

Aplicação de Redes Neurais Artificiais em Simulação e Controlo de Processos Químicos

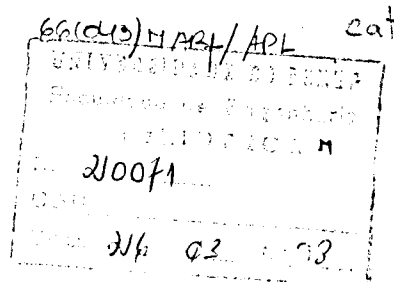
Fernando Gomes Martins

Tese de Doutoramento apresentada
à Faculdade de Engenharia
da Universidade do Porto

Departamento de Engenharia Química
Faculdade de Engenharia
Universidade do Porto

Outubro de 1997

DED.
FEUP



Tese de Doutoramento orientada por

Manuel Álvaro Neto Coelho

Professor Auxiliar

Departamento de Engenharia Química

Faculdade de Engenharia

Universidade do Porto

RESUMO

Este trabalho tem como objectivos principais o estudo da aplicação de redes neuronais artificiais em engenharia química e a análise da dualidade controlo/eficiência energética na operação por partida de reactores químicos.

Na primeira parte deste estudo faz-se uma descrição geral da metodologia das redes neuronais artificiais, apresentando-se as suas origens e as suas principais aplicações. É dada relevância à aplicação deste tipo de estruturas a diferentes áreas de engenharia química. As principais vantagens e desvantagens da sua utilização são sucintamente descritas.

Neste sentido, três problemas clássicos de engenharia química foram modelizados recorrendo a esta metodologia. Os resultados obtidos de várias simulações efectuadas foram comparados com os que se obtiveram com a resolução dos modelos baseados nos princípios físico-químicos. A facilidade de adaptação desta técnica aos problemas analisados permite concluir que se trata de uma forma de modelização eficaz e bastante poderosa em sistemas não-lineares.

A segunda parte concentra-se no problema do controlo/eficiência energética em processos de reacção por partidas. Duas configurações de transferência de calor de reactores químicos são analisadas sob o ponto de vista de controlo e eficiência energética do processo. Este estudo realizou-se em várias fases. Numa primeira fase, o controlo dos processos foi realizado através da implementação de controladores proporcional-integral-derivativos (PIDs). Várias conclusões são tiradas desta análise, sendo a mais relevante o facto de se poder encontrar processos que sejam energeticamente mais eficientes, sem aumento significativo, da complexidade dos sistemas de controlo clássicos.

No sentido de encontrar mecanismos de controlo mais eficientes, estudou-se o efeito da alteração de trajectórias de referência previamente definidas, a incorporar no sistema de controlo. As trajectórias de referência para os controladores (PIDs) pré-estabelecidas, antes do ciclo de reacção, foram continuamente reajustadas pela utilização de uma rede neuronal artificial. Utiliza-se uma rede neuronal artificial para prever o valor futuro da variável controlada (temperatura da reacção) face a medidas momentâneas de algumas variáveis do processo e às trajectórias de referência reais, sendo o seu valor usado para calcular novas trajectórias de referência que são incorporadas no sistema de controlo. Os resultados obtidos com este estudo mostraram-se muito promissores, uma vez que foram obtidos melhores desempenhos dos controladores (em termos de seguimento das trajectórias de referência reais), sem que a configuração base do sistema de controlo fosse alterada.

Por último, testou-se a utilização de controladores neuronais artificiais, em substituição das técnicas de controlo atrás enunciadas. O objectivo era encontrar outras metodologias de controlo que permitissem o seguimento de processos de reacção descontínuos com maior eficiência. Os resultados obtidos para os processos em análise apresentaram a existência de bons desempenhos destas estruturas no controlo dos processos. No entanto, os resultados demonstram claramente que o grau de adaptação destes controladores está directamente relacionado com os dados existentes durante a fase de treino das estruturas neuronais artificiais.

Palavras chave: *redes neuronais artificiais, fase de aprendizagem, fase de validação, reactores descontínuos, análise controlo/eficiência energética, trajectórias de referência, controladores neuronais artificiais.*

ABSTRACT

The main objectives of this work are the study of the application of artificial neural networks in chemical engineering and the analysis of the dual effect control/energy-efficiency in batch chemical reactors.

The first part of this study presents a general description of artificial neural networks methodology, showing the origins and the broad areas of interest. The application of this kind of structures to different fields in chemical processes are explored. The main advantages and disadvantages of process modeling by artificial neural networks are reported.

Three classical problems from the chemical process engineering were modelled by an artificial neural network approach. Several simulations were performed and the results were compared with those obtained from theoretical models based in physico-chemical principles. In the case studies considered, the adaptation characteristics of the neural architectures allows to conclude that this type of structures are powerful and efficient mathematical models to describe non-linear systems.

The second part is concerned with problem of the control/energy-efficiency in batch reaction processes. Two configurations for the heat transfer process in batch reactors were analysed in terms of process control and energy efficiency. This study was developed in several phases. In the first part, the control system was based in proportional-integral-derivative (PID) controllers. The principal conclusion achieved is the possibility to enhance the process energy-efficiency without a significant increase in the control system complexity.

In order to find more efficient control techniques, a new approach is developed. Setpoint trajectories, previously defined, are changed during the reaction evolution. These variables were forecasted through an artificial neural network model. The output of the artificial neural network was the future value of the final control variable (temperature of the reaction) predicted from the instantaneous on-line process measurements and real values of the setpoint trajectories. The results obtained with this approach shows that better control performance were achieved without significant changes in the standard configuration of the control system.

In the last part of this study, artificial neural controllers were used to control the heat transfer process in batch chemical reactors. The objective was to develop new methodologies to control batch reaction temperature evolution. The simulation results obtained with this approach were compared with results from the PID based cascade control system. The technique developed shows good results in terms of reaction temperature control. However it was demonstrated that the adaptation characteristics of these controllers are intrinsically related with the process data used in the learning phase of the artificial neural network structures.

Keywords: artificial neural networks, learning phase, validation phase, batch reactors, analysis control/energy-efficiency, setpoint trajectories, artificial neural controllers.

RÉSUMÉ

Ce travail a comme objectifs principaux l'étude de l'application de réseaux neuronaux artificiels en génie chimique et l'analyse de la dualité contrôle/efficacité énergétique dans l'opération discontinue de réacteurs chimiques.

Dans la première partie de cet étude on fait une description générale de la méthodologie des réseaux neuronaux artificiels, présentant leurs origines et les applications principales. On donne de l'importance à l'application de ce genre de structures à différents domaines de la génie chimique. Les avantages et désavantages principaux de son utilisation sont succinctement décrits.

Dans ce sens, trois problèmes classiques de la génie chimique ont été modélisés en utilisant cette méthodologie. Les résultats obtenus de plusieurs simulations faits ont été comparés avec ceux qui étaient obtenus par la résolution des modèles établis à partir des respectives bases physiques et chimiques. La facilité d'adaptation de cette technique à des problèmes analysés permet conclure que c'est une technique de modélisation efficace et très puissante dans les systèmes non-linéaires.

La deuxième partie se concentre sur le problème du contrôle/efficacité énergétique dans les procédés de réaction par étapes. Deux configurations de transfert de chaleur en réacteurs ont été analysées sur le point de vue de contrôle/efficacité énergétique du procédé. L'étude était faite en plusieurs phases. Dans une première phase, le contrôle des procédés était fait par la mise en œuvre de contrôleurs proportionnel-intégral-dérivatif (PID). Plusieurs conclusions sont tirées de cette analyse, étant la plus importante le fait d'avoir pu trouver des procédés qui soient énergétiquement plus efficaces sans augmenter significativement la complexité des systèmes de contrôle classiques.

Avec le but de trouver des mécanismes de contrôle plus efficaces, on a étudié l'effet du changement de trajectoires de référence déjà définies. Les trajectoires de référence pour les contrôleurs (PID) établies avant le cycle de réaction étaient prévues d'une forme continue par l'utilisation d'un réseau neuronal artificiel. On utilise un réseau neuronal artificiel pour prévoir la valeur future de la variable de contrôle (température de réaction) en considérant les mesures du moment du procédé et les trajectoires de référence réelles, en utilisant sa valeur pour changer les trajectoires de référence. Les résultats obtenus avec cette étude étaient très prometteurs parce que l'on a obtenu de meilleures performances des contrôleurs sans avoir modifiée la configuration de base du système de contrôle.

Cette étude était terminée avec l'usage de contrôleurs neuronaux artificiels en remplacement des techniques de contrôle déjà énoncées. L'objectif était de trouver d'autres méthodologies de contrôle qui permettaient de suivre des procédés de réaction discontinus avec une plus grande efficacité. Les résultats obtenus pour les procédés analysés présentent l'existence de bonnes performances de ces structures dans le contrôle des procédés, cependant on veut dire que le degré d'adaptation de ces contrôleurs, est directement lié avec les données existantes pendant l'apprentissage de ces structures.

Mots clés: *réseaux neuronaux artificiels, phase d'apprentissage, phase de validation, réacteurs discontinus, analyse contrôle/efficacité énergétique, trajectoires de référence, contrôleurs neuronaux artificiels*

Em especial à Paula

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos os que de algum modo contribuíram para a realização deste estudo, no entanto, para que esta tese não se restrinja aos agradecimentos, vou salientar apenas aquelas pessoas e entidades que tiveram uma prestação mais activa neste trabalho.

Em primeiro lugar queria agradecer, ao Prof. Manuel Coelho, meu supervisor, pela sua ajuda e empenho na evolução deste trabalho. Ele esteve sempre a meu lado para ultrapassar os obstáculos que de vez em quando apareciam.

Em segundo lugar, agradeço ao Laboratório de Sistemas de Processos (Prof. Sebastião Feyo e seus colaboradores) e ao Centro de Informática Prof. Correia de Araújo - CICA (Dra Lúcia Ribeiro e seus colaboradores) pelas facilidades concedidas tanto em equipamento informático, como pelas suas intervenções na minha formação, as quais se repercutiram na evolução do meu trabalho.

Em terceiro lugar, agradeço à Companhia Industrial de Resinas Sintéticas, s. a., (CIRES) pela cedência de dados que constituíram o objecto e a base deste estudo.

Em quarto lugar, agradeço à Junta Nacional de Investigação Científica e Tecnológica (JNICT), entidade que me concedeu uma bolsa de doutoramento através dos programas Ciência e Praxis XXI, sem a qual este trabalho dificilmente se realizaria.

Em quinto lugar, agradeço a todos os meus amigos, sem focar nomes, para não ser demasiado extensivo, que me incentivaram e tiveram a paciência suficiente para me aturar.

Por fim, um especial agradecimento, vai para a minha tia Custódia e meus primos, Reinaldo, Iracema, Agostinho, São, Augusto, Marília, Jorge, Ana Sofia e João. Sem eles nada disto teria sido possível.

Índice

1	Introdução	9
1.1	Motivação	10
1.2	Organização da tese	11
I	Modelização e Simulação de Processos Químicos por Redes Neurais Artificiais	14
2	Redes Neurais Artificiais. Generalidades	15
2.1	Introdução	16
2.2	Origens das redes neurais artificiais	16
2.3	Redes neurais biológicas	17
2.3.1	O neurónio	17
2.3.2	Comunicações entre neurónios	18
2.3.3	Redes de neurónios	18
2.3.4	Interacção entre arquitecturas neuronais	18
2.3.5	Aprendizagem das redes neurais biológicas	19
2.4	Redes neurais artificiais	19
2.4.1	O neurónio artificial	20
2.4.2	Arquitecturas neuronais artificiais	23
2.4.3	Aprendizagem das redes neurais artificiais	24
2.5	Tipos de redes neurais artificiais	24
2.5.1	Redes neurais directas	24
2.5.2	Redes neurais recorrentes	25
2.6	Conclusões	26
2.7	Referências	27
3	Redes Neurais Artificiais. Aplicação à Engenharia Química	28
3.1	Introdução	29
3.2	Aplicações à engenharia química	30
3.2.1	Modelização e simulação de processos	30
3.2.2	Controlo de processos químicos	31

3.2.3	Detecção e diagnóstico de falhas nos processos	32
3.2.4	Optimização de processos químicos	33
3.3	Vantagens e limitações do uso de redes neuronais artificiais em engenharia química	33
3.4	Redes neuronais artificiais não-lineares directas (RNANLDs)	35
3.5	Casos estudados	37
3.5.1	Caso 1 - Estudos de dispersão em dois tanques agitados em série	37
3.5.2	Caso 2 - Determinação da conversão num reactor tubular com dispersão axial	41
3.5.3	Caso 3 - Determinação da conversão num reactor de polimerização descontínuo	45
3.6	Conclusões	48
3.7	Referências	49

II Modelização, Simulação e Controlo de Reactores

Descontínuos

4	Reactores Descontínuos. Análise Controlo/Eficiência Energética	54
4.1	Introdução	55
4.2	Descrição dos sistemas	55
4.3	Controlo/eficiência energética dos processos	58
4.4	Implementação do controlo clássico (PIDs)	59
4.5	Modelo de simulação para as duas configurações e para os controladores	62
4.6	Resultados e discussão	68
4.7	Conclusões	73
4.8	Referências	74
5	Reactores Descontínuos. Estratégia Para Aperfeiçoamento do Controlo Clássico	75
5.1	Introdução	76
5.2	Controlo de reactores descontínuos. Conhecimento actual	77
5.3	Metodologia de controlo proposta	78
5.4	Resultados e discussão	79
5.5	Conclusões	89
5.6	Referências	89

6	Reactores Descontínuos. Aplicação de Controladores Neurais Artificiais	91
6.1	Introdução	92
6.2	Uso de redes neurais artificiais no controlo de processos	92
6.2.1	Aplicações	93
6.2.2	Estrutura dos controladores neurais artificiais	93
6.2.3	Treino de controladores neurais artificiais	94
6.2.4	Controlo adaptativo com redes neurais artificiais	95
6.3	Estratégia de controlo proposta	95
6.4	Caso de estudo e discussão	96
6.5	Conclusões	106
6.6	Referências	106
7	Conclusões Gerais e Sugestões para Trabalho Futuro	107
7.1	Conclusões Gerais	108
7.2	Sugestões para trabalho futuro	110
7.2.1	Redes neurais artificiais	110
7.2.2	Reactores descontínuos	111
	Apêndice A - Algoritmo de Retro-propagação de Erros	112
	Apêndice B - Algoritmo Simplex	116
	Apêndice C - Modelo Convencional Para o Estudo da Dispersão em Dois Tanques Agitados em Série	119
	Apêndice D - Modelo Convencional Para a Conversão Num Reactor Tubular Catalítico Com Dispersão Axial	121
	Apêndice E - Modelo da Conversão Num Reactor de Polimerização Por Partidas	125
	Apêndice F - Resultados de Simulações Efectuadas Para as Duas Configurações de Transferência de Calor de Reactores Descontínuos	130
	Nomenclatura	134

Lista de Tabelas

3.1	Treino de várias configurações de rede com o algoritmo simplex	39
3.2	Resultados da validação das estruturas neuronais artificiais	40
3.3	Treino de estruturas neuronais artificiais com o algoritmo de retro-propagação de erros	40
3.4	Treino de redes neuronais artificiais com o algoritmo simplex	42
3.5	Resultados de treino com o algoritmo de retro-propagação de erros	42
3.6	Estudo de várias configurações de rede pelo algoritmo simplex	46
3.7	Resultados do treino com o algoritmo de retro-propagação de erros (função de transferência - sigmóide)	47
4.1	Valores dos parâmetros dos controladores para a configuração de transferência de calor representada na Figura 4.1	61
4.2	Parâmetros dos sistemas de reacção	64
5.1	Treino de redes neuronais artificiais para os dois sistemas	84
E.1	Valores de parâmetros experimentais para a reacção de polimerização do cloreto de vinilo	129

Lista de Figuras

1.1	Organigrama da tese	12
2.1	Neurónio biológico	17
2.2	Estrutura básica do neurónio artificial	20
2.3	Rede neuronal artificial directa	24
2.4	Rede neuronal de <i>Hopfield</i>	26
3.1	Rede neuronal artificial não-linear directa	35
3.2	Dados utilizados na fase de treino da rede neuronal artificial	38
3.3	Dados utilizados na fase de validação da estrutura neuronal artificial para o sistema apresentado na Figura C.1 - Apêndice C	39
3.4	Dados utilizados no treino da rede neuronal artificial para o estudo da conversão no reactor tubular	41
3.5	Validação da rede neuronal artificial - Situações de interpolação relativamente aos dados usados no treino	43
3.6	Validação da rede neuronal artificial - Situações de extrapolação relativamente aos dados usados no treino	44
3.7	Erros relativos (%) para as situações de interpolação	44
3.8	Erros relativos (%) para as situações de extrapolação	45
3.9	Dados para treino da rede neuronal artificial para a previsão da conversão em função do tempo num reactor de polimerização	46
3.10	Validação da rede neuronal artificial para a conversão no reactor de polimerização - Situações de interpolação	47
3.11	Validação da rede neuronal artificial para a conversão no reactor de polimerização - Situações de extrapolação	48
4.1	Configuração tradicional de transferência de calor em reactores encamisados	57
4.2	Configuração alternativa para o processo de transferência de calor	57
4.3	Diagrama de blocos para os sistemas de transferência de calor	60

4.4	Estrutura de resolução do modelo para a configuração com injeção de água refrigerada	66
4.5	Estrutura de resolução do modelo do processo para a configuração com injeção de água refrigerada e permutador de calor	67
4.6	Evolução da temperatura da reacção depois de uma variação brusca de 2°C no valor de referência da temperatura da reacção	68
4.7	Evolução do caudal de água refrigerada injectada para as duas configurações e perfil de caudal de água que atravessa o permutador de calor para a configuração B	69
4.8	Valores da temperatura da água na entrada e na saída da camisa observadas em ambas as situações	69
4.9	Comparação entre a evolução do calor de reacção (H_r), pré-estabelecida e os valores de calor efectivamente transferido para a camisa do reactor (H_t), obtidos por simulação	70
4.10	Evolução da temperatura da reacção para as duas configurações	71
4.11	Temperatura da água à entrada e à saída da camisa do reactor (configuração A)	71
4.12	Influência da temperatura ambiente no consumo de água refrigerada	72
4.13	Razão entre o calor trocado no permutador de calor e o calor transferido para a camisa do reactor	72
5.1	Perfil do calor a retirar em função do tempo para duas partidas	80
5.2	Evolução da temperatura da reacção e da referência para o ciclo de reacção 1	80
5.3	Evolução da temperatura da reacção e da referência para o ciclo de reacção 2	81
5.4	Perturbações efectuadas no calor de reacção para gerar os dados para treino das redes neuronais artificiais	82
5.5	Valores de T_r para a configuração A correspondente a uma perturbação no calor da reacção.	82
5.6	Representação esquemática da metodologia desenvolvida neste capítulo (configuração A)	84

5.7	Perfil da temperatura da reacção em função do tempo obtido por redes neuronais artificiais e por modelos baseados nos primeiros princípios para o ciclo de reacção 1	85
5.8	Perfil da temperatura da reacção em função do tempo obtido por redes neuronais artificiais e por modelos baseados nos primeiros princípios para o ciclo de reacção 2	85
5.9	Evolução da temperatura da reacção para vários valores de kt para uma perturbação no calor de reacção - Configuração A.	86
5.10	Evolução da temperatura da reacção para vários valores de kt para uma perturbação no calor de reacção - Configuração B	87
5.11	Evolução do caudal de água injectada na configuração A em função do tempo para vários valores de kt (resultados obtidos para uma variação de $+1^{\circ}\text{C}$ na temperatura de referência)	87
5.12	Perfis da temperatura da reacção e da referência para os dois sistemas para o ciclo de reacção 1	88
5.13	Perfis da temperatura da reacção e da referência para os dois sistemas para o ciclo de reacção 2	88
6.1	Diagrama de blocos para a configuração A, com o sistema de controlo neuronal artificial	97
6.2	Diagrama de blocos para a configuração B, com o sistema de controlo neuronal artificial	97
6.3	Perturbações efectuadas na configuração A	98
6.4	Perfis da temperatura da reacção calculados em função do tempo, relativos às perturbações efectuadas	98
6.5	Perturbações efectuadas na configuração B	99
6.6	Perfis da temperatura da reacção calculados em função do tempo, relativos às perturbações efectuadas	99
6.7	Representação esquemática da metodologia de controlo desenvolvida (configuração A)	101
6.8	Testes de validação da rede neuronal artificial relativa à configuração A	102
6.9	Testes de validação da rede RNA1 relativa à configuração B	103
6.10	Testes de validação da rede RNA2 relativa à configuração B	103

6.11	Perfil do calor de reacção em função do tempo para a fase de arrefecimento num ciclo de reacção	104
6.12	Evolução da temperatura da reacção - configuração A	105
6.13	Evolução da temperatura da reacção - configuração B	105
B.1	Simplex a duas dimensões: $E(Ph) > E(Ps)$; o ponto C é o centróide do simplex o qual é usado para gerar novos simplexes	116
B.2	Operações usadas para gerar novos simplexes no sentido da procura de um mínimo de uma função	117
C.1	Esquema de dois tanques em série	119
D.1	Modelo do reactor tubular com dispersão axial	121
F.1	Evolução da temperatura da reacção após uma variação em degrau de +500 Mcal/h no calor de reacção	130
F.2	Evolução do caudal de injeção de água refrigerada e do caudal de água que circula no permutador de calor	131
F.3	Evolução da temperatura da reacção após um decréscimo de 1°C na temperatura de referência da reacção	131
F.4	Caudal de injeção de água refrigerada e circulante no permutador de calor	132
F.5	Consumo de água de refrigeração durante a fase de arrefecimento num ciclo de reacção	133
F.6	Dependência entre a quantidade de água de refrigeração consumida e área do permutador de calor	133

Capítulo 1

Introdução

Sumário

Este capítulo constitui uma nota introdutória aos estudos abordados nesta tese. A motivação para a sua realização, bem como os contributos para o desenvolvimento científico são salientados. O capítulo termina com a descrição da organização da tese.

1.1 Motivação

Nos últimos anos tem-se notado uma transformação na indústria química de processos contínuos para processos descontínuos. Várias são as razões para esta mudança. Em primeiro lugar aparece a flexibilidade de operação dos processos descontínuos face a processos descontínuos. Hoje em dia é frequente encontrar indústrias químicas com capacidade de produção de vários produtos ou de um mesmo produto com características substancialmente diferentes (por exemplo, polímeros), utilizando os mesmos equipamentos. Esta característica está em consonância com o mercado actual que requer cada vez mais produtos específicos e consequentemente uma grande diversificação.

Geralmente nos processos contínuos a flexibilidade de produção é praticamente inexistente. A produção em contínuo é vulgarmente utilizada para a produção de grandes quantidades de um mesmo produto com características definidas. Pelo contrário, recorre-se a processos descontínuos quando as quantidades a produzir são relativamente mais baixas. Outra característica que distingue os processos descontínuos dos processos contínuos é a ausência de estado estacionário nos primeiros. As variáveis do processo estão continuamente a variar com o tempo, enquanto que nos processos contínuos, o estado estacionário está geralmente perfeitamente definido.

Para a maior parte dos processos contínuos é possível encontrar procedimentos com capacidade de modelizar os processos com relativa facilidade, o mesmo não acontecendo para os processos descontínuos. Os modelos que traduzem estes processos são em geral complexos o que implica a utilização de recursos computacionais sofisticados e rápidos.

No domínio do processo químico, um exemplo clássico de um processo descontínuo é a condução de reacções em sistemas fechados, por partidas. Na generalidade, a fase de reacção, pela sua complexidade, exige sistemas de controlo sofisticados e todo um sistema de utilidades que permita a condução da reacção em condições de segurança.

A evolução recente das potencialidades dos sistemas computacionais e de sistemas de monitorização são factores que podem contribuir para a criação ou aperfeiçoamento de novas metodologias no projecto de sistemas de reacção em descontínuo. Se o recurso ao computador para executar tarefas em qualquer processo é hoje uma constante, o mesmo não se pode dizer relativamente à utilização da informação disponível do processo. Tradicionalmente a informação recolhida do processo só era utilizada *à posteriori* no sistema de controlo. A modelização baseada

em princípios físico-químicos conduzem em muitas situações a algoritmos de cálculo complexos, o que, pelo tempo de processamento inviabiliza a simulação dos processos em tempo real.

Recentemente, como forma de ultrapassar estes obstáculos começaram a ser usados modelos baseados em técnicas de inteligência artificial (exemplo, redes neuronais artificiais) para modelizar e simular processos. A exigência de dados do processo na construção destes modelos implica que a informação do processo seja continuamente introduzida no sistema. Estas técnicas, ainda numa fase muito incipiente, já conseguiram resolver alguns problemas que até aqui eram de difícil solução em tempos de cálculo aceitáveis.

Espera-se que este trabalho possa dar um contributo para o estudo da aplicação de redes neuronais artificiais nas diferentes áreas da engenharia química, mostrando como é possível modelizar processos substancialmente diferentes, utilizando estruturas simples bastante genéricas. No que respeita ao estudo de reactores descontínuos, o objectivo foi encontrar formas de actuação expeditas a utilizar tanto na fase de projecto como nas fases de modelização, simulação e controlo, de forma a optimizar as condições operatórias deste tipo de reactores, utilizando a metodologia que é apresentada nos próximos capítulos.

1.2 Organização da tese

A Figura 1.1 apresenta o organigrama da tese. Neste diagrama representa-se a interligação entre os diversos capítulos.

A tese está dividida em duas partes. Na primeira parte apresenta-se alguns conceitos associados às redes neuronais artificiais mostrando a sua aplicação à engenharia química. No Capítulo 2 faz-se uma descrição das redes neuronais artificiais apresentando as origens e os principais passos para a sua aplicação. No Capítulo 3 particulariza-se a aplicação das redes neuronais artificiais à resolução de problemas de engenharia química. As vantagens e desvantagens do uso destas técnicas são apresentadas e comprovadas pela aplicação a três problemas clássicos de engenharia química.

Na segunda parte estuda-se dois mecanismos de transferência de calor em reactores descontínuos, bem como a sua influência no controlo dos processos. No Capítulo 4, duas configurações de transferência de calor são estudadas em conjugação com a integração de esquemas de controlo tradicionais (baseados em PIDs) em cascata. São os estudos integrados destes processos globais (sistemas de controlo + processos) que constituem os exemplos base de comparação para as metodologias de controlo propostas, baseadas em redes neuronais artificiais.

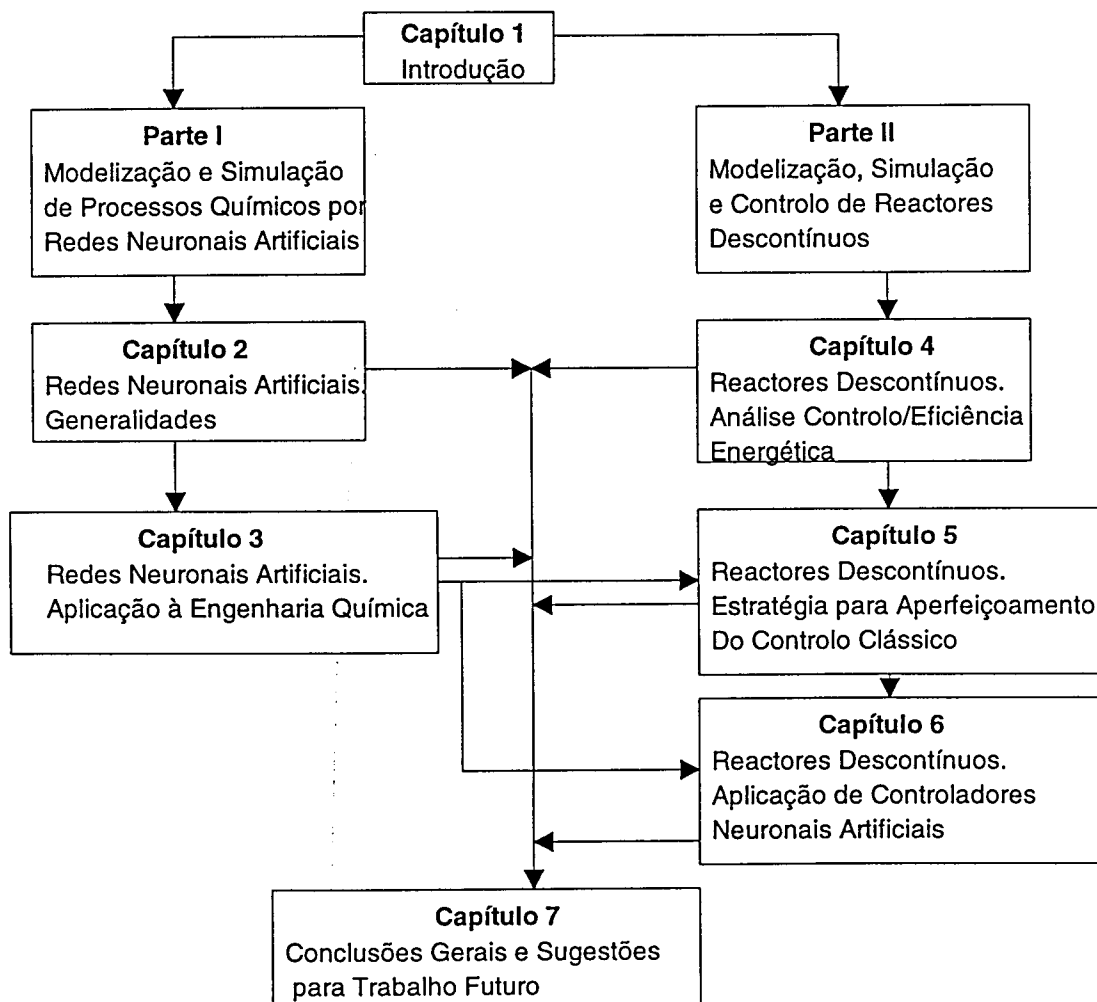


Figura 1.1 - Organograma da tese

Com o objectivo de encontrar mecanismos de controlo mais aperfeiçoados, de forma a melhorar o desempenho dos sistemas de controlo clássico do processo de transferência de calor de reactores descontínuos, no Capítulo 5 recorre-se a estruturas neuronais artificiais para previsão do valor futuro da variável controlada (temperatura da reacção), sendo este valor utilizado para calcular trajectórias de referência a incorporar nos controladores. Pretende-se desta forma encontrar procedimentos para seguir mais estritamente as trajectórias de referência previamente estabelecidas. A metodologia de controlo analisada introduz poucas modificações em termos físicos nas estruturas de controlo clássicas.

No Capítulo 6 aborda-se a problemática da aplicação de mecanismos de controlo avançados nos problemas considerados. Os sistemas de controlo são determinados a partir de

estruturas neuronais artificiais que têm como função o controlo do processo de transferência de calor em reactores descontínuos.

O Capítulo 7 apresenta conclusões gerais deste trabalho e algumas sugestões são apresentadas para trabalho futuro.

Parte I

Modelização e Simulação de Processos Químicos por Redes Neurais Artificiais

Capítulo 2

Redes Neurais Artificiais. Generalidades

Sumário

Neste capítulo apresentam-se as características básicas inerentes às redes neurais artificiais, bem como os procedimentos necessários para a sua aplicação em diferentes áreas do conhecimento. Na primeira parte descrevem-se as origens e a analogia com as redes neurais biológicas. Na segunda parte enumeram-se vários tipos de redes neurais artificiais, salientando-se algumas das suas aplicações.

2.1 Introdução

O computador é presentemente uma das ferramentas vulgarmente utilizada no desenvolvimento tecnológico e do próprio ser humano. Nos últimos anos têm-se assistido a um desenvolvimento acelerado de tecnologias computacionais com capacidade de executar procedimentos com uma velocidade tal, que dificilmente se imaginaria há alguns anos atrás. Muitos são os programas de computador utilizados para apoio à medicina, à economia, à engenharia, entre outras.

O carácter específico dos modelos de programação implica o aparecimento de uma grande diversidade de programas também específicos. Para contornar este problema, vários investigadores têm-se debruçado sobre técnicas de programação mais genéricas para serem utilizadas como algoritmos de programação na realização de diferentes tarefas. As redes neuronais artificiais parecem ser uma das técnicas mais utilizadas para este fim. O aumento de popularidade deste tipo de estruturas, tanto nos ambientes de desenvolvimento universitários como em ambientes comerciais é a prova deste facto. Hoje em dia é comum referenciar-se as redes neuronais artificiais a uma grande área de aplicações, desde a ciência dos computadores, à física, à matemática, à psicologia, aos negócios, à economia e em muitos outros campos, onde novas aplicações estão continuamente a ser encontradas e investigadas (Boullart et al., 1992).

As redes neuronais artificiais são estruturas formadas por muitos elementos simples que operam em paralelo, denominados nós ou neurónios (Demuth e Beale, 1994). Estas estruturas são inspiradas na biofisiologia do sistema nervoso, de onde advém o seu nome. A sua função é determinada especialmente pelas ligações que existem entre esses nós ou neurónios. É o ajuste dos valores das ligações que existem entre os respectivos nós que conferem a estas estruturas o seu elevado grau de adaptação a diferentes sistemas. Podem treinar-se redes neuronais artificiais para realizar tarefas muito diversificadas.

2.2 Origens das redes neuronais artificiais

Uma vasta gama de algoritmos computacionais têm sido ensaiada com vista ao desenvolvimento de novos modelos ou modelos mais simples que traduzam o comportamento de sistemas nas diferentes áreas do conhecimento. Um exemplo conhecido é a existência de algoritmos com capacidade de realizar cálculos matemáticos intensivos. Alguns dos algoritmos desenvolvidos, baseados em princípios da neurofisiologia, são usados no desenvolvimento de novos modelos de sistemas complexos. As redes neuronais artificiais são um dos exemplos mais característicos deste tipo de algoritmos.

São várias as razões para o uso dos conhecimentos da neurofisiologia do cérebro como modelos computacionais. Como primeira razão sabe-se que o cérebro é um sistema que consegue obter respostas quando solicitado. Nesta base deve também ser possível criar um sistema artificial que apresente o mesmo comportamento, uma vez que, é baseado nos mesmos princípios. A segunda razão diz respeito às características de aprendizagem do sistema neuronal biológico, isto é, o sistema neuronal biológico é capaz de aprender com a experiência, e formar as suas próprias representações dos sistemas, independentemente do nível de conhecimento. É esperado que uma estrutura neuronal artificial possa ser desenvolvida com as mesmas propriedades.

Nas secções seguintes apresentam-se as características neurofisiológicas das redes neuronais artificiais, assim como a descrição das redes neuronais artificiais mais importantes, explicitando a sua topologia e as suas principais aplicações.

2.3 Redes neuronais biológicas

A compreensão dos princípios de funcionamento e tipos de estruturas desenvolvidas como redes neuronais passa por uma breve descrição dos modelos biológicos que sustentam a base da metodologia das redes neuronais artificiais.

2.3.1 O neurónio

O elemento básico do sistema nervoso é o neurónio (Eberhart e Dobbins, 1990). Os componentes principais do neurónio incluem um corpo central, as dendrites e o axónio. Num extremo do neurónio existe uma multiplicidade de filamentos curtos, denominados dendrites, agrupando-se à medida que se aproximam do corpo central ligando-se a este. No outro extremo nasce um filamento longo denominado axónio, cuja extremidade se ramifica unindo as diferentes ramificações a dendrites de outros neurónios.

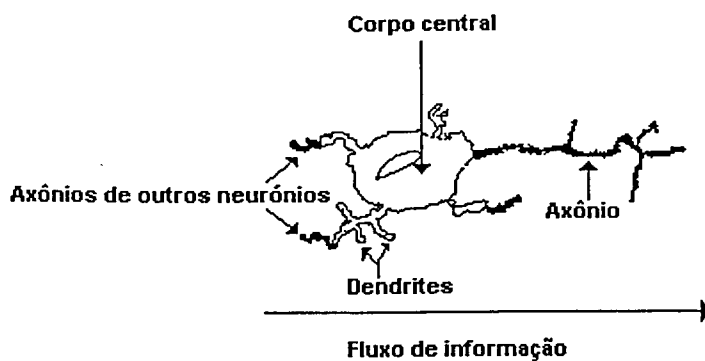


Figura 2.1 - Neurónio biológico

A Figura 2.1 representa esquematicamente o diagrama conceptual básico de um neurónio biológico. Existem vários tipos de neurónios com funções diferentes, por exemplo, alguns neurónios funcionam como motores transmitindo informação, outros funcionam como sensores, captando informação. Para obter informação mais detalhada sobre as diferentes configurações e funções dos neurónios deve recorrer-se a livros de neuroanatomia ou neurologia como House e Pansky (1967).

2.3.2 Comunicações entre neurónios

As dendrites e os axónios possuem propriedades electrofisiológicas especiais que atribuem aos neurónios o papel de processadores de informação (Boullart et al., 1992). Os neurónios transmitem informação entre eles por meio de sinais eléctricos. Os sinais eléctricos fluem da esquerda para a direita, a partir das dendrites, através do corpo central, até ao axónio. No corpo central existe uma transformação (activação) do sinal mediante a informação recebida. O axónio distribui o sinal recebido do corpo central pelas dendrites de outros neurónios. O sinal proveniente de um neurónio é transmitido para outro neurónio através das ligações existentes entre o axónio do primeiro neurónio e uma dendrite do segundo. Estas ligações denominam-se por sinapses. As sinapses são as entidades responsáveis pela capacidade de aprendizagem de um sistema neuronal.

2.3.3 Redes de neurónios

A interacção entre muitos neurónios combinados em grandes redes confere ao cérebro a capacidade para aprender, reconhecer e generalizar. Sabe-se que a actuação isolada de um neurónio, só por si, é muito limitada em termos de processamento de informação.

O cérebro humano é constituído por milhões de neurónios. Este é o maior e mais complexo sistema neuronal biológico sendo o que apresenta capacidades mais imprevisíveis. Contudo, mesmo o diminuto cérebro de uma mosca, com um número muito menor de neurónios é capaz de orientar a mosca na realização de uma diversidade de tarefas. Num sistema com poucos neurónios a interligação e combinação de vários neurónios formando diferentes arquitecturas neuronais fazem com que o sistema neuronal possa executar diversas funções.

2.3.4 Interacção entre arquitecturas neuronais

O cérebro possui capacidades de processamento complexas devido à existência de arquitecturas neuronais sofisticadas. A informação chega ao cérebro através de entradas sensoriais consistindo em várias camadas de neurónios a partir das quais a informação é

processada. Algumas destas camadas de neurónios podem realizar a filtração preliminar da informação recolhida, enquanto que outras são responsáveis pela selecção, associação e distribuição da informação pelas diversas arquitecturas neuronais existentes. As diferentes arquitecturas neuronais disponíveis processam a informação recebida conforme as funções que desempenham. Depois da informação processada, esta é transmitida a outras camadas de neurónios, que são responsáveis pela execução de várias tarefas, como por exemplo, decisões, formas de procedimentos e supervisão.

2.3.5 Aprendizagem das redes neuronais biológicas

A capacidade para aprender é uma das características mais importantes das redes neuronais biológicas. Os humanos e os animais aprendem continuamente na sua interacção com o meio envolvente. A informação momentânea disponível é automaticamente assimilada pelo cérebro afectando o comportamento futuro.

Muitos investigadores têm-se debruçado sobre o sistema de aprendizagem neuronal biológico de forma a descobrirem exactamente como e onde a informação momentânea disponível é armazenada no cérebro. Os resultados mais importantes são descritos a seguir (Boullart et al., 1992):

1. A actividade sinótica facilita as comunicações neuronais. Um elevado grau de actividade entre dois neurónios ou grupos de neurónios num determinado instante pode facilitar a comunicação entre eles no momento e no futuro;
2. A aprendizagem estimula o crescimento neuronal. Alguns investigadores têm observado que a existência de uma aprendizagem contínua causa um aumento do número de ligações entre neurónios em certas regiões do cérebro. Apesar de existir um grande número de neurónios aquando da formação do cérebro, este número aumenta significativamente com o decorrer do tempo.

2.4 Redes neuronais artificiais

Tal como já foi referido, as redes neuronais artificiais são algoritmos computacionais baseados na neurofisiologia dos sistemas biológicos (Prett e Garcia, 1988). Estes algoritmos possuem capacidades computacionais que são quase unicamente atribuídas à inteligência humana. Algumas destas propriedades são a associação, o reconhecimento de padrões, a discriminação e a aprendizagem a partir da informação disponível. Apesar das redes neuronais artificiais serem concebidas para funcionarem como modelos das redes neuronais biológicas, a maior parte destes modelos, por mais complexos que sejam, só conseguem

implementar poucas das características básicas dos sistemas neuronais biológicos. Assim o uso da terminologia neuronal biológica para as redes neuronais artificiais pode causar alguma controvérsia no mundo científico. Alguns investigadores adoptam uma definição mais conservativa para esta rede artificial, definindo-a simplesmente como algoritmos computacionais baseados no paradigma do processamento distribuído paralelo envolvendo um grande número de interligações entre as diversas unidades de processamento.

Os elementos fundamentais dos modelos de redes neuronais artificiais são o neurónio artificial, a arquitectura de rede (forma como os diversos neurónios estão dispostos e interligados) e a aprendizagem (modificação dos comprimentos de ligação entre os neurónios). Nas secções seguintes vão ser descritos os elementos básicos das estruturas neuronais artificiais e o seu modo de operação.

2.4.1 O neurónio artificial

Na Figura 2.2 representa-se a estrutura básica de um neurónio artificial, constituinte de todas as estruturas neuronais artificiais. Através deste diagrama pretende demonstrar-se a analogia do neurónio artificial com o neurónio biológico representado na Figura 2.1.

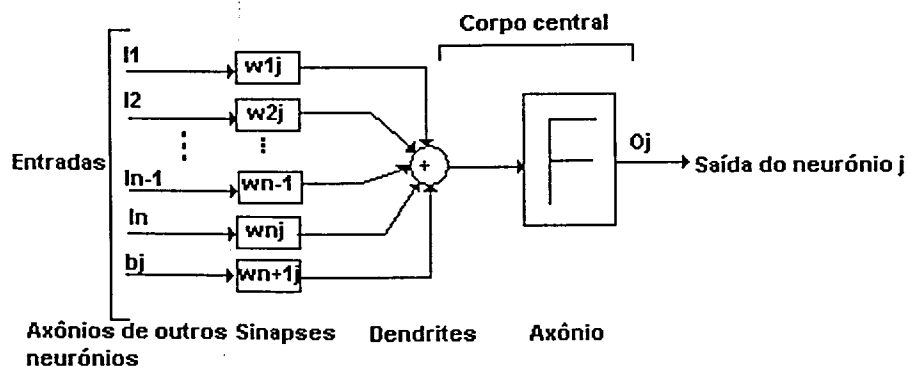


Figura 2.2: Estrutura básica do neurónio artificial

Tal como acontece com os neurónios biológicos, um neurónio artificial é um elemento simples de processamento que pode receber várias entradas de outros neurónios através das dendrites, produzindo um único sinal de saída. Este sinal pode ser propagado pelo axónio deste neurónio para outros neurónios.

Como se pode ver através da Figura 2.2, um neurónio artificial pode ser descrito por uma equação matemática muito simples para o cálculo da saída em função das entradas. O valor da saída do neurónio artificial é igual ao valor transformado do somatório de todas as entradas desse neurónio. As entradas de um neurónio são obtidas a partir da multiplicação das saídas pelo pesos das ligações de outros neurónios para o qual existam ligações. São

várias as funções de transferência utilizadas nos neurónios artificiais. Posteriormente descrever-se-ão as funções de transferência mais vulgarmente usadas nos neurónios artificiais.

Ligações entre neurónios artificiais

Os comprimentos de ligação, ou também denominados pesos, existentes entre os vários neurónios são parâmetros ajustáveis, os quais conferem às estruturas neuronais a capacidade de aprendizagem e de colocação em memória de informação. A uma determinada ligação entre dois neurónios está associado um peso, o qual é multiplicado pela saída do neurónio anterior, formando uma das entradas para o neurónio posterior. É o valor deste peso que determina o grau de interacção entre os dois neurónios artificiais.

A entrada total de cada neurónio j , i_j , é o somatório das saídas dos neurónios aos quais está interligado, a_i , multiplicado pelo respectivo peso, w_{ij} , mais uma entrada constante, b_j , a qual é multiplicada pelo peso, w_{n+1j} . Na equação (2.1), n representa o número de neurónios interligados com o neurónio j :

$$i_j = \sum_{i=1}^n w_{ij} a_i + w_{n+1j} b_j \quad (2.1)$$

A entrada constante, b_j , funciona como uma espécie de ajuste de zero para todas as outras entradas do neurónio. Diz-se que uma ligação funciona como excitação ou inibição para um neurónio se os pesos apresentarem valores positivos ou negativos respectivamente.

Funções de transferência dos neurónios artificiais

Existem várias funções de transferência associadas aos neurónios artificiais (Boullart et al., 1992; Demuth e Beale, 1994). As diferentes funções de transferência dos neurónios produzem diferentes saídas. Os neurónios artificiais usam as funções de transferência para calcular o nível de transformação desse neurónio perante as suas entradas. As diferentes funções de transferência utilizadas são na maior parte dos casos um factor de distinção das estruturas neuronais artificiais.

Em geral, é desejável que a função de transferência apresente um comportamento limitado por analogia com as respostas apresentadas pelos neurónios biológicos. As funções de transferência devem ser limitadas superior e inferiormente para que os valores calculados à saída dos neurónios não apresentem comportamentos instáveis.

As funções de transferência mais vulgarmente utilizadas na criação de modelos neuronais artificiais são:

- *Função binário*, também chamada função sinal. Esta função é usada para implementar nós binários simples em que o valor de saída é igual a 1 quando $i_j \geq 0$ e igual a 0 quando $i_j < 0$. Por vezes, em vez de 0 pode tomar-se o valor -1 para a situação em que $i_j < 0$;
- *Função semi-linear*. Esta função pode ser considerada uma função linear com valores limites, isto é:

$$f(i_j) = \begin{cases} -1 & \Leftarrow i_j \leq -a, a > 0 \\ \frac{i_j}{a} & \Leftarrow -a < i_j < a \\ 1 & \Leftarrow i_j \geq a \end{cases} \quad (2.2)$$

Tal como acontece com a função binário, esta função é descontínua e consequentemente não diferenciável nos pontos de transição;

- *Função sigmóide*. A introdução desta função contínua nos neurónios das arquitecturas neuronais artificiais foi sem dúvida um dos passos mais importantes para a aplicação desta técnica de modelização na representação do comportamento de sistemas. As vantagens desta função, relativamente às funções atrás enumeradas são relevantes. Esta função é contínua em todo o seu domínio. Como se trata de uma função limitada superior e inferiormente, não é necessário definir valores limites o que implica que ela seja uma função totalmente diferenciável. A função sigmóide é descrita pela seguinte equação matemática:

$$f(i_j) = \frac{1}{1 + e^{-\alpha i_j}} \quad (2.3)$$

onde $f(i_j)$ é o valor de saída do neurónio j , i_j é a entrada total do neurónio j , α é uma constante. Esta função possui uma região de transição cuja extensão pode ser alterada variando o valor da constante α . Outras funções com as mesmas propriedades são também geralmente implementadas nas estruturas neuronais artificiais, como é o caso da função *tangente hiperbólica*;

- *Função radial*. Tradicionalmente esta função era pouco utilizada como função de transferência dos neurónios artificiais, mas recentemente começou a ter grande popularidade e muitas aplicações de redes neuronais artificiais começam agora a utilizar esta função de transferência. A função usada é a denominada função gaussiana:

$$f(i_j) = e^{-\frac{1}{2\sigma_j^2} \sum_{i=1}^n (x_{ij} - c_{ij})^2} \quad (2.4)$$

em que $f(i)$ é a saída do neurónio j , x_{ij} , é a entrada do neurónio i para o neurónio j , c_{ij} é o centro de transferência do neurónio j para a entrada correspondente ao neurónio i , s_j é a extensão da função de transferência do neurónio j . Esta função apresenta um valor máximo para o centro de transferência diminuindo para zero para valores de entrada pouco desfasados desse centro. Os valores dos centros e das extensões das funções de transferência em cada neurónio são os parâmetros ajustáveis das redes neuronais artificiais, quando se utiliza a função gaussiana.

2.4.2 Arquitecturas neuronais artificiais

A estrutura topológica é uma característica muito importante das redes neuronais artificiais, uma vez que é a responsável pelas funções que elas desempenham. Geralmente a classificação de rede neuronal artificial deriva da sua topologia. O número de camadas de neurónios existentes, as ligações entre os diferentes neurónios e as funções de transferência dos respectivos neurónios são factores que determinam a topologia da rede. As estruturas neuronais artificiais podem ser constituídas por uma camada ou várias camadas. Se as redes forem do tipo multi-camada, o número de camadas intermédias, bem como o número de neurónios das camadas intermédias são variáveis adicionais da rede neuronal artificial. O número de neurónios das camadas de entrada e de saída ficam determinados a partir do número de variáveis de entrada/saída a correlacionar.

Os neurónios podem ser interligados de diferentes modos, por exemplo, um neurónio de uma camada posterior pode estar ligado a todos os neurónios da camada anterior. Na maior parte das aplicações de redes neuronais artificiais, as ligações que se estabelecem são deste tipo, no entanto, poderão aparecer arquitecturas neuronais em que um neurónio de uma camada posterior poderá estar somente ligado a alguns neurónios da camada anterior.

Além das estruturas já descritas, muitas outras podem aparecer com diferentes ligações entre os neurónios envolvidos. Os tipos de ligação entre os vários neurónios constituintes da rede neuronal artificial permitem a divisão destas estruturas em duas categorias principais:

- *Redes neuronais artificiais directas.* Neste tipo de redes, as interligações entre neurónios nas redes neuronais dão-se entre duas camadas sucessivas e sempre da camada anterior para a camada posterior;
- *Redes neuronais artificiais recorrentes.* Neste caso, as ligações para um neurónio de uma camada podem ser provenientes de neurónios de camadas anteriores, da própria camada ou até mesmo de camadas posteriores, formando estruturas mais complexas.

2.4.3 Aprendizagem das redes neurais artificiais

A aprendizagem de uma rede neuronal artificial não é mais do que a procura dos pesos das ligações existentes entre os neurónios constituintes da rede neuronal artificial, de forma a que esta estrutura apresente o comportamento desejado. Existem várias formas para determinar os pesos de uma rede neuronal artificial (Boullart et al., 1992). As regras baseadas na minimização do erro são as mais utilizadas, as quais permitem calcular os valores dos pesos de ligação a partir de informação disponível do sistema, comparando os valores de saída calculados pela rede com os valores conhecidos. A este conjunto de entradas/saídas dá-se o nome de *conjunto de treino* da rede neuronal artificial. O objectivo é encontrar o melhor conjunto de valores dos pesos de ligação que minimize o erro entre os valores conhecidos e os valores previstos pela rede.

2.5 Tipos de redes neurais artificiais

Como já foi referido anteriormente, as redes neurais artificiais são divididas em duas grandes classes; *redes neurais directas* e *redes neurais recorrentes*. Nas redes neurais directas, as ligações estabelecem-se entre os neurónios de diferentes camadas e sempre de uma camada anterior para uma camada posterior, enquanto que, nas redes neurais recorrentes, podem existir ligações entre neurónios de uma mesma camada, ou mesmo, neurónios de camadas posteriores podem funcionar como entradas para os neurónios de camadas anteriores.

2.5.1 Redes neurais directas

São vários os tipos de redes neurais directas existentes. O número de camadas e as funções de transferência usadas são os factores que as distinguem. A Figura 2.3 mostra uma rede neuronal artificial directa.

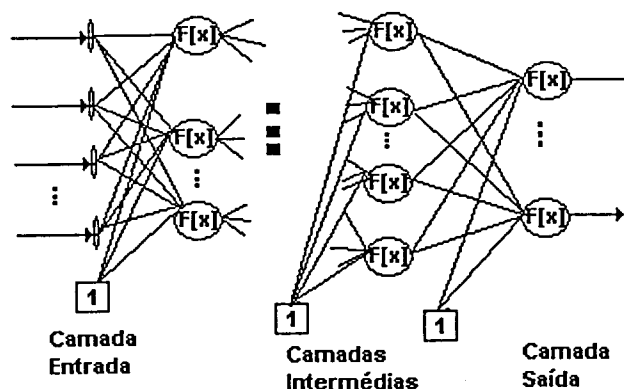


Figura 2.3: Rede neuronal artificial directa

Rede neuronal artificial - Perceptron

A rede *Perceptron*, desenvolvida por F. Rosenblatt em 1958, foi considerada a primeira rede neuronal artificial (Boullart et al., 1992). Esta rede consiste numa estrutura neuronal artificial constituída por uma ou mais camadas de neurónios. A função de transferência usada, função binário, permite distinguir esta rede de outras estruturas. As características destas estruturas atribuem-lhe funções próprias que se aplicam à classificação de sistemas. Estas estruturas funcionam como construtoras de fronteiras de decisão.

Rede neuronal artificial linear (RNAL)

As poucas aplicações das redes *Perceptron* levou ao aparecimento de outras estruturas neuronais artificiais passado pouco tempo, como é o caso das redes neuronais lineares. A única distinção entre estes dois tipos de redes é a função de transferência usada nos neurónios respectivos. Nas RNALs é usada a função de transferência $f(x)=x$ em vez da função binário.

As características desta rede neuronal artificial permitem engloba-la numa grande classe de algoritmos denominados por *filtros lineares adaptativos* (Boullart et al., 1992). As principais aplicações aparecem no estudo do comportamento de sistemas de controlo e comunicações.

Rede neuronal artificial não-linear (RNANL)

As redes neuronais artificiais não-lineares são as redes mais utilizadas em todas as aplicações das redes neuronais artificiais. Trata-se de uma estrutura com multi-camadas em que as ligações entre os diversos neurónios se estabelecem da mesma forma que as ligações nas redes *Perceptron* e RNALs. A sua principal diferença vem do facto de que as funções de transferência geralmente utilizadas nestas estruturas são funções não-lineares, como sejam, a função *sigmóide*, a função *tangente hiperbólica* e a função *gaussiana*. Este tipo de redes são utilizadas em diferentes áreas, desde as finanças, controlo dos processos, identificação de sistemas e noutras áreas do conhecimento. No Capítulo 3 apresentar-se-á uma descrição detalhada sobre o modo de aplicação deste tipo de redes na modelização e simulação de processos químicos.

2.5.2 Redes neuronais recorrentes

Todas as redes neuronais artificiais descritas anteriormente são redes neuronais directas, isto é, as ligações estabelecem-se entre neurónios de camadas sucessivas e de uma camada anterior para uma camada posterior. Nas redes neuronais artificiais recorrentes as estruturas neuronais são mais complexas, uma vez que podem existir ligações entre neurónios de uma

mesma camada ou entre neurónios de diferentes camadas, em que as entradas dos neurónios de camadas anteriores podem ser provenientes de neurónios de camadas posteriores. A introdução deste tipo de redes implica um aumento de complexidade na aplicação destas estruturas à interpretação e classificação de sistemas. O processo de aprendizagem torna-se mais complexo.

Um exemplo característico deste tipo de redes é apresentado por *Hopfield* em 1982 (Boullart et al., 1992). Uma rede neuronal deste tipo é constituída por uma única camada, em que os neurónios estão completamente interligados, como está representado na Figura 2.4. Outras redes neuronais recorrentes surgiram entretanto, como é o caso da máquina de *Boltzmann*. Esta rede é uma estrutura neuronal artificial de *Hopfield* com várias camadas intermédias. As funções de transferência para estes neurónios podem ser as que foram anteriormente referidas para as redes neuronais directas. A principal aplicação deste género de estruturas é na resolução de problemas de optimização.

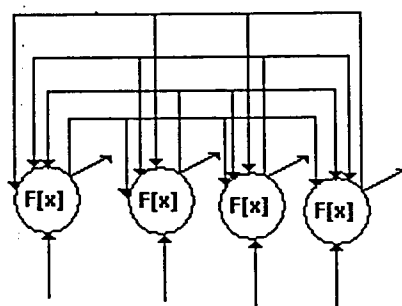


Figura 2.4: Rede neuronal de *Hopfield*.

2.6 Conclusões

Neste capítulo fez-se uma abordagem generalista sobre as redes neuronais artificiais, evidenciando-se a analogia entre estas estruturas e os sistemas neuronais biológicos. As possíveis aplicações destes algoritmos foram apresentadas. Mediante a descrição realizada, algumas considerações podem ser enumeradas:

- As estruturas neuronais artificiais, apesar de terem como base metodológica para o seu aparecimento e desenvolvimento o sistema neuronal biológico, a sua capacidade para aprender, reconhecer e identificar sistemas é muito reduzida quando comparada com os sistemas neuronais biológicos;
- As redes neuronais artificiais são algoritmos que podem ser utilizados em áreas diferentes do conhecimento. O grau de generalização destes algoritmos, relativamente aos algoritmos

convencionais existentes, é uma das grandes vantagens da sua utilização e um elemento de investigação actual;

- Apesar da existência de muitas arquitecturas neuronais, novas arquitecturas podem surgir em resposta a problemas ainda em fase de estudo e na procura de novas soluções.

2.7 Referências

- Boullart, L., Krijgsman, A. e Vingerhoeds, R. A., "Application of Artificial Intelligence in Process Control", 1ª edição, Pergamon Press, Oxford, 1992.
- Demuth, H. e Beale, M., "Neural Network Toolbox User's Guide", 1ª edição, The Mathworks, Inc., Massachusetts, 1994.
- Eberhart, R. C. e Dobbins, R. W., "Neural Networks PC Tools. A Practical Guide", 1ª edição, Academic Press, Inc., San Diego, 1990.
- House, E. L. e Pansky, B., "A Functional Approach to Neural Anatomy", McGraw-Hill, New York, 1967.
- Prett, D. M. e Garcia, C. E., "Fundamental Process Control", 1ª edição, Butterworks Series in Chemical Engineering, Boston, 1988.

Capítulo 3

Redes Neurais Artificiais.

Aplicação à Engenharia Química

Sumário

Neste capítulo descreve-se a aplicação das redes neurais artificiais na área dos processos químicos. Começa por se apresentar alguns trabalhos em que esta técnica foi usada desde a identificação, simulação até à optimização e controlo de processos. Segue-se uma descrição pormenorizada das redes neurais artificiais mais utilizadas nas diferentes áreas da engenharia química, as redes neurais artificiais não-lineares directas (RNANLDs), explicitando todos os passos necessários para a sua utilização. É proposto o algoritmo simplex para o ajuste dos parâmetros destas estruturas neurais artificiais. O capítulo termina com a aplicação desta técnica à modelização e simulação de três problemas clássicos de engenharia química.

3.1 Introdução

A competitividade crescente do mercado global, as especificações dos produtos acabados, bem como as condições em que os produtos são produzidos (condições de segurança e restrições ambientais), requerem cada vez mais metodologias de suporte, como por exemplo modelos dos processos, para a evolução da indústria do processo químico (Semple e Worstell, 1996). Estes factores implicam o desenvolvimento de estratégias expeditas de resolução de problemas de modo a aumentar a interacção entre os modelos construídos e o processo produtivo real.

Modelos matemáticos dos processos são ferramentas vulgarmente utilizadas pelos engenheiros para o apoio ao desenvolvimento e seguimento de processos. Esses modelos podem desempenhar funções importantes tanto no projecto de novos processos, como durante a operação de processos já existentes, contribuindo deste modo para a sua optimização.

Tradicionalmente, os modelos matemáticos dos processos eram baseados na tradução dos princípios físico-químicos inerentes a esses processos. Os princípios de conservação da massa, da energia e da quantidade de movimento eram postulados em equações. Devido ao grau de complexidade da maior parte dos processos químicos, os modelos assim construídos são em geral formados por um conjunto de equações algébrico-diferenciais lineares e não-lineares. Apesar do desenvolvimento dos recursos computacionais, para que estas estruturas possam ser resolúveis é necessário, na maior parte das situações, impor hipóteses simplificativas ou recorrer a parâmetros semi-empíricos. As hipóteses simplificativas consideradas implicam o aparecimento de discrepâncias acentuadas entre os valores reais dos processos e os valores obtidos a partir da resolução dos modelos. Neste sentido, com o objectivo de facilitar este processo, novos métodos de modelização têm aparecido, como é o caso da técnica de modelização por redes neurais artificiais, as quais aparecem aplicadas a várias áreas da engenharia química.

O desempenho de modelos matemáticos gerados através da utilização desta técnica estão directamente relacionados com a existência de informação representativa do processo. Uma monitorização adequada dos processos é um factor relevante para a sua aplicação.

A maior parte das redes neurais artificiais utilizadas em engenharia química são redes neurais directas, entre as quais as mais vulgarmente usadas são as redes neurais não-lineares directas, seguindo-se das redes neurais artificiais radiais. Nos últimos anos, alguns investigadores utilizam estruturas neurais artificiais recorrentes na modelização de sistemas. Um dos inconvenientes da utilização destas estruturas, relativamente às estruturas

neuronais directas, diz respeito ao tempo de criação dos modelos. A aplicação de estruturas neuronais recorrentes, como técnica de modelização de sistemas, requer maior complexidade de cálculo que a aplicação de estruturas neuronais directas devido à sua própria configuração estrutural.

3.2 Aplicação à engenharia química

Vários problemas de engenharia do processo químico, tais como, a detecção e o diagnóstico de falhas, o controlo do processo, o projecto e a simulação de processos podem ser resolvidos mais facilmente usando estruturas neuronais artificiais obtidas a partir de informação disponível dos processos, mesmo em situações em que o conhecimento desses processos seja reduzido (Hoskins e Himmelblau, 1988).

Estas estruturas são capazes de representar as características lineares e não-lineares subjacentes aos sistemas em análise (Morris et al., 1994; Montague e Morris, 1994). Numerosos são os trabalhos referenciados em literatura que utilizam as redes neuronais artificiais. Nas secções seguintes faz-se uma descrição da aplicação de estruturas neuronais artificiais a problemas correntes de engenharia química, enumerando-se alguns dos trabalhos realizados bem como os resultados obtidos.

3.2.1 Modelização e simulação de processos

A maior parte das aplicações de redes neuronais artificiais existentes em engenharia química diz respeito à resolução de problemas de modelização e simulação de processos. Alguns exemplos são; a simulação do desempenho de um reactor de leito fluidizado para oxidação parcial do propileno (Leib et al., 1996), o estudo do equilíbrio de fases num processo de extracção de soluções aquosas a duas fases (Kan e Lee, 1996), a modelização de um sistema global de remoção de poluentes de um efluente líquido (Su e McAvoy, 1992). Em todos estes trabalhos é salientado o bom desempenho apresentado por estas estruturas artificiais.

Os processos biotecnológicos recorrem também, com alguma frequência, a redes neuronais artificiais, como se pode constatar através de vários trabalhos apresentados em literatura (Montague e Morris, 1994; Robitaille et al., 1996; Zhu et al., 1994). A aplicação desta técnica de modelização a estes sistemas é em muitas vezes pouco eficiente. A complexidade destes processos leva à criação de modelos híbridos, combinando os princípios físico-químicos e as redes neuronais artificiais (Psichogios e Ungar, 1992; Thompson e Kramer, 1994). Os trabalhos realizados por estes autores mostraram que os modelos híbridos

traduzem eficientemente o comportamento dos processos biotecnológicos. Neste tipo de estruturas, as redes neurais artificiais são utilizadas para incorporar a informação dos processos de forma a ajustar continuamente os parâmetros dos modelos baseados nos princípios físico-químicos.

As redes neurais podem também funcionar como um método de contribuição de grupo para cálculo dos coeficientes de actividade de fases líquidas (Peterson et al., 1994). Segundo estes autores, comparando as soluções obtidas com estas estruturas, com as que se obtêm pelo método UNIFAC a partir de dados experimentais, nota-se que o método UNIFAC apresenta melhores desempenhos. No entanto e segundo os mesmos autores, as redes neurais artificiais conseguem prever os valores dos coeficientes de actividade com um erro médio de $\pm 5\%$, o que se pode considerar aceitável na maior parte das situações.

Apesar dos inúmeros trabalhos publicados sobre aplicação de redes neurais artificiais em engenharia química, poucos estudos sobre aplicações industriais têm sido apresentados. Resultados de aplicações industriais de redes neurais artificiais são descritos por Baratti et al. (1995) e Ramasamy et al. (1995), os quais estudaram as potencialidades das estruturas neurais artificiais na identificação, modelização e monitorização de processos petroquímicos.

3.2.2 Controlo de processos químicos

As redes neurais artificiais podem ter tarefas bastante diversificadas quando aplicadas ao controlo de processos químicos. Estas podem funcionar como controladores dos processos ou então actuarem como métodos de determinação dos parâmetros dos controladores, como por exemplo PIDs (Lin e Wong, 1995). Nahas et al. (1992) utilizaram uma rede neuronal artificial para gerar o controlador do processo. Dados de entrada/saída do processo foram utilizados para gerar o sistema de controlo do processo, o qual não é mais do que o modelo inverso do processo associado a um filtro com um parâmetro de sintonização. Este sistema de controlo, aplicado ao processo de neutralização do pH num reactor contínuo perfeitamente agitado, apresentou melhor desempenho quando comparado com o de um sistema de controlo baseado em PIDs tradicionais.

No Capítulo 6 descrever-se-á com pormenor as aplicações de redes neurais artificiais ao controlo de processos químicos em geral, e ao controlo do processo de transferência de calor em reactores descontínuos.

3.2.3 Detecção e diagnóstico de falhas nos processos

A capacidade para aprender a partir de exemplos, extraindo todas as características importantes dos dados, mesmo na presença de informação imprecisa e reduzida, tolerando erros aleatórios, tornam as redes neuronais artificiais uma técnica ideal para ser aplicada à detecção e diagnóstico de falhas nos processos químicos (Venkatasubramanian e Chan, 1989). Watanabe et al. (1989; 1994) demonstraram o potencial das redes neuronais artificiais na detecção de falhas múltiplas em várias aplicações, entre as quais constam a determinação de falhas na operação de um reactor químico, a previsão de impurezas às superfícies de permutadores de calor, a determinação do grau de deterioração de um catalizador, a previsão do aparecimento de estreitamentos em tubagens e a determinação da diminuição de desempenhos de permutadores de calor.

Apesar das potencialidades apresentadas com a utilização de estruturas neuronais artificiais no diagnóstico e detecção de falhas nos processos químicos, estas só funcionam com robustez nas zonas para as quais foram treinadas (Farell e Roat, 1994). A percepção do tipo e das limitações dos dados utilizados para treinar a rede é fundamental para a determinação do desempenho de uma estrutura neuronal artificial. Geralmente, um pré-processamento e uma filtragem dos dados existentes melhora significativamente o carácter da estrutura neuronal artificial para a detecção e diagnóstico de falhas, além de acelerar o processo de treino.

Além das redes neuronais artificiais, outras técnicas, como sejam os sistemas fuzzy (regras baseadas em certezas) e os diágrafos são também vulgarmente utilizadas na detecção de falhas. A utilização em separado destas técnicas implica o aparecimento de algumas limitações que podem ser substancialmente minimizadas quando utilizadas em conjunto. Wang et al. (1996), fazendo estudos sobre segurança e operacionalidade de um processo de reacção numa refinaria, demonstraram como a utilização conjunta destas três técnicas apresenta melhores desempenhos no diagnóstico e detecção de falhas do processo do que a utilização em separado destas técnicas.

3.2.4 Optimização de processos químicos

Savkronic-Stevanovic (1994) mostrou, a partir do estudo do processo de destilação azeotrópica do sistema ternário, acetato de butilo-álcool butílico-água, a potencialidade das redes neuronais artificiais para desenvolver ferramentas que permitam a estimativa de parâmetros de operação do processo de modo a aumentar a produtividade.

Problemas de optimização não-lineares com variáveis contínuas e discretas podem também ser resolvidos recorrendo a estruturas neuronais artificiais do tipo Hopfield (Tsirukis e

Reklaitis, 1994). Um dos exemplos estudados por estes autores foi o escalonamento da produção de forma a otimizar o processo produtivo, através da minimização dos custos, numa instalação multi-produto.

Além das áreas salientadas, as redes neuronais artificiais também são utilizadas com frequência, como métodos para identificar correlações entre variáveis dos sistemas, com o objectivo de reduzir a sua dimensão em termos de número de variáveis (Kramer, 1991). As redes neuronais artificiais encontram e eliminam relações não-lineares entre as variáveis, enquanto que, métodos como, análise por componentes principais só permitem a identificação e eliminação de relações lineares entre variáveis dos sistemas.

3.3 Vantagens e limitações do uso de redes neuronais artificiais em engenharia química.

As redes neuronais artificiais apresentam características excelentes para serem utilizadas em engenharia química. A possibilidade de rapidamente se desenvolverem modelos para operações complexas, que até aqui demorariam algum tempo usando as técnicas convencionais, é sem dúvida a característica mais importante para a sua aplicação (Montague e Morris, 1994). Além desta vantagem, outras podem ser enumeradas. Nos seguintes itens resumem-se as principais vantagens da sua aplicação (Bhagat, 1992; Boullart et al., 1992; Keeler, 1993; Psychogios e Ungar, 1992):

- Aprendizagem adaptativa. As redes neuronais artificiais podem aplicar-se a um grande conjunto de problemas diferentes, uma vez que as suas representações só dependem da disponibilidade de dados de entrada/saída do sistema. Com estruturas do mesmo tipo pode encontrar-se modelos para traduzir o comportamento de uma reacção química ou encontrar modelos que permitam distinguir caracteres escritos manualmente. A única diferença reside no tipo de dados submetidos a treino;
- Organização própria. Durante o treino e operação das redes neuronais artificiais, a rede neuronal organiza e cria as suas próprias representações da informação que recebe. Esta característica é substancialmente diferente da metodologia tradicional de programação. Na metodologia tradicional, todos os dados têm que ser especificados pelo programador. Esta característica proporciona às redes neuronais artificiais a possibilidade da sua aplicação a problemas onde é praticamente impossível definir modelos explícitos, programas e regras para obter as soluções. Esta propriedade das redes neuronais artificiais conferem-lhe a facilidade de treinar sistemas, cujos dados sejam imprecisos, que possam conter ruído, ou mesmo em situações em que a informação do sistema é limitada a conhecimento empírico;

- Tempo de processamento rápido. O *tempo de treino* de uma rede neuronal artificial depende da complexidade da estrutura adoptada e da quantidade de dados existente para treino. Estruturas pouco complexas, isto é, com poucas camadas intermédias e poucos neurónios em cada camada são capazes de representar eficazmente o comportamento dos sistemas. A simplicidade destes modelos implica um *tempo de treino* reduzido;
- Compatibilidade com a tecnologia existente. As características inerentes às redes neuronais artificiais como sejam a simplicidade de cálculo aliadas às suas características não-lineares permitem a sua aplicação a diferentes sistemas. Muitos dos simuladores de redes neuronais artificiais tem sido desenvolvidos utilizando linguagens de programação como o C e o Fortran. Estas linguagens e respectivos compiladores estão disponíveis em qualquer plataforma, desde computadores pessoais a grandes computadores.

Mediante a análise das vantagens descritas pode inferir-se a sua aplicabilidade na indústria de processo químico, quer na modelização de processos, quer no aperfeiçoamento da operacionalidade dos sistemas envolvidos. No entanto, estas estruturas também apresentam limitações como sejam (Baughman e Liu, 1994; Chitra, 1993; Crowe e Vassiliadis, 1995; Ponton, 1992):

- As redes neuronais artificiais são modelos treinados e não programados. Os modelos assim gerados são intensivamente dependentes dos dados existentes durante a fase de treino. As entradas e saídas dos sistemas disponíveis para o treino das redes devem incluir todas as condições significantes e todas as características dos sistemas considerados. Só assim podem ser desenvolvidas redes que adequadamente descrevam o processo. Nos casos em que não existe um conhecimento suficiente do processo (em termos de dados) as redes não se tornam eficazes;
- As redes neuronais apresentam grandes limitações fora dos valores limites das variáveis usadas durante o treino das estruturas neuronais artificiais. Esta limitação é sem dúvida a principal desvantagem da aplicação de redes neuronais artificiais a problemas de engenharia. A aplicação de redes neuronais artificiais, fora dos valores limites das variáveis usadas durante a fase de treino, tem que ser analisada com precaução. Os modelos convencionais podem, na generalidade, ser aplicados se não violarem as premissas do modelo;
- A aplicação das redes neuronais artificiais requer algum conhecimento do sistema. Esta característica implica que as redes neuronais artificiais apresentam grandes limitações quando aplicadas à resolução de determinados problemas, como seja, o projecto de novos processos, em que o conhecimento experimental é limitado.

Apesar das desvantagens enumeradas, a utilização das redes neurais artificiais nas diferentes áreas da engenharia química tem-se intensificado nos últimos anos. Novas aplicações destas estruturas, funcionando em interacção com o processo, estão continuamente a aparecer. As tarefas de controlo, de simulação e de optimização das condições processuais são em muitos dos casos realizadas por estruturas deste tipo.

3.4 Redes neurais artificiais não-lineares directas (RNANLDs)

Como já foi referido, as redes neurais artificiais não-lineares directas são as mais utilizadas na resolução de problemas de engenharia química. As funções de transferência vulgarmente usadas nos nós são a função sigmóide, a função tangente-hiperbólica, podendo aparecer também com alguma frequência a função radial (gaussiana). A Figura 3.1 representa esquematicamente uma estrutura neuronal artificial directa constituída por 3 camadas. A principal função da camada de entrada é a distribuição da informação recolhida. As variáveis de entrada e de saída devem ser normalizadas de modo a evitar saturação das estruturas neurais artificiais. As camadas intermédias e de saída processam a informação recebida da camada de entrada. Além desta informação, associadas a estas camadas, existem entradas constantes. Para as camadas intermédias e para a camada de saída há uma transformação do sinal recebido. A camada de saída calcula os valores correspondentes à saída da rede.

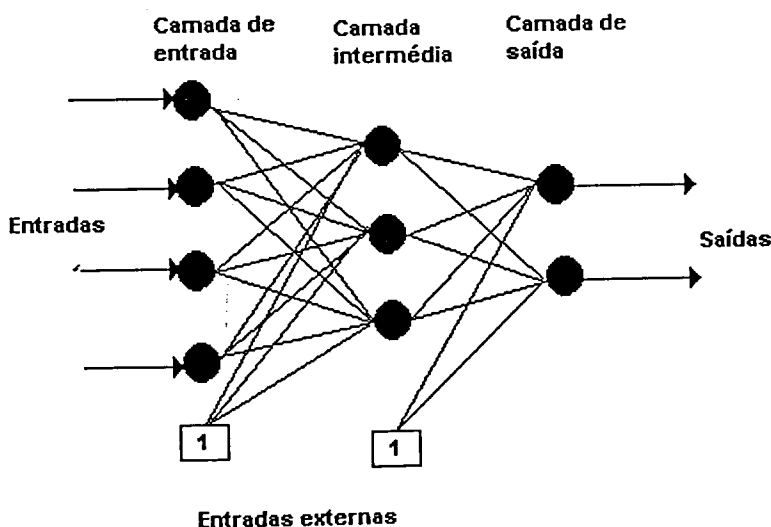


Figura 3.1: Rede neuronal artificial não-linear directa.

A aplicação deste tipo de estruturas envolve os procedimentos que a seguir se apresentam:

1. Recolha da dados para treino das redes. As RNANLDs são treinadas a partir de informação disponível. A recolha de informação adequada é um factor determinante para o sucesso da aplicação destas estruturas. Em muitas situações, a informação pode ser obtida a partir de leituras directas dos processos e nos casos da não existência destas, pode sempre recorrer-se à resolução dos modelos físico-químicos para gerar informação suficiente para o treino da rede. Nestes casos, estas estruturas deverão ser novamente treinadas quando existirem dados dos processos reais com o objectivo de gerar modelos mais robustos;
2. Fase de treino das redes. Este passo na aplicação de redes neuronais artificiais não é mais do que a resolução de um problema de optimização sem restrições. Para uma determinada estrutura considerada como possível para a representação do processo, é necessário determinar-se quais os pesos correspondentes à estrutura neuronal que minimize o somatório dos quadrados dos desvios entre as saídas da rede e os valores de saídas conhecidos. Quando se consideram estruturas neuronais com camadas intermédias existem graus de liberdade adicionais, que correspondem ao número de camadas intermédias, bem como ao número de neurónios dessas mesmas camadas. Até hoje ainda não foi possível encontrar regras gerais que permitam *à priori* determinar esses parâmetros. Geralmente, usa-se um critério baseado no método tentativa-erro. A estrutura que apresenta o valor do somatório dos quadrados dos resíduos menor, é a adoptada na modelização do sistema.

São vários os algoritmos de optimização que podem ser utilizados na fase de treino destas estruturas. A maior parte das aplicações de redes neuronais artificiais utilizam o algoritmo de retro-propagação ou seus derivados (Apêndice A) para o ajuste dos pesos das estruturas artificiais (Baba et al., 1994; Leonard e Kramer, 1990) a partir dos valores iniciais dos pesos determinados aleatoriamente. Apesar do comportamento regular apresentado por estes algoritmos na maior parte das aplicações, neste trabalho é sugerido o algoritmo simplex (Apêndice B), como algoritmo a utilizar na procura dos pesos das estruturas neuronais artificiais (Martins e Coelho, 1996; Press et al., 1986; Tao, 1988). O primeiro algoritmo é um método de convergência indirecto, isto é, trata-se de um método que recorre à utilização das derivadas das funções de transferência dos nós para ajustar os pesos, enquanto que o segundo é um método de convergência directo. As derivadas das funções de transferência não necessitam de ser calculadas. Este método, além de encontrar em todas as situações um mínimo (local ou global), permite a utilização de diferentes funções de transferência nos nós sem que se

=====

auamente a complexidade de cálculo. Estas constituem as principais razões de se ter adoptado o algoritmo simplex na determinação dos parâmetros das redes neuronais artificiais em todo o trabalho desenvolvido. Outros métodos que podem ser usados no ajuste dos parâmetros das redes são os algoritmos genéticos (Kato e Watanabe, 1994), o algoritmo de Davidon (Kasparian et al., 1994) entre outros (Robitaille et al., 1996; Savkrovic-Stevanovic, 1994).

3. Fase de validação das redes. Nesta fase procede-se ao teste da rede neuronal artificial. A esta estrutura são submetidas novas entradas (não usadas durante a fase de treino) e os valores calculados à saída da rede são comparados com as saídas disponíveis, correspondentes aquelas entradas.

3.5 Casos estudados

A aplicação de redes neuronais artificiais à modelização de processos químicos é testada através de sistemas em que existe informação relevante e representativa dos processos envolvidos. A informação recolhida para a criação das estruturas neuronais artificiais, nos casos abordados neste capítulo, é obtida a partir da resolução dos modelos físico-químicos convencionais. Os casos estudados são sistemas clássicos de engenharia do processo químico.

Como já foi referido neste capítulo, aplicam-se redes neuronais artificiais não-lineares directas segundo os procedimentos descritos na Secção 3.4. Para cada situação, são apresentados os estudos efectuados com várias configurações de rede, usando os algoritmos de aprendizagem de retro-propagação de erros e o simplex, tendo como função objectivo a minimização do somatório dos quadrados dos desvios (diferença entre os valores de saída disponíveis e os calculados pelas estruturas neuronais artificiais). Proceder-se-á igualmente à validação de estruturas neuronais artificiais, através da análise de situações de interpolação e de extrapolação relativamente ao domínio dos valores utilizados em treino.

3.5.1 Caso 1 – Estudos de dispersão em dois tanques agitados em série

A determinação do valor do caudal em sistemas de escoamento constante é um problema frequentemente encontrado em engenharia. A estimativa desse valor pode ser obtida indirectamente através da injeção de uma substância, como por exemplo, um corante inerte, seguido de monitorização à entrada e saída da concentração dessa substância. No caso de dois tanques em série, e admitindo agitação perfeita, é possível encontrar um modelo

baseado nos princípios físico-químicos para o sistema (Apêndice C). Recorrendo a este modelo e às medidas de concentração da substância pode estimar-se o caudal circulante.

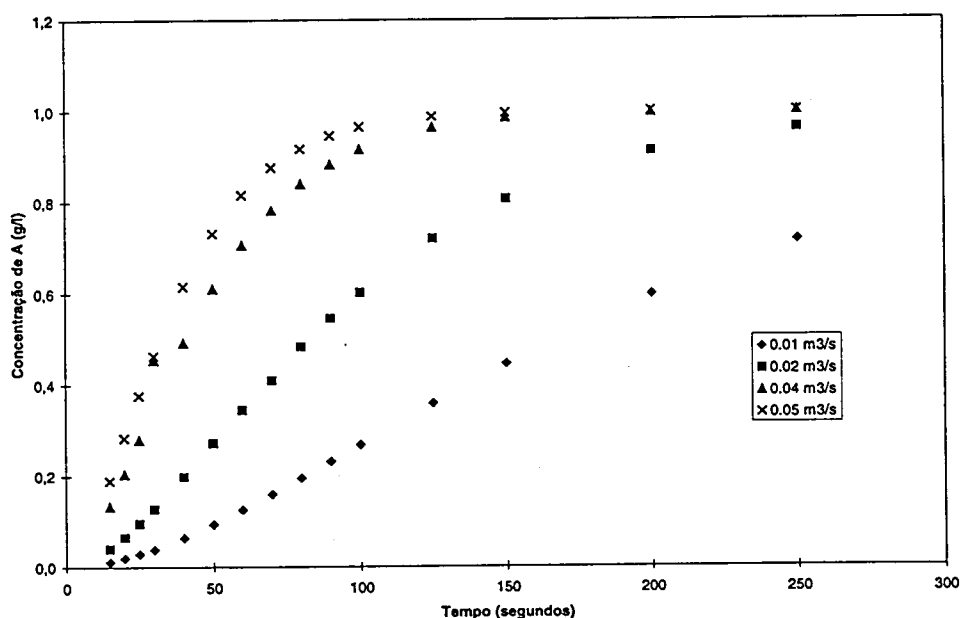


Figura 3.2: Dados utilizados na fase de treino da rede neuronal artificial.

Neste estudo pretende encontrar-se uma estrutura neuronal artificial que permita também estimar o caudal que flui ao longo do circuito em dois tanques agitados em série. Os dados utilizados na fase de treino das redes neurais artificiais são apresentados na Figura 3.2 e foram gerados a partir da simulação do modelo convencional (Apêndice C) para 4 situações diferentes. Neste caso, escolhem-se estruturas neurais artificiais com 15 entradas e 1 saída. As entradas correspondem aos valores das concentrações normalizadas em determinados instantes de tempo, como indicado na Figura 3.2 e a saída da rede é o valor do caudal normalizado. O número de exemplos de treino, para este caso é 4 e a função objectivo é igual ao somatório dos desvios entre os valores do caudal circulante obtidos pela rede neuronal artificial e os valores normalizados de caudal disponíveis em todos os exemplos de treino. A Tabela 3.1 apresenta resultados do treino de várias configurações de rede usando as funções de transferência sigmóide e tangente hiperbólica nos nós das camadas intermédia e de saída. Nesta tabela, por exemplo, a configuração, 15*3*1, refere-se a uma rede neuronal artificial com 15 neurónios na camada de entrada, 3 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída.

Tabela 3.1: Treino de várias configurações de rede com o algoritmo simplex

Configuração	Iterações	F. objectivo (Sig.)	F. objectivo (Tanh)
15*1	5000	2,36E-31	5,25E-31
15*1*1	5000	1,02E-31	6,66E-30
15*2*1	5000	2,21E-29	1,03E-30
15*3*1	5000	1,27E-31	8,37E-31
15*4*1	5000	6,28E-21	1,24E-21
15*5*1	5000	9,73E-16	9,69E-7

No treino de estruturas com as configurações indicadas na Tabela 3.1 utilizou-se o algoritmo simplex como método de procura dos pesos na minimização da função objectivo. Como se pode verificar por análise destes valores, pode dizer-se que qualquer uma das estruturas pode ser considerada como um modelo adequado para traduzir o comportamento deste sistema.

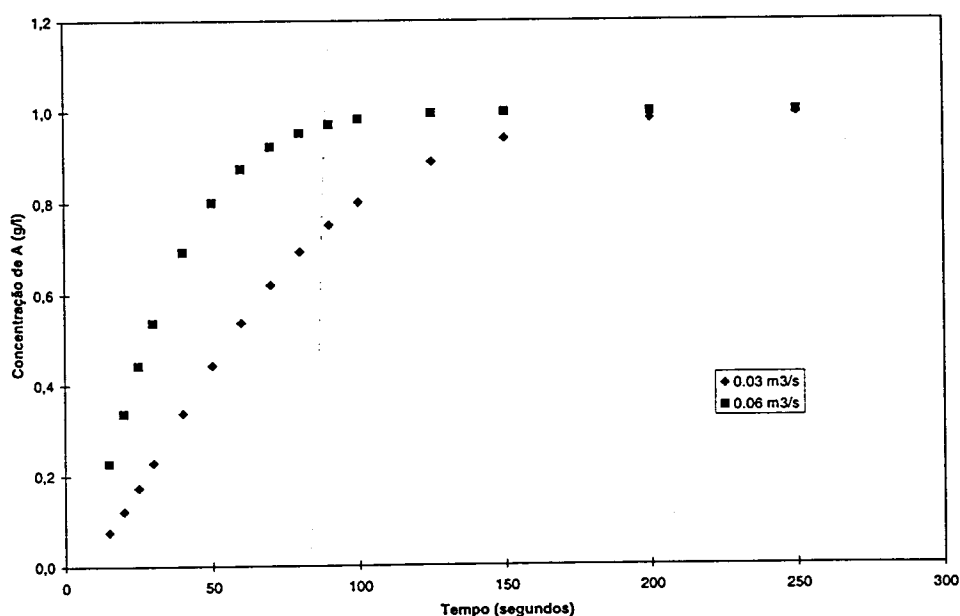


Figura 3.3: Dados utilizados na fase de validação da estrutura neuronal artificial para o sistema apresentado na Figura C.1 – Apêndice C.

Uma vez treinadas algumas das possíveis estruturas neuronais artificiais com capacidade de modelização do sistema, procedeu-se à validação de todas estas estruturas. Foram analisadas duas situações, uma correspondente a uma interpolação e outra correspondente a uma extrapolação relativamente aos dados usados na fase de treino.

Na Figura 3.3 representa-se os dados utilizados na fase de validação das estruturas neuronais artificiais para uma situação de interpolação, a que corresponde o caudal de 0,03 m³/s e para uma situação de extrapolação com o caudal de 0,06 m³/s.

Na Tabela 3.2 são apresentados os erros relativos calculados entre as previsões geradas pelas estruturas neuronais artificiais criadas e os valores normalizados dados pelo modelo convencional. Os erros calculados mostram que qualquer uma destas estruturas pode ser utilizada na representação física deste processo.

Tabela 3.2: Resultados da validação das estruturas neuronais artificiais.

Conf.	Interpolação			Extrapolação		
	V. verd.	V. calc.	Erro rel.(%)	V. verd.	V. calc.	Erro rel.(%)
15*1	0,030	0,029	3,3	0,060	0,059	1,6
15*1*1	0,030	0,030	0,0	0,060	0,058	3,3
15*2*1	0,030	0,031	3,3	0,060	0,059	2,6
15*3*1	0,030	0,029	3,3	0,060	0,056	6,6
15*4*1	0,030	0,030	0,0	0,060	0,057	5,0
15*5*1	0,030	0,029	3,3	0,060	0,056	6,6

Na Tabela 3.3 são apresentados os resultados dos estudos efectuados sobre aprendizagem de redes neuronais artificiais usando o algoritmo de retro-propagação de erros (Apêndice A), utilizando dois valores para o momento de aprendizagem (γ).

Tabela 3.3: Treino de estruturas neuronais artificiais com o algoritmo de retro-propagação de erros.

Configuração	Iterações	$\gamma=0,01$	$\gamma=0,05$
		F. objectivo	F. objectivo
15*1	5000	2,82E-3	1,94E-3
15*1*1	5000	7,53E-4	3,60E-1
15*2*1	5000	6,83E-4	3,02E-3
15*3*1	5000	7,48E-4	5,06E-4
15*4*1	5000	8,48E-4	5,66E-4
15*5*1	5000	9,55E-4	5,84E-4

Os resultados apresentados mostram que num mesmo número de iterações, os valores das funções objectivo calculados são significativamente inferiores se o método simplex for utilizado na determinação dos pesos das redes neuronais artificiais testadas. Este facto é observado em todas as configurações apresentadas na Tabela 3.1. Por exemplo, enquanto que através do método simplex o valor da função objectivo é de 1,27E-31 (configuração 15*3*1) ao fim de 5000 iterações, o método de retro-propagação de erros conduz ao valor da função objectivo de 7,98E-4 (configuração 15*3*1) ao fim das mesmas 5000 iterações.

3.5.2 Caso 2 – Determinação da conversão num reactor tubular com dispersão axial

Segundo o modelo físico-químico deste sistema, descrito em Apêndice D, a conversão num reactor tubular com dispersão axial, em operação isotérmica, está relacionada com os números de Peclet mássico e de Damköhler (Froment e Bischoff, 1990). É objectivo de estudo encontrar um modelo baseado em redes neuronais artificiais que preveja a conversão no reactor numa dada secção, em função dos números de Peclet e de Damköhler. Na Figura 3.4 são representados os dados calculados a partir da resolução do modelo descrito e que foram utilizados na fase de treino da rede neuronal artificial.

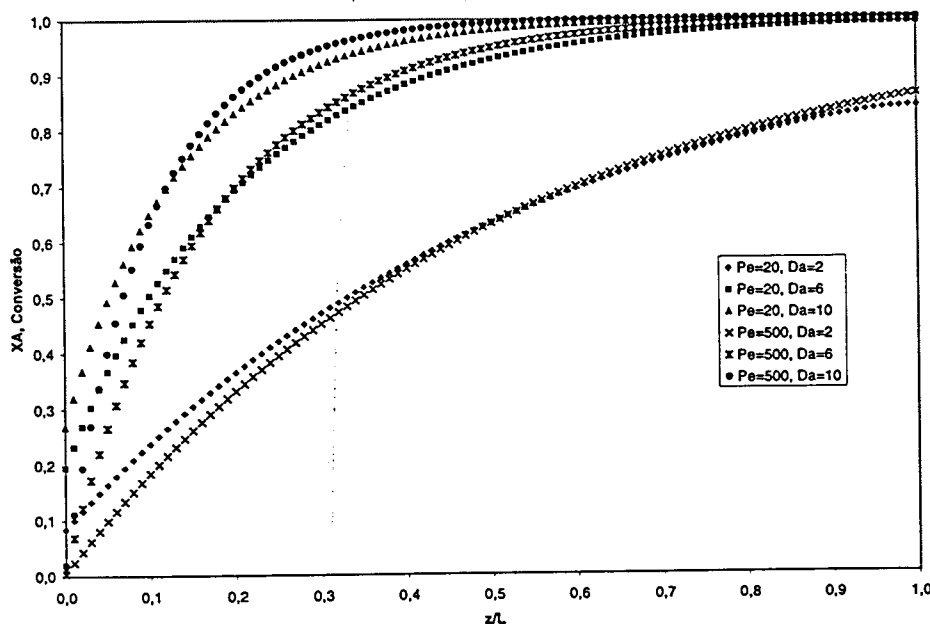


Figura 3.4: Dados utilizados no treino da rede neuronal artificial para o estudo da conversão no reactor tubular.

Como no exemplo anterior, foram testadas várias estruturas com o objectivo de encontrar a que melhor traduzia o comportamento do sistema. Nestas estruturas consideraram-se 3 entradas normalizadas (correspondentes aos números de Peclet e Damköhler e ao comprimento adimensional do reactor) e uma saída (conversão correspondente ao comprimento adimensional e aos números adimensionais considerados). A função objectivo usada é obtida através do somatório dos desvios entre os valores da conversão calculados pela rede neuronal artificial e os valores de conversão disponíveis em todos os exemplos de treino. O número de exemplos de treino considerados neste caso foi 910. Várias configurações foram treinadas como indicado na Tabela 3.4, em que se apresentam os valores das funções objectivo determinados recorrendo ao algoritmo simplex. Igualmente ao caso anterior procedeu-se ao treino de estruturas neuronais artificiais usando como funções

de transferência a função sigmóide e a função tangente hiperbólica nos nós da camada intermédia e da camada de saída. O critério de convergência usado foi que, numa dada iteração, a diferença entre a fracção correspondente ao valor máximo da função objectivo e a fracção correspondente ao valor mínimo fosse menor que 1,0E-10. Este critério pode ser traduzido pela seguinte expressão:

$$CConv = \frac{F_{\max}}{F_{\max} + F_{\min}} - \frac{F_{\min}}{F_{\max} + F_{\min}} \quad (3.1)$$

em que CConv representa o critério de convergência, Fmax e Fmin são os valores máximo e mínimo da função objectivo, numa dada iteração, respectivamente. Depois de atingir o critério pretendido utilizou-se o conjunto de parâmetros da rede neuronal artificial correspondente ao valor mínimo da função objectivo nessa iteração.

Tabela 3.4: Treino de redes neuronais artificiais com o algoritmo simplex

Configuração	Sigmóide		Tang. Hiperbólica	
	F. objectivo	Iterações	F. objectivo	Iterações
3*1	6,80	153	7,37	202
3*1*1	6,78	3331	6,70	285
3*2*1	6,78	4644	5,16	2806
3*3*1	1,36	6806	2,71	6291
3*4*1	0,86	9804	2,94	11474
3*5*1	1,17	11776		

Os resultados de treino das redes neuronais artificiais utilizando a função de transferência sigmóide nos nós das camadas intermédia e de saída, com o algoritmo retro-propagação de erros são apresentados na Tabela 3.5. Comparando os valores apresentados nesta tabela com os valores dados pela Tabela 3.4, verifica-se que mais uma vez, o algoritmo simplex conduz a valores de funções objectivo mais baixos num menor número de iterações. Por exemplo, para se atingir o valor da função objectivo 0,86 (função sigmóide nos nós das camadas intermédia e de saída) são necessárias 9804 iterações usando o algoritmo simplex, enquanto que, através do método de retro-propagação de erros são necessárias 10000 iterações para atingir o valor da função objectivo de 56,37.

Tabela 3.5: Resultados de treino com o algoritmo de retro-propagação de erros.

Configuração	γ	F. objectivo	Iterações
3*1	0,001	42,88	2000
3*1*1	0,01	57,22	4000
3*2*1	0,01	88,25	5000
3*3*1	0,01	56,72	7000
3*4*1	0,01	56,37	10000

Da análise da Tabela 3.4, conclui-se que a estrutura cujo treino determina um valor da função objectivo menor é constituída por 3 neurónios na camada de entrada, 4 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída. Assim, utilizou-se esta estrutura neuronal artificial para testar o grau de representação do processo através deste tipo de metodologias.

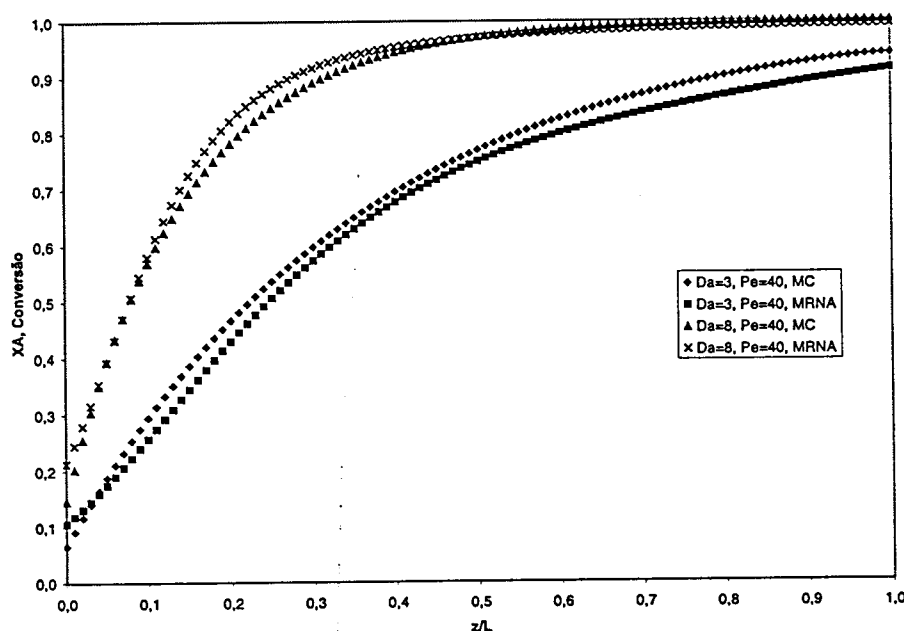


Figura 3.5: Validação da rede neuronal artificial – situações de interpolação relativamente aos dados usados no treino.

Nas Figuras 3.5 e Figura 3.6 apresentam-se a comparação de resultados obtidos através do modelo descrito e os da rede neuronal artificial considerada – rede com 3 neurónios na camada de entrada, 4 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída – para situações de interpolação e de extrapolação, relativamente ao domínio dos valores utilizados no treino da estrutura neuronal artificial gerada.

Em ambas as situações (interpolação e extrapolação) verificou-se que a rede neuronal artificial proposta representa o comportamento do sistema de acordo com os erros relativos apresentados nas Figuras 3.7 e Figura 3.8. Na Figura 3.7, os erros relativos são inferiores a 5% para a maior parte das situações, existindo apenas erros relativos superiores nas situações em que $z/L < 0,2$. Para as situações de extrapolação (Figura 3.8), os erros ultrapassam os 10% em algumas situações, nomeadamente quando $z/L < 0,2$.

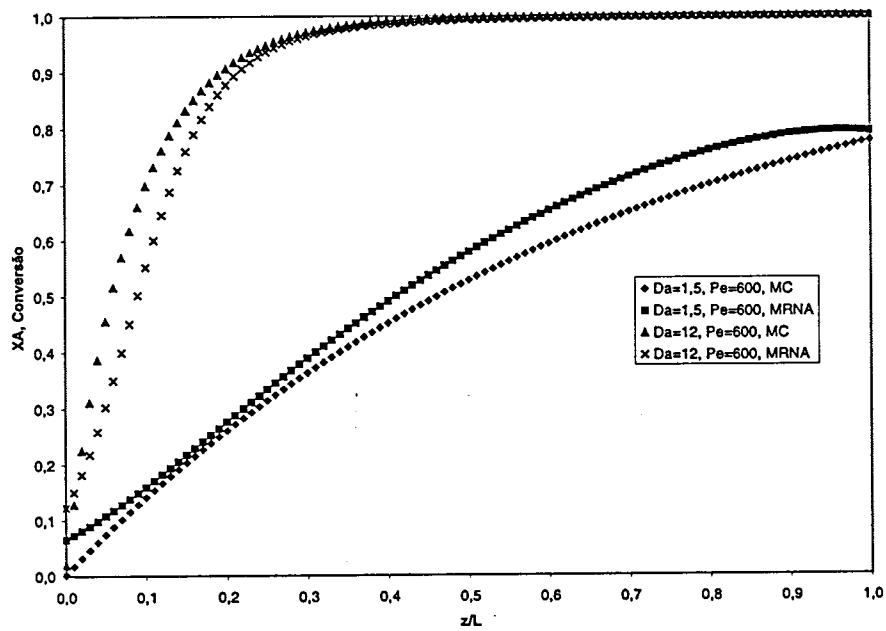


Figura 3.6: Validação da rede neuronal artificial – Situações de extrapolação relativamente aos dados usados no treino.

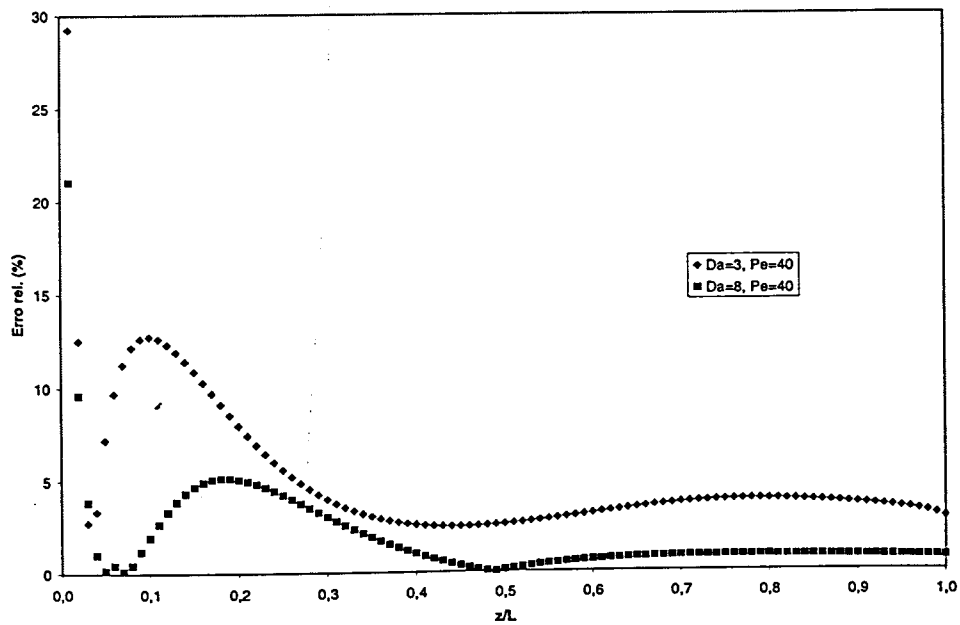


Figura 3.7: Erros relativos (%) para as situações de interpolação.

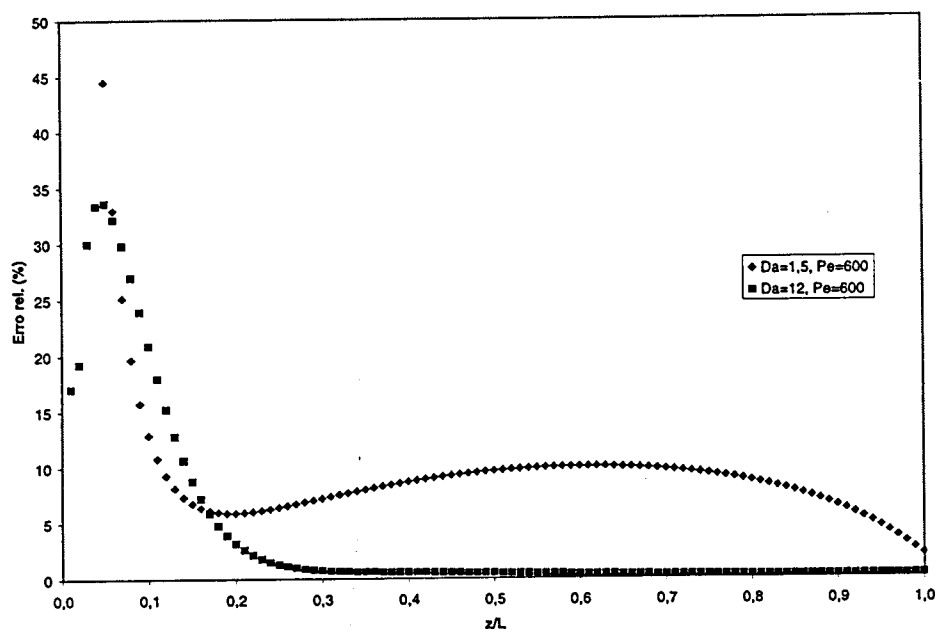


Figura 3.8: Erros relativos (%) para as situações de extrapolação.

3.5.3 Caso 3 – Determinação da conversão num reactor de polimerização descontínuo

A previsão da conversão ao longo do tempo num processo de polimerização em suspensão por partidas é uma variável bastante importante para estudos de optimização deste processo. Os modelos físico-químicos deste tipo de processos são em geral complexos. Segundo um modelo convencional, descrito em Apêndice E, as variáveis mais importantes deste processo são a temperatura da reacção, a fracção inicial de iniciador, a densidade do monómero, a densidade do polímero e o tempo (Rase, 1977). Assim, neste trabalho pretende encontrar-se um modelo baseado na técnica de redes neuronais artificiais que consiga prever o valor da conversão num reactor em função das variáveis descritas.

Na Figura 3.9 são representados os dados utilizados para o treino da rede neuronal artificial. Estes dados foram calculados com base em simulações a partir do modelo físico-químico descrito no Apêndice E. Os valores das densidades do polímero e do monómero usados para as simulações e treino foram 1,3 e 0,7 respectivamente.

Neste caso, o número de entradas da rede é 5 e corresponde aos valores normalizados de tempo, fracção inicial de iniciador, densidade do monómero, densidade do polímero e temperatura da reacção. A saída da rede corresponde ao valor da conversão para o tempo considerado. Do mesmo modo que nos dois casos de estudo anteriores, testaram-se várias configurações de rede variando o número de camadas intermédias (0 e 1) e o número de neurónios da camada intermédia. A Tabela 3.6 apresenta os valores das funções objectivo após treino usando a função sigmóide como função de transferência nos neurónios das camadas intermédia e de saída. A função objectivo corresponde ao somatório dos desvios

entre os valores da conversão calculados pelas redes neuronais artificiais e os valores de conversão disponíveis para treino. Para cada rede, o número de exemplos de treino foi 546 e o critério de convergência utilizado foi, mais uma vez, a diferença entre as frações correspondentes ao valor máximo e ao valor mínimo da função objectivo, ser menor que $1,0E-10$, calculada através da equação (3.1), numa dada iteração. Estes resultados foram obtidos usando o método simplex. Na Tabela 3.7 são apresentados resultados do treino de algumas destas configurações recorrendo ao algoritmo de retro-propagação de erros como método de aprendizagem dos pesos das diversas estruturas. Para qualquer configuração testada, a utilização do simplex determina funções objectivo menores com um menor número de iterações.

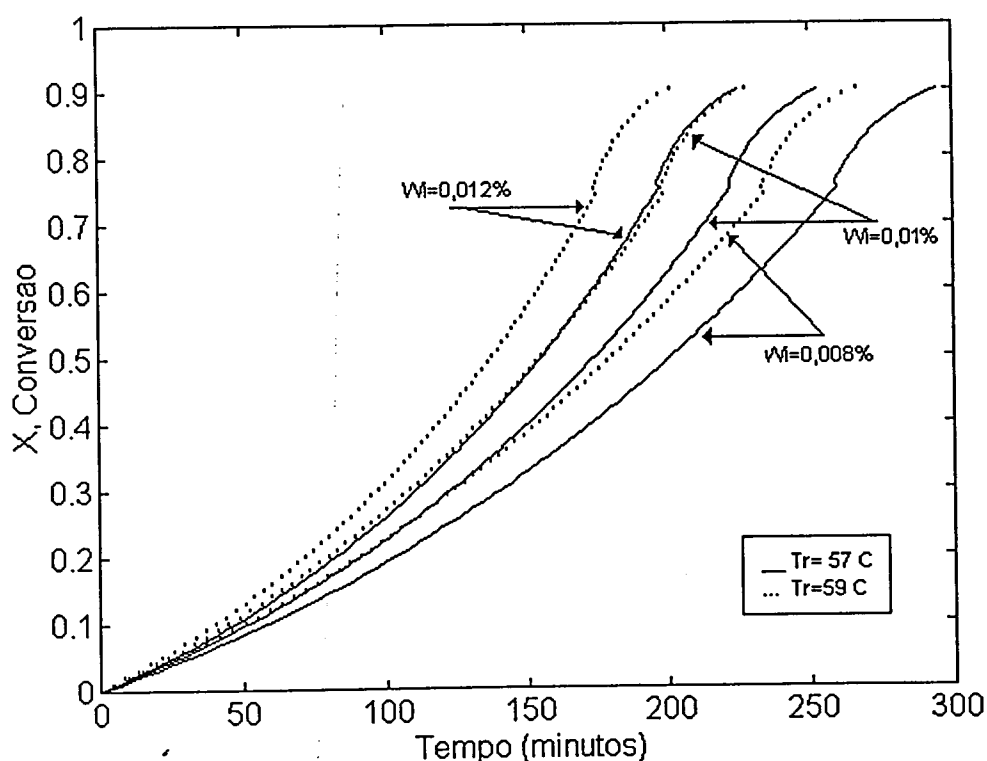


Figura 3.9: Dados para treino da rede neuronal artificial para a previsão da conversão em função do tempo num reactor de polimerização.

Tabela 3.6: Estudo de várias configurações de rede pelo algoritmo simplex.

Configuração	Sigmóide		Tang. Hiperbólica	
	F. objectivo	Iterações	F. objectivo	Iterações
5*1	1,78	213	2,60	240
5*1*1	1,67	644	1,67	1760
5*2*1	1,65	3825	0,35	45678
5*3*1	0,66	7258	0,39	51296
5*4*1	0,17	42340	0,28	13196
5*5*1	0,20	92354	0,43	16361

Tabela 3.7: Resultados do treino com o algoritmo de retro-propagação de erros (função de transferência – sigmóide)

Configuração	γ	F. objectivo	Iterações
5*1	0,001	1,80	1000
5*1	0,001	1,79	5000
5*1	0,01	1,85	1000
5*1*1	0,01	3,11	1000
5*2*1	0,01	1,88	4000
5*3*1	0,001	4,60	8000
5*3*1	0,0001	3,65	8000
5*4*1	0,01	3,40	50000

A análise dos resultados apresentados nas Tabelas 3.6 e Tabela 3.7 permite concluir que o cálculo dos parâmetros das estruturas neuronais artificiais através do método simplex conduz a valores mais baixos da função objectivo do que o método de retro-propagação de erros.

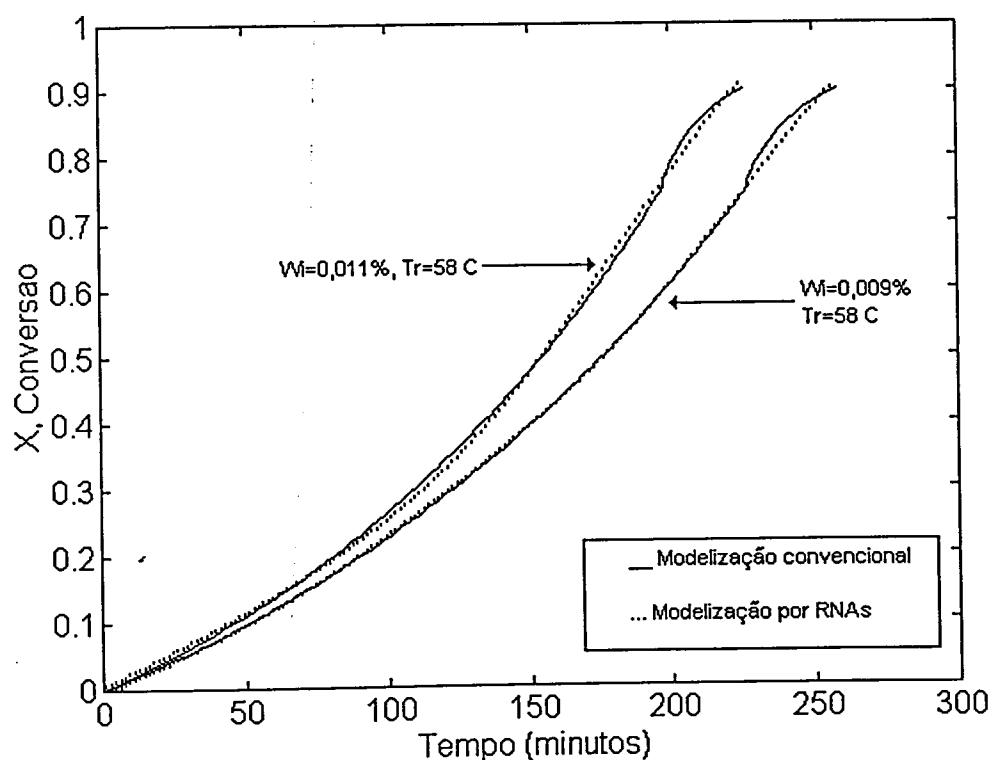


Figura 3.10: Validação da rede neuronal artificial para a conversão no reactor de polimerização – Situações de interpolação.

A estrutura neuronal com 3 camadas, possuindo 5 neurónios na camada de entrada, 4 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída (Tabela 3.6) usando a função sigmóide nos nós das camadas intermédia e de saída é a que apresenta o

valor da função objectivo menor. Esta estrutura foi utilizada para testar o desempenho deste tipo de estruturas na simulação deste processo de reacção. Através da análise das Figuras 3.10 e Figura 3.11, é possível comparar os valores calculados pelo modelo clássico e os valores previstos pela rede neuronal artificial criada, dentro e fora dos limites do domínio dos valores usados na fase de treino da estrutura considerada.

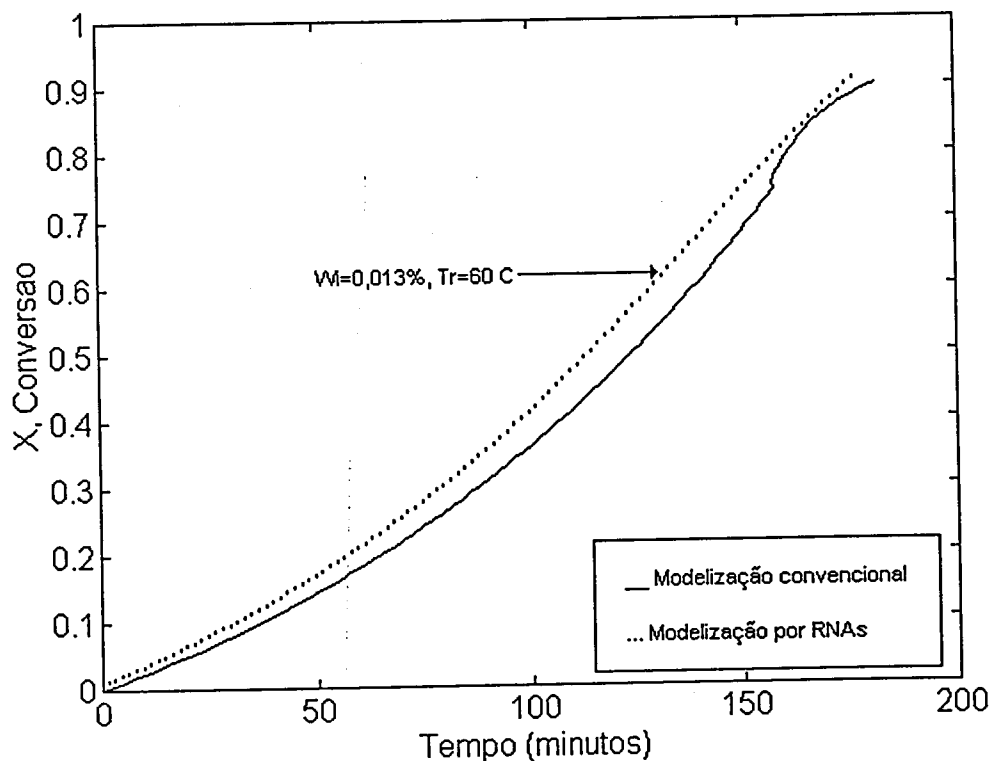


Figura 3.11: Validação da rede neuronal artificial para a conversão no reactor de polimerização – Situações de extrapolação.

Todos os dados utilizados nos três casos estudados foram gerados a partir da resolução de modelos físico-químicos, no entanto, eles poderiam ter sido gerados a partir de leituras dos processos e as estruturas neuronais poderiam ter sido treinadas a partir desses valores.

3.6 Conclusões

A aplicação das técnicas de modelização por redes neuronais artificiais aos três casos estudados mostrou-se eficaz e bastante prometedora. No estudo dos três casos foi explorada a hipótese de aplicação destas estruturas em zonas de extrapolação – valores das entradas fora dos limites dos valores das variáveis usadas durante o treino. Apesar dos resultados obtidos nas zonas de extrapolação (fora dos limites de aprendizagem da rede) serem coerentes com os calculados através dos modelos clássicos utilizados, é de referir que esta

concordância não constitui regra, já que estas estruturas artificiais não são construídas com base nos modelos físico-químicos dos processos.

O método de otimização simplex utilizado para o ajuste dos parâmetros das redes neurais artificiais foi testado, e revelou-se um método de convergência rápida para os problemas analisados. Em todos os casos analisados, os valores das funções objectivo determinados por este método são menores dos que foram obtidos com a utilização do algoritmo de retro-propagação de erros. Por outro lado, a possibilidade de alteração das funções de transferência dos diferentes nós, constituintes das redes neurais artificiais contribui para a sua facilidade de utilização na resolução deste tipo de problemas.

Os vários trabalhos referenciados neste capítulo e os casos estudados focaram-se na aplicação destas estruturas à modelização de processos químicos. Os resultados obtidos evidenciam a potencialidade desta técnica como método de previsão, através dos modelos artificiais criados.

3.7 Referências

- Baba, N., Mogami, Y., Kohzaki, M., Shiraishi, Y. e Yoshida, Y., "A Hybrid Algorithm for Finding the Global Minimum of Error Function of Neural Networks and Its Applications", *Neural Networks*, 7(8), pp. 1253-1265, 1994.
- Barati, R., Vacca, G. e Servida, A., "Neural Network Modelling of Distillation Columns", *Hydrocarbon Processing*, 74(6), pp. 35-38, 1995.
- Baughman, D. R. e Liu, Y. A., "An Expert Network for Predictive Modeling and Optimal Design of Extractive Bioseparations in Aqueous Two-Phase Systems", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 33(11), pp. 2668-1687, 1994.
- Bhagat, P. "An introduction to Neural Nets", *Chemical Engineering Progress*, 86(8), pp.55, 1990.
- Boullart, L., Krijgsman, A. e Vingerhoeds, R. A., "Application of Artificial Intelligence in Process Control.", 1ª edição, Pergamon Press, Oxford, 1992.
- Chitra, S. P., "Use Neural Networks for Problem Solving", *Chemical Engineering Progress*, 89(4), pp. 44-55, 1993.
- Crowe, E. R. e Vassiliadis, C. A., "Artificial Intelligence: Starting to Realize Its Practical Promise", *Chemical Engineering Progress*, 91(1), pp. 22 -31, 1995.
- Farrell, A. E. e Roat, S. D., "Framework for Enhancing Fault Diagnosis Capabilities of Artificial Neural Networks", *Computers Chem. Engng*, 18(7), pp. 613-635, 1994.

- Froment, G. F. e Bischoff, K. B., "Chemical Reactor Analysis and Design", 2ª edição, John Wiley & Sons, New York, 1990.
- Hoskins, J. C. e Himmelblau, D. M., "Artificial Neural Network Models of Knowledge Representation in Chemical Engineering", Computers Chem. Engng., 12 (9/10), pp. 881-890, 1988.
- Kan, P. e Lee, C.-J., "A Neural Network Model for Prediction of Phase Equilibria in Aqueous Two-Phase Extraction", Ind. Eng. Chem. Res., 35(6), pp. 2015-2023, 1996.
- Kasparian, V., Batur, C., Zang, H. e Padovan, J., "Davidon Least Squares-Based Learning Algorithm for Feedforward Neural Networks", Neural Networks, 7(4), pp. 661-670, 1994.
- Kato, S. e Watanabe, N., "Use of the Genetic Algorithm for Learning of Neural Networks", Proceedings of PSE'94, pp. 1311-1315, 1994.
- Keeler, D. J., "Prediction and Control of Chaotic Chemical Reactions Via Neural Network Models", Conference on Artificial Intelligence in Petroleum Exploration and Production, Plano, TX, May 19-22, 1993 (invited paper).
- Kramer, M. A., "Nonlinear Principal Component Analysis Using Autoassociative Neural Networks", AIChE Journal, 37(2), pp. 233-243, 1991.
- Leib, T. M., Mills, P. L. e Lerou, J. J., "Fast Response Distributed Parameter Fluidized Bed Reactor Model for Propylene Partial Oxidation Using Feed-Forward Neural Network Methods", Chemical Engineering Science, 51(10), pp. 2189-2198, 1996.
- Leonard, J. e Kramer, M. A., "Improvement of the Backpropagation Algorithm for Training Neural Networks", Computers Chem. Engng, 14(3), pp.337-341, 1990.
- Lin, J. J. L. e Wong, D. S. H., "Optimal Multiloop Feedback Design Using Simulated Annealing and Neural Network", AIChE Journal, 41(5), pp. 430-434, 1995.
- Martins, F. G. e Coelho, M. A. N., "A Neural Network Architecture for Chemical Process Simulation", submetido para publicação à revista Neural Networks, 1996.
- Montague, G. e Morris, J., "Neural Network Contributions in Biotechnology", Tibtech, 12, pp. 312-233, Agosto, 1994.
- Morris, A. J., Montague, G. A. e Wills, M. J., "Artificial Neural Networks: Studies in Process Modelling and Control", Trans IChemE, 72, Part A, pp. 3-19, 1994.
- Nahas, E. P., Henson, M. A. e Seborg, D. E., "Nonlinear Internal Model Control Strategy for Neural Network Models", Computers Chem. Engng, 16(12), pp. 1039-1057, 1992.

- Petersen, R., Fredeslund, A. e Rasmussen, P., "Artificial Neural Networks as Predictive Tool for Vapor-Liquid Equilibrium", *Computers Chem. Engng*, 18, Suppl., pp. S63-S67, 1994.
- Ponton, J. W., "Neural Networks: Some Questions and Answers", *Journal Process Control*, 2(3), pp. 163-165, 1992.
- Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. e Vetterling, W. T., "Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing", 1ª edição, Cambridge University Press, New York, 1986.
- Psychogios, D. C. e Ungar, L. H., "A Hybrid Neural Network-First Principles Approach to Process Modeling", *AIChE Journal*, 38(10), pp. 1499-1511, 1992.
- Ramasamy, S., Deshpande, P. B., Paxton, G. E. e Hajare, R. P., "Consider Neural Networks for Process Identification", *Hydrocarbon Processing*, 74(6), pp. 59-62, 1995.
- Rase, H. F., "Chemical Reactor Design for Process Plants - Case Studies and Design Data", 2ªVol., John Wiley & Sons, New York, 1977.
- Robitaille, B., Marcos, B., Veillette, M. e Payre, G., "Modified Quasi-Newton Methods for Training Neural Networks", *Computers Chem. Engng*, 20(9), pp. 1133-1140, 1996.
- Savkrovic-Stevanovic, J., "Neural Networks for Process Analysis and Optimization: Modeling and Applications", *Computers Chem. Engng*, 18 (11/12), pp. 1149-1155, 1994.
- Semple, T. C. e Worstell, J. H., "Rethink Your Model for Improving Processes", *Chemical Engineering Progress*, 92(3), pp. 56-61, 1996.
- Su, H.-T. e McAvoy, T. J., "Long-Term Predictions of Chemical Processes Using Recurrent Neural Networks: A Parallel Training Approach", *Ind. Eng. Chem. Res.*, 31(5), pp. 1338-1352, 1992.
- Tao, B. Y., "Optimization Via the Simplex Method", *Chemical Engineering*, pp. 15, Fev. 1988.
- Thompson, M. L. e Kramer, M. A., "Modeling Chemical Processes Using Prior Knowledge and Neural Networks", *AIChE Journal*, 40(8), pp. 1328-1340, 1994.
- Tsiirikis, A. G. e Reklaitis, G. V., "Application of Generalized Hopfield Networks to Discrete Nonlinear Optimization Problems", *Computers Chem. Engng*, 18(5), pp. 459-468, 1994.
- Wang, X. Z., Chen, B. H. e McGreavy, C., "Neural Nets, Fuzzy Sets and Digraphs in Safety and Operability Studies of Refinery Processes", *Chemical Engineering Science*, 51(10), pp. 2169-2178, 1996.
- Venkatasubramanian, V. e Chan, K., "A Neural Network Methodology for Process Fault Diagnosis", *AIChE Journal*, 35(12), pp. 1993-2002, 1989.

- Watanabe, K., Matsuura, I., Abe, M., Kubota, M. e Himmelblau, D. M., "Incipient Fault Diagnosis of Chemical Processes Via Artificial Neural Networks", AIChE Journal, 35(11), pp. 1803-1811, 1989.
- Watanabe, K., Hirota, S., Hou, L. e Himmelblau, D. M., "Diagnosis of Multiple Simultaneous Fault Via Hierarchical Artificial Neural Networks", AIChE Journal, 40(5), pp. 839-848, 1994.
- Zhu, Y.-H., Nagamune, T., Endo, I. e Linko, P., "Neural Networks in State Variable Prediction During Start-Up of Chemostat Culture for Ethanol Production by *Saccharomyces Cerevisiae* Yeast", Trans IChemE, 72 (Part C), pp.135-142, 1994.

Parte II

Modelização, Simulação e Controlo de Reactores Descontínuos

Capítulo 4

Reactores Descontínuos. Análise Controlo/Eficiência Energética

Sumário

O estudo do processo de transferência de calor em reactores descontínuos onde se processam reacções exotérmicas é o objectivo principal deste capítulo. Duas configurações de transferência de calor são analisadas sob o ponto de vista energético e de controlo. Os sistemas de controlo utilizados neste capítulo baseiam-se em algoritmos de controlo convencionais – PIDs. Várias simulações são efectuadas no sentido de determinar a interacção controlo/eficiência energética.

4.1 Introdução

Nos últimos anos tem-se verificado um interesse crescente pelo estudo da dinâmica e do controlo na fase de projecto de novas instalações. A interacção entre o projecto da instalação e o controlo é relevante para situações em que se pretende projectar instalações integradas energeticamente, obedecendo às especificações previamente estabelecidas, em termos de requisitos dos produtos finais.

Os reactores descontínuos são extensivamente usados na indústria química, nomeadamente nas indústrias farmacêuticas e nas indústrias dos polímeros. Nos últimos anos, os processos descontínuos de reacção têm concentrado a atenção de cientistas e engenheiros dada a sua utilização crescente em unidades de produção multi-produto ou multi-processo.

São vários os trabalhos que têm sido publicados sobre simulação dinâmica de reactores descontínuos com controlo em tempo real (Akesson, 1985; Bretelle e Machietto, 1993) e treino de operadores para o escalonamento da operação (Bretelle et al., 1994). Apesar dos desenvolvimentos recentes de técnicas sofisticadas e expeditas de controlo para reactores descontínuos (Lee et al., 1996; Marroquim e Luyben, 1973; Peterson et al., 1992), ainda não existe muito conhecimento sobre metodologias que permitam integrar energeticamente esses sistemas, atendendo aos apertados requisitos de controlo. Apenas Nowicki (1991) introduziu o conceito de erro dinâmico na tentativa de encontrar um modelo mais realista para o processo de transferência de calor em reactores encamisados.

Nas secções seguintes vão ser apresentadas duas alternativas para o processo de transferência de calor em reactores descontínuos e simultaneamente analisar-se-á a interacção controlo/eficiência energética. Verificar-se-á como o estudo integrado do processo (controlo + processo de transferência de calor) é um factor decisivo para a selecção de alternativas, que satisfaçam as condições de processo estabelecidas.

4.2 Descrição dos sistemas

O comportamento dinâmico dos processos de reacção descontínuos e os efeitos de elementos estocásticos, como sejam, incertezas nas condições iniciais e variações de temperatura não esperadas, requerem eficientes sistemas de transferência de calor para controlar o desenvolvimento de um processo de reacção. Nestes processos, o problema do controlo da temperatura da reacção começa a ser extensivamente estudado devido fundamentalmente a várias razões:

- i) A sensibilidade da velocidade de conversão à temperatura;

- ii) A coexistência de fases de arrefecimento e de aquecimento durante um ciclo de reacção;
- iii) O uso de reactores de grande capacidade, em que os requisitos de qualidade dos produtos finais constituem um factor determinante;
- iv) Sensibilidade económica deste tipo de projectos ao consumo de utilidades e seu impacto ambiental.

Considerando um processo de reacção endotérmico, é clara a relação existente entre o sistema de transferência de calor e os custos operativos da instalação. Esta característica é ainda mais relevante em processos exotérmicos, dado o aumento da complexidade dos sistemas de controlo necessários para operar sob segurança e segundo as especificações desejadas. Na prática, um grande número de processos de reacção por partidas, possui fases endotérmicas e exotérmicas, o que implica a existência de recursos, em termos de utilidades, para efectuar as operações de transferência de calor entre a mistura reaccional e o exterior.

O recurso à modelização e simulação dinâmica do processo de transferência de calor em reactores descontínuos permite avaliar estratégias de controlo alternativas e as respectivas condições de operação. Neste sentido pretende estudar-se um processo de reacção por partidas constituído por três passos principais:

1. Carga do reactor com reagentes;
2. Aquecimento da mistura reaccional através do fornecimento de vapor ou água quente à camisa do reactor;
3. Transferência do calor gerado durante a fase de reacção para o exterior e controlo da temperatura da reacção.

De forma a concretizar a análise destes sistemas, são apresentadas duas configurações alternativas para todo o sistema de transferência de calor:

- i) Um reactor encamisado (Figura 4.1) com adição directa de vapor ou água refrigerada à camisa do réactor;
- ii) Um reactor encamisado com adição directa de vapor ou água refrigerada à camisa do reactor, com um permutador de calor incorporado no circuito de aquecimento/arrefecimento (Figura 4.2).

O estudo realizado neste capítulo considera unicamente a fase de arrefecimento da mistura reaccional (fase da reacção), dada a sua grande importância, quer no projecto do sistema de utilidades, quer na especificação dos sistemas de controlo.

O ajuste constante do caudal de água refrigerada admitida ao circuito de arrefecimento do reactor, a uma temperatura inferior à temperatura ambiente, é o processo mais frequentemente utilizado para controlar a força directriz no processo de transferência de

calor, através da variação da temperatura da água na camisa do reactor. Este é o princípio de funcionamento do sistema de arrefecimento mais utilizado em operações industriais, encontrando-se representado esquematicamente na Figura 4.1.

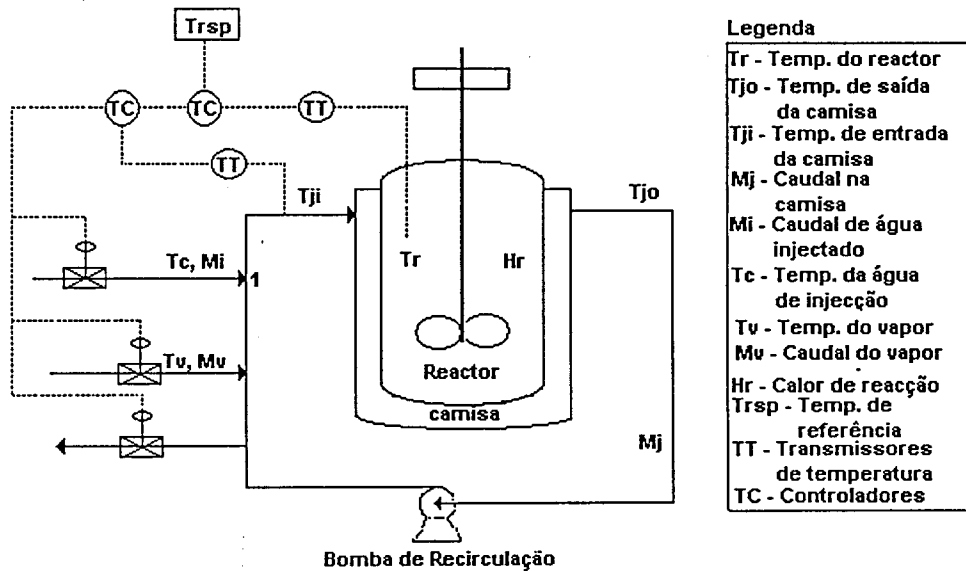


Figura 4.1: Configuração tradicional de transferência de calor em reactores encamisados.

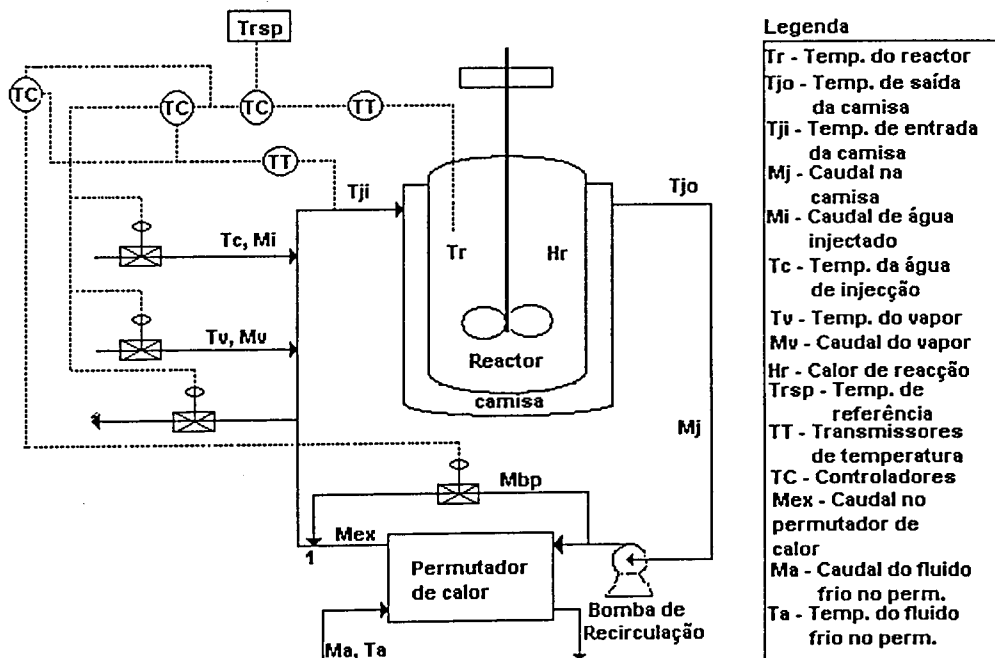


Figura 4.2: Configuração alternativa para o processo de transferência de calor.

A segunda configuração proposta tem como princípio a incorporação de um permutador de calor no circuito de arrefecimento do reactor, de acordo com a representação esquemática da Figura 4.2. Pretende testar-se a possibilidade de reduzir o consumo de

energia durante a fase de reacção através da minimização do caudal de água refrigerada injectada.

Uma visão geral das duas configurações permite antever que na configuração alternativa haverá uma redução da quantidade de água refrigerada admitida ao circuito de arrefecimento, assim como maior estabilidade do sistema em termos de variações instantâneas de caudal. No entanto, não é possível prever *à priori* o desempenho dinâmico de um sistema de controlo para esta configuração.

Na configuração tradicional, o ajuste da temperatura da reacção é efectuado por variação constante do caudal de água refrigerada que é injectada no circuito de arrefecimento do reactor. Na configuração alternativa, a mesma operação é realizada por variação do caudal que atravessa o permutador de calor. Nas situações em que a capacidade do permutador não é suficiente, existe admissão de água refrigerada ao circuito da camisa do reactor.

Nas Figuras 4.1 e Figura 4.2, T_r representa a temperatura da reacção, T_{rsp} representa o valor da temperatura de referência da reacção (valor a seguir), T_c é a temperatura da água refrigerada, M_i é o caudal de água refrigerada injectada no circuito de arrefecimento, M_j representa o caudal de água na camisa (valor constante), T_{ji} e T_{jo} são, respectivamente, a temperatura de entrada e de saída da água na camisa, H_r é o calor de reacção e T_v e M_v são a temperatura e o caudal de vapor injectado durante a fase de aquecimento no circuito da camisa do reactor, respectivamente. Nestas figuras, TC referencia um controlador de temperatura e TT um transmissor de temperatura. Na Figura 4.2, M_{ex} representa o caudal de água que passa no permutador de calor e M_{bp} representa o caudal de água que passa no circuito externo ao permutador de calor. M_a e T_a são o caudal e a temperatura de entrada do fluido frio no permutador de calor (água à temperatura ambiente).

As equações dos modelos de simulação das duas configurações são apresentadas na Secção 4.5, conjuntamente com as equações de modelização dos sistemas de controlo. A resolução simultânea das equações dos modelos e das equações dos sistemas de controlo permitem estudar o comportamento dinâmico do reactor, em termos da evolução da temperatura da reacção e determinar as condições operatórias para as duas configurações propostas.

4.3 Controlo/eficiência energética dos processos

A modelização e a simulação dinâmica do processo de transferência de calor em reactores descontínuos é aqui desenvolvida com o objectivo de encontrar mecanismos de transferência de calor mais eficientes. A forma como a estrutura base e seu dimensionamento se reflectem

no controlo da temperatura da reacção é analisada através dos modelos desenvolvidos. As inter-relações entre o projecto do sistema de arrefecimento do reactor, o consumo de utilidades e o controlo da temperatura da reacção constituem o objecto de estudo.

4.4 Implementação do controlo clássico (PIDs)

No processo de transferência de calor tradicionalmente adoptado o controlo em cascata é geralmente implementado para controlar a temperatura da reacção. Este tipo de controlo tem demonstrado ser bastante robusto para sistemas em que as perturbações estão associadas às variáveis manipuladas, ou quando a variável de controlo apresenta comportamentos não-lineares. Para o controlo da temperatura da reacção, um sistema de controlo simples (com um único controlador PID) seria capaz de ajustar a válvula de controlo da corrente de injeção de água refrigerada. Contudo, um aumento na temperatura da água na entrada da camisa do reactor pode provocar um aumento da temperatura da reacção, dada a diminuição da força directriz no processo de transferência de calor. Este efeito pode intensificar-se ainda mais devido ao atraso constante na acção correctiva do controlador, em situações que se prevejam atrasos dinâmicos apreciáveis no sistema (reactor + ciclo de refrigeração).

Para evitar os problemas atrás referidos adopta-se o sistema de controlo em cascata, controlando a temperatura da água à entrada da camisa do reactor através de um ciclo de realimentação interno. A referência deste controlador é determinada pelo controlador principal da temperatura da reacção. O sistema de controlo em cascata é representado pelo diagrama de blocos apresentado na Figura 4.3(a). A referência do controlador principal e os valores medidos da temperatura da reacção e da temperatura da água à entrada da camisa são usados para ajustar uma única variável manipulada - o caudal de água refrigerada admitida ao circuito de arrefecimento do reactor. A principal vantagem da implementação do sistema de controlo em cascata é o facto do controlo de uma segunda variável medida implicar um melhor desempenho do ciclo de controlo primário (controlo da temperatura da reacção).

A configuração alternativa requer um sistema de controlo mais complexo. A Figura 4.3(b) mostra o diagrama de blocos para este sistema de arrefecimento. Em adição ao sistema de controlo em cascata descrito, um terceiro controlador (neste caso, um controlador PI) é necessário para controlar o caudal do circuito externo ao permutador de calor (corrente designada por M_{bp} na Figura 4.2). A referência deste controlador é determinada igualmente pelo controlador principal. O sistema de controlo proposto pode ser entendido como uma dupla cascata em paralelo, possuindo o mesmo valor de referência para os controladores secundários.

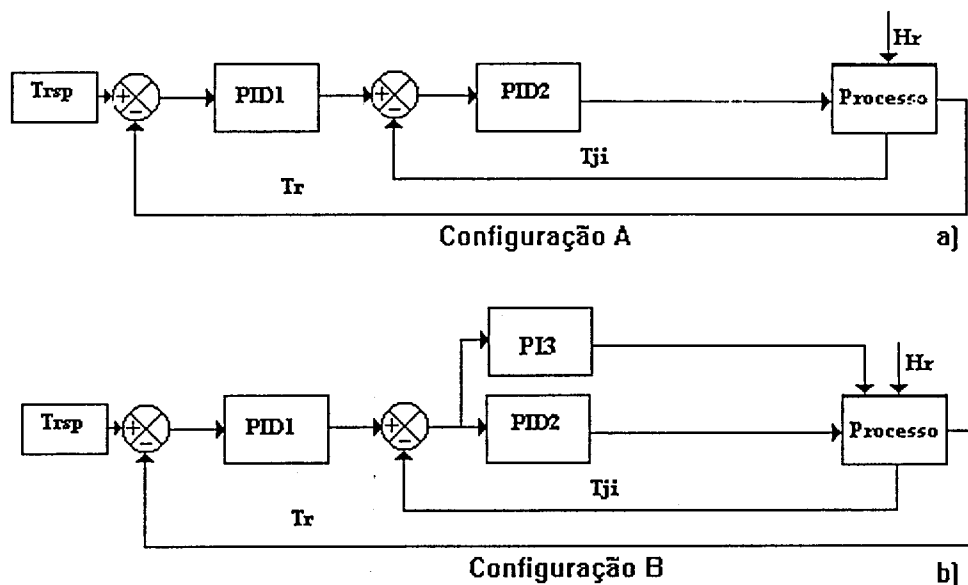


Figura 4.3: Diagrama de blocos para os sistemas de transferência de calor.

O processo de transferência de calor de uma reacção de polimerização foi o caso escolhido para testar as configurações alternativas de transferência de calor. Na Secção seguinte apresenta-se os modelos de simulação para as duas configurações e a equação utilizada na modelização dos controladores, bem como a estrutura de resolução.

Dois dos métodos mais utilizados para proceder à sintonização de controladores, isto é, à determinação dos seus parâmetros (K_c , τ_i e τ_d), são o método tentativa erro e o método que se baseia na minimização do integral absoluto do erro pesado no tempo – método ITAE (Seborg et al., 1989). Ambos os métodos recorrem à análise dos desvios entre a variável controlada e seu valor de referência, face a perturbações efectuadas em algumas variáveis do sistema. O primeiro método consiste em calcular os desvios, para vários valores dos parâmetros dos controladores. Os parâmetros dos controladores são escolhidos de forma que os desvios sejam os menores. No segundo método, a equação correspondente ao índice ITAE é definida do seguinte modo:

$$ITAE = \int_0^{\infty} t |e(t)| dt \quad (4.1)$$

São seleccionados os parâmetros dos controladores para os quais o valor de ITAE apresente o valor mais baixo.

Na configuração usual (apenas injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento), os parâmetros do controlador secundário (controlador interno) foram determinados pelo método tentativa erro face a perturbações na temperatura de referência da

água na entrada da camisa e os parâmetros do controlador externo foram determinados pelo método ITAE, mediante perturbações na temperatura de referência da reacção. Este critério foi também utilizado na sintonização do controlador do caudal que passa no circuito externo ao permutador de calor, para a configuração alternativa, perante perturbações na temperatura de referência da reacção.

O valor de ITAE obtido para a configuração usual foi de 2,72E5, para uma perturbação no valor de referência da temperatura da reacção de 1°C, utilizando o tempo de integração em segundos. Para esta configuração (Figura 4.1), os valores dos parâmetros dos controladores calculados estão apresentados na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Valores dos parâmetros dos controladores para a configuração de transferência de calor representada na Figura 4.1.

	PID1	PID2
K_c	30	-0,0243 m ³ /(sK)
τ_i (s)	406	9,0
τ_d (s)	49	5,5

Os sinais dos ganhos dos controladores são escolhidos de forma que as saídas dos controladores aumentem ou diminuam conforme os aumentos ocasionados nos desvios entre os valores de referência e os valores das variáveis medidas (Seborg et al., 1989). Assim, o ganho do controlador interno apresenta sinal negativo, uma vez que o caudal de água refrigerada injectada no circuito de arrefecimento deve aumentar quando a temperatura da água à entrada da camisa aumentar. Já para o controlador principal, o sinal adoptado, é positivo, pois, o valor da temperatura de referência da água à entrada da camisa deve diminuir quando a temperatura da reacção aumentar.

Na configuração alternativa adoptaram-se estes parâmetros para os controladores PID1 e PID2 determinando-se à *posteriori*, os parâmetros do terceiro controlador (PI3), recorrendo ao critério ITAE, mediante uma variação em degrau na temperatura de referência da reacção. Os valores encontrados para este controlador foram, $K_c=0,0778$ m³/(sK) e $\tau_i=16,0$ s. Em ambas as configurações considerou-se que as válvulas de controlo possuem uma dinâmica instantânea, sendo os ganhos incorporados nos valores de K_c dos controladores internos.

Na Secção 4.6 e no Apêndice F são apresentados os resultados obtidos através de simulações efectuadas após determinação dos parâmetros dos controladores para as duas configurações de transferência de calor. É analisado o desempenho das duas configurações

face a perturbações efectuadas na temperatura de referência da reacção e no calor de reacção. Alguns destes resultados foram igualmente apresentados em Martins e Coelho (1996a, 1996b).

4.5 Modelo de simulação para as duas configurações e para os controladores.

Sendo H_r , o calor instantâneo gerado dentro de um reactor descontínuo por uma reacção química, a transferência de calor, para a camisa do reactor, pode ser traduzida pela seguinte equação:

$$H_t = H_r - mC_p \frac{dT_r}{dt} \quad (4.2)$$

onde H_t representa o calor transferido do/para o reactor (positivo quando o calor é transferido do reactor para o exterior e negativo quando o calor é transferido do exterior para o reactor), m , a massa da mistura reaccional, C_p , a capacidade calorífica da mistura reaccional, T_r , a temperatura da reacção e t o tempo.

Admitindo temperatura uniforme dentro do reactor, o calor transferido entre a mistura reaccional e a água que circula na camisa é obtido através de:

$$H_t = UA_r \Delta T_{ln} \quad (4.3)$$

em que $1/UA_r$ representa a resistência à transferência de calor entre o conteúdo do reactor e a água na camisa e ΔT_{ln} é a média logaritmica da diferença de temperatura, definida como:

$$\Delta T_{ln} = \frac{(T_r - T_{jo}) - (T_r - T_{ji})}{\ln \left(\frac{T_r - T_{jo}}{T_r - T_{ji}} \right)} \quad (4.4)$$

sendo T_{ji} e T_{jo} as temperaturas da água à entrada e à saída da camisa do reactor, respectivamente.

Em situações em que as diferenças entre as temperaturas de entrada e de saída da água na camisa não são significativas, a seguinte aproximação é valida:

$$H_t = UA_r (T_r - T_j) \quad (4.5)$$

onde T_j é a temperatura média da água na camisa, descrita por:

$$T_j = \frac{T_{jo} + T_{ji}}{2} \quad (4.6)$$

Se o calor absorvido pela parede do reactor for desprezável em comparação com o calor transferido para a água da camisa, o balanço do calor vem dado pela seguinte expressão:

$$H_i = M_j C_{p_j} \rho_j (T_{jo} - T_{ji}) \quad (4.7)$$

onde M_j é o caudal de água que circula na camisa, C_{p_j} e ρ_j são a capacidade calorífica e a densidade da água, respectivamente.

Após injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento (ponto 1 na Figura 4.1), a equação do balanço do calor conjugada com a equação de balanço de massa conduz a:

$$\rho_j C_{p_j} M_j T_{ji} = \rho_j C_{p_j} (M_j - M_i) T_{jo} + \rho_j C_{p_j} M_i T_c \quad (4.8)$$

sendo M_i o caudal de água refrigerada injectada e T_c a temperatura da água refrigerada.

Quando existe o permutador de calor integrado no circuito de refrigeração, como representado na Figura 4.2, a equação (4.8) pode ser reescrita do seguinte modo:

$$\rho_j C_{p_j} M_j T_{ji} = \rho_j C_{p_j} (M_j - M_i) T_p + \rho_j C_{p_j} M_i T_c \quad (4.9)$$

onde T_p é a temperatura da água na camisa, no ponto de mistura da água que passa no permutador de calor, com a água que provém da saída da camisa e que passa no circuito externo ao permutador de calor (ponto 1 na Figura 4.2). As equações de balanço de energia para o processo de transferência de calor no permutador de calor são:

$$H_{ex} = \rho_j C_{p_j} M_{ex} (T_{jo} - T_{ho}) \quad (4.10)$$

e

$$H_{ex} = \rho_j C_{p_j} M_a (T_{ao} - T_a) \quad (4.11)$$

e a equação de transferência de calor traduz-se pela seguinte expressão:

$$H_{ex} = (UA)_{ex} \frac{(T_{jo} - T_{ao}) - (T_{ho} - T_a)}{\ln \left(\frac{T_{jo} - T_{ao}}{T_{ho} - T_a} \right)} \quad (4.12)$$

sendo H_{ex} , o calor transferido no permutador de calor, $1/(UA)_{ex}$, a resistência à transferência de calor no permutador de calor, M_{ex} e M_a , os caudais de água quente e fria no permutador de

calor, respectivamente. T_{ho} é a temperatura do fluido quente (água) à saída do permutador de calor e T_a e T_{ao} são as temperaturas de entrada e de saída do fluido frio (água) no permutador de calor, respectivamente.

A equação de balanço de energia correspondente ao ponto 1, representado na Figura 4.2 toma a seguinte forma:

$$\rho_j C_{p_j} M_j T_p = \rho_j C_{p_j} M_{bp} T_{jo} + \rho_j C_{p_j} M_{ex} T_{ho} \quad (4.13)$$

Do balanço mássico ao mesmo ponto, obtém-se:

$$M_{ex} = M_j - M_{bp} \quad (4.14)$$

As variáveis conhecidas para a simulação dos modelos para as duas configurações são:

1. mC_p , C_{p_j} , ρ_j , M_j , M_a , T_c , T_a , UA_r (UA)_{ex}. – parâmetros do processo (Tabela 3.2);
2. M_i e M_{bp} – valores obtidos a partir do sistema de controlo;
3. H_r – Valor inferido a partir da evolução real de um processo de polimerização em suspensão.

Tabela 4.2: Parâmetros dos sistemas de reacção

Parâmetro	Valor
mC_p	70 Mcal/K
UA_r	77 Mcal/(hK)
M_j	350 m ³ /h
C_{p_j}	1 kcal/(kgK)
ρ_j	1000 kg/m ³
T_c	9 °C
M_a	550 m ³ /h
T_a	Entre 16-22 °C
(UA) _{ex}	1100 Mcal/(hK)

Os valores de M_i e de M_{bp} são determinados pelos controladores do processo. Neste caso, usa-se controladores do tipo proporcional-integral-derivativo analógicos. A equação que traduz este comportamento é a seguinte:

$$p(t) = p_b + K_c \left[e(t) + \frac{1}{\tau_i} \int_0^t e(t) dt + \tau_d \frac{de(t)}{dt} \right] \quad (4.15)$$

sendo $p(t)$, o valor de saída do controlador no momento t , p_b o valor de estado estacionário ou valor inicial da saída do controlador, $e(t)$ é o erro no momento t (diferença entre o valor de

referência da variável controlada e o valor real da variável controlada), K_c , o ganho do controlador e τ_i e τ_d , os valores das constantes de tempo integral e derivativa do controlador, respectivamente.

Os diagramas das Figuras 4.4 e Figura 4.5 mostram a estrutura de resolução dos modelos para as duas configurações entre o intervalo de tempo t_1 e t_2 . Os valores de M_i e M_{bp} , calculados pelos controladores são considerados constantes entre estes dois instantes. Δt_s corresponde ao intervalo de integração ($< t_2 - t_1$). No exemplo de estudo usou-se o valor de Δt_s igual a 1 segundo e a diferença $\Delta t = t_2 - t_1$ igual a 10 segundos. O erro relativo usado na integração foi de 0,1 %. A simulação iniciou-se com $t_1 = 0$ segundos e $t_2 = 10$ segundos. Para a simulação ter início é necessário conhecer a temperatura da reacção ($T_r(0)$) para $t = t_1$ e uma estimativa do valor da temperatura da água à saída da camisa ($T_{j0}(0)$) no instante $t = t_1 + \Delta t_s$. O valor considerado no início é T_{j0} para o instante $t = t_1$. Após 10 segundos são calculados novos valores de saída dos controladores que entram na estrutura de resolução do modelo para continuar com a simulação. O processo de resolução continua, incrementando t_1 e t_2 em Δt e termina quando se atinge o tempo final de simulação. Os valores de M_i e M_{bp} são obtidos através da resolução de equações do tipo da equação (4.15). A parte integral dessas equações é resolvida recorrendo à regra de Simpson de 1/3 e a parte derivativa recorre ao método das diferenças finitas.

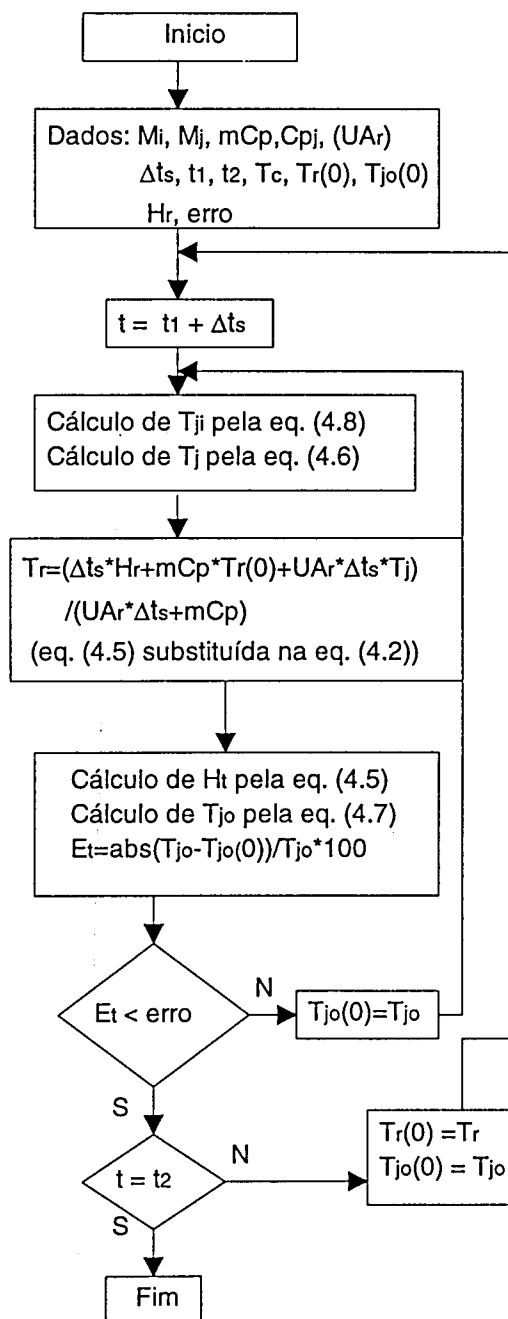


Figura 4.4: Estrutura de resolução do modelo para a configuração com injeção de água refrigerada.

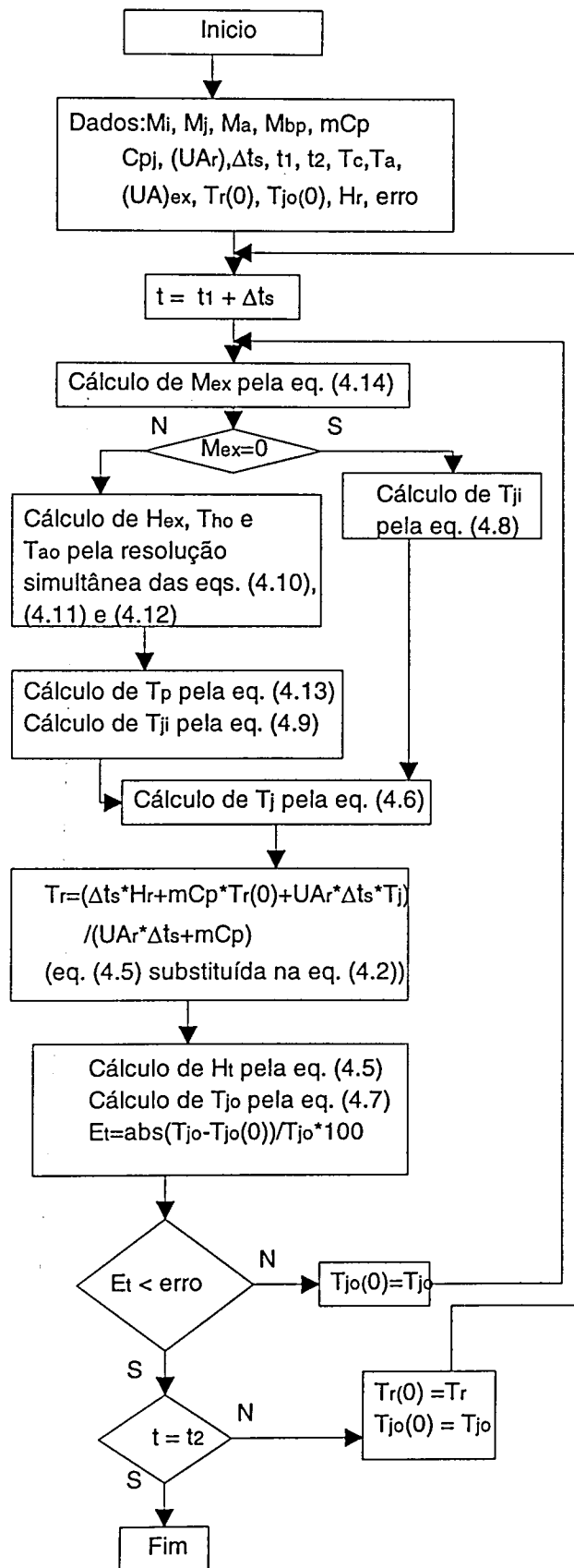


Figura 4.5: Estrutura de resolução do modelo do processo para a configuração com injeção de água refrigerada e permutador de calor.

4.6 Resultados e discussão

Nesta secção e nas secções posteriores adoptar-se-á a seguinte nomenclatura. A configuração A diz respeito ao processo de transferência de calor usual (apenas injeção de água refrigerada), sendo a configuração alternativa para o processo de transferência de calor denominada pela configuração B.

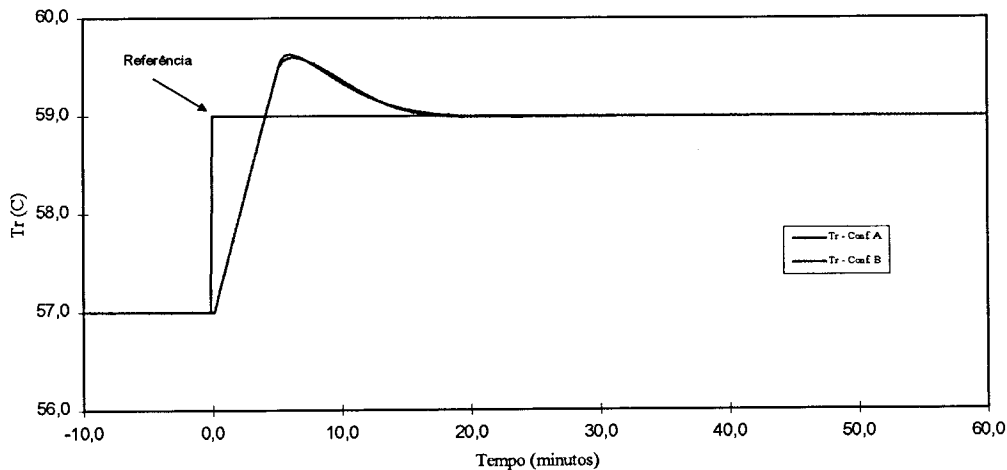


Figura 4.6: Evolução da temperatura da reacção depois de uma variação brusca de 2°C no valor da temperatura de referência da reacção.

A Figura 4.6 mostra a evolução da temperatura da reacção, para as duas configurações, quando é efectuada uma variação brusca de 2°C no valor de referência da temperatura da reacção. Os resultados são obtidos considerando que o calor da reacção (perturbação) se mantém constante e igual a 2100 Mcal/h. Como se pode ver pela figura, os resultados das simulações para os dois processos são muito idênticos.

Por outro lado, os resultados da simulação apresentados na Figura 4.7, relativamente aos perfis do caudal de injeção de água refrigerada em função do tempo, são bastante diferentes. Na configuração B, o aumento da temperatura da reacção que ocorre nos primeiros 5 minutos é compensado pelo aumento do caudal de água que atravessa o permutador de calor, enquanto que para a configuração A, este aumento de temperatura, conduz a um aumento do caudal de água a ser injectada no circuito de arrefecimento. Na configuração B, a diminuição da temperatura da água à entrada da camisa é possível por acção individual ou combinada de duas variáveis do processo: 1) aumento do caudal de água que atravessa o permutador de calor; 2) injeção de água refrigerada.

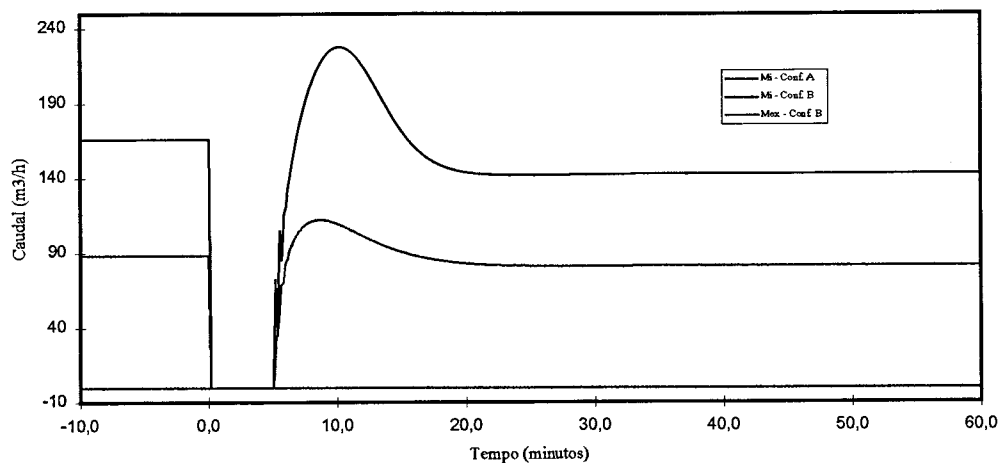


Figura 4.7: Evolução do caudal de água refrigerada injectada para as duas configurações e perfil de caudal de água que atravessa o permutador de calor para a configuração B.

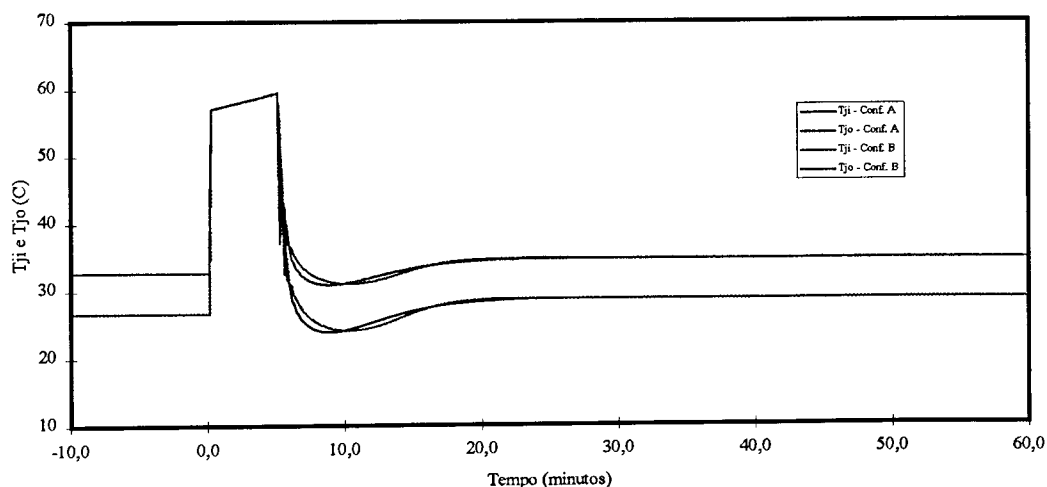


Figura 4.8: Valores da temperatura da água na entrada e na saída da camisa observadas em ambas as situações.

Os perfis das temperaturas da água na entrada e na saída da camisa em função do tempo estão representados na Figura 4.8. Embora o tempo para atingir a estabilidade dessas temperaturas seja o mesmo em ambas as situações, as variações das temperaturas, após a perturbação no valor de referência, são menores para a configuração B.

A diferença no comportamento observado deve-se ao efeito do aumento do caudal através do permutador de calor, que actua em primeiro lugar com o objectivo de atingir a temperatura pretendida da água à entrada da camisa.

Situações em que existem variações no calor de reacção e diminuição no valor de referência da temperatura da reacção também foram analisadas. Para tornar mais fácil a leitura desta tese, os resultados destas simulações, bem como a discussão estão compilados no Apêndice F.

Os resultados apresentados até aqui permitem verificar a evolução das diferentes variáveis processuais, para as duas configurações propostas. Seguidamente analisa-se o comportamento das duas configurações durante toda a fase de reacção.

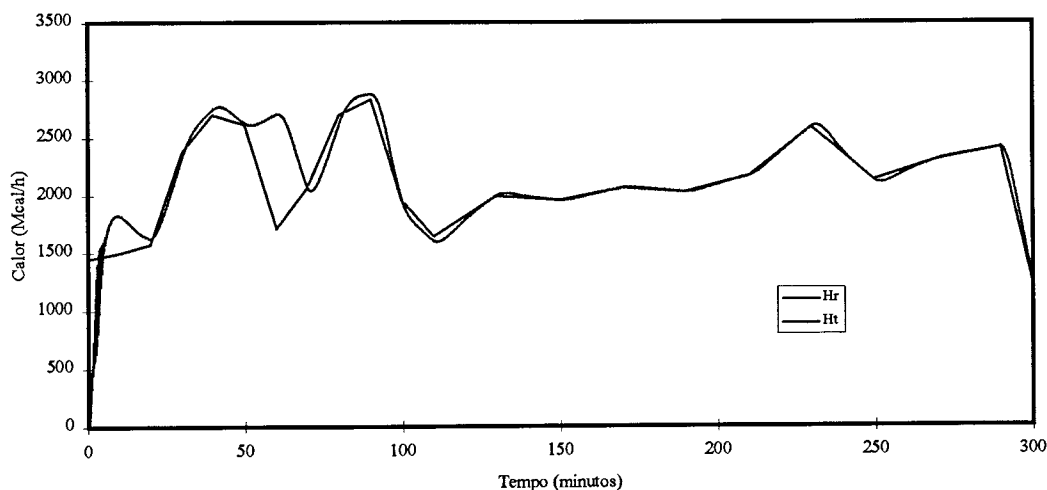


Figura 4.9: Comparação entre a evolução do calor de reacção (H_r), pré-estabelecida e os valores de calor efectivamente transferido para a camisa do reactor (H_t), obtidos por simulação.

A Figura 4.9 apresenta a comparação entre a evolução desejável do calor a ser transferido para a camisa do reactor, previsto através do valor instantâneo do calor de reacção (H_r) e o que foi efectivamente transferido (configuração A). O perfil do calor de reacção, presente nesta figura, corresponde à evolução real de um processo de polimerização em suspensão.

A temperatura da reacção a ser mantida foi estabelecida em 57°C. Os perfis de temperatura da reacção em função do tempo, para as duas configurações estão representados na Figura 4.10.

Os resultados das simulações referentes à evolução da temperatura da reacção mostram a estabilidade dos sistemas de controlo, mesmo em situações em que existem aumentos e diminuições bruscas no calor de reacção.

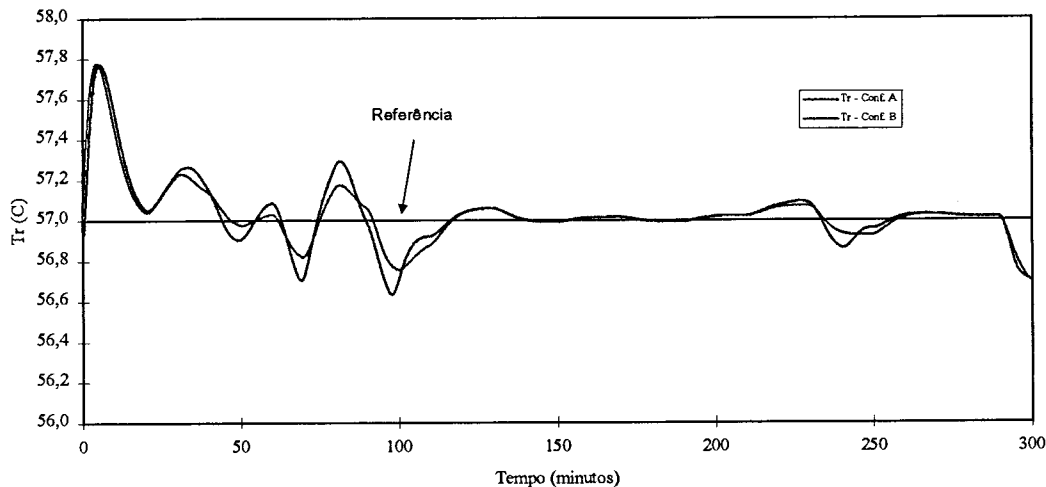


Figura 4.10: Evolução da temperatura da reacção para as duas configurações.

As temperaturas da água que circula na camisa do reactor à entrada e à saída foram calculadas com base nos modelos de simulação. Os resultados obtidos para a configuração A, estão representados na Figura 4.11. Nesta figura não se apresentou os valores obtidos para a configuração B, uma vez que estes eram praticamente idênticos. Convém salientar que para a configuração B, só é necessária a injeção de água refrigerada quando a temperatura de água no ponto de mistura da água que provém do permutador de calor e do circuito externo a este é superior à temperatura desejada à entrada da camisa.

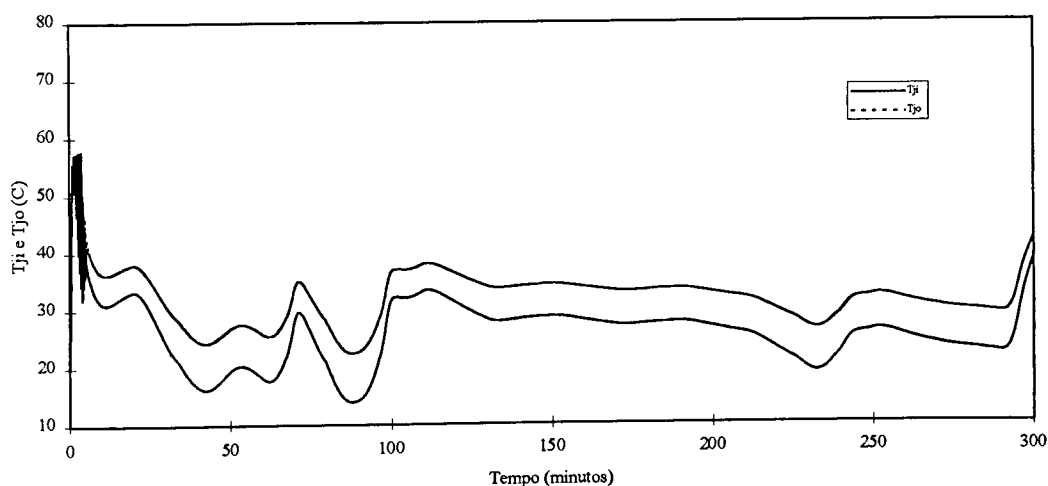


Figura 4.11: Temperaturas da água à entrada e à saída da camisa do reactor (configuração A).

A Figura 4.12 mostra a influência da temperatura ambiente no consumo de água refrigerada. Quando a temperatura ambiente é inferior a 18°C, o consumo de água refrigerada

é reduzido a 10% do valor original (configuração A). Este facto deve-se a que 95% do calor absorvido pela camisa do reactor é transferido no permutador de calor (H_{ex}) como pode ser observado por análise da Figura 4.13.

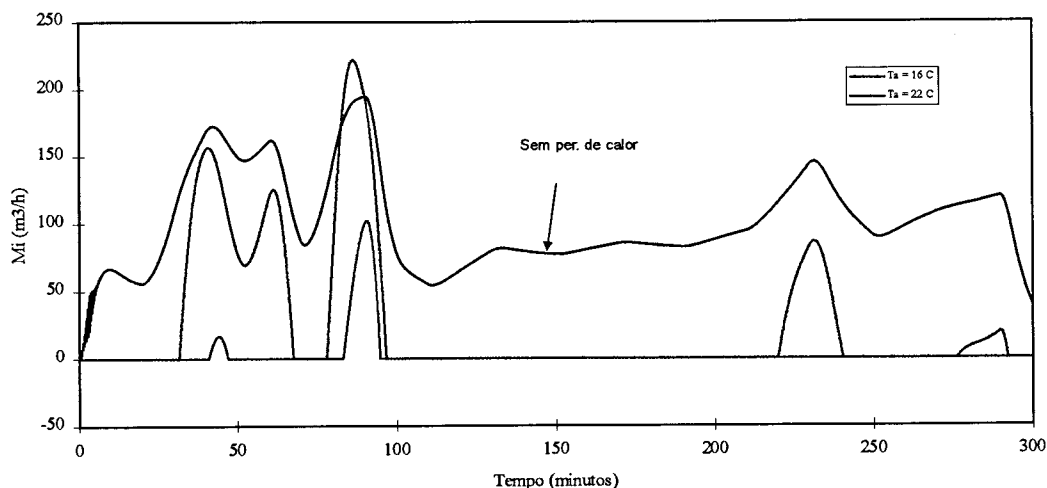


Figura 4.12: Influência da temperatura ambiente no consumo de água refrigerada.

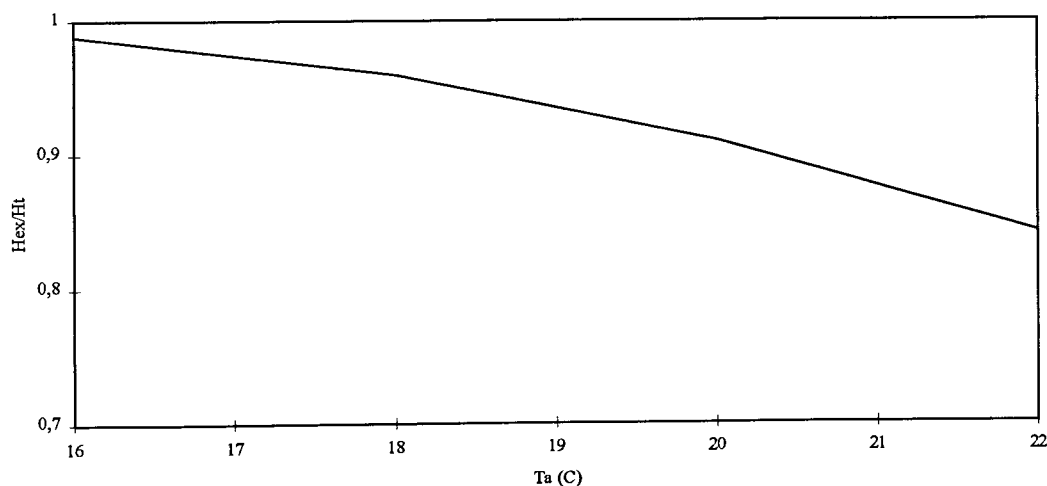


Figura 4.13: Razão entre o calor trocado no permutador de calor e o calor transferido para a camisa do reactor.

Considerando o limite superior para a temperatura da água de arrefecimento no permutador de calor de 22°C, dada as variações anuais e diurnas na temperatura ambiente, o consumo de água refrigerada na camisa reduz-se ainda a 25% do seu valor original (504 $m³$ por ciclo de reacção). A razão entre H_{ex}/H_t , quando a temperatura da água de arrefecimento no permutador de calor se situa na gama 16-22°C é calculada pela combinação da acção do permutador de calor e da injecção de água refrigerada (Figura 4.13).

Os perfis ao longo do tempo dos caudais injectados na camisa e do caudal através do permutador de calor, analisados em função da temperatura ambiente e do tempo, são apresentados no Apêndice F. Neste apêndice apresenta-se igualmente a dependência entre o consumo de água refrigerada e a área de transferência de calor do permutador de calor.

4.7 Conclusões

Neste capítulo examinou-se o impacto da introdução de um permutador de calor no circuito primário de transferência de calor de um reactor descontínuo.

Modelos do processo para a fase de arrefecimento foram desenvolvidos e utilizados para a sintonização do sistema de controlo. Foi objecto de análise o comportamento dinâmico do sistema durante toda a fase de arrefecimento do ciclo de reacção. Analisou-se também a influência dos parâmetros de operação (temperatura ambiente e área do permutador) na evolução do processo de transferência de calor alternativo com vista a determinar a influência no caudal de água injectada e no controlo do processo.

A utilização de um permutador de calor interno para a transferência parcial do calor de reacção é um método efectivo para o controlo da temperatura da reacção. As simulações realizadas deram-nos previsões realistas das variáveis processuais, em condições de operação normal, e face a variações bruscas do calor de reacção e/ou alterações da temperatura de referência. Não foram detectadas alterações significativas na evolução da temperatura da reacção, quando existe o permutador incorporado no circuito de arrefecimento do reactor.

Os resultados apresentados resumem os princípios de funcionamento do circuito de arrefecimento em ambas as configurações estudadas:

1. Na configuração A (Figura 4.1), o controlo da temperatura da reacção é realizada pela constante variação do caudal de injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento;
2. Na configuração B (Figura 4.2), o controlo da temperatura da reacção é realizado pela acção combinada de variações no caudal que circula através do permutador de calor e no caudal de injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento.

As simulações realizadas, para a fase de arrefecimento (fase de reacção), mostram uma redução significativa do consumo de água refrigerada por unidade de calor absorvido pela água que circula na camisa do reactor quando se incorpora um permutador de calor no circuito de arrefecimento.

O caudal que circula no circuito externo ao permutador de calor é a primeira variável a actuar no controlo da temperatura da reacção. Esta característica pode ser muito importante,

nomeadamente em situações de reacção altamente exotérmica. O permutador de calor é um meio adicional de prevenção de riscos térmicos, no caso de falhas dos sistemas de refrigeração. A introdução de um permutador de calor no circuito primário de arrefecimento parece não ter consequências negativas na dinâmica do sistema, de acordo com os resultados das simulações efectuadas.

Os estudos realizados neste capítulo mostram a importância da simulação global (controlo + processo) na avaliação de alternativas tendo como objectivo a racionalização de utilidades e o controlo da reacção química.

4.8 Referências

- Akesson, I., "Adaptive Automatic Control of Reaction Speed in Exothermal Batch Processes", IFAC Control of Chemical Processes, Frankfurt am Main, pp. 99-102, 1985.
- Bretelle, D., Macchietto, S., "Dynamic Simulation of a PVC Batch Reactor", Computers Chem. Engng., 17, Suppl, S317-S322, 1993.
- Bretelle, D., Chua, E. S. e Macchietto, S., "Simulation and On-line Scheduling of a PVC Process for Operator Training", Computers Chem. Engng., 18, Suppl., S547-S551, 1994.
- Lee, K. S., Bang, S. H., Yi, S., Son, J. S. e Yoon, S. C., "Iterative Learning Control of Heat-Up Phase for Batch Polymerization Reactor" Journal Process Control, 6(4), pp. 255-262, 1996.
- Marroquin, G. e Luyben, W. L., "Practical Control Studies of Batch Using Realistic Mathematical Models", Chem. Eng. Science, 28, pp. 993-1003, 1973.
- Martins, F. G., Coelho, M. A. N., "Heat Transfer in Batch Reactors. Part A: Dynamic Simulation of Heat Transfer in a Jacket Reactor", submetido a publicação na Chemical Engineering Research and Design, 1996.
- Martins, F. G., Coelho, M. A. N., "Heat Transfer in Batch Reactors. Part B: A More Efficient Use of Energy for Controlling a Batch Reactor Process", submetido a publicação na Chemical Engineering Research and Design, 1996.
- Nowicki, P. L., "Improve Reactor Control", Chemical Engineering Progress, 65(12), pp. 32-36, 1991.
- Peterson, T. Hernandez, E., Arkun, Y. e Schork, F. J., "A Nonlinear DMC Algorithm and Its Application to a Semibatch Polymerization Reactor", Chemical Engineering Science, 47(4), pp. 737-753, 1992.
- Seborg, D. E., Edgar, T. F. e Mellichamp, D. A., "Process Dynamic and Control", John Wiley & Sons, 1ª edição, New York, 1989.

Capítulo 5

Reactores Descontínuos. Estratégia Para Aperfeiçoamento do Controlo Clássico.

Sumário

Com o objectivo de conseguir melhores resultados, em termos dos desvios observados entre as temperaturas da reacção pré-estabelecidas e as observadas nas simulações realizadas, foi desenvolvida uma estratégia que conjuga a configuração de controlo em cascata com a simulação dinâmica do processo. As redes neuronais artificiais constituíram a base do método utilizado para previsão dos valores da temperatura da reacção, em função dos dados do processo e da evolução da temperatura de referência. A correcção das trajectórias previamente definidas, através do conhecimento de previsões em cada instante, possibilita o ajuste dos valores de referência nos controladores, de forma a reduzir as diferenças entre a temperatura da reacção desejada e a que realmente é observada (por simulação).

5.1 Introdução

Nos últimos anos têm sido introduzidos aperfeiçoamentos significativos na indústria do processo químico devido ao desenvolvimento acelerado de sofisticadas tecnologias computacionais (Peters e Timmerhaus, 1991). As áreas em que este efeito é sentido particularmente são a simulação, o controlo e o treino para operação de processos.

Inicialmente, a maior parte dos programas de computador para apoio à indústria eram desenvolvidos a partir da criação de modelos baseados nos princípios físico-químicos dos processos. A simulação de um processo funcionava como uma ferramenta de apoio para passagem à escala real e para estudos do comportamento do processo durante a operação. As grandes desvantagens associadas à utilização destas metodologias são a complexidade dos modelos criados, a falta de conhecimento de alguns parâmetros físico-químicos dos sistemas e a sua resolução em tempo útil para possível utilização. Com o objectivo de ultrapassar estes obstáculos, outras técnicas começaram a ser implementadas na criação de modelos mais genéricos que possam descrever com algum rigor o comportamento dos processos físico-químicos. Novas metodologias baseadas em conceitos de inteligência artificial, como por exemplo sistemas baseados no conhecimento do processo, redes neuronais artificiais, sistemas *fuzzy* e algoritmos genéticos, podem ser utilizadas para criar novos modelos e metodologias de modelização, para aplicação à simulação e controlo de processos físico-químicos (Crowe e Vassiliadis, 1996).

Tal como na área da simulação de processos, os sistemas de controlo estão a sofrer uma importante fase de desenvolvimento (Åström e McAvoy, 1992). Os computadores, as redes neuronais artificiais e modelos baseados nos princípios físico-químicos podem ser incorporados em sistemas de controlo com o objectivo de melhorar a operacionalidade e fiabilidade dos processos químicos. Em algumas aplicações de controlo, a incorporação de modelos baseados nos princípios físico-químicos é por vezes de difícil concretização, quer devido à complexidade dos modelos concebidos, quer ao nível da disponibilidade de informação sobre parâmetros característicos do processo. Por outro lado, as redes neuronais artificiais constituem estruturas genéricas, que são determinadas pelos dados particulares de cada processo. Segundo Hunt et al. (1992), a principal limitação da aplicação de metodologias baseadas nas redes neuronais artificiais está relacionada com a sua grande dependência de dados do processo. Em termos genéricos, as redes neuronais artificiais são estruturas geradas a partir de dados do processo, o que significa que para gerar modelos adequados e consistentes é necessário a existência de informação representativa desse mesmo processo.

Neste trabalho, as redes neuronais artificiais constituem a base do método de simulação, para previsão dos valores futuros da variável controlada principal (temperatura da reacção). Estes valores são comparados com os valores de referência da temperatura da reacção (pré-estabelecidos), permitindo a criação de novos valores de referência com vista a seguir os valores pré-estabelecidos.

Nas Secções seguintes é apresentada a metodologia proposta e é descrita a sua aplicação ao processo de transferência de calor em reactores descontínuos industriais.

5.2 Controlo de reactores descontínuos. Conhecimento actual

Encontrar metodologias de controlo que permitam reduzir as discrepâncias entre os valores das variáveis controladas e os valores de referência dessas mesmas variáveis, previamente estabelecidos, é o objectivo principal a atingir pela tecnologia de controlo de processos. Se para um processo contínuo esta tarefa é difícil de realizar devido à presença constante de elementos estocásticos que produzem alterações nos processos, num processo descontínuo a complexidade aumenta em geral pela própria dinâmica característica de um processo não estacionário (Berber, 1996).

Uma das consequências desta situação é a pouca informação disponível em literatura sobre algoritmos de controlo aplicados a reactores descontínuos industriais. Os trabalhos referenciados concentram-se em desenvolvimentos teóricos sobre metodologias de controlo, respeitantes, em geral, a processos descontínuos, não existindo praticamente confrontação com resultados obtidos em instalações industriais ou piloto.

Na condução de processos dinâmicos e seu controlo, em que se enquadra o processo de transferência de calor em reactores descontínuos, existem fundamentalmente duas estratégias a seguir:

1. Aplicação de procedimentos com vista a obter bons desempenhos dos sistemas de controlo, independentemente do conhecimento do processo;
2. Aquisição de conhecimento do sistema de modo a adoptar procedimentos para melhoria do desempenho dos sistemas de controlo do processo.

No primeiro caso, o controlo por realimentação de processos é um dos procedimentos mais utilizados para compensar o fraco conhecimento do processo. Actualmente, em muitas situações, implementam-se algoritmos de controlo que consistem na combinação de sistemas de controlo por realimentação tradicional, usando PIDs, com esquemas de controlo por antecipação (Chang e Huang, 1994).

No segundo caso, surgem esquemas de controlo baseados no conhecimento do processo (Cott e Macchietto, 1989; Merkle e Lee, 1989). Pode-se inverter o modelo do processo de forma a utilizá-lo como sistema de controlo (controlo por modelo inverso), ou então usar o modelo para estimar valores futuros das variáveis do processo, os quais são continuamente incorporados nos sistemas de controlo (controlo predictivo).

Os reactores químicos industriais descontínuos são em geral controlados através da utilização de algoritmos proporcional-integral-derivativos (PIDs) convencionais em ciclo simples ou em cascata (Davidson, 1989). Os parâmetros destes controladores necessitam de ser reajustados para as diferentes condições de operação. Numa grande parte das instalações industriais, os parâmetros dos controladores são únicos e são determinados de forma a obter os melhores desempenhos nas diferentes condições de operação, seguindo quase sempre um procedimento heurístico.

Com o objectivo de ultrapassar alguns obstáculos associados aos esquemas de controlo tradicionais, sistemas auxiliares de controlo como, por exemplo, algoritmos baseados em redes neuronais artificiais podem ser usados no apoio ao controlo dos processos. A principal razão para a utilização deste género de estruturas é o grau de generalização e a facilidade inerente a esta técnica para incorporar a informação disponível do processo e utiliza-la continuamente no controlo do processo. A metodologia desenvolvida neste trabalho pretende mostrar como é possível incorporar redes neuronais artificiais no sistema de controlo convencional deste tipo de reactores.

5.3 Metodologia de controlo proposta

Considerando a problema do controlo da temperatura em reactores descontínuos durante a fase de reacção, pretende encontrar-se um sistema de controlo baseado em PIDs em cascata, que permita minimizar as diferenças entre as trajectórias de referência da temperatura da reacção e os valores da temperatura da reacção obtidos por simulação.

Nos mecanismos clássicos de controlo (PIDs), as únicas medidas das variáveis processuais que entram no sistema de controlo são os valores das variáveis controladas e os valores de referência dessas variáveis (trajectórias previamente estabelecidas). Nesses sistemas não são incorporados quaisquer outras variáveis processuais, podendo apenas existir em algumas situações, reajustamentos dos parâmetros dos controladores. A metodologia apresentada neste capítulo impõe uma única alteração relativamente ao sistema de controlo convencional e diz respeito ao facto de se provocar uma alteração contínua da

trajectória de referência a incorporar no controlador principal, trajetória esta que incorpora outras variáveis do processo. Em vez de se utilizar a trajetória de referência pré-estabelecida, usa-se uma trajetória que é calculada com base em dados do processo e na trajetória de referência real.

Sendo Δt o intervalo de tempo t_2-t_1 (ver Secção 4.5 do Capítulo anterior), isto é, o intervalo de tempo ao fim do qual se procede à alteração da acção de controlo, um valor mais realista para a referência da variável controlada (temperatura da reacção) pode ser obtido através da seguinte equação:

$$T_{rsp}|_t = T_{sp}|_t - kt(T_r^*|_{t+\Delta t} - T_{sp}|_{t+\Delta t}) \quad (5.1)$$

em que, $T_{sp}|_t$ e $T_{sp}|_{t+\Delta t}$ são os valores de referência da temperatura da reacção pré-estabelecidos nos momentos t e $t+\Delta t$ respectivamente. $T_r^*|_{t+\Delta t}$ é o valor previsto da temperatura da reacção no momento $t+\Delta t$, $T_{rsp}|_t$ é o valor de referência calculado no momento t e kt é um parâmetro de ajuste que depende do sistema considerado. Através da equação (5.1), as trajetórias de referência podem ser alteradas com o objectivo de obter melhores desempenhos dos sistemas de controlo, bastando para isso conhecer $T_r^*|_{t+\Delta t}$ e kt . O valor $T_r^*|_{t+\Delta t}$ pode ser previsto através da simulação do processo utilizando modelos baseados nos primeiros princípios ou em outras técnicas de modelização. Neste estudo, foram usadas estruturas neuronais artificiais como modelos de previsão. Após treino, o processamento da informação é contínuo de forma a transferir as previsões para o sistema de controlo. Quanto ao valor de kt , pode dizer-se que se trata de um parâmetro heurístico que pondera o efeito da variação $(T_r^*|_{t+\Delta t} - T_{sp}|_{t+\Delta t})$ no valor de $T_{sp}|_t$. Na Secção seguinte aplica-se esta metodologia ao controlo do processo apresentado no Capítulo 4, sendo as duas configurações de transferência de calor analisadas.

5.4 Resultados e discussão

A Figura 5.1 apresenta o perfil do calor de reacção obtido ao longo do tempo para um processo descontínuo, para dois ciclos de reacção (ciclo 1 e ciclo 2). Pretende controlar-se a temperatura da reacção no valor estipulado de 56,5°C. Estes perfis correspondem a dois ciclos de reacção reais de polimerização em suspensão.

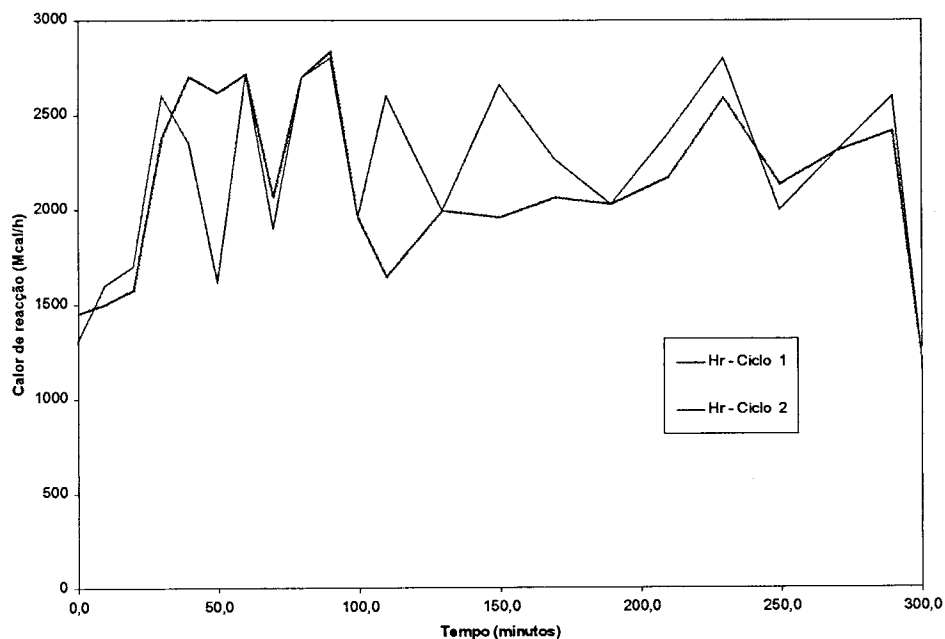


Figura 5.1: Perfil do calor de reacção em função do tempo para duas partidas.

Utilizando simplesmente a metodologia clássica de controle (PIDs), apresentada no Capítulo 4, a evolução da temperatura da reacção é representada nas Figuras 5.2 e 5.3 para os dois ciclos de reacção referidos.

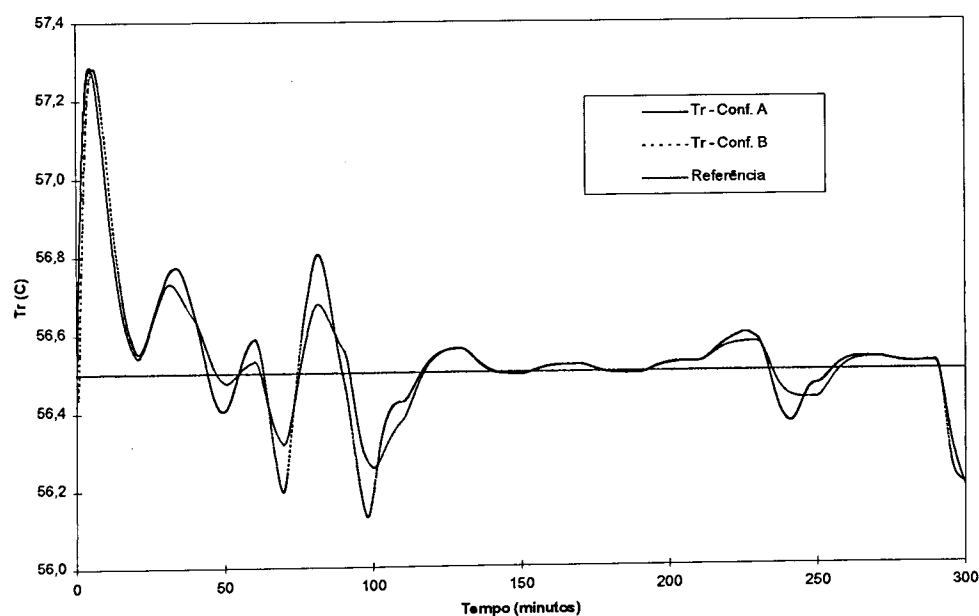


Figura 5.2: Evolução da temperatura da reacção e da referência para o ciclo de reacção 1.

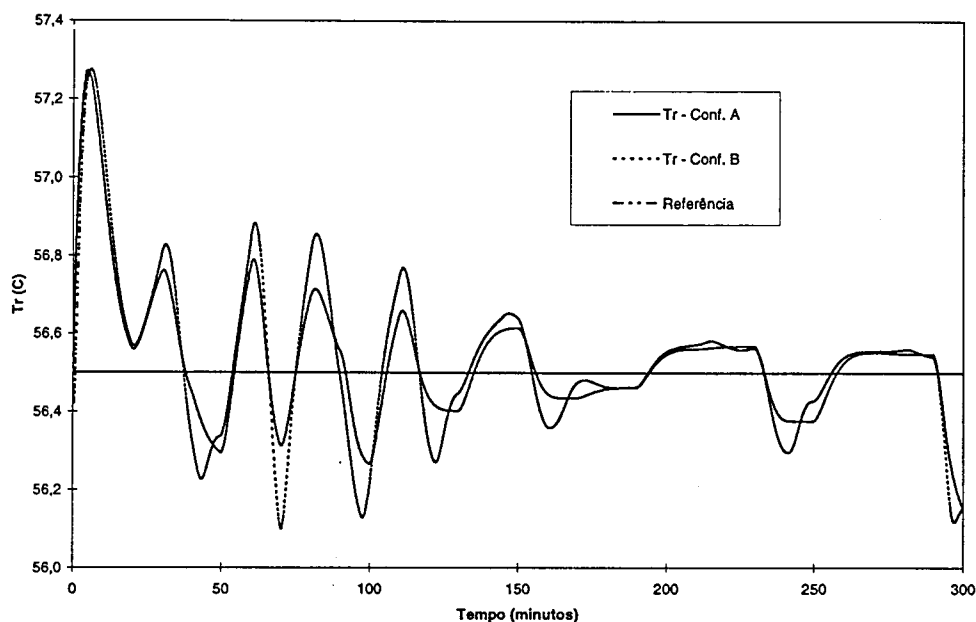


Figura 5.3: Evolução da temperatura de reacção e da referência para o ciclo de reacção 2.

A implementação da estratégia de controlo descrita na secção anterior implica a realização dos seguintes procedimentos:

1. Procura da rede neuronal artificial como modelo de previsão do valor futuro da variável controlada (temperatura da reacção);
2. Determinação do parâmetro kt para cada uma das configurações estudadas;
3. Simulação do sistema com a estrutura de controlo determinada.

Relativamente ao primeiro item, é gerado um conjunto de dados a fim de determinar a rede neuronal artificial que traduza o comportamento do sistema. No caso de existirem medidas reais do processo, estas podem ser utilizadas no treino da rede. Na ausência destas, recorre-se a resultados de simulações utilizando modelos baseados nos princípios físico-químicos. Geralmente este procedimento é utilizado numa fase inicial, sendo posteriormente reajustada a rede neuronal artificial com medidas reais dos processos. A Figura 5.4 mostra as perturbações efectuadas no calor de reacção para gerar o conjunto de dados de entrada/saída utilizados no treino das estruturas neuronais artificiais. Estas simulações foram realizadas utilizando o sistema integrado (sistema de controlo convencional + processo), de acordo com a metodologia detalhadamente apresentada no Capítulo 4. As temperaturas de referência consideradas para o treino foram 54,0; 57,0 e 60,0 °C. A título exemplificativo, representa-se na Figura 5.5 um conjunto de valores de T_r (Configuração A), obtido por simulação (temperatura de referência igual a 57 °C e perturbação do calor da reacção de

2100 Mcal/h para 2600 Mcal/h), que foi usado na aprendizagem da rede neuronal desenvolvida para a configuração A.

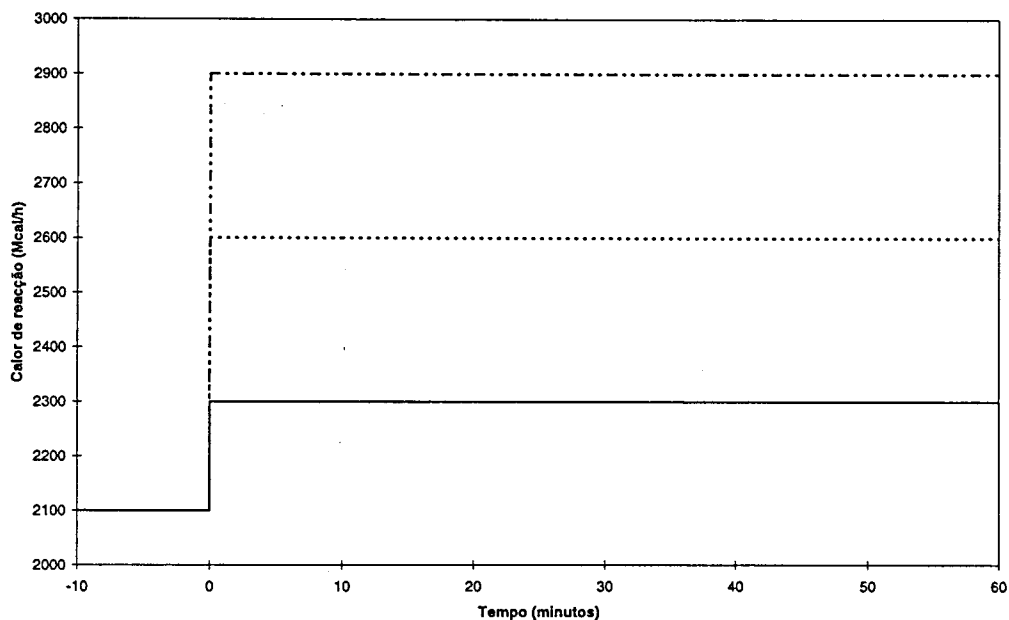


Figura 5.4: Perturbações efectuadas no calor de reacção para gerar os dados para treino das redes neuronais artificiais.

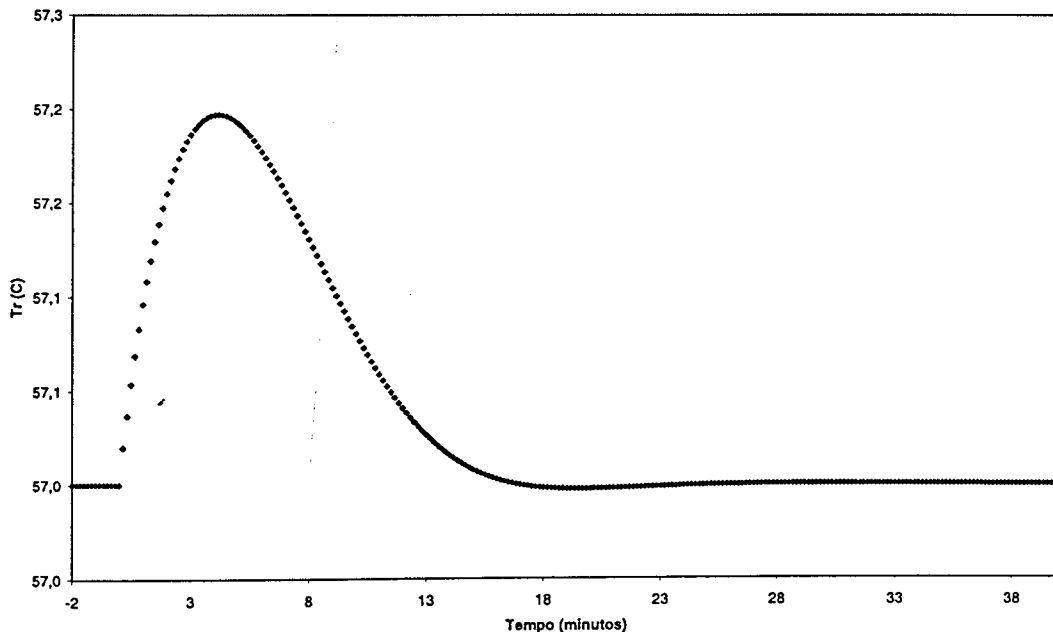


Figura 5.5: Valores de T_r para a configuração A correspondente a uma perturbação no calor da reacção.

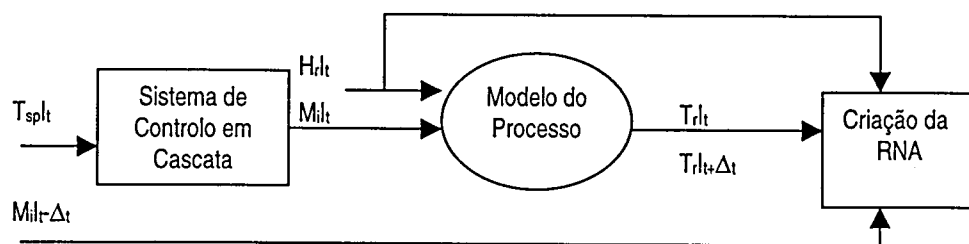
Foram efectuados vários testes de adaptação de redes neuronais artificiais com o objectivo de determinar as estruturas neuronais que melhor traduziam o comportamento dos sistemas (Configuração A e B). Este procedimento foi realizado usando o algoritmo simplex

para calcular o mínimo valor da função objectivo, que neste caso é o somatório da diferença dos quadrados dos desvios entre a saída calculada pela rede (valor previsto para a temperatura da reacção para o momento $t+\Delta t$) e o valor da temperatura da reacção para o momento $t+\Delta t$ disponível. O número de dados utilizados para treino foi de 3600 para a configuração A e de 6300 para a configuração B. O critério de convergência para cada caso foi, mais uma vez, a diferença das fracções correspondentes ao valor máximo e mínimo da função objectivo numa dada iteração calculada pela equação (3.1), ser menor que $1,0E-10$.

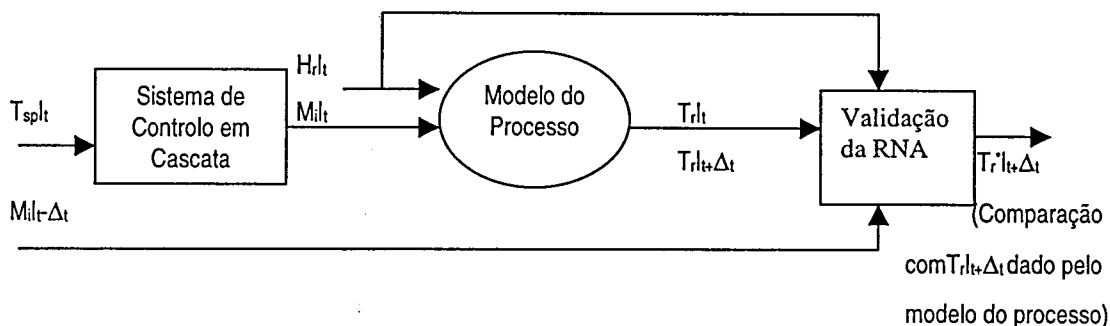
No caso da configuração A, as entradas da rede são 4 e correspondem ao valor do calor de reacção e ao valor da temperatura da reacção no momento t , ao valor do caudal injectado no momento $t-\Delta t$ e ao valor da temperatura de referência da reacção pré-estabelecido para o momento $t+\Delta t$. A saída da rede corresponde ao valor da temperatura da reacção para o momento $t+\Delta t$. Para a configuração B, o número de entradas das redes neuronais artificiais é 5. Além das variáveis já referidas, o caudal que passa no permutador de calor (M_{ex}) no momento $t-\Delta t$, é uma entrada adicional para as redes neuronais artificiais. Durante a fase de treino o valor da temperatura de referência da reacção, nas entradas das redes neuronais artificiais, foi substituído pelo valor da temperatura da reacção para o momento $t+\Delta t$, como se pode ver no diagrama da Figura 5.6, a qual representa a estrutura de funcionamento da metodologia de controlo desenvolvida neste capítulo, para a configuração A. Todos os valores de entrada e saída da rede foram normalizados.

A Tabela 5.1 resume os resultados obtidos com diferentes configurações de redes neuronais artificiais utilizadas na modelização dos dois processos. Em todas as situações utilizou-se a função sigmóide como função de transferência dos nós das camadas intermédia e de saída. Para a configuração A, a estrutura neuronal artificial que apresenta o valor da função objectivo mais baixo é constituída por 3 camadas, contendo 4 nós na camada de entrada, 3 nós numa camada intermédia e 1 nó na camada de saída. No caso da configuração B, a rede neuronal artificial escolhida é igualmente constituída por três camadas, possuindo 5 nós na camada de entrada, 6 nós na camada intermédia e 1 nó na camada de saída.

1. Criação da estrutura neuronal artificial



2. Validação da estrutura neuronal artificial



3. Simulação do sistema integrado (RNAs + modelo do processo)

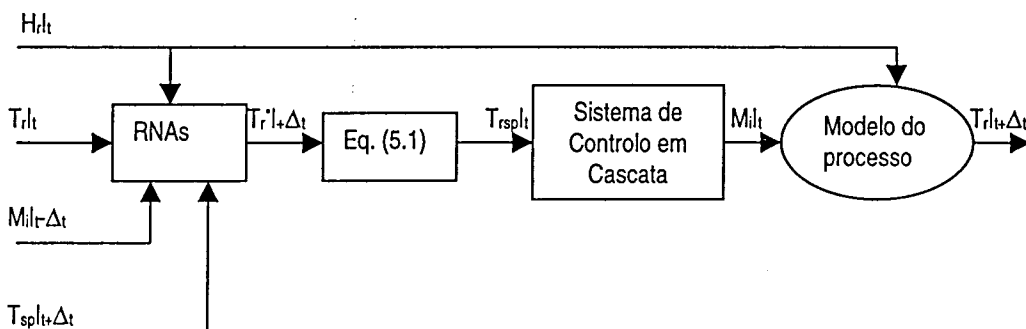


Figura 5.6: Representação esquemática da metodologia de controlo desenvolvida neste capítulo (configuração A).

Tabela 5.1: Treino de redes neurais artificiais para os dois sistemas.

Configuração A			Configuração B		
Conf.	F. objectivo	Iterações	Conf.	F. objectivo	Iterações
4*1	0,26	644	5*1	0,048	862
4*1*1	0,078	1504	5*1*1	0,067	1419
4*2*1	0,074	5056	5*2*1	0,031	6798
4*3*1	0,065	7784	5*3*1	0,055	10593
4*4*1	0,066	10866	5*4*1	0,058	13928
4*5*1	0,070	10624	5*5*1	0,030	25846
4*6*1	0,081	36197	5*6*1	0,020	34962
4*7*1	0,075	22412	5*7*1	0,049	38627

Através da análise das Figuras 5.7 e Figura 5.8 é possível comparar os valores previstos da temperatura da reacção calculados pelas redes neuronais artificiais, com os valores obtidos por simulação utilizando modelos tradicionais, durante a fase de arrefecimento de ciclos de reacção. É claro nestes casos, o elevado grau de adaptação deste tipo de estruturas à tradução do comportamento destes sistemas.

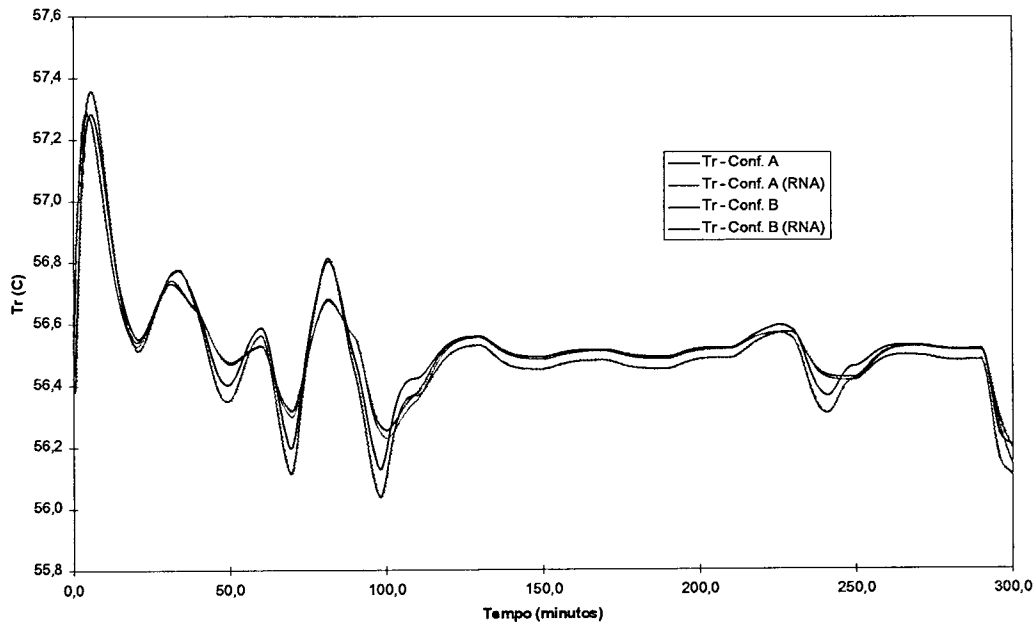


Figura 5.7: Perfil da temperatura da reacção em função do tempo obtido por redes neuronais artificiais e por modelos baseados nos primeiros princípios para o ciclo de reacção 1.

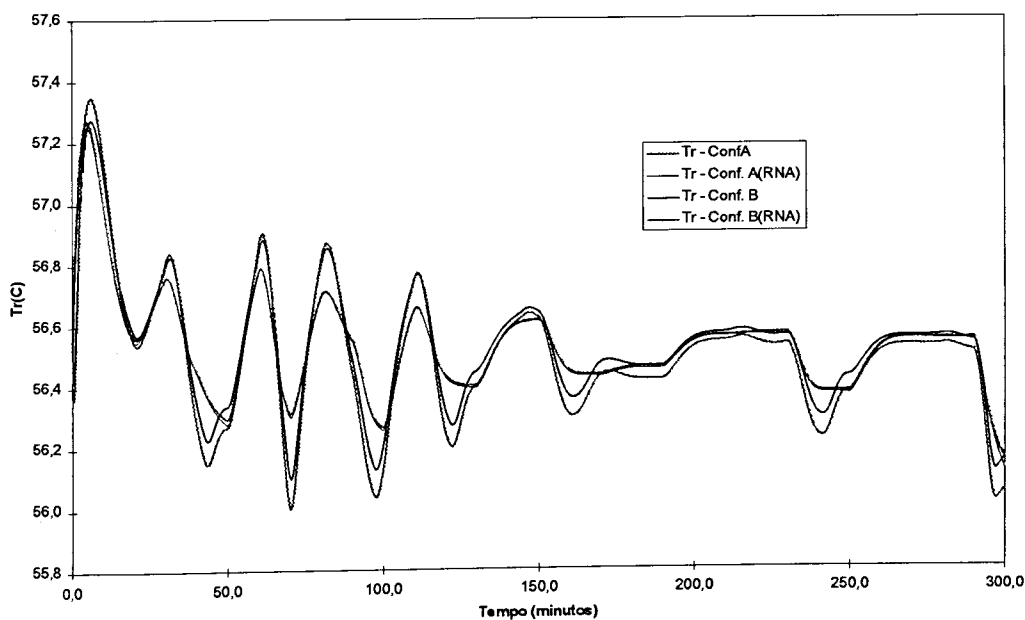


Figura 5.8: Perfil da temperatura da reacção em função do tempo obtido por redes neuronais artificiais e por modelos baseados nos primeiros princípios para o ciclo de reacção 2.

O valor adequado de kt para cada uma das configurações é obtido pelo método tentativa-erro. No presente trabalho efectuou-se uma perturbação em degrau no calor de reacção (Figuras 5.9 e 5.10) e analisou-se o desempenho dos sistemas de controlo para vários valores de kt . O valor de kt para cada uma das configurações foi seleccionado de modo a reduzir as discrepâncias entre o valor de referência da temperatura da reacção e o valor real da variável de controlo, mantendo a estabilidade desses sistemas. À medida que kt aumenta melhora-se o desempenho dos sistemas de controlo, mas a partir de determinado valor o processo apresenta um comportamento instável. Este facto é evidenciado na Figura 5.11, a qual apresenta o comportamento do processo, através da evolução do caudal de água injectada em função do tempo, quando é imposto um degrau de 1°C na temperatura de referência da reacção. Verifica-se que para valores de kt elevados o caudal de água apresenta oscilações. A configuração B apresenta o mesmo comportamento.

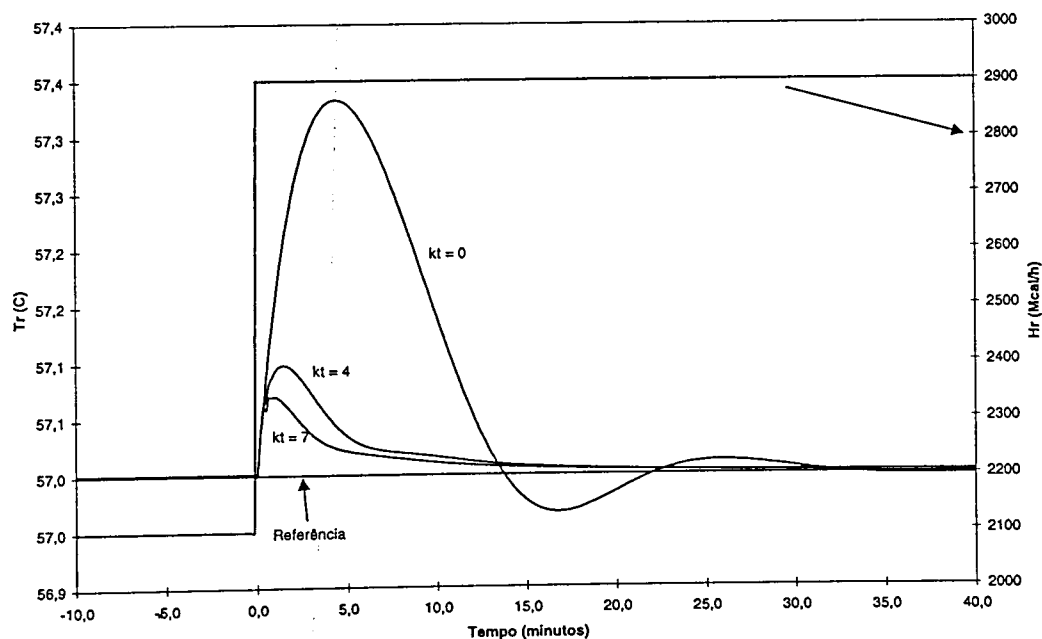


Figura 5.9: Evolução da temperatura da reacção para vários valores de kt para uma perturbação no calor de reacção - Configuração A.

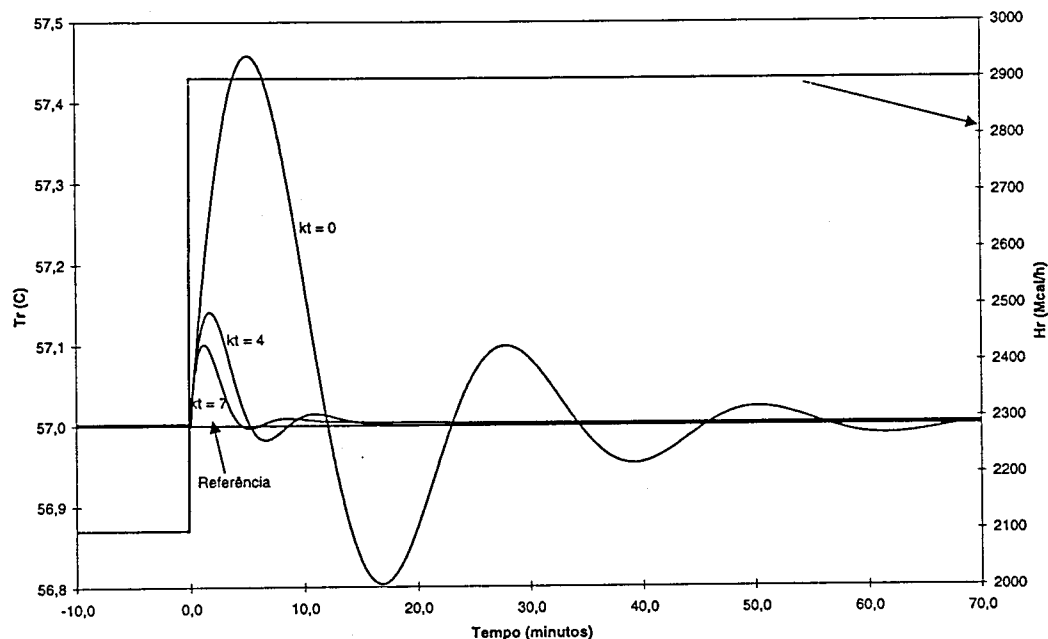


Figura 5.10: Evolução da temperatura da reacção para vários valores de kt para uma perturbação no calor de reacção - Configuração B.

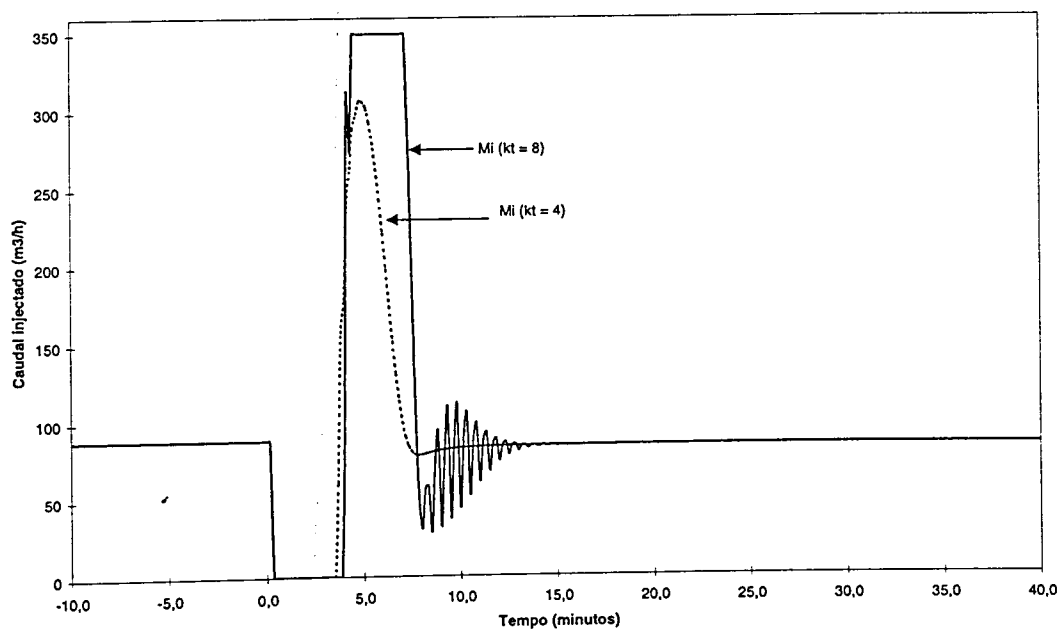


Figura 5.11: Evolução do caudal de água injectada na configuração A em função do tempo para vários valores de kt (resultados obtidos para variação de 1°C na temperatura de referência).

As Figuras 5.12 e 5.13 comparam o comportamento dos sistemas globais (sistema de controlo + processo) utilizando a metodologia convencional de controlo (descrita no Capítulo anterior) e a estratégia de controlo aqui proposta. Foram seleccionados valores de kt para os

quais os processos apresentavam um comportamento estável. Como se pode verificar existe uma melhoria significativa no desempenho dos sistemas de controlo quando esta nova estrutura é implementada. Os desvios máximos entre a temperatura da reacção e os valores de referência previamente estabelecidos reduzem-se a cerca de 10%, relativamente aos desvios observados com a utilização de sistemas de controlo em cascata sem alteração das trajectórias.

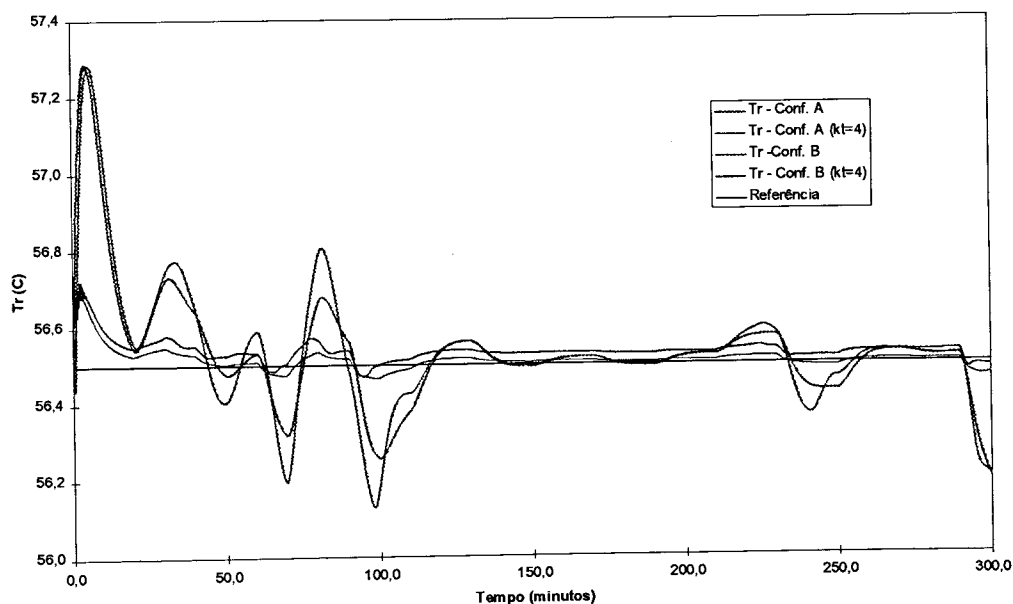


Figura 5.12: Perfis da temperatura da reacção e referência para os dois sistemas para o ciclo de reacção 1.

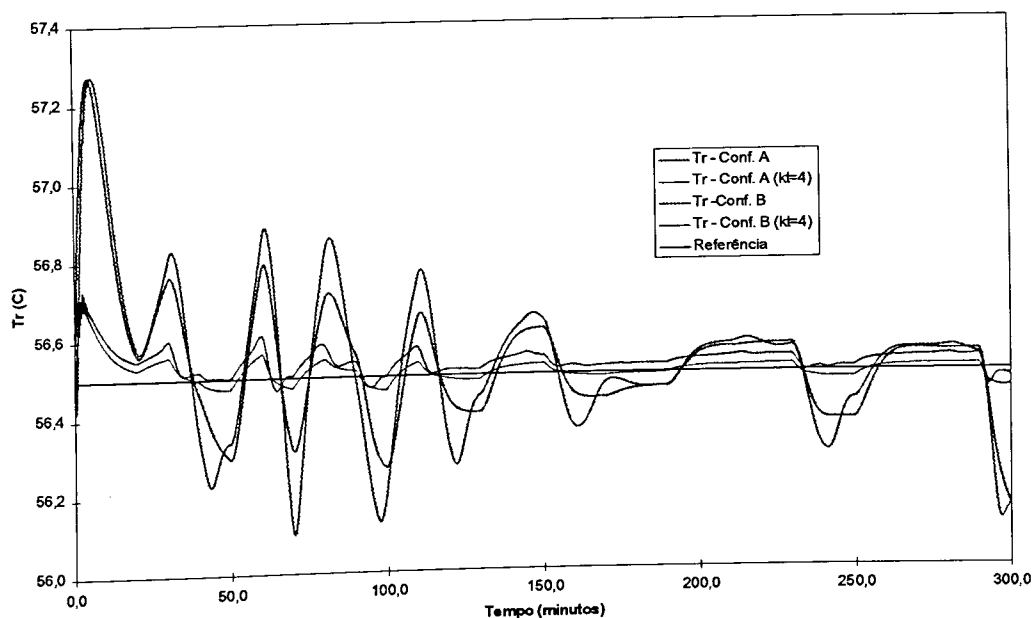


Figura 5.13: Perfis da temperatura da reacção e referência para os dois sistemas para o ciclo de reacção 2.

Estes resultados demonstram a robustez das estruturas neuronais artificiais criadas na previsão da temperatura da reacção, já que durante em ciclo de reacção são impostas variações instantâneas no calor de reacção que vão de valores da ordem de 10 Mcal/h a 1000 Mcal/h. Desta forma, no estudo de um ciclo global de reacção está imposta a análise da robustez das redes neuronais criadas de suporte ao sistema de controlo.

5.5 Conclusões

Os resultados das simulações apresentados demonstraram uma redução significativa entre os valores da temperatura de referência da reacção e os valores da temperatura da reacção obtidos por simulação dos sistemas, quando é usada a metodologia clássica de controlo proposta com a incorporação de trajectórias de referência calculadas com base em dados do processo e em trajectórias de referência reais.

O uso de redes neuronais artificiais para simular os processos considerados mostrou-se eficiente. A facilidade e a flexibilidade da utilização destas técnicas na tradução do comportamento dos dois processos de transferência de calor, em situações dinâmicas, comprovam a sua capacidade de gerar modelos realistas dos processos estudados.

Neste estudo, os parâmetros dos controladores foram mantidos constantes, existindo apenas a introdução de um meio para reajustar as trajectórias de referência da temperatura da reacção. Os resultados obtidos são promissores, uma vez que nas simulações efectuadas os desvios entre os valores da temperatura da reacção e os valores de referência reais (previamente estabelecidos) são reduzidos a 10%, quando comparados com os desvios obtidos com a utilização de esquemas de controlo em cascata sem correcção de trajectórias.

5.6 Referências

- Åström, K. J. e McAvoy, T. J., "Intelligent Control", Journal Process Control, 2(3), pp.115-125, 1992.
- Berber, R., "Control of Batch Reactors: A Review", Trans IChemE, 74, Part A, pp. 3-20, 1996.
- Chang, J.-S. e Huang, K.-L., "Performance of Control Strategies to Track the Trajectories of Batch Reactors", The Canadian Journal of Chemical Engineering, 72(10), pp. 906-919, 1994.
- Cott, B. J. e Macchietto, S., "Temperature Control of Exothermic Batch Reactors Using Generic Model Control", Ind. Eng. Chem. Res., 28(8), pp. 1177-1184, 1989.

- Crowe, E. R. e Vassiliadis, C. A., "Artificial Intelligence: Starting to Realize Its Practical Promise", Chemical Engineering Progress, 92(1), pp.23-31, Jan. 1996.
- Davidson, R. S., "Using Process Information to Control a Multipurpose batch Chemical Reactor", Computers Chem. Engng., 13(1/2), pp. 83-85, 1989.
- Hunt, K. J., Sbarbaro, D., Zbikowski, R. e Gawthrop, P. J., "Neural Networks for Control Systems", Automatica, 28(6), pp. 1083-1112, 1992.
- Merkle, J. E. e Lee, W.-K., "Adaptive Structures for Automatic Startup and Temperature Control of a Batch Process", Computers Chem. Engng., 13(1/2), pp. 87-103, 1989.
- Peters, M. S. e Timmerhaus, K. D., "Plant Design and Economics for Chemical Engineers", 4ª edição, McGraw-Hill, 1991.

Capítulo 6

Reactores Descontínuos. Aplicação de Controladores Neurais Artificiais.

Sumário

A aplicação de técnicas de inteligência artificial, como sejam, as redes neurais artificiais, ao controlo de processos químicos é cada vez mais frequente. No entanto, em reactores descontínuos, a sua aplicação ainda está pouco desenvolvida e poucos resultados experimentais ou de simulação são apresentados em literatura.

Este Capítulo pretende mostrar a possibilidade de aplicação de estruturas neurais artificiais ao controlo de reactores descontínuos. Os resultados obtidos através desta metodologia são comparados com os que se obtiveram por simulação do sistema de controlo tradicional e com a metodologia apresentada no capítulo anterior.

O processo de transferência de calor de um reactor descontínuo baseia-se nas configurações já descritas nos capítulos anteriores.

6.1 Introdução

As primeiras aplicações do computador ao controlo apareceram nos finais dos anos 50, sendo este utilizado como ferramenta de controlo de processos químicos industriais em instalações da Texaco, American Oil e Standard Oil (Boullart et al., 1992). A principal função do computador era calcular os valores de referência dos controladores analógicos, os quais controlavam os processos. Embora o computador digital não fosse utilizado directamente no controlo do processo, a sua implementação foi progressiva como forma de aumentar a flexibilização e o rendimento dos processos. A grande diversidade de condições de operação e de especificação dos produtos finais assim o exigia.

A intensificação da utilização de recursos computacionais no controlo dos processos está directamente relacionada com o desenvolvimento de novas técnicas de modelização e novas concepções de controlo. A recorrência a novas metodologias, como as redes neurais artificiais, reflecte-se quer no alargamento do espectro de aplicações, quer em novas perspectivas de análise e desenvolvimento de sistemas de controlo. As redes neurais artificiais podem ser treinadas para executarem diversas funções, desde supervisão e diagnóstico até ao controlo directo do processo.

No Capítulo anterior apresentou-se uma das possíveis aplicações das redes neurais artificiais no controlo dos processos de reacção descontínuos. A metodologia de controlo descrita mostrou-se bastante eficiente face aos resultados obtidos, e às pequenas alterações necessárias para a adaptação aos sistemas de controlo convencionais. A estratégia de controlo que a seguir se apresenta é uma técnica que impõe mudanças mais significativas nos sistemas de controlo. Neste caso, vai ser explorada a hipótese de implementação de esquemas de controlo construídos unicamente por estruturas neurais artificiais.

6.2 Uso de redes neurais artificiais no controlo dos processos

As redes neurais artificiais constituem uma técnica promissora quando aplicadas ao controlo de sistemas não-lineares, uma vez que este tipo de estruturas consegue representar facilmente relações complexas entre entradas e saídas de sistemas dinâmicos (Boullart et al., 1992). O grau de adaptação das redes neurais artificiais em sistemas em mutação e a sua robustez no que se refere ao tratamento do ruído dos dados do processo são factores que possibilitam o desenvolvimento de controladores adaptativos, cujo resultado será uma melhoria no desempenho dos sistemas de controlo.

6.2.1 Aplicações

São vários os trabalhos existentes que utilizam redes neuronais artificiais no controlo dos processos. Neste género de aplicações surgem os trabalhos de Bhat e McAvoy (1990) que desenvolvem estruturas neuronais artificiais para modelizar o comportamento dinâmico da resposta do pH num tanque agitado, perante perturbações nos caudais de entrada de hidróxido de sódio e ácido acético, com o objectivo de controlar mais eficientemente o processo.

Wills et al. (1992) mostraram igualmente, através do estudo do processo de fermentação da penicilina, como as redes neuronais artificiais podem ser usadas no controlo inferido do processo. Um controlador proporcional-integral (PI) é usado para controlar o conteúdo em biomassa. Uma vez que não há possibilidade de medir esta variável em linha, o algoritmo PI utiliza uma estimativa dessa variável calculada a partir de uma estrutura neuronal artificial.

Outra das aplicações das redes neuronais artificiais ao controlo de processos diz respeito à sua aplicação no controlo de qualidade para produção de polímeros em reactores por partidas (Tsen et al., 1996). O objectivo principal era gerar modelos robustos do processo, num intervalo de tempo muito curto, e sua utilização em linha, no controlo instantâneo da qualidade do produto ao longo do processo produtivo. Neste sentido, uma rede neuronal artificial foi usada para funcionar como modelo de previsão da qualidade dos polímeros, em função das variáveis manipuladas e das variáveis medidas em linha. O modelo artificial foi construído através da integração da informação do processo com um modelo baseado nos princípios físico-químicos, constituindo deste modo os chamados modelos híbridos artificiais. Os resultados obtidos por estes autores mostraram que os modelos que recorrem a estruturas neuronais artificiais apresentaram melhores desempenhos quando comparados com outras estruturas de previsão, como sejam, os modelos baseados nos princípios físico-químicos.

No presente trabalho foram desenvolvidas redes neuronais artificiais como algoritmos de controlo do processo de transferência de calor em reactores por partidas. Os esquemas de controlo convencionais (PIDs em cascata) são substituídos por estruturas neuronais artificiais. Alguns dos estudos realizados sobre este assunto e apresentados neste trabalho, foram descritos em Martins e Coelho (1996).

6.2.2 Estrutura dos controladores neuronais artificiais

O projecto de controladores neuronais artificiais em termos de nós, camadas e ligações entre os respectivos nós é obtido através de procedimentos análogos aos descritos no Capítulo 3.

Não existem métodos expeditos que determinem *à priori* as estruturas neuronais artificiais. Na maior parte das situações, a escolha do número de nós das camadas de entrada, intermédias e de saída, bem como o número de camadas intermédias, das funções de transferência dos nós e dos valores dos elementos de ligação iniciais são determinados por métodos heurísticos de procura, com algumas regras de sistematização. Durante este processo efectuam-se testes de adaptação de várias estruturas com variação da configuração, relativamente à configuração original.

As variáveis de entrada e de saída dos controladores neuronais artificiais são determinantes no projecto da estrutura neuronal envolvida. Por exemplo, a escolha do número de entradas na estrutura neuronal depende não só do processo a controlar, mas também do tipo de entradas nesse controlador. Este efeito é igualmente válido para os nós das camadas intermédias.

Não existem regras que permitam *à priori* determinar qual a estrutura neuronal artificial que melhor se adapte como controlador do processo. Neste campo, apenas algumas tentativas de sistematização do conhecimento são referenciadas em literatura (Boullart et al., 1992), como por exemplo, a constatação para muitos casos, de que uma rede neuronal artificial com uma única camada intermédia, possuindo um número de neurónios maior que o número de neurónios da camada de entrada e menor que o seu dobro, tem a capacidade de produzir os mesmos resultados que uma rede com várias camadas intermédias.

A configuração final é escolhida por um método heurístico, recorrendo normalmente ao método tentativa-erro (a estrutura que apresente o valor da função objectivo menor é a configuração final adoptada). O valor da função objectivo é obtido pelo somatório dos quadrados dos desvios entre os valores calculados à saída da estrutura neuronal e os valores disponíveis durante a fase de treino.

6.2.3 Treino de controladores neuronais artificiais

Existem fundamentalmente duas metodologias, denominadas por modelização directa e modelização frontal, que são utilizadas no treino de controladores neuronais artificiais. Em ambas as situações, o objectivo a atingir é a minimização do somatório dos quadrados dos desvios obtidos entre os valores calculados recorrendo a estruturas neuronais artificiais e os valores disponíveis para treino. A distinção entre os dois critérios reside na escolha das variáveis utilizadas para o cálculo deste somatório. Os valores utilizados na modelização directa de controladores neuronais artificiais são os desvios entre os valores das variáveis manipuladas do processo disponíveis e os obtidos à saída da estrutura neuronal. Na

modelização frontal, os desvios são calculados a partir dos valores das variáveis controladas disponíveis e os gerados com recurso às estruturas neuronais artificiais e ao modelo do processo. O modelo do processo é utilizado como ferramenta de cálculo das variáveis controladas, a partir das variáveis manipuladas geradas pelas estruturas neuronais artificiais. Neste trabalho é utilizada a modelização directa para avaliação das estruturas neuronais artificiais de controlo desenvolvidas.

6.2.4 Controlo adaptativo com redes neuronais artificiais

O grau de adaptação inerente às estruturas neuronais artificiais tornam-nas excelentes candidatas para funcionarem como controladores adaptativos. Em aplicações de controlo, as redes neuronais artificiais têm sido usadas para exercer funções de supervisão, isto é, estas estruturas são inicialmente treinadas com um número finito de casos, sendo posteriormente usadas com os parâmetros fixos. No entanto, as redes neuronais artificiais podem ser equacionadas para operar adaptativamente, ou seja, treinadas continuamente e em linha com o processo. Tal como nos controladores convencionais adaptativos, as estruturas de controlo neuronais artificiais podem incorporar redes neuronais com arquitecturas fixas em termos da configuração e ligações, mas com parâmetros que podem ser ajustados à medida que o processo evolui.

6.3 Estratégia de controlo proposta

A estratégia de controlo proposta consiste em desenvolver estruturas neuronais artificiais cuja função é substituir os algoritmos de controlo tradicionais (PIDs), tendo como objectivo final controlar mais eficientemente o processo. A utilização desta técnica implica a realização de um conjunto de passos:

1. Escolha das variáveis de entrada e de saída do controlador neuronal artificial. Este passo é fundamental para qualquer algoritmo de controlo a implementar. A escolha das variáveis de entrada e de saída dos controladores depende do tipo de metodologia de controlo. No caso dos sistemas de controlo em cascata tradicionais, as variáveis de entrada dos controladores são os valores de referência das variáveis controladas e os valores das variáveis controladas do processo. Os valores de saída correspondem às variáveis manipuladas. Adoptando-se estruturas neuronais artificiais para o controlo, pode existir maior flexibilidade na escolha das variáveis de entrada dos controladores. Além das variáveis já referidas, podem ser introduzidas outras variáveis cujos valores sejam medidos

ou inferidos a partir de outras variáveis do processo. As saídas usualmente consideradas nestes controladores são as variáveis manipuladas;

2. Criação da base de dados para treino das estruturas neuronais artificiais. Se o processo já existe, a base de dados para treino da rede pode ser obtida a partir das medidas do processo. No caso de um processo em projecto recorre-se à resolução de modelos simples do processo, baseados nos primeiros princípios. Desta forma, várias simulações do processo podem ser realizadas com o objectivo de gerar um conjunto de dados representativos para a fase de treino. Após conhecimento real do processo poder-se-á reajustar as estruturas neuronais de controlo aos valores reais;
3. Determinação da estrutura neuronal artificial final. Tendo a base de dados para treino, desenvolve-se a estrutura da rede neuronal artificial. O procedimento adoptado é idêntico ao descrito para a modelização de processos com redes neuronais artificiais (Capítulo 3), isto é, simular várias configurações neuronais artificiais e escolher aquela que apresente o valor da função objectivo mais baixo, segundo os critérios já referidos;
4. Simulação integrada de todo o sistema (estrutura de controlo neuronal artificial + processo). Para testar o sistema de controlo são realizadas várias simulações do sistema integrado (estrutura de controlo + modelo do processo) a fim de averiguar o desempenho do novo sistema de controlo, antes da implementação real.

6.4 Caso de estudo e discussão

O caso de estudo considerado é mais uma vez o processo de transferência de calor em reactores descontínuos. As duas configurações de transferência de calor, descritas no Capítulo 4, serão analisadas através da comparação dos resultados obtidos (em termos da evolução da temperatura da reacção) através de algoritmos de controlo baseados em redes neuronais artificiais e os resultados apresentados nos últimos dois capítulos.

As Figuras 6.1 e Figura 6.2 representam os diagramas de blocos para as duas alternativas do processo de transferência de calor em reactores descontínuos, com a implementação de estruturas neuronais artificiais de controlo. O processo de transferência de calor (bloco designado por Processo nas Figuras 6.1 e 6.2) é simulado de acordo com os modelos desenvolvidos no Capítulo 4.

A metodologia de controlo proposta baseia-se nas seguintes leis:

$$M_i(t) = f(H_r(t), T_r(t), M_i(t - \Delta t), T_{rp}(t + \Delta t)) \quad (6.1)$$

$$M_{ex}(t) = g(H_r(t), T_r(t), M_{ex}(t - \Delta t), T_{rsp}(t + \Delta t)) \quad (6.2)$$

sendo f e g funções que representam redes neuronais artificiais. Estas redes são desenvolvidas de acordo com os procedimentos genéricos já apresentados.

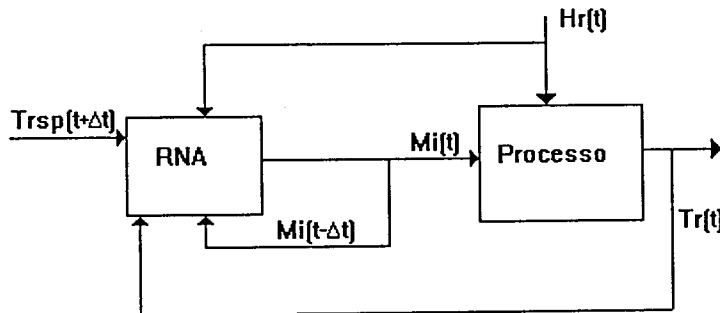


Figura 6.1: Diagrama de blocos para a configuração A, com o sistema de controlo neuronal artificial.

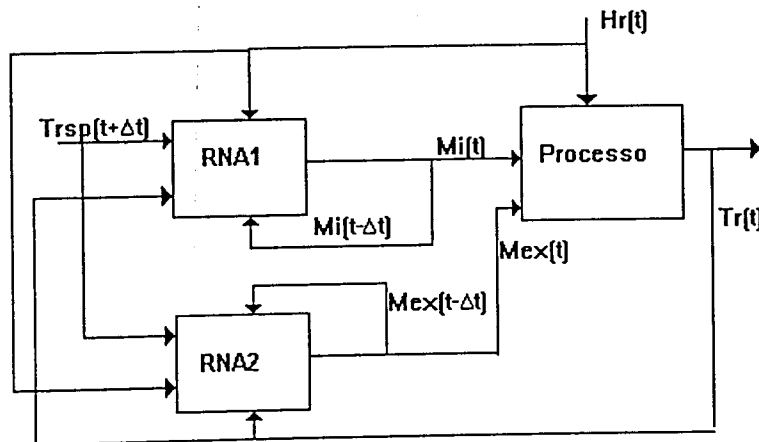


Figura 6.2: Diagrama de blocos para a configuração B, com o sistema de controlo neuronal artificial.

A fase de treino destas redes neuronais artificiais foi realizada com dados obtidos por simulação. Os conjuntos de resultados que constituem as respostas dos sistemas a perturbações nas variáveis manipuladas (M_i e M_{ex}) e no calor de reacção (H_r) foram utilizados como base de aprendizagem das redes neuronais artificiais criadas. Relativamente à configuração A, as perturbações efectuadas correspondem às seguintes condições:

- Situação 1 - Variação de +300 Mcal/h no calor de reacção;
- Situação 2 - Variação de -500 Mcal/h no calor de reacção;
- Situação 3 - Variação de +62 m³/h no caudal de água refrigerada;

- Situação 4 - Variação de $-68 \text{ m}^3/\text{h}$ no caudal de água refrigerada.

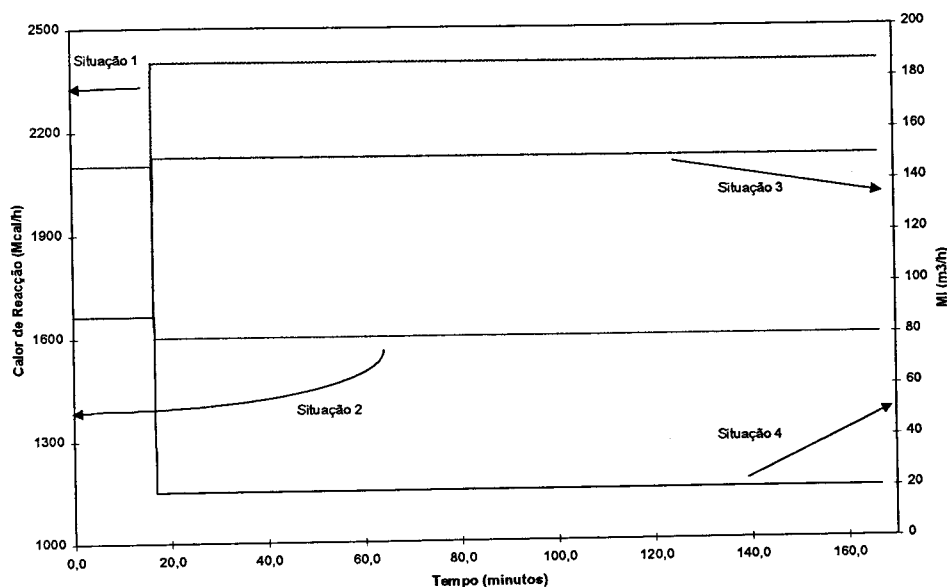


Figura 6.3: Perturbações efectuadas na configuração A.

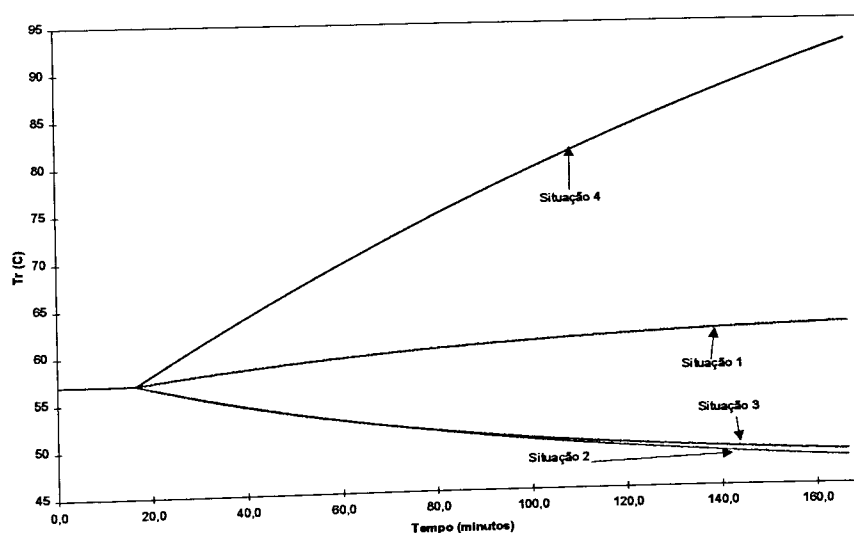


Figura 6.4: Perfis de temperatura da reacção calculados em função do tempo, relativos às perturbações efectuadas.

As Figuras 6.3 e 6.4 apresentam, respectivamente, as perturbações e os resultados obtidos em termos da temperatura da reacção, no caso da configuração A. Nas Figuras 6.5 e 6.6 representam-se, respectivamente, as perturbações impostas e os resultados obtidos com a simulação do modelo para a configuração B. Neste caso, as perturbações são:

- Situação 1 - variação de $+500 \text{ Mcal/h}$ no calor de reacção;
- Situação 2 - Variação de -300 Mcal/h no calor de reacção;
- Situação 3 - Variação de $+66 \text{ m}^3/\text{h}$ no caudal de água que circula no permutador de calor;

- Situação 4 - Variação de $+60 \text{ m}^3/\text{h}$ no caudal de água refrigerada.

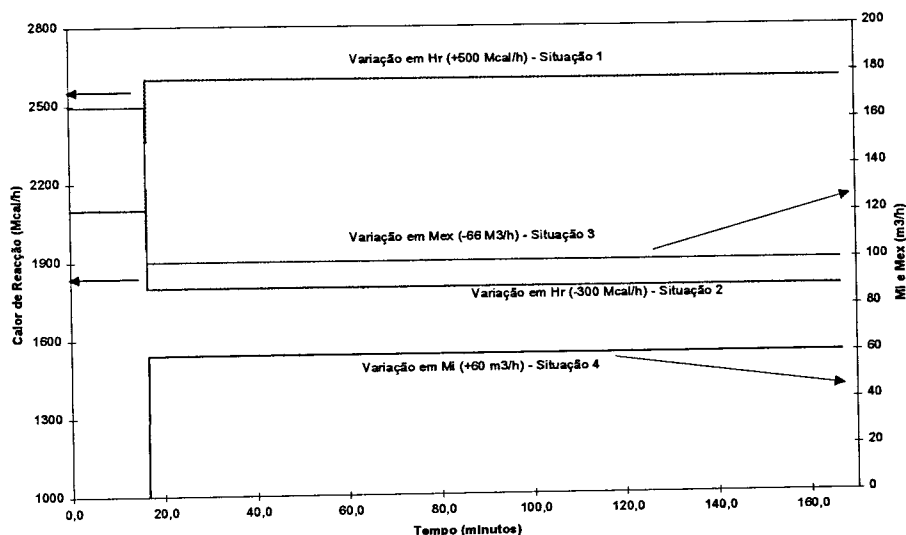


Figura 6.5: Perturbações efectuadas na configuração B.

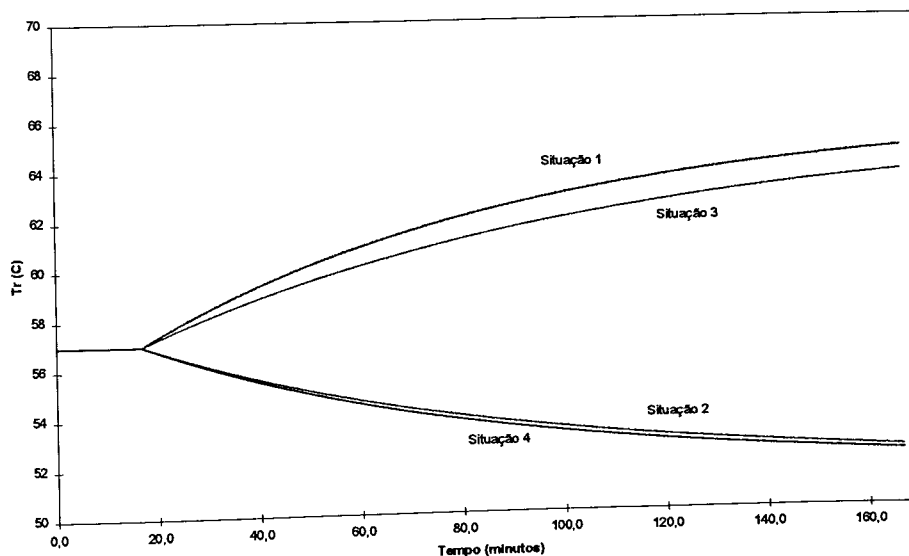


Figura 6.6: Perfis da temperatura da reacção calculados em função do tempo relativos às perturbações efectuadas.

Estes dados foram utilizados para gerar as estruturas neuronais artificiais para o controlo.

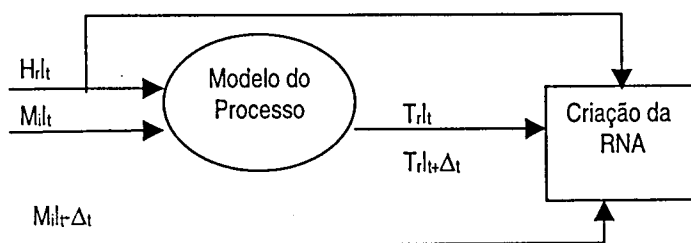
Foram testadas diferentes estruturas neuronais artificiais para as duas configurações de forma a minimizar o valor da função objectivo, de acordo com o critério de convergência indicado na equação (3.1). Na configuração A, as variáveis de entrada e de saída das estruturas estão referidas na Figura 6.1, isto é, as entradas são os valores da temperatura de reacção (T_r) e do calor de reacção (H_r) para o momento t , o caudal M_i para o momento $t-\Delta t$ e a

temperatura de referência da reacção (T_{rsp}) para o momento $t+\Delta t$, a saída corresponde ao valor de M_i no momento t . A função objectivo é igual ao somatório dos quadrados dos desvios entre os valores de M_i calculados pelas redes neuronais artificiais ($M'_{i|t}$) e os valores de M_i no momento t , disponíveis para treino. Na configuração B, as entradas e as saídas são as indicadas na Figura 6.2. Na rede RNA1, as entradas e a saída são as mesmas que foram referidas no estudo da configuração A e a função objectivo é idêntica à da configuração A. Na rede RNA2 a entrada M_i é substituída por M_{ex} no momento $t-\Delta t$ e a saída corresponde ao valor M_{ex} para o momento t . Neste caso, a função objectivo corresponde ao somatório dos quadrados dos desvios entre M_{ex} calculados pelas redes e M_{ex} nos diversos momentos t , disponíveis para treino. Durante a fase de treino utilizou-se o valor de T_r em vez de T_{rsp} para o momento $t+\Delta t$. Todas as entradas e saídas das redes neuronais artificiais correspondem a valores normalizados das respectivas variáveis. A estrutura da metodologia desenvolvida é representada esquematicamente na Figura 6.7 (configuração A), em que se apresentam as entradas e as saídas das RNAs nas fases de treino, validação e simulação do modelo integrado (modelo de processo + controlador neuronal artificial).

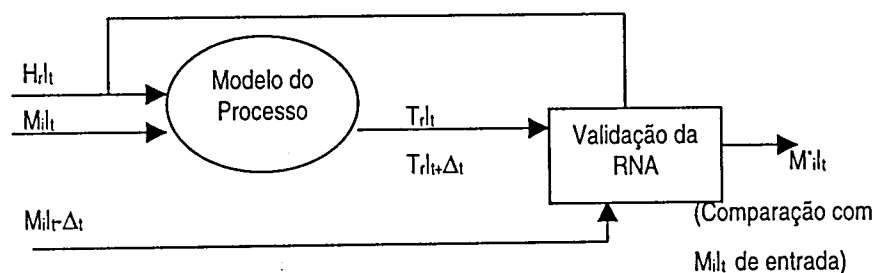
O número de exemplos de treino foi de 4990 para a rede da configuração A e de 3598 para as redes RNA1 e RNA2 da configuração B.

Na situação correspondente à configuração A, a rede neuronal artificial escolhida, a que corresponde um valor da função objectivo mais baixo, é constituída por 3 camadas, possuindo 4 neurónios na camada de entrada, 3 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída. A função de transferência usada nos neurónios das camadas intermédia e de saída foi a função tangente hiperbólica. Na configuração B, a rede neuronal artificial RNA1 (Figura 6.2) é formada por 4 neurónios na camada de entrada, 2 neurónios na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída. A rede RNA2 (Figura 6.2) possui 3 camadas, com 4 neurónios na camada de entrada, 1 neurónio na camada intermédia e 1 neurónio na camada de saída. Ambas as estruturas foram criadas com a função sigmóide como função de transferência dos neurónios das camadas intermédia e saída. As estruturas neuronais artificiais desenvolvidas com a função tangente hiperbólica, como função de transferência, apresentaram valores das funções objectivo maiores durante a fase de treino.

1. Criação da estrutura neuronal artificial



2. Validação da estrutura neuronal artificial



3. Simulação do sistema integrado (RNAs + modelo do processo)

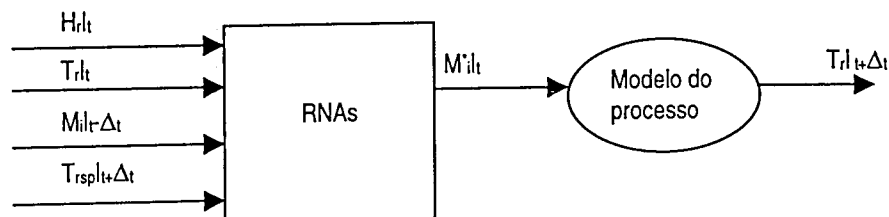


Figura 6.7: Representação esquemática da metodologia desenvolvida (configuração A)

As redes neurais artificiais escolhidas foram testadas através da realização de perturbações diferentes das consideradas durante a fase de treino. Na Figura 6.8 comparam-se os valores reais impostos e os gerados pela rede, no caso da configuração A. Na situação 1 impôs-se uma variação de M_i de 88 para 120 m³/h, mantendo o calor de reacção igual a 2100 Mcal/h, enquanto que, na situação 2 é bruscamente alterado o calor de reacção de 2100 para 2600 Mcal/h mantendo M_i . Como se pode ver pela figura, a rede neuronal artificial escolhida ajusta-se bem às novas situações. As diferenças entre os valores reais (impostos) e os obtidos pela rede não são significativos.

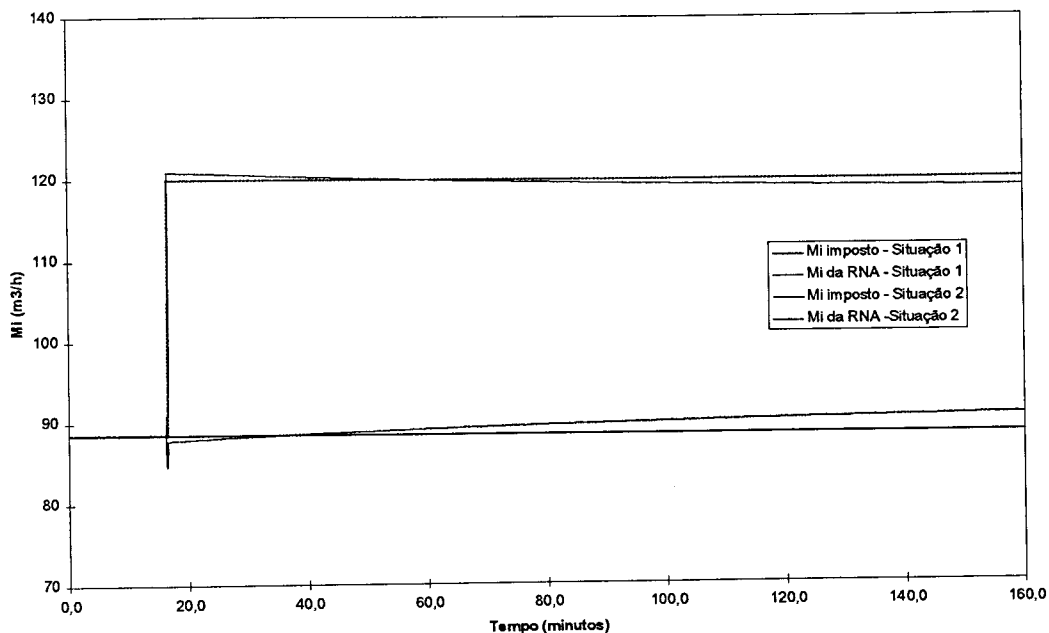


Figura 6.8: Testes de validação da rede neuronal artificial relativa à configuração A.

As perturbações efectuadas para testar as redes no caso da configuração B foram:

1. Variação no calor de reacção (H_r) de 2100 para 2800 Mcal/h, mantendo constante o caudal injectado de água fria ($M_i=0 \text{ m}^3/\text{h}$) e o caudal que circula no permutador de calor ($M_{ex}=166 \text{ m}^3/\text{h}$) - Situação 1;
2. Variação no caudal que circula no permutador de calor (M_{ex}) de 166 para 120 m^3/h , mantendo constante o calor de reacção ($H_r=2100 \text{ Mcal/h}$) e o caudal de água de refrigeração ($M_i=0 \text{ m}^3/\text{h}$) - Situação 2;
3. Variação no caudal de água de refrigeração de 0 para 20 m^3/h , mantendo constante o calor de reacção ($H_r=2100 \text{ Mcal/h}$) e o caudal que circula no permutador de calor ($M_{ex}=166 \text{ m}^3/\text{h}$) - Situação 3.

As Figuras 6.9 e 6.10 comparam os valores impostos em termos dos caudais (M_i e M_{ex}) com os valores gerados pelas redes. Existem discrepâncias entre estes valores, sendo as mais relevantes na situação 3, que corresponde à perturbação efectuada no caudal de água refrigerada.

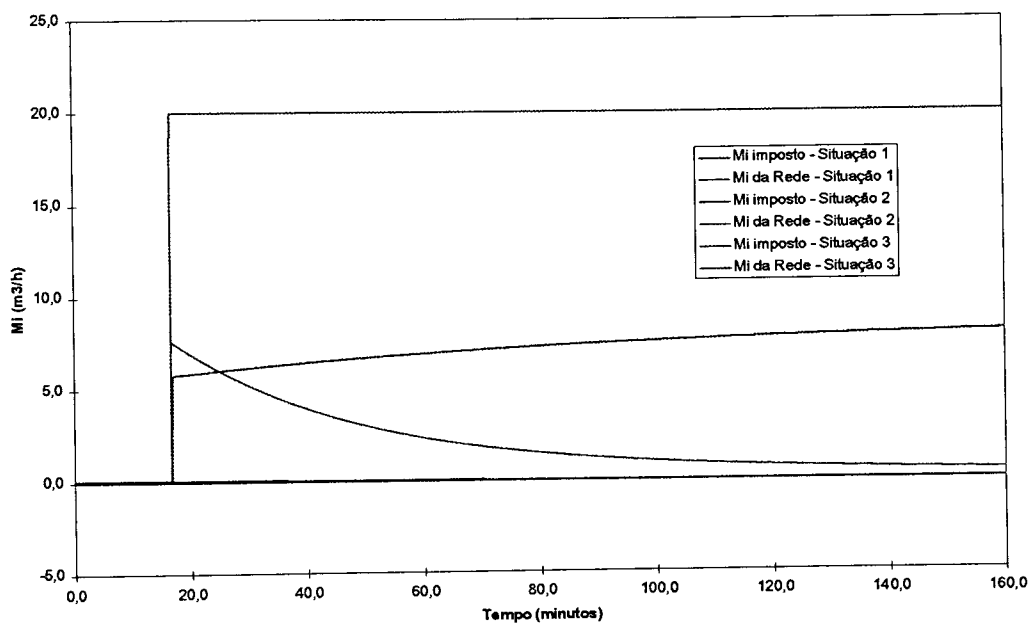


Figura 6.9: Testes de validação da rede RNA1 relativa à configuração B.

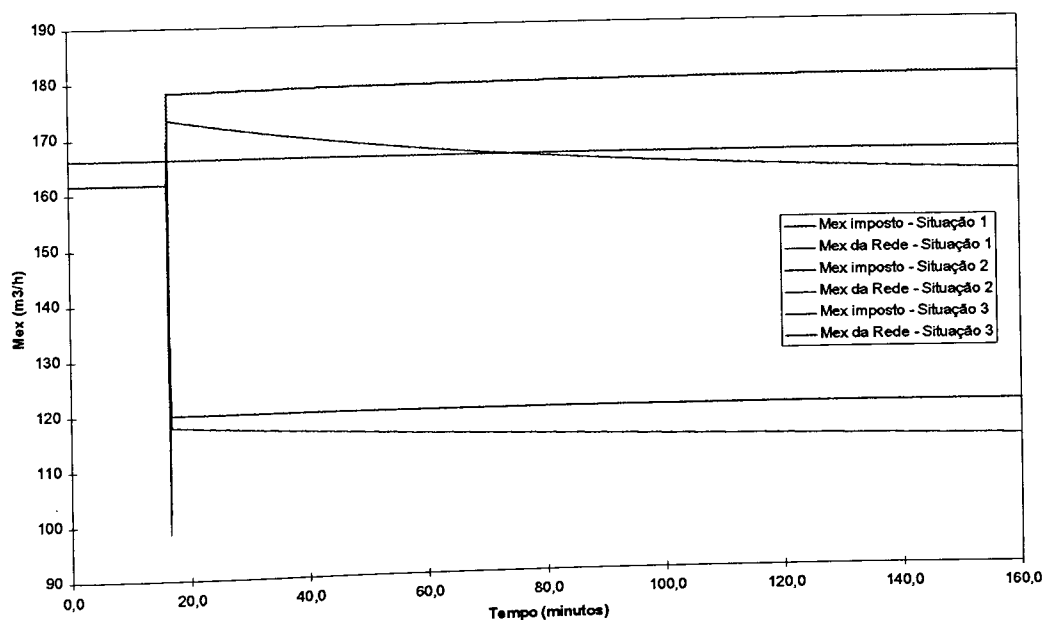


Figura 6.10: Testes de validação da rede RNA2 relativa à configuração B.

Uma vez criadas e testadas as estruturas neuronais artificiais para o controlo do processo, a análise do sistema criado é realizada através do estudo dinâmico do processo, em termos da evolução da temperatura da reacção versus tempo, para a fase de arrefecimento de um ciclo de reacção. O objectivo é comparar o desempenho deste sistema de controlo com o desempenho das metodologias de controlo apresentadas nos capítulos anteriores.

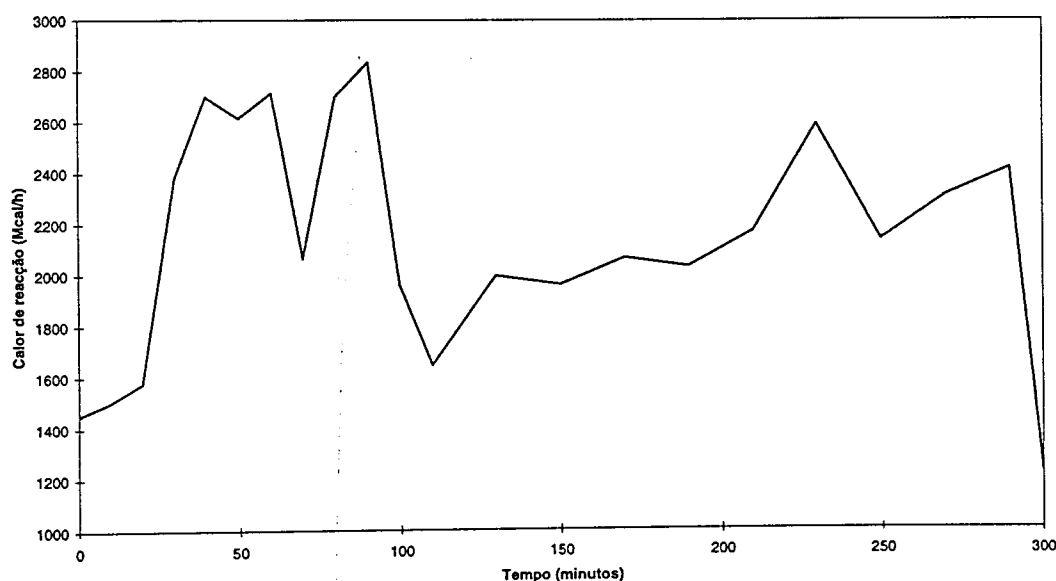


Figura 6.11: Perfil do calor de reacção em função do tempo para a fase de arrefecimento num ciclo de reacção.

Na Figura 6.11 representa-se o perfil do calor de reacção, em função do tempo, durante a fase de arrefecimento num ciclo de reacção. O objectivo é manter a temperatura da reacção no valor pré-estabelecido de 57 °C.

Na Figura 6.12 representa-se a evolução da temperatura da reacção em função do tempo, obtida com as diferentes metodologias de controlo, relativa à configuração A. Como se pode ver pela análise da figura, o sistema de controlo baseado em redes neuronais artificiais apresenta um melhor desempenho quando comparado com o desempenho das duas estruturas de controlo já estudadas.

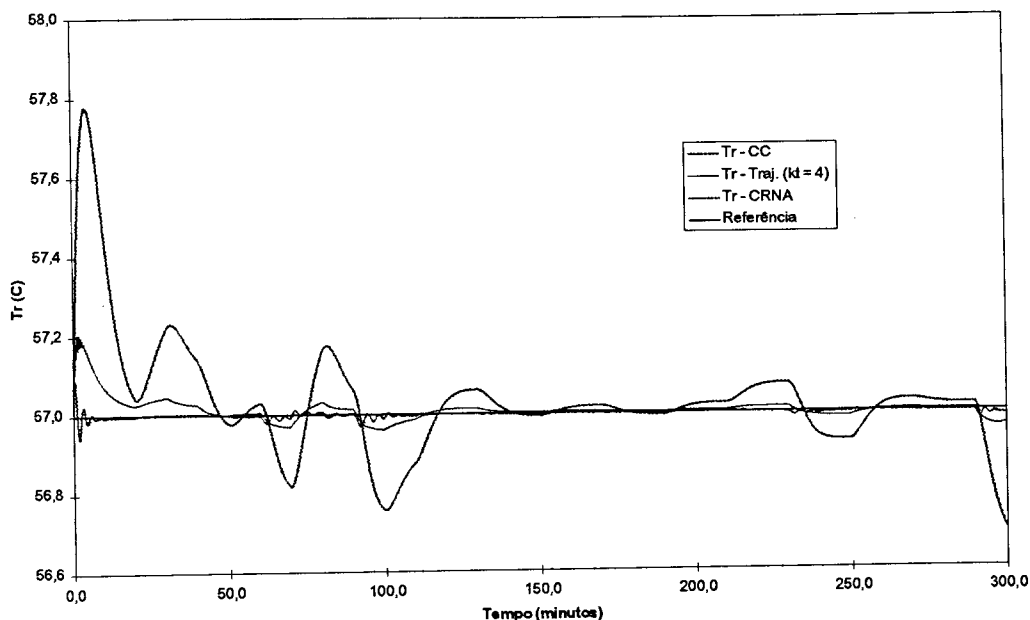


Figura 6.12: Evolução da temperatura da reacção - Configuração A.

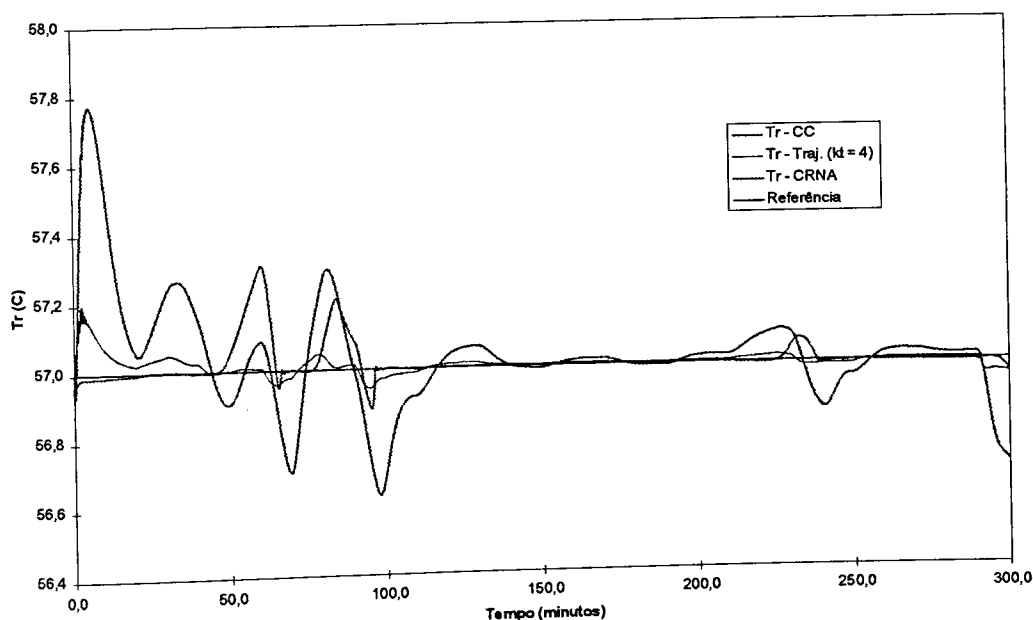


Figura 6.13: Evolução da temperatura da reacção - Configuração B.

O mesmo não se pode dizer em relação à configuração B (Figura 6.13). Para o caso deste sistema, o controlo neuronal artificial apresenta praticamente o mesmo desempenho do que o apresentado pelo sistema de controlo tradicional. Este facto pode dever-se à inexistência de dados representativos do processo durante o treino das estruturas neuronais artificiais, como demonstram as Figuras 6.9 e 6.10, em que se representam os testes de validação a estas redes. Apesar das discrepâncias entre os valores previstos pelas redes

artificiais e os valores gerados pelos modelos, pode dizer-se que o grau de adaptação destas estruturas ao controlo do processo é satisfatório.

6.5 Conclusões

Os estudos efectuados e apresentados neste capítulo mostram que a utilização de estruturas neuronais artificiais no controlo do processo de transferência de calor em reactores descontínuos é em geral eficiente. Os resultados obtidos, através da aplicação destas estruturas no controlo da temperatura do processo de reacção exotérmica, mostram a possibilidade de desenvolver novas metodologias de controlo de processos dinâmicos. A técnica adoptada para a aprendizagem das redes neuronais artificiais, através de perturbações efectuadas no processo, apresentou bons resultados nos estudos dinâmicos de controlo da temperatura da reacção. Este facto tem relevância na aplicação de redes neuronais artificiais ao controlo de processos, em situação de projecto em que é possível realizar previsões da dinâmica do sistema através de modelos. Estas previsões podem ser usadas como primeiros valores de aprendizagem das redes. A situação tratada de controlo demonstrou que estruturas neuronais de baixa complexidade podem atingir os níveis de desempenho dos sistemas de controlo em cascata convencionais.

A conclusão subjacente a este capítulo é a possibilidade de extrapolação dos resultados obtidos à criação de metodologias genéricas para o controlo de processos dinâmicos, com uma larga utilização no domínio da engenharia do processo químico.

6.6 Referências

- Bhat, N. e McAvoy, T. J., "Use of Neural Nets for Dynamic Modeling and Control of Chemical Process Systems", Computers Chem. Engng., 14(4/5), pp.573-583, 1990.
- Boullart, L., Krijgsman, A. e Vingerhoeds, R. A., "Application of Artificial Intelligence in Process Control", 1ª edição, Pergamon Press, Oxford, 1992.
- Martins, F. G. e Coelho, M. A. N., "Implementation of an Artificial Neural Controller in Batch Chemical Reactor", Cartaz apresentado no 2nd General Meeting of Human Capital and Mobility Program, 27-28 de Setembro, Porto, Portugal, 1996.
- Tsen, A. Y.-D., Jang, S. S., Wong, D. S. H. e Joseph, B., "Predictive Control of Quality in Batch Polymerization Using Hybrid ANN Models", AIChE Journal, 42(2), pp. 455-464, 1996.
- Will, M. J., Montague, G. A., Di Massimo, C., Tham, M. T. e Morris, A. J., "Artificial Neural Networks in Process Estimation and Control", Automatica, 18(6), pp. 1181-1187, 1992.

Capítulo 7

Conclusões Gerais e Sugestões Para Trabalho Futuro

Sumário

Neste capítulo enumeram-se conclusões retiradas dos estudos efectuados. Este capítulo surge como um complemento das conclusões parcelares apresentadas no final de cada capítulo. É igualmente apresentado um conjunto de linhas de acção que pode ser seguido para desenvolvimento posterior das matérias estudadas ao longo deste trabalho.

7.1 Conclusões gerais

O comportamento dinâmico do processo de transferência de calor em reactores encamisados, em que se processam reacções altamente exotérmicas e elevadas taxas de transferência de calor, foi analisado recorrendo a modelos clássicos e a metodologias baseadas em estruturas neuronais artificiais. A interligação destes modelos com os sistemas de controlo e sua posterior integração em diferentes configurações de transferência de calor em reactores encamisados constituem os objectivos principais deste trabalho.

Numa primeira fase, analisou-se o desempenho das redes neuronais artificiais, através da análise de três casos – estudo da dispersão em dois tanques agitados em série, determinação da conversão num reactor tubular com dispersão axial e determinação da conversão num reactor de polimerização descontínuo. No estudo dos três casos foi explorada a hipótese da aplicação destas estruturas em zonas de extrapolação – valores das entradas fora dos limites usados durante a fase de treino. Apesar dos resultados obtidos nas zonas de extrapolação (fora dos limites de aprendizagem da rede) serem coerentes com os calculados através dos modelos clássicos utilizados, é de referir que esta concordância não constitui regra, já que, estas estruturas artificiais não são construídas com base em modelos físico-químicos dos processos.

As redes neuronais artificiais foram desenvolvidas recorrendo ao método de optimização simplex. O recurso a este algoritmo permite o desenvolvimento de estruturas neuronais artificiais mais genéricas como, por exemplo, estruturas neuronais artificiais com funções de transferência diferentes em cada neurónio, sem que se verifique um aumento significativo da complexidade de cálculo. Pode-se concluir que a introdução deste algoritmo, na determinação dos parâmetros das estruturas neuronais artificiais desenvolvidas, foi realizado com sucesso, quer em termos de rapidez de convergência, quer em termos de fiabilidade dos resultados obtidos.

Através dos modelos desenvolvidos foi possível avaliar diferentes configurações de transferência de calor em reactores encamisados, nomeadamente a introdução de um permutador de calor no circuito primário de transferência de calor de um reactor descontínuo (designada por configuração B ao longo do trabalho). Os resultados apresentados concentram-se na análise de duas concepções para o arrefecimento de reactores encamisados:

1. Na configuração A (Figura 4.1), o controlo da temperatura da reacção é realizada pela constante injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento;

2. Na configuração B (Figura 4.2), o controlo da temperatura da reacção é realizado pela acção combinada do caudal que circula através do permutador de calor e através da injeção de água refrigerada no circuito de arrefecimento.

Através das simulações realizadas são apresentadas previsões relativas às principais variáveis processuais, em condições de operação normal, assim como variações bruscas do calor de reacção e/ou alterações da temperatura de referência da reacção. Não foram detectadas alterações significativas na evolução da temperatura da reacção, quando se incorpora um permutador de calor no circuito primário de arrefecimento. Esta conclusão é de interesse vital para a possível implementação deste esquema de arrefecimento em reactores encamisados.

Os resultados das simulações relativas à configuração A e configuração B demonstram que existe uma redução efectiva no consumo de água refrigerada (Figuras 4.12 e 4.13) por unidade de calor transferido na camisa do reactor, quando é introduzido um permutador de calor no circuito primário de arrefecimento do reactor (configuração B).

Os estudos realizados no Capítulo 4 mostram a importância da simulação global (controlo + processo) na avaliação de alternativas, tendo como objectivo a racionalização de utilidades e o controlo da reacção química. A criação de modelos integrados permitiu analisar o comportamento de diferentes alternativas para o processo de transferência de calor num reactor descontínuo.

A estratégia apresentada no Capítulo 5 permite avaliar, através de simulação, novas concepções de controlo baseadas em controlo em cascata. No desenvolvimento desta concepção de controlo, os parâmetros dos controladores foram mantidos constantes, existindo apenas a introdução de um método para reajustar as trajectórias de referência a incorporar nos controladores. Os resultados são promissores, uma vez que nas simulações efectuadas os desvios entre os valores da temperatura da reacção e os valores de referência são reduzidos a 10%, quando comparados com os desvios obtidos com a utilização de esquemas de controlo em cascata, sem correção de trajectórias de referência (Capítulo 4). A utilização desta técnica foi concretizada através da análise do comportamento dinâmico dos dois processos de transferência de calor descritos no Capítulo 4.

Os estudos efectuados e apresentados no Capítulo 6 concretizam a utilização de estruturas neuronais artificiais no controlo do processo de transferência de calor em sistemas de reacção exotérmica. A situação tratada de controlo demonstrou que estruturas neuronais de baixa complexidade podem atingir os níveis de desempenho dos sistemas baseados em controlo em cascata.

A técnica adoptada baseia-se em estudos dinâmicos do processo de transferência de calor em reactores encamisados, sem recurso a dados históricos ou experimentais, para a criação e aprendizagem das redes neuronais artificiais desenvolvidas. Estes resultados são relevantes para avaliar diferentes configurações de transferência de calor e implementação de novas metodologias de controlo em sistemas de reacção exotérmica.

7.2 Sugestões para trabalho futuro

Alguns dos temas focados nesta tese podem ser objectos de estudo para trabalhos posteriores. As áreas estudadas são diversificadas e o conhecimento existente está em pleno desenvolvimento.

7.2.1 Redes neuronais artificiais

Estudos sobre a aplicação de redes neuronais artificiais podem seguir várias vertentes:

- Desenvolvimento de procedimentos expeditos para a procura de estruturas neuronais artificiais. A determinação da estrutura neuronal artificial que melhor descreva o processo deve ser obtida seguindo uma aproximação sistemática de procura. Deste modo, poder-se-á efectuar o treino e implementação de redes neuronais artificiais em tempo real, e assim, utilizar este tipo de estruturas em processos para os quais existe pouco conhecimento sobre o seu comportamento dinâmico;
- Em consequência do item anterior surgirão naturalmente estudos sobre algoritmos e procedimentos de cálculo a usar durante a fase de treino de redes neuronais artificiais. A estrutura distribuída das redes neuronais artificiais será, sem dúvida, uns dos aspectos a ter em consideração num futuro muito próximo, uma vez que este género de arquitecturas serão facilmente incorporadas em sistemas de processamento em paralelo;
- Utilização de modelos híbridos aplicados a processos químicos. O uso integrado de modelos puramente matemáticos e de modelos baseados nos princípios físico-químicos é actualmente objecto de estudo intensivo. Estruturas neuronais artificiais são incorporadas nos modelos teóricos para previsão dos parâmetros desses modelos, a partir de informação disponível. Do mesmo modo que nos modelos convencionais, surge o problema relacionado com o aumento do tempo de processamento. Mais uma vez, será necessário encontrar novas formas de cálculo que possibilitem a redução do tempo de processamento para implementação destes modelos em tempo real.

7.2.2 Reactores descontínuos

O desenvolvimento de testes à escala piloto para diferentes sistemas de reacção em processos por partidas, utilizando vários sistemas de transferência de calor e diversos esquemas de controlo, poderá ser o corolário dos estudos apresentados nesta tese. O desenvolvimento de uma instalação piloto com flexibilidade suficiente que permita a validação experimental dos resultados das simulações efectuadas, para o processo de transferência de calor em reactores descontínuos, é um dos passos fundamentais a atingir no futuro. A expansão dos conceitos apresentados ao controlo de reactores descontínuos industriais será relevante pela sua relação com a dualidade controlo/eficiência energética dos processos. A metodologia desenvolvida para sistemas de reacção por partidas pode ser testada em outras operações, que envolvam controlo de processos dinâmicos.

Apêndice A – Algoritmo de Retro-propagação de Erros

O algoritmo de retro-propagação de erros é um método de procura de mínimos de uma função multivariável sem restrições, que se baseia, tal como o nome indica, na utilização dos erros relativamente a cada parâmetro a otimizar, na procura do vector correspondente ao mínimo da função. Apesar deste método de optimização poder ser aplicado na minimização de qualquer função multivariável, este apêndice vai centralizar-se na descrição deste algoritmo aplicado às estruturas neuronais artificiais.

Seja i_j a entrada de um neurónio com uma função de transferência f , o valor de saída de um neurónio j é dado por:

$$a_j = f(i_j) \quad (\text{A.1})$$

em que

$$i_j = \sum_i w_{ij} a_i + \theta_j \quad (\text{A.2})$$

sendo w_{ij} o peso da ligação entre o neurónio i e o neurónio j , a_i a saída do neurónio i e θ_j uma entrada externa para o neurónio j .

Numa estrutura neuronal artificial, a função a minimizar é:

$$E = \sum_p E^p \quad (\text{A.3})$$

em que p representa o conjunto dos exemplos de treino. Na prática, a procura do mínimo da função objectivo é realizada de uma forma iterativa, pela minimização do erro sobre as n saídas presentes para cada exemplo de treino, p , isto é;

$$E_p = \frac{1}{2} \sum_j^n (d_j - a_j)_p^2 \quad (\text{A.4})$$

onde a_j representa a saída do neurónio j pertencente à camada de saída e d_j corresponde ao valor correspondente à saída j disponível no exemplo de treino p .

Em cada exemplo de treino, o ajuste dos pesos é definido como sendo proporcional à derivada do erro em ordem ao peso, w_{ij} :

$$\Delta w_{ij} = -\gamma \frac{\partial E^p}{\partial w_{ij}} \quad (A.5)$$

Por sua vez, a derivada do erro em ordem ao peso é dada por:

$$\frac{\partial E^p}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial E^p}{\partial i_j} \frac{\partial i_j}{\partial w_{ij}} \quad (A.6)$$

Da equação (A.2) obtém-se:

$$\frac{\partial i_j}{\partial w_{ij}} = a_i \quad (A.7)$$

Definindo δ_j (delta), como:

$$\delta_j = -\frac{\partial E^p}{\partial i_j} \quad (A.8)$$

Substituindo as duas últimas equações na equação (A.5) obtém-se a fórmula de adaptação dos pesos da rede, considerando o exemplo de treino p:

$$\Delta w_{ij} = \gamma \delta_j a_i \quad (A.9)$$

Deste modo, o peso entre o neurónio i da camada l o neurónio j da camada l+1 para a iteração k+1, considerando todos os exemplos de treino, é obtido a partir da seguinte expressão:

$$w_{ij}^{k+1} = w_{ij}^k + \gamma \sum_p \delta_j a_i \quad (A.10)$$

O cálculo de δ_j numa estrutura neuronal artificial com camadas intermédias é efectuado de maneira diferente, conforme se trate de neurónios da camada de saída ou das camadas intermédias. Os *deltas* da camada de saída serão denominados por δ_j , e os das camadas intermédias por δ_h .

No cálculo de ambos os *deltas* aplica-se recursivamente a regra composta das derivadas à equação (A.8):

$$\delta_j = -\frac{\partial E^p}{\partial i_j} = \frac{\partial E^p}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial i_j} \quad (A.11)$$

Pela equação (A.1), a segunda parte é dada por:

$$\frac{\partial a_j}{\partial i_j} = f'(i_j) \quad (A.12)$$

a qual é simplesmente a derivada da função de activação.

Como já foi referido, a primeira parte da equação (A.11) é calculada de modo diferente para as unidades da camada de saída e das camadas intermédias. Para qualquer unidade da camada de saída j , a derivada pode ser obtida directamente a partir do erro definido pela equação (A.4):

$$\frac{\partial E^p}{\partial a_j} = -(d_j - a_j) \quad (A.13)$$

Substituindo esta equação e a equação (A.12) na equação (A.11), resulta:

$$\delta_j = (d_j - a_j) f'(i_j) \quad (A.14)$$

Se a função de activação for a função sigmóide, cuja expressão matemática é:

$$a_j = f(i_j) = \frac{1}{1 + e^{-i_j}} \quad (A.15)$$

a sua derivada é dada por:

$$f'(i_j) = \frac{\partial}{\partial i_j} \frac{1}{1 + e^{-i_j}} = \frac{e^{-i_j}}{(1 + e^{-i_j})^2} = a_j(1 - a_j) \quad (A.16)$$

O valor de δ_j para uma unidade de saída pode ser escrito da seguinte forma:

$$\delta_j = (d_j - a_j) a_j (1 - a_j) \quad (A.17)$$

Em cada exemplo de treino p , esta expressão pode ser substituída na equação (A.9), sendo usada para alterar os pesos da estrutura neuronal artificial, conduzindo a:

$$\Delta w_{hj} = \gamma (d_j - a_j) a_j (1 - a_j) a_h \quad (A.18)$$

onde os índices h e j se referem a nós da última camada intermédia e da camada de saída, respectivamente.

Contrariamente ao que acontece nas unidades da camada de saída, as saídas desejadas para as unidades nas camadas intermédias são desconhecidas. No entanto, podem ser calculadas pela expansão da derivada do erro, usando a regra em cadeia que se segue:

$$\frac{\partial E^p}{\partial a_j} = \sum_j \frac{\partial E^p}{\partial i_j} \frac{\partial i_j}{\partial a_h} = \sum_j \frac{\partial E^p}{\partial i_j} \frac{\partial}{\partial a_h} \sum_h w_{hj} a_h = \sum_j \frac{\partial E^p}{\partial i_j} w_{hj} = - \sum_j \delta_j w_{hj} \quad (\text{A.19})$$

Substituindo (A.19) e (A.12) em (A.11), usando o índice h para as unidades intermédias, temos:

$$\delta_h = f'(i_h) \sum_j \delta_j w_{hj} \quad (\text{A.20})$$

Usando a derivada da função sigmóide obtida pela equação (A.16) calcula-se o *delta* para as unidades das camadas intermédias através da seguinte expressão:

$$\delta_h = a_h (1 - a_h) \sum_j \delta_j w_{hj} \quad (\text{A.21})$$

A equação para ajuste dos pesos é:

$$\Delta w_{ih} = \gamma \sum_p a_i a_h (1 - a_h) \sum_j \delta_j w_{hj} \quad (\text{A.22})$$

onde i e j referem-se aos nós das camadas anterior e posterior à camada h respectivamente.

Apêndice B – Algoritmo Simplex

O algoritmo simplex é um método de otimização directo, de procura dos parâmetros, que permite a minimização de uma função multivariável. A implementação deste método consiste na realização de uma série de passos desenvolvidos através do movimento de pontos do simplex, no sentido da diminuição do valor da função objectivo. Neste apêndice faz-se uma descrição geométrica do algoritmo simplex aplicado à minimização de uma função a dois parâmetros.

A Figura B.1 representa um simplex a duas dimensões, constituindo um triângulo, representado pelos vértices, $P(1)$, $P(2)$ e $P(3)$. O valor da função para qualquer ponto P_i é $E(P_i)$. Novos pontos do simplex são gerados por manipulações geométricas.

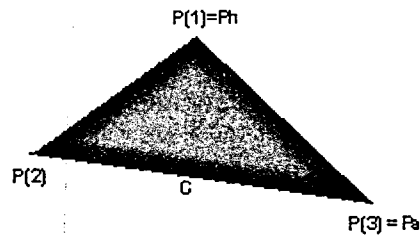


Figura B.1: Simplex a duas dimensões: $E(P_h) > E(P_s)$; o ponto C é o centróide do simplex o qual é usado para gerar novos simplexes.

O ponto C é o centróide do simplex obtido através do cálculo da média de todos os pontos excluindo P_h (ponto com maior valor da função):

$$C = \frac{1}{n} \sum_{i=1, i \neq h}^{n+1} P_i \quad (B.1)$$

Existem três operações principais neste processo de otimização: reflexão, expansão e contracção.

A reflexão encontra um novo ponto simplex. Na Figura B.2a, o ponto P_r é estimado pela reflexão em volta do centróide e obtido a partir de P_h . O valor da função no ponto reflectido é $E(P_r)$.

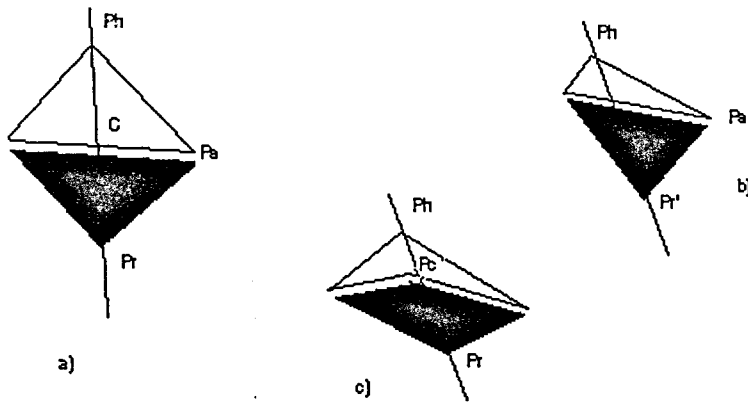


Figura B.2: Operações usadas para gerar novos simplexes no sentido da procura de um mínimo de uma função.

Se $E(P_r) < E(P_h)$, P_h é substituído por P_r gerando-se um novo simplex. Este processo é repetido, em conjugação com as outras operações, até que um mínimo seja encontrado.

Matematicamente, o ponto reflectido é dado por:

$$P_r = (1 + a)C - aP_h \quad (\text{B.2})$$

Se $a=1$, a distância entre P_r e o centróide é igual à distância entre P_h e o centróide.

Existem três aspectos a ter em consideração na operação reflexão:

- Se $E(P_r) < E(P_h)$, a reflexão teve sucesso;
- Se $E(P_r) < E(P_s)$, a reflexão teve sucesso e o simplex pode ser expandido nesta direcção de forma a acelerar a convergência;
- Se $E(P_r) > E(P_h)$, a reflexão não teve sucesso e um novo ponto pode ser seleccionado por contracção α partir do ponto reflectido, ao longo da linha definida pelo centróide até P_h . Sendo encontrado um ponto com mais baixo valor da função objectivo, o processo é repetido.

Quando $E(P_r) < E(P_s)$, a reflexão teve sucesso e a convergência pode ser acelerada pela expansão do ponto reflectido na mesma direcção (Figura B.2b). Esta expansão é descrita pela expressão matemática seguinte:

$$P_r' = bP_r + (1 - b)C \quad (\text{B.3})$$

Se $b=2$, a distância a partir do novo ponto é o dobro da distância entre P_h e C .

Se $E(P_r) > E(P_h)$, o ponto reflectido P_r não é conveniente (Figura B.2c) e um novo ponto P_c é definido entre o centróide C e P_h . Esta operação é designada por contracção.

O ponto de contracção pode ser definido matematicamente por:

$$P_c = (1 - d)C + dP_h \quad (B.4)$$

Se $d=0,5$, o novo ponto é o ponto médio entre o ponto C e o ponto P_h . Se $E(P_c) < E(P_h)$, o ponto P_c define um novo simplex e o processo de reflexão pode prosseguir até que o mínimo seja encontrado.

Desta forma é possível encontrar um mínimo de uma função a dois parâmetros. Numa situação de n dimensões, como o caso das estruturas neuronais artificiais, a diferença relativamente a uma função a 2 dimensões diz respeito ao tipo de simplex a gerar. Por exemplo, uma rede neuronal com 3 camadas (a de entrada, a intermédia e a de saída), possuindo entradas externas para os neurónios da camada intermédia e de saída, possui um número de parâmetros a otimizar dado por:

$$n_p = n_i(n_i + 1) + n_o(n_o + 1) \quad (B.5)$$

sendo n_p o número total de parâmetros da rede neuronal artificial, n_i o número de neurónios da camada de entrada, n_h o número de neurónios da camada intermédia e n_o o número de neurónios da camada de saída. Neste caso, o simplex gerado terá n_p+1 dimensões. O algoritmo simplex foi implementado, utilizando código em Fortran 90, transcrevendo para esta linguagem o código desenvolvido em Fortran 77, presente em Press et al. (1986)¹.

¹ Press, W. H., Flannery, B. P., Teukolsky, S. A. e Vetterling, W. T., "Numerical Recipes: The Art of Scientific", 1ª edição, Cambridge University Press, new York, pp.292-293, 1986.

Apêndice C – Modelo Convencional Para o Estudo da Dispersão em Dois Tanques Agitados em Série

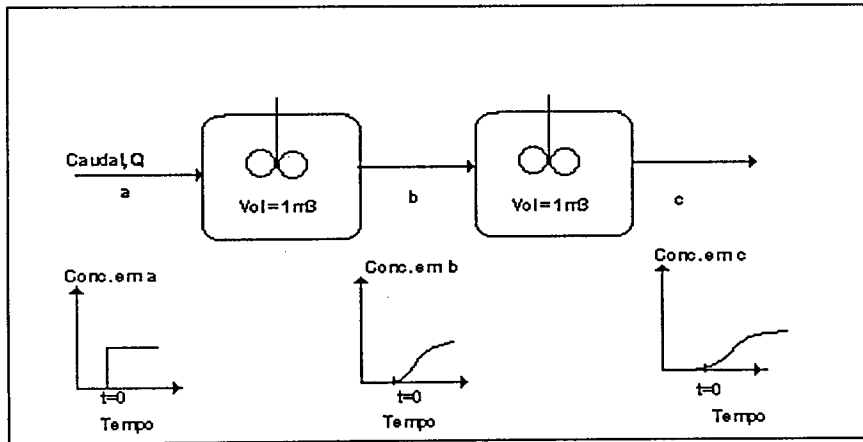


Figura C.1: Esquema de dois tanques em série

A Figura C.1 representa esquematicamente dois tanques dispostos em série. Sendo Q o caudal que flui no circuito, V o volume de cada tanque e C_i , C_{in} e C_o as concentrações de um fluido à entrada do primeiro tanque, entre os dois tanques e à saída do segundo tanque, respectivamente, as equações (C.1) e (C.2) descrevem o princípio de conservação da massa em cada tanque:

$$QC_i = QC_{in} + V \frac{dC_{in}}{dt} \quad (C.1)$$

e

$$QC_{in} = QC_o + V \frac{dC_o}{dt} \quad (C.2)$$

Substituindo a equação (C.2) na equação (C.1), obtém-se:

$$C_i = C_o + 2\tau \frac{dC_o}{dt} + \tau^2 \frac{d^2C_o}{dt^2} \quad (C.3)$$

em que $\tau = V/Q$, é o tempo de passagem em cada tanque.

A equação (C.3) relaciona a concentração do fluido à entrada do primeiro tanque com a concentração do fluido à saída do segundo tanque, o volume de cada tanque e o caudal que flui ao longo do circuito. Conhecendo o volume de cada tanque, as concentrações de entrada do primeiro tanque e de saída do segundo tanque, em função do tempo, é possível estimar o caudal que flui ao longo do circuito através da resolução da equação (C.3).

Apêndice D – Modelo Convencional Para a Conversão Num Reactor Tubular Com Dispersão Axial

A equação de continuidade para um componente A num reactor tubular (Figura D.1) com dispersão axial é²:

$$u_s \frac{dc_A}{dz} + \rho_B r_A = \varepsilon D_{ea} \frac{d^2 c_A}{dz^2} \quad (D.1)$$

em que, u_s é a velocidade superficial, c_A é a concentração do componente A, z é a distância medida a partir da entrada do reactor, ρ_B é a densidade do catalizador no reactor, r_A é a velocidade da reacção, ε é a porosidade e D_{ea} é o coeficiente de dispersão axial.

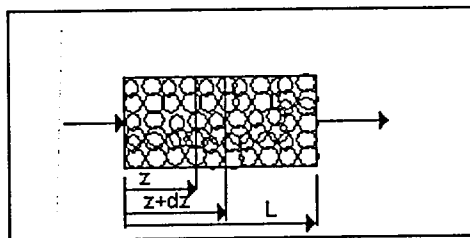


Figura D.1: Modelo do reactor tubular com dispersão axial.

A equação de balanço energético pode ser descrita da seguinte forma:

$$\lambda_{ea} \frac{d^2 T}{dz^2} - \rho_g u_s C_p \frac{dT}{dz} + (-\Delta H) r_A \rho_B - \frac{2U}{R_o} (T - T_w) = 0 \quad (D.2)$$

sendo λ_{ea} a condutividade térmica efectiva do leito na direcção axial, ρ_g a densidade do fluido, $(-\Delta H)$ o calor de reacção, U o coeficiente global de transferência de calor, R_o o raio do tubo e T_w a temperatura ambiente.

As condições fronteira, em geral mais utilizadas são:

$$\begin{cases} u_s c_A(0^-) = u_s c_A(0^+) - \varepsilon D_{ea} \frac{dc_A}{dz} \\ u_s \rho_g C_p T(0^-) = u_s \rho_g C_p T(0^+) - \lambda_{ea} \frac{dT}{dz} \end{cases} \Leftarrow z = 0 \quad (D.3)$$

² Froment, G. F. e Bischoff, K. B., "Chemical Reactor Analysis and Design", 2ª edição, John Wiley & Sons, New York, 1990.

$$\left\{ \frac{dc_A}{dz} = \frac{dT}{dz} = 0 \rightleftharpoons z = L \quad (D.4)$$

sendo T a temperatura e L o comprimento do reactor.

O modelo vai ser desenvolvido para o caso de uma reacção de primeira ordem, $r_A = kC_A$, em que k é a constante de velocidade da reacção.

Introduzindo as seguintes variáveis transformadas, $x = z/L$ e $\theta = T/T_o$ e $f = C_A/C_{A0}$, sendo T_o a temperatura à entrada do reactor e C_{A0} a concentração do componente **A** à entrada do reactor, e os grupos adimensionais seguintes:

Número de Damköhler:

$$Da = \frac{L}{u_s} \rho_B k(T_o) \quad (D.5)$$

Número de Peclet mássico:

$$Pe = \frac{u_s L}{\varepsilon D_{ea}} \quad (D.6)$$

Número de Peclet térmico:

$$Peh = \frac{UL}{\frac{\varepsilon \lambda_{ea}}{\rho_g Cp T_o}} \quad (D.7)$$

Elevação adiabática de temperatura:

$$\beta = \frac{(-\Delta H) C_{A0}}{\rho_g Cp T_o} \quad (D.8)$$

Número de Biot térmico:

$$Bih, w = \frac{2U}{R_o} \frac{L}{\rho_g u_s Cp} \quad (D.9)$$

Número de Arrhenius:

$$\gamma_o = \frac{E}{RT_o} \quad (D.10)$$

em que E é a energia de activação da reacção e R a constante dos gases ideais, as equações (D.1) e (D.2) transformam-se em:

$$\frac{df}{dx} = Dae^{-\gamma\left(\frac{1}{\theta}-1\right)} f = \frac{1}{Pe} \frac{d^2 f}{dx^2} \quad (D.11)$$

e

$$\frac{d\theta}{dx} - \beta Dae^{-\gamma\left(\frac{1}{\theta}-1\right)} + Bi_{h,w}(\theta - \theta_w) = \frac{1}{Peh} \frac{d^2 \theta}{dx^2} \quad (D.12)$$

onde $\theta_w = T_w/T$.

Da mesma forma, as condições fronteira podem ser reescritas na forma:

$$\begin{cases} 1 - f = -\frac{1}{Pe} \frac{df}{dx} \\ 1 - \theta = -\frac{1}{Peh} \frac{d\theta}{dx} \end{cases} \Leftarrow x = 0 \quad (D.13)$$

e

$$\frac{df}{dx} = \frac{d\theta}{dx} = 0 \Leftarrow x = 1 \quad (D.14)$$

No caso de regime isotérmico, a equação que traduz a evolução da concentração do componente **A**, como uma função do comprimento adimensional e dos grupos adimensionais é:

$$\frac{df}{dx} + Daf = \frac{1}{Pe} \frac{d^2 f}{dx^2} \quad (D.15)$$

e as condições fronteira são:

$$1 - f = -\frac{1}{Pe} \frac{df}{dx} \Leftarrow x = 0 \quad (D.16)$$

e

$$\frac{df}{dx} = 0 \Leftarrow x = 1 \quad (D.17)$$

A equação (D.15) relaciona a conversão no reactor com o comprimento adimensional e os respectivos grupos adimensionais Pe e Da , uma vez que:

$$X_A = 1 - f \tag{D.18}$$

Apêndice E – Modelo da Conversão Num Reactor de Polimerização Por Partidas.

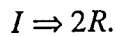
Os fenómenos de polimerização são em geral descritos por modelos baseados em radical livre. O iniciador da reacção e a sua concentração são variáveis determinantes para a progressão da reacção, mediante controlo eficaz da temperatura.

Adoptando o mecanismo de radical livre na descrição do processo de polimerização³, temos:

$$\frac{d[I]}{dt} = k_d [I] \quad (E.1)$$

Esta reacção processa-se por uma série de passos:

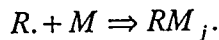
Passo 1: Iniciação



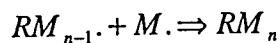
$$(r_i) = 2 f_e k_d [I] \quad (E.2)$$

sendo f_e o factor de eficiência do iniciador, k_d a constante da velocidade de dissociação do iniciador e (r_i) a velocidade de geração de novos radicais.

Passo 2: Propagação



... ..

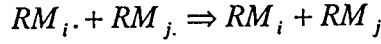
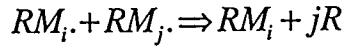


$$r_{Pr} = k_{Pr} [M] \sum_{j=1}^{\infty} [RM_j] \quad (E.3)$$

em que k_{Pr} representa a constante da velocidade da reacção de propagação (polimerização) e r_{Pr} a velocidade da reacção de propagação (polimerização).

³ Rase, H. F., "Chemical Reactor Design for Process Plants – Case Studies and Design Data", 2ª Vol., John Wiley & Sons, New York, 1977.

Passo 3: Terminação



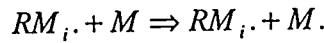
$$r_t = 2k_t \left(\sum_{j=1}^{\infty} [RM_{j\cdot}] \right) \left(\sum_{i=1}^{\infty} [RM_{i\cdot}] \right) = 2k_t \left(\sum_{j=1}^{\infty} [RM_{j\cdot}] \right)^2 \quad (E.4)$$

sendo k_t a constante da velocidade da reacção de terminação e r_t a velocidade da reacção de terminação.

Por uma questão de simplicidade esta equação pode ser reescrita sob a forma:

$$r_t = 2k_t [R\cdot]^2 \quad (E.5)$$

Na generalidade, além dos passos referidos, mais um passo deve ser considerado, designado por passo de transferência:



A concentração total das partículas em crescimento pode ser deduzida a partir de observações de estado-estacionário, admitindo a inexistência de variação da concentração de radicais livres ao longo do tempo. Deste modo, pode dizer-se que a velocidade da reacção de iniciação é igual à velocidade de desaparecimento dos radicais, obtendo-se então:

$$(r_i) = 2k_t [R\cdot]^2 \quad (E.6)$$

e

$$[R\cdot] = \left(\frac{(r_i)}{2k_t} \right)^{1/2} = \left(\frac{f_i k_d [I]}{k_t} \right)^{1/2} \quad (E.7)$$

Substituindo as equações (E.7) e (E.6) na equação (E.3) temos:

$$r_{Pr} = \frac{d[M]}{dt} = k_{Pr} \left(\frac{f_e k_d}{k_i} \right)^{1/2} [I]^{1/2} \quad (E.8)$$

No processo de polimerização em suspensão, o monómero é dispersado sob a forma de gotículas na água. A polimerização ocorre quando as gotículas se transformam numa espécie de gel, constituindo duas porções, uma rica em polímero e outra rica em monómero.

O polímero é praticamente insolúvel no monómero mas o monómero é solúvel no polímero. A polimerização ocorre nas duas fases. Uma vez consumida a fase de monómero, a polimerização continua na fase rica em polímero até que todo o monómero desaparece ou se termine a reacção. No modelo que se descreve, estes dois períodos são definidos analiticamente em termos de conversão do monómero (X), como uma função da fracção mássica do polímero na fase rica em polímero (w_2).

Este modelo permite estimar o tempo e a temperatura requerida para se atingir um peso moléculas médio desejado do polímero, e a conversão, utilizando um dado iniciador com uma determinada concentração inicial.

Durante o primeiro período, quando $X < w_2$, as concentrações de monómero são constantes em ambas as fases; (ρ_M/M_M) na fase do monómero e $(1-w_2)^* \rho_2/M_M$ na fase rica em polímero; em que ρ_M é a densidade do monómero na fase rica em monómero e ρ_2 é a densidade do monómero na fase rica no polímero, M_M é o peso moléculas do monómero. Admite-se que o iniciador se encontra na mesma concentração em ambas as fases, sendo possível usar a equação (E.2) para obter o valor da sua concentração em função do tempo. As equações das velocidades da reacção em ambas as fases podem ser desenvolvidas a partir da equação (E.8), com a constante de velocidade para a fase rica em polímero $k_2 = p k_1$, sendo k_1 a constante de velocidade da reacção para a fase rica em monómero e p uma constante empírica maior do que 1. Admitindo como verdadeiras as hipóteses apresentadas podemos obter a seguinte equação para a conversão de monómero:

$$\frac{dX}{dt} = k_1 (w_{i0})^{1/2} \frac{1 + Q_0 X}{(1 - BX)^{1/2}} \text{Exp} \left(-\frac{k_d t}{2} \right) \quad (E.9)$$

onde $Q_0 = [p(1-w_2)-1]/w_2$, $B = (\rho_{Pr} - \rho_M)/\rho_{Pr}$, w_{i0} é a fracção do iniciador na fase rica em polímero, k_d é a constante da velocidade de decomposição para o iniciador e $k_1 = k_{Pr} (f_e k_d / k_i)^{1/2} (\rho_M / M_i)^{1/2}$, sendo M_i o peso moléculas do iniciador, ρ_{Pr} a densidade do polímero.

Com as condições iniciais, $X=0$ para $t=0$, a solução da equação (E.9) é:

$$t = -\frac{2}{k_d} \ln(1-H) \quad (E.10)$$

em que:

$$H = \frac{k_d}{2k_1(w_1)^{1/2}} \left[\frac{2}{Q_o} (\sqrt{1-BX} - 1) + \frac{\sqrt{Q_o+B}}{Q_o\sqrt{Q_o}} + \ln \left\{ \frac{\frac{\sqrt{Q_o(1-BX)} - \sqrt{Q_o+B}}{\sqrt{Q_o} - \sqrt{Q_o+B}}}{\frac{\sqrt{Q_o(1-BX)} + \sqrt{Q_o+B}}{\sqrt{Q_o} + \sqrt{Q_o+B}}} \right\} \right]$$

Quando $X > w_2$ (usualmente para $X \approx 70-80\%$), a fase de monómero desaparece, as velocidades de reacção diminuem devido ao aumento da resistência difusional no processo de transferência de massa. Este fenómeno pode ser descrito através de k aparente como uma função do monómero não reagido, $1-X$, através da equação seguinte:

$$k = pk_1 \frac{1-X}{1-w_2} \quad (E.11)$$

A velocidade de desaparecimento do monómero pode ser deduzida de forma semelhante à descrita no desenvolvimento da equação (E.9), obtendo-se:

$$\frac{dX}{dt} = \frac{pk_1}{1-w_2} (w_{1o}) \frac{(1-X)^2}{(1-BX)^{1/2}} \exp\left(-\frac{k_d t}{2}\right) \quad (E.12)$$

com $X > w_2$.

O parâmetro Q_o é seleccionado com um parâmetro ajustável forçando a equação (E.10) a ajustar valores experimentais usualmente disponíveis, seguindo-se o cálculo do parâmetro p , obtido a partir de Q_o .

Da integração da equação (E.12) resulta:

$$t = -\frac{2}{k_d} \ln(1-H') + t_2 \quad (E.13)$$

sendo t_2 , o tempo para $X=w_2$.

$$H' = \frac{(1-w_2)k_d}{2pk_1(w_{io})^{1/2}} \left[\frac{\sqrt{1-BX}}{1-x} - \frac{\sqrt{1-Bw_2}}{1-w_2} + \frac{B}{2\sqrt{1-B}} \ln \left\{ \frac{\sqrt{1-X} - \sqrt{1-B}}{\sqrt{1-w_2} - \sqrt{1-B}} \cdot \frac{\sqrt{1-X} + \sqrt{1-B}}{\sqrt{1-w_2} + \sqrt{1-B}} \right\} \right]$$

Na tabela seguinte apresentam-se vários valores dos parâmetros w_2 e Q_o , obtidos experimentalmente para a reacção de polimerização do cloreto de vinilo.

Tabela E.1: Valores dos parâmetros experimentais

Temperatura (°C)	w_2	Q_o
30	0,88	4,4
50	0,77	5,0
65	...	6,1
70	0,72	5,4

As equações empíricas baseadas nestes dados são:

$$Q_o = 2,4176 + 0,07769T - 0,0004371T^2 \quad (E.14)$$

$$w_2 = 0,8075 + 0,0005T - 0,000025T^2 \quad (E.15)$$

com T em °C.

A constante de velocidade k_1 , é:

$$(k_1)_A = 3,54 * 10^{11} e^{\left(\frac{8505}{T(K)}\right)} \quad (E.16)$$

em que as unidades de k_1 são $h^{-1}(\text{frac. molar})^{-1}$.

Esta velocidade é baseada no iniciador **AIBN**, designado pelo subscrito **A**, em que:

$$k_d = 3,79 * 10^{18} e^{\left(\frac{15460}{T(K)}\right)} \quad (E.17)$$

em k_d vem expresso em h^{-1} .

Para qualquer iniciador, k_1 pode ser obtido seguindo a relação seguinte:

$$k_1 = k_d^{1/2} \left(\frac{k_1}{k_d^{1/2}} \right)_A \quad (E.18)$$

Apêndice F - Resultados de Simulações Efectuadas Para as Duas Configurações de Transferência de Calor de Reactores Descontínuos.

Na Figura F.1 representa-se a evolução da temperatura da reacção após uma variação súbita de 500 Mcal/h no calor de reacção. Na configuração A verifica-se que existe uma aproximação mais rápida do valor de referência (12 minutos) em relação à configuração B (45 minutos). No entanto, nesta configuração a amplitude de oscilação reduz-se a 0,1°C após 12 minutos.

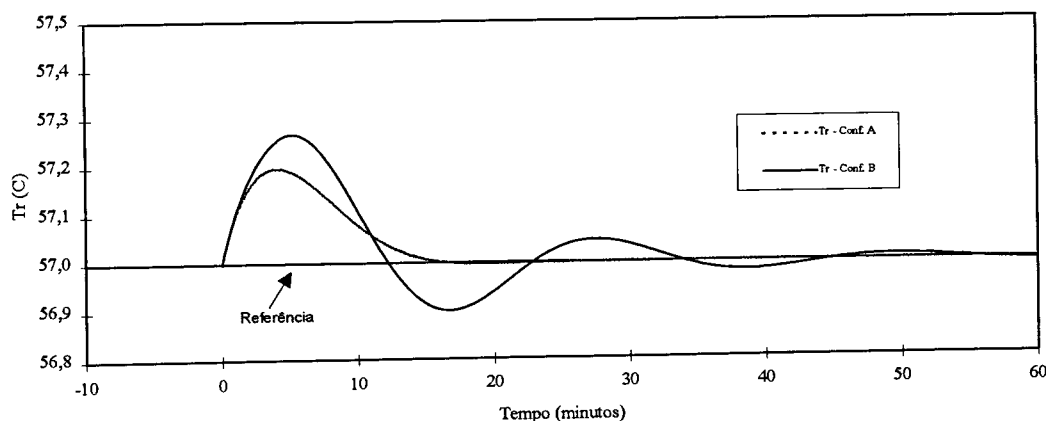


Figura F.1: Evolução da temperatura da reacção após uma variação em degrau de +500 Mcal/h no calor de reacção.

Para compensar o aumento da temperatura da reacção, devido ao aumento do calor de reacção, existe um aumento imediato do caudal de água refrigerada, na configuração A, enquanto que, na configuração B este aumento da temperatura é inicialmente compensado pelo aumento do caudal de água no permutador de calor, e só quando este atinge o valor máximo de caudal (após 5 minutos) é que há a injeção de água refrigerada (Figura F.2).

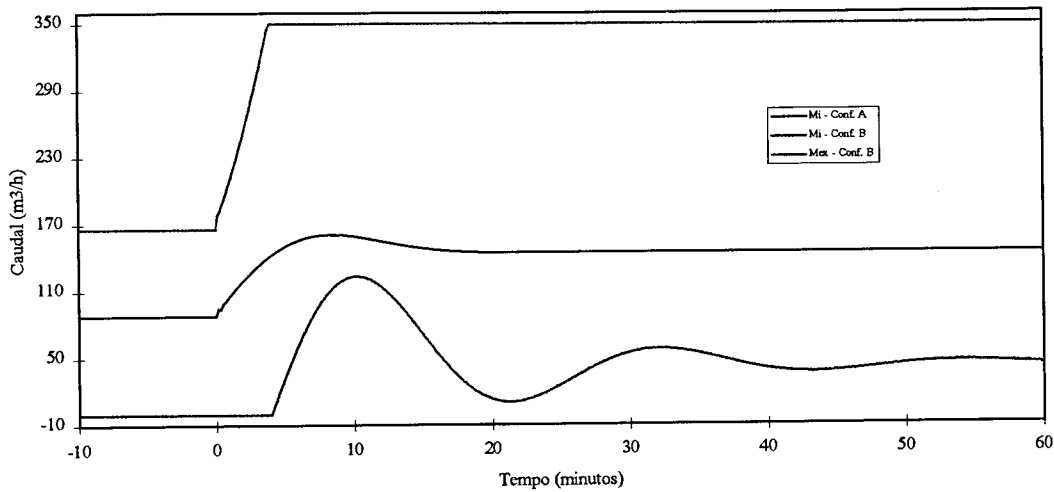


Figura F.2: Evolução do caudal de injeção de água refrigerada e do caudal de água que circula no permutador de calor.

As Figuras F.3 e F.4 mostram os resultados das simulações para os dois sistemas quando a temperatura de referência da reacção sofre uma diminuição súbita de 1°C. Através da análise da Figura F.3 verifica-se que não existe diferença significativa entre o comportamento dos dois sistemas, sendo claro, no entanto, que o tempo necessário para atingir a nova temperatura de referência é maior para a configuração B, quando comparada com o tempo de resposta da configuração A.

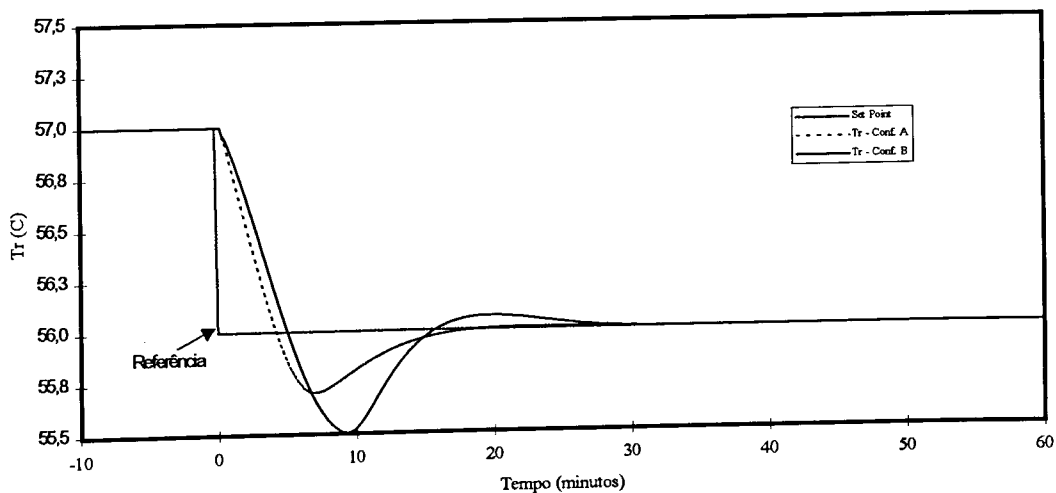


Figura F.3: Evolução da temperatura da reacção após um decréscimo de 1°C na temperatura de referência.

Mais uma vez na configuração B, durante a fase inicial da perturbação, a resposta do sistema, em termos de transferência de calor é efectuada pela acção combinada do permutador de calor e da água refrigerada (Figura F.4).

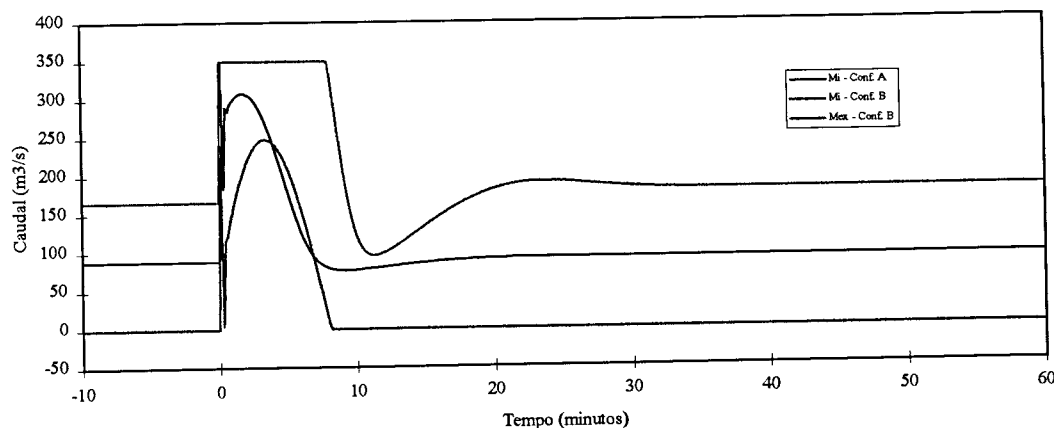


Figura F.4: Caudal de injeção de água refrigerada e circulante no permutador de calor.

Quando se analisa todo o circuito de arrefecimento, prevê-se que em condições de reacções exotérmicas conduzidas a temperaturas superiores à temperatura ambiente se possam atingir reduções significativas na quantidade de água refrigerada injectada no circuito de arrefecimento, através do sistema representado pela configuração B. Na Figura F.5 apresenta-se os resultados de simulação do exemplo de estudo. Verifica-se a existência de uma redução de 90% no consumo de água refrigerada injectada no circuito de arrefecimento, quando a temperatura ambiente está abaixo de 18°C e, cerca de 74% para condições de temperatura ambiente inferior a 22°C. Quanto menor for a temperatura ambiente, maior é a quantidade de calor transferida no permutador de calor e menor é a quantidade de água refrigerada necessária à condução da reacção à temperatura desejada.

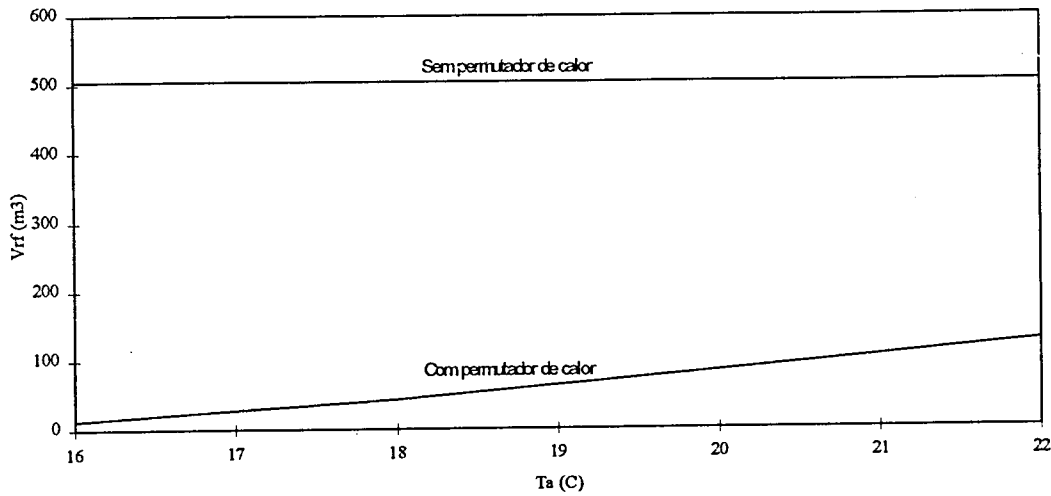


Figura F.5: Consumo de água de refrigeração durante a fase de arrefecimento num ciclo de reacção

A Figura F.6 mostra o efeito do aumento da área do permutador de calor na diminuição da quantidade de água injectada, ao longo de todo o ciclo de arrefecimento, para vários valores de temperatura ambiente. A partir de determinado valor da área do permutador de calor (cerca de 300 m^2), um aumento de área do permutador de calor não implica uma diminuição da quantidade de água refrigerada injectada no circuito de arrefecimento. Estas simulações podem desta forma ser usadas no dimensionamento do permutador de calor e no projecto do circuito de arrefecimento do reactor.

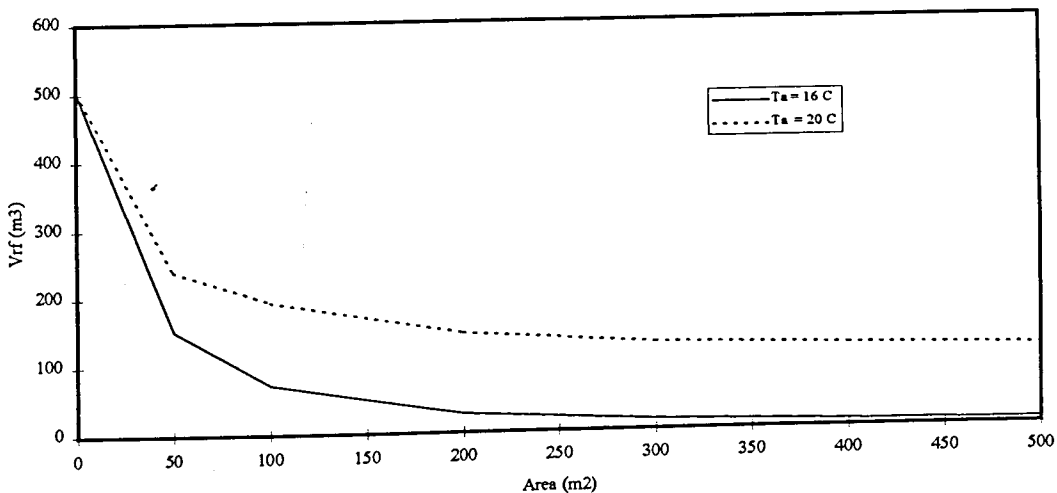


Figura F.6: Dependência entre a quantidade de água refrigerada consumida e área do permutador de calor.

Nomenclatura

a	Valor real positivo
a_j	Saída do neurónio j
a_h	Saída do neurónio h (camada intermédia)
A_r	Área do reactor, m^2
B	Constante do modelo para o estudo da conversão num reactor de polimerização
$B_{ih,w}$	Número de Biot térmico
b_j	Entrada externa constante para os neurónios da camada intermédia e de saída
C	Centróide
C_A	Concentração do componente A , kg/m^3
C_{Ao}	Concentração do componente A à entrada do reactor, kg/m^3
CC	Controlo em cascata convencional
C_{conv}	Critério de convergência
C_i	Concentração de entrada no primeiro tanque, kg/m^3
C_{ij}	Centro de transferência do neurónio j para a entrada correspondente ao neurónio i
C_o	Concentração à saída do segundo tanque, kg/m^3
Conf. A	Configuração A
Conf. B	Configuração B
C_p	Capacidade calorífica, $J/(kgK)$
C_{pj}	Capacidade calorífica da água, $J/(kgK)$
CRNA	Controlo por redes neuronais artificiais
D_a	Número de Damköhler
D_{ea}	Coeficiente de dispersão axial
d_j	Saída desejada da unidade j na camada de saída
E	Erro da rede neuronal artificial, Energia de activação
E_p	Erro da rede neuronal artificial para o exemplo de treino p
$E(P_i)$	Valor da função objectivo para o ponto P_i
E_t	Erro relativo de integração
$e(t)$	Erro do controlador
f	Concentração adimensional
f_e	Factor de eficiência
F_{max}	Valor máximo da função objectivo numa dada iteração
F_{min}	Valor mínimo da função objectivo numa dada iteração

H, H'	Parâmetros do modelo da conversão no reactor de polimerização
H_{ex}	Calor transferido no permutador de calor, j/s
H_r	Calor de reacção, j/s
H_t	Calor transferido, j/s
I	Iniciador
i_j	Saída do neurónio i interligado com o neurónio j
ITAE	Integral absoluto do erro pesado no tempo
k	Constante da velocidade da reacção
K_c	Ganho do controlador
k_d	Constante da velocidade da reacção de dissociação do iniciador
k_{Pr}	Constante da velocidade da reacção de propagação
kt	Parâmetro de controlo
k_t	Constante da velocidade da reacção de terminação
k_1	Constante da velocidade da reacção para a fase rica em monómero
k_2	Constante da velocidade da reacção para a fase rica em polímero
L	Comprimento do reactor tubular, m
m	Massa da mistura reaccional, kg
M_a	Caudal de água de arrefecimento no permutador de calor, m ³ /s
M_{bp}	Caudal de água que circula do circuito externo ao permutador de calor, m ³ /s
M_{ex}	Caudal de água da camisa que atravessa o permutador de calor, m ³ /s
M_i	Caudal de água refrigerada injectada, m ³ /s
M'_{ilt}	Valor do caudal de água de refrigeração previsto pela rede neuronal artificial, m ³ /s
M_j	Caudal de água que circula na camisa do reactor, m ³ /s
M_n	Peso molecular do monómero
M_v	Caudal de vapor, m ³ /s
n	Número de parâmetros
n_i	Número de neurónios na camada de entrada
n_h	Número de neurónios na camada intermédia
n_o	Número de neurónios na camada de saída
n_p	Número de parâmetros de uma RNA de 3 camadas
O_j	Saída do neurónio j na camada de saída
$p(t)$	Saída do controlador
p_b	Valor inicial ou de estado estacionário

Pe	Número de Peclet mássico
Peh	Número de Peclet térmico
P(1), P(2), P(3)	Vértices do simplex
P _h , P _r , P _s , P' _r	Vértices do simplex
R	Constante dos gases ideais
R.	Radical livre
RM _j .	Radical intermédio
R _o	Raio do tubo, m
RNA	Rede neuronal artificial
r _A	Velocidade da reacção
(r _i)	Velocidade da reacção de dissociação do iniciador
r _{Pr}	Velocidade da reacção de propagação da polimerização
RNA	Rede neuronal artificial
r _t	Velocidade da reacção de terminação da polimerização
R _o	Raio das partículas de catalizador, m
s _j	Extensão da função de transferência no neurónio j
Q	Caudal, m ³ /s
Q _o	Parâmetro do modelo da conversão num reactor de polimerização
t, t ₁ , t ₂	Tempo, s
T	Temperatura, K
T _a	Temperatura de entrada da água de arrefecimento no permutador de calor, K
T _{ao}	Temperatura de saída da água de arrefecimento no permutador de calor, K
T _c	Temperatura da água refrigerada, K
TC	Controlador de temperatura
T _{ho}	Temperatura de saída da água no permutador de calor, K
T _j	Temperatura média da água na camisa, K
T _{ji}	Temperatura da água à entrada da camisa, K
T _{jo}	Temperatura da água à saída da camisa, K
T _{jo} (0)	Estimativa de T _{jo} para t=t ₁ +Δt _s
T _p	Temperatura da água no ponto 1 (Figura 4.2), K
T _r	Temperatura da reacção, K
T _r (0)	Temperatura da reacção para t=t ₁ , K
Traj.	Controlo com alteração de trajectórias a incorporar no controlador

T_{rsp}	Temperatura de referência da reacção a incorporar nos controladores, K
$T_{rlt+\Delta t}$	Valor previsto da temperatura da reacção, K
T_{sp}	Temperatura de referência da reacção, K
T_v	Temperatura do vapor, K
T_w	Temperatura ambiente, K
T_0	Temperatura à entrada do reactor tubular, K
TT	Transmissor de temperatura
U	Coefficiente global de transferência de calor, $j/(m^2sK)$
$(UA)_{ex}$	Produto do coeficiente global de transferência de calor e da área do permutador de calor, j/K
$(UA)_r$	Produto do coeficiente global de transferência de calor e da área do reactor, j/k
u_s	Velocidade superficial, m/s
V	Volume da cada tanque, m^3
V_{rf}	Volume de água refrigerada consumida, m^3
x	Comprimento adimensional do reactor
X	Conversão de monómero
X_A	Conversão do reactor tubular
x_{ij}	entrada do neurónio i do neurónio j
V_{rf}	Volume de água de refrigeração consumida, m^3
W_{lo}, W_i	Fracção mássica de iniciador no início da reacção
w_{ij}	Peso da ligação entre o neurónio i e j
w_{n+1j}	Peso de ligação entre as entradas externas constantes e o neurónio j
w_2	Fracção mássica de polímero na fase rica em polímero
z	Comprimento, m

Símbolos gregos

α	Constante da função de transferência sigmóide.
β	Elevação adiabática de temperatura
γ	Momento de aprendizagem do algoritmo de retro-propagação de erros
γ_0	Número de Arrhenius
ε	Porosidade
δ	Delta
λ_{ea}	Condutividade térmica efectiva
θ	Temperatura adimensional

θ_j	Entrada externa para o neurónio j
ρ_B	Densidade do catalizador no reactor
ρ_g	Densidade do gás
ρ_i	Densidade da água, kg/m^3
ρ_M	Densidade do monómero, kg/m^3
ρ_2	Densidade do monómero na fase rica em polímero, kg/m^3
τ	Tempo de residência, s
τ_d	Constante de tempo derivativa, s
τ_i	Constante de tempo integral, s
$-\Delta H$	Calor de reacção, J/s
Δt	Intervalo de tempo ao fim do qual se procede à alteração da acção de controlo, s
Δt_s	Passo de integração, s

