

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA – ITEC
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA
MESTRADO PROFISSIONAL EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ALAN MARCEL FERNANDES DE SOUZA

ESTIMAÇÃO DA PORCENTAGEM DE FLÚOR EM ALUMINA FLUORETADA
PROVENIENTE DE UMA PLANTA DE TRATAMENTO DE GASES POR MEIO DE
UM SENSOR VIRTUAL NEURAL

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

Belém-PA

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA – ITEC
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA
MESTRADO PROFISSIONAL EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ESTIMAÇÃO DA PORCENTAGEM DE FLÚOR EM ALUMINA FLUORETADA
PROVENIENTE DE UMA PLANTA DE TRATAMENTO DE GASES POR MEIO DE
UM SENSOR VIRTUAL NEURAL

Dissertação de Mestrado Profissionalizante apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica do Instituto de Tecnologia da Universidade Federal do Pará com requisito para obtenção do Título de Mestre em Engenharia Elétrica com ênfase em Processos Industriais.

ALAN MARCEL FERNANDES DE SOUZA

ORIENTADORA: PROFA. DRA. CAROLINA DE MATTOS AFFONSO

Belém-PA

2011

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA – ITEC
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA ELÉTRICA
MESTRADO PROFISSIONAL EM ENGENHARIA ELÉTRICA

ALAN MARCEL FERNANDES DE SOUZA

Título: Estimação da Porcentagem de Flúor em Alumina Fluoretada Proveniente de uma Planta de Tratamento de Gases por Meio de um Sensor Virtual Neural.

DEFESA DE MESTRADO

Esta dissertação foi julgada e aprovada para obtenção do título de **Mestre em Engenharia Elétrica na área de concentração Processos Industriais do Programa de Pós-Graduação Strictu Sensu em Engenharia Elétrica da Universidade Federal do Pará – ITEC – UFPA.**

Belém-PA, _____ / _____ / 2011

Prof. Dr. José Antônio da Silva Souza – UFPA
Coordenador do CMPPI

BANCA EXAMINADORA

Profa. Dra. Carolina de Mattos Affonso
Orientadora – UFPA

Prof. Dr. Roberto Célio Limão de Oliveira
Co-orientador – UFPA

Prof. Dr. Emanuel Negrão Macêdo
UFPA

Prof. Dr. José Augusto Furtado Real
IESAM

Prof. Dr. Ádamo Lima de Santana
UFPA

S719e Souza, Alan Marcel Fernandes de

Estimação da porcentagem de flúor em alumina fluoretada proveniente de uma planta de tratamento de gases por meio de um sensor virtual neural / Alan Marcel Fernandes de Souza ; orientadora, Carolina de Mattos Affonso.-2011.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-graduação em Engenharia Elétrica, Belém, 2011.

1. Inteligência computacional. 2. Processos químicos – modelos matemáticos. 3. Controle de processo. 4. Detectores. I. orientador. II. título.

CDD 22. ed. 006.32

“Não se pode criar experiência. É preciso passar por ela.”

Albert Camus (1913 – 1960)
Escritor, romancista, ensaísta e filósofo argelino.

AGRADECIMENTOS

Sou grato por Deus, “inteligência suprema e causa primeira de todas as coisas”.

Agradeço imensamente os meus pais Célio Souza e Maria do Socorro Fernandes por sempre me indicarem o caminho do bem e me proporcionarem uma educação tanto intelectual quanto moral de ótima qualidade. Agradeço também à minha irmã, Alyne Marcely, que sempre acredita e torce por mim. Agradeço aos meus familiares, tios, tias, primas, primos pelo incentivo constante. Agradeço a todos os meus amigos pelo estímulo e torcida proporcionada.

Sou grato pelos colegas que surgiram em minha vida acadêmica durante esses dois anos de estudos. Em especial, ao amigo Fábio Soares que me ajudou tanto nas disciplinas quanto na resolução do projeto, me apresentando os engenheiros da Albras, os quais também sou agradecido por sempre me receberam muito bem na fábrica: Marcos Castro, Lena Campos e Nelson Dourado.

Aos professores Carolina Affonso e Roberto Limão, pela orientação dispensada e atenção nos momentos preciosos sempre com o intuito de melhorar o trabalho.

Ao amigo e professor José Antônio Souza que me ajudou a sanar diversas dúvidas que surgiram no decorrer do projeto.

A todos os professores que tive a oportunidade de conhecer e que me ensinaram novos assuntos durante as disciplinas desse mestrado.

A FAPESPA/VALE pelo apoio financeiro concedido e a Universidade Federal do Pará pelo suporte acadêmico prestado por seus excelentes professores.

A comunidade acadêmica do mundo todo pelas várias publicações de trabalhos, sem os quais, muito do conhecimento contido nesta dissertação não poderia ser desenvolvida.

LISTA DE FIGURAS

| | |
|---|----|
| Figura 2.1 – Molécula de alumina | 8 |
| Figura 2.2 – Forno de redução do alumínio e suas partes | 9 |
| Figura 2.3 – Diagrama de Fase/Equilíbrio..... | 15 |
| Figura 3.1 – Diagrama simplificado da PTG..... | 19 |
| Figura 3.1 – Diagrama de funcionamento da PTG..... | 20 |
| Figura 3.3 – Esquema Genérico da PTG | 21 |
| Figura 3.4 – Layout da Área de Redução I..... | 23 |
| Figura 3.5 – Abastecimento de Silo de Alumina Virgem..... | 24 |
| Figura 3.6 – Manuseio de Alumina Primária | 25 |
| Figura 3.7 – Rejeitos proveniente da alumina | 26 |
| Figura 3.8 – Tubulações que captam gases poluentes | 27 |
| Figura 3.9 – Fase de reação, filtração, recirculação e pulsação..... | 28 |
| Figura 3.10 – Filtros de manga desgastados..... | 29 |
| Figura 3.11 – Processo de Manusear Alumina Secundária | 31 |
| Figura 4.1 – Comparação entre os valores estimados pelo modelo e os valores reais | 34 |
| Figura 4.2 – Análise de Regressão (a) Conjunto de Treino (b) Conjunto de Teste..... | 34 |
| Figura 4.3 – Simulador Térmico do Forno 441 (Redução II) | 35 |
| Figura 4.4 – (a) Dados <i>outliers</i> (b) Distribuição Normal dos Dados | 37 |
| Figura 4.5 – Exemplo gráfico de não generalização..... | 40 |
| Figura 4.6 – Comportamento da Rede Neural com Erro Alto..... | 41 |
| Figura 5.1 – Mecanismo de ajuste de pesos de uma RNA | 43 |
| Figura 5.2 – Exemplo de Rede <i>Feedforward</i> Monocamada..... | 46 |
| Figura 5.3 – Exemplo de Rede <i>Feedforward</i> Multicamada | 46 |
| Figura 5.4 – Exemplo de Rede <i>Feedforward</i> de Saídas Recorrentes às Entradas..... | 48 |
| Figura 5.5 – (a) NARX Tipo Paralelo (b) NARX Tipo Série | 49 |
| Figura 5.6 – Esquema Geral do Algoritmo de Treinamento de uma RNA | 50 |
| Figura 5.7 – Treinamento supervisionado | 51 |
| Figura 5.8 – Exemplo de Funcionamento do Algoritmo <i>Backpropagation</i> | 52 |
| Figura 5.9 – Exemplo de Mínimo Local e Mínimo Global..... | 53 |
| Figura 5.10 – Exemplo de Organização de Mapa Auto Organizável de Kohonen | 54 |
| Figura 6.1 – Etapas de análise da composição da alumina fluoretada | 56 |
| Figura 6.2 – Esquema da RNA projetada..... | 58 |
| Figura 6.3 – Gráfico do Conjunto Total de Registros dos Exaustores da PTG..... | 59 |

| | |
|---|----|
| Figura 6.4 – (a) Histograma do conjunto total de registros para o Exaustor 1. (b) Histograma do conjunto total de registro para o Exaustor 2. (c) Histograma do conjunto total de registro para o Exaustor 3 (d) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 4 . | 60 |
| Figura 6.5 – Gráfico do Subconjunto Automático de Registros dos Exaustores | 62 |
| Figura 6.6 – (a) Histograma do subconjunto automático de registros para o Exaustor 1. (b) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 2. (c) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 3 (d) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 4 | 62 |
| Figura 6.7 – (a) Gráfico da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem. (b) Histograma da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem | 64 |
| Figura 6.8 – (a) Gráfico das Granulometrias da Alumina Virgem. (b) Histograma da 100 mesh. (c) Histograma 200 mesh. (d) Histograma -325 mesh | 65 |
| Figura 6.9 – (a) Gráfico da Porcentagem de Flúor na Alumina Fluoretada. (b) Histograma da Porcentagem de Flúor na Alumina Fluoretada..... | 65 |
| Figura 6.10 – (a) Gráfico da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem após Filtro 3Sigma..... | 66 |
| Figura 6.11 – (a) Gráfico das Granulometrias da Alumina Virgem após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da 100 mesh após Filtro 3Sigma. (c) Histograma 200 mesh após Filtro 3Sigma. (d) Histograma -325 mesh após Filtro 3Sigma..... | 66 |
| Figura 6.12 – (a) Gráfico dos Exaustores após Filtro 3Sigma. (b) Histograma do Exaustor 1 após Filtro 3Sigma. (c) Histograma do Exaustor 2 após Filtro 3Sigma. (d) Histograma do Exaustor 3 após Filtro 3Sigma (e) Histograma do Exaustor 4 após Filtro 3Sigma..... | 67 |
| Figura 6.13 – (a) Gráfico da Porcentagem de Flúor Adsorvido na Alumina Fluoretada após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da Porcentagem de Flúor Adsorvido na Alumina Fluoretada após Filtro 3Sigma..... | 68 |
| Figura 6.14 – Gráfico da Divisão dos Subconjuntos | 69 |
| Figura 6.15 – Topologia da Rede Neural Perceptron Multicamadas NARX tipo Série..... | 69 |
| Figura 7.1 – Gráfico contendo os erros MSE das RNA Candidatas | 74 |
| Figura 7.2 – Histograma PEA da RNA Candidata 9 | 75 |
| Figura 7.3 – Histograma PEA da RNA Candidata 10 | 75 |
| Figura 7.4 – Histograma PEA da RNA Candidata 11 | 75 |
| Figura 7.5 – Histograma PEA da RNA Candidata 12 | 76 |

| | |
|---|----|
| Figura 7.6 – (a) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 9. (b) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 10. (c) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 11. (d) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 12..... | 77 |
| Figura 7.7 – Esquema da RNA Definitiva..... | 78 |
| Figura 7.8 – Gráfico de erros MSE de treino, de validação e de teste da RNA Definitiva..... | 79 |
| Figura 7.9 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de treino. (b) Gráfico de erro de treino..... | 80 |
| Figura 7.10 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de validação. (b) Gráfico de erro de validação..... | 81 |
| Figura 7.11 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de teste. (b) Gráfico de erro de teste | 81 |
| Figura 7.12 – Gráfico comparativo entre a Saída Real e a Saída Estimada, levando em consideração o conjunto de dados da PTG 2..... | 82 |

LISTA DE TABELAS

| | |
|--|----|
| Tabela 1.1 – Metodologia do trabalho..... | 6 |
| Tabela 2.1 – Compostos Químicos do Banho Eletrolítico | 12 |
| Tabela 2.2 – Variação da resistividade em relação aos aditivos a 1000°C..... | 14 |
| Tabela 2.3 – Variação da densidade em relação aos aditivos a 1000°C..... | 14 |
| Tabela 2.4 – Influência do composto no banho eletrolítico | 16 |
| Tabela 2.5 – Influência dos aditivos na tensão de superfície e na tensão interfacial | 17 |
| Tabela 2.6 – Resumo da influência do uso de cada aditivo químico no banho eletrolítico | 17 |
| Tabela 3.1 – Descrição das Etapas de Funcionamento da PTG | 20 |
| Tabela 5.1 – Aplicações que utilizam RNA na indústria | 45 |
| Tabela 6.1 – Relatório da Análise Física da Alumina Virgem repassada pela ALUNORTE à ALBRAS | 55 |
| Tabela 6.2 – Relatório da Análise Química da Alumina Virgem repassada pela ALUNORTE à ALBRAS | 56 |
| Tabela 6.3 – Faixas operacionais das variáveis e suas médias..... | 68 |
| Tabela 6.4 – Configurações de redes utilizadas para auxiliar na escolha da melhor RNA..... | 70 |
| Tabela 6.5 – Parâmetros de Treinamento da PMC..... | 71 |
| Tabela 7.1 – Resultados do erro MSE de cada RNA Candidata | 72 |

GLOSSÁRIO

| | |
|---------------------------------------|--|
| Aditivo Químico | Compostos químicos preparados especialmente para auxiliar no processo de manutenção química do forno de redução de alumínio primário |
| Adsorção | Adesão de moléculas de um fluido (o adsorvido) a uma superfície sólida (o adsorvente). |
| Algoritmo de Treinamento | Método matemático utilizado para encontrar parâmetros ótimos que reproduzam um determinado conjunto de saídas a partir de entradas. Ver também Treinamento . |
| Alumina Fluoretada/Secundária | Componente produzido pela Planta de Tratamento de Gases que retorna para o forno de redução de alumínio para manter a estabilidade química e térmica do mesmo. |
| Alumina Virgem/Primária/Fresca | Componente produzido e fornecido pela ALUNORTE que tem a propriedade de adsorver os gases sujos provenientes dos fornos de redução. |
| Alumínio Primário | Alumínio na sua forma mais pura, podendo ser adaptado por outras indústrias para diversas finalidades. |
| Anodo | Extremidade de carga positiva do meio eletrólito, na qual são depositadas partículas eletricamente negativas do processo. No processo de fabricação de alumínio primário, é representado por um bloco de coque e piche fabricados a partir de carbono. |
| Aprendizado | Procedimento pelo qual uma estrutura computacional inteligente extrai conhecimento de um conjunto de dados no qual se deseja obter informações relevantes. |
| Balanço Térmico | Equilíbrio termodinâmico do forno eletrolítico para manter a temperatura estável próxima do ideal. |
| Banho Químico | Material utilizado como meio fundido durante a eletrólise da alumina, geralmente composto por criolita. Ver Criolita . |
| Bauxita | Matéria-prima da Alumina, uma das formas mais abundantes do alumínio na natureza. |
| Bias | Parâmetro que possui influência na saída de um neurônio, independente de suas entradas. Geralmente possui valor unitário. |
| Camada neural | Estrutura de múltiplos neurônios que operam em paralelo com o mesmo conjunto de entradas, compartilhando mesmos tributos. |
| Catodo | Extremidade de carga negativa do meio eletrólito, na qual se acumulam partículas eletricamente positivas. |

| | |
|-----------------------------------|---|
| Criolita | Material utilizado como meio fundido na eletrólise da alumina. Ver também Banho Químico . |
| Crosta | Parte do Banho químico que se solidifica na lateral dos fornos eletrolíticos |
| Eficiência de Corrente | Medida da produção atual de corrente dividida pela produção real de corrente. |
| Eletrólise | Processo pelo qual uma molécula polarizada é separada através da passagem de corrente elétrica, necessitando de um meio fundente para se dar a reação. |
| Eletrólito | Meio no qual ocorre a Eletrólise |
| Estimação | Determinar por cálculo determinada grandeza através do uso de outras grandezas. |
| Exaustor | Enormes hélices que giram através de um motor, criando uma sucção de massa gasosa. |
| Filtragem de Dados | Técnica utilizada para retirar dados que possam conter ruídos ou informações incorretas sobre o processo. |
| Filtro de Manga | Estruturas de poliéster que funcionam como um filtro capaz de reter pó e liberar gás. |
| Forno Eletrolítico | Estruturas preparadas especialmente para receber os elementos que compõem o eletrólito e para permitir que o processo de fabricação de alumínio ocorra. |
| Função de Ativação | Função matemática com comportamento não linear utilizada para cálculo da saída dos neurônios, reproduzindo tal como acontece em neurônios reais. |
| Gás Limpo | Massa gasosa isenta de elementos que agredem o meio ambiente. |
| Gás Sujo | Massa gasosa composta por elementos nocivos ao meio ambiente. |
| Inteligência Computacional | Paradigma computacional no qual programas de computador desenvolvem facilidades de resolver problemas complexos de difícil modelagem matemática baseadas no modo como o cérebro humano age. |
| Modelagem | Construir um modelo capaz de emular o comportamento da planta que está sendo modelada. |
| Neurônio Artificial | Estrutura de processamento simples, que reproduzem o comportamento aproximado de neurônios reais, recebendo entradas e ativando saídas. |
| Pesos | Conexões entre neurônios, que possuem habilidade de modificar as entradas dos mesmos, sendo considerados parâmetros da Rede Neural. |

| | |
|--|---|
| Planta de Tratamento de Gases | Grandes estruturas que retêm os Gases Sujos provenientes dos fornos de redução e os faz entrar em contato com Alumina Virgem , gerando Alumina Fluoretada e Gás Limpo . |
| Redes Neurais Artificiais | Estrutura Computacional, baseada no cérebro humano, dedicada para simular uma rede de neurônios, que a partir de certas entradas, reproduz saídas estimadas. |
| Sensor Virtual | Programa computacional, fundamentado em dados reais, com a capacidade de estimar ou inferir alguma grandeza de forma virtual. |
| Silos | Grandes compartimentos que estocam determinado material. |
| Sinapses | Conexões entre neurônios, que são estruturas que contem pesos. |
| Técnica de Inteligência Computacional | Abordagem prática da inteligência computacional na forma de algoritmos e/ou programas de computador. |
| Tratamento de Gases | Procedimento de reaproveitamento dos gases produzidos no processo de fabricação de alumínio primário. |
| Treinamento | Procedimento de aprendizagem de uma rede neural artificial. |

LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS

| | |
|---|--|
| RNA | Rede Neural Artificial. |
| PTG | Planta de Tratamento de Gases. |
| d_i | Distância ponderada do ponto x_i à média da variável de acordo com o desvio padrão. |
| y_{max} | Valor máximo de normalização (1). |
| y_{min} | Valor mínimo de normalização (-1). |
| x_{max} | Valor máximo da variável a ser normalizada. |
| x_{min} | Valor mínimo da variável a ser normalizada. |
| x | Valor real da variável a ser normalizada. |
| y | Valor normalizado. |
| \bar{x} | Média da variável x. |
| σ_x | Desvio padrão da variável x. |
| w_n | Pesos sinápticos. |
| n_p | Ordem do preditor e indica o número de medidas (amostras) anteriores que serão necessárias para estimação. |
| n_q | Quantidade de saídas passadas que serão também utilizadas na estimação. |
| x(t) | Entradas do sistema. |
| $\hat{y}(t)$ ou $\hat{y}_i(t)$ | Saída estimada pelo modelo. |
| y(t) ou y_i(t) | Saída real coletada. |
| L.O.I. | Perda por ignição. |
| D. APAR. | Densidade Aparente. |
| Na₂O % | Porcentagem de sódio na substância. |
| $\bar{u}(t)$ | Vetor de entradas reais do sistema. |
| 1:D | D representa o número de atrasos utilizados. |
| MSE | <i>Mean Square Error</i> ou Erro Quadrático Médio. |
| N | Número total de registros. |
| i | Índice genérico. |
| APE ou PEA | <i>Absolute Percentage Errors</i> ou Porcentagem do Erro Absoluto. |

SUMÁRIO

| | |
|---|-------------|
| AGRADECIMENTOS | V |
| LISTA DE ILUSTRAÇÕES | VI |
| LISTA DE TABELAS | IX |
| GLOSSÁRIO | X |
| LISTA DE ABREVIATURAS, SIGLAS E SÍMBOLOS | XIII |
| RESUMO | 1 |
| ABSTRACT | 2 |
| 1. INTRODUÇÃO | 3 |
| 1.1. APRESENTAÇÃO DO CENÁRIO | 3 |
| 1.2. OBJETIVOS E JUSTIFICATIVA | 4 |
| 1.3. METODOLOGIA E ESTRUTURA DO TRABALHO | 5 |
| 2. INTRODUÇÃO AO PROCESSO DE FABRICAÇÃO DE ALUMÍNIO | 8 |
| 2.1. O PROCESSO HALL-HÉROULT | 8 |
| 2.1.1. FORNO ELETROLÍTICO | 9 |
| 2.1.2. BANHO ELETROLÍTICO | 11 |
| 2.1.3. ADITIVOS QUÍMICOS UTILIZADOS | 12 |
| 3. PLANTA DE TRATAMENTO DE GASES | 19 |
| 3.1. DESCRIÇÃO DA PLANTA | 19 |
| 3.2. FUNCIONAMENTO DA PLANTA | 24 |
| 4. USO DE SENSORES VIRTUAIS NA INDÚSTRIA | 31 |
| 4.1. APLICAÇÕES NA INDÚSTRIA QUÍMICA | 33 |
| 4.2. PROJETO DE SENSOR VIRTUAL | 35 |
| 4.2.1. MODELAGEM FÍSICA (CAIXA BRANCA) | 35 |
| 4.2.2. MODELAGEM BASEADA EM INTELIGÊNCIA COMPUTACIONAL (CAIXA PRETA) | 36 |
| 4.2.3. MODELAGEM HÍBRIDA (CAIXA CINZA) | 36 |
| 4.2.4. COLETA DE DADOS | 36 |
| 4.2.4.1. REGRA 3SIGMA | 37 |
| 4.2.5. NORMALIZAÇÃO DOS DADOS | 38 |
| 4.2.5.1. NORMALIZAÇÃO MIN-MAX | 38 |
| 4.2.5.2. NORMALIZAÇÃO Z-SCORE | 39 |
| 4.2.6. VALIDAÇÃO DO SENSOR VIRTUAL | 39 |

| | | |
|-----------|---|-----------|
| 4.2.7. | AJUSTES E MELHORAMENTOS | 39 |
| 4.2.7.1. | NÃO GENERALIZAÇÃO..... | 39 |
| 4.2.7.2. | ERRO ALTO..... | 40 |
| 4.3. | IMPLEMENTAÇÃO E INTEGRAÇÃO DE SENSORES VIRTUAIS COM APLICAÇÕES..... | 41 |
| 4.3.1. | MEMÓRIA | 41 |
| 4.3.2. | LINGUAGEM DE PROGRAMAÇÃO | 41 |
| 4.3.3. | PADRONIZAÇÕES | 42 |
| 4.3.4. | CONTEXTO DA APLICAÇÃO..... | 42 |
| 4.3.5. | TOLERÂNCIA A FALHAS..... | 42 |
| 5. | REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS..... | 43 |
| 5.1. | CARACTERÍSTICAS..... | 44 |
| 5.2. | ARQUITETURAS | 45 |
| 5.2.1. | REDES <i>FEEDFORWARD</i> MONOCAMADA..... | 45 |
| 5.2.2. | REDES <i>FEEDFORWARD</i> MULTICAMADAS | 46 |
| 5.2.3. | REDES <i>FEEDFORWARD</i> DE SAÍDAS RECORRENTES ÀS ENTRADAS..... | 47 |
| 5.3. | APRENDIZADO..... | 49 |
| 5.3.1. | APRENDIZADO SUPERVISIONADO..... | 50 |
| 5.3.1.1. | ALGORITMO <i>BACKPROPAGATION</i> | 51 |
| 5.3.1.2. | ALGORITMO DE LEVENBERG-MARQUARDT..... | 53 |
| 5.3.2. | APRENDIZADO NÃO-SUPERVISIONADO..... | 53 |
| 6. | PROJETO DO SENSOR VIRTUAL PARA ESTIMAÇÃO DA PORCENTAGEM DE FLÚOR NA ALUMINA FLUORETADA | 55 |
| 6.1. | ESCOLHA DAS VARIÁVEIS | 55 |
| 6.2. | COLETA, SELEÇÃO E FILTRAGEM DE DADOS HISTÓRICOS | 58 |
| 6.3. | DEFINIÇÃO DA ESTRUTURA DO MODELO E DOS PARÂMETROS DE TREINAMENTO DA REDE NEURAL..... | 68 |
| 7. | RESULTADOS..... | 72 |
| 8. | CONCLUSÃO..... | 83 |
| 8.1. | LIMITAÇÕES E DIFICULDADES | 83 |
| 8.2. | TRABALHOS FUTUROS | 84 |
| | REFERÊNCIAS | 85 |
| | APÊNDICE A | 88 |
| | APÊNDICE B..... | 88 |
| | ANEXO I..... | 92 |

RESUMO

As indústrias têm buscado constantemente reduzir gastos operacionais, visando o aumento do lucro e da competitividade. Para alcançar essa meta, são necessários, dentre outros fatores, o projeto e a implantação de novas ferramentas que permitam o acesso às informações relevantes do processo de forma precisa, eficiente e barata. Os sensores virtuais têm sido aplicados cada vez mais nas indústrias. Por ser flexível, ele pode ser adaptado a qualquer tipo de medição, promovendo uma redução de custos operacionais sem comprometer, e em alguns casos até melhorar, a qualidade da informação gerada. Como estão totalmente baseados em software, não estão sujeitos a danos físicos como os sensores reais, além de permitirem uma melhor adaptação a ambientes hostis e de difícil acesso. A razão do sucesso destes tipos de sensores é a utilização de técnicas de inteligência computacional, as quais têm sido usadas na modelagem de vários processos não lineares altamente complexos. Este trabalho tem como objetivo estimar a qualidade da alumina fluoretada proveniente de uma Planta de Tratamento de Gases (PTG), a qual é resultado da adsorção de gases poluentes em alumina virgem, via sensor virtual. O modelo que emula o comportamento de um sensor de qualidade de alumina foi criado através da técnica de inteligência computacional conhecida como Rede Neural Artificial. As motivações deste trabalho consistem em: realizar simulações virtuais, sem comprometer o funcionamento da PTG; tomar decisões mais precisas e não baseada somente na experiência do operador; diagnosticar potenciais problemas, antes que esses interfiram na qualidade da alumina fluoretada; manter o funcionamento do forno de redução de alumínio dentro da normalidade, pois a produção de alumina de baixa qualidade afeta a reação de quebra da molécula que contém este metal. Os benefícios que este projeto trará consistem em: aumentar a eficiência da PTG, produzindo alumina fluoretada de alta qualidade e emitindo menos gases poluentes na atmosfera, além de aumentar o tempo de vida útil do forno de redução.

Palavras-chave: *Sensor Virtual, Indústria do Alumínio, Planta de Tratamento de Gases, Inteligência Computacional, Rede Neural Artificial.*

ABSTRACT

The industries have been often seeking to reduce operating expenses, as to increase profits and competitiveness. To achieve this goal, it must take into account, among other factors, the design and implementation of new tools that accurately, efficiently and inexpensively allow access to information relevant to process. Soft sensors have been increasingly applied in industry. Since it offers flexibility, it can be adapted to make estimations of any measurement, thus a reducing in operating costs without compromising the measurements, and in some cases even improve the quality of generated information. Since they are completely software-based, they are not subjected to physical damage as the real sensors, and are better adapted to harsh environments with hard access. The success of this kind of sensors is due to the use of computational intelligence techniques, which have been widely used in the modeling of several nonlinear complex processes. This work aims to estimate the quality of alumina fluoride from a Gas Treatment Center (GTC), which is the result of gaseous adsorption on alumina virgin, using a soft sensor. The model that emulates the behavior of a alumina quality sensor the plant was created using an artificial intelligence technique known as Artificial Neural Network. The motivations of this work are: perform virtual simulations without compromising the GTC and make accurate decisions based not only on the operator's experience, to diagnose potential problems before they can interfere with the quality of alumina fluoride; maintain the aluminum reduction pot control variables within normal limits, since the production from low quality alumina strongly affects the reaction of breaking the molecule that contains this metal. The benefits this project brings include: increasing the GTC efficiency, producing high quality fluoridated alumina and emitting fewer greenhouse gases into the atmosphere and increasing the pot lifespan.

Keywords: *Soft Sensor, Aluminum Industry, Gas Treatment Center, Computational Intelligence, Artificial Neural Network.*

1. INTRODUÇÃO

Este capítulo apresenta a introdução do contexto do trabalho e a metodologia utilizada.

1.1 APRESENTAÇÃO DO CENÁRIO

A produção industrial no século XXI tem crescido de forma avassaladora, pois o consumo de produtos oriundos das indústrias também tem se elevado. A cada dia, novas formas de se produzir vão sendo criadas e/ou aperfeiçoadas. Dentre os fatores que regem a produção industrial, duas das maiores preocupações são: redução dos gastos para produzir e manutenção do meio ambiente.

No período inicial da produção de conhecimento para solucionar os novos problemas de controle dos processos, Ogata (2007) e Dunn (2005) ressaltaram que o sistema era fortemente baseado em instrumentações que tinham a responsabilidade de coletar dados em tempo real. Entretanto, esses equipamentos eram caros, deveriam ser robustos para suportar a operação em ambientes hostis e precisavam fornecer dados reais com o mínimo de ruído possível. Dessa forma, o custo operacional do processo cresce à medida que a produção aumenta.

Esse problema seria solucionado com o aparecimento das técnicas computacionais inteligentes e de mineração de dados (Haykin, 1999; Ogata, 2007; Dunn, 2005). Após a metade do século XX, ocorreram grandes avanços nesse ramo da ciência, cujos resultados apresentavam coerência com a realidade, permitindo inclusive a identificação de padrões até então invisíveis ou impercebíveis numa análise simplória (Haykin, 1999). Essas técnicas começaram a ser utilizadas na modelagem de processos não-lineares (complexos) e resultados coerentes com o esperado foram obtidos.

Mais ainda, o uso destas técnicas se mostrou também eficiente na identificação de variáveis correlatas entre si, que mais tarde evoluíram na constituição de um instrumento virtual ou sensor virtual (Fortuna *et al.*, 2007). Através de variáveis de entrada em tempo real, é possível saber indiretamente o valor da variável de saída sem a necessidade de instrumentação ou análise laboratorial. O uso sistemático de sensores virtuais pode ocasionar uma redução drástica nos custos operacionais da empresa, além de permitir uma simulação da planta sem prejudicar o processo de produção.

Até o ano 2000, a indústria de alumínio, escopo deste trabalho, tratava os seus efluentes gasosos através da lavagem úmida dos mesmos (Hagen, 2006). Os rejeitos misturados com água eram então enterrados em áreas destinadas para isso. Como indicador

biológico de poluição, havia palmeiras espalhadas no parque industrial, as quais, dependendo de suas características, advertiam sobre a qualidade do ar. Ainda nesse período, a alumina fluoretada, principal matéria-prima dos fornos de redução de alumínio, era comprada de outros fornecedores, constituindo-se um custo para a empresa.

Após a instalação de um novo ferramental, conhecido como Planta de Tratamento de Gases (PTG), a lavagem dos gases sujos passa a ser feita a seco, pois a alumina virgem, ao entrar em contato com os gases poluentes, ricos em flúor, se agrega aos rejeitos, gerando alumina fluoretada, a qual retorna para o forno de redução. Como as substâncias nocivas ao meio ambiente se ligam à alumina, o gás limpo é expelido pela chaminé da planta.

É importante ressaltar que dependendo da qualidade da alumina fluoretada o funcionamento do forno de redução de alumínio pode sofrer alterações. Por exemplo, se uma alumina muito fina for gerada e transferida para o forno, ela acabará passando diretamente para o fundo do mesmo sem que aconteça a reação química necessária.

Nota-se que com a implantação dessa nova planta para tratamentos dos gases, a fábrica de alumínio ganha tanto na redução de gastos, já que não precisa mais comprar alumina fluoretada de terceiros; quanto na manutenção do meio ambiente, uma vez que o sistema de lavagem a seco é mais eficiente em relação ao sistema de lavagem úmida. Além de aumentar a eficiência dos fornos de redução, utilizando alumina dentro dos padrões requeridos.

Nesse contexto, verifica-se que se torna indispensável a criação de ferramentas que possibilitem o monitoramento e a simulação do comportamento da PTG em tempo real.

O principal tema deste trabalho é o projeto de um sensor virtual para estimar a qualidade da alumina fluoretada proveniente de uma PTG em uma indústria de alumínio primário. O caso apresentado envolve a medição indireta da porcentagem de flúor adsorvido pela alumina na PTG, com a utilização de dados reais de uma PTG que opera em uma fábrica de alumínio primário no Brasil. As medidas da porcentagem de flúor adsorvido são feitas em laboratório através de um analisador químico que avalia uma amostra de alumina fluoretada a cada dia (Albras, 2005). A proposta desse trabalho é oferecer uma alternativa para obter a porcentagem de flúor usando a técnica de estimação citada (Rede Neural).

1.2 OBJETIVOS E JUSTIFICATIVA

Por serem baseados em *software*, os sensores virtuais são capazes de estimar valores de variáveis que são difíceis de ser obtidas em tempo real, que necessitam de análise laboratorial para saber a composição da substância alvo e que envolvem um alto custo para a medição. Estes sensores geralmente são utilizados na estimação de variáveis como

temperatura e composição química, cujo tempo de resposta é lento, e na maioria das vezes são necessárias análises em laboratório (Soares 2009 *apud* Zanata, 2005). Além disso, os sensores virtuais trazem o benefício da previsão das próximas medidas com base em amostras atuais (Fortuna, 2007).

Este trabalho propõe a utilização de sensores virtuais, baseado em rede neural artificial, para estimação, em tempo real, da porcentagem de flúor adsorvido pela alumina fluoretada proveniente da PTG. O principal benefício para a indústria de alumínio ao estimar a porcentagem de flúor na alumina fluoretada é dispor desse dado a qualquer momento, ao invés de uma vez a cada 24 horas, como é feito até então. Isso ocasionaria antecipação na tomada de decisão por parte da equipe de engenheiros de processo da PTG, contribuindo para a eficiência da produção de alumínio primário como um todo.

Os sensores virtuais normalmente possuem tempo de resposta baixo e boa precisão por serem baseados em *software*, utilizando os dados de processo como base de conhecimento (Fortuna *et al.*, 2007; Aguirre, 2004; Zanata, 2005). Os trabalhos já publicados na área (Assis *et al.*, 2000; Castro, 2001; Branco, 2004; Amos, 2005; Pereira, 2005; Branco, 2006; Sinelnikov *et al.*, 2006; Soares, 2010) mostram resultados satisfatórios para processos químicos. Tais processos já possuem disponíveis variáveis em tempo real para realizar o controle da planta, como, por exemplo, a composição química da alumina, a composição física da alumina, as correntes de operação dos exaustores da PTG, dentre outras.

Dessa maneira, o objetivo geral desse trabalho é a estimação indireta da porcentagem atual e futura de flúor adsorvido pela alumina no estado fluoretada com base nas variáveis de entrada, para auxiliar na tomada de decisões.

De forma específica, objetiva-se:

- Identificar as variáveis mais importantes e que mais influenciam na variável de saída para construir o modelo neural;
- Coletar, filtrar e selecionar dados reais do processo a fim de se retirar dados ruidosos e permitir uma análise mais precisa do processo;
- Construir um modelo de estimação, contemplando variáveis fundamentais de entrada e variável de saída, possibilitando a criação do sensor virtual neural.

1.3 METODOLOGIA E ESTRUTURA DO TRABALHO

O trabalho segue uma Metodologia específica para construção de sensores virtuais, conforme definida em (Fortuna *et al.*, 2007). Como a comportamento da planta é muito complexo e não linear, a identificação das variáveis do modelo requer uma boa pesquisa junto

à equipe de processo da fábrica, necessária para entender o funcionamento da planta. A experiência que essa equipe possui deve ser aproveitada para determinar quais variáveis interferem de maneira significativa na porcentagem de flúor na alumina fluoretada.

Uma extensa pesquisa bibliográfica é conveniente para conhecer os trabalhos já feitos na área e em áreas afins, para determinar a metodologia recomendada, pois muitos trabalhos compartilham da mesma maneira de se projetar o sensor, variando-se apenas a tecnologia ou a técnica computacional utilizada. Essa pesquisa deve envolver as três áreas deste trabalho que são: o funcionamento da PTG, o projeto de sensores virtuais e a técnica de Inteligência Computacional conhecida como Redes Neurais Artificiais.

O próximo passo é a escolha e a filtragem de dados para análise e criação de modelos candidatos ao modelo definitivo. Após diversos testes, várias simulações e análise dos erros de cada modelo; as estimações das variáveis são obtidas e submetidas à validação, tanto pela equipe de processo quanto pelos cálculos das métricas de erro para o conjunto de dados de validação. A partir daí, escolhe-se o modelo definitivo para ser usado no sensor virtual.

A Tabela 1.1 a seguir mostra as atividades desenvolvidas para atingir cada objetivo elencado:

Tabela 1.1 – Metodologia do trabalho

| Objetivo | Método/Atividade |
|-----------------|--|
| I | Pesquisa de literatura sobre a PTG (leitura de manuais); Entrevista com a equipe de processos que lida diariamente com a PTG (técnicos de processo, engenheiros de processo, operadores). |
| II | Utilizar técnicas de filtragem de dados; Escolher dados que representem da melhor maneira possível o comportamento da planta. |
| III | Projetar vários modelos (modelos candidatos) baseados em rede neural e com diferentes parâmetros a fim de emular o comportamento da PTG de forma coerente e precisa, de acordo com as variáveis escolhidas; Analisar o valor do erro de cada modelo neural candidato e escolher o modelo neural definitivo; Validar, segundo dados coletados e junto à equipe de processo, os resultados obtidos, havendo ainda a possibilidade de modificações na estrutura do modelo definitivo. |

Esta dissertação foi organizada em oito capítulos, objetivando mostrar de forma direta o funcionamento da PTG, os procedimentos utilizados para o projeto do sensor virtual neural e os resultados obtidos.

A organização dos capítulos segue os seguintes tópicos:

- **Capítulo 1:** apresenta a motivação que deu origem ao trabalho, os objetivos e a fundamentação teórica preliminar;
- **Capítulo 2:** mostra uma introdução ao processo de fabricação de alumínio primário;
- **Capítulo 3:** descreve a PTG e explica seu funcionamento;
- **Capítulo 4:** apresenta os sensores virtuais de forma genérica, ressaltando trabalhos já feitos com a utilização desta técnica e explicando conceitos específicos dessa ferramenta;
- **Capítulo 5:** mostra a teoria de redes neurais artificiais que serviu de base para o projeto do modelo neural, elucidando suas arquiteturas e algoritmos de treinamento;
- **Capítulo 6:** exhibe a especificação do projeto do sensor virtual neural, como ele foi concebido para alcançar os objetivos propostos no trabalho, destacando a metodologia utilizada para a criação do sensor;
- **Capítulo 7:** apresenta os resultados obtidos, incluindo gráficos comparativos entre os resultados gerados pelo sensor virtual (estimados) e os dados reais;
- **Capítulo 8:** mostra a conclusão do trabalho, as limitações do projeto e as propostas de trabalhos futuros;
- Na penúltima seção, encontram-se as referências bibliográficas utilizadas;
- No final do trabalho, temos os Apêndices e os Anexos.

2. INTRODUÇÃO AO PROCESSO DE FABRICAÇÃO DE ALUMÍNIO

A maioria das informações contidas neste capítulo foi extraída de ALBRAS (1999). O restante está baseado em reuniões com a equipe de engenheiros de processos que aconteceram no decorrer do projeto.

1.4 O PROCESSO HALL-HÉROULT

Na natureza, o alumínio está sempre ligado a algum outro elemento químico na forma de sais ou óxidos, o que torna necessária uma separação. Através do processo Hall-Héroult, a quebra da molécula que contém o alumínio, a alumina (Al_2O_3), vista na Figura 2.1, é feita de tal forma que se consegue obter alumínio com mais de 99% de pureza.

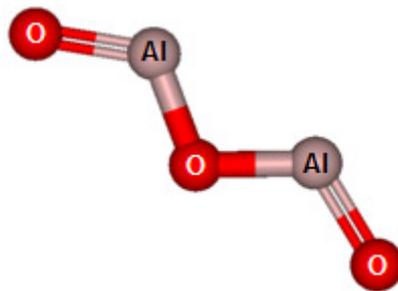


Figura 2.1 – Molécula de alumina

Este processo, gasta muita energia elétrica para que ocorra a quebra (eletrólise) da molécula. Na tentativa de diminuir gastos incalculáveis de energia, adicionam-se outros elementos ao processo como: sais fundentes e aditivos químicos, que além de diminuir o ponto de fusão da molécula, também mantêm a estabilidade química do processo. Com o aumento no número de variáveis que compõem o processo e como a maioria dessas variáveis é fortemente correlacionada, isto é, uma variável depende da outra, o processo se torna muito complexo. A reação a seguir mostra o processo químico genérico que ocorre no forno.



O processo Hall-Héroult é contínuo, ou seja, em condições normais, funciona 24 horas ao dia e sete dias na semana. A alumina é dissolvida em um banho de criolita a uma temperatura em torno de 960°C sob a passagem de corrente elétrica contínua. No caso da ALBRAS, utiliza-se uma corrente entre 160 kA e 180 kA. Nas fábricas, os fornos, também conhecidos como cubas ou, em inglês, *pots* ou *cells*, são dispostos em série, assim a corrente

elétrica é a mesma em todos os fornos. O metal produzido é retirado dos fornos e encaminhado ao lingotamento – no qual o alumínio líquido é solidificado em fôrmas produzindo-se os lingotes, que logo depois são empilhados e estocados para exportação.

Cada etapa citada no parágrafo anterior é alvo de constante controle no interior da fábrica. Além disso, os institutos de pesquisa, principalmente as universidades, têm atuado em conjunto com os membros de equipes da fábrica, produzindo, através de parcerias em projetos, melhorias que tendem a simplificar e automatizar cada vez mais o processo de fabricação de alumínio.

2.1.1. Forno Eletrolítico

O forno é o local onde a reação ocorre. É uma construção de aço especialmente preparada para receber os elementos utilizados no processo: banho eletrolítico, alumina, gases, aditivos químicos, corrente elétrica e estruturas de carbono para condução de energia. A Figura 2.2 ilustra o forno e indica seus componentes.

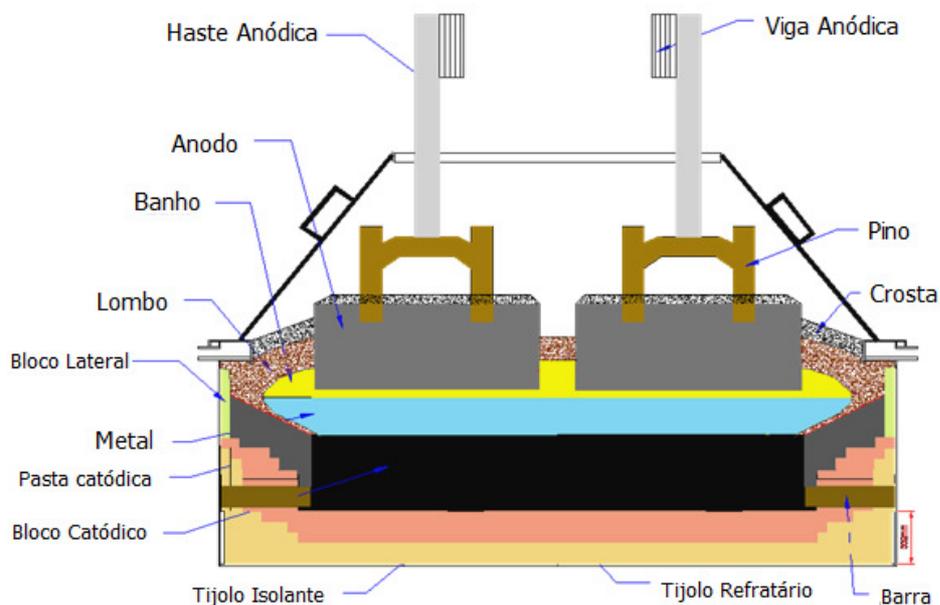


Figura 2.2 – Forno de redução do alumínio e suas partes

Fonte: Grjotheim & Kvande, 1993. (Adaptação)

A corrente elétrica atravessa o forno dos anodos ao catodo. O número de anodos por forno é proporcional a corrente de operação e o tamanho do mesmo. No caso da ALBRAS, são 18 anodos em cada forno. O banho eletrolítico fica entre os anodos e o catodo, que é o meio onde ocorre a eletrólise. O alumínio produzido é atraído para o pólo negativo (catodo), ficando depositado no fundo do forno. Uma crosta sólida se forma ao redor do forno e na sua

superfície. Essa crosta é importante, pois isola o forno não permitindo troca de calor excessiva com o meio externo, além disso, ela ajuda a diminuir as emissões de gases para o meio ambiente. Periodicamente, ela é rompida para troca de anodos. Para adição de alumina, fluoreto ou outros aditivos químicos o caminho fica aberto constantemente. Acima da superfície ficam os gases gerados no processo, que são reaproveitados pela PTG. Esses gases, compostos também de flúor, irão compor a reação que produzirá alumina fluoretada (que voltará para o processo como matéria-prima). É necessária a captação desses gases para atender às normas ambientais.

A temperatura de operação do banho é de 920 a 1000°C, entretanto o ideal é manter a temperatura o mais próximo possível de 960°C. A criolita pura possui um ponto de fusão alto (1009°C) e, para reduzi-lo, são adicionados alguns aditivos químicos, principalmente o fluoreto de alumínio (AlF_3), o fluoreto de cálcio (CaF_2) e a própria alumina (Al_2O_3). A finalidade dos aditivos químicos também é manter a composição química do forno estável.

A resistência comum de um forno está em torno de 15 μOhm , mantendo a tensão em torno de 4,2V. A tensão efetiva, ou seja, aquela que é gerada pela própria reação química e resulta na produção do alumínio corresponde a 1,65V por forno. É fundamental que a resistência se mantenha estável para que a tensão efetiva não se altere, pois causaria uma queda na produtividade. Uma resistência muito alta pode provocar superaquecimento no forno, comprometendo o anodo e em casos extremos o catodo (Grjotheim & Kvande, 1993). O comprometimento do catodo provoca o desligamento do forno. Já uma resistência muito baixa provoca uma queda na eficiência de corrente. Observa-se que a relação tensão *versus* resistência é regida pela Primeira Lei de Ohm:

$$V = R.i \quad (2.2)$$

Para se manter a resistência estável, é necessário controlar a distância anodo- catodo a um nível que mantenha a resistência próxima de seu *setpoint*. Os anodos são consumidos continuamente pelo eletrólito fazendo com que a distância com o catodo aumente, elevando a resistência do forno. Existe um sistema de controle de resistência capaz de monitorar continuamente as variáveis *online* do forno, identificando se há necessidade de subir ou de descer o anodo. Ressalta-se que esse sistema de controle normalmente não movimenta um anodo individualmente, mas todos ao mesmo tempo.

2.1.2 Banho Eletrolítico

A composição química do eletrólito (ou banho) possui um papel fundamental no processo produtivo. Visando manter estáveis as suas variáveis, há duas formas de se controlar a química de banho: balanço térmico e balanço de massa. Qualquer alteração no balanço térmico (ou equilíbrio térmico) interfere no balanço de massa (composição química), e vice-versa (Grjotheim & Kvande, 1993).

O equilíbrio térmico é obtido através dos aditivos químicos:

- Fluoreto de Alumínio (AlF_3);
- Fluorita de Cálcio (CaF_2);
- Barrilha (Carbonato de Sódio) Na_2CO_3 .

Na ALRBAS, este controle é feito a cada 32 horas, quando são coletadas informações sobre o balanço térmico (temperatura de banho, temperatura de líquidos, *super heat*). Para se obter a informação sobre a composição química atual do banho, uma análise química é feita em laboratório com amostras do banho retiradas a cada 64 horas. Tendo essas informações, o técnico de processo deve tomar a decisão sobre o que deve ser adicionado ao banho para que a composição química e, conseqüentemente, a temperatura fique estabilizada. Esse tempo entre as coletas é alto por causa do elevado número de fornos a serem percorridos para coleta das amostras do alumínio líquido, a serem analisadas em laboratório.

O principal impacto da química de banho no processo de fabricação de alumínio é a influência direta na eficiência de corrente e a formação da crosta. As variáveis de temperatura e fluoreto se tornaram um parâmetro de avaliação fundamental sobre o desempenho do forno, pois elas respondem pelo balanço térmico e químico dos fornos.

A presença de alumina no banho é um importante fator de desempenho da produção, pois existe uma quantidade ideal para que o forno não se desestabilize. Normalmente a quantidade ideal é em torno de 2 a 5% em massa. Qualquer quantidade fora desse limite leva a um comportamento inadequado do forno. Como o processo é contínuo, a alimentação de alumina é feita por pequenas bateladas periodicamente de forma pré-programada. No caso da ALBRAS, é adicionado, em média, 2400 quilos de alumina por dia onde a frequência de como é alimentada depende do controle de resistência.

Esse controle, na prática, identifica qual tipo de alimentação é mais adequado para o forno naquele momento. Essa informação é extraída das mesmas variáveis do controle de

resistência. O principal parâmetro para se identificar uma mudança de alimentação é a própria resistência do forno.

Todos os sistemas de controle são automatizados parcialmente, ficando a cargo da equipe de processo a tomada de decisões de acordo com as informações passadas pelo sistema de controle e a experiência da equipe que mantém o processo. Com as tecnologias de acesso a dados (através de sensor) e a comunicação entre sensores e computador, é possível registrar em bancos de dados a grande maioria das informações referentes aos fornos, suas variáveis e seus registros com o passar do tempo. Isso possibilita a realização de pesquisas sobre esses dados sendo possível a identificação de certos padrões entre as variáveis.

Apesar de se encontrar em um patamar já bastante evoluído, o processo enfrenta alguns problemas de natureza operacional ou por limitações dos equipamentos. As alimentações são pré-definidas para cada tipo de situação, porém há situações indesejáveis que acabam ocorrendo, citadas a seguir:

- Formação de pontas nos anodos;
- Efeito anódico;
- Superaquecimento repentino do forno;
- Oscilações fortes na temperatura e na composição química;
- Vazamento de metal;
- Variação da crosta.

2.1.3 Aditivos Químicos Utilizados

O banho típico contidos nos fornos da ALBRAS é composto dos elementos químicos mostrados na Tabela 2.1:

Tabela 2.1 – Aditivos Químicos do Banho Eletrolítico.

| Composto | Descrição |
|---|---|
| Fluoreto de Alumínio (AlF ₃) | O fluoreto de alumínio é o principal componente utilizado tanto para o controle da temperatura do banho quanto para o controle da estabilidade química do mesmo. Entretanto, se esse composto estiver em excesso no banho, quantidades grandes de flúor serão liberadas em forma de gás. Além disso, o fluoreto de alumínio serve como matéria-prima, já que possui alumínio na sua composição. Seu ponto de fusão é 1040 °C. |

| Composto | Descrição |
|---|--|
| Fluoreto de Cálcio (CaF ₂) | O fluoreto de cálcio também atua no controle da temperatura e da estabilidade química do forno, mas a sua quantidade dentro do forno é pequena. Seu ponto de fusão é alto: 1330 °C |
| Alumina (Al ₂ O ₃) | A alumina é a principal matéria-prima do forno e é despejada continuamente dentro da cuba. Seu ponto de fusão é 1009 °C. |

As propriedades químicas do banho são determinadas em laboratório, através das amostras coletadas periodicamente de cada forno. A frequência de amostragem é de 64 em 64 horas. Os resultados dessa análise são usados para fazer adições de AlF₃ e também são úteis para determinar as propriedades do banho.

As propriedades do banho de maior importância são:

- a) Resistividade (ohms/cm/cm²);
- b) Densidade (g/cm³);
- c) Diagrama de fase da criolita (inter-relação do fluoreto de alumínio e temperatura operacional);
- d) Solubilidade da alumina (percentual);
- e) Tensão de superfície (dinas/cm);
- f) Pressão de vapor (Pa).

A seguir são descritos os efeitos dos vários aditivos nas propriedades físico-químicas da criolita e do alumínio fundido.

- a) Resistividade:

É a resistência em Ohms, de uma seção de um material de 1 cm² por 1 cm de comprimento.

A resistência é importante porque ela é responsável por 30 ~ 40% da queda de voltagem e consumo de energia no forno e determina a quantidade de calor dissipada enquanto a corrente flui pelo banho.

A resistividade da criolita pura a 1000 °C é de +0,36 ohms/cm/cm². A influência dos aditivos a 1000 °C por cada ponto percentual é mostrada na Tabela 2.2:

Tabela 2.2 – Variação da resistividade em relação aos aditivos a 1000°C

| Resistividade | Aditivo |
|---------------------------------|--------------------------------|
| +0,007 ohms/cm/cm ² | Al ₂ O ₃ |
| +0,0014 ohms/cm/cm ² | CaF ₂ |
| +0,003 ohms/cm/cm ² | AlF ₃ |
| -0,004 ohms/cm/cm ² | NaF |

A influência da temperatura na resistividade ocorre da seguinte maneira: a resistividade do banho aumenta à medida que a temperatura diminui. Para criolita pura a variação é de 0,08% por grau centígrado de mudança na temperatura.

b) Densidade:

A densidade de banho é importante, porque é necessário que o banho seja menos denso (mais leve) que o alumínio para que o metal fique no fundo do forno. Caso as densidades sejam iguais, o banho e o metal irão se misturar, resultando no que é conhecido como “um forno virando metal”.

Na temperatura de fusão (ponto de fusão e solidificação), de aproximadamente 1000 °C, a criolita tem duas densidades:

- Criolita sólida: 2,970 g/cm³
- Criolita líquida: 2,095 g/cm³

A influência da composição do banho na densidade, com temperatura de 1000 °C, é mostrada na Tabela 2.3 a seguir, para cada ponto percentual de aditivo:

Tabela 2.3 – Variação da densidade em relação aos aditivos a 1000°C

| Densidade | Aditivo |
|--------------------------|--------------------------------|
| -0,005 g/cm ³ | Al ₂ O ₃ |
| +0,006 g/cm ³ | CaF ₂ |
| -0,004 g/cm ³ | AlF ₃ |

A influência da temperatura na densidade: a densidade do banho aumenta à medida que a temperatura diminui. A variação é da ordem de 0,002 g/cm³/°C.

c) Diagrama de Fase da Criolita

A criolita pura funde a 1009 °C, mas os fornos operam na faixa de temperatura de 940 a 965 °C. Sendo necessário, portanto, reduzir a temperatura. Essa redução se dá devido aos vários aditivos no banho. Quando duas ou mais substâncias são misturadas juntas, um ponto de fusão diferente irá existir por cada combinação única entre os materiais. A relação entre os pontos de fusão e os resultados de composição resulta em um Diagrama de Fase (ou de Equilíbrio), mostrado pela Figura 2.3.

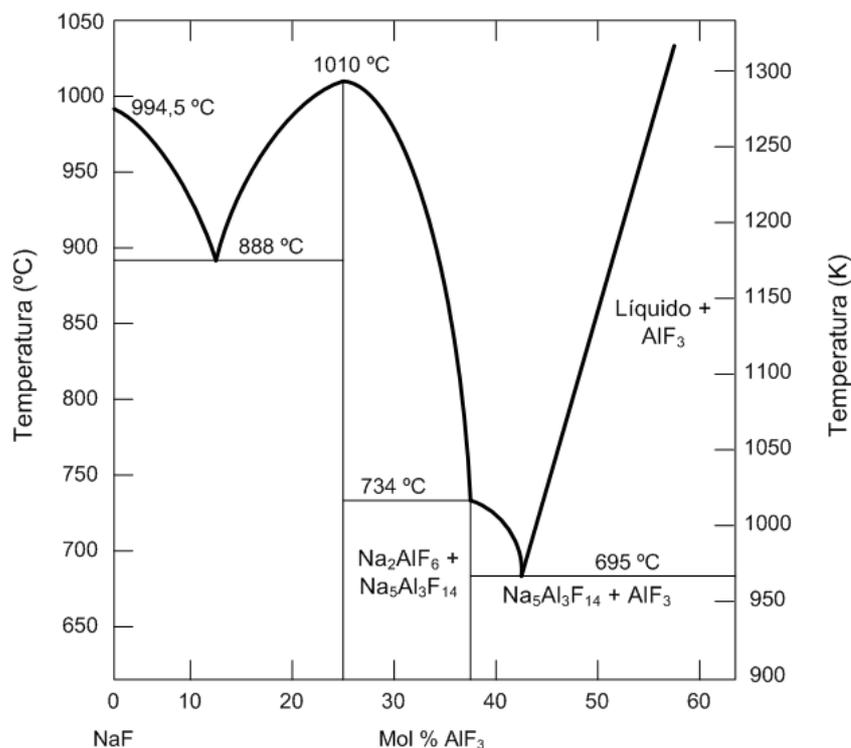


Figura 2.3 – Diagrama de Fase/Equilíbrio

O banho básico é caracterizado por possuir excesso de NaF. Fornos operando em seu estado normal nunca são operados neste lado (esquerdo antes de 890° C) do diagrama de fase. Esse tipo de banho torna-se sólido a 890° C, a Eficiência de Corrente é baixa e o banho solidifica muito rapidamente para que esse tipo de eletrólito seja controlável.

O banho ácido é diferenciado por ter excesso de AlF₃. Fornos operam com banho ácido, pois a faixa de solidificação é mais ampla, a densidade é mais baixa, permite operação mais fria e aumenta a Eficiência da Corrente. Entretanto, as desvantagens são: o AlF₃ eleva a resistividade e é continuamente perdido durante a volatilização, exigindo sistemas de coletas

de gases sofisticados para recolher este material, para que ele seja retornado (como matéria-prima) para os fornos.

d) Solubilidade da alumina

É um dos fatores mais importantes que afetam a operação do forno. Se a alumina não solubilizar no banho, ela precipitará para o fundo do forno, formando lama. A quantidade de alumina que pode ser dissolvida no banho depende da temperatura e da composição do banho. A taxa de dissolução depende da temperatura e do tamanho da partícula de alumina.

A influência da composição do banho é resumida na Tabela 2.4:

Tabela 2.4 – Influência do composto no banho eletrolítico

| Composto | Influência |
|--|--|
| AlF ₃ | Desprezível |
| CaF ₂ | 0,3% para cada 1% de CaF ₂ |
| %Al ₂ O ₃ no banho | %Al ₂ O ₃ na criolita – 0,3 (%CaF ₂) |

A temperatura tem um efeito maior na solubilidade do que tem a composição do banho. A solubilidade da alumina na criolita aumenta com a temperatura. Criolita (a 1000 °C) conterá um máximo de 12% de alumina na solução. Isto diminui em 0,05% para cada queda de 1 °C na temperatura, como mostrado na equação 2.3 a seguir.

$$\%Al_2O_3 = 12 - 0.05(1000 - \text{Temperatura do Banho}) \quad (2.3)$$

Se um banho estiver saturado com a alumina a uma certa temperatura, à medida que esta temperatura diminui, a alumina se precipitará como lama na taxa de 0,05% por cada 1°C.

Em um banho com baixas concentrações de alumina, alumina adicionada dissolverá bem rapidamente. Em concentrações maiores, a taxa de solução é menor e a alumina pode precipitar no fundo do forno.

As propriedades físicas da alumina também afetam a taxa de solução. Partículas grandes tendem a se precipitar através do banho antes de serem completamente dissolvidas e pode levar à formação de lama. As partículas também se precipitarão mais rapidamente a temperaturas maiores. Essas propriedades físicas são controladas através de especificações de compra e análises de laboratórios para checar concordâncias.

e) Tensão de superfície e Tensão Interfacial

É uma propriedade de líquidos resultantes de forças de atração molecular desequilibrada na superfície, como resultado, a superfície tende a contrair. Quando consideramos a interface entre duas substâncias, como banho/metal, esta força é chamada Tensão Interfacial. Ela, geralmente, é expressa em dinas por centímetros.

Estas propriedades afetam diretamente o processo eletrolítico, assim como reações secundárias ocorrem no forno. A tensão de superfície do banho afeta a quantidade de materiais do banho volatilizados do forno. A tensão na interface do banho/metal é um dos fatores que influenciam a solubilidade do alumínio no banho, o que resulta em uma menor eficiência de corrente e perda de produção de metal.

A tensão interfacial no revestimento de carbono causa a absorção de alguns materiais de banho pelo revestimento. O fluoreto de sódio será absorvido seletivamente pelo catodo por causa de seu efeito na tensão interfacial da criolita.

A influência de aditivos no banho pode ser analisada através da Tabela 2.5:

Tabela 2.5 – Influência dos aditivos na tensão de superfície e na tensão interfacial

| Composto | Tensão de Superfície | Tensão Interfacial |
|------------------|----------------------|--------------------|
| AlF ₃ | Diminui | Aumenta |
| CaF ₂ | Aumenta | Aumenta |
| NaF | Aumenta | Diminui |

Em relação a temperatura, ambas tensões diminuem com o aumento de temperatura.

A Tabela 2.6 resume a influência dos aditivos químicos utilizados na propriedade química do banho.

Tabela 2.6 – Resumo da influência do uso de cada aditivo químico no banho eletrolítico

| Aditivo | Resistividade | Densidade | Ponto de Solidificação | Tensão de Superfície | Solubilidade da Alumina |
|--|---------------|-----------|------------------------|----------------------|-------------------------|
| Alumina Virgem | Aumenta | Diminui | Diminui | Nenhuma | Diminui |
| Fluoreto de Cálcio (CaF ₂) | Aumenta | Aumenta | Diminui | Aumenta | Diminui |
| Fluoreto de Alumínio (AlF ₃) | Aumenta | Diminui | Diminui | Diminui | Diminui |
| Fluoreto de Sódio (NaF) | Diminui | Aumenta | Aumenta | Aumenta | Aumenta |

É importante que se entenda o processo de fabricação de alumínio, pois o que é produzido na PTG (alumina fluoretada) volta para o forno eletrolítico para o controle térmico e químico do banho contido no forno. Além disso, se o forno se comportar de forma anômala, isso poderá causar interferências na PTG, reduzindo sua eficiência em tratar os gases poluentes. Dessa forma, a qualidade da alumina fluoretada interfere diretamente no funcionamento dos fornos de redução de alumínio e vice-versa.

3. PLANTA DE TRATAMENTO DE GASES

O conteúdo deste capítulo foi baseado nos manuais disponibilizados pela equipe de engenheiros de processo da fábrica de alumínio em questão (Albras, 2001; Albras, 2005). Além desse material, as informações adquiridas em reuniões com a equipe de engenheiros também foram relevantes para a construção desta seção.

Entender o funcionamento das Plantas de Tratamento de Gases é de fundamental importância, já que o objetivo deste trabalho é estimar a concentração de flúor na alumina fluoretada que é produzida por essa planta. Dessa forma, ao conhecer detalhadamente o processo, o projetista da Rede Neural é capaz de criar um sensor virtual coerente com a dinâmica da planta.

1.5 DESCRIÇÃO DA PLANTA

As Plantas de Tratamento de Gases (PTG) foram projetadas para reaproveitar o flúor proveniente dos fornos de redução de alumínio, reagindo-o com alumina, gerando alumina fluoretada. Adicionalmente, ocorre o tratamento dos gases tóxicos, já que esses tipos de gases se ligam com a alumina, objetivando-se com isso a limpeza da massa gasosa antes de despejá-la no meio ambiente. Além disso, acontece a coleta e remoção do pó de alumina e de carbono do gás das cubas.

De uma forma geral, as PTG's funcionam de acordo com o diagrama de blocos apresentado na figura 3.1. Neste diagrama, é possível perceber que as PTG's recebem gases sujos provenientes das cubas de redução de alumínio, juntamente com a alumina virgem, proveniente dos silos de estocagem. Produzindo, a partir de uma reação de adsorção, alumina fluoretada e gases limpos que são menos danosos ao meio ambiente.



Figura 3.1 – Diagrama simplificado da PTG.

Entretanto, o processo de tratamento de gases pode ser dividido em várias etapas específicas, como mostrado no fluxograma da Figura 3.2.

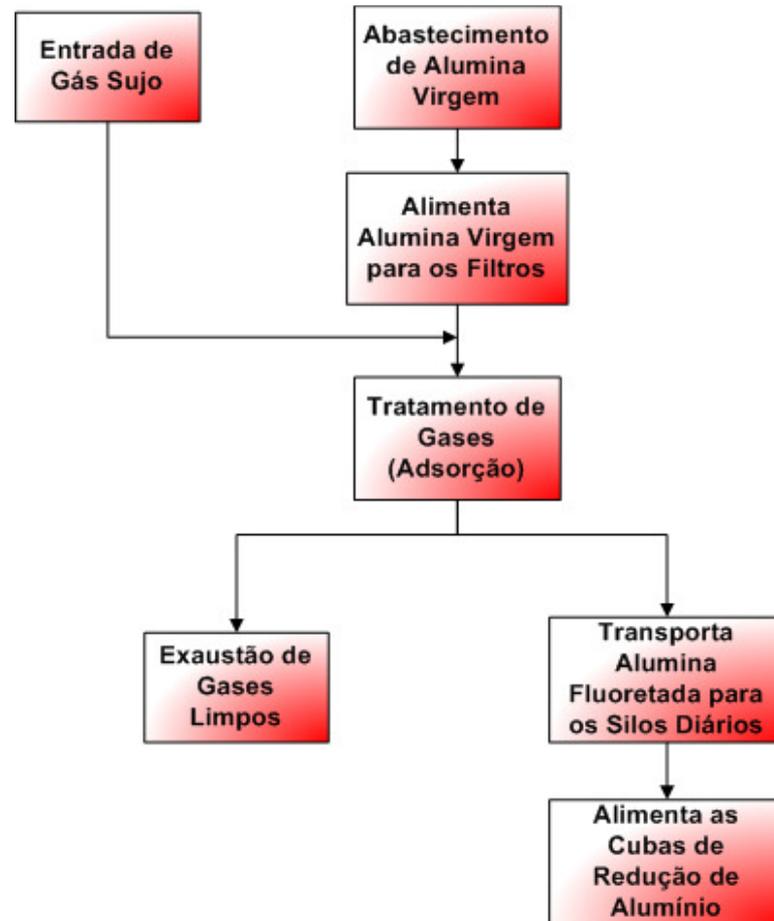


Figura 3.2 – Fluxograma de funcionamento da PTG.

A Tabela 3.1, a seguir, descreve, resumidamente, o funcionamento de cada etapa do processo.

Tabela 3.1 – Descrição das Etapas de Funcionamento da PTG

| Etapa | Descrição |
|---|---|
| Entrada de gás | Consiste no encaminhamento do gás proveniente das cubas de reduções de alumínio até a PTG. |
| Abastecimento de alumina | Consiste no abastecimento dos silos de estocagem da PTG através de caminhões que transportam a alumina virgem fornecida pela Alunorte. |
| Alimentação de alumina para os filtros | Esta etapa refere-se à alumina que é injetada no reator da PTG afim de que esta reaja com os gases sujos. |
| Tratamento dos gases | Referem-se às reações propriamente ditas, ocorridas na planta durante o processo de tratamento dos gases. |
| Transporte de alumina para os silos diários | Refere-se ao transporte da alumina fluoretada obtida após a fase de filtragem dos gases. Deve-se ressaltar que a alumina transportada é retirada das tremonhas (grandes silos), que ficam localizadas abaixo do reator. |
| Alimenta PTMs (cubas) | Refere-se ao sistema de acoplamento e abastecimento das PTMs (<i>Pot Tending Machine</i> – Máquina Operadora de Cuba) através dos silos de estocagem. |

A Figura 3.3 exibe de forma genérica o esquema de funcionamento da planta. Antes da chaminé, encontra-se o exaustor de grande potência que coleta, através de uma depressão forçada (sucção), os gases da cuba (vista na parte esquerda da figura citada). Esses gases são transportados através de grandes tubulações até se misturarem com a alumina virgem (ou primária) antes dos filtros de manga. Nesse momento, ocorre a reação de adsorção, que dura poucos segundos.

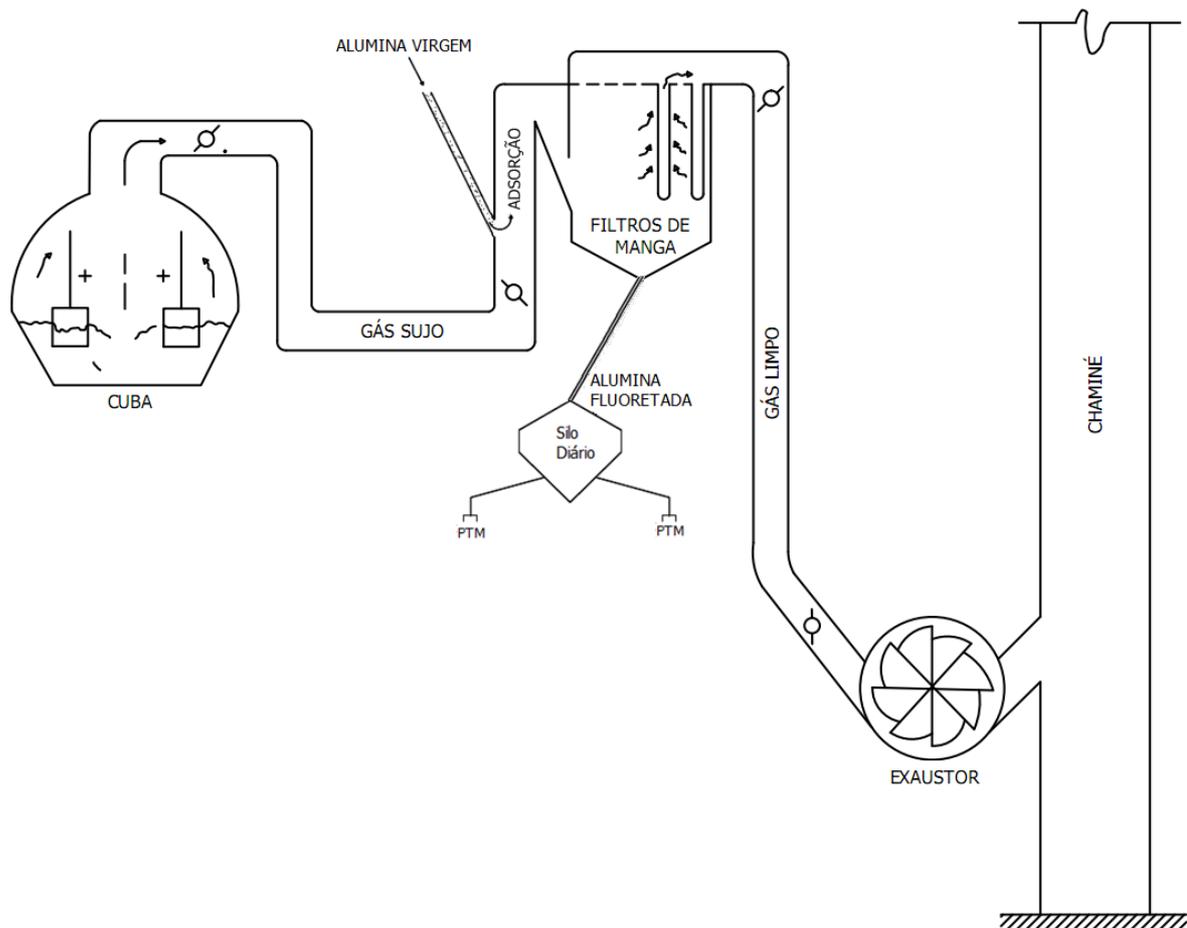


Figura 3.3 – Esquema Genérico da PTG

Após a adsorção, a alumina, agora fluoretada (ou secundária), entra nos filtros de manga que são estruturas de poliéster que impedem que a alumina secundária atravesse para a chaminé, porém, permite que os gases, agora limpos, sejam expelidos. A alumina secundária sai dos filtros de manga em direção aos silos diários, os quais abastecem os fornos de redução através das PTMs.

A seguir será explicado de forma mais detalhada as etapas que compõem o processo.

Antes de 2006, a ALBRAS dispunha de onze PTG's. Após 2006, devido a necessidade de aumento da produtividade e com o objetivo de igualar as taxas de emissão ao padrão

internacional, a fábrica expandiu seu parque de tratamento de gases. Atualmente, existem 19 PTG's, sendo que seis delas trabalham em pares e as outras três operam em conjunto.

Na redução I, que é o foco deste trabalho, existem quatro plantas no total: duas antigas e duas novas (expansão). Na redução II, III e IV há cinco plantas: duas antigas e três novas. Existe esse desbalanceamento de PTG's, pois a redução II, III e IV sofreu aumento de fornos, o que não aconteceu na redução I.

A Figura 3.4 a seguir mostra o layout da redução I. Observando a figura, a PTG 1 é composta por uma planta antiga e sua expansão, o mesmo vale para a PTG 2. Nota-se que cada planta comporta duas seções de 60 fornos, totalizando 120 fornos para cada planta.

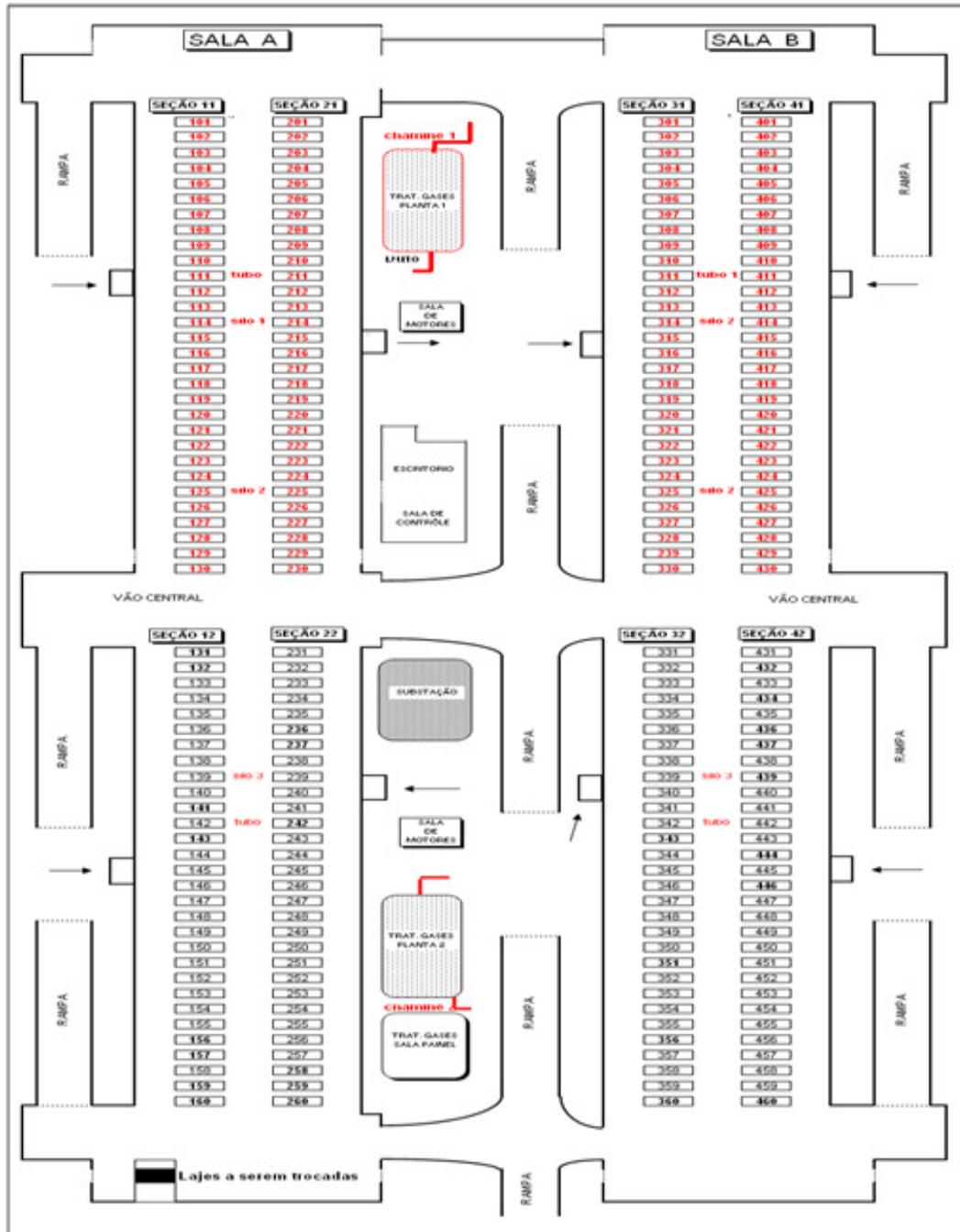


Figura 3.4 – Layout da Área de Redução I

1.6 FUNCIONAMENTO DA PLANTA

O processo de tratamento de gases segue etapas bem definidas, que são:

- Manuseio da Alumina Primária/Virgem;
- Captação de Gases;
- Reação/Filtração/Recirculação/Pulsação;
- Manuseio da Alumina Secundária/Fluoretada.

O objetivo do manuseio da alumina primária é alimentar o reator da planta com alumina virgem estocadas nos silos de maneira equitativa, constante e proporcional às necessidades do projeto. Antes da estocagem nos silos, um caminhão é responsável por transportar e descarregar essa alumina virgem que advém da Alunorte. A Figura 3.5 a seguir ilustra o descarregamento.



Figura 3.5 – Abastecimento de Silo de Alumina Virgem

A alumina virgem estocada nos silos é descarregada em direção ao sistema de dosagem onde o fluxo será regulado na caixa dosadora para atender as necessidades do processo. O controle do fluxo é feito em duas etapas: antes da caixa (regime intermitente) e após à caixa (regime contínuo). Em seguida, com fluxo já regulado, é direcionado para o sistema de medição, onde através de uma placa defletora de fluxo onde é feito o registro de massa que está sendo transportada.

O fluxo de alumina virgem é dosado e monitorado e então enviado para a caixa de alimentação, onde o fluxo total de alumina primária é dividido equitativamente e alimentado a cada um dos reatores em operação, através de dois *air slids* que por sua vez alimentam quatro reatores cada.

O percurso acima descrito percorrido pela alumina fresca é feito através de sistemas de fluidização específicos a cada equipamento ou a um grupo de equipamentos. Compõem-se

esses sistemas de ventiladores e compressores localizados no C.C.M (Central de Controle de Motores). A Figura 3.6 a seguir esquematiza essa etapa.

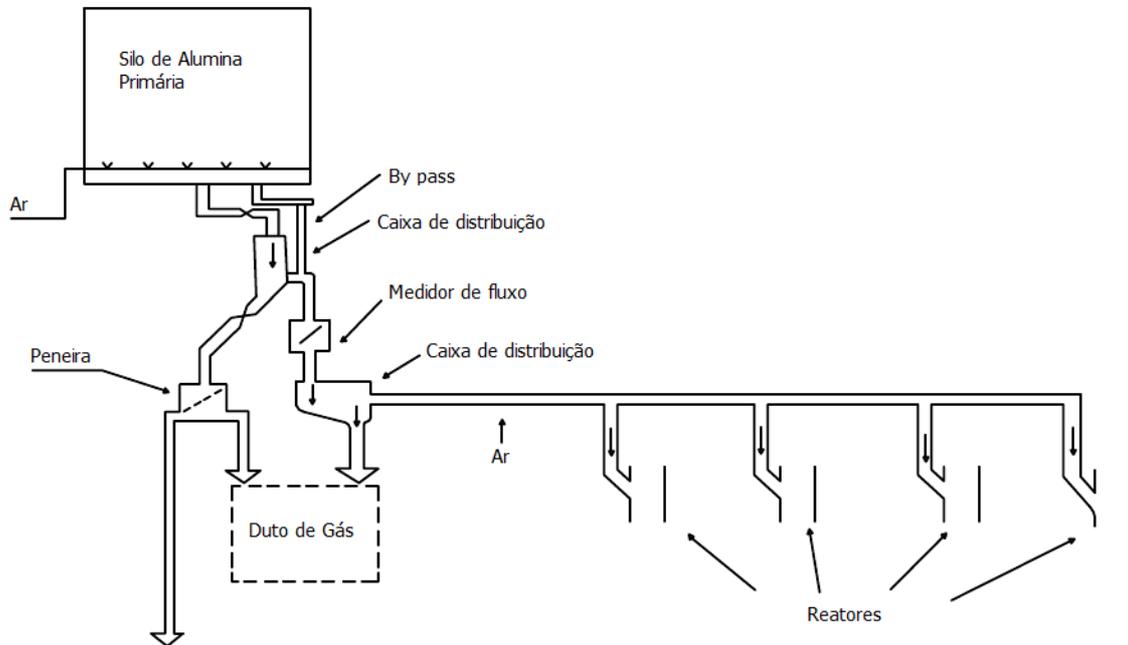


Figura 3.6 – Manuseio de Alumina Primária

O sistema é provido com peneiras instaladas dentro da caixa de alimentação para retirar corpos estranhos e volumosos, evitando assim danos aos equipamentos. A Figura 3.7 a seguir mostra o material peneirado rejeitado. O destino deste rejeito é compor a camada de alumina presente nos anodos.



Figura 3.7 – Rejeitos proveniente da alumina

O objetivo da **captação dos gases** é retirar os gases produzidos na redução do alumínio de maneira que:

- Mantenha o ambiente das salas de redução salubre;
- Mantenha o fluxo através da planta de tratamento de gases dentro do especificado pelo projeto, de modo a garantir a otimização dos acessórios (filtros de manga, tubulações, etc) e a eficiência nos arrastes dos particulados.

Os gases produzidos na redução do alumínio são exauridos das salas de cubas pelo processo de “exaustão forçada” através das tubulações mostradas na Figura 3.8. Para tal são utilizados grandes exaustores que provocam uma depressão entre sua sucção e os pontos de tomada de gás sobre as cubas. Os gases fluem por tubulações, reatores, filtros de mangas e finalmente são lançados ao meio ambiente pelos exaustores através da chaminé.



Figura 3.8 – Tubulações que captam gases poluentes

Durante esse trajeto as variáveis como pressão e temperatura vão sendo monitoradas, através de sensores que tem interface com um aplicativo computacional, para garantir a segurança de processo e dos equipamentos. O fluxo de gás pode ser caracterizado em três fases:

- Fase do gás sujo: compreende a captação das cubas até os reatores;
- Gás em lavagem: ocorre do reator até a passagem pelas mangas;
- Gás limpo ou lavado: começa na saída das mangas e termina no lançamento pela chaminé.

O fluxo de gás varia em quantidade de acordo com a linha de redução, em função do número de cubas em operação, do balanço térmico do forno, que define a quantidade de calor a ser exaurida, e das condições de salubridade definidas para o projeto.

O objetivo da fase de **reação, filtração, recirculação e pulsação** é misturar os gases e a alumina fresca dentro dos reatores em proporções definidas para que, através das propriedades de adsorção da alumina, possa ser retirado o ácido fluorídrico (HF) existente na massa gasosa, como mostrado na Figura 3.9 a seguir.

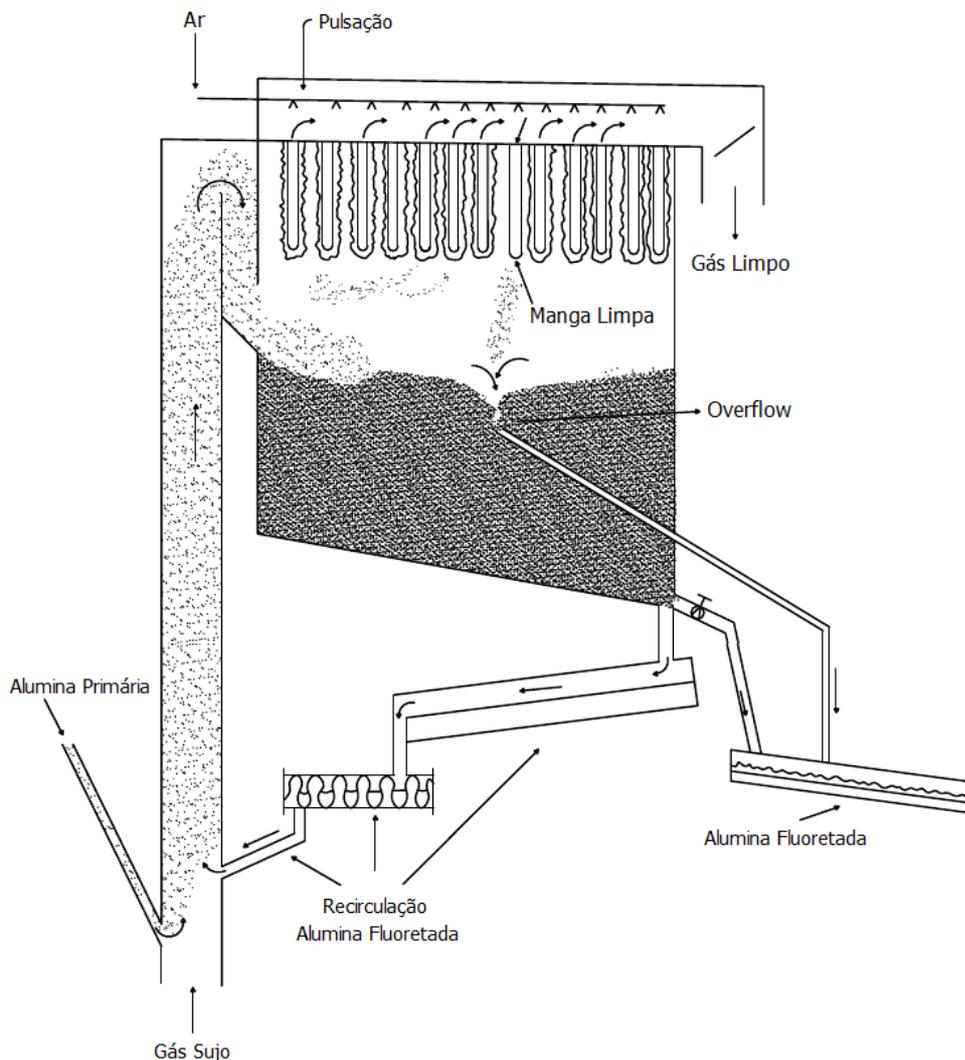


Figura 3.9 - Fase de reação, filtração, recirculação e pulsação.

O HF é adsorvido rapidamente entre o instante que os gases recebem a alumina injetada nos reatores até o momento em que passa através da porta de alumina formada nas mangas. É possível dividir a lavagem dos gases em dois estágios:

- Lavagem propriamente dita, quando ocorre a retirada do HF pela alumina;
- Alumina injetada é retirada da massa gasosa.

Os reatores nada mais são do que dutos, cujas áreas de seção transversal são projetadas para obter uma velocidade tal, que consiga arrastar a alumina injetada nos reatores até as mangas dentro de um determinado tempo de contato.

Os filtros de mangas, vistos na Figura 3.10, como o nome indica, são câmaras divididas em duas seções: gás sujo e gás limpo. O que separa essas duas seções é o lado externo e o interno das mangas: o gás ao passar do lado externo das mangas para o lado interno deixa de ser sujo para ser limpo.



Figura 3.10 – Filtros de manga desgastados

Observa-se que quando os filtros de manga estão desgastados, como exemplificados pela Figura 3.10, e são trocados, os mesmos são despejados e incinerados nos próprios fornos de redução. Com isso, otimiza-se o destino deste rejeito.

Para que sejam eliminados os picos de emissões de HF que possam existir na redução, a lavagem é provida de um sistema de recirculação que funciona continuamente, que também serve como segurança de processo em caso de falha na alimentação de alumina fresca. Esse sistema é composto por uma tremonha, localizada no fundo da câmara de gás sujo, e um transportador helicoidal capaz de recircular a alumina aí existente para uma re-injeção nos reatores.

A fase se completa com o sistema de pulsação das mangas, onde, através de um Controlador Lógico Programável (PLC), o diferencial de pressão nas mangas é mantido constante em um valor predefinido. O operador programa a frequência, a ordem e o tempo da sopragem.

A tremonha recebe toda a alumina que se desprende das mangas assim como a alumina que se separa naturalmente dos gases. A capacidade da tremonha é tal que possibilita os gases serem lavados com eficiência, somente com recirculação durante aproximadamente quatro horas, em caso de anormalidade no sistema de alumina fresca. A capacidade da tremonha é limitada pelo sistema de *overflow* dos filtros. Quando esse *overflow* é atingido, a alumina fluoretada passa para o *air-lift*.

O objetivo da fase de **manusear alumina secundária** é transferir a alumina fluoretada no tratamento de gases para os silos diários da redução de modo a coordenar o balanço de necessidades da redução e do próprio tratamento de gases.

Como já foi mencionado, após a fluoretação da alumina nos reatores, a mesma é recebida na tremonha dos filtros de onde, através do *overflow*, é descarregada para os *air-slid* de alumina fluoretada ou secundária.

Devido a diferença de cota (altura) entre a planta de tratamento de gases e os silos diários, toda essa alumina secundária recolhida é direcionada para um sistema de transporte pneumático conhecido como *air-lift*.

O *air-lift* eleva toda essa alumina fluoretada até aproximadamente 40 metros acima do solo, onde a corrente de ar/alumina fluoretada sofre uma expansão, na câmara de expansão, permitindo desse modo uma separação entre as fases gasosa, o ar e a sólida alumina. A fase sólida é então conduzida através de *air-slids* para os silos diários, onde é estocada. A fase gasosa após passar por ciclones e filtros de despoeiramento é lançada na atmosfera.

A alumina armazenada nos silos fica então disponível para alimentação das PTMs da redução.

A descarga do silo é comandada por um sistema lógico, que é disparado quando a PTM acopla para carregamento. Os silos diários são providos também de um filtro de mangas

para fazer o despoeiramento do ar aliviado dos carregamentos pela linha de emergência. Todo ar de transporte e de fluidização é gerado dentro do próprio tratamento de gases por compressores e sopradores localizados na sala de motores. A Figura 3.11 ilustra essa etapa do processo.

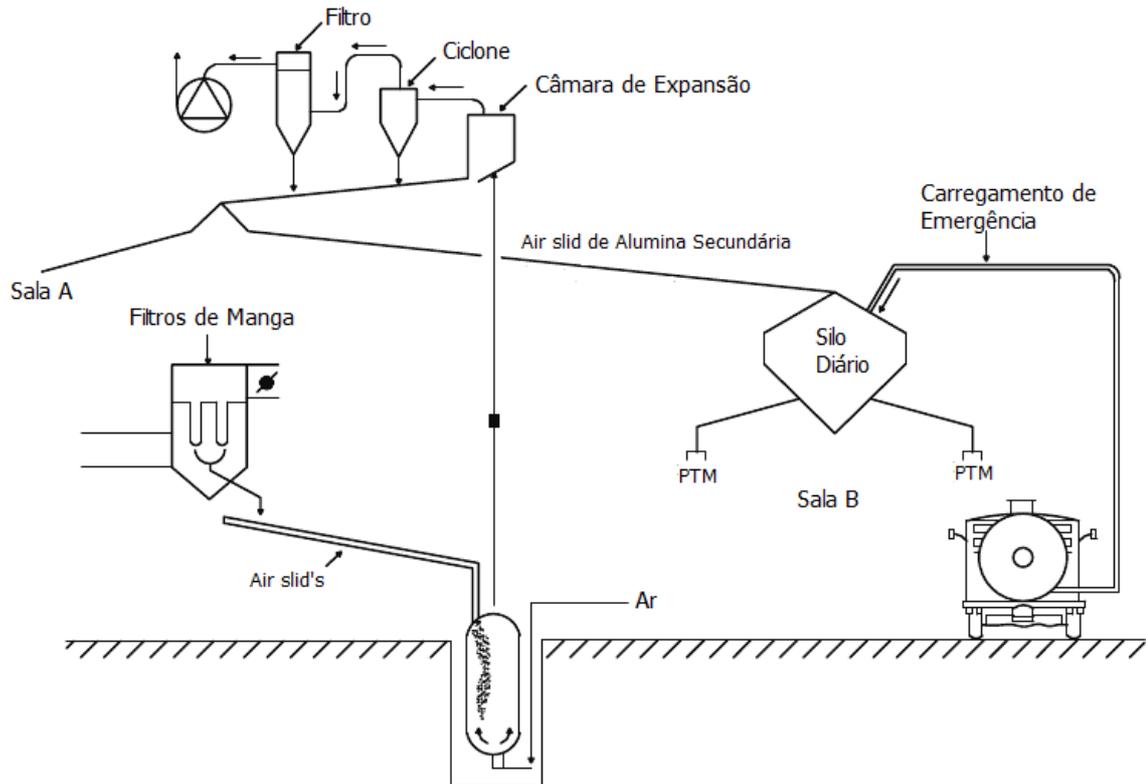


Figura 3.11 – Processo de Manusear Alumina Secundária

4. USO DE SENSORES VIRTUAIS NA INDÚSTRIA

Após verificar nas seções anteriores como é produzido o alumínio nos fornos eletrolíticos e como a PTG funciona, nesta seção é mostrada a definição de sensores virtuais, suas finalidades e como podem ser projetados.

Zanata (2005) define sensores virtuais como sendo aplicativos de computador (*software*) capazes de estimar o valor de uma determinada variável cuja medição é difícil, custosa e/ou requer tempo para ser analisada em laboratório, por exemplo, para ser disponibilizada. Ressalta-se que a estimação da variável de interesse é realizada através de informações que já são conhecidas ou que estão disponibilizadas on-line, ou seja, a partir de variáveis em tempo real, os sensores virtuais são capazes de inferir o valor de uma variável.

Já James *et al.* (2000) afirma que sensores virtuais são algoritmos matemáticos capazes de estimar, em tempo real, variáveis de interesse não medidas a partir de outras variáveis disponíveis e medidas instantaneamente.

Com o aprimoramento das técnicas de controle e inteligência computacional, a modelagem matemática de processos passou a ser utilizada na predição de propriedades a partir de dados de planta (Haykin, 1999). Esses estimadores evoluíram para a categoria de sensor virtual (ou do inglês “*soft sensor*”) cuja origem está relacionada a uma das principais aplicações desta técnica que é o uso de *software*.

Os sensores virtuais apresentam algumas vantagens para modelagem de plantas:

- **Substituição de dispositivos de Hardware caros:** os sensores virtuais são totalmente baseados em software, portanto podem substituir sensores reais e assim reduzir parte do custo operacional;
- **Fácil implementação em qualquer dispositivo:** como são algoritmos matemáticos, podem ser implementados em microcontroladores, microprocessadores, microcomputadores, controladores lógico programáveis com a mínima capacidade de processamento necessária dependendo da aplicação;
- **Estimação de dados em tempo real:** dadas as capacidades da planta, o sensor virtual pode fornecer dados do processo sem os ruídos que aconteceriam por sensores baseados em *hardware* analógicos ou análises demoradas do sinal;
- **Funcionam como sensores reais para o processo:** o sensor, depois de implantado, é visto como mais um elemento na planta de automação, fornecendo dados importantes

para o sistema de controle, porém sem a necessidade de um plano de manutenção e troca, como acontecem com os sensores reais.

4.1 APLICAÇÕES

Tais tipos de sensores possuem um grande escopo de aplicação, pois podem ser projetados para estimar qualquer variável, auxiliando na sua monitoração, controle, contribuindo para a otimização de processos (Fortuna *et al.*, 2007). Ao longo da história, os sensores virtuais têm sido utilizados com sucesso na substituição de sensores físicos ou no trabalho em conjunto com eles, ajudando no controle do processo. Além disso, o que facilita a modelagem do processo a partir do uso de sensores virtuais é o fato de muitas indústrias já possuírem uma ampla base de dados histórica de seus processos, (Zanata, 2005; Fortuna *et al.*, 2007).

4.1.1 Indústria Química

Os melhores exemplos de utilização de sensores virtuais se encontram no ramo da química, visto que muito dos seus processos são complexos e não-lineares.

Zynger *et al.* (2000) projetou um sensor virtual, através de duas abordagens – caixa-branca e caixa-preta – para estimar o desperdício de água no processo de tratamento da mesma. O sensor virtual projetado em caixa-branca apresentou bons resultados, como visto na Figura 4.1 (a), já que foi baseado em um modelo do processo simplificado, este sensor virtual não requer ajuste de parâmetros no decorrer do tempo. Por outro lado, o sensor virtual baseado em caixa-preta, também alcançou resultados satisfatórios (Figura 4.1 (b)), entretanto, caso a faixa de operação das variáveis de entrada se modifique, faz-se necessário a atualização do modelo.

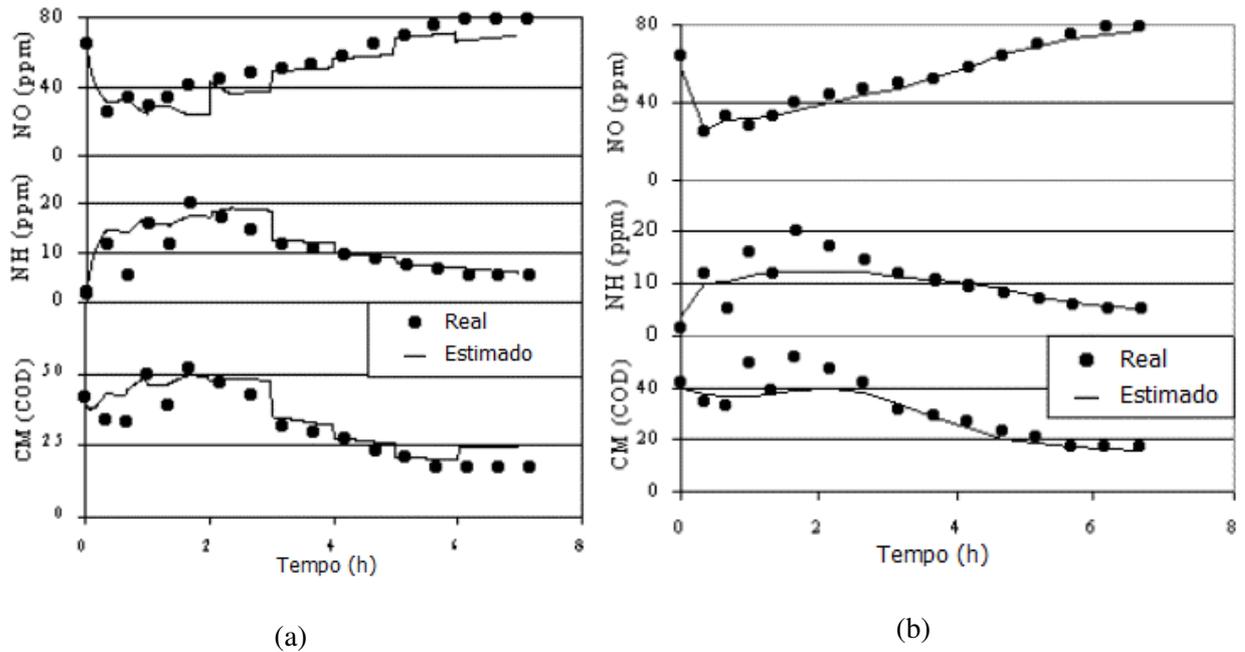


Figura 4.1 – Comparação entre os valores estimados pelo modelo e os valores reais (a) Caixa-branca (b) Caixa-preta
Fonte: Zynger *et al.* (2000)

Outro exemplo de sensor virtual na indústria química é mostrado em Rashid *et al.* (2010), onde se especifica um sensor virtual para medir a concentração de ácido láctico. Uma rede neural artificial foi projetada para essa finalidade, a partir da utilização de dados coletados de forma *offline*. Rashid *et al.* (2010) mostra, através do gráfico de regressão do conjunto de treinamento (Figura 4.2(a)) e do conjunto de teste (Figura 4.2(b)), que o seu sensor virtual é capaz de realizar medidas precisas e coerentes com o processo.

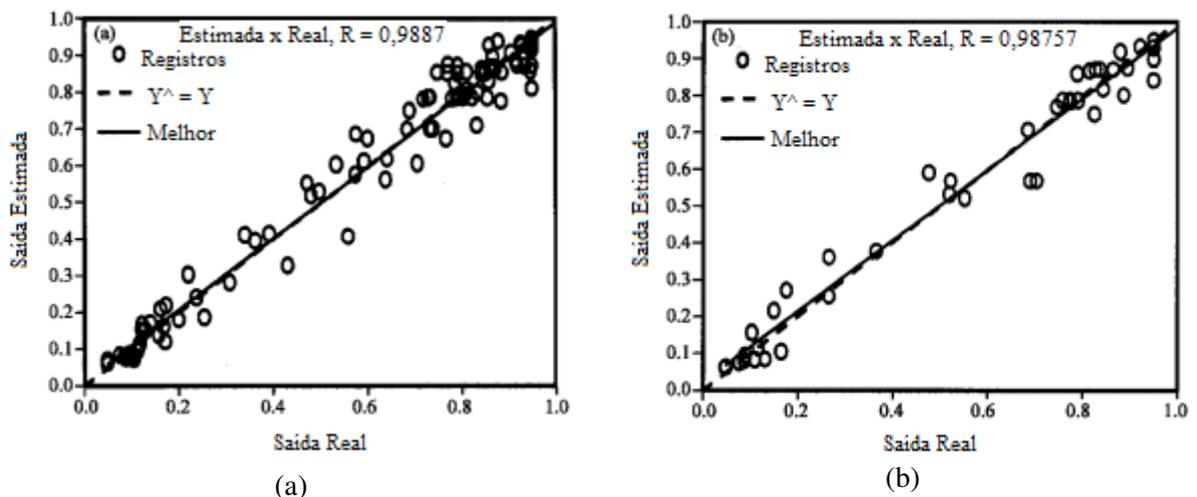


Figura 4.2 – Análise de Regressão (a) Conjunto de Treino (b) Conjunto de Teste
Fonte: Rashid *et al.* (2010)

Soares (2009) descreve, em sua dissertação de mestrado, o projeto de um sensor virtual capaz de inferir a temperatura dos fornos de redução de alumínio. Seus resultados foram validados pela equipe de processos da indústria de alumínio. Com a utilização deste sensor proposto por Soares (2009), a fábrica reduzirá os gastos com termopares – sensor real utilizado para a medição de temperatura direta nos fornos – além de preservar recursos humanos que enfrentavam condições inóspitas para realizar a medida, além do tempo economizado para tal tarefa. Por intermédio da Figura 4.3, percebe-se, pela comparação dos dados reais e dados simulados, que o sensor virtual opera de maneira equivalente ao sensor real.



Figura 4.3 – Simulador Térmico do Forno 441 (Redução II)

Fonte: Soares (2009)

4.2 PROJETO DE SENSOR VIRTUAL

A identificação de sensores virtuais segue os mesmos princípios da modelagem matemática descrita por Aguirre (2007):

4.2.1 Modelagem Física (Caixa Branca)

Neste tipo de modelagem, faz-se imprescindível estar bem familiarizado com o sistema a ser modelado. Além disso, é necessário saber as relações matemáticas que regem os fenômenos envolvidos, pois serão a partir delas que irá se derivar o modelo do sistema (Aguirre, 2007). Infelizmente, devido ao conhecimento e ao tempo demandado para equacionar os fenômenos envolvidos, nem sempre é viável seguir esse procedimento de modelagem.

4.2.2 Modelagem baseada em Inteligência Computacional (Caixa Preta)

Uma das características dessa técnica é que pouco ou nenhum conhecimento prévio do sistema é necessário (Aguirre, 2007). Dessa forma, os modelos construídos através desta abordagem são determinados apenas pelo comportamento dos dados de entrada e dos dados de saída do processo. Ressalta-se que a escolha da técnica de Inteligência Computacional mais adequada para emular o sistema é fundamental neste caso, porque cada técnica é mais adequada para certo tipo de problema. Como exemplos de técnicas, têm-se: Redes Neurais Artificiais, Lógica *Fuzzy*, Algoritmos Genéticos, etc.

4.2.3 Modelagem Híbrida (Caixa Cinza)

A modelagem caixa cinza baseia-se nos dois tipos citados anteriormente. Frequentemente, o conhecimento do processo também é importante para realizar a modelagem baseada em Inteligência Computacional, o que pode poupar tempo, pois a escolha de variáveis de entrada, de variáveis de saída ou de parâmetros do sistema pode ser feita por um engenheiro de processo. Este lida diariamente com o processo e o conhece a fundo o funcionamento da planta. Dessa forma, gera-se o modelo de acordo com o conhecimento do especialista e os dados de entrada e de saída coletados.

4.2.4 Coleta de Dados

Em geral, nas grandes fábricas, os dados referentes ao processo são coletados por sensores reais e armazenados em um banco de dados. Além disso, costuma-se também manter no banco de dados as análises feitas em laboratório. Essa aquisição de dados normalmente é feita para que a equipe de processos possa analisar as tendências, com o passar do tempo, das variáveis de interesse que compõem o negócio da empresa.

Valendo-se desse enorme conjunto de dados, o projetista de um sensor virtual é capaz de extrair conhecimento que muitas vezes os engenheiros de processo desconhecem (Pereira, 2005; Fortuna *et al.*, 2007). O primeiro passo a ser feito a fim de construir o modelo é a seleção das variáveis que mais interferem na saída alvo do estudo. Dessa forma, é essencial escolher dados que representem de forma coerente a dinâmica do sistema.

Para essa escolha, uma cooperação entre o projetista do sensor e a equipe de processo é fundamental, porque a experiência da equipe é um importante fator a ser agregado no projeto do sensor. Ainda com o intuito de realizar a escolha das variáveis significantes, técnicas como correlação linear, correlação logarítmica e análise de componentes principais

podem auxiliar nessa determinação (Fortuna *et al.*, 2007). A seleção de dados passados, com atrasos regulares, também pode ser considerada (Fortuna *et al.*, 2007).

O próximo passo é realizar de fato a coleta de dados, o que requer cuidado, pois, de acordo com Fortuna *et al.* (2007), dados com ruídos, incorretos ou não disponíveis podem propagar falhas durante o processo de derivação do modelo do sensor, afetando sua qualidade.

Além disso, os dados disponíveis geralmente são amostras de sinais analógicos, nos quais os especialistas utilizam certos critérios conservativos para corrigir eventuais erros no processo de amostragem (Ogata, 2007; Aguirre, 2007). As figuras 4.4(a) e 4.4(b) mostram, respectivamente, um gráfico contendo registros discrepantes e um gráfico mostrando a distribuição normal dos dados de uma variável.

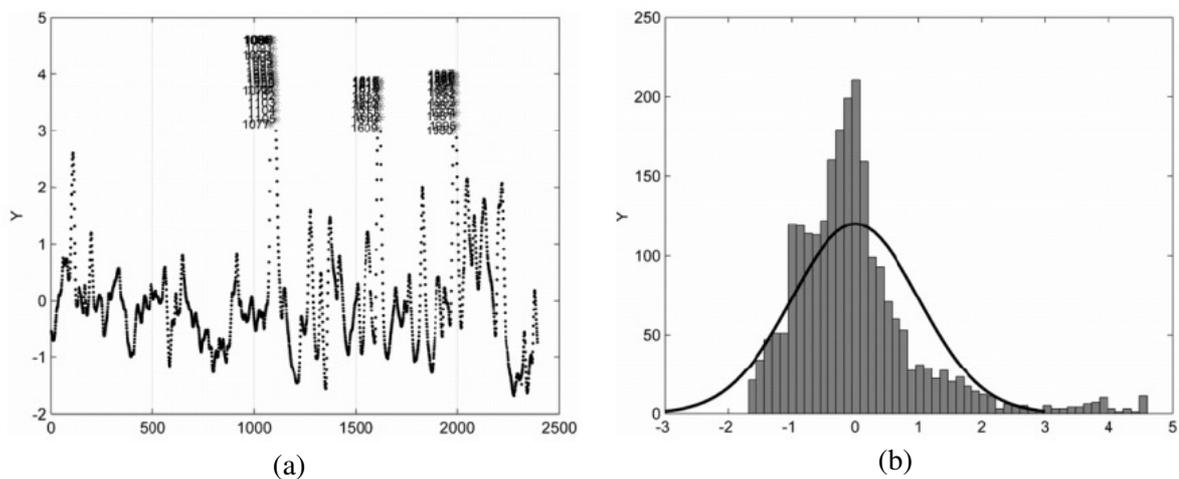


Figura 4.4 – (a) Dados discrepantes. (b) Distribuição Normal dos Dados.

Sendo assim, uma filtragem dos dados é necessária para deixar apenas os dados que representam coerentemente a dinâmica da planta. Fortuna *et al.* (2007) adverte que dados que fogem de uma faixa regular de operação (*outlier*), dados incompletos ou ausentes (NaN, NULL, etc.) necessitam ser eliminados. Algumas regras, dependendo do processo, devem ser definidas na filtragem destes dados.

4.2.4.1 Regra 3Sigma

Trata-se de uma boa técnica para eliminar dados espúrios (*outliers*), porque os registros que fogem a uma janela de até três vezes o desvio padrão da média da variável são desconsiderados. A Equação 4.1 a seguir traduz matematicamente esta regra.

$$d_i = \frac{x_i - \bar{x}}{\sigma_i} \quad (4.1)$$

onde x_i é o valor da variável x no instante i ; \bar{x} é a média da variável; σ_i é o desvio padrão da variável e d_i é a distância ponderada do ponto x_i à média da variável de acordo com o desvio padrão.

Segundo Fotuna *et al.* (2007), pontos com uma distância ponderada maior que três são registros fora da faixa de operação e são considerados dados inadequados para a construção do modelo.

4.2.5 Normalização dos Dados

Outro detalhe importante no projeto de sensor virtual é a normalização dos dados para diminuir as magnitudes de algumas variáveis. Ela pode ser realizada de duas maneiras (Fortuna *et al.*, 2007):

4.2.5.1 Normalização MIN-MAX

Este tipo de normalização considera uma faixa regular de operação, onde os dados são convertidos em valores geralmente compreendidos entre -1 e 1 (Fortuna *et al.*, 2007). O cálculo dessa conversão é feita através da Equação 4.2.

$$y = \frac{(y_{\max} - y_{\min})(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min}) + y_{\min}} \quad (4.2)$$

onde: y_{\max} : 1; y_{\min} : -1; x : valor real da variável a ser normalizada; x_{\min} : valor mínimo da variável a ser normalizada; x_{\max} : valor máximo da variável a ser normalizada; y : valor normalizado.

Substituindo os valores na Equação 4.2, tem-se:

$$y = \frac{(1 + 1)(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min}) - 1} \therefore y = \frac{2(x - x_{\min})}{(x_{\max} - x_{\min}) - 1} \quad (4.3)$$

4.2.5.2 Normalização z-score

Esta normalização acontece quando uma quantidade muito grande de pontos fora da faixa normal é suspeitada, pois ela é baseada na média e no desvio padrão da variável. O cálculo é efetuado pela Equação 4.4.

$$y = \frac{x - \bar{x}}{\sigma_x} \quad (4.4)$$

onde: x: valor da variável a ser normalizada; \bar{x} : média da variável; σ_x : desvio padrão da variável; y: valor normalizado.

4.2.6 Validação do Sensor Virtual

Em alguns casos, o modelo utilizado pelo sensor virtual pode funcionar adequadamente para algumas situações, mas em outros casos, ele pode se comportar de maneira anômala (com erro alto). Segundo Zanata (2005), uma estratégia para minimizar o erro é a adição de redundâncias. Nesse contexto, como a validação do sensor virtual envolve a utilização de medidas que não foram usadas para a construção do modelo, é possível fazer uma “avaliação” da inferência do sensor virtual e, se preciso, fazer ajustes.

4.2.7 Ajustes e Melhoramentos

Se os resultados calculados pelo sensor virtual não retratarem de forma fidedigna a saída do sistema, dado os valores das variáveis de entrada, faz-se necessário voltar ao projeto do modelo do sensor virtual e modificar certos parâmetros, como por exemplo: escolher outras variáveis de entrada; modificar o conjunto de dados de treinamento e, conseqüentemente, mudar o conjunto de dados de teste e de validação. Ressaltam-se como erros mais comuns:

4.2.8.1 Não Generalização

Quando se espera um erro mínimo aceitável demasiadamente pequeno, a previsão do sensor seguirá o comportamento do conjunto de treinamento (Figura 4.5). Nesses casos, recomenda-se manter esse erro não muito baixo, para que o sensor possa ser generalizado.

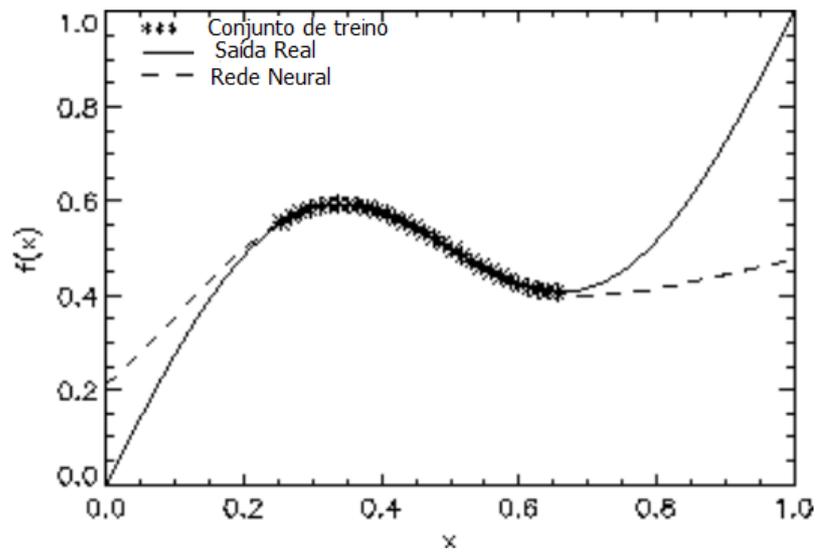


Figura 4.5 – Exemplo gráfico de não generalização

Além disso, Silva *et al.* (2010), no que diz respeito a generalização das Redes Neurais, afirma que quanto menos neurônios na camada escondida, mais generalizada é o modelo neural, cabendo ao projetista a busca pelo equilíbrio entre o menor número de neurônios possíveis na camada escondida e o menor erro aceitável possível após o treinamento e teste da rede.

4.2.8.2 Erro alto

Uma vez construído, o sensor virtual está preparado para responder aos dados de treinamento, mas na validação os erros são muito altos, como denota a Figura 4.6, além da faixa operação aceitável pela equipe de processo. Mudanças na sua estruturação do modelo devem ser consideradas, incluindo a quantidade de regressores e até o tipo de técnica a ser utilizado (Fortuna *et al.*, 2007; Zanata, 2005).

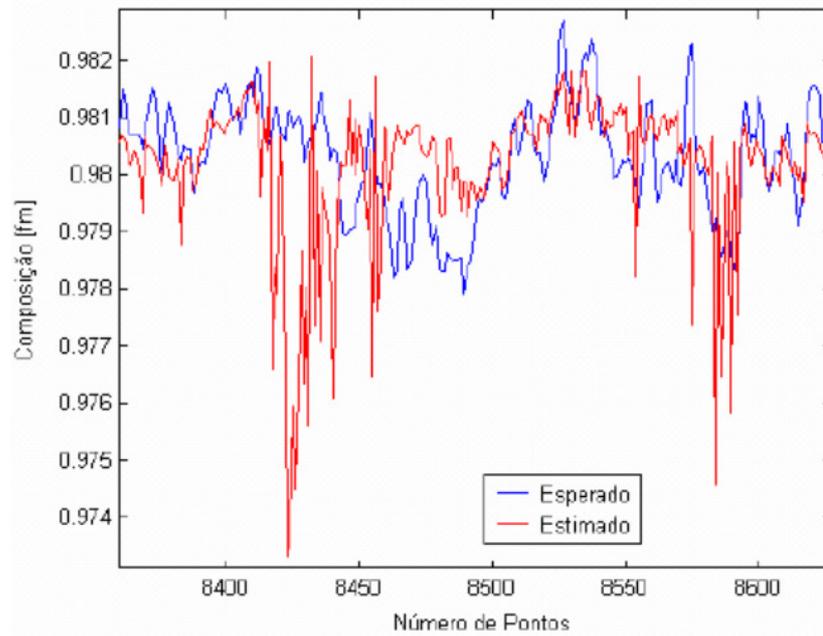


Figura 4.6 – Comportamento da Rede Neural com Erro Alto

Além disso, Silva *et al.* (2010), indica que os valores mínimos e máximos do conjunto de validação devem estar dentro dos valores mínimos e máximos do conjunto de treinamento, caso contrário, a rede neural não tem como operar valores que fogem da janela de treinamento.

4.3 IMPLEMENTAÇÃO E INTEGRAÇÃO DE SENSORES VIRTUAIS COM APLICAÇÕES

Uma vez projetado um sensor virtual ideal para realizar medições de forma precisa e coerente com a dinâmica do processo, faz-se necessário a sua implementação, a qual requer algumas exigências:

4.3.1 Memória

O *hardware* deve possuir o mínimo de memória necessário para armazenar os parâmetros do sensor. Tais parâmetros são os fatores determinantes da exatidão das medições do sensor virtual. Qualquer alteração ou mudança não desejável neles comprometerá o desempenho do sensor virtual.

4.3.2 Linguagem de Programação

Dependendo do tipo de abordagem utilizada na construção do sensor virtual, o mesmo só poderá ser implementado em determinados tipos de linguagem de programação. Por

exemplo, uma rede neural só pode ser programada em uma linguagem imperativa como C++, C# e Java.

4.3.3 Padronizações

Com o surgimento de padrões e protocolos de controle industrial, o sensor virtual deve estar preparado para se comunicar sob este padrão. Um padrão conhecido de comunicação é o OPC (*Ole for Process Control*).

4.3.4 Contexto da Aplicação

Há casos em que o sensor virtual é construído para funcionar como um dispositivo de *backup* ou de substituição eventual de algum sensor físico. O programa no qual ele é implementado deve estar preparado para se comunicar com os demais dispositivos e elementos do processo.

4.3.5 Tolerância a falhas

O sensor deve estar preparado para responder satisfatoriamente contra falhas no *hardware* ou no *software* em nível de sistema operacional.

5. REDES NEURAIS ARTIFICIAIS

Redes neurais artificiais (RNA) são modelos computacionais baseados no sistema nervoso dos seres vivos. Possuem a capacidade de aquisição e manutenção do conhecimento (baseado em informações de um histórico) e podem ser definidas como um conjunto de unidades de processamento, conhecidas como neurônios artificiais, que são interligados por várias conexões (sinapses artificiais), as quais são representadas por meio de vetores/matrizes de pesos sinápticos (Silva *et al.*, 2010).

Os pesos sinápticos são os parâmetros que traduzem o comportamento do processo modelado. Esses pesos são calculados através dos sucessivos treinamentos realizados. Fazendo uma comparação com um modelo matemático clássico (polinômio de grau n), pode-se considerar que os n coeficientes desse polinômio são equivalentes aos pesos que formam uma RNA. A Figura 5.1 a seguir mostra o mecanismo de ajuste desses pesos.

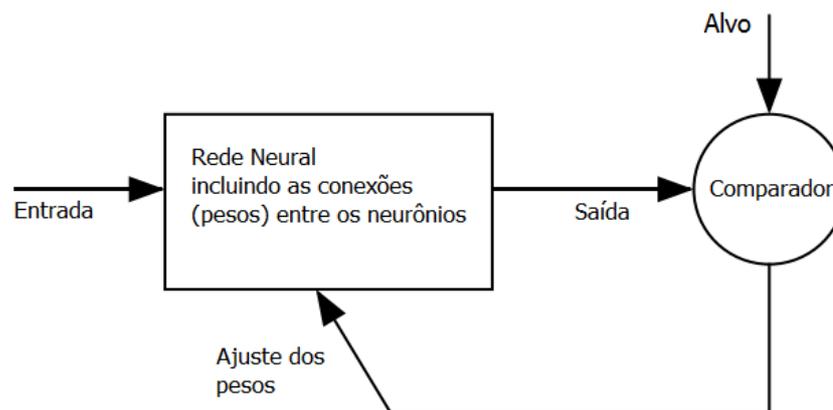


Figura 5.1 – Mecanismo de ajuste de pesos de uma RNA.

As RNA's estão inseridas dentro da área de Sistemas Inteligentes (conexionistas) ou Inteligência Computacional (Jang *et al.*, 1997; Zadeh, 1992). No ramo de fabricação de alumínio, Soares (2009) projetou e utilizou uma RNA para previsão da temperatura dos fornos de redução de alumínio, obtendo resultados coerentes.

5.1 CARACTERÍSTICAS

Destacam-se como principais características das RNAs (Silva *et al.*, 2010):

- a) **Adaptação por experiência:** as adaptações dos parâmetros internos da rede, tipicamente seus pesos sinápticos, são ajustados a partir da leitura sucessiva de exemplos (amostras) que traduzem o comportamento do processo, o que possibilita a aquisição do conhecimento por experimentação;
- b) **Capacidade de aprendizado:** através do método de treinamento, a rede se torna capaz de extrair o relacionamento existente entre as variáveis que compõem a aplicação;
- c) **Habilidade de generalização:** depois do processo de treinamento, a rede consegue generalizar o conhecimento adquirido, possibilitando estimar soluções que eram até então desconhecidas e que não foram utilizadas em nenhum momento na criação da rede;
- d) **Organização de dados:** baseada em características inerentes ao processo que envolve determinado conjunto de informações, é possível que a rede realize a sua organização interna, visando o agrupamento de padrões que apresentam particularidades em comum;
- e) **Tolerância a falhas:** devido ao elevado nível de conexões entre os neurônios artificiais, a rede neural se constitui em um sistema robusto, pois se parte de sua estrutura interna for sensivelmente corrompida, mesmo assim ela irá tolerar essas falhas;
- f) **Armazenamento distribuído:** o conhecimento a respeito do comportamento do processo é realizado de forma distribuída entre as diversas sinapses de neurônios artificiais, permitindo um incremento da robustez da arquitetura frente a eventuais neurônios que se tornaram inoperantes;
- g) **Facilidade de prototipagem:** a implementação da maioria das arquiteturas neurais pode ser prototipada de maneira simples em *hardware* e *software*, pois após o processo de treinamento, os seus resultados são normalmente obtidos por algumas operações matemáticas elementares (soma, multiplicação, divisão, subtração).

Em relação aos principais ramos de aplicação das RNAs na indústria, ressaltam-se os segmentos apresentados na Tabela 5.1 a seguir (Hagan *et al.*, 2010).

Tabela 5.1 – Aplicações que utilizam RNA na indústria.

| Indústria | Área de atuação |
|------------------|---|
| Automotiva | Sistema de direção automática. |
| Financeira | Avaliação imobiliária, avaliação para concessão de empréstimo, triagem de hipotecas, avaliação de títulos corporativos, análise de crédito, rastreamento de atividade de cartão de crédito, previsão de preço da moeda. |
| Eletrônica | Escolha do layout de circuitos integrados, análise de falha de chip, visão artificial, síntese de voz, modelagem não linear. |
| Entretenimento | Animações, efeitos especiais, previsão de mercado. |
| Fábricas | Previsão de processos industriais, tal como a saída de gases de fornos, substituindo a complexidade e o custo do uso de equipamentos para esse propósito no passado. |
| Médica | Análise celular de câncer de mama, análise de encefalograma e de eletrocardiograma, projeto de próteses, otimização do tempo de espera por transplante, redução de gasto hospitalar. |
| Robótica | Controle de trajetória, robô de empilhadeira, controladores de manipulação, sistemas de visão artificial. |
| Telecomunicações | Compressão de imagem e dados, serviços de informações automatizados, tradução em tempo real de linguagem falada, sistemas de processamento de pagamento do consumidor. |
| Transporte | Sistemas de diagnóstico de freio de caminhão, previsão de chegada e partida de conduções, sistemas de rota de veículos. |

5.2 ARQUITETURAS

5.2.1 Redes *Feedforward* Monocamada

Trata-se de uma rede simples, porque é constituída de n sinais de entrada, apenas por uma camada neural e por um neurônio artificial nesta única camada. A Figura 5.2 a seguir ilustra uma rede *Feedforward* monocamada (Silva *et al.*, 2010).

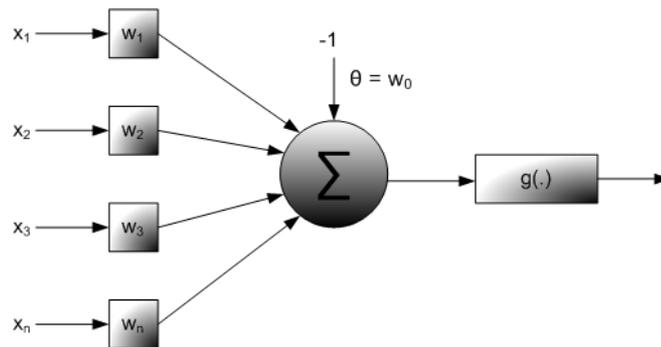


Figura 5.2 – Exemplo de Rede *Feedforward* Monocamada

Sinais são enviados para os nós de entrada (x_1, x_2, x_n), os quais reenviam este estímulo, agora processados pelos pesos, para a camada de saída.

Como Arquiteturas que fazem parte desta categoria tem-se as Redes *Perceptrons*, Adaline e os mapas auto-organizáveis de Kohonen (Haykin, 1999; Soares, 2006).

5.2.2 Redes *Feedforward* Multicamadas

Neste tipo de rede, há pelo menos uma camada intermediária (escondida) de neurônios, localizada entre a camada de entrada e a respectiva camada neural de saída. Dessa forma, essas redes possuem no mínimo duas camadas de neurônios, os quais estarão distribuídos entre camadas intermediárias e camada de saída. A Figura 5.3 a seguir mostra a composição da rede *Feedforward* Multicamadas.

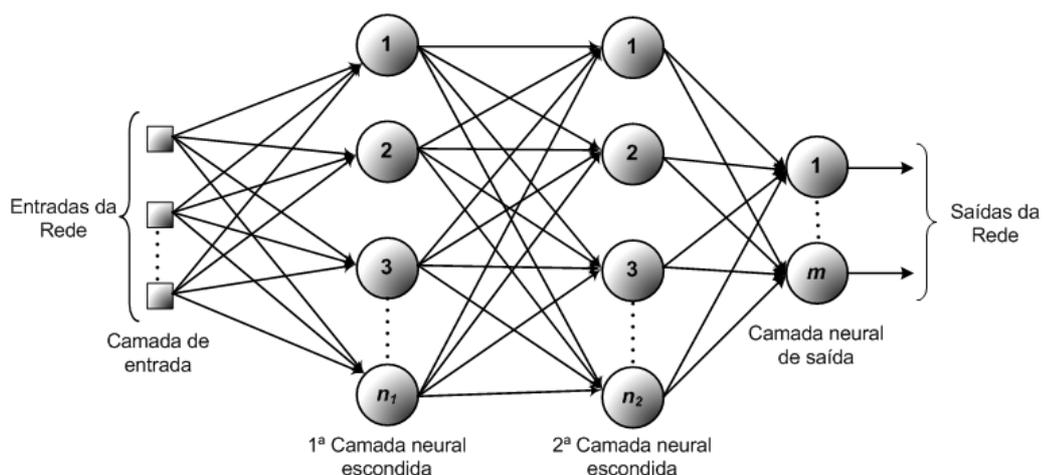


Figura 5.3 – Exemplo de Rede *Feedforward* Multicamada

Essa arquitetura de rede é caracterizada pelas elevadas possibilidades de aplicações em diversos tipos de problemas de diferentes áreas de conhecimento, sendo também considerada como uma das arquiteturas mais versáteis quanto à sua aplicabilidade (Silva *et al.*, 2010). Entre as potenciais áreas, destacam-se:

- Aproximação universal de funções;
- Reconhecimento de padrões;
- Identificação e controle de processos;
- Previsão de séries temporais;
- Otimização de sistemas.

Por intermédio da Figura 5.3, observa-se que cada uma das entradas da rede, representando os sinais advindos de determinada aplicação, será propagada individualmente em direção à camada neural de saída. Neste caso, as saídas dos neurônios da primeira camada escondida serão as próprias entradas daqueles neurônios pertencentes à segunda camada neural escondida. Já as saídas dos neurônios da segunda camada escondida serão respectivas entradas dos neurônios que pertencem à sua camada neural de saída.

Assim, a propagação dos sinais de entradas da rede, independente da quantidade de camadas intermediárias, é sempre realizada em um único sentido, isto é, da camada de entrada em direção à camada de saída. Daí a denominação *feedforward*.

5.2.3 Redes *Feedforward* de Saídas Recorrentes às Entradas

A arquitetura com saídas recorrentes às entradas possibilita a recuperação de respostas passadas a partir da realimentação de sinais produzidos em instantes anteriores. Sendo assim, assume-se que tais topologias possuem memória, sendo capazes de “relembrar” saídas passadas a fim de produzir resposta atual ou futura (Silva *et al.*, 2010).

A predição de valores futuros associados ao comportamento do processo, a partir do instante t , será também baseada em função dos valores anteriores que foram produzidos por suas saídas, ou seja:

$$y(t) = f(x(t-1), x(t-2), \dots, x(t-n_p), y(t-1), y(t-2), \dots, y(t-n_q)) \quad (5.1)$$

onde: n_p é a ordem do preditor e indica o número de medidas (amostras) anteriores que serão necessárias para estimação $x(t)$. O valor n_q expressa a quantidade de saídas passadas que serão também utilizadas na estimação de $y(t)$.

Nesta condição, o papel desempenhado pela rede, após o treinamento da mesma, seria representar de forma indireta a função $f(\cdot)$, a qual estará responsável de identificar o relacionamento entre as entradas e saídas do sistema. A Figura 5.4 ilustra uma representação de rede recorrente que implementa o processo dinâmico explicitado na equação 5.1.

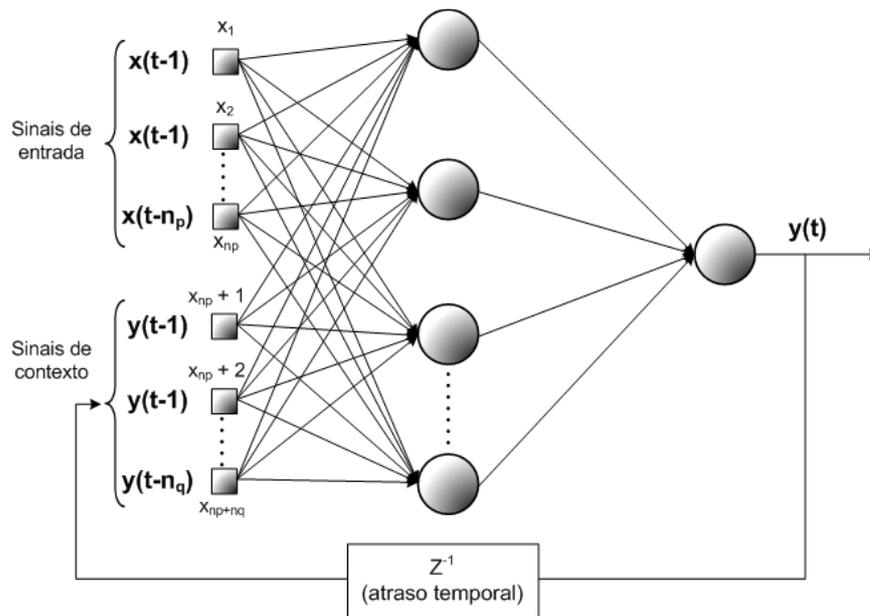


Figura 5.4 – Exemplo de Rede *Feedforward* de Saídas Recorrentes às Entradas.

Em terminologia da área de identificação de sistemas, a rede recorrente que estará desempenhando o relacionamento visto na Equação 5.1 funciona como um modelo Auto-Regressivo Não-Linear com Entradas Exógenas (*Nonlinear Auto-Regressive with eXogenous Inputs* – NARX), sua aplicabilidade direciona-se ao mapeamento de sistemas com dinâmicas tipicamente não-lineares (Nelles, 2005).

Os modelos NARX podem ser representados em paralelo ou em série. No paralelo, utiliza-se, como entrada da rede, as entradas do sistema $x(t)$ e a própria saída estimada $\hat{y}(t)$ para processar a saída estimada pelo modelo. Por outro lado, no tipo serial, utilizam-se, como entradas da rede, também as entradas do sistema $x(t)$ e, diferentemente do paralelo, as saídas reais $y(t)$ para calcular a saída estimada $\hat{y}(t)$. A Figura 5.5 a seguir ilustra a diferença entre o tipo paralelo e o tipo série.

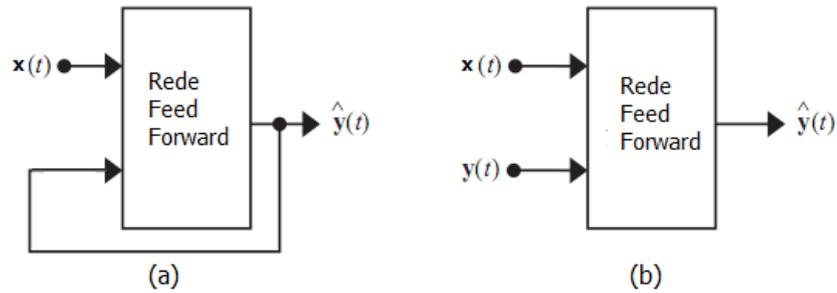


Figura 5.5 – (a) NARX Tipo Paralelo. (b) NARX Tipo Série.

Segundo Hagan *et al.* (2010), há duas vantagens em se utilizar o tipo em série. A primeira é que a entrada (saída real do sistema) da rede é mais precisa. A segunda é que a rede resultante possui uma arquitetura puramente *feedforward*, sendo possível treiná-la utilizando algoritmos tradicionais.

5.3 APRENDIZADO

A fase de aprendizado constitui uma das etapas mais importantes na criação de um modelo neural, pois a qualidade do modelo está diretamente ligada com um treinamento eficiente capaz de fazer com que a rede extraia o conhecimento contido no conjunto de dados (amostras) e o reproduza de forma mais fidedigna possível.

É através da apresentação de amostras (padrões) de entradas e saídas que a rede aprende. Na prática, esse aprendizado se dá através dos ajustes dos pesos sinápticos que compõem a RNA, conforme ilustra a Figura 5.6. Computacionalmente, o aprendizado é implementado na forma de algoritmos de treinamento (Hagan *et al.*, 2010), que são baseadas em técnicas de otimização. Após a rede ter aprendido o relacionamento entre as entradas e saídas, esta deve ser capaz de generalizar soluções, ou seja, reproduzir uma saída próxima daquela esperada (desejada) a partir de quaisquer sinais inseridos em suas entradas (Silva *et al.*, 2010), desde que os valores desses sinais estejam compreendidos na faixa de operação do modelo.

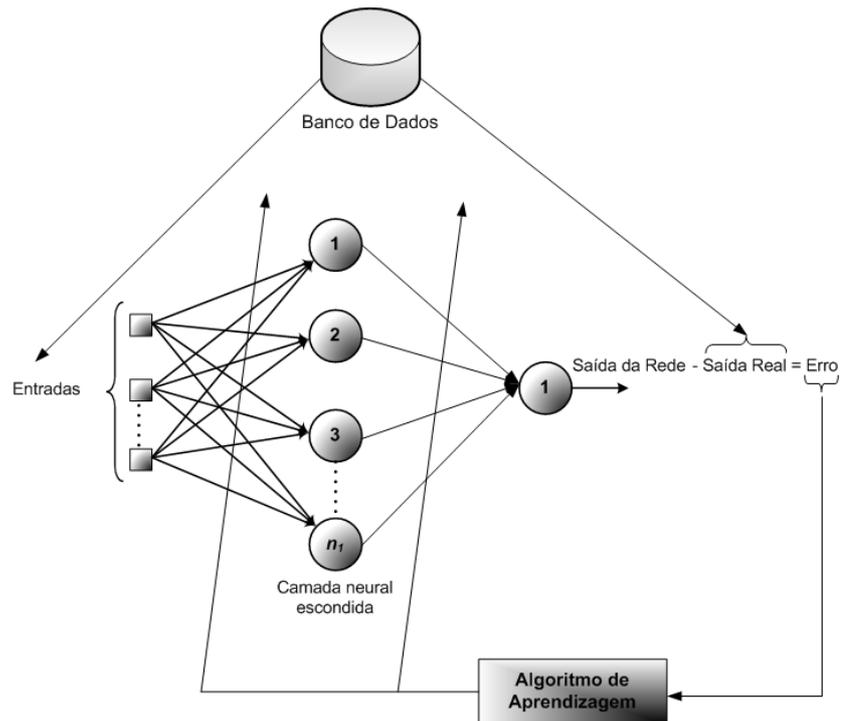


Figura 5.6 – Esquema Geral do Algoritmo de Treinamento de uma RNA

Geralmente, o conjunto total das amostras disponíveis sobre o comportamento do sistema é dividido em três subconjuntos: subconjunto de treinamento, subconjunto de validação e subconjunto de teste. O subconjunto de treinamento, composto aleatoriamente com cerca de 50 a 70% das amostras do conjunto total, será utilizado no processo de aprendizagem da rede. Já o subconjunto de validação, composto entre 20 e 30% do conjunto total, será usado para verificar se os aspectos referentes à generalização de soluções já estão em valores aceitáveis. O restante dos dados será utilizado pelo conjunto de teste, para avaliar o modelo com valores não utilizados no treinamento e na validação.

As duas principais classes de aprendizado são: aprendizado supervisionado e aprendizado não-supervisionado.

5.3.1 Aprendizado Supervisionado

O aprendizado supervisionado consiste em apresentar para a rede a ser treinada, os sinais de entradas e suas correspondentes saídas, disponibilizando uma tabela de dados (entradas/saídas) representativa do processo. A partir de tais informações, as estruturas neurais formularão as “hipóteses” sobre aquilo a ser aprendido.

Esse tipo de treinamento depende unicamente desta tabela, sendo que tudo se comporta como se houvesse um “professor” ensinando para a rede qual resposta correta para cada amostra apresentada em suas entradas (Silva *et al.*, 2010).

Através da Figura 5.7, constata-se o funcionamento do treinamento supervisionado. Os pesos sinápticos são ajustados mediante as sucessivas comparações entre as respostas produzidas pela rede àsquelas desejadas, sendo esta diferença (taxa de erro) usada no procedimento de ajuste. A rede está considerada treinada quando a defasagem entre o real e o estimado estiver dentro de valores aceitáveis.

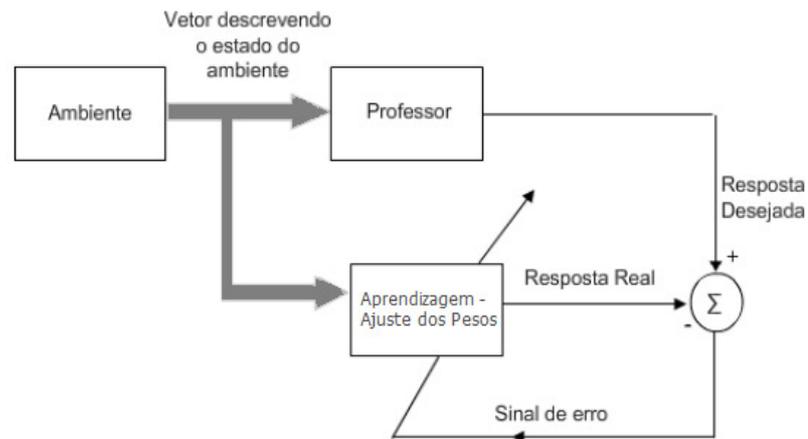


Figura 5.7 – Treinamento supervisionado

5.3.1.1 Algoritmo *Backpropagation*

Conhecido também como Regra Delta Generalizada, o processo de treinamento utilizando o algoritmo *backpropagation* é realizado através da aplicação sucessivas de duas fases específicas. Por intermédio da Figura 5.8, que é uma rede multicamadas constituída de duas camadas escondidas e seus respectivos neurônios na camada de entrada (x_n), 1ª camada escondida (n_1), 2ª camada escondida (n_2) e camada de saída (n_3), verifica-se as duas fases de funcionamento do *backpropagation*: fase *forward* e fase *backward*.

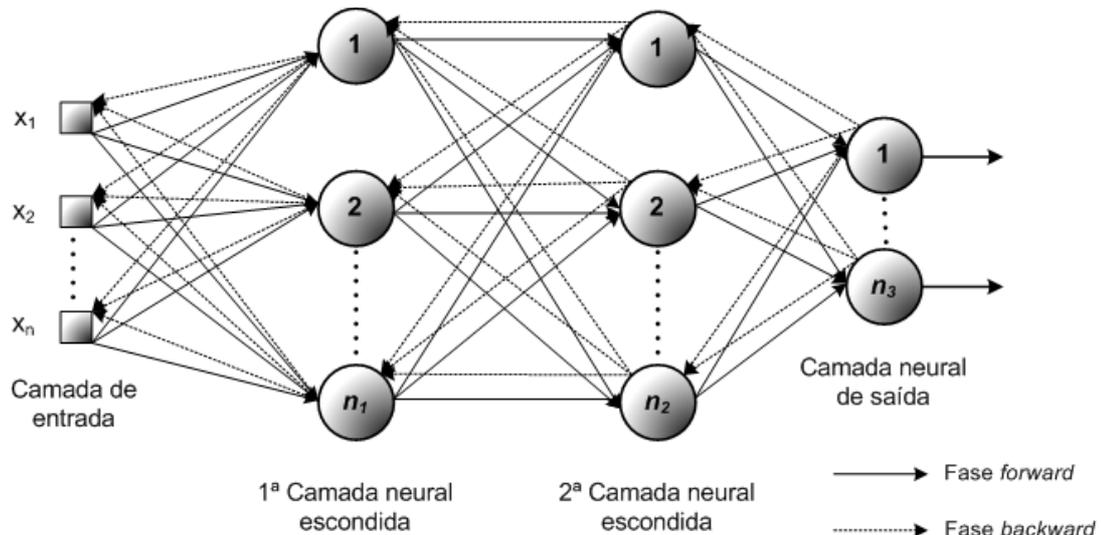


Figura 5.8 – Exemplo de Funcionamento do Algoritmo *Backpropagation*

- **Fase *forward* (propagação adiante):** os sinais $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ de uma amostra do conjunto de treinamento são inseridos nas entradas da rede e são propagados para as próximas camadas até a produção das respectivas saídas. Dessa maneira, essa fase visa somente obter as respostas da rede, levando em consideração apenas valores atuais de pesos sinápticos dos neurônios, os quais não se alteram durante a execução desta fase. Em seguida, as respostas produzidas pelas saídas da rede são comparadas com as respectivas respostas desejadas disponíveis e então, os respectivos n_3 erros são calculados e usados no próximo passo para ajuste dos pesos de todos os neurônios.
- **Fase *backward* (propagação reversa):** essa fase utiliza os valores de erros produzidos pela fase *forward* para alterar (ajustar) os pesos sinápticos de todos os neurônios da rede, agregando conhecimento à rede.

Resumidamente, as aplicações sucessivas das fases *forward* e *backward* fazem com que os pesos sinápticos dos neurônios se ajustem automaticamente em cada iteração, implicando-se na gradativa diminuição da soma dos erros produzidos pelas respostas da rede frente àquelas desejadas (Silva *et al.*, 2010).

Conhecendo o funcionamento do algoritmo, pode-se considerar que quanto mais vezes as duas fases especificadas forem executadas, menor será o erro produzido. Entretanto, a combinação dos valores dos pesos pode conduzir a um mínimo local maior que o erro mínimo desejado, ao invés de um mínimo global que é menor que o erro desejado, como se vê na Figura 5.9.

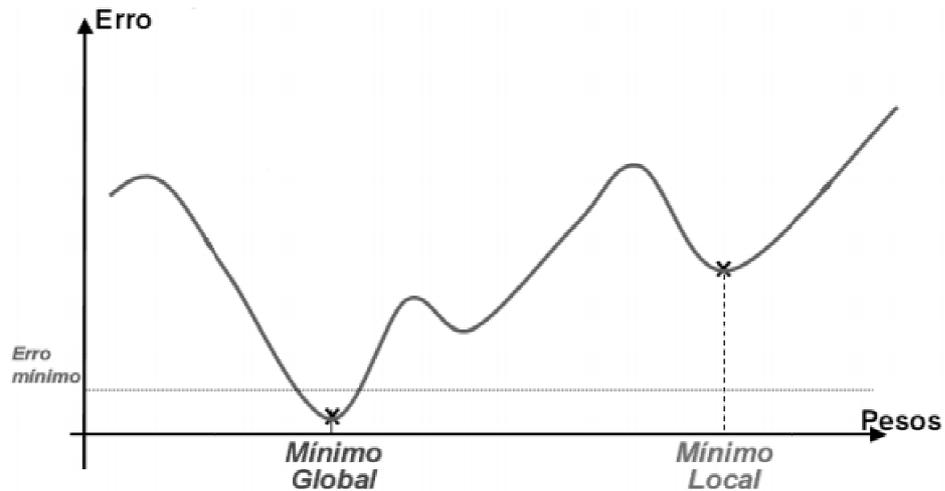


Figura 5.9 – Exemplo de Mínimo Local e Mínimo Global

Para evitar a região de mínimo local, outro parâmetro deve ser levado em consideração no treinamento *backpropagation*: a taxa de momento. Essa taxa deve ser definida por um valor entre 0 e 1.

5.3.1.2 Algoritmo de Levenberg-Marquardt

Segundo Silva *et al.* (2010), na prática, o *backpropagation* tende a convergir muito lentamente, exigindo um elevado esforço computacional. Para contornar esse inconveniente, a abordagem Levenberg-Marquardt propõe a diminuição do tempo de convergência e do esforço computacional (Hagan *et al.*, 1994).

O algoritmo de Levenberg-Marquardt é um método gradiente de segunda ordem, baseado no método dos mínimos quadrados para modelos não-lineares, que pode ser incorporado ao algoritmo *backpropagation* a fim de se potencializar a eficiência do treinamento (Silva *et al.*, 2010). Enquanto que o algoritmo *backpropagation* é um método de descida no gradiente da função erro quadrático a fim de minimizá-la, o algoritmo de Levenberg-Marquardt é uma aproximação do método de Newton (Battiti, 1992; Foresee, 1997; Hagan *et al.*, 1994).

Matematicamente, a característica principal deste algoritmo é a computação da matriz Jacobiana, a qual passa a ser reescrita em função das matrizes sinápticas da rede. Entretanto, problemas de convergência podem ocorrer no caso da matriz Jacobiana ser mal condicionada.

5.3.2 Aprendizado Não-supervisionado

A principal característica desse tipo de aprendizado é que as saídas desejadas inexistem ao se aplicar o algoritmo de treinamento. Conseqüentemente, a própria rede deve se auto-organizar em relação às particularidades existentes entre os elementos do conjunto total

de amostras, identificando subconjuntos que contenham similaridades (Silva *et al.*, 2010). Os pesos sinápticos da rede são então ajustados pelo algoritmo de aprendizado de forma a refletir a representação intrínseca da própria rede.

A quantidade máxima de possíveis subconjuntos pode ser pré-especificada pelo projetista da rede, levando-se em conta o seu conhecimento a respeito do problema a ser tratado.

O algoritmo de treinamento não-supervisionado mais conhecido e utilizado é conhecido como Mapa Auto Organizável de Kohonen, exibido pela Figura 5.10. Nota-se que no decorrer das fases de treinamento, a aplicação passa de uma organização totalmente difusa para outra mais ordenada.

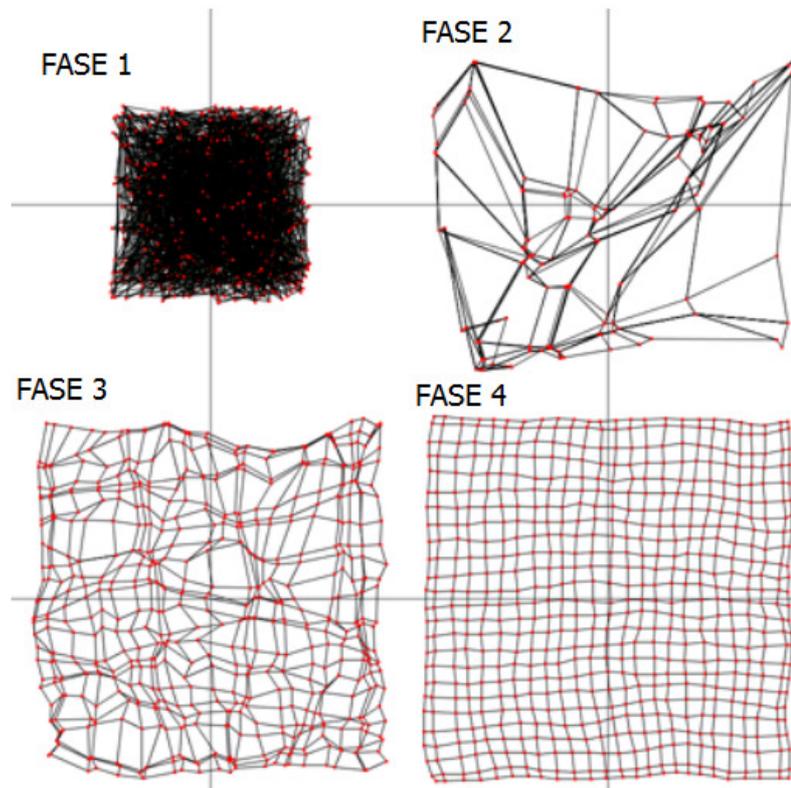


Figura 5.10 – Exemplo de Organização de Mapa Auto Organizável de Kohonen

Existem muitas outras classes de aprendizado e de redes neurais conhecidas (Haykin, 1999). Recomenda-se a leitura das referências para mais informações.

6. PROJETO DO SENSOR VIRTUAL PARA ESTIMAÇÃO DA PORCENTAGEM DE FLÚOR NA ALUMINA FLUORETADA

A estratégia para construir o sensor virtual utilizada neste trabalho segue a metodologia descrita em Fortuna *et al.* (2007):

- Escolha das variáveis;
- Coleta, seleção e filtragem de dados históricos;
- Definição da estrutura do modelo e dos parâmetros de treinamento da rede neural;
- Validação do modelo.

6.1 ESCOLHA DAS VARIÁVEIS

Na primeira etapa do projeto, aconteceram diversas reuniões com a equipe de processo da PTG, nas quais foi esclarecida a maioria das atividades que fazem parte do cotidiano do controle dessa planta e foram citados determinados problemas que são enfrentados. Ressaltou-se que é importante estimar a quantidade de flúor na alumina fluoretada, porque esse componente, como retorna para o forno eletrolítico em forma de matéria-prima, interfere diretamente no comportamento do mesmo, já que esse tipo de alumina é utilizado para manter a estabilidade térmica e química dos fornos.

Os engenheiros de processo possuem informações das propriedades químicas e físicas da alumina virgem e da alumina fluoretada a cada dia. A especificação da alumina virgem é dada pela fornecedora desse material: ALUNORTE (Alumina do Norte do Brasil S. A.). Para exemplificar como essas informações são repassadas à ALBRAS, a Tabela 6.1 mostra alguns resultados das análises físicas e a Tabela 6.2 exibe alguns resultados das análises químicas.

Tabela 6.1 – Relatório da Análise Física da Alumina Virgem repassada pela ALUNORTE à ALBRAS

| ALUMINA CALCINADA – ALBRAS DIÁRIA – ANÁLISE FÍSICA | | | | | | | |
|--|---|-------------|-------------|----------------------------|---------------|-------------|------------|
| Data | Superfície Específica m ² /g | L.O.I. % | | D. APAR. g/cm ³ | GRANULOMETRIA | | |
| | | 110-300°C | 300-1100°C | | +100# | +200# | -325# |
| 10/06/10 | 77 | 0,54 | 0,84 | 0,964 | 3,1 | 68,8 | 6,2 |
| 11/06/10 | 76 | 0,56 | 0,74 | 0,964 | 3,4 | 70,7 | 5,0 |
| 12/06/10 | 76 | 0,53 | 0,79 | 0,964 | 3,4 | 69,8 | 6,8 |
| 13/06/10 | 76 | 0,63 | 0,85 | 0,962 | 3,0 | 62,2 | 6,0 |
| 14/06/10 | 78 | 0,69 | 0,82 | 0,967 | 3,1 | 65,9 | 8,5 |
| Média | 76,6 | 0,59 | 0,81 | 0,964 | 3,2 | 67,5 | 6,5 |

Tabela 6.2 – Relatório da Análise Química da Alumina Virgem repassada pela ALUNORTE à ALBRAS

| ALUMINA CALCINADA – ALBRAS DIÁRIA – ANÁLISE QUÍMICA | | | | | | | | |
|---|-------------------------------------|-----------------------|-----------------------|--------------|------------------------------------|--------------|------------------------|------------------------------------|
| Data | Fe ₂ O ₃ % | SiO ₂ % | TiO ₂ % | ZnO % | V ₂ O ₅ % | CaO % | Na ₂ O % | P ₂ O ₅ % |
| 10/06/10 | 0,016 | 0,017 | 0,005 | 0,001 | 0,001 | 0,013 | 0,38 | 0,0006 |
| 11/06/10 | 0,015 | 0,016 | 0,005 | 0,001 | 0,001 | 0,013 | 0,39 | 0,0005 |
| 12/06/10 | 0,016 | 0,018 | 0,005 | 0,001 | 0,001 | 0,014 | 0,41 | 0,0004 |
| 13/06/10 | 0,014 | 0,016 | 0,004 | 0,001 | 0,001 | 0,016 | 0,40 | 0,0004 |
| 14/06/10 | 0,014 | 0,016 | 0,005 | 0,001 | 0,001 | 0,015 | 0,39 | 0,0003 |
| Média | 0,015 | 0,016 | 0,005 | 0,001 | 0,001 | 0,014 | 0,39 | 0,0004 |

Ainda por intermédio das Tabelas 6.1 e 6.2, verificam-se as variáveis de entrada do modelo neural – destacadas em amarelo – que, segundo os engenheiros de processo da PTG, mais influenciam no comportamento da variável de saída (porcentagem de flúor na alumina fluoretada).

Além de levar em consideração a experiência dos engenheiros de processo da fábrica, Silveira *et al.* (2006) e Innocentini *et al.* (2001) ratificam a importância de considerar a granulometria em processos que envolvem adsorção.

É também diariamente que as amostras de alumina fluoretada são coletadas nas plantas de tratamento de gases e analisadas em laboratório. Os resultados dessa análise são enviados a um banco de dados e permanecem lá para a verificação do comportamento da planta. A Figura 6.1 ilustra as etapas mencionadas.

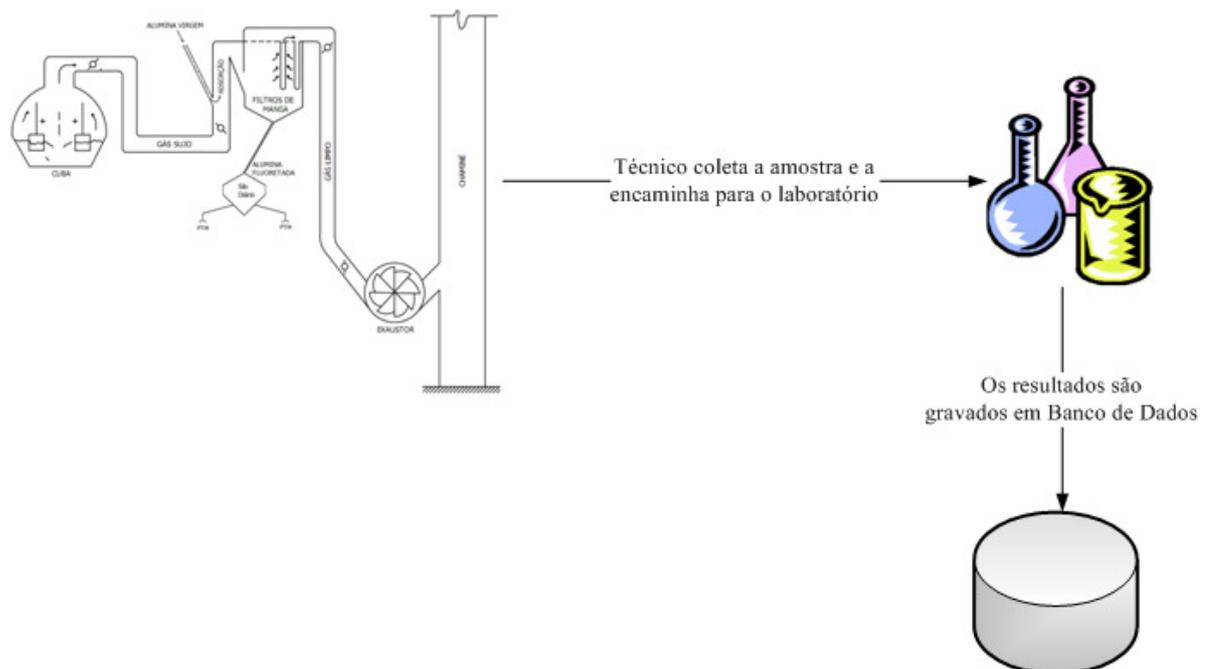


Figura 6.1 – Etapas de análise da composição da alumina fluoretada.

Existe outro banco de dados que armazena, de quatro em quatro horas, as variáveis que permeiam o controle da PTG. Esse controle é feito manualmente, pela equipe de processos da PTG, a qual se baseia na tendência dos valores das variáveis exibidas nos terminais de controle. Daí a importância de considerar os valores de corrente elétrica dos exaustores como variáveis de entrada do modelo. Para uma planta que opera na redução I, têm-se as seguintes variáveis:

- Amperagem de cada exaustor da planta (três por PTG);
- Níveis dos silos (quatro por PTG);
- Pressão diferencial de cada fileira de filtro de manga (doze por PTG);
- Pressão dos exaustores (duas por PTG);
- Temperaturas dos silos (três por PTG).

Como foi mencionado nos parágrafos anteriores, os dados que especificam as características físicas e químicas da alumina virgem são disponíveis diariamente, já os dados da PTG são coletados a cada quatro horas. Para solucionar essa diferença de frequência de amostragem, optou-se por considerar a média diária das variáveis da PTG.

Pelos motivos explicitados, decidiu-se que os valores de granulometria (mesh 100, mesh 200 e mesh -325) irão compor a variável física considerada no modelo. Além disso, como variável química, decidiu-se considerar a porcentagem de sódio (Na_2O). Por fim, os valores de corrente elétrica de cada exaustor da planta (quatro por PTG) constituem as variáveis da PTG a ser considerada na camada de entrada do modelo neural deste projeto. Dessa forma, as entradas da rede neural e a saída estão definidas e podem ser vistas na Figura 6.2 a seguir.

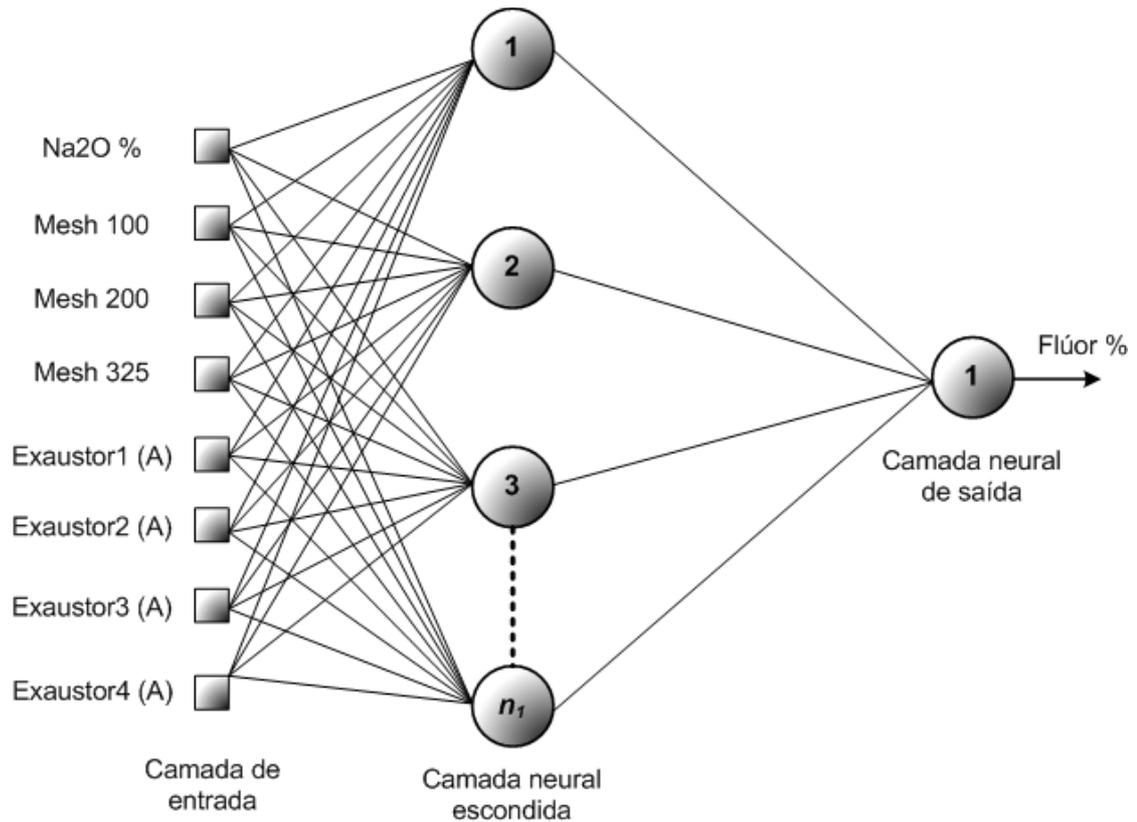


Figura 6.2 – Esquema da RNA projetada.

6.2 COLETA, SELEÇÃO E FILTRAGEM DE DADOS HISTÓRICOS

Como foi dito na seção anterior, existem dois banco de dados que armazenam os registros das variáveis de entrada e de saída escolhidas para fazer parte do modelo. Hipoteticamente, para facilitar a compreensão, considera-se nesse trabalho que o Banco de Dados A contém as variáveis químicas e físicas (percentagem de sódio na alumina virgem, valores de granulometria, percentagem de flúor adsorvido na alumina fluoretada) e o Banco de Dados B mantém as variáveis da PTG (corrente de operação dos exaustores).

É importante destacar que os dados da planta em questão advêm da PTG 1. Como foi dito no capítulo que aborda sobre a Planta de Tratamento de Gases, existem duas PTG's por redução, optou-se pelos dados da PTG 1 que atua na Redução 1, pois, segundo os engenheiros de automação da fábrica, essa planta é que possui há mais tempo um melhor monitoramento do que as outras plantas.

No Banco de Dados A, encontram-se registros desde 1997. Já no Banco de Dados B, os registros começaram a ser armazenados desde 2005. Entretanto, os registros de maio/2005 até maio/2008, contidos em B, foram coletados manualmente; de junho/2008 até junho/2009, não foi realizada coleta de dados dos exaustores; somente em julho/2009, quando ocorreu a

expansão das PTG's, até os dias de hoje (este trabalho cobre até maio/2011) que os dados foram adquiridos de forma automática, armazenados em Banco de Dados e disponibilizados para consulta dos engenheiros de processo através de um aplicativo computacional conhecido como APTA. O gráfico a seguir, Figura 6.3, mostra como os registros do Banco de Dados B estão dispostos no decorrer do tempo.

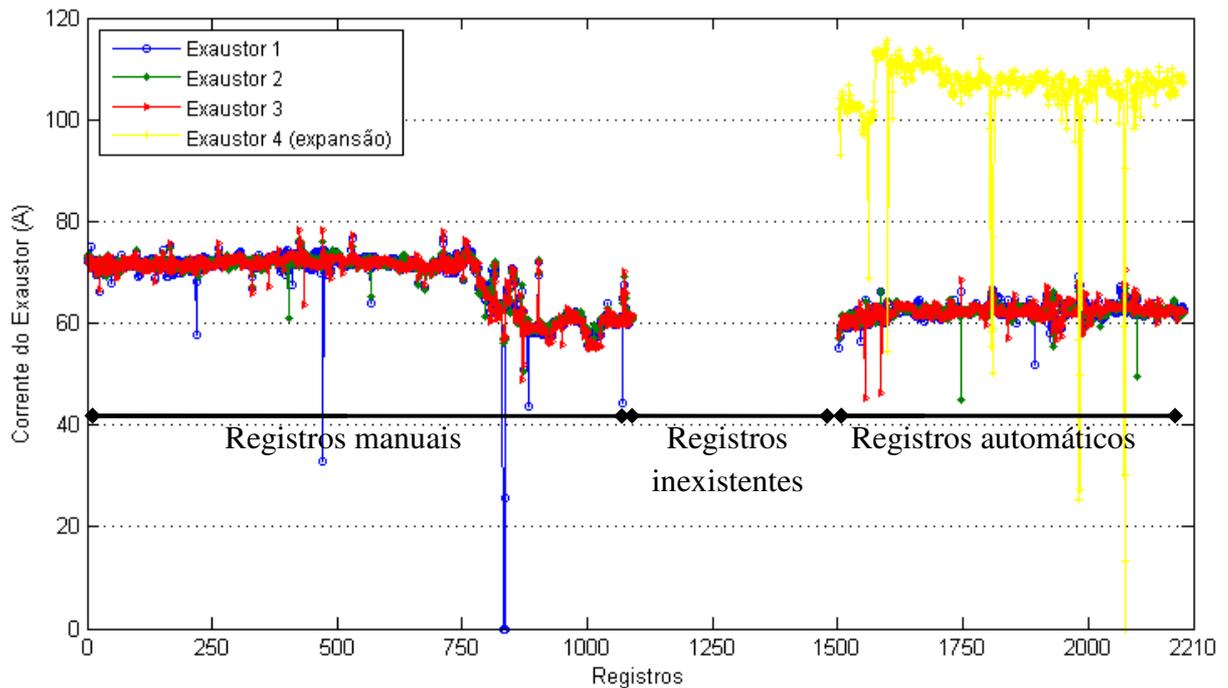
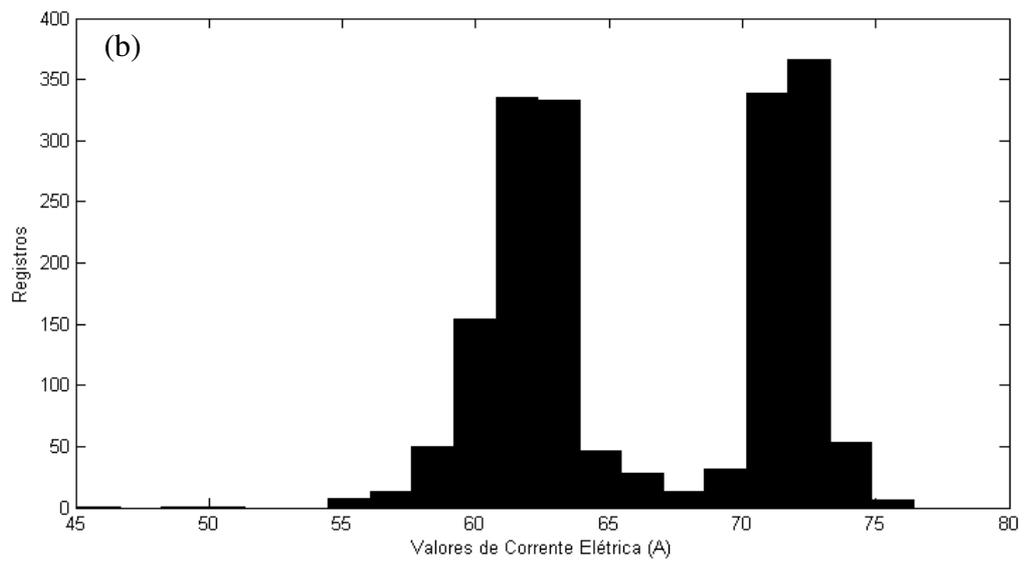
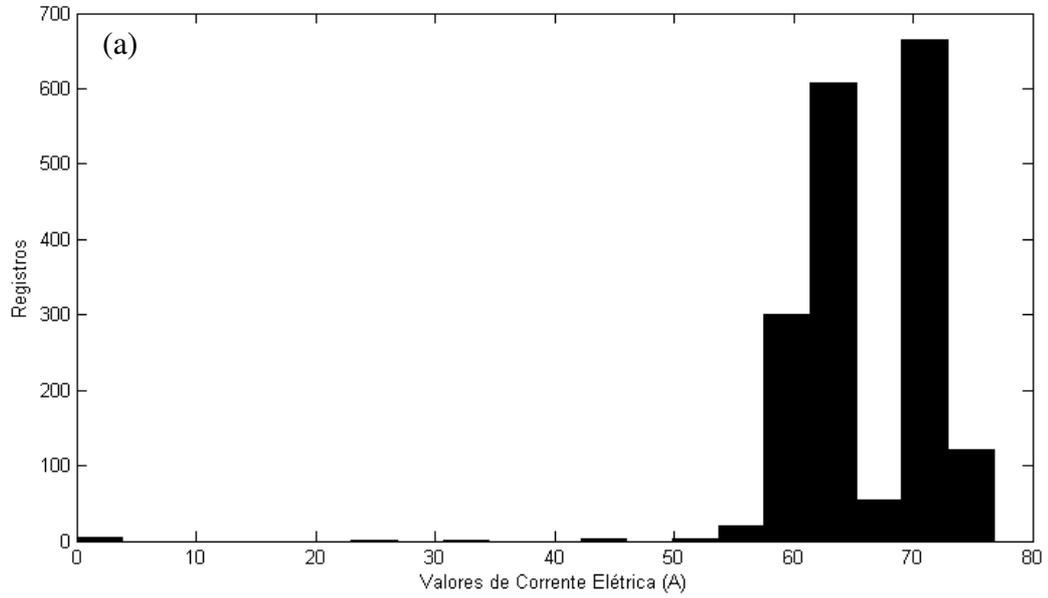


Figura 6.3 – Gráfico do Conjunto Total de Registros dos Exaustores da PTG

Ainda observando a Figura 6.3, é possível afirmar que a média dos registros referentes aos exaustores antigos da fase manual é de aproximadamente 70 A, enquanto que a média dos desse mesmo tipo de registros na fase automática chega perto dos 62 A. Caso o conjunto total de registros fosse utilizado para construir o modelo neural, essa disparidade entre os subconjuntos de registros iria interferir de maneira negativa na qualidade do mesmo. Outra desvantagem de usar o conjunto total, é que antes de julho/2009 não existia o quarto exaustor (expansão), o qual opera a 105 A, em média.

Através do exame dos histogramas a seguir, Figura 6.4, também é possível verificar que existem dois valores de corrente elétrica mais significativos – exceto o Exaustor 4 – que giram em torno da média de cada subconjunto (70 A e 62 A). Outro fator que ratifica a dissemelhança entre os subconjuntos de registros manuais e de registros automáticos, já que, segundo Montgomery *et al.* (2004), um histograma é um sumário dos dados, ou seja, mostra

as características intrínsecas mais importantes dos mesmos e contribui para um bom julgamento estatístico.



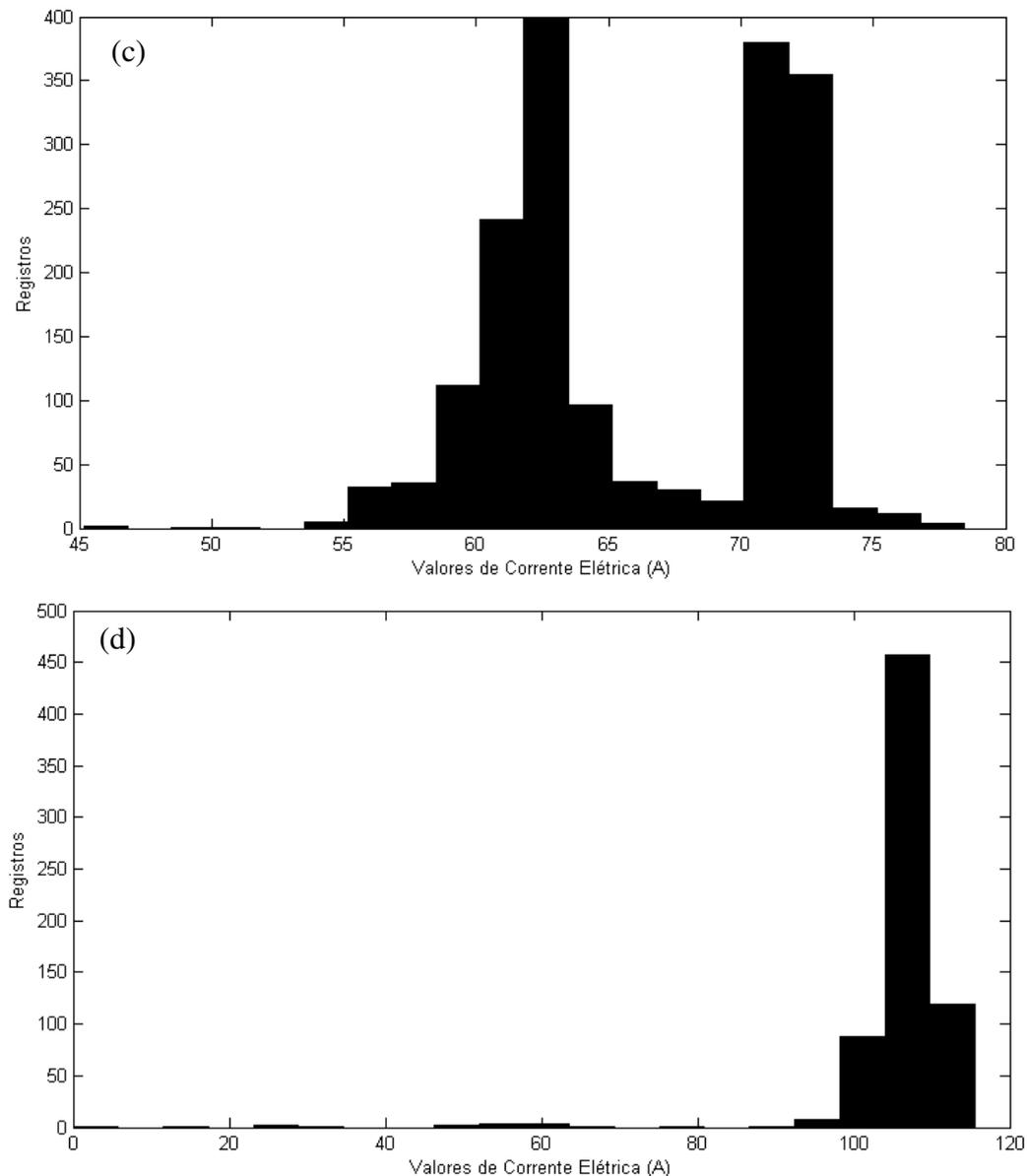


Figura 6.4 – (a) Histograma do conjunto total de registros para o Exaustor 1. (b) Histograma do conjunto total de registro para o Exaustor 2. (c) Histograma do conjunto total de registro para o Exaustor 3. (d) Histograma do conjunto total de registro para o Exaustor 4.

Por esses motivos, por ser o subconjunto mais recente e por estar livre de possíveis erros humanos, considerou-se para a criação do modelo neural o subconjunto de registros da fase automática.

Sendo assim, o período de coleta dos dados está compreendido entre julho/2009 e maio/2011. Como a frequência dos dados é diária, há um conjunto de aproximadamente 690 amostras no total.

Por intermédio da Figura 6.5 abaixo, verifica-se os registros da corrente elétrica de operação dos exaustores da PTG do subconjunto automático selecionado. Nota-se que existem

valores espúrios que certamente influenciariam negativamente na criação do modelo neural, gerando resultados imprecisos.

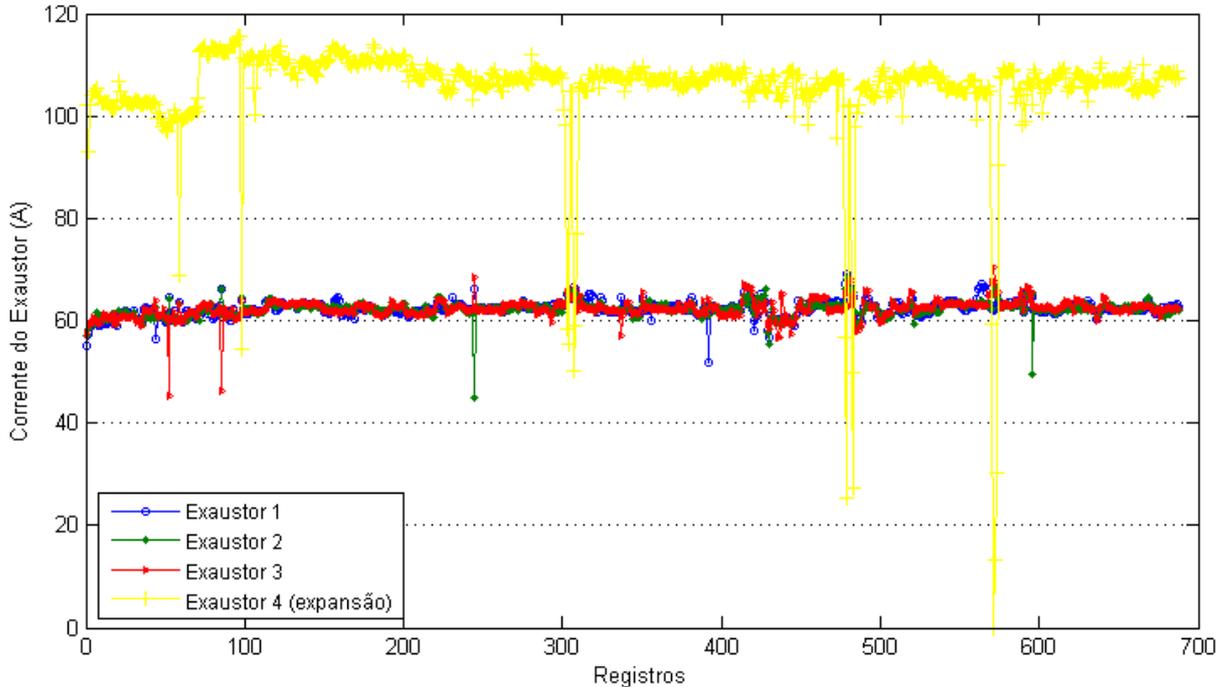
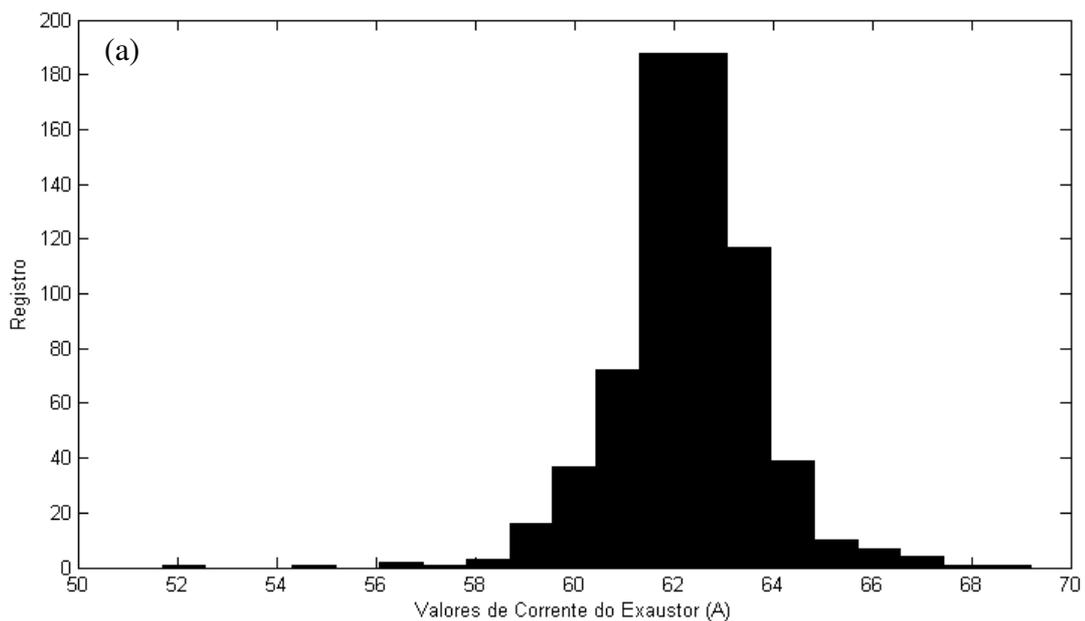
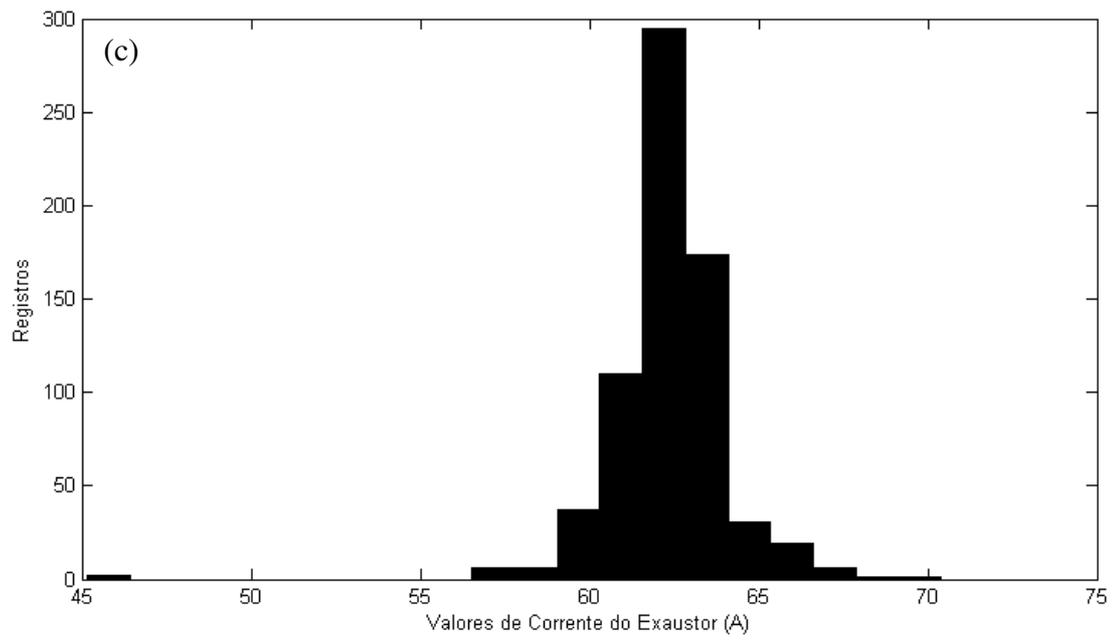
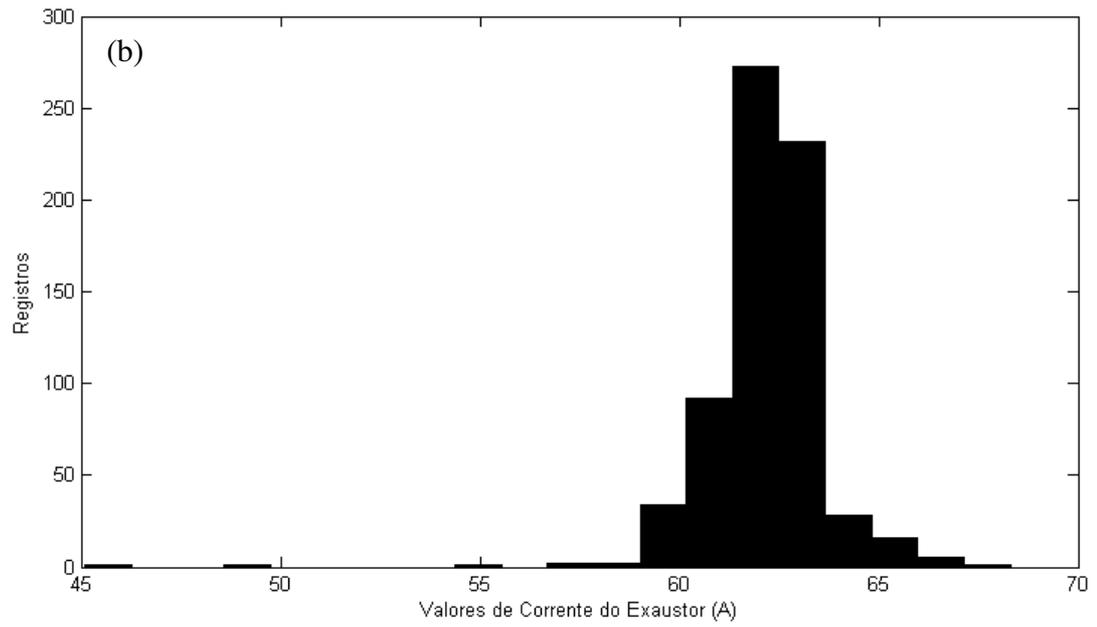


Figura 6.5 – Gráfico do Subconjunto Automático de Registros dos Exaustores.

Também é mostrado a seguir (Figura 6.6) os histogramas dos quatro exaustores. Percebe-se que houve uma melhora significativa na distribuição dos valores, pois agora se tem somente um pico por histograma. Entretanto, ainda é possível verificar a quantidade de dados espúrios contidos, observando as extremidades mais baixas em cada histograma.





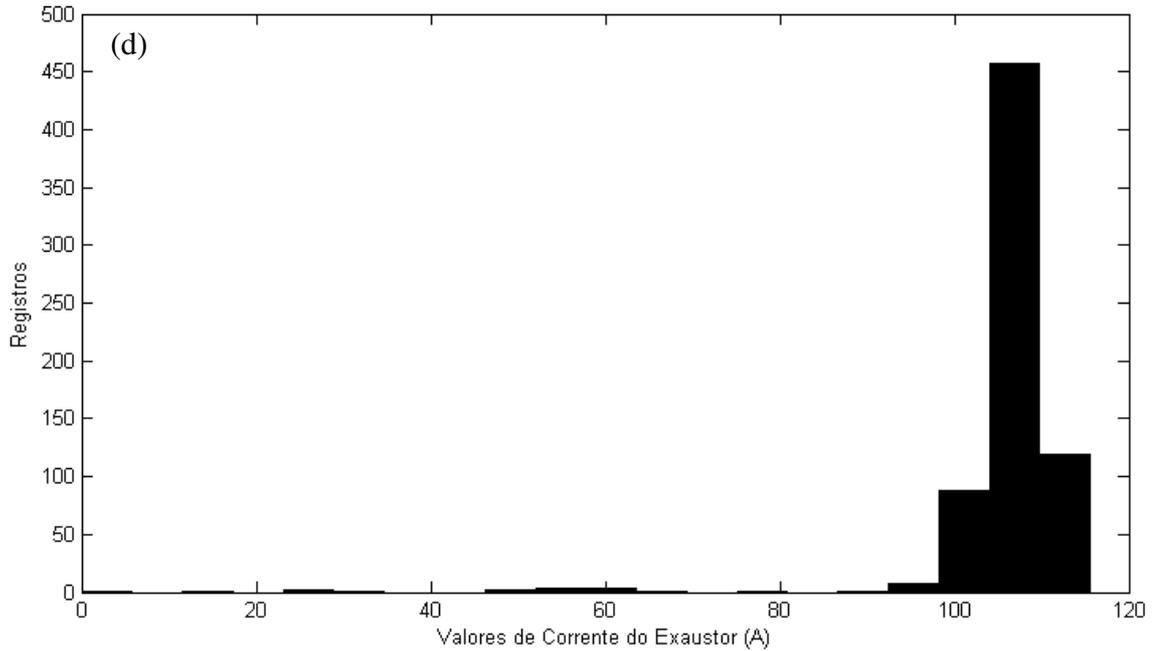


Figura 6.6 – (a) Histograma do subconjunto automático de registros para o Exaustor 1. (b) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 2. (c) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 3. (d) Histograma do subconjunto automático de registro para o Exaustor 4.

Em relação às outras variáveis de entrada e à variável de saída, que são armazenadas do Banco de Dados A, logicamente foram selecionados os respectivos subconjuntos levando em consideração o período da fase de aquisição automática dos registros dos exaustores da PTG. As Figuras 6.7, 6.8 e 6.9 mostram os gráficos e os histogramas, respectivamente, das variáveis: percentagem de sódio em alumina virgem, valores de granulometria, percentagem de flúor em alumina fluoretada (variável de saída).

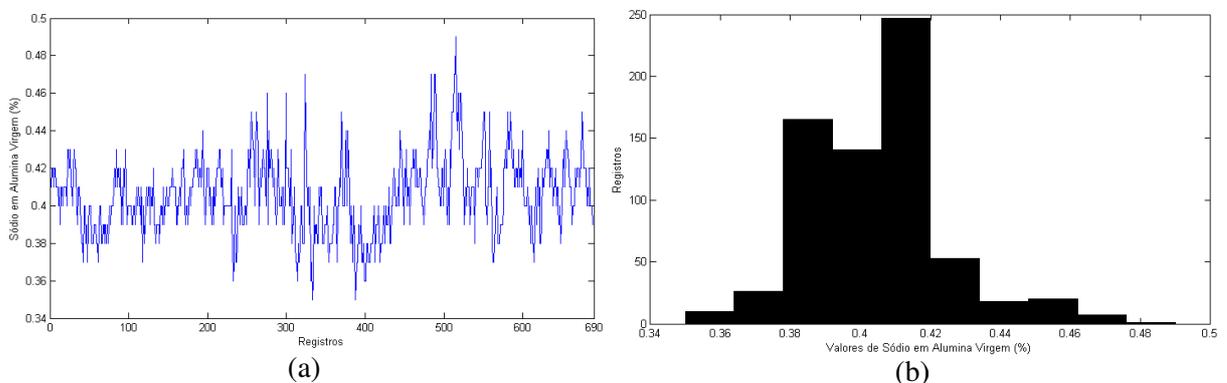


Figura 6.7 – (a) Gráfico da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem. (b) Histograma da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem.

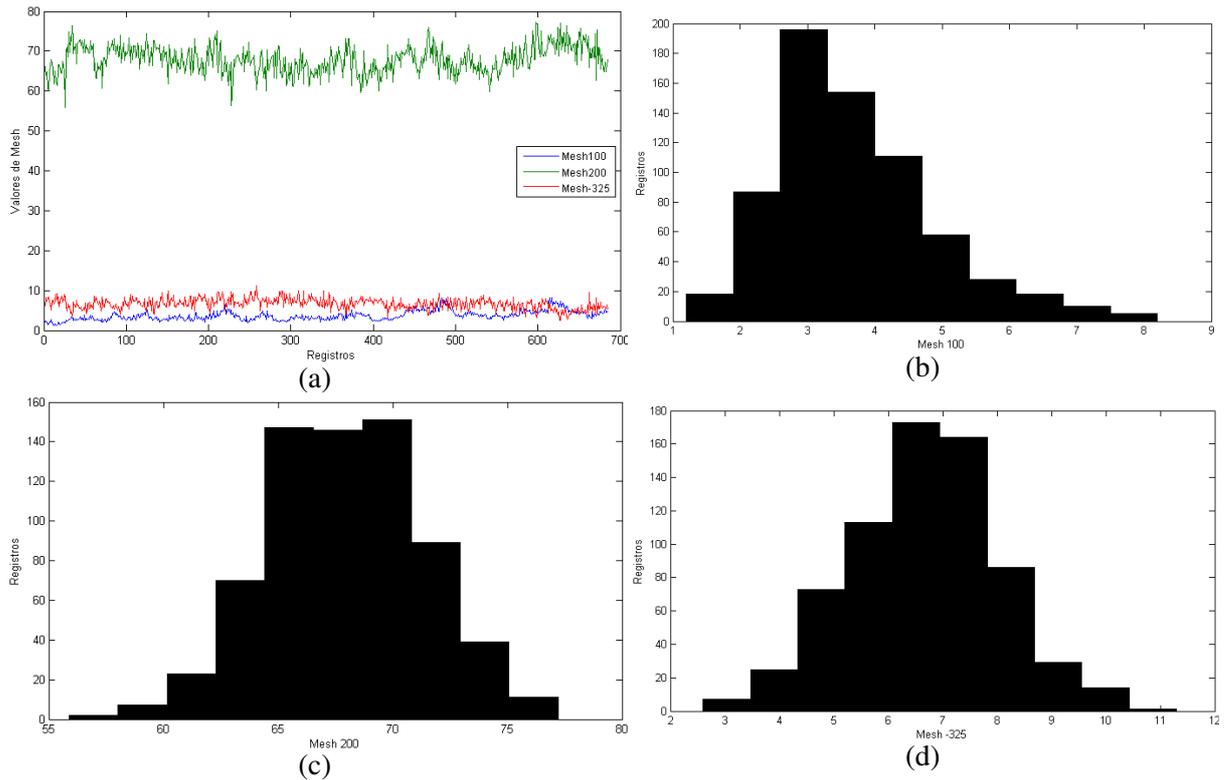


Figura 6.8 – (a) Gráfico das Granulometrias da Alumina Virgem. (b) Histograma da 100 mesh. (c) Histograma 200 mesh. (d) Histograma -325 mesh.

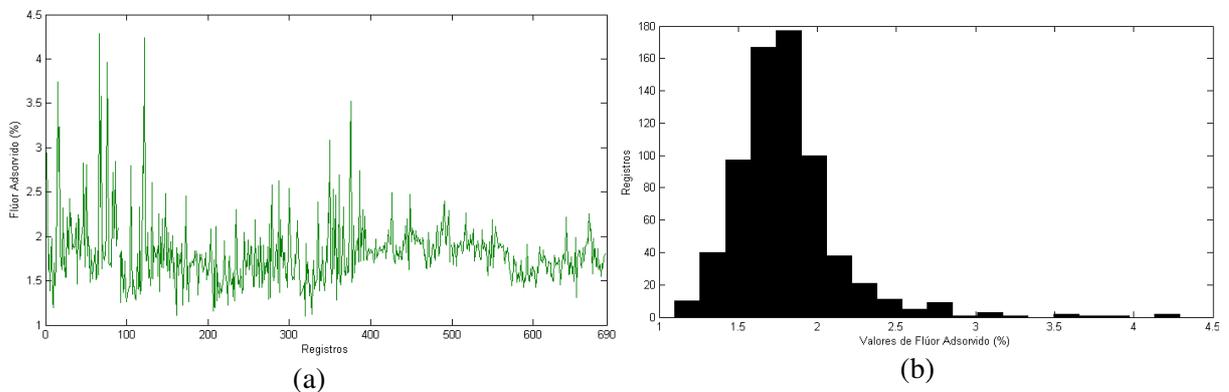


Figura 6.9 – (a) Gráfico da Porcentagem de Flúor na Alumina Fluoretada. (b) Histograma da Porcentagem de Flúor na Alumina Fluoretada.

Com o intuito de eliminar os dados espúrios para melhorar o desempenho do modelo, utilizou-se a Regra 3Sigma, explicitada na seção referente aos Sensores Virtuais desse trabalho. No Apêndice A, encontra-se a rotina feita em Matlab que calcula o 3Sigma e elimina os dados espúrios de acordo com essa regra. Dessa forma, foram eliminados cerca de 130 registros. Esse novo conjunto de dados, com quase 500 padrões, será usado na criação do modelo neural. Os dados das variáveis de entrada e os da variável de saída ganharam novas configurações, como pode ser visto nas Figuras 6.10, 6.11, 6.12 e 6.13.

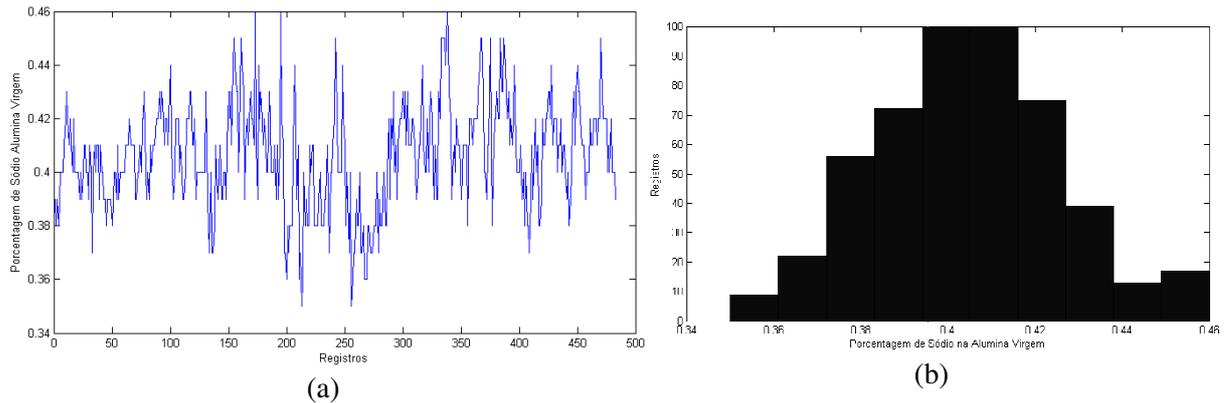


Figura 6.10 – (a) Gráfico da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da Porcentagem de Sódio na Alumina Virgem após Filtro 3Sigma.

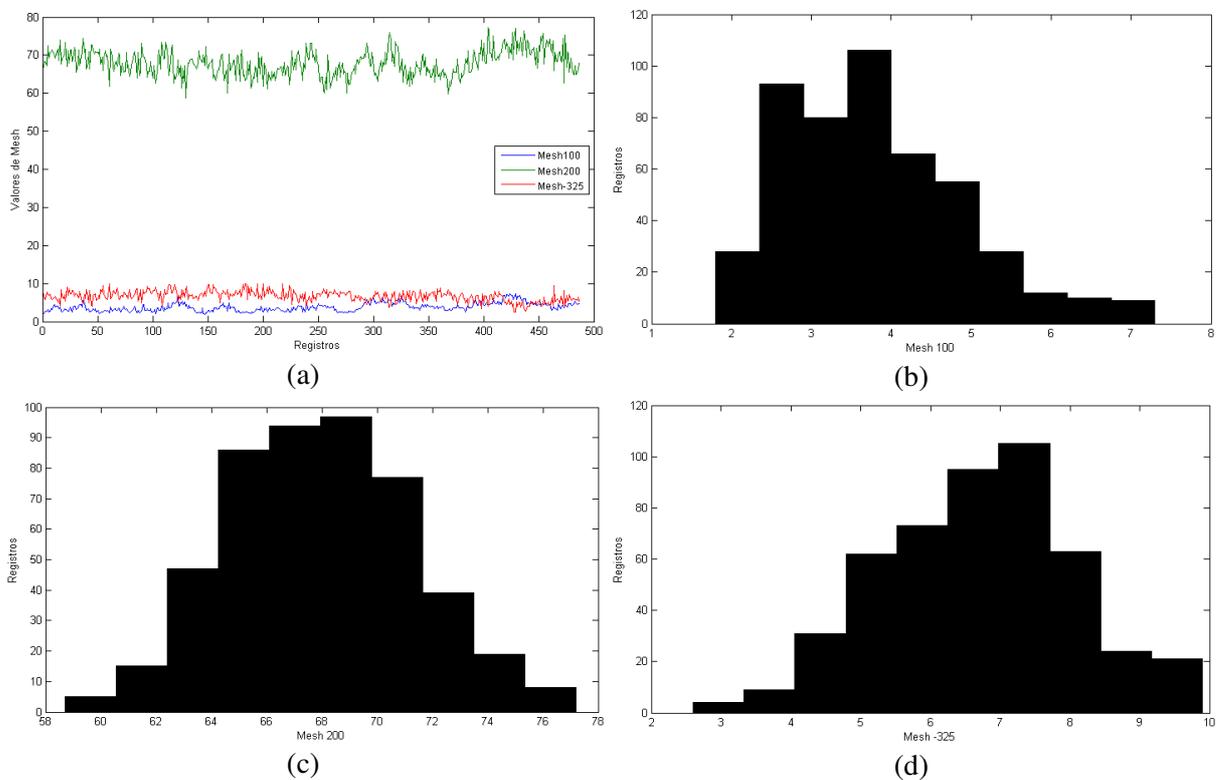


Figura 6.11 – (a) Gráfico das Granulometrias da Alumina Virgem após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da 100 mesh após Filtro 3Sigma. (c) Histograma 200 mesh após Filtro 3Sigma. (d) Histograma -325 mesh após Filtro 3Sigma.

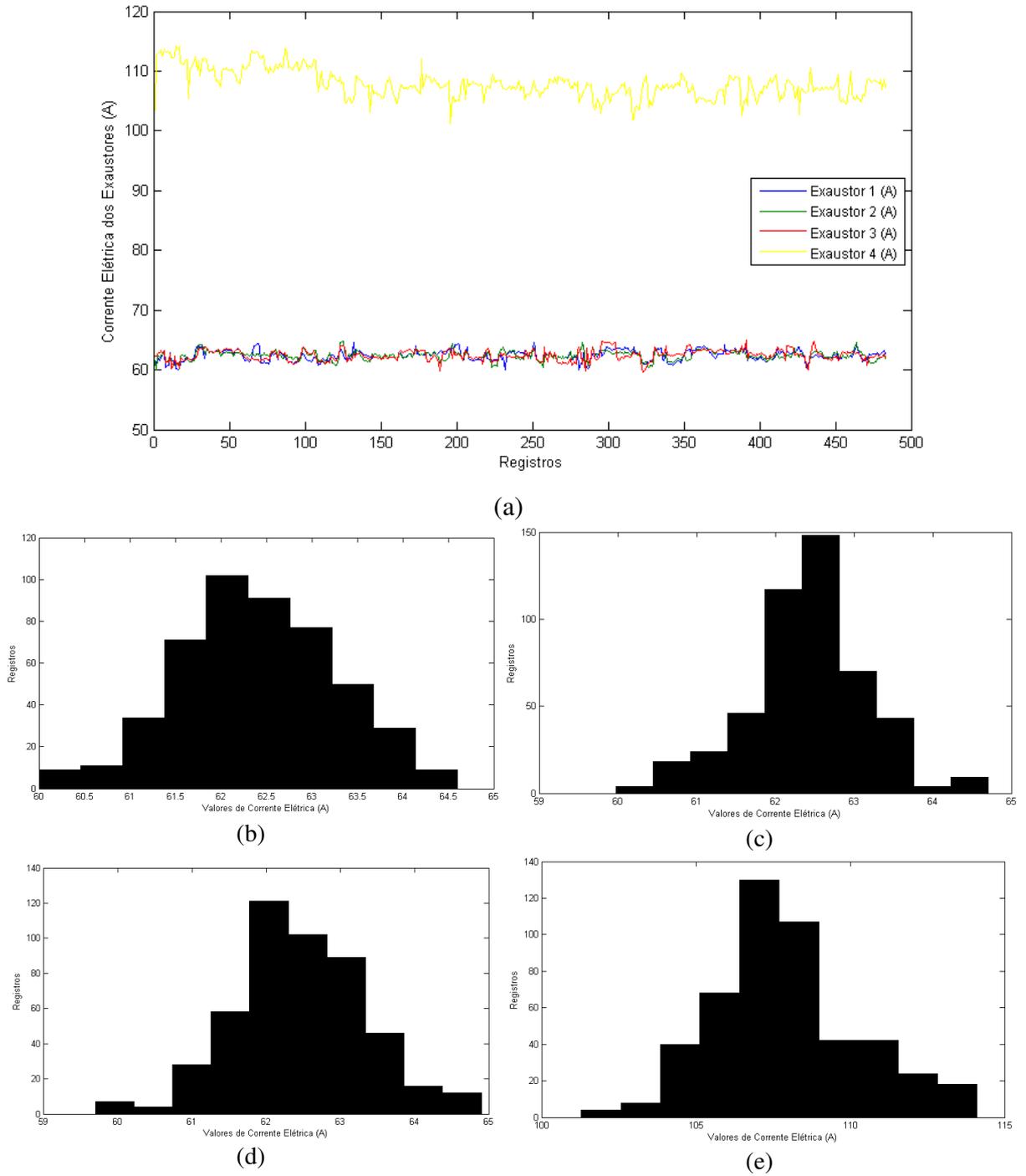


Figura 6.12 – (a) Gráfico dos Exaustores após Filtro 3Sigma. (b) Histograma do Exaustor 1 após Filtro 3Sigma. (c) Histograma do Exaustor 2 após Filtro 3Sigma. (d) Histograma do Exaustor 3 após Filtro 3Sigma. (e) Histograma do Exaustor 4 após Filtro 3Sigma.

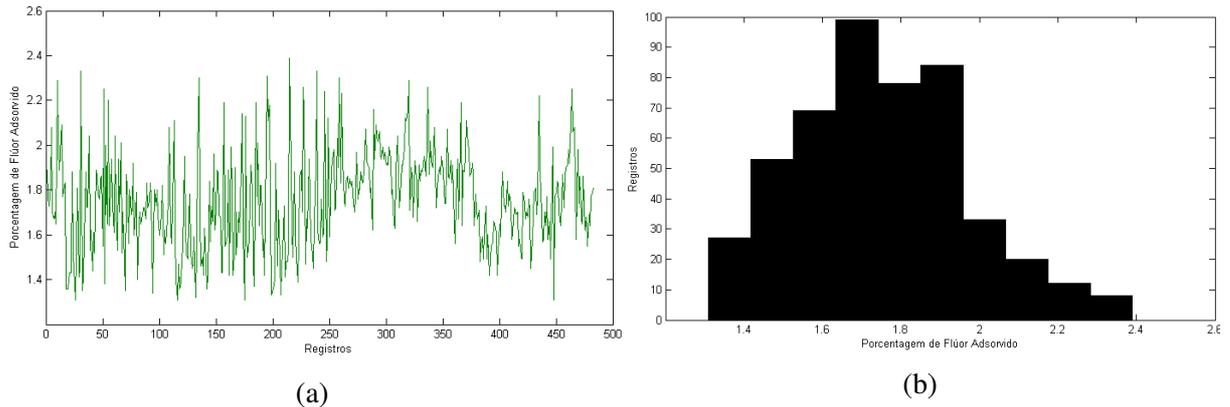


Figura 6.13 – (a) Gráfico da Porcentagem de Flúor Adsorvido na Alumina Fluoretada após Filtro 3Sigma. (b) Histograma da Porcentagem de Flúor Adsorvido na Alumina Fluoretada após Filtro 3Sigma.

Os valores mínimos e máximos de cada variável utilizada no modelo podem ser vistos na Tabela 6.3, assim como a média de cada uma também.

Tabela 6.3 – Faixas operacionais das variáveis e suas médias.

| Variável | Valor Mínimo | Valor Máximo | Média |
|---|--------------|--------------|--------|
| Concentração de Sódio (%) | 0,35 | 0,46 | 0,40 |
| Mesh 100 | 1,80 | 7,30 | 3,81 |
| Mesh 200 | 58,70 | 77,20 | 67,95 |
| Mesh 325 | 2,60 | 9,90 | 6,67 |
| Exaustor 1 (A) | 60,00 | 64,00 | 62,41 |
| Exaustor 2 (A) | 59,98 | 64,70 | 62,40 |
| Exaustor 3 (A) | 59,70 | 64,90 | 62,47 |
| Exaustor 4 (A) | 101,29 | 114,11 | 107,90 |
| Concentração de Flúor na Alumina Fluoretada (%) | 1,31 | 2,39 | 1,75 |

6.3 DEFINIÇÃO DA ESTRUTURA DO MODELO E DOS PARÂMETROS DE TREINAMENTO DA REDE NEURAL

A divisão dos dados em subconjuntos de treinamento, de validação e de teste do modelo segue o gráfico (Figura 6.14). Essa separação foi feita de forma aleatória de modo que o intervalo do subconjunto de treinamento abrangesse os intervalos dos outros subconjuntos (validação e teste).

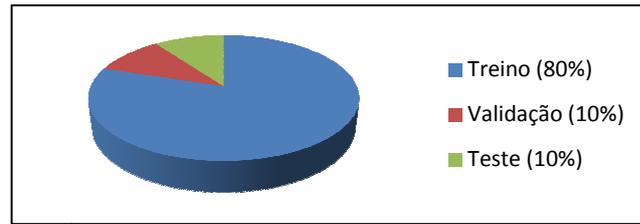


Figura 6.14 – Gráfico da Divisão dos Subconjuntos

A normalização dos dados, para não saturar a função de ativação, foi feita entre -1 e 1.

A topologia de rede neural utilizada é *Perceptron* Multicamadas do tipo NARX em Série, vista na Figura 6.15. A sigla NCE significa número de neurônios na camada escondida, $\bar{u}(t)$ é o vetor com as entradas reais, $y(t)$ é a saída real e $\hat{y}(t)$ é a saída estimada pelo modelo. Na camada escondida, tem-se a indicação “1:D”, onde a letra D representa o número de atrasos utilizados. Há somente um neurônio na camada de saída, porque o modelo requer somente uma saída.

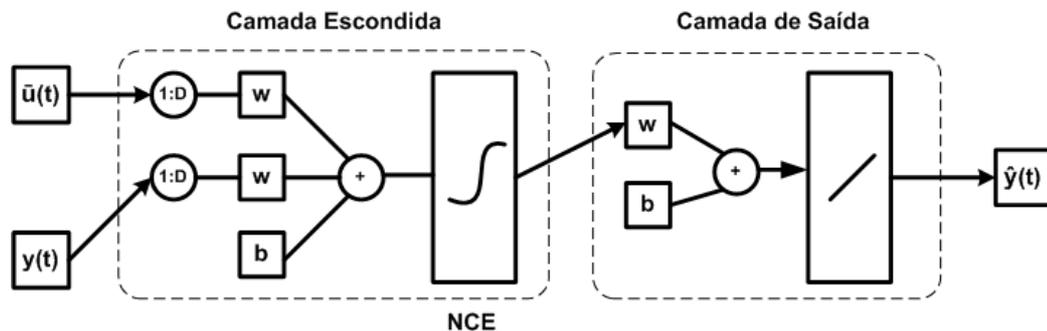


Figura 6.15 – Topologia da Rede Neural *Perceptron* Multicamadas NARX tipo Série

Com o intuito de criar o Modelo Neural NARX, ilustrado pela Figura 6.15 capaz de estimar valores mais próximos possíveis das amostras reais, testou-se, através da implementação de um programa computacional desenvolvido na linguagem de programação MATLAB e com o uso do *toolbox* de RNA (Matlab, 2010), doze tipos diferentes de configurações de RNA's candidatas, variando: número de neurônios na camada escondida e valor do atraso da rede. Verificam-se, através da Tabela 6.4, as diversas configurações utilizadas e o parâmetro para a escolha usado: erro MSE (*Mean Square Error*) do modelo. Os valores dos erros MSE, não preenchidos nessa tabela, serão calculados após a conclusão da fase de aprendizagem de cada topologia. Na seção seguinte (Resultados), encontra-se a tabela completa.

Tabela 6.4 – Configurações de redes utilizadas para auxiliar na escolha da melhor RNA

| RNA Candidata | Parâmetro | Valor |
|----------------------|-------------------------------|--------------|
| 1 | Neurônios na Camada Escondida | 5 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 2 | Neurônios na Camada Escondida | 10 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 3 | Neurônios na Camada Escondida | 15 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 4 | Neurônios na Camada Escondida | 20 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 5 | Neurônios na Camada Escondida | 25 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 6 | Neurônios na Camada Escondida | 30 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 7 | Neurônios na Camada Escondida | 5 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 8 | Neurônios na Camada Escondida | 10 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 9 | Neurônios na Camada Escondida | 15 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 10 | Neurônios na Camada Escondida | 20 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 11 | Neurônios na Camada Escondida | 25 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |
| 12 | Neurônios na Camada Escondida | 30 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | - |

O *Mean Square Error* ou Erro Quadrático Médio é uma medida que calcula a média dos erros observados entre o valor estimado pelo modelo e o valor desejado (medido pelo sensor). A Equação 6.1 mostra como calcular esse erro.

$$\text{MSE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y}_i - y_i)^2 \quad (6.1)$$

onde N é o número total de registros; \hat{y} é a saída estimada pelo modelo; y é a saída real medida pelo sensor e i é o índice dos termos.

Em relação à função de ativação, na camada escondida e na camada de saída, usou-se, respectivamente, a Tangente Hiperbólica e a Função Linear.

O algoritmo de treinamento escolhido foi o de Levenberg-Marquardt (Hagan & Menhaj, 1994). Este algoritmo é capaz de conduzir o treinamento de redes *Perceptron* Multi-Camadas (PMC) de forma mais rápida que algoritmos tradicionais (*backpropagation*, por exemplo). Trata-se de um método gradiente de segunda ordem, baseado no método dos mínimos quadrados para modelos não-lineares, que utiliza aproximação do método de Newton, a fim de potencializar a eficiência do processo de treinamento (Silva *et al.*, 2010).

A divisão dos dados nos respectivos subconjuntos de treino, validação, teste e a inicialização dos pesos também foram feitas de forma aleatória. Por esses motivos, como visto no Apêndice B, que mostra o código-fonte do programa desenvolvido em Matlab, cada configuração apresentada na Tabela 6.4 foi treinada 60 vezes e as que apresentassem o melhor desempenho, ou seja, menores taxas de erros MSE eram salvas.

Por meio da Tabela 6.5, verificam-se os parâmetros de treinamento, para parada antecipada, das redes candidatas.

Tabela 6.5 – Parâmetros de Treinamento da PMC

| Parâmetro | Valor |
|-----------------------------|---------------------------|
| Quantidade máxima de épocas | 200 |
| Taxa de Aprendizado | Variando entre 0,01 e 0,1 |
| Gradiente Mínimo | 10^{-10} |
| Erro MSE | 0,0001 |
| Checagem de Validação | 30 |

7. RESULTADOS

Esse capítulo mostra os resultados obtidos com a execução das etapas descritas no final da seção anterior.

Como mencionado na metodologia, foram definidas doze tipos de configurações diferentes de redes neurais, as quais foram denominadas RNA Candidatas. Após o treinamento de cada RNA Candidata, completou-se a Tabela 6.4 com os valores de erro MSE de cada modelo, gerando a Tabela 7.1.

Tabela 7.1 – Resultado do erro MSE de cada RNA Candidata.

| RNA Candidata | Parâmetro | Valor |
|---------------|-------------------------------|--------|
| 1 | Neurônios na Camada Escondida | 5 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0351 |
| 2 | Neurônios na Camada Escondida | 10 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0329 |
| 3 | Neurônios na Camada Escondida | 15 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0310 |
| 4 | Neurônios na Camada Escondida | 20 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0262 |
| 5 | Neurônios na Camada Escondida | 25 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0290 |
| 6 | Neurônios na Camada Escondida | 30 |
| | Atraso | 3 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0242 |
| 7 | Neurônios na Camada Escondida | 5 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0337 |

| RNA Candidata | Parâmetro | Valor |
|----------------------|-------------------------------|--------------|
| 8 | Neurônios na Camada Escondida | 10 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0250 |
| 9 | Neurônios na Camada Escondida | 15 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0176 |
| 10 | Neurônios na Camada Escondida | 20 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0134 |
| 11 | Neurônios na Camada Escondida | 25 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0174 |
| 12 | Neurônios na Camada Escondida | 30 |
| | Atraso | 5 |
| | Erro MSE do modelo | 0,0150 |

A partir dos valores dos erros contidos na Tabela 7.1, criou-se o gráfico (Figura 7.1) que mostra o comportamento dos erros MSE das RNA Candidatas para facilitar a análise. Nota-se que foram pré-selecionadas quatro topologias: as RNA Candidatas 9, 10, 11 e 12. O critério para essa escolha se deu pelo fato dos respectivos erros MSE estarem dentro do intervalo [0,01; 0,02]. Vê-se que a RNA Candidata 10 possui o menor erro MSE das quatro redes candidatas.

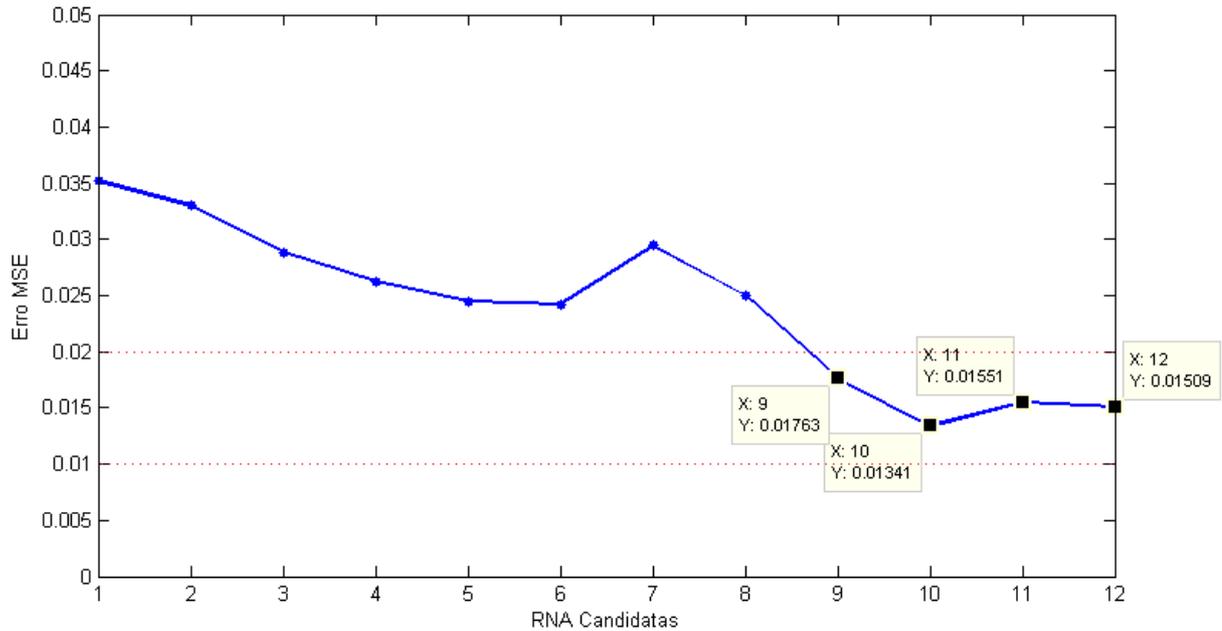


Figura 7.1 – Gráfico contendo os erros MSE das RNA Candidatas.

Outra análise feita para determinar a RNA Definitiva, foi construir histogramas com valores de Porcentagem do Erro Absoluto (PEA) ou, em inglês, *Absolute Percentage Errors (APE)*, para verificar qual das RNA Candidatas pré-selecionadas apresenta mais valores concentrados no intervalo de 0 a 5%. Para realizar o cálculo de PEA, utilizou-se a rotina, que consta no Anexo A, desenvolvida em Matlab disponibilizada por Belani (2007). As Figuras 7.2 a 7.5 exibem os respectivos histogramas.

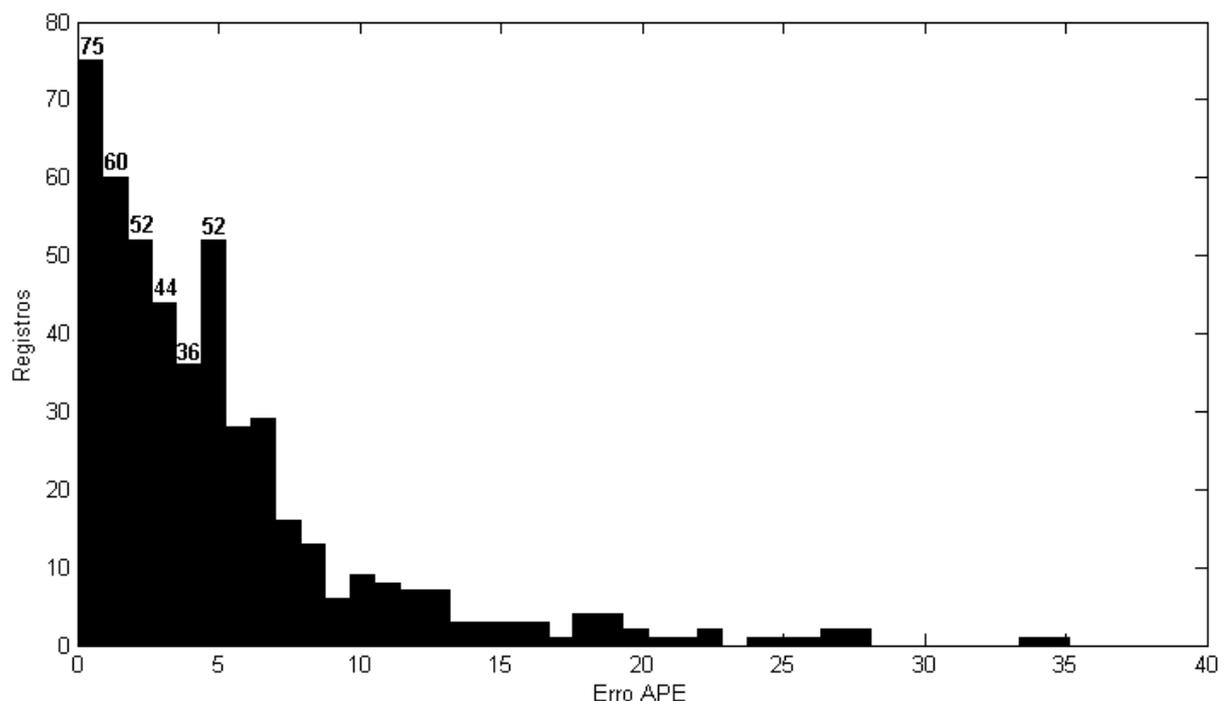


Figura 7.2 – Histograma PEA da RNA Candidata 9.

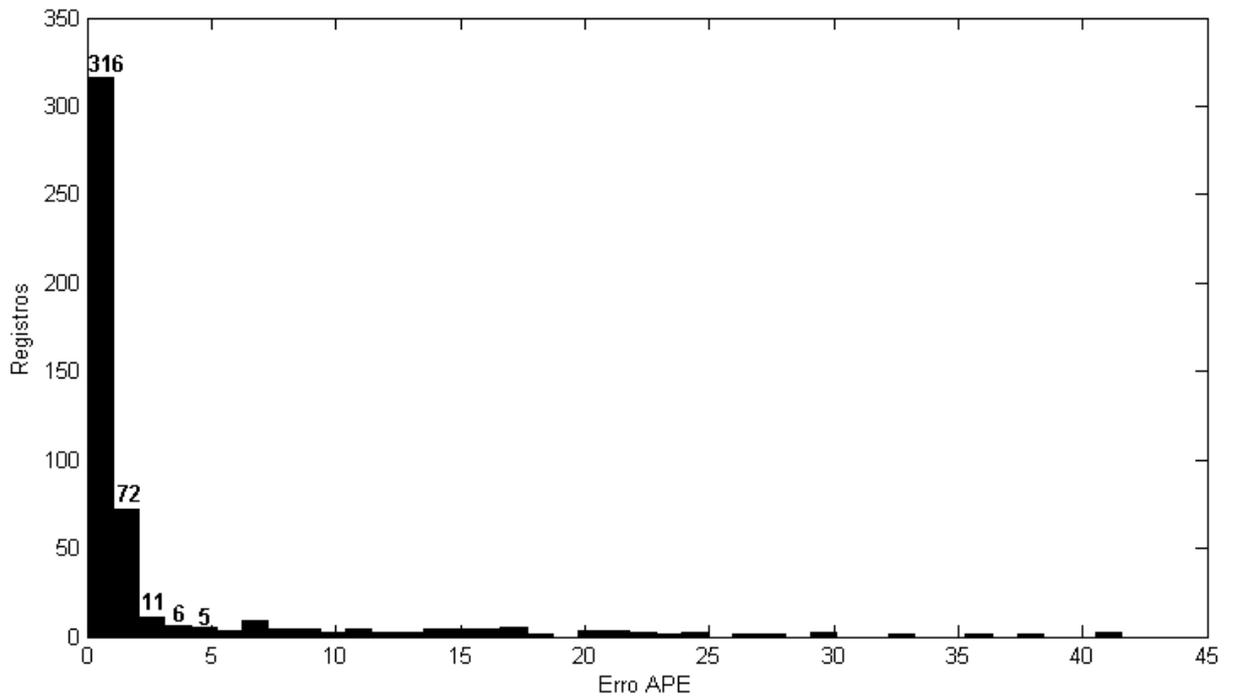


Figura 7.3 – Histograma PEA da RNA Candidata 10.

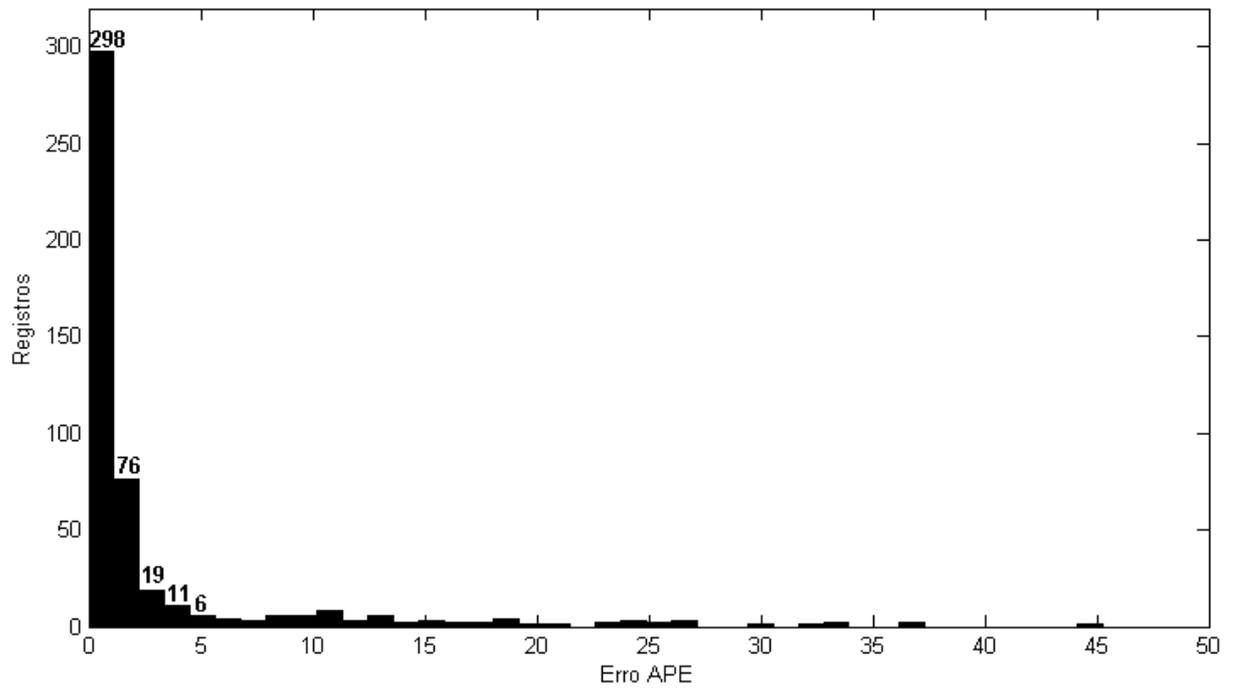


Figura 7.4 – Histograma PEA da RNA Candidata 11.

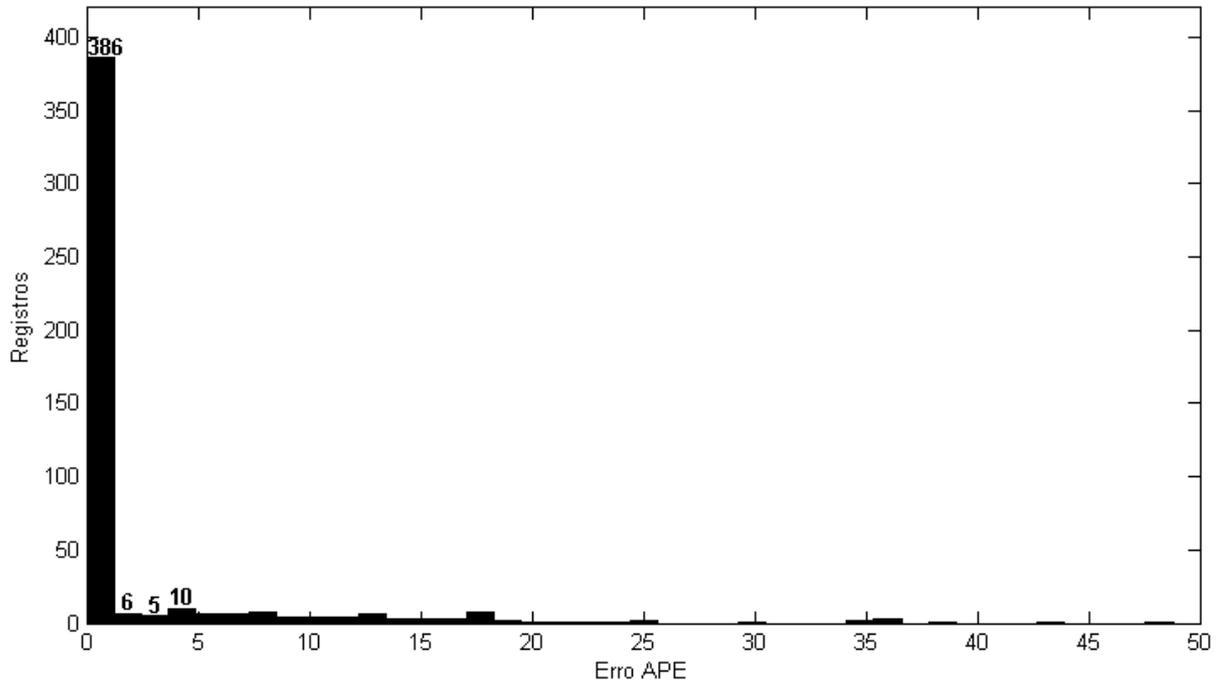


Figura 7.5 – Histograma PEA da RNA Candidata 12.

Verifica-se que o histograma PEA da RNA Candidata 12, representado pela Figura 7.5, está mais concentrado ao redor do zero do que os demais histogramas e possui 407 registros na faixa de 0 a 5%; contra 319 da RNA Candidata 9, 410 da RNA Candidata 10 e 410 da RNA Candidata 11. Por essa análise, pode-se considerar que as redes candidatas 10, 11 e 12 são equivalentes. Entretanto, a RNA Candidata 12 é um pouco superior às demais, pois, como foi dito, está mais concentrada em zero.

Para ratificar a qualidade da RNA Candidata 11, são apresentados os gráficos de dispersão das quatro RNA Candidata pré-selecionadas através da Figura 7.6, onde o eixo das abcissas (x) é representado pela Saída Real e o eixo das ordenadas (y) pela Saída Estimada. Atesta-se, também por essa análise, que a RNA Candidata 11, dentre as quatro topologias, é a que melhor traduz o comportamento da Planta de Tratamento de Gases, gerando estimativas de alumina fluoretada, a partir das entradas citadas na seção anterior, de maneira precisa, considerando que se trata de um sistema muito complexo e bastante não-linear.

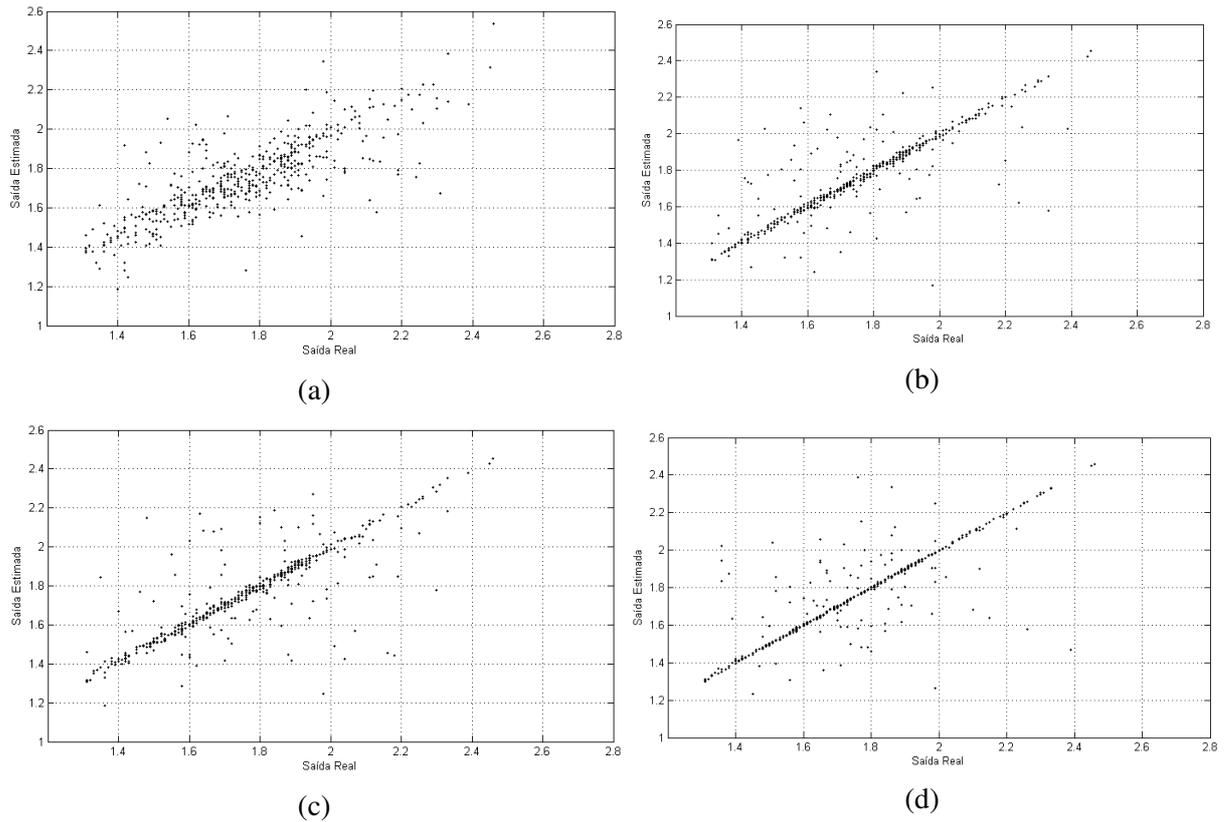


Figura 7.6 – (a) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 9. (b) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 10. (c) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 11. (d) Gráfico de Dispersão RNA Candidata 12.

Após a análise das PEA e dos Gráficos de Dispersão, constata-se que a RNA Candidata 12 é que melhor estima a porcentagem de flúor na alumina fluoretada proveniente da PTG. Porém, também sob esse aspecto, as redes 10 e 11 possuem um comportamento aceitável. Sendo assim, aliando simplicidade da Rede Neural (20 neurônios na camada escondida e cinco atrasos) e taxas de erros baixas, a RNA Candidata 10 é a RNA Definitiva e irá compor o Sensor Virtual. Segundo Silva *et al.* (2010), redes neurais com muitos neurônios na camada escondida tendem a ser sobretrainadas (*overfitting*). A Figura 7.7 mostra o esquema da RNA Definitiva.

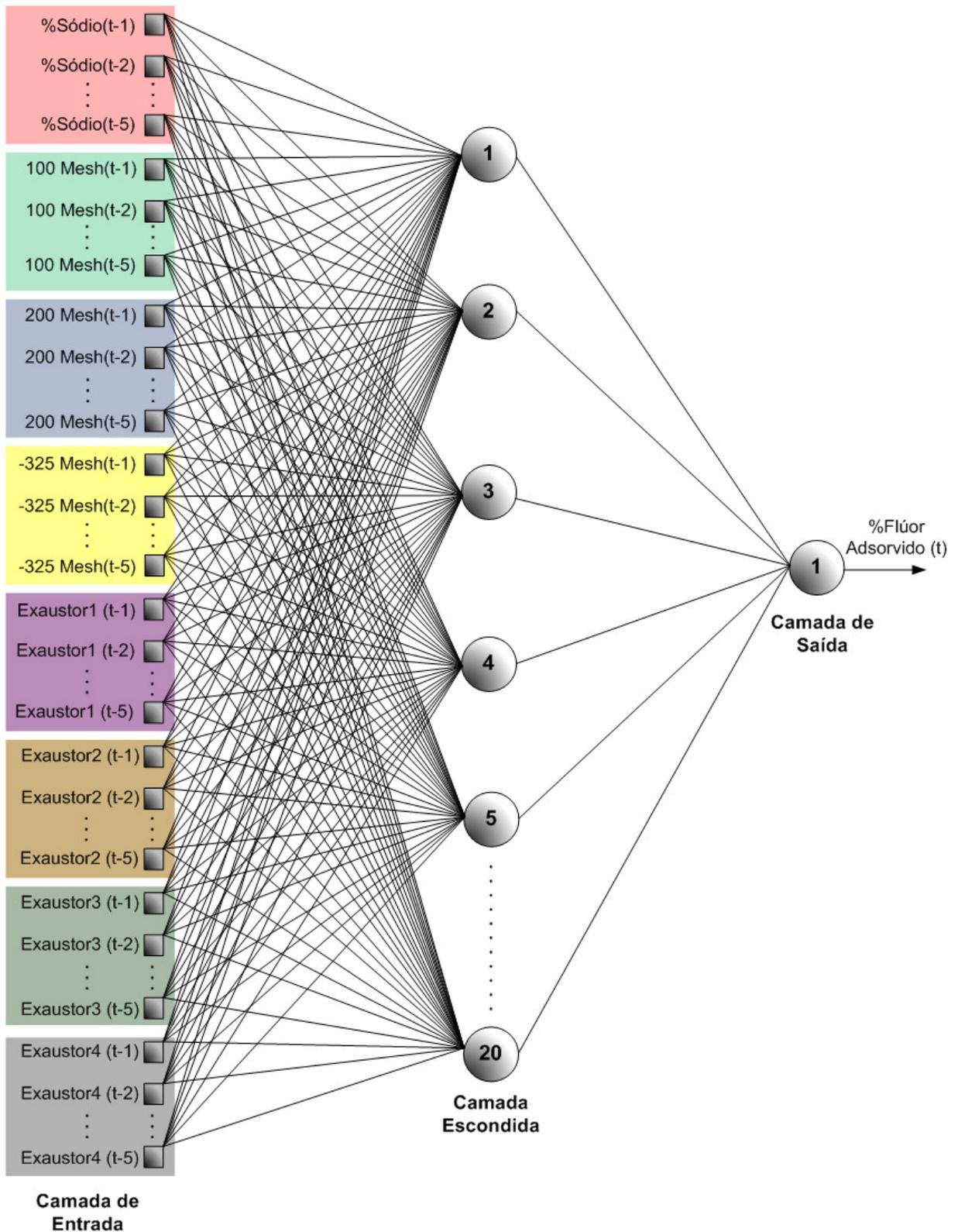


Figura 7.7 – Esquema da RNA Definitiva.

A Figura 7.8 indica o decaimento dos erros MSE de treino, validação e teste alcançados pela RNA Definitiva, destacando a época na qual o processo de treinamento atingiu o melhor resultado (para antecipada).

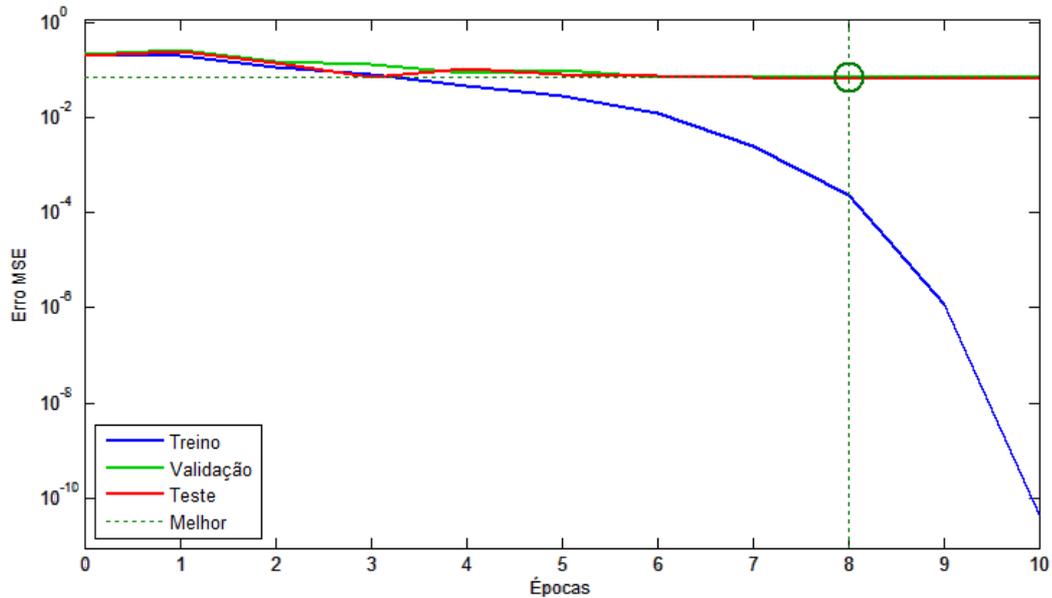


Figura 7.8 – Gráfico de erros MSE de treino, de validação e de teste da RNA Definitiva.

A comparação entre os valores de flúor adsorvido estimados pela RNA Definitiva e os valores de flúor adsorvido reais coletados em laboratório, para o conjunto de treino, pode ser encontrada na Figura 7.9(a). No gráfico citado, os dados representados por pontos são os coletados em laboratório (reais) e armazenados no banco de dados. Já os sinais de adição, simbolizam os resultados (estimados) adquiridos após o treinamento da rede.

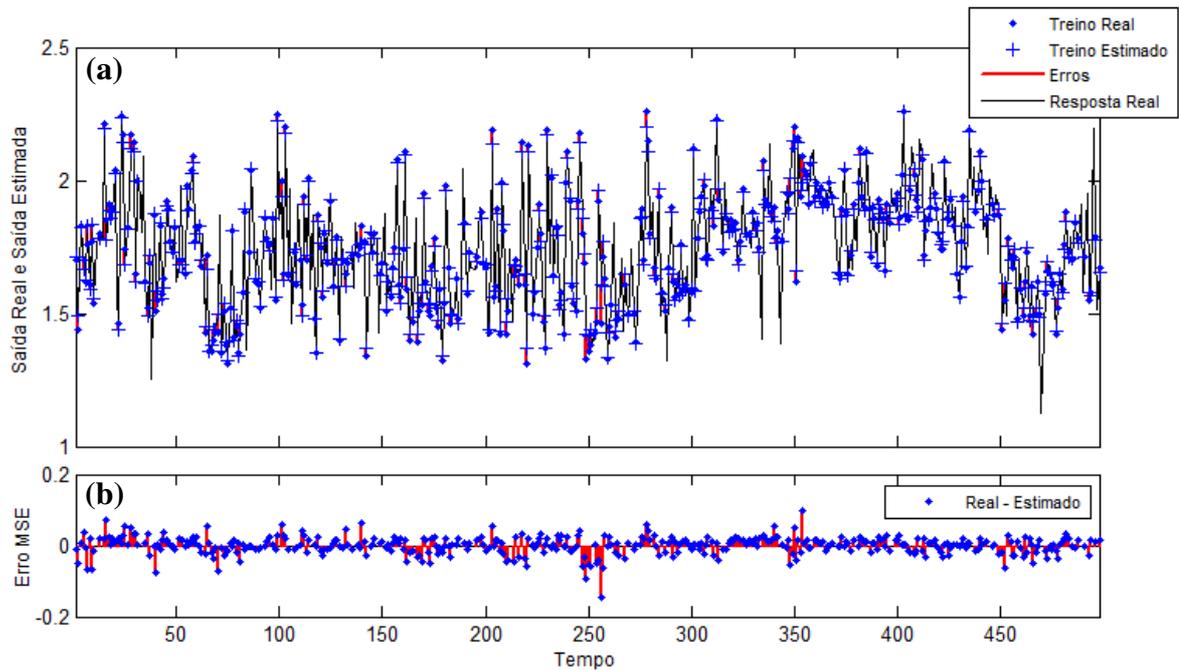


Figura 7.9 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de treino. (b) Gráfico de erro de treino.

Constata-se que, de um modo geral, o modelo neural identificado traduz de forma coerente o comportamento não-linear da PTG para este conjunto de dados, já que, como se vê na Figura 7.9(b), a margem de erro está entre 0,2 e -0,2, sendo a grande maioria dos pontos estimados em erro quase nulo.

Outra comparação entre o estimado e o real, agora analisando através dos dados de validação, pode ser verificado pela Figura 7.10(a). Percebe-se que os erros são maiores do que aqueles encontrados no conjunto de treino. Entretanto, ao analisar o gráfico de distribuição dos erros, Figura 7.10(b), constata-se que a margem de erro de todos os pontos é de aproximadamente -0,5 e 0,5.

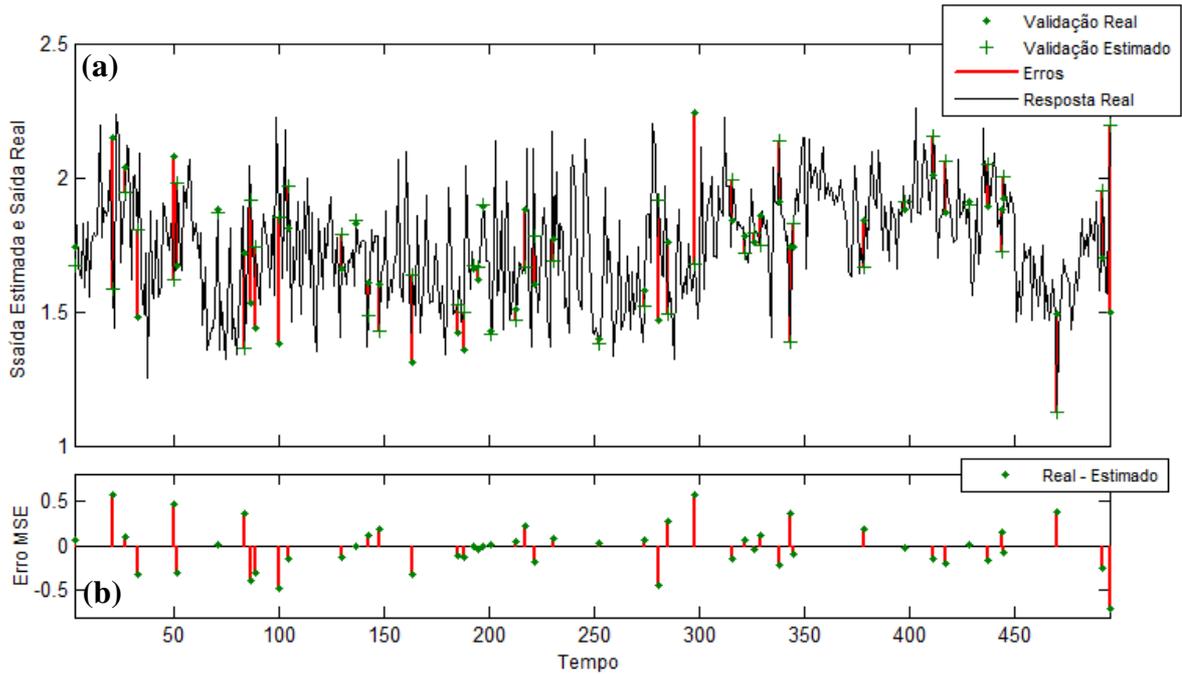


Figura 7.10 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de validação. (b) Gráfico de erro de validação.

Em relação aos dados de teste, o gráfico representado pela Figura 7.11(a) constitui a comparação entre os valores de saída estimados e os valores de saída real. Nota-se que a distribuição do erro (Figura 7.11(b)) segue praticamente a mesma distribuição dos erros de validação – intervalo entre -0,5 e 0,5.

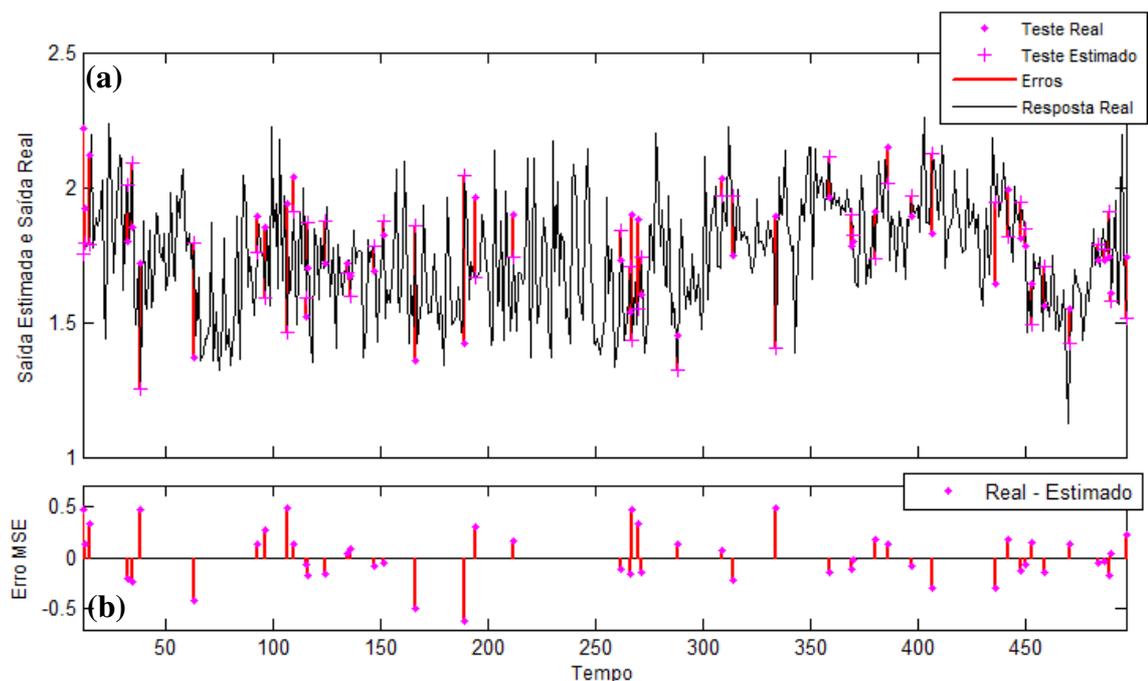


Figura 7.11 – (a) Gráfico comparativo entre os valores de saída estimados e os valores de saída real para o conjunto de dados de teste. (b) Gráfico de erro de teste.

Sabe-se que a Redução 1 é composta por quatro PTG's (vide unidade 3 deste trabalho, Figura 3.4), mas que essas quatro operam em par por causa da expansão, considerando-se, portanto, duas PTG's por Redução. Além disso, tem-se conhecimento de que os dados utilizados para o treinamento da RNA Definitiva são advindos da PTG 1.

Para atestar a generalização do modelo proposto, isto é, verificar se a RNA Definitiva produz saídas coerentes através de entradas que não foram utilizadas na fase de treinamento, registros da PTG 2 foram simulados usando a RNA Definitiva. O resultado pode ser observado na Figura 7.12. Nota-se que para aproximadamente 115 amostras, a rede conseguiu responder de maneira satisfatória, confirmando a capacidade de generalização da mesma.

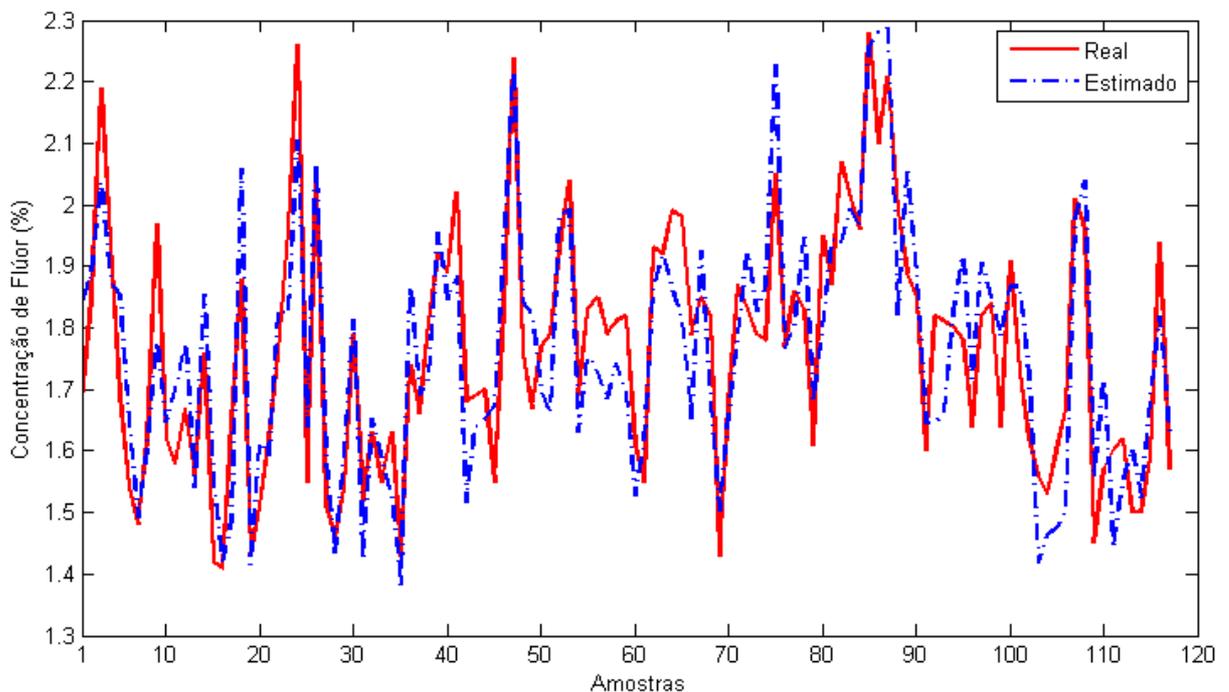


Figura 7.12 – Gráfico comparativo entre a Saída Real e a Saída Estimada, levando em consideração o conjunto de dados da PTG 2.

8. CONCLUSÃO

O presente trabalho mostra a especificação de um Sensor Virtual, construído através da técnica de Inteligência Computacional conhecida como Rede Neura Artificial, capaz de estimar a porcentagem de flúor na alumina fluoretada proveniente de uma Planta de Tratamento de Gases que captura gases poluentes oriundos dos fornos de redução de alumínio, os “lava”, produzindo alumina fluoretada (ou secundária) e expelindo gás limpo para o meio ambiente.

As análises estatísticas dos dados reais feitas previamente (pré-processamento) disponibilizados pela indústria produtora desse metal e a filtragem desses dados permitiram selecionar a melhor faixa de registros das variáveis de entrada e de saída, o que contribuiu para a precisão do Sensor Virtual.

Ao utilizar a estratégia de gerar diversas Redes Neurais com topologias diferentes, foi possível escolher, também através de análises estatísticas e do exame dos erros MSE e da PEA produzidos, o modelo que melhor estima a porcentagem de flúor adsorvido pela alumina: o modelo neural NARX com 25 neurônios na camada escondida e cinco atrasos.

Esse Sensor Virtual, uma vez disponibilizado para uso, a equipe de engenheiros da fábrica de alumínio terá uma opção rápida para simular o comportamento da Planta de Tratamento de Gases sem precisar parar a produção, o que contribui para a geração de alumina fluoretada de melhor qualidade e para a preservação dos fornos de redução de alumínio (aumentando o seu tempo de vida).

8.1 LIMITAÇÕES E DIFICULDADES

Uma das grandes limitações encaradas no trabalho foi a pouca literatura sobre aplicações de Redes Neurais em PTG's disponível para consulta, por se tratar de uma área de aplicação restrita. Tais estudos poderiam ter sido mais decisivos no início do problema, em se aplicando uma técnica já utilizada em outro trabalho similar.

A falta de tempo disponível para comparação dos resultados com outras arquiteturas também foi uma dificuldade enfrentada. O enorme tempo gasto nos treinamentos das diferentes topologias das redes foi um entrave enfrentado, uma vez que as simulações demoravam várias horas, consumindo todo o recurso computacional existente.

Além disso, há grandes chances de que o pouco número de registros existentes até então para a construção do modelo tenha afetado a precisão do Sensor Virtual. De modo que

quando mais dados forem capturados, maior a capacidade de se gerar um modelo com erros menores.

8.2 TRABALHOS FUTUROS

Como trabalhos futuros, destacam-se inúmeros outros projetos para melhorar o presente trabalho e/ou para investigar novas conclusões a respeito da estimação da porcentagem de flúor adsorvido na alumina fluoretada proveniente da PTG.

Uma possível melhoria seria utilizar outras arquiteturas de RNA, como:

- *Cascade Correlation Algorithm*: constrói uma melhor configuração de neurônios que compõem a rede de acordo com o resultado obtido (Yang & Honavar, 1991);
- *ANFIS (Adaptive Neuro-Fuzzy Inference Systems)*: algoritmo híbrido de treinamento o qual, além de se basear nos benefícios de Redes Neurais, usa conhecimento de Sistemas *Fuzzy*, representado por um modelo *fuzzy* de Sugeno e Tsukamoto para melhorar o treinamento de uma RNA (Jang, 1993);
- *FCM (Fuzzy C-Means Clustering)*: outra técnica híbrida que propõe realizar uma divisão otimizada dos dados em subconjuntos de treino, validação e teste que melhora substancialmente a generalização da RNA e sua precisão (Wu & Liu, 2009).

Outra contribuição seria correlacionar as variáveis da PTG com as variáveis de funcionamento do forno eletrolítico, como, por exemplo, a temperatura do forno, a porcentagem de flúor existente no banho químico, a porcentagem de flúor a ser adicionada, dentre outras.

Além desses projetos, outra proposta de trabalho futuro seria estudar a influência das variáveis de entrada da PTG na qualidade dos gases “limpos” expelidos pela chaminé da planta.

REFERÊNCIAS

- AGUIRRE, L. A. **Introdução à identificação de sistemas : técnicas Lineares e não-lineares aplicadas a sistemas reais**. Belo Horizonte : Ed. UFMG, 2004.
- ALBRAS, **Manual da Planta de Tratamento de Gases – Descrição das Etapas e Controle**, 2005.
- _____, **Manual da Planta de Tratamento de Gases**, vol. 1, 2001.
- _____, **Manual de Fundamentos do Processo de Produção de Alumínio Parte II**, 1999.
- BATTITI, R. **First and second order methods for learning: between steepest descent and Newton's method**. Neural Computation, vol. 4, nº 2, pp. 141-166, 1992.
- BELANI, A. **Error related performance metrics**. Matlab Central, File Exchange. Disponível em: <http://www.mathworks.com/matlabcentral/fileexchange/15130-error-related-performance-metrics>. Último Acesso: abril/2011, 2007.
- DUNN, W. C. **Fundamentals of Industrial Instrumentation and Process Control**. McGraw Hill Companies, e-Book: 0-07-146693, 2005.
- FORESEE, F. D.; HAGAN, M. T. **Gauss-newton approximation to Bayesian regularization**, Proceedings of the International Joint Conference on Neural Network, Hong Kong, China, pp. 1930-1935, 1997.
- FORTUNA, L. **Soft Sensors for Monitoring and Control of Industrial Processes**. Springer, 1ª ed, 2007.
- _____, L., GIANNONE,P.,GRAZIANI,S., XIBILIA, M.G., **Virtual Instruments Based on Stacked Neural Networks to Improve Product Quality Monitoring in a Refinery**, IEEE Instrumentation & Measurement Magazine, vol. 56, no.1, pp.95-101, 2007.
- GRJOTHEIM, K; KVANDE, H.; **Introduction to Aluminium Electrolysis Understanding the Hall-Hérout Process**, Aluminium-Verlag, 2ª edição, 1993.
- HAGAN, M. T.; DEMUTH, H. B.; BEALE, M. H. **Neural Network Toolbox Design Book User's Guide version 7**, The MathWorks Inc., 11ª release. Disponível em: http://www.mathworks.com/help/pdf_doc/nnet/nnet.pdf. Último Acesso: outubro/2010, 2010.

_____, M. T.; MENHAJ, M. B. **Training Feedforward Networks With the Marquardt Algorithm**. IEEE Transactions on Neural Networks 5 (6): 989-993, 1994.

HAGEN, M.; **New Requirements And Solutions For The Fume Treatment At Paste Mixing And Anode Baking Plants**, TMS, Light Metals, pp. 615, 2006.

HAYKIN, S. **Redes Neurais – Princípios e Práticas**. Prentice Hall, 2ª ed, 1999.

INNOCENTINI, M. D. M.; YAMAMOTO, J.; RIBEIRO, C.; PILEGGI, R. G.; RIZZI JR., A. C.; BITTENCOURT L. R. M.; RETTORE, R. P.; PANDOLFELLI, V. C. **Efeito da distribuição granulométrica na secagem de concretos refratários**, Cerâmica, vol. 47, n. 304, São Paulo, 2001.

JAMES, S.C.; LEGGE, R.L., BUDMAN, H. **On-line estimation in bioreactors: A Review**. **Reviews in Chemical Engineering**, v. 16, n. 4, pp. 311-240, 2000.

JANG, J. S. R. **ANFIS: Adaptive-Network-Based Fuzzy Inference System**, IEEE Trans. Systems, Man, Cybernetics, 23(5/6), pp. 665-685, 1993.

_____, J. S. R.; SUN, C. T.; MIZUTANI, E. **Neuro-fuzzy and soft computing: a computational approach to learning and machine intelligence**. Prentice-Hall, Upper Saddle River, New Jersey, USA, 1997.

MATLAB versão 7.11.0.584. Belém-PA, Brasil: The MathWorks Inc., 2010.

MONTGOMERY, D. C.; RUNGER, G. C.; HUBELE, N. F. **Estatística Aplicada à Engenharia**, LTC, 2ª ed., 2004.

OGATA, K. **Modern Control Engineering**. Prentice Hall, 4ª ed, 2007.

PEREIRA, V. G.; OLIVEIRA, R. C. L.; BRANCO, M. V. B. M.; CASTRO M. A. G.; SOARES, F. M. **Adição de Fluoreto em Cubas de Redução de Alumínio Utilizando Lógica Fuzzy**. Revista C&I. Controle e Instrumentação, v.116, pp. 17-25, 2006.

RASHID, R; EVISAN, S. M. M.; RADZALI, S. R.; IDRIS, A. **Software Sensor for Measuring Lactic Acid Concentration: Effect of Input Number and Node Number**.

Journal of Applied Sciences, Asian Network for Scientific Information, nº 10, v. 21, pp. 2578-2583, 2010.

SILVA, I. N.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. **Rede Neurais Artificiais: para Engenharia e Ciências Aplicadas**, Artliber, São Paulo, 1ª edição, 2010.

SILVEIRA, B. I.; VASCONCELOS, P. D. S.; SOUZA, R. S.; RODRIGUES, L. A. S. **Lavagem a seco de efluentes gasosos com alumina para a remoção de dióxido de enxofre**, XIII SIMPEP, Bauru, SP, Brasil, Anais XIII, 2006.

SINELNIKOV, V. V.; LAPAEV I. I.; NIKANDROV K. F.; **Neural Network in Coke Calcining Computer Process Control System**, TMS, Light Metals, pp. 559, 2006.

SOARES, F. M. **Aplicação De Sensores Virtuais Na Inferência Da Temperatura De Banho No Processo De Fabricação De Alumínio Primário**, Dissertação de Mestrado – Universidade Federal do Pará – Belém-PA, 2009.

_____, F. M.; OLIVEIRA, R. C. L. **Inferência de temperatura de Fornos de Redução de Alumínio Primário através de Sensores Virtuais**, Learning and Nonlinear Models – Revista da Sociedade Brasileira de Redes Neurais (SBRN), v. 8, nº 1, pp. 41-51, 2010.

_____, F. M. **Desenvolvimento de Modelos Neuro-Adaptados para Propagação de Ondas em Florestas**. Trabalho de Conclusão de Curso para obtenção do diploma de Engenheiro de computação, Universidade Federal do Pará, 2006.

WU, X. X.; LIU, J. G. **A New Early Stopping Algorithm For Improving Neural Network Generalization**. Second International Conference on Intelligence Computation Technology and Automation, IEEE Computer Society, 2009.

YANG, J.; HONAVAR, V. **Experiments with the cascade-correlation algorithm**. IEEE International Joint Conference on Neural Networks, pp. 2428-2433, vol. 3, 1991.

ZADEH, L. **Fuzzy logic, neural networks and soft computing**. Proceedings of the 2nd International Conference on Fuzzy Logic and Neural Networks, Iizuka, Japan, pp. 13-14, 1992.

ZANATA, D. R. P. **Desenvolvimento de Sensor Virtual Empregando Redes Neurais para Medição da Composição em uma Coluna de Destilação**, Dissertação de Mestrado Escola Politécnica da USP, 2005.

ZYNGIER, D.; ARAUJO, O. Q. F.; LIMA, E. L. **Soft sensors with white- and black-box approaches for a wastewater treatment process**. Braz. J. Chem. Eng., São Paulo, v. 17, pp. 4-7. Disponível em: http://www.scielo.br/scielo.php?script=sci_arttext&pid=S0104-66322000000400008&lng=en&nrm=iso. Último Acesso: outubro/2010, 2000.

APÊNDICE A - CÓDIGO-FONTE ESCRITO EM MATLAB PARA CALCULAR A REGRA 3SIGMA E ELIMINAR DADOS FORA DA DISTÂNCIA ESTABELECIDADA.

```

load dadosSemNaN.mat

altura = size(dadosSemNaN,1);
largura = size(dadosSemNaN,2);

%Distância Ponderada (3sigma)
medias = [];
desvioPad = [];
for i=1:largura
    medias = [medias mean(dadosSemNaN(:,i)')];
    desvioPad = [desvioPad std(dadosSemNaN(:,i)')];
end

indSigma = [];
for i=1:largura
    for j=1:altura
        d = (dadosSemNaN(j,i)-medias(i))/desvioPad(i);
        if abs(d) >= 3
            indSigma = [indSigma j];
        end
    end
end

indSigma = sort(indSigma);
indSigma

indSigmaDif = [];

%Exclui índices iguais:
indSigmaDif = unique(indSigma);
%Mostra índices que serão excluídos:
indSigmaDif

%Removendo d >= 3
for i=1:length(indSigmaDif)
    if i>1

```

```
        dadosSemNaN(indSigmaDif(i)-(i-1), :) = [];  
    else  
        dadosSemNaN(indSigmaDif(i), :) = [];  
    end  
end  
end  
  
dadosTresSigma = dadosSemNaN;  
load dadosSemNaN.mat  
save dadosTresSigma dadosTresSigma
```

APÊNDICE B – CÓDIGO-FONTE DO PROGRAMA FEITO EM MATLAB PARA CONSTRUIR AS REDES NEURAIIS CANDIDATAS

```

% Solve an Autoregression Problem with External Input with a NARX Neural
Network
%
% This script assumes these variables are defined:
%
%  entrada_1 - input time series.
%  saida_1 - feedback time series.

load entradas.mat %sódio, mesh100, mesh200, mesh325, exaustor1, exaustor2,
exaustor3, exaustor4
load saida.mat    %porcentagem de flúor adsorvido

inputSeries = tonndata(entradas,false,false);
targetSeries = tonndata(saida,false,false);

flag1 = 1;
atraso = 3;
nce = 5;
while flag1 <= 12
    flag1;
    % Create a Nonlinear Autoregressive Network with External Input
    inputDelays = 1:atraso;
    feedbackDelays = 1:atraso;
    hiddenLayerSize = nce
    net = narxnet(inputDelays,feedbackDelays,hiddenLayerSize);

    if flag1 >= 6 && nce == 30
        atraso = 5;
        nce = 0;
    end

    flag2 = 0;
    flag3 = 0;
    vetorPerformance = [];
    while flag2 < 60
        flag2;

```

```

% Choose Input and Feedback Pre/Post-Processing Functions
% Settings for feedback input are automatically applied to feedback
output
% For a list of all processing functions type: help nprocess
% Customize input parameters at: net.inputs{i}.processParam
% Customize output parameters at: net.outputs{i}.processParam
net.inputs{1}.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};
net.inputs{2}.processFcns = {'removeconstantrows','mapminmax'};

% Prepare the Data for Training and Simulation
% The function PREPARETS prepares timeseries data for a particular
network,
    % shifting time by the minimum amount to fill input states and
layer states.
    % Using PREPARETS allows you to keep your original time series data
unchanged, while
    % easily customizing it for networks with differing numbers of
delays, with
    % open loop or closed loop feedback modes.
[inputs,inputStates,layerStates,targetSeries] =
preparets(net,inputSeries,{},targetSeries);

% Setup Division of Data for Training, Validation, Testing
% The function DIVIDERAND randomly assigns target values to
training,
% validation and test sets during training.
% For a list of all data division functions type: help nndivide
net.divideFcn = 'dividerand'; % Divide data randomly
% The property DIVIDEMODE set to TIMESTEP means that targets are
divided
% into training, validation and test sets according to timesteps.
% For a list of data division modes type: help
nntype_data_division_mode
net.divideMode = 'value'; % Divide up every value
net.divideParam.trainRatio = 80/100;
net.divideParam.valRatio = 10/100;
net.divideParam.testRatio = 10/100;

% Choose a Training Function
% For a list of all training functions type: help nntain
% Customize training parameters at: net.trainParam

```

```

net.trainFcn = 'trainlm'; % Levenberg-Marquardt

% Choose a Performance Function
% For a list of all performance functions type: help
nnperformance
% Customize performance parameters at: net.performParam
net.performFcn = 'mse'; % Mean squared error

net.trainParam.showWindow = 0;

% Choose Plot Functions
% For a list of all plot functions type: help nnplot
% Customize plot parameters at: net.plotParam
net.plotFcns = {'plotperform','plottrainstate','plotresponse',
...
               'ploterrcorr','plotinerrcorr','ploterrhist'};

% Train the Network
[net,tr] = train(net,inputs,targets,inputStates,layerStates);

% Test the Network
outputs = net(inputs,inputStates,layerStates);
errors = gsubtract(targets,outputs);
performance = perform(net,targets,outputs);

% Recalculate Training, Validation and Test Performance
trainTargets = gmultiply(targets,tr.trainMask);
valTargets = gmultiply(targets,tr.valMask);
testTargets = gmultiply(targets,tr.testMask);
trainPerformance = perform(net,trainTargets,outputs);
valPerformance = perform(net,valTargets,outputs);
testPerformance = perform(net,testTargets,outputs);

% View the Network
%view(net)
%Save workspace
if performance < 0.08
    vetorPerformance = [vetorPerformance performance];
    minPerformance = min(vetorPerformance)
    if performance == minPerformance

```

```
        if exist('savefileVet', 'var') == 1 && flag3 == 1
            delete(savefileVet)
        end
        performanceStr = strrep(num2str(performance), '0.',
''');
        savefileVet = ['melhorRNA' int2str(flag1) '_'
performanceStr '.mat'];
        save(savefileVet)
        disp('salvo!')
        flag3 = 1;
    end
    end
    flag2 = flag2 + 1;
end
min(vetorPerformance)
flag1 = flag1 + 1;
nce = nce + 5;
end
```

ANEXO I – ROTINA DESENVOLVIDA EM MATLAB PARA CALCULAR A PORCENTAGEM DE ERRO ABSOLUTO (PEA) DISPONIBILIZADA POR BELANI (2007).

```
function V=errperf(T,P,M)

%ERRPERF Determine various error related performance metrics.
%
% ERRPERF(T,P,M) uses T and P, which are target and prediction vectors
% respectively, and returns the value for M, which is one of several error
% related performance metrics.
%
% T and P can be row or column vectors of the same size. M can be one of
% the following performance metrics:
%
% mae (mean absolute error)
% mse (mean squared error)
% rmse (root mean squared error)
%
% mare (mean absolute relative error)
% msre (mean squared relative error)
% rmsre (root mean squared relative error)
%
% mape (mean absolute percentage error)
% mspe (mean squared percentage error)
% rmspe (root mean squared percentage error)
%
% EXAMPLE:
%
% rand('state',0)
%
% T = [0:0.2:1]
% P = rand(size(T)).*T
%
% errperf(T,P,'mae') returns 0.1574
%
% To compute the relevant performance metric, the function uses recursion
% to first compute one or more error vectors. The function can therefore
% secondarily be used to compute these error vectors. M can therefore also
% be one of the following:
```

```

%
% e (errors)
% ae (absolute errors)
% se (squared errors)
%
% re (relative errors)
% are (absolute relative errors)
% sre (squared relative errors)
%
% pe (percentage errors)
% ape (absolute percentage errors)
% spe (squared percentage errors)
%
% REMARKS:
%
% - The Neural Network Toolbox also has functions to compute mae and mse.
%   This function does not make use of the toolbox.
%
% - Percentage error equals relative error times 100.
%
% - The abbreviations used in the code, and the calculation tree are
%   documented in a comments section within the file.
%
% VERSION: 20070703
% MATLAB VERSION: 7.4.0.287 (R2007a)
% LICENSE: As-is; public domain
%
% See also MAE, MSE.

%{
VERSION HISTORY:
20070703: - Added MATLAB version check.
20070606: - Added support for metrics MARE, MSRE, and RMSRE.
           - Addressed a possible division by zero condition in calculating
             relative and percentage errors.
20070528: - Original version.

KEYWORDS:
perf, performance, metric, performance measure, machine learning
%}

```

```
%% Comments
```

```
%{
```

```
Abbreviations:
```

```
a: absolute
```

```
e: error(s)
```

```
M: METRIC
```

```
m: mean
```

```
P: PREDICTIONS
```

```
p: percentage
```

```
r: relative (if before e)
```

```
r: square root (if before m)
```

```
s: squared
```

```
T: TARGETS
```

```
V: VALUE(S)
```

```
Calculation tree:
```

```
e
```

```
|
```

```
|-ae-mae
```

```
|
```

```
|-se-mse-rmse
```

```
|
```

```
|-re-pe
```

```
  | |
```

```
  | |-ape-mape
```

```
  | |
```

```
  | |-spe-mspe-rmspe
```

```
  |
```

```
  |-are-mare
```

```
  |
```

```
  |-sre-msre-rmsre
```

```
%}
```

```
%% Check MATLAB version
```

```

if datenum(version('-date'))<datenum('29-Jan-2007')
    error(['The MATLAB version in use is ',version('-release'),'.' ' ',...
          'This function requires at least version 2007a.'])
end

%% Parse and validate input

Inputs=inputParser;

Inputs.addRequired('T',@(x) isnumeric(x) && ndims(x)==2 && ...
                  (size(x,1)==1 || size(x,2)==1));
Inputs.addRequired('P',@(x) isnumeric(x) && ndims(x)==2 && ...
                  (size(x,1)==1 || size(x,2)==1));
Inputs.addRequired('M',@(x) ischar(x) && ~isempty(x));

Inputs.parse(T,P,M);
clear Inputs

assert(isequal(size(T),size(P)),'T and P must have the same size.')

%% Transform input

M=lower(M);

%% Compute metric

switch M

    % Errors
    case 'e'

        V=T-P;

    % Absolute errors
    case 'ae'

        Ve=errperf(T,P,'e');
        V=abs(Ve);

```

```
% Mean absolute error
case 'mae'

    Vae=errperf(T,P,'ae');
    V=mean(Vae);

% Squared errors
case 'se'

    Ve=errperf(T,P,'e');
    V=Ve.^2;

% Mean squared error
case 'mse'

    Vse=errperf(T,P,'se');
    V=mean(Vse);

% Root mean squared error
case 'rmse'

    Vmse=errperf(T,P,'mse');
    V=sqrt(Vmse);

% Relative errors
case 're'

    assert(all(T),'All elements of T must be nonzero.')
    Ve=errperf(T,P,'e');
    V=Ve./T;

% Absolute relative errors
case 'are'

    Vre=errperf(T,P,'re');
    V=abs(Vre);
```

```
% Mean absolute relative error
case 'mare'

    Vare=errperf(T,P,'are');
    V=mean(Vare);

% Squared relative errors
case 'sre'

    Vre=errperf(T,P,'re');
    V=Vre.^2;

% Mean squared relative error
case 'msre'

    Vsre=errperf(T,P,'sre');
    V=mean(Vsre);

% Root mean squared relative error
case 'rmsre'

    Vmsre=errperf(T,P,'msre');
    V=sqrt(Vmsre);

% Percentage errors
case 'pe'

    Vre=errperf(T,P,'re');
    V=Vre*100;

% Absolute percentage errors
case 'ape'

    Vpe=errperf(T,P,'pe');
    V=abs(Vpe);

% Mean absolute percentage error
case 'mape'
```

```
Vape=errperf(T,P,'ape');
V=mean(Vape);

% Squared percentage errors
case 'spe'

    Vpe=errperf(T,P,'pe');
    V=Vpe.^2;

% Mean squared percentage error
case 'mspe'

    Vspe=errperf(T,P,'spe');
    V=mean(Vspe);

% Root mean squared percentage error
case 'rmspe'

    Vmspe=errperf(T,P,'mspe');
    V=sqrt(Vmspe);

otherwise

    error('M is invalid.')

end
```