

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ CENTRO DE
ENGENHARIAS E CIÊNCIAS EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
“STRICTO SENSU” EM ENGENHARIA QUÍMICA – NÍVEL DE MESTRADO

MODELAGEM DA QUEIMA DO CARBONO NA CALDEIRA DE RECUPERAÇÃO
2 DA KLABIN MONTE ALEGRE POR REDE NEURAL ARTIFICIAL

LUCIANA BENNEMANN POTRICH

TOLEDO – PR – BRASIL

2014

UNIVERSIDADE ESTADUAL DO OESTE DO PARANÁ CENTRO DE
ENGENHARIAS E CIÊNCIAS EXATAS PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO
“STRICTO SENSU” EM ENGENHARIA QUÍMICA – NÍVEL DE MESTRADO

MODELAGEM DA QUEIMA DO CARBONO NA CALDEIRA DE RECUPERAÇÃO
2 DA KLABIN MONTE ALEGRE POR REDE NEURAL ARTIFICIAL

Dissertação de mestrado
apresentada ao Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Química
em cumprimento parcial aos
requisitos para obtenção do título de
Mestre em Engenharia Química.

TOLEDO – PR – BRASIL

2014

“A persistência é o menor caminho do êxito”. (Charles Chaplin)

AGREDECIMENTOS

Ao Professor e Orientador, Fernando Palu, pela orientação e conselhos na construção deste trabalho e amizade.

A Rodrigo Barella pelo apoio, sugestões, conselhos e exemplo

A Klabin Papéis Monte Alegre.

E,

A minha mãe Marta pelo apoio, amor e por ter me dado condições para chegar até aqui.

A meu namorado, Gilmar, pela dedicação, carinho e amor.

A meus amigos pelos momentos de distração.

A minha família, por serem meu suporte.

À Deus.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	iii
LISTA DE TABELAS	iv
NOMENCLATURA	v
RESUMO.....	vi
ABSTRACT	viii
1 INTRODUÇÃO.....	1
1.1 Objetivos	2
1.2 Organização da dissertação.....	2
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	4
2.1 Processo de produção da polpa celulósica	4
2.1.1 Polpação química - Kraft	5
2.1.2 Tipos de licores – processo Kraft.....	6
2.1.3 Sistema de recuperação de reagentes químicos.....	7
2.2 Caldeira de recuperação	9
2.2.1 Pirólise	12
2.2.2 Queima dos voláteis	12
2.2.3 Queima do leito.....	13
2.2.4 Oxidação inorgânica	13
2.2.5 Redução do sulfato de sódio	14
2.2.6 Formação de cinzas	15
2.3 Licor Verde.....	16
2.4 Redes Neurais Artificiais	17
2.4.1 Modelagem Matemática	17
2.4.2 Redes Neurais	18
2.4.3 Estrutura de uma rede	19
2.4.4 Treinamento de uma rede neural.....	22
2.4.5 Aplicações de redes neurais na área de celulose e papel.....	23
2.5 Considerações finais	25
3 METODOLOGIA	26
3.1 A Caldeira de Recuperação Química em Estudo	26
3.2 Rede Neural	29
3.2.1 Identificação das variáveis de entrada e saída	29

3.2.2	Coleta de dados históricos do processo	30
3.2.3	Pré-processamento dos dados.....	30
3.2.4	Formulação do modelo baseado em redes neurais.....	30
3.2.5	Análise de sensibilidade	31
3.2.6	Análise do modelo	32
3.2.7	Validação do modelo	33
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	34
4.1	Modelagem matemática por redes neurais do percentual de carbono no licor verde	34
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	44
6	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	45
	ANEXO I.....	50
	ANEXO II.....	51

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1. Fluxograma do processo Kraft (PIOTTO,2003).....	6
Figura 2.2. Representação esquemática do processo de recuperação (EK et al, 2009)	8
Figura 2.3. Caldeira de recuperação (EMPIE, 2009).....	10
Figura 2.8. Modelo de neurônio proposto por McCulloch e Pitts (HU & HWANG, 2002)	20
Figura 2.9. Fluxograma do treinamento <i>backpropagation</i>	23
Figura 3.1. Caldeira de recuperação 2 - Klabin Monte Alegre.....	26
Figura 3.2. Esquemas da injeção de licor	27
Figura 3.3. Esquema caldeira recuperação 2 Klabin.....	28
Figura 3.4. Esquema de uma bica de fundidos - <i>smelt</i> (MARTINELLI, 2008)	29
Figura 3.5. Condição de parada - método validação cruzada	31
Figura 4.1. Curva de acompanhamento do treinamento e teste do modelo.....	37
Figura 4.2. Valores preditos versus reais do modelo RNA - treinamento.....	38
Figura 4.3. Valores preditos versus reais do modelo RNA – teste	39
Figura 4.4. Ilustração curvas sensibilidade das variáveis de entrada do modelo do percentual de carbono no licor verde	40
Figura 4.5. Valores sobrepostos reais e preditos pelo modelo.....	42

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1. Classificação dos processos de polpação com base no rendimento em polpa (adaptado de IPT, 1988).....	4
Tabela 2.2. Concentrações aproximadas dos componentes do licor verde. (EK et al, 2009)	16
Tabela 2.3. Funções de ativação (HU & HWANG, 2002)	21
Tabela 4.1. Apresentação do percentual de respostas de cada variável apresentada no questionário de opinião [(1) não influencia; (2) influência baixa; (3) influência moderada; (4) influência substancial; (5) influência forte] e variáveis escolhidas para o modelo.....	35
Tabela 4.2. Distribuição dos dados utilizados para formação da rede neural artificial	36
Tabela 4.3. Parâmetros do treinamento do modelo de predição do percentual de carbono no licor verde	37
Tabela 4.4. Classificação das variáveis de entrada do modelo do percentual de carbono no licor verde em função do ganho médio absoluto	41

NOMENCLATURA

a	Saída (output)
f	Função de ativação
i	Índice referente a diferentes neurônios da rede
j	Índice referente a diferentes neurônios da rede
m	Parâmetro ajustado
u	Saída (output) da rede neural
w	Pesos da sinapse
y	Entrada (input) da rede neural

Letras gregas

θ	Bias associados aos neurônios
σ	Variância
α	Parâmetro ajustado

MODELAGEM DA QUEIMA DO CARBONO NA CALDEIRA DE RECUPERAÇÃO 2 DA KLABIN MONTE ALEGRE POR REDE NEURAL ARTIFICIAL

AUTOR: LUCIANA BENNEMANN POTRICH

ORIENTADOR: PROF. DR. FERNANDO PALU

Dissertação de Mestrado; Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química; Universidade Estadual do Oeste do Paraná; Rua da Faculdade, 645; CEP: 85903-000 - Toledo - PR, Brasil.

RESUMO

O setor de papel e celulose no Brasil vem crescendo substancialmente, e tem alcançado posição de destaque na economia mundial. Embora o país ganhe importância nesse setor, também enfrenta desafios na otimização de processos e consequente redução dos impactos ambientais. A busca por soluções de problemas e melhorias é um desafio constante. Para isso, uma ferramenta muito utilizada é a modelagem matemática computacional do processo. A modelagem por redes neurais artificiais vem sendo objeto de crescentes pesquisas e servindo como valiosa ferramenta para diversas aplicações, incluindo estudos de processos produtivos como celulose e papel. O presente trabalho tem por objetivo criar um modelo matemático por redes neurais artificiais capaz de descrever o processo de queima de licor negro, um sub produto da produção de celulose, para geração de energia e recuperação de produtos químicos. A construção das redes foi feita utilizando ferramenta Property Predictor da Pavilion Technology. A escolha das variáveis de entrada foi baseada no conhecimento da operação, por meio de um questionário de opinião. A criação do modelo em redes neurais artificiais passou pelas etapas de pré processamento de dados, treinamento,

análise de sensibilidade e validação. A rede foi formulada com 21 entradas e os neurônios na camada oculta foram calculados automaticamente pelo software. O treinamento utilizado foi o backpropagation. O modelo proposto não apresentou um resultado significativo. A pequena quantidade de dados e a qualidade dos mesmos fizeram com que houvesse uma memorização excessiva da rede, na qual a rede só é capaz de representar bem o conjunto de dados utilizados no treinamento, não generalizando. Para que o modelo apresente um resultado significativo um maior período de coleta de dados é necessário. Com o aperfeiçoamento do modelo, é possível aplicar a técnica de sensor virtual, gerando informação mais rápida à área operacional, contribuindo nas decisões na mudança de parâmetros de processo.

Palavras-chave: Recuperação, redes neurais, modelagem.

MODELING OF CARBON BURNING ON KLABIN MONTE ALEGRE'S RECOVERY BOILER BY ARTIFICIAL NEURAL NETWORK

AUTHOR: LUCIANA BENNEMANN POTRICH

SUPERVISOR: PROF. DR. FERNANDO PALU

Master Thesis; Chemical Engineering Graduate Program; Western Paraná State University; Rua da Faculdade, 645; CEP: 85903-000 - Toledo - PR, Brazil.

ABSTRACT

The Brazilian paper and wood pulp sector have been growing in a substantial way, reaching a prominent position in the global economy. Though our country is a spotlight in this sector, it also faces challenges on the process optimization and the reduction of environmental damage. The quest for problem solutions and improvement is a continuous challenge. For doing that, process simulation is a widely used tool. The simulation using artificial neural networks have been object of growing researches and becoming a useful tool for several applications, including Paper and pulp processes. The purpose of this paper is to create a mathematical model through an artificial neural network able to describe the black liquor burning process, a pulp process subproduct, used for energy production and chemical recovery. The neural network building was made by using the Property Predictor software by Pavilion Technology. The entrance variables selection was based on the operation knowledge, by an opinion questionnaire. The model created by neural network used pre-processing data, training, sensitivity analysis and validation. The artificial neural network was formulated with 21 inputs and the neurons in the hidden layer were calculated automatically by the software. The training was used backpropagation. The proposed model didn't present a meaningful result. The small data quantity, and poor data quality have resulted on the overfitting of the net, which only allows to

represent the training data, resulting in a poor predictive performance. For better results, more data is required. With the model improvement it is possible to use the virtual sensor technique, which will allow quick information to the operational area, contributing on process parameters changing decisions.

Keywords: recovery, neural network, modeling.

1 INTRODUÇÃO

O setor de papel e celulose no Brasil vem crescendo substancialmente, e tem alcançado posição de destaque na economia nacional. Os fatores responsáveis por este crescente avanço do setor são os menores custos de produção e também uma maior produtividade de madeira por hectare, derivado de pesquisas de melhoramento genético.

Segundo dados da Bracelpa (2014), o setor de celulose possui 220 empresas, localizadas em 18 estados, com área plantada de 2,2 milhões de hectares para fins industriais, equivalente 0,8% do território nacional. Emprega 128 mil empregados diretos e 640 mil empregados indiretos. O Brasil encontra-se na quarta posição do *ranking* mundial na produção de celulose, com 13997 mil toneladas produzidas, e na nona posição na produção de papéis, com 10260 mil toneladas produzidas. O crescimento anual da produção de celulose é em média 7,1%, e da produção de papel é de 5,4%.

Embora o país ganhe posições de destaque nesse setor, também enfrenta desafios referentes ao aumento do custo de produção e redução dos impactos ambientais resultante de suas atividades. Estes fatores fazem com que pesquisadores trabalhem em linhas de pesquisa como conservação de energia, minimização do consumo de químicos com ganhos em produtividade, mantendo a qualidade do produto final.

A busca por soluções de problemas e melhorias é um desafio constante. Para isso, uma ferramenta muito utilizada é a modelagem matemática computacional do processo. Nesta modelagem estudam-se elevado número de variáveis, adotando-se métodos numéricos associados à ferramenta computacional, e técnicas de programação avançadas, adequadas à otimização da busca das soluções dos problemas complexos.

O uso de redes neurais artificiais vem crescendo substancialmente em diversas aplicações, incluindo o setor de papel e celulose. As redes neurais visam trabalhar no processamento de dados de maneira semelhante ao cérebro

humano, sendo capaz de armazenar conhecimento baseado em aprendizado e disponibilizar este conhecimento para a aplicação em questão.

A caldeira de recuperação química é um equipamento-chave na indústria de polpa celulósica e papel. Apesar da queima de licor negro ser muito similar à queima de outros combustíveis, este processo é mais complexo devido à função de recuperar os produtos químicos. Os produtos da combustão não se resumem ao gás carbônico e vapor de água, mas também são incluídos os químicos recuperados do cozimento Kraft, o carbonato de sódio e o sulfeto de sódio. As reações químicas importantes são a redução do sulfato, a formação de vapores e cinzas e a liberação do enxofre (REIPERT, 2000). Em virtude da complexidade química do processo optou-se por utilizar a metodologia de modelagem por redes neurais artificiais para representar a queima do licor negro e prever o percentual de carbono no licor verde, parâmetro que representa a queima irregular na caldeira de recuperação química

Considerando este contexto, são apresentados a seguir os objetivos deste trabalho.

1.1 Objetivos

O presente trabalho tem por objetivo propor um modelo para prever o percentual de carbono no licor verde com base na queima de licor negro na caldeira de recuperação 2 da Klabin Monte Alegre.

O grande desafio deste trabalho é a alta complexidade deste processo somado a variáveis que não são medidas em tempo real, que dificultam a modelagem do processo.

1.2 Organização da dissertação

A dissertação está organizada na seguinte forma: Capítulo 1, a introdução sobre o tema em estudo e os principais objetivos deste trabalho. No Capítulo 2 é abordado a revisão bibliográfica na qual são revisados os temas relacionados ao

objetivo tais como: o processo de produção de papel, ciclo de recuperação Kraft, e mecanismos de queima em caldeiras de recuperação química. Ainda neste capítulo há uma revisão sobre modelagem de processos e redes neurais. A seguir, no Capítulo 3 apresenta-se a metodologia empregada para esse estudo. Posteriormente, no Capítulo 4 são apresentados os resultados obtidos. Por fim, no Capítulo 5 são abordadas as principais conclusões e sugestões do trabalho.

Ainda são apresentados o Anexo I com o questionário de opinião aplicado a operação e Anexo II com o descritivo do programa Property Predictor, utilizado na modelagem.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Processo de produção da polpa celulósica

No processo de produção da celulose qualquer matéria-prima fibrosa pode ser utilizada. Porém, para ter-se um processo produtivo eficiente alguns fatores são levados em consideração, como percentual de fibras, características físicas, químicas e morfológicas, custo e disponibilidade (Barrichelo & Brito, 1979). As madeiras dos gêneros *Pinus* e *Eucalyptus* são as principais fontes de matéria prima para produção de celulose e papel no Brasil.

As características da pasta celulósica produzida são funções da quantidade de energia aplicada. Há quatro tipos de processos de polpação: químico, semi-químico, químico-mecânico, mecânico. Estes estão em ordem crescente de energia mecânica necessária para separar as fibras e decrescente em relação a ação química (IPT, 1988). A Tabela 2.1 apresenta o rendimento sobre a madeira de cada um destes processos de polpação.

Tabela 2.1. Classificação dos processos de polpação com base no rendimento em polpa (adaptado de IPT, 1988)

Processo	Rendimento (%)
Mecânico	95-98
Químico-mecânico	85-95
Semi-químico	65-85
Químico	40-65

Segundo Polowski, (2004) No processo mecânico as ligações entre as fibras são rompidas aplicando-se forças de cisalhamento intensas. A polpa gerada é composta por fibras intactas, feixes de fibras e fibras danificadas. Com esse método é possível obter um elevado rendimento, pois perde-se apenas finos e solúveis em água. Já em processos semi-químico e químico mecânico, há uma menor influência mecânica, fazendo com que as fibras apresentem-se melhores

separadas e menos danificadas, além de ocorrer alguma remoção de lignina e hemiceluloses, comparado com processo mecânico.

O Processo Químico será descrito de maneira simplificada na seção 2.1.1.

2.1.1 Polpação química - Kraft

O processo Kraft inicia-se na obtenção dos cavacos de madeira, para isso, a madeira é cortada, descascada e picada. Em seguida os cavacos são submetidos a um cozimento, em um equipamento chamado digestor, com a utilização de água, produtos químicos: sulfeto e hidróxido de sódio (licor branco), pressão e temperaturas controladas. O objetivo é separar as fibras de celulose da lignina – substância que une essas fibras, aumentando a rigidez da parede celular vegetal, e que constitui, juntamente com a celulose, a maior parte da madeira das árvores e arbustos.

Após o cozimento, as fibras celulósicas formam uma pasta marrom que segue para uma série de processos e reações químicas, responsáveis por depurar, lavar e branquear essa polpa até a alvura desejada.

Após essas etapas, a celulose seguirá, basicamente, dois caminhos distintos:

- Seguirá para uma máquina de papel – no caso de fábricas integradas;
- Passará por um processo de secagem e será estocada em fardos, para posterior comercialização para fábricas de papel, como celulose de mercado.

A lignina, após a separação das fibras não é descartada. A lignina residual do processo de polpação é componente principal do licor negro. Esse licor negro passa por outro processo que gera energia e, ao mesmo tempo, recupera os reagentes químicos usados no cozimento.

A seguir encontra-se um fluxograma simplificado (Fig. 2.1) do processo Kraft.

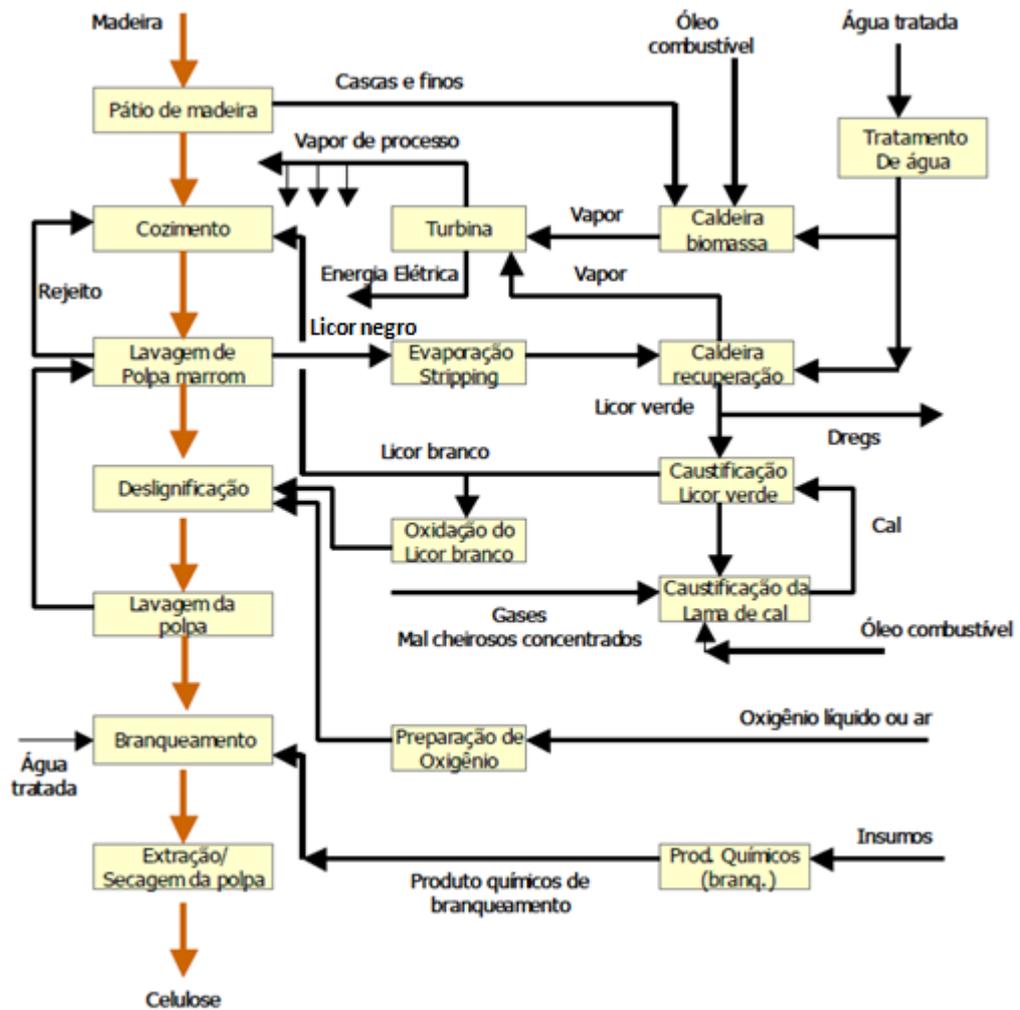


Figura 2.1. Fluxograma do processo Kraft (PIOTTO,2003)

2.1.2 Tipos de licores – processo Kraft

A seguir serão descritos os principais licores (lixívia) do Processo de Polpação Kraft, segundo IPT, (1988):

Licor Branco: É o nome aplicado ao licor obtido pela caustificação do licor verde. Este é constituído de hidróxido de sódio e sulfeto de sódio.

Licor Negro: Nome designado ao licor recuperado dos digestores até o ponto de sua queima na área de recuperação. Formado por compostos orgânicos (celulose, hemicelulose, lignina e extrativos) e inorgânicos.

Licor Verde: É o nome dado ao licor obtido pela dissolução dos reagentes recuperados em água e licor fraco, preparatório para caustificação. A coloração verde é devido a presença de pequenas quantidades de sais ferrosos.

Smelt: É o produto fundido que se obtém com a queima do licor preto concentrado nas caldeiras de recuperação.

2.1.3 Sistema de recuperação de reagentes químicos

A proposta da planta de recuperação de produtos químicos é recuperar e recircular os reagentes químicos do cozimento e extrair energia dos compostos orgânicos do licor negro. (EK *et al*, 2009)

Segundo IPT, (1988) a recuperação constitui parte essencial no processo Kraft. A ausência de um sistema de recuperação e a conseqüente descarga do licor negro em rios significa desperdiçar reagentes e combustíveis, além de provocar poluição ao meio ambiente.

As principais etapas do processo de recuperação, segundo Biermann, (1996) são:

- Concentrar o licor negro por evaporação;
- Queimar o licor negro forte a fim de se obter os produtos químicos inorgânicos em forma de fundido (*smelt*). Esse *smelt* é dissolvido em água gerando licor verde;
- Preparação do licor branco a partir do licor verde;
- Recuperação de sub produtos como Tall Oil, Energia e Terebentina;
- Regeneração do carbonato de cálcio, a hidróxido de cálcio.

A Figura 2.2 a seguir mostra um diagrama esquemático do processo de recuperação.

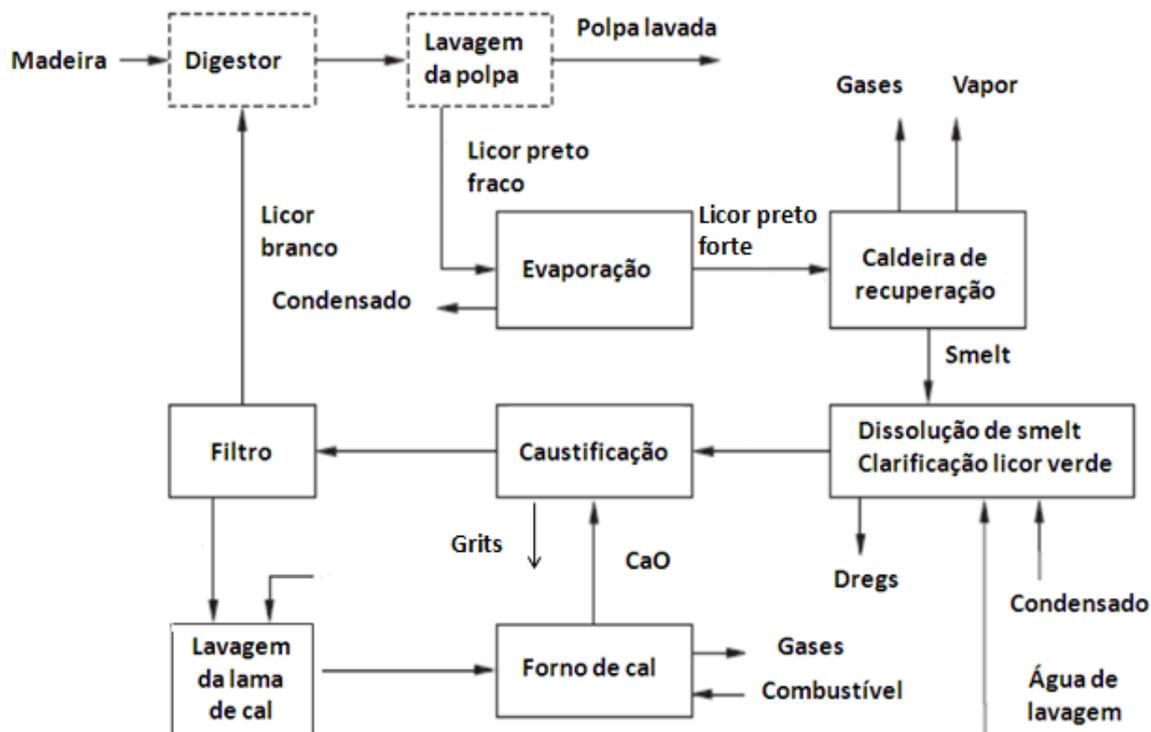


Figura 2.2. Representação esquemática do processo de recuperação (EK et al, 2009)

Como descrito por EK *et al*, (2009) o licor negro descarregado do digestor, resultante do cozimento dos cavacos de madeira e sob a forma diluída, contendo produtos químicos inorgânicos originais do licor branco, já com outra composição e também com material orgânico é submetido à evaporação que tem função de concentrar o licor negro obtido do sistema de lavagem de pasta a uma densidade tal que, quando injetado na fornalha de recuperação, ignifique e continue a queimar por força da matéria orgânica que contém. Essa concentração é normalmente 65%-75% de sólidos secos. Instalações modernas chegam a 80% de sólidos secos (GULLINCHSEN & FOGELHOLM, 1999). Na Klabin Monte Alegre, foco deste trabalho, a concentração aproxima-se de 80%.

A concentração mínima recomendada como segura para queima de licor negro em caldeiras de recuperação é de 58%. Abaixo desse valor o risco de explosão é muito alto devido à umidade do licor em contato com os fundidos alcalinos do leito da caldeira (MARTINELLI, 2008).

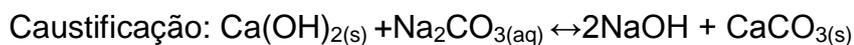
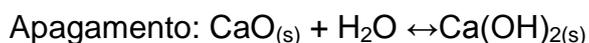
O concentrado entra na caldeira de recuperação originando a fusão dos compostos inorgânicos (*smelt*), e a queima dos componentes orgânicos, gerando

vapor de alta pressão que é aproveitado na produção. A caldeira de recuperação será detalhada na seção 2.2.

Os produtos químicos inorgânicos do licor negro (*smelt*) formam uma substância que depois de dissolvida com água alcalina da caustificação, dão origem ao licor verde, que é constituído principalmente por Na_2CO_3 e Na_2S . Este licor é clarificado, a fim de retirar os *dregs*, que são componentes não queimados na caldeira e elementos não processuais. Estes elementos não têm parte ativa no processo e são prejudiciais para a polpação, branqueamento ou recuperação de químicos.

Posteriormente a clarificação inicia-se a caustificação, onde é gerado o licor branco fornecido aos digestores. O licor verde clarificado reage com uma suspensão concentrada de hidróxido de cálcio para caustificar o carbonato de sódio em hidróxido de sódio, produzindo o licor branco (IPT, 1988).

As reações do processo de caustificação são as seguintes (BIERMANN, 1996):



O carbonato de cálcio resultante da reação de caustificação é removido por filtros, e então enviados a fornos para a conversão em CaO , e utilizado novamente na caustificação. O filtrado é enviado aos digestores como licor branco.

Green e Hough (1998) afirmam que a viabilidade econômica de uma fábrica depende da capacidade do sistema de caustificação em converter carbonato de sódio em soda, fornecendo um licor branco de qualidade para atender a demanda do digestor.

2.2 Caldeira de recuperação

Segundo EK *et al*, (2009) a proposta da caldeira de recuperação é recuperar inorgânicos em *smelt* (carbonato de sódio e sulfeto de sódio), queimar os compostos orgânicos para estes não serem descarregados como poluentes, e

recuperar calor da combustão em forma de vapor. Após diluição do *smelt*, gera-se o licor verde, que é enviado a próxima etapa do processo, a caustificação.

A caldeira de recuperação consiste basicamente de uma fornalha e equipamentos trocadores de calor. O licor negro é pulverizado na fornalha por bocais. As partículas formadas por estes bocais tem diâmetro de 2 a 3 mm (SIXTA, 2006). A fornalha localiza-se na parte inferior da caldeira, e é responsável pela combustão da matéria orgânica contida no licor. Os equipamentos de troca térmica são responsáveis pela produção de vapor superaquecido. O nariz é a demarcação entre essas duas partes, e serve para proteger o superaquecedor das radiações incidentes da parte inferior e reduzir as taxas de corrosão desse equipamento. Após a caldeira tem-se o precipitador eletrostático e a chaminé (SOSA, 2007). A Figura 2.4 a seguir traz esquematicamente o design de uma caldeira de recuperação.

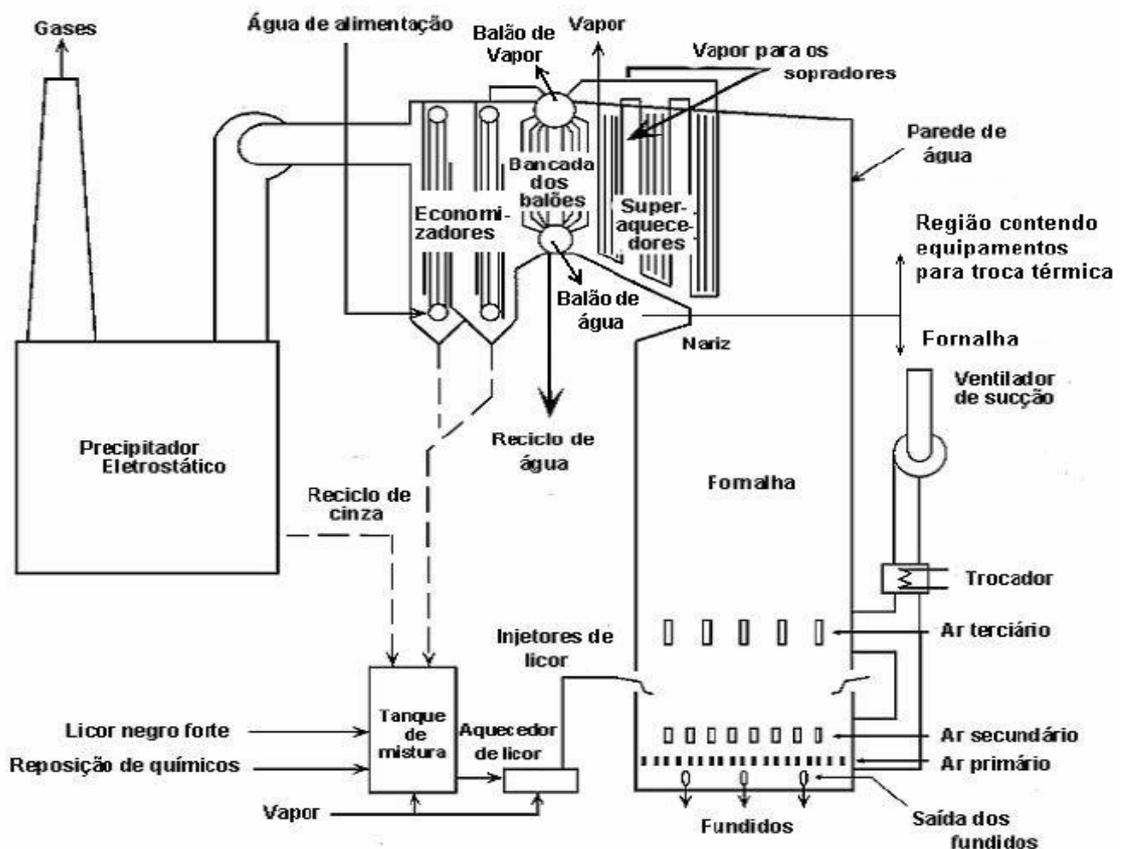


Figura 2.3. Caldeira de recuperação (EMPIE, 2009)

Estratégias de injeção de ar na fornalha da caldeira de recuperação influenciam fortemente a reação de redução e a produção de vapor. O ar de combustão entra em três níveis, sendo denominado ar primário, secundário e terciário. A principal razão para esta divisão são as funções antagônicas de proporcionar um ambiente oxidante (rico em oxigênio), para se queimar a matéria orgânica do licor, e, ao mesmo tempo, de promover um ambiente redutor (deficiente em oxigênio), para se reduzir a parte inorgânica do licor (ADAMS et al., 1997).

Segundo Ferreira *et al*, (2010) o ar primário tem as funções de controlar o formato e a posição do leito de sais e fornecer oxigênio para a combustão do carbono residual. A injeção deste ar ocorre nas quatro paredes da caldeira e há um ventilador dedicado para sua alimentação. As funções do ar secundário são: controlar a altura e manter a temperatura do leito; secar e queimar o licor; queimar os produtos voláteis oriundos da combustão do licor e controlar a velocidade dos gases. O ar secundário é injetado na parede frontal e na parede traseira, com um ventilador dedicado para sua alimentação. O ar terciário tem a função de queimar os produtos voláteis, manter uma selagem na fornalha (para se minimizar o arraste de material particulado para a parte superior da caldeira) e uniformizar o fluxo de gases para a sessão superior. Ele é injetado na parede frontal e na parede traseira, com um ventilador dedicado para sua alimentação.

O fluxo de gases gerados na parte inferior da caldeira segue para o precipitador eletrostático e para chaminé, sendo dispersos na atmosfera. Para impedir a perda de substâncias químicas importantes para o processo, como sulfato de sódio, utilizam-se precipitadores eletrostáticos. A precipitação eletrostática ocorre aplicando-se uma diferença de potencial de 50000 a 10000 volts através de um eletrodo carregado negativamente, situado perto de outro positivo ligado a terra, chamado eletrodo coletor. (SOSA, 2007)

Existem três zonas na caldeira de recuperação: na seção superior encontra-se a zona de oxidação, na seção do meio (onde o licor negro é injetado) é a zona de secagem, e na seção inferior é a zona de redução, onde há a redução de sulfato a sulfeto (BIERMANN, 1996).

O licor negro sofre os processos de queima (secagem, pirólise, queima dos voláteis, queima do carbono fixo e oxidação inorgânica); reações de redução do sulfato; formação de cinzas e reações de corrosão da fornalha, dentro das regiões distintas da caldeira (SOSA, 2007).

Nas seções a seguir são detalhadas as reações químicas que ocorrem durante a queima, descritas por Green e Hough, 1992.

2.2.1 Pirólise

Durante a pirólise, uma série de reações de degradação irreversível ocorre com os sólidos do licor negro, à medida que a temperatura do licor se eleva. A reação inicia-se quando os sólidos do licor atingem a temperatura de aproximadamente 200°C.



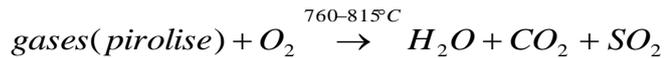
A pirólise é uma etapa importante na queima do licor negro, pelas seguintes razões:

- Na pirólise ocorre a separação entre os gases de queima rápida e o carbono fixo de queima lenta. Quanto maior a velocidade de produção de gases pela pirólise, mais rapidamente o licor queima;
- É o mecanismo de liberação dos gases de enxofre na fornalha;
- O residual da pirólise (carbono fixo) é fundamental para formação do leito;

O resíduo sólido ao fim da pirólise é um material carbonáceo, contendo aproximadamente 20 – 25% de carbono fixo e 70 – 75% de inorgânicos.

2.2.2 Queima dos voláteis

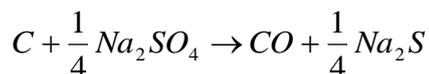
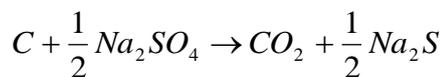
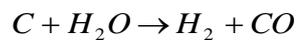
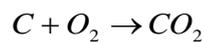
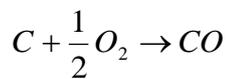
A reação de queima dos voláteis é uma reação na fase gasosa, rápida e homogênea, que pode ser representada da seguinte forma:



Para esta reação completar-se é necessário fornecimento suficiente de ar e uma mistura adequada com os gases a uma temperatura de 760 a 815°C.

2.2.3 Queima do leito

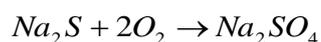
A queima no leito ocorre em duas fases: (1) conversão de carbono fixo em CO e CO₂ liberando calor para permitir a fusão do *smelt*; (2) mudanças no estado de oxidação dos compostos inorgânicos de enxofre. As principais reações químicas envolvidas são as seguintes:



Durante a queima do leito, as reações predominantes do carbono são as reações com o sulfato fundido. O sulfato e o sulfeto presentes podem agir como catalisadores da queima do carbono, com o sulfato sendo reduzido a sulfeto, e conseqüentemente o sulfeto sendo re-oxidado a sulfato pela reação com o oxigênio.

2.2.4 Oxidação inorgânica

A única reação de combustão de compostos inorgânicos que ocorre de forma significativa é a oxidação do sulfeto para sulfato conforme reação abaixo:



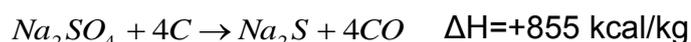
Esta é uma reação exotérmica com um poder calorífico de 3082 kcal/kg. A oxidação do sulfeto tende a ser inibida enquanto há carbono presente no leito, porém, ocorre de imediato quando o *smelt* estiver exposto ao oxigênio após a queima do carbono.

2.2.5 Redução do sulfato de sódio

Uma das funções mais importantes da caldeira de recuperação é a reação química para a produção do sulfeto de sódio a partir do conteúdo de sódio e enxofre presentes no licor negro.

A reação dos compostos oxidados de enxofre-sódio com um agente de redução, é o mecanismo dominante pelo qual o sulfeto é formado na fornalha de recuperação. Uma vez que o sulfato é a forma mais oxidada disponível do enxofre, o processo de formação do sulfeto ocorre predominantemente pela reação de redução deste sulfato. Inúmeros agentes de redução estão disponíveis na fornalha de recuperação, incluindo C, CO e H₂, sendo que destes o mais importante é o carbono.

A redução do sulfato pelo carbono é uma reação endotérmica (absorve calor). A magnitude da do calor da reação é três vezes maior quando o produto da reação é o CO ao invés do CO₂. As reações e os calores associados da reação a 930° C são:

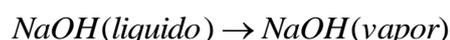
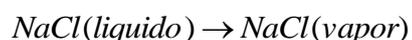
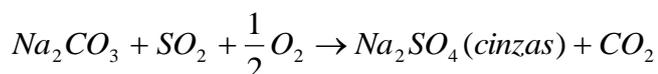
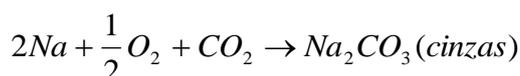
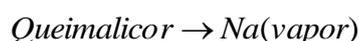


A taxa de reação entre o carbono/sulfato é muito sensível ao efeito da temperatura, dobrando a cada 50 °C. Se a redução ocorrer na ausência de uma fonte de calor, o calor endotérmico da reação provoca a queda da temperatura.

O conceito do ciclo sulfato/sulfeto indica que a oxidação do sulfeto e a redução do sulfato podem ocorrer simultaneamente na queima do leito. O calor liberado pela oxidação do sulfeto é maior do que o calor absorvido pela redução do sulfato, sendo assim a temperatura da superfície de reação tende a aumentar. As condições de queima vigorosa no leito favorecem a redução, e desta forma, a maior parte da reação de redução ocorre no leito.

2.2.6 Formação de cinzas

Cinzas é o nome dado às partículas muito pequenas produzidas pela vaporização do sódio (e potássio) na fornalha. As reações básicas da formação de cinzas são:



As cinzas são tanto um benefício quanto um problema na caldeira de recuperação. A poeira de carbonato de sódio desempenha um papel importante na captura do enxofre, porém, uma grande quantidade de cinzas requer um precipitador de maior área de coleta e pode contribuir também para a incrustação ou entupimento das passagens de gás. Os cloretos e o potássio podem formar cinzas de baixo ponto de fusão e agravar o entupimento e os problemas de corrosão.

2.3 Licor Verde

O licor verde, como afirma Svensson (2012), é formado pela dissolução de *smelt* vindo da caldeira de recuperação, e é uma solução alcalina que contém diferentes componentes, variando de fábrica para fábrica. Sua qualidade está diretamente relacionada com as reações de queima na caldeira de recuperação.

A Tabela 2.2 mostra concentrações aproximadas das principais sais presentes no licor verde, para fábricas de polpa de madeira do tipo *Eucalyptus*.

Tabela 2.2. Concentrações aproximadas dos componentes do licor verde. (EK et al, 2009)

Sal/Ion	Na	K	Na ₂ CO ₃	Na ₂ S	NaOH	Na ₂ SO ₄	Na ₂ S ₂ O ₃	NaCl
Conc. (g/kg)	70-95	5-15	100- 140	30-60	2-25	1-15	1-10	1-10

Além destes compostos, o licor verde possui grande quantidade de dregs, que são uma mescla de partículas inorgânicas chamadas NPE (elementos não processuais) e também partículas orgânicas resultantes de uma combustão incompleta (SVENSSON, 2012).

No licor verde o conteúdo de sólidos ideal é 1500 mg/l, destes 500 mg/l são Carbono, ou seja, 30% do licor verde é carbono não queimado. Um aumento deste percentual de Carbono indica má qualidade de queima do licor negro na caldeira de recuperação (METSU, 2013).

Uma otimização da combustão do licor negro em caldeiras de recuperação, segundo Wessel *et al* (1995) aumenta a qualidade do *smelt*, resultando numa melhor qualidade do licor verde, ou seja, menores quantidades de *dregs*.

2.4 Redes Neurais Artificiais

2.4.1 Modelagem Matemática

Uma relação matemática que descreve o comportamento das variáveis do processo é chamada de modelo matemático. Tal modelo relaciona as variáveis de saída com as variáveis de entrada. (VIEIRA & ROISENBERG, 2003)

Segundo EDGAR & HIMMELBLAU, (1988) um modelo matemático representa um sistema existente, ou a ser construído, transmitindo o conhecimento sobre tal sistema em uma forma utilizável.

As redes neurais artificiais são uma ferramenta matemática bastante funcional para modelar processos complexos, considerando que elas possuem capacidade de aprendizagem (PATAN & PARISINI, 2005).

Existem dois tipos de modelagem matemática, fenomenológica e empírica, ambas têm vantagens e desvantagens que se complementam, e a incorporação de conhecimento fenomenológico dentro dos modelos empíricos é uma técnica utilizada para capturar as vantagens das duas abordagens e é denominada modelagem híbrida. (VIEIRA, 2003)

É costume distinguir os modelos matemáticos dentre três níveis codificados por cor, associados ao nível de informação que eles contêm: (VIEIRA, 2003)

- Modelos “caixa-branca”: os modelos são perfeitamente conhecidos a partir dos aspectos fenomenológicos que ocorrem no processo (balanços de massa, energia, cinética de reações, termodinâmica).
- Modelos “caixa-cinza”: os modelos são construídos utilizando os aspectos fenomenológicos conhecidos do processo, enquanto que os desconhecidos são descritos a partir de dados experimentais; modelos híbridos.
- Modelos “caixa-preta”: os modelos são construídos apenas a partir dos dados empíricos, devido à não existência de qualquer conhecimento dos aspectos fenomenológicos que ocorrem no processo.

Por se um processo complexo, multivariável e com perturbações não medidas, a modelagem tipo “caixa-branca”.na área de recuperação de químicos da industria de celulose e papel não é aplicável.

2.4.2 Redes Neurais

O ser humano é dotado de complexos circuitos neurais cerebrais que constam de variadas conexões entre seus neurônios (sinapses) interagindo entre si de modo a fazer emergir comportamento inteligente. Sendo assim, surge a idéia de que se conseguirmos modelar computacionalmente estas conexões neurais, poderíamos fazer emergir comportamentos também inteligentes em máquinas. Neste contexto, surgem as redes neurais artificiais (RNAs) que são inspiradas na própria natureza das redes de neurônios e sinapses biológicas. Esta idéia de modelagem cerebral forma a vertente da Inteligência Artificial chamada Inteligência Artificial conexionista (VIEIRA & ROISENBERG, 2003).

Segundo VIEIRA, (2003) o desenvolvimento de trabalhos científicos a modelagem de processos usando redes neurais tem sido muito utilizada. Estudos na área de controle e monitoramento de processos ganham destaque nesta área.

Na sua forma mais geral, uma rede neural é análoga ao cérebro, compostas por camadas de neurônios, chamados nós ou elementos de processamento, que estão altamente conectados entre si. A rede recebe um conjunto de *inputs*, ou dados de entrada, e essas conexões de caráter microscópico e subsimbólico, muito bem ajustadas, transportam a informação para as próximas camadas, gerando um *output*, que se manifesta de maneira macroscópica, correspondente aos dados de entrada apresentados. Apesar delas serem processadores numéricos, as redes neurais também podem fornecer resultados simbólicos (AGUIAR, 2000).

Podem-se considerar as redes neurais uma aplicação relativamente recente na matemática, e são aplicáveis a determinar as interligações que existem entre variáveis, sem ser necessário definir antecipadamente as equações que as correlacionam. É possível elaborar modelos sem fundamentação fenomenológica com os dados de operação de um processo (VIEIRA, 2003).

Em uma tentativa de estabelecer uma classificação dos tipos existentes de redes neuronais GONTARSKI, (2000) cita as características básicas que são levadas em consideração:

- A forma como a informação flui pela rede. Em algumas ela flui sempre em um sentido único, da entrada para a saída. Em outras a informação flui independente de sentido ou direção.
- A forma como os resultados são interpretados, quando a rede neuronal compara as suas respostas com uma desejada durante o seu treinamento, ou quando a rede neuronal por si própria estabelece a melhor forma de encontrar uma resposta.

As redes onde as informações avançam em apenas uma direção são denominadas de diretas ("feedforward"). São bastante comuns por sua relativa simplicidade e estabilidade. As redes conhecidas como "backpropagation" são exemplos deste tipo.

Aquelas redes onde as conexões permitem que as informações fluam em qualquer sentido são chamadas de recorrentes ("feedback"). Em geral as redes deste tipo são capazes de representar sistemas mais complexos, mas isto pode ser às custas de complicações indesejáveis para o treinamento da rede.

2.4.3 Estrutura de uma rede

Muitos modelos de redes neurais foram propostos ao longo dos anos, e todos compartilham sua estrutura em comum, baseado no modelo de neurônio de McCulloch e Pitts, mostrado na Figura 2.9.

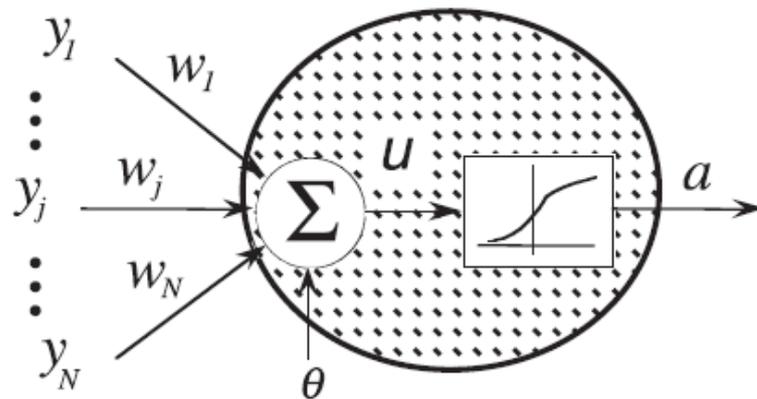


Figura 2.4. Modelo de neurônio proposto por McCulloch e Pitts (HU & HWANG, 2002)

De acordo com Santos (2011) um neurônio artificial é uma unidade de processamento de informação de fundamental importância para a rede neural. Percebe que o neurônio artificial realiza seus cálculos baseados nos dados de entrada. O neurônio recebe um valor de entrada que é multiplicado por um peso, o somatório desta multiplicação com o bias forma o argumento da função transferência. O bias tem a função de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo do sinal positivo ou negativo, respectivamente. A Equação 1 apresenta o modelo de um neurônio artificial.

$$u = \sum (w_i y_i) + \theta \quad (2.1)$$

Onde:

y_i - entradas da rede ($1 \leq j \leq N$)

w_i - peso da sinapse

θ - bias

A saída (output), denotada por a , é relacionada a entrada (input), chamada u , via transformação linear ou não linear chamada função de ativação:

$$a = f(u) \tag{2.2}$$

Em vários modelos de redes neurais, diferentes funções de ativação são propostas. As funções de ativação mais comumente utilizadas são mostradas na Tabela 2.6.

Tabela 2.3. Funções de ativação (HU & HWANG, 2002)

Função de ativação	Fórmula a=f(u)	Derivada	Comentários
Sigmóide	$f(u) = \frac{1}{1 + e^{-ux}}$	$f(u)[1 - f(u)]x$	Comumente usada
Tangente hiperbólica	$f(u) = \tanh(ux)$	$(1 - [f(u)]^2)x$	
Tangente inversa	$f(u) = \frac{2}{\pi} \tan^{-1}(ux)$	$\frac{2}{\pi} x \frac{1}{1 + (ux)^2}$	Menos usada
Gaussiana em base radial	$f(u) = \exp\left[-\ u - m\ ^2 / \alpha^2\right]$	$-2(u - m)f(u) / \alpha^2$	m e σ^2 são parâmetros a serem especificados
Linear	$f(u) = bu + c$	b	

Para obter-se um resultado satisfatório quando se trabalha com redes neurais é importante definir o número de camadas e do número de neurônios em cada uma delas. Não existe ainda nenhuma regra que esclareça satisfatoriamente a forma correta de configurar esses parâmetros.

2.4.4 Treinamento de uma rede neural

A primeira e mais demorada fase da operação de uma rede neural é o treinamento, etapa na qual as conexões e pesos entre os neurônios devem ser ajustados. Esta fase é de vital importância, pois a capacidade da rede para prever relações causa-efeito depende de conexões adequadas.

O treinamento de RNA's pode ser dividido em supervisionado e não-supervisionado. No primeiro caso a rede necessita de um "professor" durante a fase de aprendizado, já o segundo caso a rede é direcionada por correlações existentes nos dados de entrada, não necessitando de um "professor". O treinamento mais utilizado em casos de Engenharia Química é o treinamento supervisionado chamado de retropropagação (backpropagation). Este método utiliza a seguinte seqüência, como descrito por Aguiar, (2000):

1. Atribuir valores aleatórios para os pesos e fatores de tendência
2. Alimentar a rede com os *inputs*, que serão, por sua vez, os sinais transmitidos por cada neurônio da camada de entrada.
3. Calcular o *output* de cada neurônio da próxima camada - o resultado da adição da soma ponderada dos sinais que chegam em cada neurônio com o respectivo fator de tendência é inserido na função de ativação, gerando o *output* deste neurônio.
4. Alimentar a próxima camada com os *output* de cada neurônio desta camada.
5. Repetir este procedimento até que a camada de saída gere um *output*.
6. Comparar os *outputs* gerados pela rede com os valores esperados (reais) correspondentes aos *inputs* fornecidos ao sistema. Calcular a diferença e fazer a retropropagação deste erro para determinar os novos pesos e os novos fatores de tendência, de forma a minimizar o erro total quadrado. Este procedimento é feito para cada camada até a primeira camada oculta.
7. Repetir o procedimento de 2 a 5 até que o erro total quadrado seja muito próximo de zero.

A sequência descrita anteriormente é apresentada na forma de fluxograma na Figura 2.10.



Figura 2.5. Fluxograma do treinamento *backpropagation*

O treinamento por retropropagação tem a vantagem de poder lidar com modelos complexos e não lineares, é flexível e pode armazenar muitos padrões de mapeamento. Porém, demanda muito tempo computacional, não só para programação e desenvolvimento de uma boa interface com o usuário, mas também por necessitar de um grande número de dados de treinamento.

2.4.5 Aplicações de redes neurais na área de celulose e papel

Os processos da área de papel e celulose vêm sendo analisados por redes neurais, pois esta ferramenta provou ser uma ferramenta útil na modelagem de

processos completos. A seguir apresenta-se alguns trabalhos relacionados a área.

Qian e Tessier, (1995) utilizaram redes neurais MLP para modelar a operação de refinação de polpa termo-mecânica. Este estudo demonstrou que redes neurais podem ser utilizadas com sucesso em processos industriais complexos, como o refino de polpa em indústrias de celulose e papel.

Smith (2000) modelou as emissões de TRS e SO₂ de uma caldeira de recuperação. Este trabalho relacionou variáveis de processo, produtividade da caldeira e emissões de enxofre. A modelagem foi desenvolvida com o intuito de ser utilizada como ferramenta para prever perturbações e ajudar na revelação das possíveis causas.

Martinelli (2008) usou as redes neurais na detecção de defeitos em caldeiras de recuperação química, no processo de produção de celulose "Kraft". Uma MLP foi utilizada para reproduzir o comportamento quase-estático das malhas de controle. Os resultados demonstraram características de sensibilidade, robustez e velocidade para a detecção de defeitos incipientes.

Vieira (2003) apresentou a modelagem das propriedades físicas de cartão para embalagem. Foram investigados modelos não lineares quase-estáticos híbridos para propriedades independentes, e também múltiplas propriedades, para explorar a existência de eventuais efeitos de acoplamento entre as mesmas.

Garcia (2010) utilizou redes neurais para analisar o comportamento de marmorização de cartão revestido. Através de uma modelagem foi possível determinar os parâmetros que mais influenciam a propriedade de marmorização e com isso proporcionar o conhecimento aos operadores, para que estes atuassem na máquina de papel, reduzindo variações de produção.

Aguiar (2000) realizou a modelagem de digestores Kraft contínuos para predição do grau de polpação da madeira. Além da modelagem por redes neurais, foram utilizados modelos determinísticos e híbridos a fim de comparação.

Motta Lima *et al* (2005) estudou o processo de secagem do papel em cilindros através de simulação por redes neurais. Este trabalho teve o objetivo de ajudar o controle do teor de umidade do papel e aumentar a eficiência de secagem.

2.5 Considerações finais

Apesar de RNAs apresentarem-se como uma ferramenta computacional relativamente recente, a aparente qualidade dos resultados obtidos quando da utilização desta técnica em diversos trabalhos tem feito com que o número de pesquisas envolvendo o uso desta aumentasse.

O que faz das redes neurais uma ferramenta poderosa para aplicação em diversos tipos de problemas é sua capacidade de aprendizado de comportamentos a partir de informações obtidas (medidas, amostras ou padrões). É uma técnica que não requer conhecimento teórico profundo, e é considerada ideal para processos não lineares e/ou muito complexos.

O desenvolvimento de uma RNA em ambiente industrial na área de celulose e papel é desafiador, porém pela análise das informações apresentadas neste capítulo, julgou-se promissor o uso desta ferramenta, principalmente por se tratar de um processo complexo, pelas diversas reações que ocorrem simultaneamente com espécies químicas variadas, revelando uma nova área de pesquisa que deve necessariamente ser explorada e expandida.

3 METODOLOGIA

3.1 A Caldeira de Recuperação Química em Estudo

A caldeira de recuperação em estudo (Figura 3.1) possui capacidade de queima de licor negro de 1700 toneladas de sólido seco por dia (tss/d), gerando vapor a 100 bar de pressão e 500°C de temperatura. Sua capacidade de geração de vapor bruta é 243 toneladas por hora. A caldeira é do tipo tiragem balanceada, ou seja, a pressão da fornalha é aproximadamente zero.



Figura 3.1. Caldeira de recuperação 2 - Klabin Monte Alegre

O sistema de pulverização do licor (Figura 3.2) consiste em 12 lanças através das quais o licor é injetado na fornalha, arranjadas 3 em cada parede a fim de aproveitar o máximo o volume da fornalha para secagem.

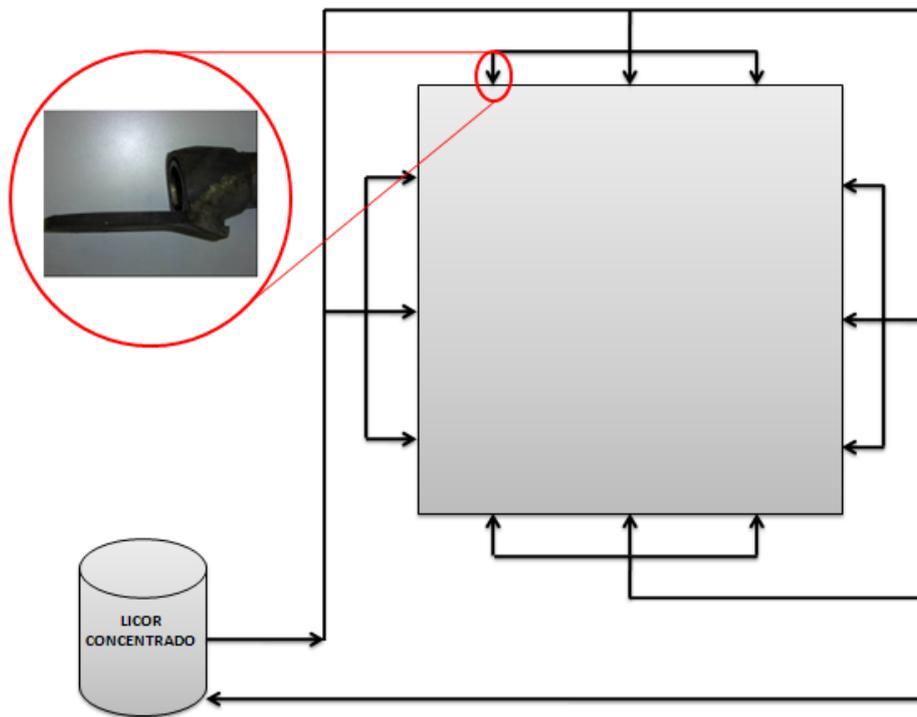


Figura 3.2. Esquemas da injeção de licor

O sistema de ar de combustão distribui o ar em três níveis independentes. O ar primário é injetado em um único nível e é distribuído nas quatro paredes da fornalha, enquanto o ar secundário e terciário são divididos em dois níveis cada um e são distribuídos em apenas duas paredes da fornalha (frontal e traseira). As razões normais entre o ar primário, secundário e terciário são respectivamente: 30%, 40% e 30%. O ar é aquecido nos níveis primário e secundário (150°C), já no terciário a injeção é a temperatura ambiente. Um esquema da caldeira de recuperação 2 da unidade da Klabin Monte Alegre é mostrado na Figura 3.3.

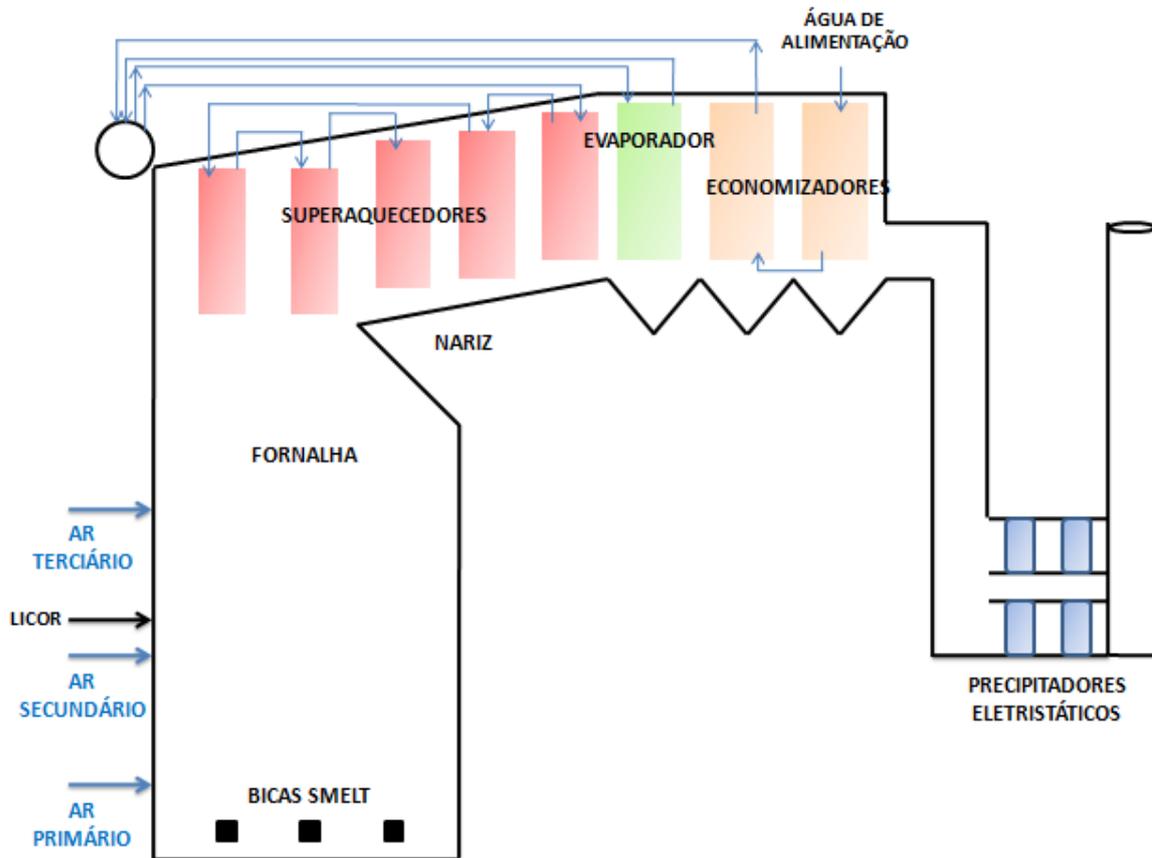


Figura 3.3. Esquema caldeira recuperação 2 Klabin

O *smelt* precisa ser retirado da caldeira a fim de recuperar os produtos químicos presentes. Para isso utiliza-se bicas que são localizadas na parte inferior da fornalha. O fundo da fornalha é tipo caixa, de modo que o *smelt* seja acumulado até um nível que flua pelas bicas de forma contínua e suave. Três bicas descarregam o *smelt* do fundo da fornalha para o tanque dissolvedor (Figura 3.4). Essas bicas são resfriadas utilizando água alcalina para proteção do material da mesma.

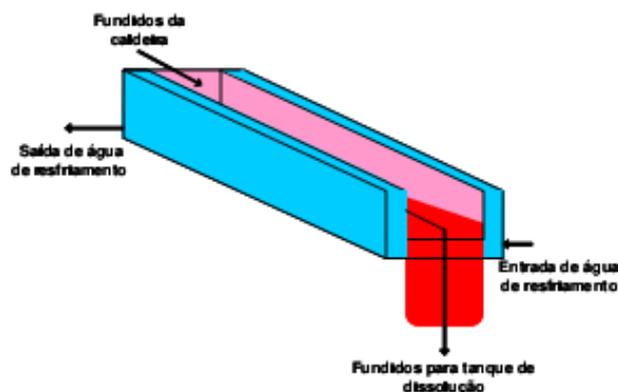


Figura 3.4. Esquema de uma bica de fundidos - *smelt* (MARTINELLI, 2008)

3.2 Rede Neural

O modelo por redes neurais artificiais foi construído a fim de auxiliar no controle de qualidade do licor verde gerado na caldeira de recuperação 2 da unidade Monte Alegre da Klabin (percentual de carbono no licor verde).

A construção das redes foi feita utilizando ferramenta Property Predictor da Pavilion Technology. Essa ferramenta auxilia a desenvolver modelos lineares e não lineares baseados em dados históricos do processo.

Para a formulação do modelo de redes neurais utilizando o *software* Property Predictor foram realizadas as seguintes etapas:

3.2.1 Identificação das variáveis de entrada e saída

O critério de escolha das variáveis de entrada foi baseado em retorno de informação da operação e análise de processo. Um questionário foi aplicado aos operadores para verificar, na visão destes, quais as variáveis influenciam na queima do licor, e conseqüentemente na qualidade do licor verde. Este questionário encontra-se em anexo. Foram entrevistados 10 operadores da área de recuperação e vapor, no período de março – junho de 2013.

O percentual de carbono no licor verde foi escolhido para ser predito pelo modelo (*output*) por ser uma variável de laboratório, analisada a cada 8 horas, e por ter grande importância para a etapa posterior, a caustificação, pela sua correlação com a qualidade do licor verde, gerado pela dissolução do *smelt* oriundo da caldeira de recuperação.

3.2.2 Coleta de dados históricos do processo

Coletou-se dados de todas as variáveis operacionais identificadas na etapa anterior. O conjunto de dados utilizados neste trabalho foi obtido por meio do Sistema PI (Sistema de Gerenciamento de Informações de Processo) desenvolvido pela empresa americana OSI soft, Inc. Este sistema é capaz de armazenar dados de produção em tempo real. Os dados são em sua maioria coletados através de SDCD (Sistemas Digitais de Controle Distribuído), dados de análise de laboratório, dentre outros.

Neste trabalho foram utilizados 5 meses de dados, totalizando 15357 dados coletados entre dezembro de 2012 a maio de 2013 com uma periodicidade de 1 minuto.

3.2.3 Pré-processamento dos dados

Para desenvolvimento de um modelo confiável o pré-processamento dos dados é a etapa mais importante da formulação do modelo.

Nesse passo foi feita a eliminação de dados não confiáveis, tais como parada de planta, desbalanceamentos de processos de queima e desligamentos por segurança operacional. A eliminação dos dados foi baseada em relatos de ocorrências de processo.

3.2.4 Formulação do modelo baseado em redes neurais

A rede neural formulada utilizou algoritmo de treinamento backpropagation. O processo de treinamento foi analisado com cuidado, para que a rede não tivesse capacidade de generalização reduzida. Para alcançar o treinamento ideal utilizou-se o método de validação cruzada com parada antecipada, descrito por Haykin (2011). O método ilustrado pela Figura 3.5 consiste em acompanhar a evolução do aprendizado nas curvas correspondentes aos subconjuntos de dados de treinamento e de validação. Deste modo, o treinamento é interrompido, quando a curva de validação decresce a um erro mínimo, e antes de começar a crescer.

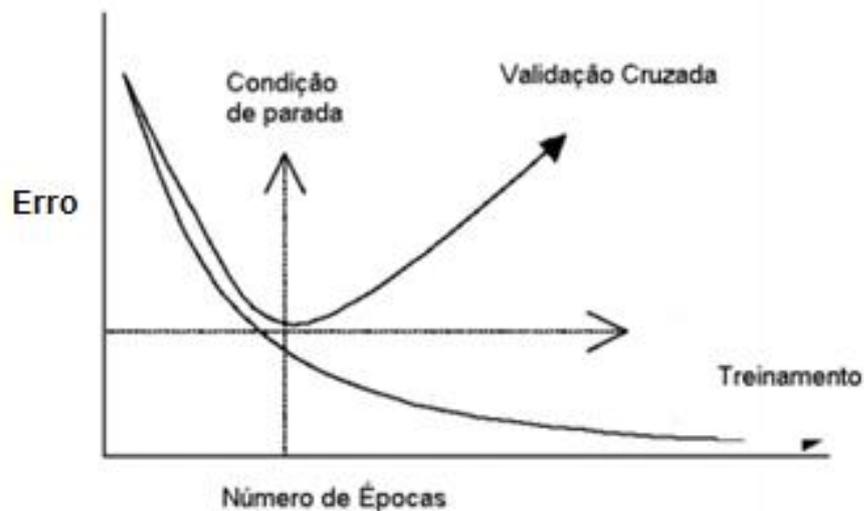


Figura 3.5. Condição de parada - método validação cruzada

3.2.5 Análise de sensibilidade

A análise de sensibilidade é importante para verificação da reprodutibilidade do modelo e a influência de cada variável de entrada sobre a propriedade de saída a ser inferida.

As equações 3.2.1 e 3.2.2 mostram como é calculado o ganho e o ganho médio absoluto.

$$ganho = \frac{\sum_{j=1}^N \frac{\partial u_{j,i}}{\partial y_{j,i}}}{N} \quad (3.2.1)$$

$$ganho_m\u00e9dio_absoluto = \frac{\sum_{j=1}^N \left| \frac{\partial u_{j,i}}{\partial y_{j,i}} \right|}{N} \quad (3.2.2)$$

Em que N é o número de padrões do conjunto de dados sobre o qual a distribuição é calculada. E $u_{j,i}$ é a i-ésima saída para o j-ésimo padrão e $y_{j,i}$ a i-ésima entrada para o j-ésimo padrão.

3.2.6 Análise do modelo

A análise do modelo consistiu pelo acompanhamento dos seguintes fatores:

- Erro relativo e R^2 : as medidas de erro relativo e R^2 indicam a discrepância entre a saída real e a predita pelo modelo. Essas medidas de erro são calculadas automaticamente pelo software utilizado.

$$erro = \sqrt{\frac{(a_{real} - a_{pred})^2}{\sigma^2}} \quad (3.1.1)$$

$$R^2 = 1 - erro^2 \quad (3.1.2)$$

- Inclinação da reta que ajusta os pontos representados num gráfico de valores preditos *versus* valores reais;
- Gráfico com valores preditos e verdadeiros ao longo do tempo;

3.2.7 Validação do modelo

O modelo validado empregando um conjunto de dados não utilizados no seu treinamento. Essa análise é realizada para assegurar que o modelo descreve aspectos essenciais do processo e que não apresenta problemas de sobre ajuste.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 Modelagem matemática por redes neurais do percentual de carbono no licor verde

A Caldeira de recuperação é responsável pela combustão do carbono do sistema encontrado no licor negro. Uma melhora na queima traz melhora nos teores de carbono do licor verde, melhorando assim a qualidade do mesmo para a etapa posterior de caustificação. Então optou-se por criar um modelo matemático para prever o percentual de carbono no licor proveniente da caldeira de recuperação 2 da Klabin MA.

A identificação das variáveis de entrada foi realizada através de conhecimento operacional e de processo. O questionário apresentado à operação mostrou que todas as variáveis têm percentual de influência moderada a forte. O modelo então foi formulado com vinte e uma entradas, sendo elas de operação da caldeira e de combustível.

Em casos de aplicação industrial é interessante a utilização de variáveis medidas no processo, medidas por medidores de linha ou provenientes de análise de rotina laboratorial (AGUIAR,2000). Três variáveis aplicadas no questionário não foram escolhidas para a modelagem por não apresentarem medições online ou por laboratório, mesmo tendo influência significativa pelo questionário de opinião.

A Tabela 4.1 apresenta os percentuais de respostas para cada variável e as variáveis escolhidas na formulação do modelo por redes neurais artificiais.

Tabela 4.1. Apresentação do percentual de respostas de cada variável apresentada no questionário de opinião [(1) não influencia; (2) influência baixa; (3) influência moderada; (4) influência substancial; (5) influência forte] e variáveis escolhidas para o modelo

	Unidade	1	2	3	4	5	Modelo
		(%)					
Eficiência de Redução	%	-	-	-	13	88	X
Vazão de alimentação de licor negro	m ³ /h	-	13	38	38	13	X
Temperatura do licor negro	°C	-	-	-	63	38	X
Concentração do licor negro	%	-	-	-	-	100	X
Vazão ar 1º	Nm ³ /h	-	-	38	-	63	X
Vazão ar 2º	Nm ³ /h	-	-	38	-	63	X
Vazão ar 3º	Nm ³ /h	-	-	50	25	25	X
Residual de Oxigênio	%	-	-	38	50	13	X
Temperatura ar 1º	°C	-	-	38	13	50	X
Temperatura ar 2º	°C	-	-	38	13	50	X
Pressão ar 1º	mmCa	-	-	13	25	63	X
Pressão ar 2º	mmCa	-	-	38	-	63	X
Pressão ar 3º	mmCa	-	11	44	22	22	X
Queima de óleo	t/d	13	-	-	88	-	X
Queima de sabão	t/d	-	25	38	25	13	X
Queima sólidos	tss/h			25	50	25	X
Dosagem de sulfato de sódio	t/d	-	-	50	13	38	X
Emissões: Compostos reduzidos de enxofre (TRS)	%	-	-	38	38	25	X
Emissões: SO2	%	-	-	38	38	25	X
Produção de vapor	t/d	-	13	13	50	25	X
Álcali efetivo residual	g Na ₂ O/L	-	13	50	38	-	X
Angulação dos bocais de licor	°	-	-	-	-	100	Não
Escoamento das bicas	m ³ /h	-	-	-	63	38	Não
Matéria Orgânica	%	-	-	50	50	-	Não

Na formulação do modelo, como mencionado na seção 3.1.4 o treinamento da rede utilizado foi o backpropagation, tendo como função de ativação a função sigmoïdal. Os dados para formulação do modelo foram separados aleatoriamente em frações de dados para treinamento, teste e validação, conforme Tabela 4.2.

Tabela 4.2. Distribuição dos dados utilizados para formação da rede neural artificial

	Total	Treino	Teste	Validação
Dados	15357	11668	2023	1666

Não há uma regra padrão de como se predizer o número ótimo de neurônios nas camadas ocultas, e para o caso deste trabalho a arquitetura utilizada foi de 3 camadas com 11 neurônios na camada oculta. Essa formulação é automaticamente realizada pelo Software Property Predictor.

Como mencionado na seção 3.1.4 as curvas de aprendizado de treino e teste foram acompanhadas, e o treinamento foi parado quando a curva de teste decresceu a um erro mínimo, e antes de começar a crescer.

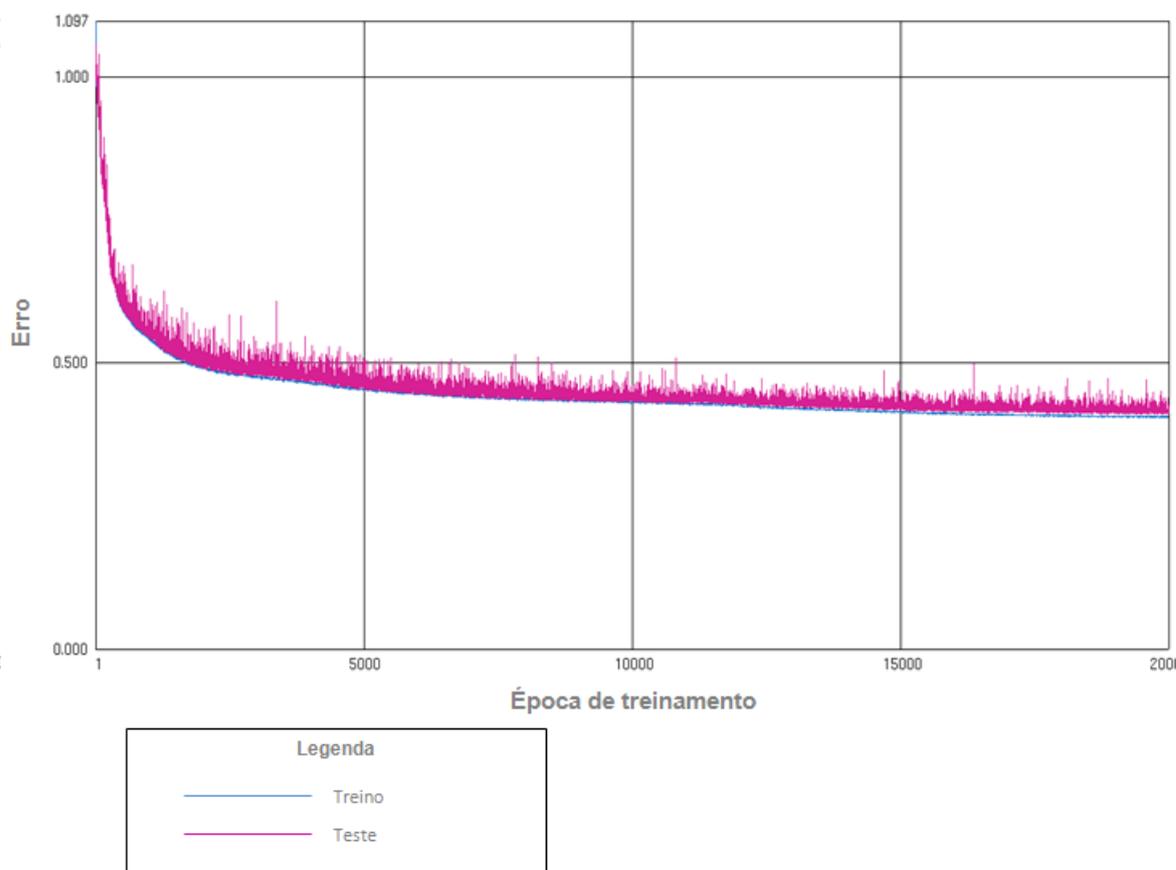


Figura 4.1. Curva de acompanhamento do treinamento e teste do modelo

O treinamento da rede seguiu por 20000 épocas, como mostrado na Figura 4.1. As curvas de teste e treino não apresentaram crescimento. O erro relativo tornou-se constante por volta das 20000 épocas, viabilizando a parada do treinamento.

O modelo predito apresentou os seguintes padrões de treinamento e teste mostrados na Tabela 4.3.

Tabela 4.3. Parâmetros do treinamento do modelo de predição do percentual de carbono no licor verde

	R²	Erro
Treino	0,835	0,407
Teste	0,833	0,409

Na Figura 4.2 é apresentada a curva dos resultados preditos e reais do modelo de predição do percentual de carbono no licor verde, para o conjunto de dados de treinamento.

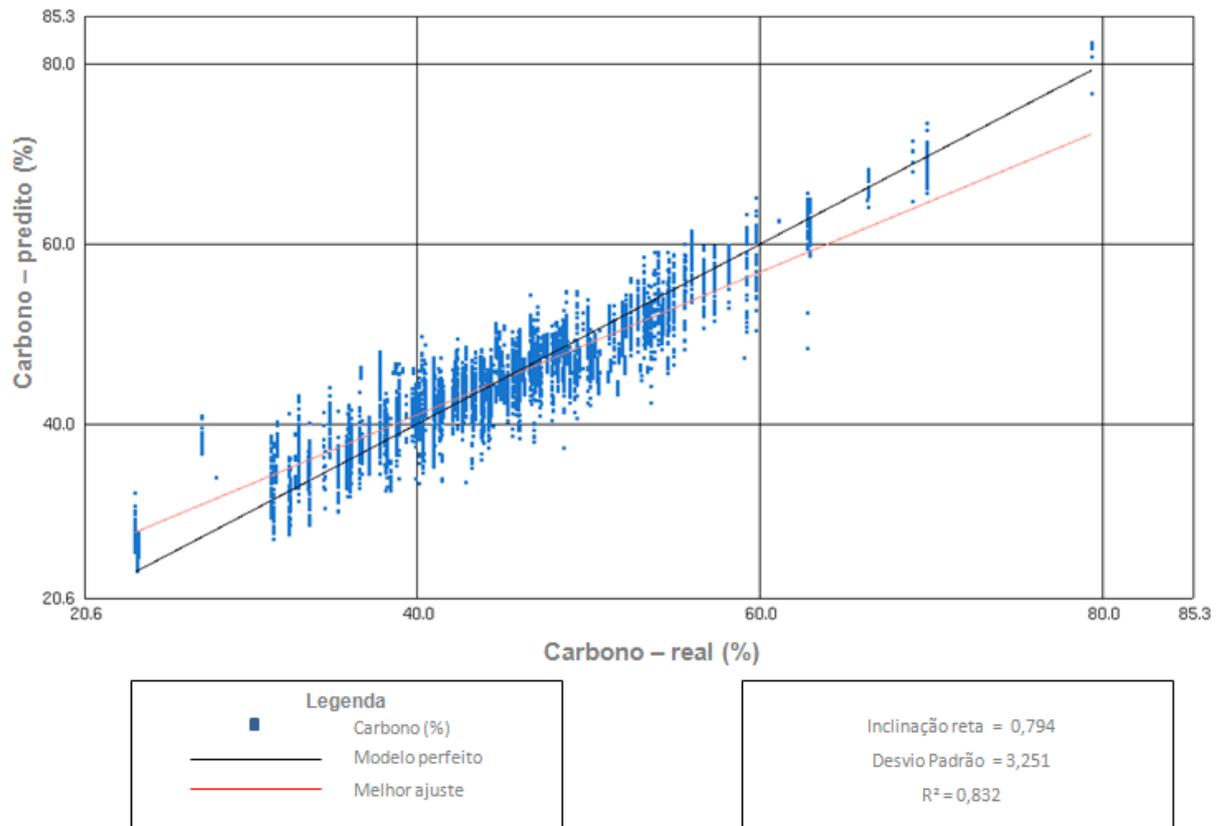


Figura 4.2. Valores preditos versus reais do modelo RNA - treinamento

O gráfico de valores preditos *versus* reais também foi feito para o conjunto de teste, e é apresentado pela Figura 4.3.

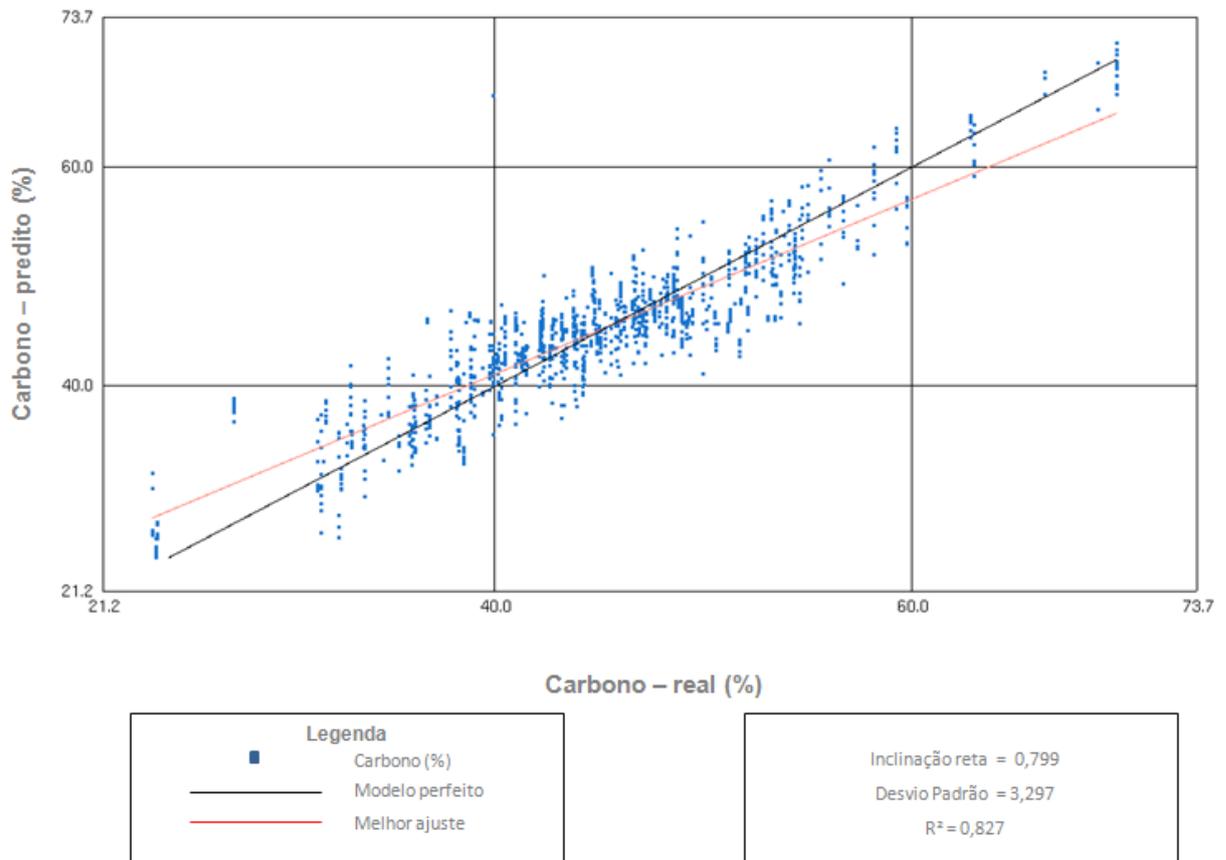


Figura 4.3. Valores preditos versus reais do modelo RNA – teste

As figuras 4.2 e 4.3 mostram que para o conjunto de dados de teste e treino, o modelo proposto está reproduzindo os padrões de comportamento das variáveis.

Para análise do número de variáveis do modelo executou-se análise de sensibilidade, ou seja, a classificação das variáveis com os correspondentes ganhos médios, apresentada na Tabela 4.4 apresenta. Os valores de ganho representam a força de influência de uma variável de entrada na variável de saída do modelo.

Um valor negativo de ganho indica que a valor de saída decresce com o aumento da variável de entrada. Caso o valor seja positivo, o valor de saída cresce conforme aumento da variável de entrada. O ganho médio absoluto é a magnitude de mudança da variável de saída do modelo com o aumento da variável de entrada.

A Tabela 4.4 é representada também de forma gráfica pela Figura 4.4, do maior ganho absoluto (2,081 – vazão de óleo) ao menor ganho (0,079 – residual de oxigênio).

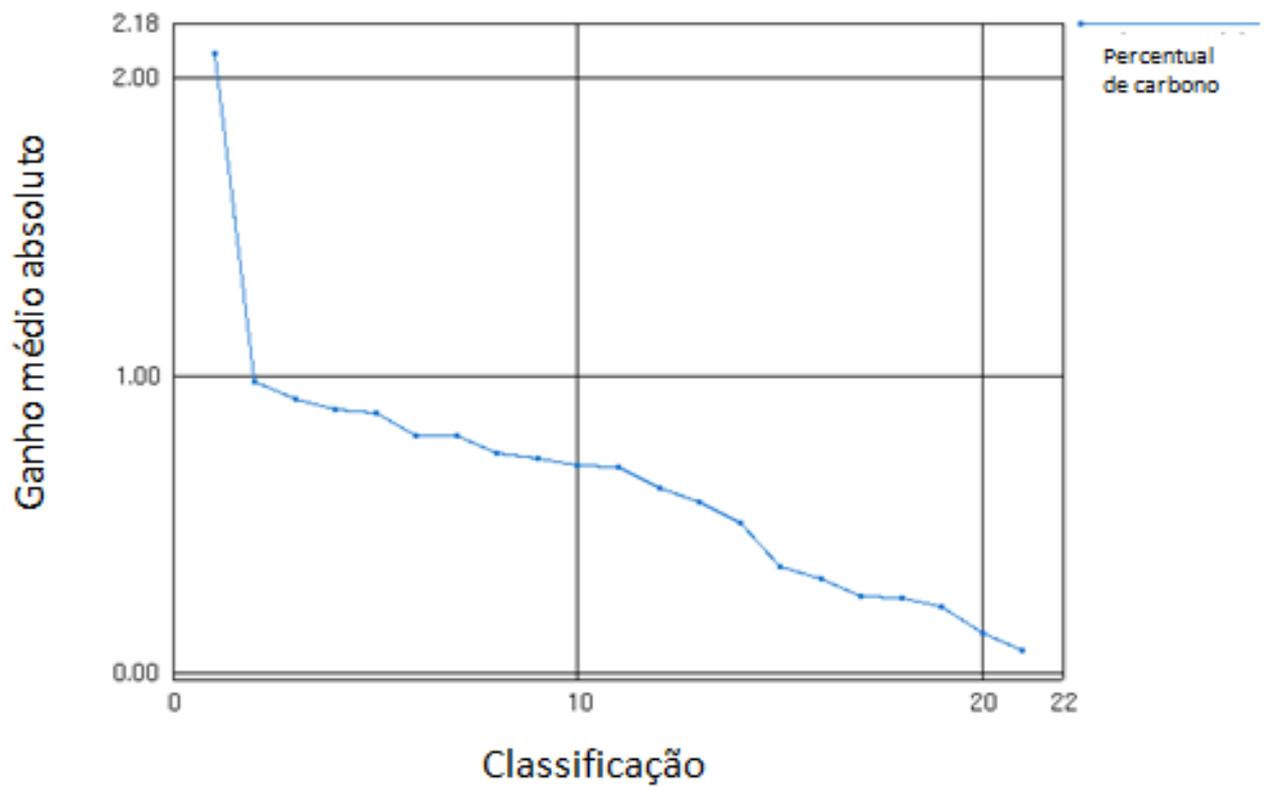


Figura 4.4. Ilustração curvas sensibilidade das variáveis de entrada do modelo do percentual de carbono no licor verde

Tabela 4.4. Classificação das variáveis de entrada do modelo do percentual de carbono no licor verde em função do ganho médio absoluto

Classificação	Entrada	Ganho médio absoluto	Ganho
1	Vazão de óleo	2,081	0,281
2	Temperatura do licor negro	0,979	0,297
3	Vazão de ar terciário	0,921	-0,236
4	TRS	0,885	-0,195
5	Queima da caldeira	0,876	-0,306
6	Concentração licor negro de entrada	0,801	0,123
7	Alcali Efetivo residual	0,797	0,073
8	Eficiência de Redução	0,739	0,178
9	Temperatura do ar primário	0,722	-0,255
10	Temperatura do ar secundário	0,702	0,039
11	Vazão de licor negro para os bocais	0,696	0,394
12	Sulfato de sódio	0,622	-0,132
13	SO ₂	0,576	0,417
14	Pressão do ar terciário	0,507	-0,106
15	Queima de sabão	0,363	0,046
16	Pressão ar secundário	0,316	0,094
17	Vazão ar primário	0,261	0,106
18	Produção de vapor	0,257	0,108
19	Vazão de ar secundário	0,222	-0,030
20	Pressão ar primário	0,135	0,019
21	Residual de Oxigênio	0,079	0,040

Os resultados da Tabela 4.4 demonstra que todas as variáveis tem ganho, e podem ser utilizadas para a formulação do modelo, pois exercem influência nos resultados. Ressalta-se a grande importância das variáveis relacionadas a combustíveis, como óleo e licor negro.

O óleo tem maior influência no ganho. O óleo é adicionado ao processo em momentos de distúrbio. Isso desbalanceia a queima do licor negro, ocasionando uma queima incompleta deste licor, aumentando o percentual de licor negro.

A fim de verificar se o modelo está identificando os padrões, um gráfico de dados preditos e reais foi feito, de forma sobreposta, para todo conjunto de dados (teste, treino e validação) (Fig. 4.5).

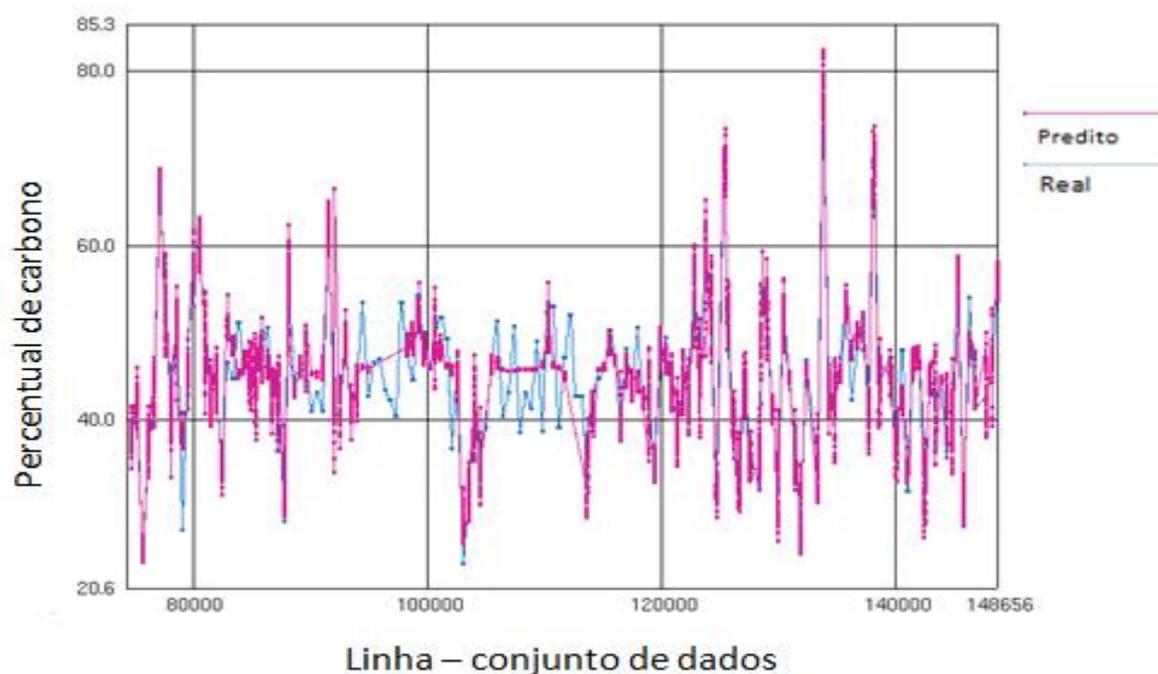


Figura 4.5. Valores sobrepostos reais e preditos pelo modelo

Pela Figura 4.5 é possível verificar que a capacidade do modelo de prever o percentual de carbono no licor verde é reduzida. Tal fato pode ser explicado pela quantidade de dados coletados para formulação do modelo e qualidade dos mesmos.

Normalmente as redes requerem uma grande quantidade de dados para o treinamento. A planta de evaporação da Klabin MA foi modificada no final de

2012, alterando a faixa de concentração do licor utilizado na caldeira de recuperação. A modificação da planta alterou os patamares de trabalho modificaram-se, e foi possível coleta de dados representativos ao processo apenas a partir de dezembro de 2012, reduzindo drasticamente a quantidade de dados disponíveis para a formulação da rede.

A qualidade dos dados também contribuiu para que a capacidade de predição fosse reduzida. Dentre as vinte e uma variáveis de entrada do modelo, duas eram análises laboratoriais (eficiência de redução e álcali efetivo residual), e estas diferiam em periodicidade de análises, gerando um conjunto incompleto de dados. A variável de saída (percentual de carbono no licor verde) também era obtida laboratorialmente, com periodicidade diferente aos dados de processo. Para unificação da periodicidade de coleta de dados para a formulação do modelo, optou-se por repetir o valor da variável de laboratório por um período de tempo de 50 min.

A teoria das redes neurais indica a possibilidade de treinamento com dados contendo ruídos e até com conjunto incompleto de dados, uma vez que a informação é distribuída pelos neurônios, apresentando uma pequena influência. Porém essa influência, para o modelo apresentado neste trabalho foi subestimada. As variáveis de laboratório incorporaram ao conjunto de dados um padrão tendencioso, incorporando a rede este padrão no cálculo do resultado.

A pequena quantidade de dados e a qualidade dos mesmos fizeram com que houvesse uma memorização excessiva da rede, na qual a rede só é capaz de representar bem o conjunto de dados utilizados no treinamento, não generalizando, verificado no gráfico apresentados na Figura 4.5., mesmo usando o método da validação cruzada apresentada na seção 3.1.4. O objetivo do treinamento de uma rede neural não é somente que apresente pequenos erros para o conjunto de treinamento é também que a rede seja capaz de representar bem entradas desconhecidas (SANTOS, 2011).

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

O objetivo desta dissertação foi o desenvolvimento de um modelo utilizando redes neurais artificiais para estimar percentual de carbono no licor verde, a partir de dados reais de queima da caldeira de recuperação da Klabin Monte Alegre. Esta pesquisa foi realizada em colaboração Universidade-Indústria, mostrando a possibilidade de realização de pesquisas acadêmicas de interesse industrial.

A caldeira de recuperação foi alvo deste estudo pela sua importância no processo de recuperação de produtos químicos e pela pouca quantidade de trabalhos relacionados à queima de licor na mesma utilizando modelagem por redes neurais artificiais.

O modelo por redes neurais da queima de licor negro da caldeira de recuperação da Klabin proposto não apresentou um resultado significativo. As variáveis escolhidas na formulação do mesmo apresentaram ganhos significativos, mas deve-se avaliar outras variáveis influentes, para enriquecer o modelo, como temperatura do fundo da fornalha, percentual de matéria orgânica e inorgânica no licor negro.

Os resultados obtidos com a rede mostraram que houve uma memorização excessiva no modelo formulado, em que este acaba decorando as suas respostas frente aos estímulos introduzidos em suas entradas.

Sugere-se para trabalhos futuros aperfeiçoamento do modelo apresentado nesta dissertação, aprimorando ainda mais o banco de dados, tanto no que se refere à periodicidade das análises como quantidade de dados coletados, para que o modelo aprenda os padrões e os reproduza, generalizando-o. Recomenda-se que para os dados coletados com periodicidade diferenciada (análises laboratoriais) uma interpolação seja feita, para que não transmita ao conjunto de dados um padrão tendencioso.

Com o refino do modelo, é possível aplicar a técnica de sensor virtual, substituindo a análise laboratorial de percentual de carbono no licor verde. Esta técnica fornece informação mais rápida à área operacional, contribuindo no poder de decisão na mudança de parâmetros de processo.

6 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ADAMS, T.N., FREDERICK, W.J., GRACE, T.M., HUPA, M., IISA, K., JONES, A.K., TRAN, H. **Kraft Recovery Boilers**. TAPPI Press, New York, 1997. 381 p.
- AGUIAR, Helena Cristina. **Modelagem Digestores Kraft Contínuo: Redes Neurais e Modelos Híbridos**. Campinas: Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2000. Dissertação (Mestrado)
- BARRICHELO, L. E. G., BRITO, J.O. **A utilização da madeira na produção de celulose**. IPEF – Instituto de pesquisas e estudos florestais, 1979.
- BIERMAN, C.J. **Handbook of Pulping and Papermaking**, 2 Ed. Academic Press, 1996.
- DOLDÁN, J. POUKKA, O. SALMENOJA, K. BATTEGAZZORE, M. FERNANDEZ, V. ELUEN, I. **Evaluation of sources and routes of non-process elements in a modern *Eucalyptus* pulp mill**.
- EDGAR, T. F., HIMMELBLAU, D. M., **Optimization of Chemical Processes**, McGraw-Hill Book Co. – Singapore, 1988.
- EK, M.; GELLERSTEDT, G.; HENRIKSSON, G. **Pulp and Paper Chemistry and Technology**. Berlin: De Gruyter, 2009. 2 v.
- EMPIE, H.J. **Fundamentals of the kraft recovery process**. Tappi Press. 2009.
- EMUNDS, R. **Balanço De Elementos Não Processáveis Em Uma Fábrica De Celulose**. Campinas: Universidade Estadual de Campinas, 2010. Dissertação (Mestrado)
- EMUNDS, R. L.; CARDOSO, M.; MENDES, M. D.. **Elementos não processáveis na unidade de recuperação química da produção de celulose Kraft**. *O Papel*, p.53-69, ago. 2006.
- FERREIRA, D.J.O.; CARDOSO, M.; PARK, S.w.. **Gas Flow analysis in a Kraft recovery boiler**. *Fuel Processing Technology*, Belo Horizonte, p.789-798, 2010.

- FERREIRA,D.J.O. CARDOSO,M. PARK, S.W. **Gas Flow Analysis In A Kraft Recovery Boiler**. *Fuel Processing Technology*, 2010
- GARCIA, D. **Análise do comportamento de marmorização de cartão revestido usando modelagem matemática em redes neurais**. Curitiba: Curso Engenharia Química. Universidade Federal do Paraná, 2010. Dissertação (Mestrado).
- GONTARSKI, Carlos Alberto Ubirajara.. **Avaliação da utilização de redes neuronais aplicadas a processos químicos** Campinas: Curso de Engenharia Química, Unicamp, 2000. Tese (Doutorado).
- GREEN, R. P.; HOUGH, G. **Chemical Recovery in the Alkaline Pulping Processes**.3 Ed. Tappi Press, 1992.
- GU, Y. EDWARDS, L. **Prediction Of Metals Distribution In Mill Process, Part 3 Of 3: NPE Management In Kraft Chemical Recovery**. *TAPPI*. 2002
- GULLINCHSEN, J.; FOGELHOLM, C.; **Chemical Pulping – Papermaking Science and Technology – Book 6**. Fapet Oy. 1999.
- HAYKIN, S. **Redes Neurais: princípios e práticas**. 2 Ed. Porto Alegre, Brasil, Bookman, 2001.
- HOLIK, H. **Handbook of pulp – Vol. 2**. HILEY-VCH, 2006.
- HU, Y.H., HWANG, J. **Handbook of neural network signal processing**. CRC Press, 2002.
- IPT – INSTITUTO DE PESQUISAS TECNOLÓGICAS DO ESTADO DE SÃO PAULO S.A. **Celulose e Papel: tecnologia de fabricação da pasta celulósica**. São Paulo: IPT, 1988.
- LOPES, Luiz Gustavo Dias. **Uma contribuição para análise de componentes principais em otimização de múltiplas respostas sob condição de incerteza**. Itajubá: Engenharia de Produção, Universidade Federal de Itajubá , 2011. Dissertação (Mestrado)
- MANSKINENA, K., NURMESNIEMIB, H., PÖYKIÖC, R. **Total And Extractable Non-Process Elements In Green Liquor Dregs From The Chemical**

- Recovery Circuit Of A Semi-Chemical Pulp Mill.** *Chemical Engineering Journal*. 2010.
- MARTINELLI, Sérgio. H. S. **Detecção De Defeitos Em Caldeiras De Recuperação Química.** Maringá: Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Maringá, 2008. Tese (Doutorado).
- MATIAS, Diana Vanessa Saraiva. **Análise do potencial de valorização dos resíduos de licor verde da indústria de pasta de papel.** Coimbra: Curso de Engenharia do Ambiente, Faculdade de Ciências e Tecnologia da Universidade de Coimbra, 2012. Dissertação (Mestrado).
- METSO. **Treinamento de processo – Caldeira de recuperação.** Apostila técnica. Metso. 2013.
- MILANEZ, A.F. **Caracterização da concentração de íons nos sistemas de produção industrial de celulose e de recuperação química.** *O Papel*. 2007.
- MONTANHESE, M. **Green Liquor Filtration At Aracruz Celulose Mill: Causticizing And Effluent Close-Up, Pilot Plant And Practical Results.** *International Chemical Recovery Conference*, 1998.
- MORAIS, Jácina Tábita Gurgel. **Análise De Componentes Principais Integrada A Redes Neurais Artificiais Para Predição De Matéria Orgânica.** Salvador: Curso de Engenharia Industrial, Universidade Federal da Bahia, 2011. Dissertação (Mestrado).
- MOTTA LIMA, O. C. PEREIRA, N.C. DEGANUTTI, F. **Study of the multicylinder drying section of the Klabin-PR MP-7 paper machine,** *TAPPI JOURNAL*, 2005.
- NEVALAINEN A. **Opportunities in Green and White Liquor Handling Towards Mim-Concept,** *Minimum Effluent Mills Symposium Proceedings*, 1997.
- PATAN, K.; PARISINI, T. **Identification of a neural dynamical models for fault detection and isolation: the case of a real sugar evaporation process.** *Journal of Process Control*. 2005.
- PERRY, H. R., CHILTON, C. H., **Perry's Chemical Engineers's Handbook**, 8 Ed., McGraw-Hill, 2008.

- PIOTTO, Zeila Chittolina. **Eco-eficiência na Indústria de Celulose e Papel - Estudo de Caso**. São Paulo: Departamento de Engenharia Hidráulica e Sanitária, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2003. Tese (Doutorado).
- POLOWSKI, Natascha Vigdis. **Modelagem E Análise De Digestores Kraft Descontínuo**. Campinas: Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2004. Dissertação (Mestrado).
- QIAN, Y., TESSIER, P.J.C., **Modeling of a Woodchip Refiner Using Artificial Neural Network**, *Chemical Eng. Technol.*, pp. 337-342, 1995.
- REIPERT, C. F. **Caldeira de recuperação química**. Apostila técnica. AR engenharia. 2000
- RICHARDSON, B. ULOTH, V. LOWNERTS, P. GLEADOW, P. FORGUET, C. HOGIKYAN, R., **Behavior of Non-process elements in the Kraft Recovery System**. *TAPPI*, 1990.
- SACON, V. VENTURA, J. W. HEINRICH, F. **Balço de metais e não metais numa fabrica de celulose Kraft – um conceito para circuito fechado**. ABTCP, São Paulo, 1995.
- SALMENOJA, K. POUKKA, O. BATTEGAZORE, M. **Management of non-process elements in eucalyptus Kraft Pulp Mills**. *Tappi*, 2006.
- SALOVAINEN, K. **O X-filter em ação - O efeito no circuito da cal**. *O PAPEL*, 1999.
- SANTOS, Rejane Barbosa. **Desenvolvimento de modelos neurais para detectar e localizar vazamentos em tubulações transportando gás**. Campinas: Curso de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2011. Dissertação (Mestrado).
- SHRINATH, A.; BUETTNER, C.. **A Review of Issues Related to Green Liquor Quality and approaches towards improved clarification**. ABTCP - Tappi, São Paulo, 2000.
- SILVA, I. N. SPATTI, D. H. FLAUZINO, R. A. **Redes Neurais Artificiais para engenharia e ciências aplicadas**. 1 Ed., Editora Artliber. São Paulo, 2010.

- SILVA, W. L. et al. **Reduction Efficiency Prediction Of Cenibra's Recovery Boiler By Direct Minimization Of Gibbs Free Energy.** *Brazilian Journal Of Chemical Engineering*, Belo Oriente - Mg, v. 25, n. 03, p.603-611, 2008.
- SIXTA, H. **Handbook of Pulp.** 1 Ed., Weinheim, WILEY-VCH, 2006
- SMITH, G. C. **Modeling TRS And SO₂ Emissions From A Kraft Recovery Boiler Using An Artificial Neural Network,** *TAPPI JOURNAL*, 2000.
- SOSA, I. R. H. **Sistemas Multiagentes Para Controle Inteligente Da Caldeira De Recuperação.** São Paulo: Curso: Engenharia Química, Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, 2007. Dissertação (mestrado).
- SVENSSON, J.. **Non-process Elements in the Green Liquor System.**Sweden, 2012.
- TINO, Vicente. **Utilização de análise de componentes principais na regulação de máquinas de injeção plástica.** Rio de Janeiro: Curso de Engenharia Elétrica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2005. Dissertação (Mestrado).
- VENKATESH, V., NGUYEN, X. N., **Evaporation and Concentration of Black Liquor.** In:Green, R. P., Hough, G., *Chemical Recovery in The Alkaline Pulping Processes*, 3a ed., chapter 2,TAPPI Press, Atlanta, USA, 1992.
- VIEIRA, O. **Construção de modelos empíricos e projeto da operação de uma máquina de produção de cartão embalagem.** Rio de Janeiro: Curso Engenharia Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro. 2003. Tese (Doutorado).
- VIEIRA, R. C. & ROISENBERG, M. **Redes neurais artificiais: Um breve tutorial.** Relatório Técnico. Universidade Federal de Santa Catarina. 2003.
- WESSEL, R. A., PARKER, K. L., VERRILL, C. L. **Three-dimensional kraft recovery furnace model: implementation and results of improved black liquor combustion models**

ANEXO I

Questionário de opinião – variáveis que representam melhora na queima de licor negro na caldeira de recuperação 2

Marque com um X as variáveis influentes na queima de licor negro da caldeira 2. Utilize a seguinte escala: (5) influência alta; (4) influência substancial; (3) influência moderada; (2) influencia pequena; (1) sem influência

	1	2	3	4	5
Eficiência de Redução					
Vazão de alimentação de licor negro					
Temperatura do licor negro					
Concentração do licor negro					
Vazão ar 1º					
Vazão ar 2º					
Vazão ar 3º					
Residual de Oxigênio					
Temperatura ar 1º					
Temperatura ar 2º					
Pressão ar 1º					
Pressão ar 2º					
Pressão ar 3º					
Queima de óleo					
Queima de sabão					
Dosagem de sulfato de sódio					
Emissões: Compostos reduzidos de enxofre					
Emissões: SO ₂					
Produção de vapor					
Álcali efetivo residual					
Angulação dos bocais de licor					
Escoamento das bicas					
Matéria Orgânica/inorgânica					

ANEXO II

Property Predictor

O objetivo deste anexo é descrever de forma simplificada o programa Property Predictor versão 8 da Pavilion Technology utilizado para construção da Rede Neural Artificial. Este programa possui ferramentas para o desenvolvimento de modelos lineares e não lineares baseados em dados históricos de processo.

Construção de um modelo RNA

O modelo pode ser usado para analisar um processo, prever o comportamento de um processo ou reconstruir valores de entrada com erro. O tipo do modelo a ser criado depende do uso. Os tipos de modelo que podem ser desenvolvidos pelo software são: modelo para predição, sensor virtual, PCR (principal components regression) e customizado. Para esta dissertação utilizou-se o modelo para predição (Figura A).

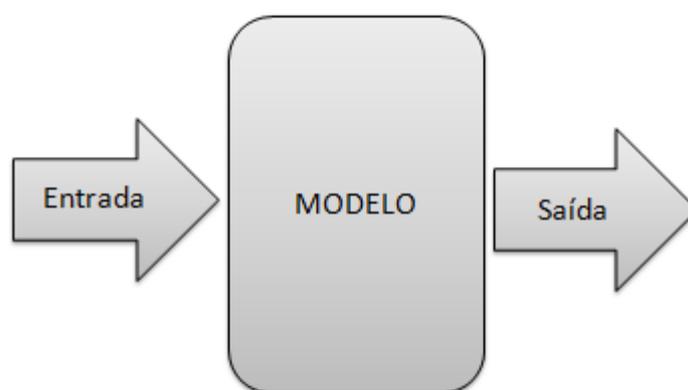


Figura A. Estrutura de um modelo de predição

A seguir serão mostrados os passos de criação de um modelo de predição.

1. Carregue os dados e realize o pré-processamento, retirando dados tendenciosos e com erro;
2. Escolha as variáveis desejadas no modelo e aplique “time delay” para variáveis com atraso. O recurso “time delay” pode ser especificado manualmente ou automaticamente.
3. Opcionalmente é possível editar a conectividade entre variáveis de entrada e saída, aos pares. Cada par, entrada e saída, pode ser relação linear, não linear ou não há relação.
4. Selecione os padrões para teste, treino e validação. Pode-se escolher a quantia de dados para cada fase.
5. Salve o modelo e verifique correlações entre variáveis e estatísticas do modelo. Se necessário altere os padrões (passo 4).

Treinando o modelo:

1. Carregue os dados e o modelo criado.
2. Selecione o tipo de treinamento (regular; stiff). O treinamento regular, utilizado no modelo apresentado nesta dissertação, utiliza o algoritmo backpropagation. O treinamento stiff utiliza algoritmo “Stiff Differential Equation Solver” desenvolvido pela Du Pont.
3. Altere os parâmetros de treinamento (opcional).
4. Inicie o treinamento.
5. O treinamento pode ser acompanhado pelo monitor de treinamento.