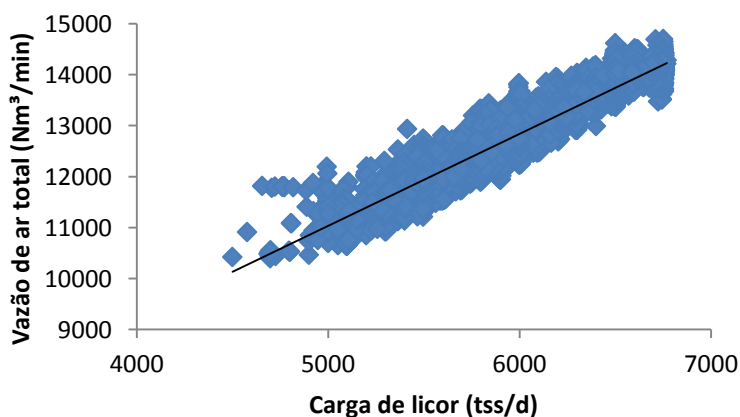


Figura 3.5: Variação do ar total de acordo com a carga de licor.

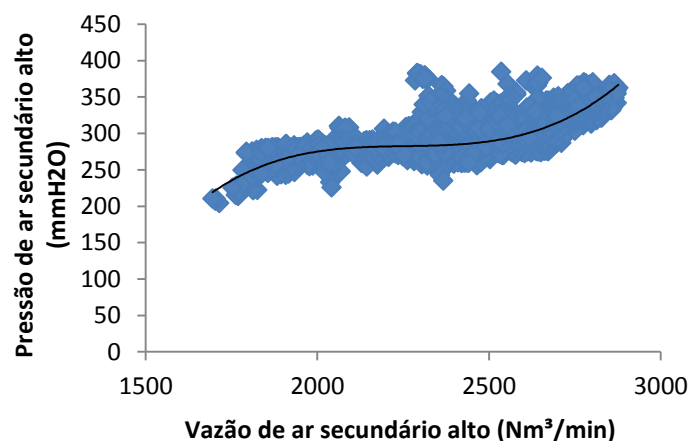


Figura 3.6: Variação da pressão do ar secundário com a sua vazão.

A relação da pressão do ar terciário com sua respectiva vazão não apresentou nenhuma tendência definida, mas é possível observar pelo gráfico da Figura 3.7 que há valores máximos operacionais ligeiramente diferentes para determinadas faixas de injeção de ar. Portanto, traçaram-se retas que melhor representassem os limites dessa variável de acordo com a vazão de ar alimentada.

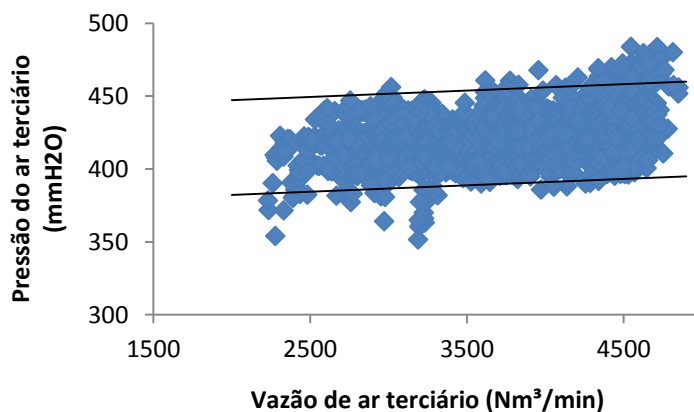


Figura 3.7: Variação da pressão do ar terciário com a sua vazão.

A fim de otimizar a distribuição do ar na caldeira, definiu-se uma faixa de variação dos percentuais de cada ar em relação ao total. Esses limites também foram definidos a partir da observação dos dados históricos e são mostrados na Tabela 3.2.

Tabela 3.2: Limites das restrições para a distribuição do ar na caldeira.

Variável	Limite inferior	Limite superior
% de ar primário	21%	28%
% de ar secundário	27%	35%
% de ar secundário alto	16%	22%
% ar terciário	21%	31%

Ao final, as otimizações que não convergiram foram identificadas através do *exitflag* da função *fmincon* e desconsideradas. A Tabela 3.3 mostra um resumo do problema de otimização.

Tabela 3.3: Quadro resumo do problema de otimização.

Parâmetro da otimização	Descrição
Função objetivo	Minimizar a função = -fluxo de vapor
Limites	Valores máximo e mínimo das variáveis
Restrições lineares de desigualdade	Relação de cada nível de ar e ar total com a carga de licor alimentada, relação da pressão de ar terciário com sua respectiva vazão.
Restrições não lineares de desigualdade	Relação da pressão de ar secundário alto com sua respectiva vazão e proporção de cada nível ar em relação ao ar total
Variáveis de decisão	Vazões das correntes de ar: primário, secundário, secundário alto e terciário. Pressões: ar secundário alto e terciário

4 Resultados

4.1 Detecção do estado estacionário

Conforme descrito na metodologia, o método de Cao & Rhinehart foi associado ao método gráfico para a identificação do estado estacionário, sendo que o primeiro dá um direcionamento sobre onde há maior probabilidade de haver regiões em EE e o segundo realmente confirma a hipótese. O ajuste dos coeficientes foi realizado de forma empírica conforme descrito no apêndice A e os melhores resultados obtidos são mostrados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1: Melhores ajustes dos parâmetros de Cao & Rhinehart para o problema proposto.

λ_1	λ_2	λ_3	Erro do tipo I (%)	Erro do tipo II (%)	Erro total (%)
0,65	0,7	0,002	5,81	12,8	18,61
0,65	0,75	0,002	5,66	13,1	18,76
0,65	0,8	0,002	5,53	13,32	18,85
0,65	0,85	0,002	5,45	13,5	18,95

A quantificação do erro foi feita ao se comparar a análise prévia baseada nas mudanças de set point e análise gráfica com a reposta do algoritmo. A sintonia escolhida foi a primeira apresentada na Tabela 4.1 por possuir menor erro total.

Por se tratar de um sistema sujeito a distúrbios, à imprecisão de medição e à ação de diversos controladores, suas variáveis nunca estão completamente estáticas sendo necessário admitir-se certa variabilidade dentro de um mesmo período em EE. A Figura 4.1 ilustra o comportamento das variáveis em um desses períodos.

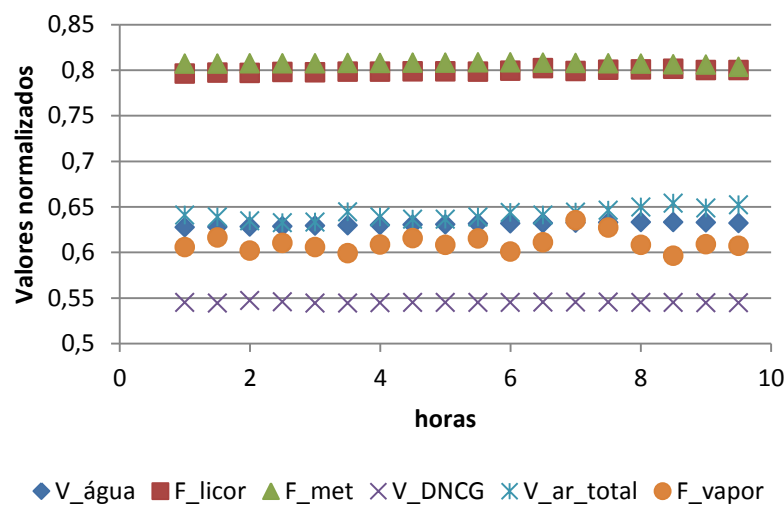


Figura 4.1: Período identificado como estacionário.

4.2 Seleção de Variáveis

Conforme descrito no Capítulo 3, das 23 variáveis previamente selecionadas foram removidas a vazão de alimentação da água e o fluxo do óleo combustível, considerando-se apenas os instantes operacionais com queima exclusiva de licor. A seleção de variáveis utilizou o conjunto de dados contendo todos os 8256 pontos não normalizados em estado estacionário.

Como uma primeira análise, usou-se a função *stepwise* no Matlab em que, através de uma interface amigável é possível acompanhar a redução do RMSE em cada etapa do algoritmo. Percebe-se pela Figura 4.2 que com a inclusão de apenas de uma variável, a carga de licor, o RMSE já reduz significativamente ao passo que todas as variáveis posteriormente adicionadas contribuem de forma muito sutil para a melhora do modelo.

Alguns testes foram realizados retirando-se as últimas variáveis selecionadas do modelo e foi possível verificar que o *stepwise* excluía variáveis que antes havia selecionado e também mudava a ordem com que as variáveis eram adicionadas ao modelo. Esse fenômeno é explicado pela baixa contribuição das variáveis secundárias de uma forma geral e pela sensibilidade do método ao conjunto de dados apresentado.

Desta forma, observando as variáveis que apareciam mais frequentemente entre as dez primeiras selecionadas pelo *stepwise*, elegeram-se as variáveis-chave: F_{licor} , V_{licor} , F_{ar_1} , F_{ar_2} , $F_{ar_2_alto}$, F_{ar_3} . A vazão de ar primário, apesar de não ter ficado entre as mais frequentes, foi forçada no modelo por uma questão de coerência.

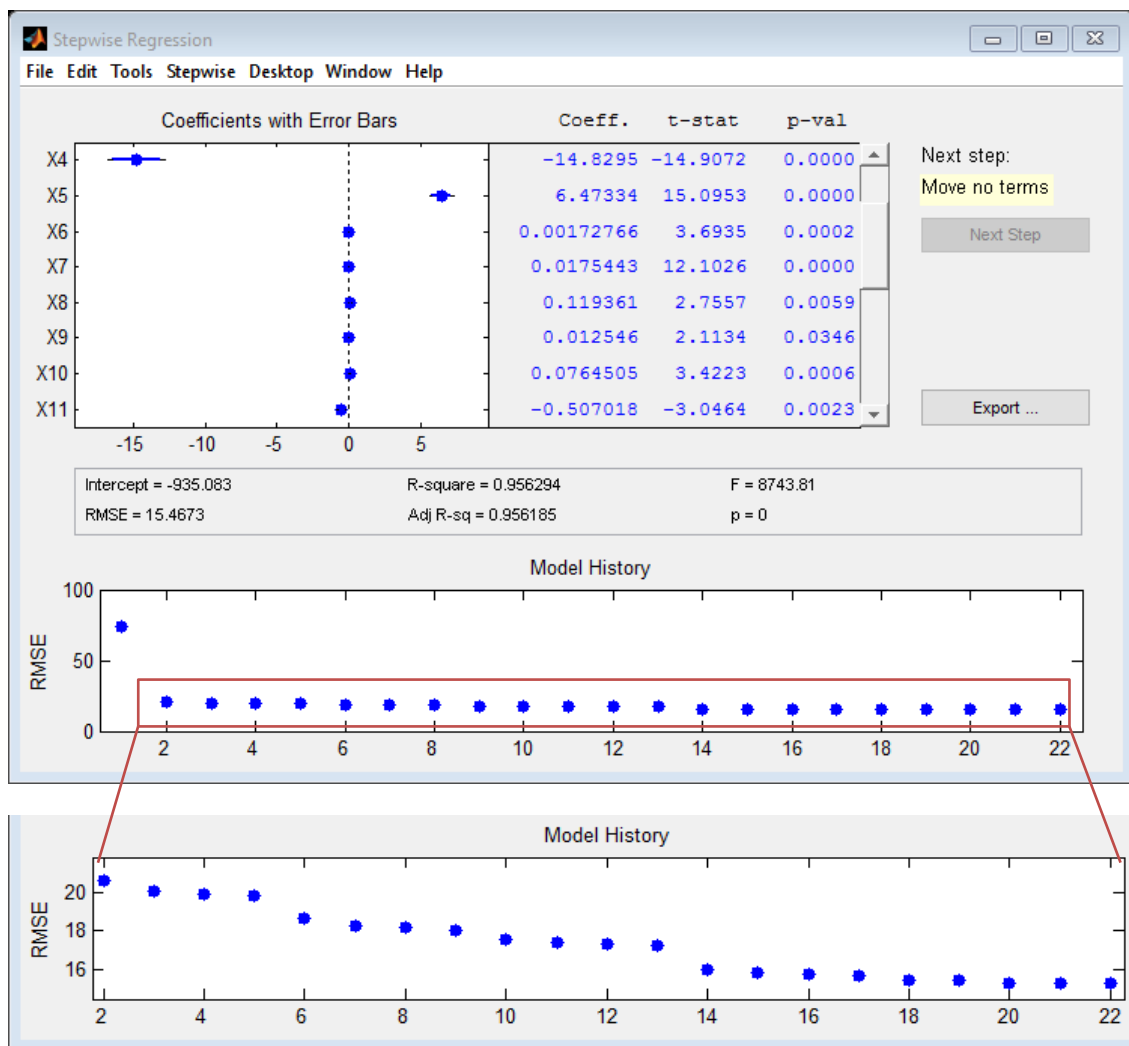


Figura 4.2: Resultado da seleção de variáveis usando *stepwise*.

Em seguida, executou-se uma busca exaustiva testando-se todos os conjuntos possíveis em que as 6 variáveis-chave estivessem presentes e escolhendo aqueles que tivessem menor erro percentual médio absoluto, maior R^2 e menor número de variáveis, nesta ordem de prioridade. Uma regressão linear foi executada para cada conjunto e verificou-se a coerência entre o coeficiente da variável e sua tendência física. Observou-se que as temperaturas do ar primário e secundário tinham coeficientes de mesma ordem e sinais opostos, sendo que o comportamento das duas é muito semelhante, indicando que o modelo apenas estava usando uma para compensar a outra. Além disso, o teor de licor apresentou coeficiente negativo, o que é incoerente com dados da literatura. Estudo realizado por VALIMAKI et al. (2010) demonstra um aumento da geração de vapor com a concentração do licor negro.

Cada vez que uma variável com coeficiente incoerente era excluída, uma nova busca exaustiva era executada, até que se chegou aos melhores conjuntos conforme a Tabela 4.2, sendo o último o conjunto selecionado para este trabalho:

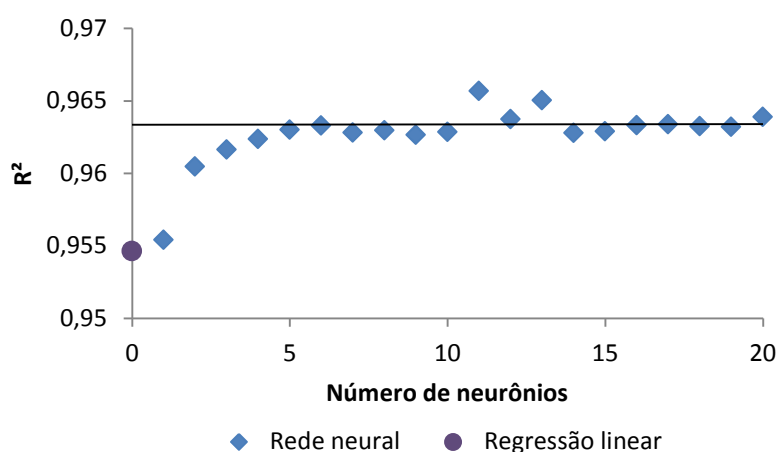
Tabela 4.2: Seleção de variáveis a partir da busca exaustiva.

Variáveis dos melhores conjuntos	Variável removida da análise por incoerência	Erro médio percentual	R ²
Todas	Nenhuma	1,21%	0,9572
F _{licor} , V _{licor} , F _{ar_1} , F _{ar_2} , F _{ar_2_alto} , F _{ar_3} , T _{licor} , F _{DNCG} , T _{ar_1} , T _{ar_2} , T _{ar_2_alto} , P _{ar_2_alto} , P _{ar_3} , T _{ar_3}	C _{licor}	1,23%	0,9557
F _{licor} , V _{licor} , F _{ar_1} , F _{ar_2} , F _{ar_2_alto} , F _{ar_3} , T _{água} , T _{licor} , F _{met} , F _{DNCG} , T _{ar_2_alto} , P _{ar_2_alto} , P _{ar_3}	T _{ar_1} e T _{ar_2}	1,24%	0,9554

4.3 Validação dos modelos

Os modelos de Redes Neurais e Regressão linear múltipla foram desenvolvidos com base nas 13 variáveis selecionadas. A matriz contendo os 575 pontos foi a base para o treinamento de ambos os modelos e o conjunto contendo os 8256 pontos em estado estacionário foram utilizados para a validação. O Matlab através da ferramenta nntools ainda dividiu a matriz de 575 amostras em 70% para treinamento, 20% validação e 10% teste.

A fim de identificar a quantidade ideal de neurônios na camada escondida, foram geradas redes variando-se a quantidade de neurônios de 1 até 20. A Figura 4.3 permite acompanhar a evolução do R² no conjunto de validação com o aumento do número de neurônios e também comparar o desempenho da rede neural com o modelo linear.

**Figura 4.3:** Desempenho dos modelos no conjunto de validação.

É possível notar que se atinge um patamar de estabilidade a partir de 5 neurônios na camada oculta e que há uma leve melhora do R² da rede (0,9630) e do erro médio percentual (1,13%) em relação ao R² do modelo linear (0,9546) e seu erro médio

percentual (1,27%). Essa diferença se mantém para o desempenho no conjunto de treinamento como mostrado no gráfico da Figura 4.4.

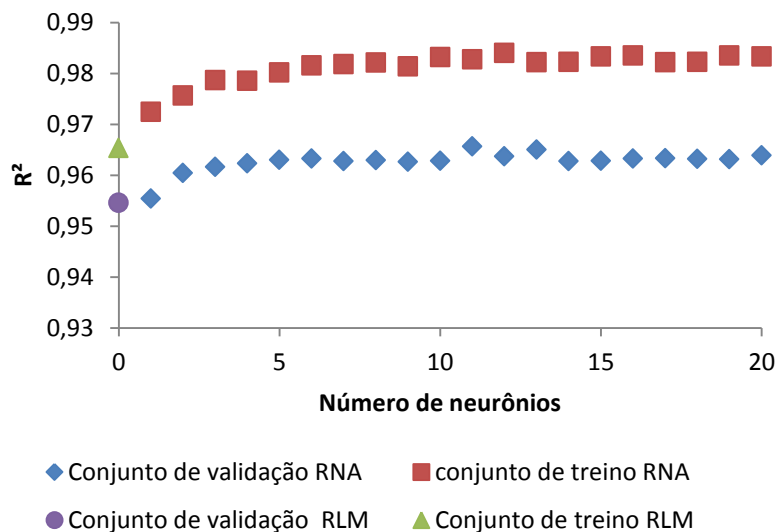


Figura 4.4: Comparação do desempenho dos modelos no conjunto de treino e validação.

Percebe-se que há uma redução no R^2 do conjunto de treino em relação ao de validação o que era esperado, no entanto o comportamento dos modelos é o mesmo, podendo-se verificar que tanto o modelo linear quanto o não linear foram capazes de generalizar o problema. Os histogramas presentes na Figura 4.5 e Figura 4.6 representam a distribuição do erro do modelo linear e não linear respectivamente.

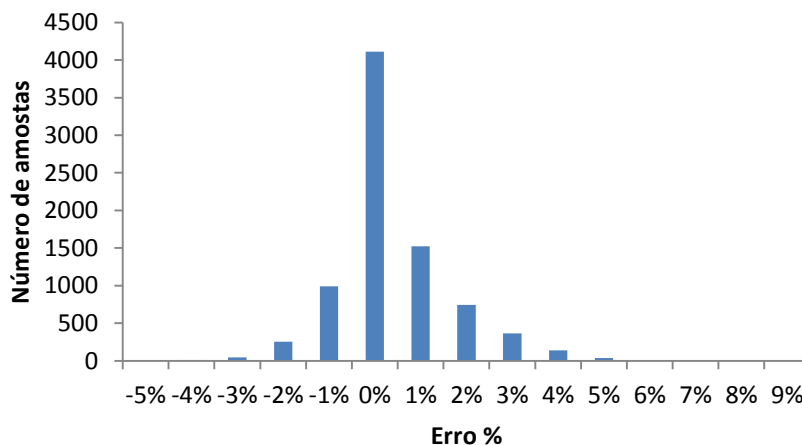


Figura 4.5: Histograma do erro percentual do modelo linear no conjunto de validação.

Pode-se verificar que a distribuição do erro possui comportamento aproximadamente normal com média de 0,01% e desvio padrão de 1,6%. Como o valor do desvio padrão é superior ao erro percentual médio absoluto, será utilizado 1,6% como base de erro para o modelo linear.

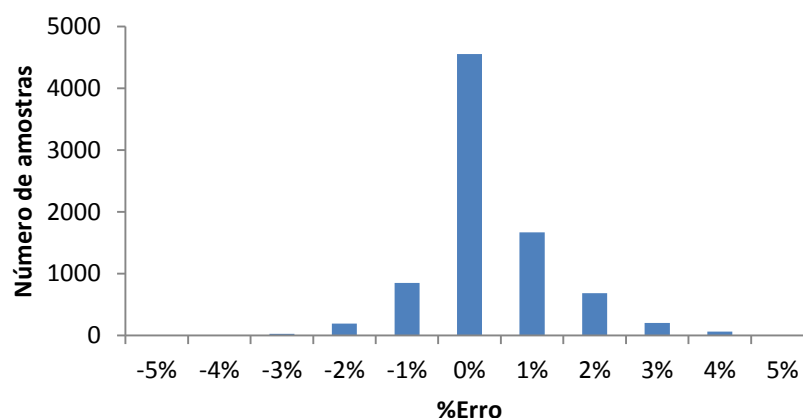


Figura 4.6: Histograma do erro percentual do modelo não linear no conjunto de validação.

Analogamente, o modelo produzido pela rede neural também apresentou distribuição normal dos resíduos com médio de -0,07% e desvio de 1,32%. Também foi considerado o valor do desvio como base de erro para o modelo por ser o pior caso.

4.3.1 Análise de sensibilidade

Modelo linear

Com o objetivo de compreender o comportamento do modelo foi realizada uma análise do impacto que cada uma das variáveis para a predição da geração de vapor. Para isso, multiplicaram-se os coeficientes dos parâmetros pelos seus respectivos valores médios, permitindo comparar a ordem de grandeza e a importância de cada variável no modelo desenvolvido. O resultado é apresentado na Tabela 4.3.

Tabela 4.3: Análise do impacto das variáveis no modelo RLM.

Variável	Coef. Regressão	Valor médio	Impacto
Coef indep.	-906,22	1	-906,22
T _{água}	0,18	283	51,94
F _{licor}	0,08	6055	505,16
V _{licor}	-17,79	4,29	-76,36
T _{licor}	4,95	141	698,81
F _{met}	3,14E-03	2477	7,79
F _{DNCG}	0,02	1231	20,89
F _{ar_1}	0,02	3003	61,54
F _{ar_2}	0,07	3830	249,88
F _{ar_2_alto}	0,04	2418	94,82
P _{ar_2_alto}	0,13	294	39,09
T _{ar_2_alto}	0,18	183	32,94
F _{ar_3}	0,03	3685	110,43
P _{ar_3}	0,20	419	82,63

Como era esperado, a carga de licor mostrou um grande impacto na produção de vapor, bem como a vazão de ar secundário que, conforme discutido anteriormente, é o nível de ar mais importante da caldeira. Por outro lado, o alto peso dado à temperatura de alimentação do licor foi uma surpresa e merece ser investigado mais profundamente em trabalhos futuros. Neste estudo, as temperaturas não serão otimizadas, pela maior dificuldade de implementação frente às demais variáveis.

Rede neural

Para realizar a análise de sensibilidade do modelo neural foi escolhido um ponto representativo do sistema como base. Cada variável-chave foi manipulada dentro dos limites e restrições do sistema enquanto as demais eram mantidas constantes. O resultado pode ser verificado nas figuras subsequentes, onde as variáveis avaliadas foram: vazão de ar primário (Figura 4.7), vazão de ar secundário (Figura 4.8), vazão de ar secundário alto (Figura 4.9), vazão de ar terciário (Figura 4.10) pressão do ar secundário alto (Figura 4.11), pressão do ar terciário (Figura 4.12).

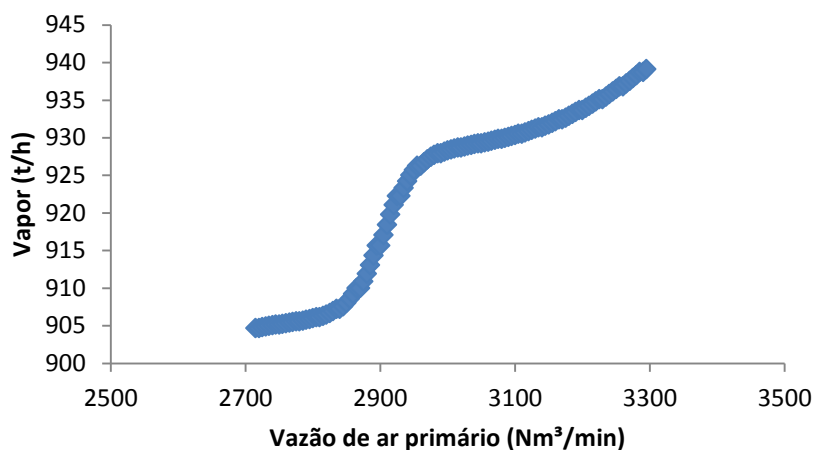


Figura 4.7: Impacto da vazão de ar primário na geração de vapor segundo a RNA.

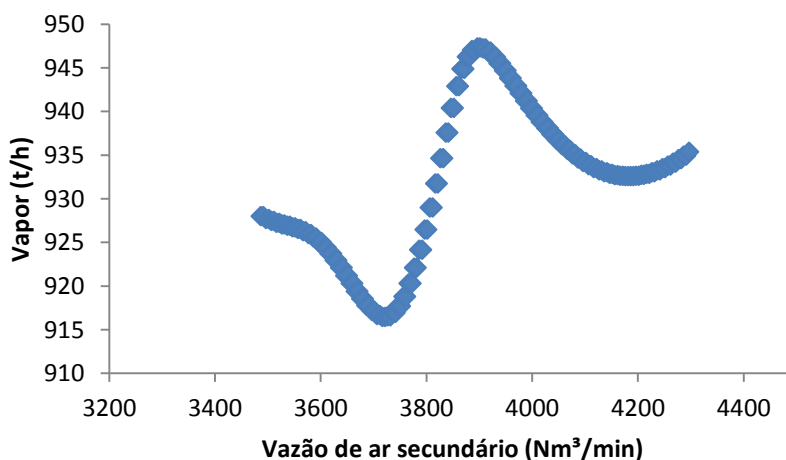


Figura 4.8: Impacto da vazão de ar secundário na geração de vapor segundo a RNA.

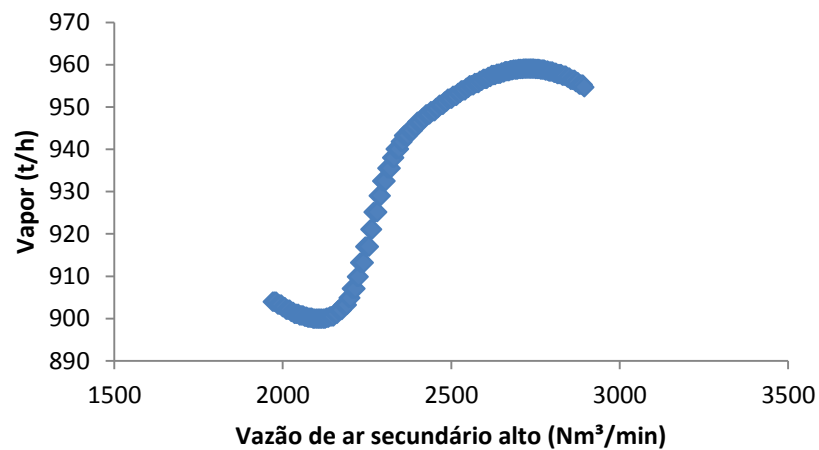


Figura 4.9: Impacto da vazão de ar secundário alto na geração de vapor segundo a RNA.

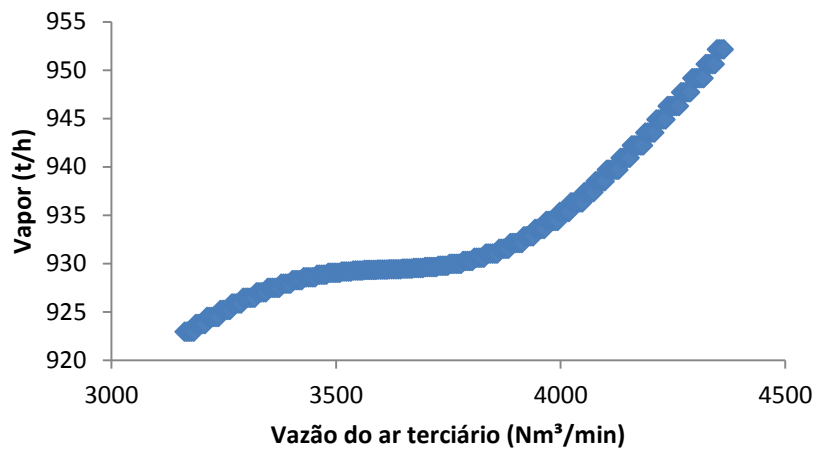


Figura 4.10: Impacto da vazão de ar terciário na geração de vapor segundo a RNA.

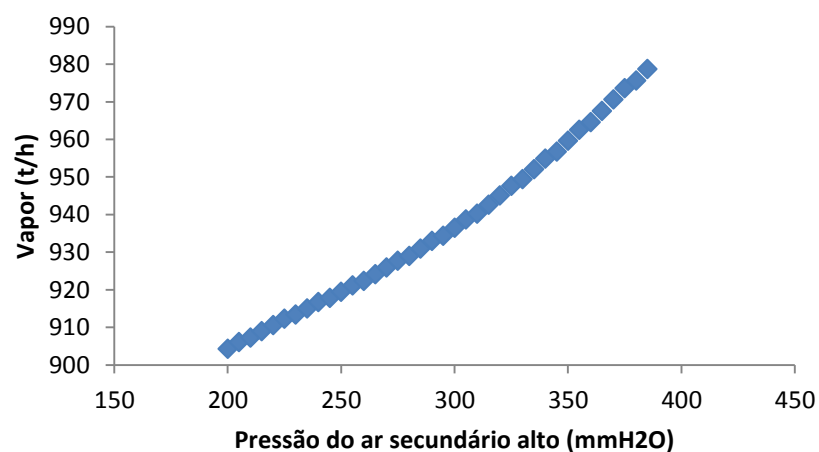


Figura 4.11: Impacto da pressão do ar secundário alto na geração de vapor segundo a RNA.

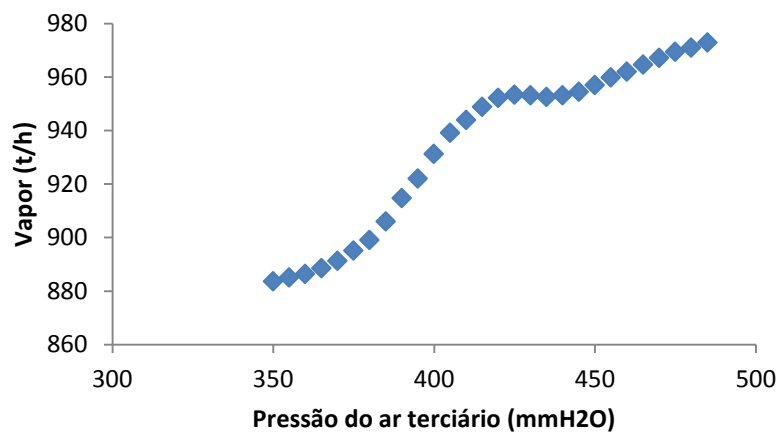


Figura 4.12: Impacto da pressão do ar terciário na geração de vapor segundo a RNA.

Pode-se perceber que, com exceção do comportamento do ar secundário, as demais variáveis seguem, de forma geral, a mesma direção do modelo linear. No entanto, a presença de máximos locais no modelo neural torna o problema de otimização mais sensível ao chute inicial e, portanto, mais suscetível a erro.

Assim, selecionou-se o modelo linear para realizar a otimização do processo por ele ser mais simples e de desempenho similar ao da rede neural. É importante destacar que não foi encontrado na literatura referência a trabalhos que tenham testado a utilização de modelos lineares para modelagem de caldeiras de recuperação, tendo sido a motivação para se comparar as duas formas de metodologia.

4.4 Otimização

Conforme abordado no Capítulo 3, algumas variáveis, que mostraram ter impacto na geração de vapor através dos modelos construídos, não foram objeto de otimização ou porque seus valores estão vinculados a sua disponibilidade, como o caso do DNCG e do metanol, ou porque sua variação depende de aspectos técnicos e econômicos de avaliação mais complexa, como é o caso das temperaturas.

Neste trabalho, serão manipuladas as vazões de todas as correntes de ar e as pressões do ar secundário alto e ar terciário. A proporção e quantidade de ar na caldeira podem ser modificadas pela velocidade dos ventiladores e as pressões através dos *dampers* de ar. Como todas as restrições da otimização foram elaboradas com base no histórico operacional, admite-se que todas as variações propostas pelo algoritmo sejam factíveis.

Para se analisar o possível ganho da otimização em relação ao fluxo de vapor gerado, utilizou-se a base de dados contendo a média dos pontos em estado estacionário (575 pontos) e se aplicou o problema de otimização às variáveis de decisão escolhidas sujeitas às devidas restrições e mantendo as demais constantes.

O ganho percentual na geração de vapor foi calculado a partir da diferença entre o valor histórico e o otimizado da produção de vapor descontando-se o erro do modelo. Para determinar o erro do modelo, simulou-se o ponto histórico e comparou-se o valor predito com o real. O resultado da otimização está representado no histograma da Figura 4.13.

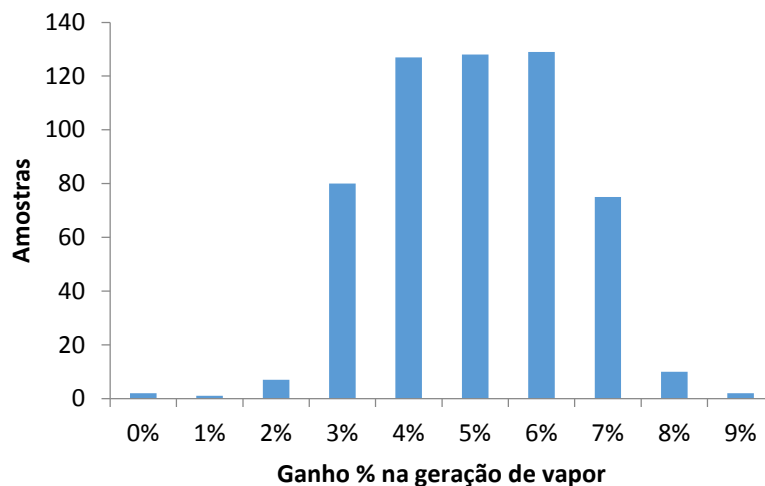


Figura 4.13: Histograma do ganho ajustado da geração de vapor após a otimização.

A média de ganho para as amostras avaliadas foi de 5% com desvio padrão de 1,4%. A análise do ganho médio de eficiência de queima para cada faixa de carga de licor alimentada é representada no gráfico da Figura 4.14:

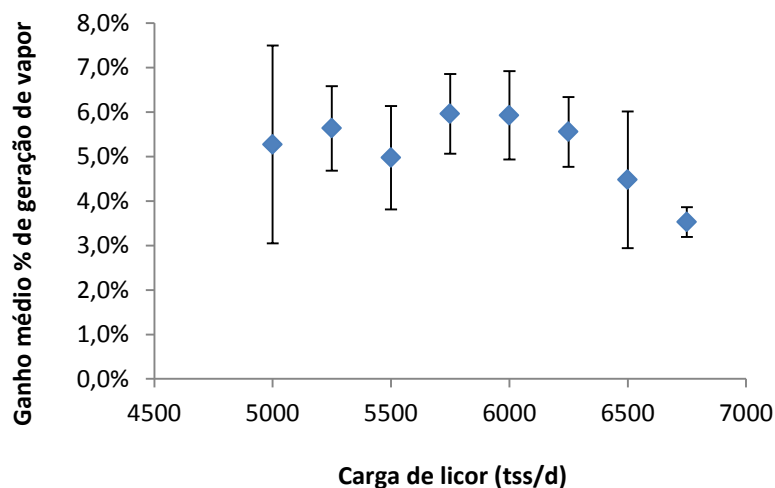


Figura 4.14: Ganho médio ajustado da geração de vapor após otimização de acordo com a carga de licor alimentada.

Pode-se notar que o ganho médio da otimização para a carga de licor alimentada nominal é inferior a outras faixas de operação. Este fenômeno pode ser atribuído ao fato de que, nessa região, os limites do problema de otimização são atingidos limitando os ganhos. O ganho médio da geração de vapor na condição nominal de operação foi de 3,5% o que corresponde a uma geração adicional de 35 ton/h de vapor.

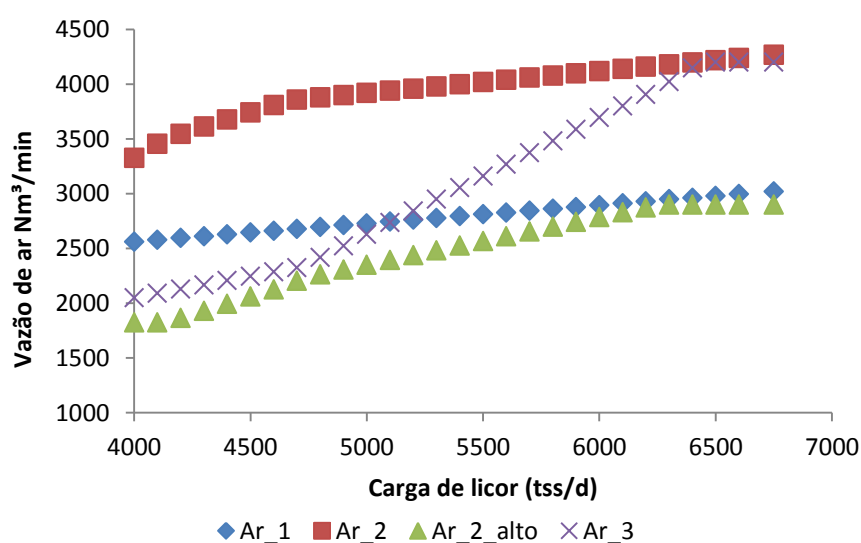
A fim de avaliar o comportamento das variáveis manipuladas durante a otimização, foram calculadas a média e o desvio padrão da variação das mesmas para o conjunto de 575 pontos otimizados. A Tabela 4.4 expressa esses valores.

Tabela 4.4: Variação dos parâmetros manipulados durante a otimização.

Variável	Média de variação	Desvio padrão da variação
Vazão de ar primário	-1,43%	2,94%
Vazão de ar secundário	7,70%	2,00%
Vazão de ar secundário alto	14,01%	7,25%
Vazão de ar terciário	-1,19%	7,20%
Pressão de ar secundário alto	8,44%	2,10%
Pressão de ar terciário	26,26%	9,30%
Vazão de ar total	4,52%	2,24%

Nota-se que, apesar de todos os coeficientes do modelo linear para as vazões de ar serem positivos as correntes de ar primário e terciário experimentaram, em média, redução em suas vazões em relação ao ponto histórico de comparação. Esse fato mostra que há uma distribuição ineficiente do ar dentro da caldeira.

As curvas otimizadas para as correntes de ar (Figura 4.15) e pressões de ar secundário alto (Figura 4.16) e ar terciário (Figura 4.17) foram obtidas aplicando-se o problema de otimização a 29 pontos em que a carga de licor variou de 4000 a 6750, as variáveis não manipuladas foram mantidas no seu valor médio de operação histórico e as variáveis de decisão variaram dentro das restrições do problema.

**Figura 4.15:** Distribuição otimizada do ar na caldeira de recuperação conforme a carga de licor alimentada.

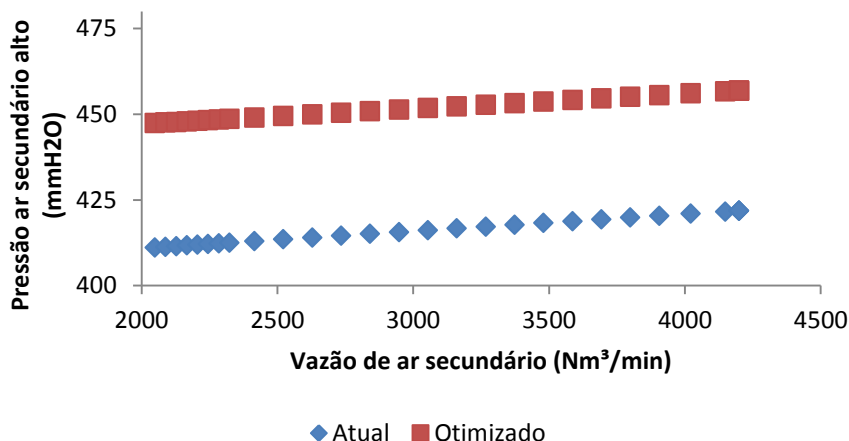


Figura 4.16: Comparação da pressão de ar secundário alto atual e otimizada.

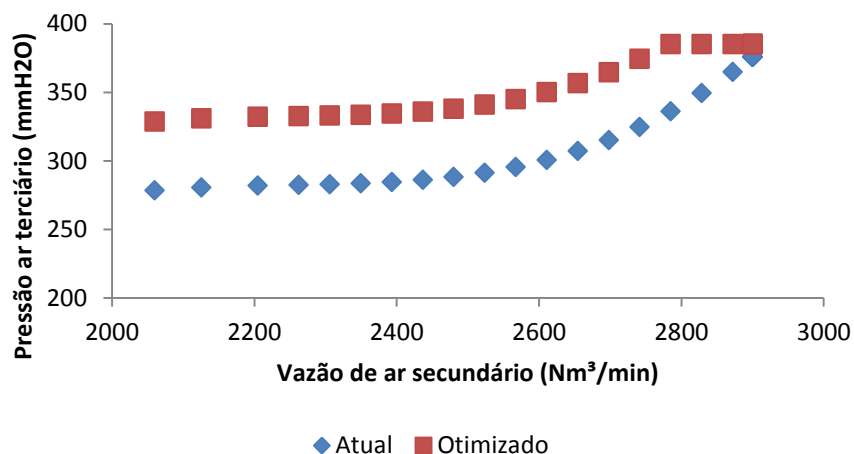


Figura 4.17: Comparação da pressão de ar terciário atual e otimizada.

O resultado da otimização é consistente com a literatura. PINHEIRO (2011), em um estudo de caso semelhante, alcançou uma melhora de 3% na geração de vapor ao alterar divisão de ar preexistente conforme sugerido pelo seu problema de otimização. Um aspecto interessante é que, em seu estudo, ele também verificou a necessidade de redução da vazão de ar primário e, ao implementar a modificação na planta, observou impactos positivos sobre a eficiência de redução. Isso se explica pelo fato de que uma menor vazão de ar primário favorece um ambiente mais pobre em oxigênio e, portanto, mais redutor.

5 Conclusões e Trabalhos Futuros

O presente trabalho envolveu o estudo sobre a indústria de celulose, sobre o funcionamento de caldeiras de recuperação Kraft, além de técnicas de modelagem e otimização. Desta forma, diversas áreas de conhecimento foram aplicadas para solucionar um problema real de engenharia.

A demanda por soluções de eficiência energética é contínua no setor de celulose e o uso de metodologias baseadas em modelos para estes fins são reportadas por PINHEIRO (2011), ALMEIDA et al. (2007) e SARIMVEIS et al (2003).

O tratamento de dados foi essencial para o desenvolvimento do trabalho sendo uma das etapas que mais demandou esforço. O método de detecção do estado estacionário proposto por Cao & Rhinehart tem ajuste complexo e apresentou um erro de 19% na identificação do regime operacional, mostrando ser uma metodologia útil, mas não suficiente, exigindo uma inspeção gráfica posterior.

A seleção de variáveis mostrou que a geração de vapor é definida principalmente pela carga de licor alimentada e a identificação das variáveis secundárias exigiu a associação de técnicas de seleção automática (*stepwise regression*), busca exaustiva e verificação se o peso atribuído à variável era fisicamente coerente. Ao final, selecionaram-se 13 das 23 variáveis previamente escolhidas.

Os modelos desenvolvidos a partir de Regressão Linear Multivariável e Redes Neurais Artificiais apresentaram desempenhos similares. A primeira apresentou R^2 de 0,9546 e erro médio percentual de 1,27%, enquanto a rede treinada com 5 neurônios atingiu R^2 de 0,9630 erro médio percentual de 1,13%. Além disso, uma análise da sensibilidade dos modelos mostrou que ambos os modelos possuem, em geral, a mesma direção de variação para os parâmetros avaliados. Diante disso, o modelo linear foi escolhido como base da otimização por ser mais simples e sem a presença de máximos locais.

O problema de otimização limitou-se a variar as vazões de cada nível de ar e a pressões do ar secundário alto e terciário. Essa decisão baseou-se no fato de essas modificações serem de mais simples implementação no processo. O resultado mostrou um ganho médio de 5% na eficiência de queima, além de apontar que, atualmente, há uma distribuição ineficiente do ar na caldeira.

Adotando como premissa a produção nominal da caldeira de recuperação da linha 2, o aumento médio de geração de vapor foi de 35 t/h o que corresponde a uma geração de 5MWh de energia pelos turbogeradores. Esse excedente de energia e de vapor poderia ser direcionado para a linha antiga de produção (linha 1) cuja caldeira de recuperação não consegue suprir a demanda energética e térmica da unidade, tendo que fazer uso de uma caldeira de força auxiliar. Essa iniciativa significaria uma redução de 5,38 t/h no consumo de carvão na caldeira de força, ocasionando uma economia da ordem de R\$ 8 milhões/ano.

Não foi possível, até a conclusão deste trabalho, realizar testes experimentais que validassem os resultados encontrados através da otimização. Este é o passo subsequente mais imediato para a continuação do projeto, seguido de uma análise técnico-econômica sobre a implementação das modificações propostas.

Trabalhos futuros podem envolver a otimização de outros parâmetros não manipulados neste trabalho, com destaque para a temperatura do licor negro que apresentou alto impacto na geração de vapor segundo mostra a análise de sensibilidade do modelo linear. Além disso, sugere-se desenvolver um trabalho semelhante a esse, mas considerando apenas os períodos operacionais em que haja queima de óleo com o licor negro.

Ainda, vale destacar, que o presente trabalho possibilitou o aprendizado de metodologias de tratamento, análise de dados, modelagem e otimização que podem ser aplicados em diversos outros estudos de caso no meio industrial.

6 Referências

ADAMS, T. et al. Kraft Recovery Boilers. TAPPI Press, Nova Iorque, 1997, p.381.

AGUIRRE, L. A. Introdução à Identificação de Sistemas: técnicas lineares e não lineares aplicadas a sistemas reais. 2 ed. Editora da UFMG, 2004.

ALMEIDA, G. M. Detecção de situações anormais em caldeiras de recuperação química. 2006. 168 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Escola Politécnica da USP, São Paulo, SP.

ALMEIDA, G. M.; CARDOSO, M.; PARK, S. W. Determinação de regiões ótimas de operação em um processo químico através de redes neurais. In: VIII Congresso Brasileiro de Redes Neurais, Florianópolis – SC. 2007. Disponível em http://abricom.org.br/eventos/cbrn_2007/50100083-2/. 3/05/2017

ALMEIDA, G.M.; PARK, S.W.; CARDOSO M. Variables selection for neural networks identification for Kraft recovery boilers. IFAC Proceeding Volumes, v. 37, n. 16, p. 91-96, 2004.

BARRON, A. R. Universal approximation bounds for superpositions of a sigmoidal function. IEEE Transactions on Information Theory, v.39, p-930-945, 1993.

BEYCHOK, M. Boiler (power generation). 2012. Disponível em [https://en.wikipedia.org/wiki/Boiler_\(power_generation\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Boiler_(power_generation))>. Acesso em: 21/07/2017

BHAT, S. A.; SARAF, D. N. Steady-State Identification, Gross Error Detection and Data Reconciliation for Industrial Process Units. Ind.Eng.Chem.Res., v.43, num.15, p.4323-4336, 2004.

BRAGA, A. P.; LUDEMIR, T. B.; CARVALHO, A. C. P. F. Redes neurais artificiais: teoria e aplicações. Rio de Janeiro: LTC Livros Técnicos e Científicos. Editora S.A. 2000. 237 p.

BRIGHENTI, J.R.N. Simulação e otimização de uma linha de manufatura em fase de projeto. 2006. 78 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção), Universidade Federal de Itajubá.

CAMILO, C. O., SILVA, J. C. Mineração de Dados: Conceitos, Tarefas, Métodos e Ferramentas. 2009. Relatório Técnico - Instituto de Informática da Universidade Federal de Goiás. Disponível em: http://www.inf.ufg.br/sites/default/files/uploads/relatorios-tecnicos/RT-INF_001-09.pdf. 11/05/2017

CAO, S. and RHINEHART, R. R. An efficient method of on-line identification of steady state. Journal of Process Control, v. 5, 363-374, 1995.

CASTRO, H. F. Processos Químicos Industriais II – Apostila 4: Papel e Celulose. 2009. Escola de Engenharia de Lorena, Universidade de São Paulo. Apostila. PDF. Disponível em: <http://sistemas.eel.usp.br/docentes/arquivos/5840556/434/apostila4papelecelulose.pdf>. 8/05/2017

CONTRERAS, R. J. Técnicas de Seleção de Características aplicadas a Modelos Neuro-Fuzzy Hierárquicos BSP. 2002.104p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Elétrica) - PUCRio, Rio de Janeiro/RJ.

COSTA, A. O. S.; BISCAIA, E. C. Jr.; LIMA, E. L. Análise de Diferentes Condições Operacionais. O PAPEL, 2005. Disponível em: <http://www.revistaopapel.org.br/publicacoes.php?id=229>. 3/05/2017

CROW, E. L.; DAVIS, F. A.; MAXFIELD, M. W. Statistics Manual. Dover Publications, New York, NY, 1960.

CUNHA, E. J. Análise da influência das variáveis da caldeira de recuperação química no sistema de abate do material particulado na indústria de celulose e papel. 2005. p.149. Dissertação (Mestrado em Engenharia da Produção) – Universidade Federal de Itajubá.

D'ALMEIDA, M. L. O. Celulose e Papel. Tecnologia de fabricação de pasta celulósica. v.1, 2 ed., cap. 3. São Paulo: IPT- SENAI, 1988.

DENN, M. M. Process Modeling. Harlow, Longman, 1986

EMBIRUÇU, M.; LIMA, E. L. Controle Avançado de Processos – Um Caminho para Lucratividade, Qualidade, Segurança e Proteção ao Meio Ambiente. II Congresso de Engenharia de Processos do Mercosul. Santa Catarina. 1999.

EPE – Empresa de Pesquisa Energética. Anuário Estatístico de Energia Elétrica 2016. Disponível em: <http://www.epe.gov.br> 20/06/2017

FACCHIN, S. Técnicas de análise multivariável aplicadas ao desenvolvimento de analisadores virtuais. 2005. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – UFRGS, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

FERREIRA, Ariane. Seleção de Variáveis - Disciplina de Modelos Lineares. 2012. Departamento de modelagem computacional – Instituto Politécnico/UFRJ. Apostila. PDF. Disponível em: http://wiki.nosdigitais.teia.org.br/images/f/fa/Apostila_selecao_variaveis.pdf 11/05/2017

FERREIRA, D. J. O. Modelagem de caldeira de recuperação química Kraft. 2013. 209 p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Escola Politécnica da USP, São Paulo, SP.

FERREIRA, D.J.O. CARDOSO, M.; PARK S.W. Gas flow analysis in a Kraft recovery boiler. Fuel Processing Technology, v. 91, p. 789–798, 2010.

FIGUEIRÊDO, L. S. Modelagem matemática do estado estacionário de um real sistema de caustificação em uma fábrica de celulose. 2009. 69 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial) – UnilesteMG, Centro Universitário Do Leste De Minas Gerais, Coronel Fabriciano.

FILHO, G. D. M.; CARDOSO, M.; ALMEIDA, G. M. Monitoramento quantitativo e qualitativo do vapor gerado em uma caldeira de recuperação química. In: VIII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, Uberlândia, MG. 2009. Disponível em: <http://www.cobeqic2009.feq.ufu.br/uploads/media/111919311.pdf>. 3/05/2017

- FONTES, P.; COSTA, M; AZEVEDP, J. L. T. Measurements in and Modeling of a Black
- GARCIA, C. Modelagem e Simulação de Processos Industriais e de Sistemas Eletromecânicos. 2 ed. Editora da Universidade de São Paulo, 2005, v.1.
- GARCIA, L. M. P. Metodologias de análise de dados para um sistema de otimização em tempo real. 2013. 100 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química), Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
- GORE, S. Evaluation of automated steady state and transient state detection algorithms.2011. 46 p. Dissertação (Master Of Science) - Oklahoma State University, Estados Unidos.
- GRACE, T. M. Recovery Boiler Equipament and Operation. In: TAPPI Kraft Recovery Short Course, Florida – EUA. 2008. Disponível em: <http://www.tappi.org/contents/events/08kros/manuscripts/4-1.pdf>. 9/05/2017
- HAYKIN, S. Redes Neurais: Princípios e prática. 2 ed. Bookman, 2001. p. 899
- HUANG, T. Steady state and transient state identification in an industrial process. 2010. 61 p. Dissertação (Bachelor of Science in Material Chemistry) - Tianjin University of Science & Technology .Tianjin, China
- JIANG, T., CHEN, B., HE, X., STUART, P. Application of steady-state detection method based on wavelet transformation. Computers & Chemical Engineering, v. 27, num. 4, p. 569–578, 2003. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135402002351>. 13/05/2017.
- KADLEC, P.; GABRYS, B.; STRANDT, S. Data-driven soft sensors in the process industry. Computers & Chemical Engineering, v.33, num. 4, p.795–814, 2009. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0098135409000076>.10/05/2017.11/05/2017.
- LEIVISKA, K.; SANTTI, K.; LAMPELA, K. Production optimization of the pulp bleach plant – intelligent methods utilization approach. 6th International Conference on new available technologies, p. 402-408. Stockolm, Sweden, 1999.
- LEPPÄNEN, A.; TRAN, H.; VÄLIMÄKI, E.; OKSANEN, A. Modelling fume deposit growth in recovery boilers: effect of flue gas and deposit temperature. Journal of Science & Technology for Forest Products and Processes, v.4, n.1, 2014.
- Liquor Recovery Boile. Combustion Science and Technology, v. 180, n.3, p. 494-508, 2008. Diposnível em: <http://www.tandfonline.com/loi/gcst20>.
- MAAKALA,V. Multi-Objective Optimization of Recovery Boiler Dimensions Using Computational Fluid Dynamics. 2013. 92 p. Dissertação (Master of Science in Technology) – AALTO University School of Engineering, Helsinki, Finlândia.
- MARTINELLI, S. H. S. Detecção de defeitos em caldeiras de recuperação química. 2008. 149p. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – UEM, Universidade Estadual de Maringá. Maringá, PR.

MEJIA, R. I. G.; DUARTE, M. B.; TRIERWEILER, J. O. Novo Método para a Identificação de Estado Estacionário Baseada na Estimativa da Autocorrelação Local. Congresso Brasileiro de Automática, 2010.

MENEZES, D. R. C. Aplicação e avaliação de desempenho de um sistema de otimização em tempo real em uma unidade de produção de propeno. 2016. Dissertação (Mestrado em Ciências) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo

MHAMDI, A.; GEFFERS, W.; FLEHMIG, F.; MARQUARDT, W. On-line optimization of MSF desalination plants. In: Desalination and Water Resources: Thermal Desalination Processes, v. 1, EOLSS, p. 136–162, 2010.

PÉREZ, M. G.; VAKKILAINEN, E.; HYPÄNEN, T. Unsteady CFD analysis of Kraft recovery boiler fly-ash trajectories, sticking and deposition rates with a mechanistic particle rebound-stick model. Fuel, v. 181, p. 408–420, 2016.

PINHEIRO, O. S. Modelagem e otimização do rendimento de uma caldeira de recuperação em uma indústria de celulose Kraft. 2011. p. 85. Dissertação (Mestrado em Engenharia Industrial) – UnilesteMG, Centro Universitário do Leste De Minas Gerais, Coronel Fabriciano, MG.

POTRICH, L. B. Modelagem da queima do carbono na caldeira de recuperação 2 da Klabin Monte Alegre por rede neural artificial. 2014. 52 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) - Universidade Estadual do Oeste do Paraná, Toledo, PR.

REYES, E. M. E. P. Investigación de causas de altas emisiones de TRS en calderas recuperadoras. 2011. 106 p. Dissertação (Mestrado Profissional em Tecnologia de Celulose e Papel) - UFV, Universidade Federal de Viçosa. Viçosa, MG.

ROSSINI, K. Seleção de variáveis no desenvolvimento, classificação e predição de produtos. 2011. 147 p. Tese (Doutorado em Engenharia de Produção) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS.

SAINLEZ, M.; HEYEN, G. Comparison of supervised learning techniques for atmospheric pollutant monitoring in a Kraft pulp mill. Journal of Computational and Applied Mathematics, v. 246, p. 329–334, 2013. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0377042712002610>. 3/05/2017

SARIMVEIS, H. K et al. Optimal energy management in pulp and paper Mills. Energy Conversion and Management 44. p.1707-1718. 2003. Atlanta. USA. Disponível em <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0196890402001656>. 15/05/2017

SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A. Process Dynamics and Control. New York: John Wiley, 1989.

SMITH, G. C.; WROBEL, C. L.; STENGEL, D. L. Modeling TRS and SO₂ emissions from a Kraft recovery boiler using an artificial neural network. TAPPI Journal, v. 83, num. 11, p. 69, 2000.

VALIMAKI, E., NIEMI, P. HAAGA, K. A case study on the effects of lignina recovery on recovery boiler operation. In : Chemical Recovery Conference, Williamsburg/USA, 2010.

VAKKILAINEN, E. K. Kraft recovery boilers – Principle and practice. Suomen Soodakattilayhdistys r.y., 2005. p. 246.

VELLASCO, Marley Maria Bernardes Rebuzzi. Redes Neurais Artificiais. 2007. Laboratório Computacional Aplicada – PUC/RJ. Apostila. PDF. Disponível em: <http://www2.ica.ele.puc-rio.br/Downloads%5C33/ICA-introdu%C3%A7%C3%A3o%20RNs.pdf>. 9/05/2017

VILLARROEL, R. Incinerating NCG HCLV in a recovery Boiler without Auxiliary Fuel. TAPPI International Chemical recovery Conference Proceeding, 1998.

WIDARSSON , B.; DOTZAUER, E. Bayesian network-based early-warning for leakage in recovery boilers. Applied Thermal Engineering, v. 28, num. 7, p. 754–760, 2008. Disponível em: <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1359431107002153>. 3/05/2017

Apêndice A

Implementação para ajuste do método de Cao & Rhinehart de identificação de estados estacionários utilizando a linguagem Visual Basic for Applications (VBA) no Microsoft Excel® 2010

```

Sub Ajuste_Cao_Rhinehart ()

Dim L1, L2, L3 As Double
Dim i, j As Integer
Dim xf(numero_de_pontos, numero_de_variaveis)
Dim vf(numero_de_pontos, numero_de_variaveis)
Dim df(numero_de_pontos, numero_de_variaveis)
Dim R(numero_de_pontos, numero_de_variaveis)
Dim EE(numero_de_pontos, numero_de_variaveis)
Rc = 2
n = 0

For L3 = 0.001 To 0.01 Step 0.001
  For L2 = 0.1 To 0.9 Step 0.05
    For L1 = 0.1 To 0.9 Step 0.05
      Erro_tipo_I = 0
      Erro_tipo_II = 0

      For i = 2 To numero_de_linhas
        EE(i) = "ESTACIONÁRIO"

        For j = 1 To numero_de_variaveis

'Método Cao & Rhinehart

xf(i, j) = L1 * Cells(i, j) + (1 - L1) * xf(i - 1, j)
vf(i, j) = L2 * ((Cells(i, j) - xf(i - 1, j)) ^ 2) + (1 - L2) * vf(i - 1, j)
df(i, j) = L3 * ((Cells(i, j) - Cells(i - 1, j)) ^ 2) + (1 - L3) * df(i - 1, j)
R(i, j) = (2 - L1) * (vf(i, j) / df(i, j))

          If R(i, j) > Rc Then
            EE(i) = "TRANSIENTE"
          End If
        Next j

'Comparando o resultado do algoritmo com a análise prévia

        If Cells(i, 9) = "ESTACIONÁRIO" And EE(i) = "TRANSIENTE" Then
          Erro_tipo_I = Erro_tipo_I + 1
        End If

        If Cells(i, 9) = "TRANSIENTE" And EE(i) = "ESTACIONÁRIO" Then
          Erro_tipo_II = Erro_tipo_II + 1
        End If
      Next i

'Escreve o resultado
      Cells(9, 10 + n) = L1 & " " & L2 & " " & L3
      Cells(10, 10 + n) = Erro_tipo_I
      Cells(11, 10 + n) = Erro_tipo_II
      n = n + 1

    Next L1
  Next L2
Next L3
End Sub

```


Apêndice B

Implementação de algoritmo para busca exaustiva na seleção de variáveis em Matlab® 2009a.

```

%criando o vetor p_ com todas as combinações possíveis de variáveis
p_=[];
for t=1:16
    p = nchoosek([7:22],t);
    tamanho = size(p)
    p_ = [p_; p,zeros(tamanho(1), 16-t)];
end

var_chave =zeros(length(p_),6);
for i=1:length(p_)
    for j=1:6
        var_chave(i,j)= j;
    end
end
p_ = [var_chave p_];

%inicializando variáveis do algoritmo
k = 10 ; %número de combinações armazenadas
tamanho=size(p_);
erros_medios_porc = ones(k,2+size(1,2));
erro = ones(numel(y),1);
porc_erro = ones(numel(y),1);

% Iniciando busca exaustiva
for j = 1:length(p_)

    %criando o vetor linha com a combinação de variáveis a ser avaliada
    clear columns
    for n=1:tamanho(2)
        if p_(j,n) > 0
            columns (n)= p_(j,n);
        end
    end

    %criando vetor de entradas do modelo a ser testado
    clear u
    clear uut
    u = Todas_var_EE(:,columns);
    uut = [ones(length(u),1) u];
    b = uut\y; % gerando modelo linear
    yp = uut*b; %simulando o modelo

    %cálculo do R² e erro percentual médio absoluto
    SQexp = 0;
    SQres =0;

    for i=1:numel(y)
        SQexp = SQexp + (yp(i) - mean(y))^2;
        SQres = SQres + (yp(i) - y (i))^2;
        erro(i) = sqrt ((y(i)- yp(i)).^2);
    end

    SQt = SQexp + SQres;
    R2 = SQexp/SQt;
    erro_medio_porc = mean(porc_erro);

```

```
%Avaliando a performance

erro_medio_por_c_rounded = round(erro_medio_por_c/0.0001)/10000;
max_erro_rounded = round(max(erros_medios_por_c(:,1))/0.0001)/10000;
menor_erro = erro_medio_por_c_rounded < max_erro_rounded;

R2_max= max(erros_medios_por_c(:,2));
erro_igual_e_maior_r2 = erro_medio_por_c_rounded == max_erro_rounded
&& R2 > R2_max;

%armazena o R2, o erro porcentual médio absoluto e as variáveis
%selecionadas das 10 combinações com menor erro e maior R2

if menor_erro || erro_igual_e_maior_r2
    [e,local] = max(erros_medios_por_c(:,1));
    erros_medios_por_c(local,:) = [erro_medio_por_c,R2,p_(j,:)]
end
end
```

Apêndice C

Implementação de treinamento e validação dos modelos em Matlab® 2009a

```

%treino, validação e escolha da melhor rede
% abaixo está exemplificado para uma rede com n=1 neurônios, esse código
foi repetido para n de 1 a 20.

u = Media_EE_norm(:,1:13)'; %conjunto usado para treinar
y = Media_EE_norm(:,14)';
u_valid = Todos_EE_norm(:,1:13)'; % conjunto de validação
y_valid = Todos_EE_norm(:,14)';

n=1;
menor_erro_porc_1 = 1;
maior_R2_1=0.1;

for cont=1:200 %treina a rede com n neurônios 200 vezes
    net = newff(u,y,n); %cria a rede
    net.trainParam.epochs = 500; %número máximo de iterações
    net = train(net,u,y); % treina a rede
    yp = sim(net,u_valid); %simula a rede no conjunto de validação

%calcula R² e erro porcentual médio absoluto desnormalizado
SQexp = 0;
SQres =0;
    for i=1:numel(y_valid)
        SQexp = SQexp + ((yp(i) - mean(y_valid))*550)^2;
        SQres = SQres + ((yp(i) - y_valid(i))*550)^2;
        erro(i) = sqrt ((y_valid(i)- yp(i)).^2);
        porc_erro(i) = (erro(i)*550)/(y_valid(i)*550+600);
    end
    SQt = SQexp + SQres;
    R2 = SQexp/SQt;
    erro_medio_porc = mean(porc_erro);

%guarda a rede que possuir menor erro porcentual médio abs e maior R²
    if round(erro_medio_porc*10^4)/10^4 < round(menor_erro_porc_1*10^4)/10^4;
        melhor_net_1= net;
        menor_erro_porc_1 = erro_medio_porc;
        maior_R2_1 = R2;

    elseif round(erro_medio_porc*10^4)/10^4== round(menor_erro_porc_1*10^4)/10^4
        && R2 > maior_R2_1
        melhor_net_1 = net;
        menor_erro_porc_1 = erro_medio_porc;
        maior_R2_1 = R2;
    end
end

%Treinamento e validação do modelo linear
% Criando modelo linear
uut = [ones(length(u'),1) u'];
b = uut\y';
% Simulando modelo linear no conjunto de validação
uut = [ones(length(u_valid'),1) u_valid'];
yp = uut*b;
yp=yp';

```

```
%calcula R2 e erro porcentual médio absoluto desnormalizado
SQexp = 0;
SQres =0;

for i=1:numel(y_valid)
    SQexp = SQexp + ((yp(i) - mean(y_valid))*550)^2;
    SQres = SQres + ((yp(i) - y_valid(i))*550)^2;
    erro(i) = sqrt ((y_valid(i)- yp(i)).^2);
    porc_erro(i) = (erro(i)*550)/(y_valid(i)*550+600);
end

SQt = SQexp + SQres;
R2_linear = SQexp/SQt;
erro_medio_porc_linear = mean(porc_erro);
```