



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA**

**ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS**

**UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE**

**PREDIÇÃO DA RESISTÊNCIA À COMPRESSÃO DE UM CIMENTO
INDUSTRIAL UTILIZANDO TÉCNICAS DE REDES NEURAS ARTIFICIAS**

Autora: Fabiola Andrea Chandia Moreno

Orientador: Dr. José Cláudio Moura

**Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como
parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia
Química**

Campinas – São Paulo

Março, 2001

05727150



UNIDADE	32
N.º CHAMADA:	T/UNICAMP
	M815p
V.	Ex.
TOMBO BC/	44919
PROC.	16-39.2/01
C	<input type="checkbox"/>
D	<input checked="" type="checkbox"/>
PREC.º	R\$ 11,00
DATA	26/06/01
N.º CPD	

CM00158102-1

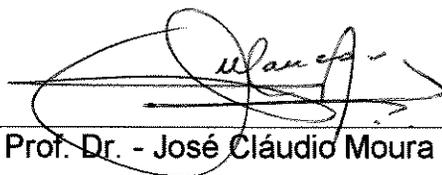
FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA - BAE - UNICAMP

M815p Moreno, Fabiola Andrea Chandia
Predição da resistência à compressão de um cimento industrial utilizando técnicas de redes neurais artificiais / Fabiola Andrea Chandia Moreno. --Campinas, SP: [s.n.], 2001.

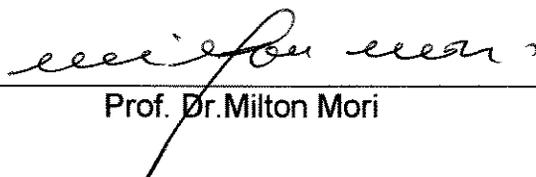
Orientador: José Cláudio Moura.
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Controle de qualidade. 2. Cimento portland. 3. Redes neurais (Computação). 4. Simulação (Computadores). I. Moura, José Cláudio. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.

Dissertação de Mestrado defendida por Fabiola Andrea Chandia Moreno e aprovada em 15 de março de 2001 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. - José Cláudio Moura



Prof. Dr. Milton Mori



Dr. Manoel Araújo Lourenço Telhada

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida pela Engenheira Fabiola Andrea Chandia Moreno e aprovada pela Comissão Julgadora em 15 de março de 2001.



Professor Dr. José Cláudio Moura

Orientador

AGRADECIMENTOS

Ao Senhor Deus pela presença constante em minha vida, iluminando meus caminhos e me ensinando a cada passo dado.

Aos meus maravilhosos pais e irmãos, por todo amor e apoio sempre presentes mesmo que à distância.

Ao professor Dr. José Cláudio Moura pela orientação.

Ao professor Dr. Milton Mori pela confiança e ajuda prestadas para a realização deste trabalho.

À Votorantim Cimentos, em especial aos Engenheiros Herbert Foster, João Jayme e Patrícia, pela grande colaboração prestada e ajuda financeira da empresa.

A minha grande amiga Karla pelas inúmeras sugestões e apoio neste trabalho como também pela sua amizade.

Aos meus amigos e colegas de trabalho Wesley e Fujita pelas discussões em redes neurais, entre outras.

Às meninas (Ana, Xuxa, Dani, Cris, Giovana) e ao Vagner pelo carinho e por me suportarem em momentos de crise.

Ao Cnpq pelo apoio financeiro.

A todas as pessoas que contribuíram de uma forma ou de outra para que este trabalho pudesse ser realizado.

Muito obrigada!!

RESUMO

A indústria de produção de cimento vem crescendo a cada ano e com isso a tendência em se aplicar técnicas que otimizem o seu processo também. O processo de produção de cimento não implica dificuldades maiores, mas como em qualquer indústria, tem os seus problemas devido ao alto consumo de energia e fatos ligados ao controle de qualidade do produto final, o cimento, para a geração do concreto. Principalmente o que diz respeito à Resistência Mecânica à Compressão, que é a principal variável nesse quesito.

A técnicas de redes neurais artificiais podem ser aplicadas a maioria dos sistemas ou processos industriais e tem se tornado uma prática, hoje em dia, realizada com resultados muito satisfatórios. Pela sua facilidade em simular, entre outras características, pode ser utilizada também para se prever e modelar dados industriais referentes ao processo de produção de cimento também.

Neste trabalho é desenvolvido um modelo baseado em computação neural com o objetivo de predição da Resistência Mecânica à Compressão 3 dias (R3), com aproximação suficiente na qual tem-se a grande vantagem de poder antecipar com confiança o tempo para expedição estando o cimento de acordo com as normas, ou então tomar-se as devidas precauções e correções, caso esteja fora.

O modelo otimizado é representado por 15 neurônios na camada de *input*, 17 neurônios na camada intermediária e 1 neurônio na camada de *output*, sendo que para cada um desses neurônios foi utilizada a função de transferência sigmoideal e algoritmo de *backpropagation* para a correção dos pesos com auxílio da estrutura Delta bar Delta para a atualização dos pesos.

Desse modo chegou-se a resultados satisfatórios com a utilização dos dados fornecidos pela empresa e com o uso das técnicas estatísticas de apoio e as técnicas de redes neurais artificiais para a modelagem do sistema.

ABSTRACT

The industry of cement production has been growing each year and with this the trend in applying techniques that also optimize its process. The process of cement production does not imply bigger difficulties, but as in any industry, it has its problems due to the high consumption of energy and represents the quality control of the final product, the cement, for the generation of the concrete. Mainly in respect to the Compression Strength, which is the main variable that indicates the quality of the cement

The techniques of artificial neural networks can be applied the industrial majority of the systems or processes and if have become practical one, nowadays, carried through with very satisfactory results. By its easiness in simulating, among others characteristic, it can also be used to predict and shape referring industrial data to the process of cement production.

In this work a model based on neural computation with the objective of prediction of the Compression Strength is developed in 3 days (R3), with enough approach in which had great advantage of being able in accordance with to anticipate with confidence the time for dispatching being the cement the norms, or then to be overcome the due precautions and corrections, in case that it is it are.

The optimized model is represented by 15 neurons in the layer of input, 17 neurons in the intermediate layer and 1 neuron in the layer of output, that for each one of these neurons it was used the function of sigmoidal transference and algorithm of back propagation for the correction of the weights with aid of the structure Delta bar Delta for the update of the weights. In this mode it resulted satisfactory with the use of the data supplied for the company and with the use of the statistical techniques of bracket was arrived and the techniques of artificial neural networks the modelling of the system.

SUMÁRIO

Índice por capítulos

Lista de Figuras

Lista de Tabelas

Nomenclatura

Capítulo 1

Introdução

1.1 Motivação deste trabalho	1
1.2 De Capítulo em Capítulo	2

Capítulo 2

Revisão Bibliográfica

2.1 Cimento	4
2.1.1 A história do cimento	5
2.2 A fabricação do cimento	7
2.2.1 Matérias-primas	7
2.2.2 O processo típico da fabricação do cimento	10
2.2.3 O processo industrial <i>versus</i> energia	13
2.2.4 O clínquer e suas características	15

2.2.5 Tipos de cimento	18
2.3 Moagem do cimento acabado	21
2.3.1 Estocagem	25
2.3.2 Silos	25
2.4 O controle da qualidade do produto final	26
2.4.1 Parâmetros de Monitoração	27
2.4.2 Resistência Mecânica	28
2.5 Redes Neurais Artificiais	31
2.5.1 Introdução	31
2.5.2 Um breve histórico	32
2.5.3 Redes neurais biológicas	33
2.5.4 Redes neurais artificiais	35
2.5.4.1 Aprendizagem	37
2.5.4.2 Mapeamento não-linear multivariado	37
2.5.4.3 Comparação entre RNA e o ajuste polinomial	40
2.5.4.4 Funções erro e treinamento da rede	41
2.5.5 Perceptron multi-camadas (MLP)	41
2.5.5.1 Arquitetura do perceptron multi-camadas	42
2.5.6 Algoritmos de treinamento	44
2.5.6.1 Algoritmo backpropagation	46
2.5.7 RNAs aplicadas a processos químicos	50

2.6 Teste de Hipóteses	51
2.6.1 Introdução	51
2.6.2 Decisões Estatísticas	51
2.6.3 Erros do Tipo I e II	52

Capítulo 3

Materiais e Métodos

3.1 Ferramentas Computacionais	54
3.2 Metodologia	54
3.2.1 Pesquisa Bibliográfica	54
3.2.1.1 Locais de Amostragem	55
3.2.2 Pré-processamento dos dados	55
3.2.2.1 Determinação da igualdade estatística dos parâmetros	56
3.2.2.2 Detecção de <i>outliers</i>	57
3.2.2.3 Determ. dos parâm. a serem utilizados para a pred de R3	57
3.2.3 Desenvolvimento do modelo	58
3.2.3.1 Números de amostras e parâmetros	58
3.2.3.2 Divisão de dados de treinamento, validação e teste	59
3.2.3.3 Determinação da topologia da rede	59
3.2.3.4 Treinamento e teste da rede	60
3.2.3.5 Integração do modelo	61

Capítulo 4

Resultados e Discussões

4.1 Tratamento inicial dos dados	62
4.2 Igualdade Estatística	65
4.3 Conjunto final de dados	67
4.4 Treinamento	67

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões

5.1 Conclusões	72
5.2 Sugestões	73

LISTA DE TABELAS**Capítulo 2**

Tabela 2.1 Matérias-primas do cimento Portland e seus componentes	7
Tabela 2.2 Compostos do clínquer	16
Tabela 2.3 Tipos de cimento atualmente definidos pelas normas da ABNT	18
Tabela 2.4 Especificações químicas de cimentos Portland	20
Tabela 2.5 Aplicações para os diversos tipos de cimento	21

Capítulo 4

Tabela 4.1 Variáveis estudadas e seus valores máximo e mínimo	63
Tabela 4.2 Relação dos valores de p referente às variáveis de <i>input</i>	66
Tabela 4.3 Configurações das redes treinadas	68

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 Diagrama simplificado da fabricação de cimento	11
Figura 2.2 Relação dos componentes do clínquer com a resistência	17
Figura 2.3 Processo de moagem do cimento na Fábrica Rio Branco	23
Figura 2.4 Neurônio biológico	33
Figura 2.5 Modelo de McCulloch-Pitts	35
Figura 2.6 Algumas funções de ativação	36
Figura 2.7 Esquema de uma função não linear mapeada a partir de um conjunto de variáveis de <i>input</i> x_1, \dots, x_d e um conjunto de variáveis de <i>output</i> $\hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_c$.	38
Figura 2.8 Estrutura de uma rede neural simples	43
Figura 2.9 Estrutura de uma rede neural contendo uma camada intermediária	43
Figura 2.10 Desenho esquemático da superfície da função erro $E(w)$	45

Capítulo 3

Figura 3.1 Pontos de coleta e análise na rotina de controle de qualidade da moagem e expedição do cimento	55
---	----

Capítulo 4

Figura 4.1 Dispersão das variáveis início e fim de pega	65
Figura 4.2 Esquema simplificado de uma rede neural do tipo <i>backpropagation</i>	67
Figura 4.3 Efeito do número de neurônios na camada intermediária no índice de correlação do conjunto de treino e teste	69
Figura 4.4 R3 dias medida versus estimada utilizando a técnica de RNA	70

Figura 4.5 Correlação entre a R3 medida e estimada pelo método RNA 71

Referências Bibliográficas 75

NOMENCLATURA

A	Alumina
Al_2O_3	Óxido de alumínio %
C	Óxido de cálcio
C_2S	Silicato de dicálcio
C_3S	Silicato de tricálcio
C_3A	Aluminato de tricálcio
C_4AF	Alumino Ferrito de tetracálcio
E	Função Erro
F	Óxido Férrico
Fe_2O_3	Óxido Férrico %
FSC	Fator de Saturação da Cal
g	função de ativação
k	valor de iteração de saída da rede
K_2O	Óxido de Potássio %
m	ordem de um polinômio
MA	Módulo de Alumínio
Mg	Óxido de Magnésio Livre
MgO	Óxido de Magnésio %
MS	Módulo de Sílica

Na_2O	Óxido de Sódio %
p	valor obtido do Teste de Hipóteses
q	valor padrão da rede
R	índice de correlação
S	Sílica
SiO_2	Óxido de Silício %
SO_3	Gesso %
Tanh	função de ativação tangente hiperbólica
x_0	<i>input</i> extra (bias)
x_i	variáveis de entrada
y_i	variáveis de saída
w_i	peso de cada neurônio
α	intervalo de confiança com Erro tipo I associado
$\nabla E(w)$	vetor gradiente da função erro

INTRODUÇÃO

1.1 Motivação deste trabalho

Nas últimas décadas as indústrias de cimento e de processo mineralógico sofreram um crescimento fenomenal, tanto no tamanho de planta de processo empregado como também na taxa de produção de produtos de alta qualidade, com plantas modernas, capazes de produzir mais de um milhão de toneladas de cimento por ano.

Com referência particular ao cimento, não é nenhum exagero dizer que com a combinação de certas adições é formado o concreto, e que se tornou o material de construção mais popular e versátil do mundo.

O objetivo da produção de cimento é produzi-lo dentro dos limites impostos pelo material analisado e pela economia do processo, onde a qualidade é exigida pelo mercado.

A qualidade do cimento é avaliada pelo seu desempenho como um material aglutinante na combinação com a água. Envolve um número de propriedades importantes para os usuários do cimento dentro das quais está a Resistência à Compressão Mecânica desenvolvida, que é normalmente a mais importante.

Uma nova e emergente aproximação à representação do conhecimento que imita a arquitetura de distribuição adaptativa do cérebro humano, chamado de Redes Neurais Artificiais (RNAs), provém da técnica alternativa de analisar problemas (HOSKINS, J. C. and HIMMELBLAU, D.M., 1988). Elas possuem a propriedade de - uma vez apresentadas a um conjunto de entrada e saída- "aprender" as relações que estiverem implícitas entre os dados contidos nesse conjunto.

De acordo com AGUIAR (2000), devido à falta de conhecimento profundo sobre a teoria por trás de várias propriedades do processo, o desenvolvimento de um modelo baseado em redes neurais parece ser uma alternativa interessante. As redes neurais vêm sendo utilizadas nos mais diversos ramos devido às suas características de aprendizagem.

Elas são capazes de mapear complicadas relações de causa-efeito, sem requerer profundo conhecimento teórico, através de um treinamento com vários exemplos desta relação.

Este presente trabalho tem como objetivo a verificação da aplicabilidade das técnicas de Redes Neurais Artificiais nas etapas finais do processo de fabricação de cimento, da Fábrica de Cimento Rio Branco – Rio Branco do Sul, PR, Votorantim Cimentos, pertencente ao Grupo Votorantim,

O estudo está focalizado na predição da Resistência à Compressão em 3 dias de cura em relação aos parâmetros de controle de qualidade, praticados pela empresa e determinados através de ensaios químicos e físicos. O sistema a ser isolado corresponde desde o cimento acabado até a expedição do mesmo (ensacamento).

1.2 De Capítulo em Capítulo

O Capítulo 1 expõe a motivação e interesse no desenvolvimento de um modelo de redes neurais para a indústria do cimento.

O Capítulo 2 está dividido em três tópicos; primeiro contém a revisão bibliográfica sobre o processo de produção de cimento e suas características globais no país e no mundo, em segundo a revisão das técnicas de redes neurais artificiais, em terceiro a técnica estatística do Teste de Hipóteses. Descreve desde a obtenção das matérias-primas, do processo em si e das relações de componentes no cimento em questão que afetam ou não na Resistência à Compressão de 3 dias, como também uma introdução, histórico e particularidades das técnicas de redes neurais e Teste estatístico de Hipóteses.

O Capítulo 3 é dedicado à metodologia aplicada para a obtenção do melhor modelo encontrado através das técnicas de redes neurais realizadas para a predição em questão.

O Capítulo 4 é destinado aos resultados obtidos, bem como o tratamento inicial dos dados, relações estatísticas e os valores dos dados fornecidos pelo setor de controle de

qualidade da fábrica. Encontra-se também a topologia da rede neural que melhor se ajusta aos dados e a discussão de cada passo para sua otimização desses resultados.

O Capítulo 5 traz a conclusão da tese, onde é relatado como os objetivos foram alcançados. Algumas sugestões também são apresentadas e discutidas para futuros trabalhos.

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo é apresentada a revisão bibliográfica em relação ao sistema estudado e modelado, detalhando-se as características globais do processo de fabricação do cimento produzido e a estocagem para expedição do mesmo.

Inicia-se o relato com o processo de produção do cimento que envolve várias etapas, todas com consumo intensivo de energia, seja para a geração de calor, ou para acionamento de motores elétricos. E em seguida, são focalizados os parâmetros de qualidade que influenciam na Resistência à Compressão na fabricação do cimento. Após, é detalhada a técnica de modelagem de Redes Neurais Artificiais, para o pré-processamento dos dados e modelagem, incluindo as equações matemáticas, e suas características gerais.

2.1 CIMENTO

O cimento é normalmente definido como sendo um aglomerante hidráulico constituído basicamente de óxidos de cálcio, silício, alumínio e ferro, em certas proporções que quando misturados com água, endurece, tanto exposto ao ar como submerso. Em relação a outros aglomerantes hidráulicos, o cimento se distingue por apresentar mais elevada Resistência Mecânica à Compressão (de acordo com as normas internacionais, nunca inferior a 250 N/mm²).

O cimento, como produto final para uso, é apresentado sob forma de diversas misturas que constituem os diversos tipos, cada um com características específicas conforme o tipo de aplicação. O componente principal dos diferentes tipos de cimento assim obtidos é o clínquer Portland. É da composição química e cristalina do clínquer, que derivam as propriedades aglomerantes e hidráulicas dos diferentes tipos de cimento. O segundo componente essencial dos diferentes tipos de cimento, é o sulfato de cálcio, que comercialmente pode ser encontrado sob diversas formas no gesso natural e artificial. A

adição do gesso é necessária para regular o processo de pega do cimento. Um outro grupo de componentes, como por exemplo, calcário puro, escória de alto forno, cinzas volantes, pozolanas naturais ou artificiais, podem estar presentes nos cimentos, formando os diversos tipos de cimento definidos por norma peculiar, tendo cada um suas características próprias. Estes componentes contribuem em geral para melhorar algumas propriedades específicas do cimento.

2.1.1 A história do cimento

Na antigüidade, os egípcios usavam gesso impuro calcinado como material aglomerante. Já os gregos e romanos usavam calcário calcinado. Uma evolução na utilização do calcário foi a inclusão de cal, areia, pedra moída e água, o que deu como resultado a utilização do primeiro concreto.

O concreto de cal usado na antigüidade não endurecia sob a água. Mais tarde, porém, descobriu-se que misturando-se cinza vulcânica à cal, havia o desenvolvimento da propriedade de endurecimento em submersão, dando como resultado o desenvolvimento do cimento pozolânico.

Até onde se sabe, os romanos antigos foram os primeiros a fabricar um cimento deliberadamente como produto. Encontraram isso misturando certos tipos de pedras de cal impuras combinadas ao carvão em um forno e calcinando-se a mistura a uma temperatura elevada (processo conhecido hoje como clínquerização) foi possível obter um produto que possuía propriedades superiores comparadas a uma cal comum queimada. O que fez do cimento ser superior foi a sua resistência à água, na qual poderia endurecer-se.

Na idade média houve um retrocesso geral na qualidade e usos do cimento. No século XVIII ocorreu um pequeno desenvolvimento no campo do cimento, através da utilização de pedras e argilas calcinadas pelos romanos.

Josef Aspdin, mediante a queima de uma mistura de argila e rocha calcária moída até que todo o CO₂ se desprendesse, obteve um produto que pulverizado tinha a

propriedade de enrijecer-se muito mais rápido e com resistência muito mais alta que a cal hidráulica. A patente inglesa nº 5022, referente ao processo, foi outorgada pelo Rei Jorge IV em 1824. Estava então estabelecida a base para o que hoje conhecemos como cimento Portland.

A origem do nome “Portland” é devido à semelhança da cor e qualidade do cimento endurecido com a pedra Portland, uma pedra calcária oriunda da Inglaterra.

Porém, no final dos anos 50 e começo dos anos 60 em diante, grandes avanços foram obtidos com o controle do processo global e dos parâmetros que influenciam nesse controle.

O primeiro cimento Portland lançado no mercado brasileiro foi o cimento comum, que corresponde atualmente ao CPI- cimento Portland comum (EB 1/ NBR 5732), um tipo de cimento Portland sem quaisquer adições além do gesso (utilizado como retardador da pega). Ele acabou sendo considerado nas maioria das aplicações usuais como termo de referência para comparação com as características e propriedades dos tipos de cimento que surgiram posteriormente. Foi a partir do amplo domínio científico e tecnológico sobre o cimento Portland comum que se pôde desenvolver outros tipos de cimento, com o objetivo inicial de atender a casos especiais. Com o tempo verificou-se que alguns desses cimentos, inicialmente tidos como especiais, tinham desempenho equivalente ao do cimento Portland comum original, atendendo plenamente às necessidades da maioria das aplicações usuais e apresentando, em muitos casos, certas vantagens adicionais. A partir do resultado dessas conquistas e a exemplo de países tecnologicamente mais avançados, como os da União Européia, surgiu no mercado brasileiro em 1991 um novo tipo de cimento Portland composto, cuja composição é intermediária entre os cimentos Portland comuns e os cimento Portland com adições (alto-forno e pozolânico), estes últimos já estão disponíveis há algumas décadas. Aumentou-se, então a quantidade de cimentos específicos para cada tipo de aplicação.

2.2 A fabricação do cimento

A fabricação de cimento tem como característica um grande consumo de energia, seja na detonação das minas para o recolhimento das matérias-primas, como também na moagem e homogeneização, clinquerização em fornos rotativos, moagem do cimento, etc, etapas que são peculiares para se ter um cimento final desejado pelo cliente.

A indústria de cimento é caracterizada pelo uso intensivo de energia térmica e elétrica. A eficiência energética das fábricas de cimento pode variar de acordo com a mistura de cru ou produção de farinha, tipo de processo produtivo, características dos equipamentos, queima de combustível, nível de automação, etc (CARDOSO e DIREITINHO, 1992).

2.2.1 Matérias-primas

O cimento baseia-se na mistura e calcinação de materiais calcários e argilosos em proporções adequadas. As matérias-primas fundamentais de tais componentes no cimento Portland, são apresentas na tabela 2.1 a seguir.

Tabela 2.1 Matérias-primas do cimento Portland e seus componentes

Componentes	Calcário (%)	Argila (%)
Perda ao Fogo	40,38	7,19
SiO ₂	3,76	67,29
Al ₂ O ₃	1,10	8,97
Fe ₂ O ₃	0,66	4,28
CaO	52,46	7,27
MgO	1,23	1,97
K ₂ O	0,18	1,20
Na ₂ O	0,22	1,51
SO ₃	0,01	0,32

O dióxido de silício ou sílica, SiO_2 , é o mais abundante de todos os minerais e é componente de um grupo vasto de silicatos entre as quais estão as argilas. Está presente nos cimentos em estado de combinação, e é derivado da argila ou xisto utilizado como um material cru. É o componente principal das pozolanas e é usado também na forma de areia como um constituinte da argamassa.

O óxido de alumínio ou alumina, ocorre na natureza como $\alpha\text{Al}_2\text{O}_3$. Em seu estado combinado é um importante constituinte do cimento, devido ao seu caráter ácido, mas como por exemplo, com a sílica, pode ser considerado uma base. Na forma livre hidratado, é misturado com uma porção de óxido férrico e em menores quantidades com óxido de titânio e sílica. É um importante componente dos cimentos de alta-alumina. É constituinte dos cimentos Portland de alta-alumina.

O óxido férrico ou Fe_2O_3 , derivado da bauxita, é um componente de correção para cimentos que requerem esse aditivo para suas especificações. Assim como o óxido de cálcio ou cal, sua maior parte é derivada da decomposição do carbonato de cálcio.

O óxido de magnésio está presente somente em pequenas quantidades no cimento Portland, sendo derivado do carbonato de magnésio presente no calcário original na forma de dolomita, que contém $\text{CaCO}_3 \cdot \text{MgCO}_3$ ou também em pequenas quantidades na argila. Em seu estado puro e não aquecido a uma temperatura muito alta, o óxido de magnésio possui distintas propriedades hidráulicas.

Os álcalis, K_2O e Na_2O , por serem solúveis e reativos estão entre os elementos mais distribuídos na natureza e são encontrados em pequenas quantidades em todos os materiais crus utilizados para a manufatura do cimento.

Componentes sulfurosos são encontrados geralmente na argila contida nos materiais crus usados na manufatura do cimento Portland, enquanto o carvão em pó utilizado para a queima no forno também pode conter enxofre na forma de pirita (FeS_2) e componentes sulfurosos orgânicos que levam à formação de sulfatos.

Compostos como o dióxido de titânio (TiO_2), o pentóxido de fósforo (P_2O_5) e o fluoreto de cálcio (CaF_2) também podem estar presentes para o ajuste do material cru conforme a especificidade do cimento a ser produzido.

Algumas fábricas utilizam produtos artificiais tais como a escória de alto forno, ou o carbonato de cálcio precipitado, subproduto gerado na indústria de álcalis e na de sulfato de amônio sintético.

Como já foi dito, é de grande importância que as matérias-primas utilizadas na fabricação do cimento estejam presentes numa proporção bem definida na mistura que é chamada de farinha, garantindo assim, a obtenção das propriedades desejadas do clínquer.

Com a finalidade de garantir a proporção dos diferentes componentes químicos, utilizam-se nas fábricas algumas relações que orientam a preparação da farinha e definem as características e comportamento da mesma durante a etapa de clinquerização. As principais relações utilizadas são:

■ **Módulo de sílica – MS**

Relaciona a concentração de sílica (SiO_2) com a concentração em peso de Al_2O_3 e Fe_2O_3 , ou seja, a proporção de materiais não-fundentes e fundentes. Os valores praticados pelas fábricas estão entre 2,3 e 2,7.

$$MS = \frac{\text{SiO}_2}{\text{Al}_2\text{O}_3 + \text{Fe}_2\text{O}_3}$$

■ **Módulo de Alumínio- MA**

Relaciona a concentração em peso dos óxidos alumínio e de ferro na farinha, ou seja, a relação entre os 2 principais fundentes. Seu valor têm influência direta na viscosidade da fase líquida. Como referência para o valor de MA podemos citar o intervalo de 1,3 a 1,6.

$$MA = \left(\frac{\text{Al}_2\text{O}_3}{\text{Fe}_2\text{O}_3} \right)$$

■ **Fator de Saturação da Cal – FSC**

Relaciona a concentração em peso de CaO presente na farinha/clínquer com os demais componentes com os quais ele reage. Normalmente seu valor está entre 92 e 96%. Quanto menor a quantidade de CaO e maior a de SiO₂, menor a resistência mecânica do cimento.

$$FSC = \left(\frac{CaO}{2,8SiO_2 + 1,18Al_2O_3 + 0,65Fe_2O_3} \right) \times 100$$

Estas razões expressas acima, são úteis não somente porque estão prontamente ligadas à composição da mistura a serem atingidas, portanto dá-se alguma indicação ou inclinação do potencial de qualidade do cimento, mas também porque estão proximamente associadas à características de clínquerização e ao processo como um todo.

São utilizadas algumas abreviaturas para o melhor entendimento dos produtos obtidos do forno de cimento, tais como:

- CaO – óxido de cálcio = C
- SiO₂ – óxido de silício (sílica) = S
- Al₂O₃ – óxido de alumínio (alumina) = A
- Fe₂O₃ – óxido de ferro = F

2.2.2 O processo típico da fabricação do cimento

O processo de fabricação de cimento é um processo físico-químico de transformação de minerais naturais como o calcário, argila, minério de ferro e areia em uma

mistura de minerais sintéticos que possuem capacidade de reagir com a água e desenvolver propriedades de resistência à compressão. Para um melhor entendimento do processo, podemos dividi-lo em etapas:

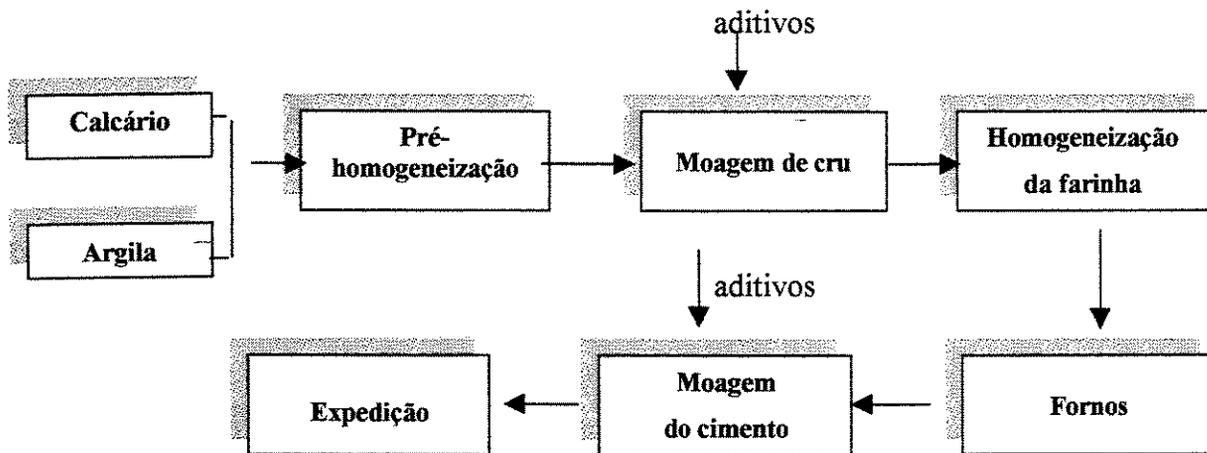


Figura 2.1 Diagrama simplificado da fabricação de cimento

A mineração engloba a etapa de elaboração e validação do banco de dados da mina, onde a finalidade é orientar quais áreas serão exploradas para fornecer o calcário com as características desejadas para o estudo e modelagem da situação topográfica das seções da mina a serem exploradas com a finalidade de execução da malha de furação e detonação para a extração do calcário. Em seguida, o calcário é britado, empilhado e pré-homogeneizado.

Além do calcário, a argila também é extraída e preparada em moinhos de rolos a fim de desaglomerar as partículas. Após britada, passa assim como o calcário por uma pré-homogeneização, em conjunto com o calcário ou em uma pilha independente.

O minério de ferro e demais matérias-primas são adquiridos de terceiros e não sofrem nenhum tratamento preliminar a nível de mineração, sendo alimentado diretamente ao moinho de cru.

A moagem do cru consiste na preparação da mistura crua (farinha), através do tratamento da matéria-prima nos moinhos de bolas e moinhos verticais, para que seja reduzida sua granulometria até cerca de 0,050mm (50micrometros - μm).

A granulometria da farinha tem uma papel muito importante na cinética das reações de clinquerização. Não se pode precisar a granulometria ideal, pois ela varia de material para material, dependendo de suas características mineralógicas e estruturais. As argilas não apresentam problemas de granulação devido ao seu diâmetro inferior a 2 microns. Ao mesmo tempo que o material é submetido à moagem, dá-se sua mistura e secagem.

A etapa de clinquerização, consiste em processar a farinha nos fornos rotativos onde se dá a transformação química dos minerais naturais (farinha) em minerais sintéticos (clínquer).

O clínquer, principal composto na fabricação do cimento, pode ser produzido pelos processos de via-úmida, semi-úmida, semi-seca e via-seca, sendo que a escolha adequada de um destes processos de produção é fortemente influenciada pela composição química das matérias-primas, utilizadas na preparação da farinha. Embora o processo de produção de cimento por via úmida ainda seja utilizado, neste trabalho apenas serão relatados o processo de via-seca.

O clínquer pode ser definido como um produto granulado, obtido por tratamento térmico de uma mistura adequada de calcário e argila até fusão parcial e posterior reação química entre os óxidos de sílica, cálcio, ferro e alumínio. É um produto constituído na sua maior parte por silicatos (75%) e em proporções menores de aluminatos e ferro-aluminatos cálcicos. Os componentes principais do clínquer são o C_3S ($3\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$), C_2S ($2\text{CaO} \cdot \text{SiO}_2$), C_3A ($3\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3$) e C_4AF ($4\text{CaO} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot \text{Fe}_2\text{O}_3$), sendo o C_3S o mais importante uma vez que é o maior responsável pelo desenvolvimento das propriedades de resistência mecânica, do clínquer. Sendo assim, podemos caracterizar a clinquerização como um processo de fabricação de C_3S , onde deve-se garantir que este produto esteja presente na quantidade e qualidade adequadas.

As reações que ocorrem entre os sólidos para a produção do clínquer tem características de difusão iônica. Esta difusão é acelerada com o aparecimento de uma fase líquida superficial, localizada na interface dos grãos e que começa a se formar à temperatura próxima de 1300°C. A velocidade de difusão e a capacidade de clínquerização estão relacionadas à quantidade e à viscosidade desta fase líquida.

O clínquer sai do forno a uma temperatura aproximada de 1200°C e é submetido a resfriamento para que a sua temperatura caia até 100°C aproximadamente. Diversos são os tipos de resfriadores existentes, porém os mais utilizados são os dos tipos satélites e grelhas, sendo estes últimos os mais eficientes.

Na etapa seguinte, a moagem do cimento, o clínquer produzido é moído juntamente com outros materiais denominados aditivos que são: gesso, calcário, escória e pozolanas. Nesta etapa o cimento é produzido segundo as normas de definição e regulamentação do produto.

Finalmente, o cimento é ensacado e expedido, podendo também ser vendido a granel.

2.2.3 O processo industrial *versus* energia

A maior parte da produção mundial do clínquer de cimento Portland, advém atualmente do uso de processo de via-seca, devido às atuais exigências de melhor utilização de energia consumida. Estimou-se um consumo médio de calor de 3600 kJ/kg de clínquer (860 kcal/kg de clínquer), no ano de 1990, e chegou-se ao consumo total de combustíveis no setor, na ordem de 100 milhões de toneladas (equivalentes) de óleo de combustível, que é o combustível típico da indústria cimenteira no mundo.

Devido a grande quantidade de energia consumida pelo setor, este tem merecido especial atenção em muitos países produtores, nos programas de conservação de energia, principalmente naqueles dependentes de petróleo externo.

Sobre as condições de produção industrial, dois importantes consumos específicos de energia existem para caracterizar o processo de via-seca, os quais situam-se na seguinte faixa (HUCKAUF, 1988):

- consumo específico de calor: 3150 a 3770 kJ/kg de clínquer (750 a 900 kcal/kg de clínquer);
- consumo específico de energia elétrica: 100 a 1130 kWh/ton de cimento.

O uso eficiente de energia na indústria de cimento deve levar em conta a redução do consumo de energia térmica na produção do clínquer, que se considerado em termos de tonelada de cimento Portland produzido, representa de 70 a 78% do consumo total de energia. Medidas para reduzir este consumo específico de calor tem merecido prioridade. O consumo de energia elétrica na preparação e moagem do cru e na moagem do cimento, são também de particular importância na conservação de energia, pois representam juntas 73% do consumo total de eletricidade em uma fábrica de cimento. Até início dos anos 70, o desenvolvimento da tecnologia para a produção de cimento ficou centrada no aumento da capacidade produtiva dos fornos e no crescimento de suas dimensões geométricas (LUDERA, 1998). A partir daí, grande modificação na tendência de construção dos fornos foi verificada, pela introdução de novas tecnologias, bem como pelo surgimento de novos fatores de mercado.

Sob o estímulo de um apreciável aumento nos preços dos combustíveis derivados de petróleo a partir de 1973, dois grandes desenvolvimentos tecnológicos ganharam destaque, desde a segunda metade da década de 70 (SILVA, 1988):

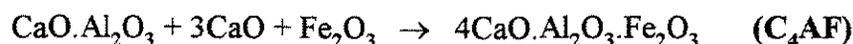
- melhoramento na tecnologia de calcinação;
- uso de combustíveis sólidos e residuais.

O avanço verificado no desenvolvimento do processo de via-seca foi alcançado, devido aos esforços para se obter uma efetiva utilização do calor residual contido nos gases de saída do forno e no clínquer, dentro do próprio sistema e também através da utilização do calor residual dos gases de exaustão em um sistema externo.

Na procura por menores consumo de energia térmica na produção de cimento, bem como por características específicas destinadas a alguns tipos de aplicações, surgiram alternativas para a produção de cimento Portland, misturando-se ao clínquer durante a moagem, materiais com características aglomerantes, denominados de adições ativas. Estas adições, além de trazerem economia para a produção de cimento pela substituição de parte do clínquer, permitem o aproveitamento de sub-produtos de outros setores, notoriamente do setor siderúrgico e termoelétrico, dando origem a cimentos com características mais adequadas e alguns tipos de aplicações. Os cimentos Portland compostos, por exemplo, com teor de escória de alto-forno entre 6 e 34% mais carbonato de cálcio, numa percentagem de até 10%, são indicados para obras de grandes volumes de concreto, com geração de calor de hidratação numa velocidade menor do que o cimento Portland comum. Estas adições podem apresentar uma economia de até 1380 kJ/kg de cimento, se considerada que o total de adição neste cimento pode atingir até 44%.

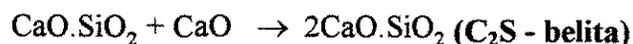
2.2.4 O clínquer e suas características

A partir da temperatura de 600°C no forno começam a ocorrer ligações entre os diferentes óxidos formados pela decomposição das argilas e dos carbonatos. Destas combinações iniciais vão se formar, a partir dos 800°C, o aluminato tricálcico e o ferrialuminato tetracálcico conforme as seguintes reações:



Todas estas reações se realizam em estado sólido e são portanto muito lentas. Sua velocidade dependerá do tamanho das partículas da farinha e da temperatura no forno. Nesta fase se forma também o C_2S , em quantidade superior à encontrada no clínquer uma

vez que ele posteriormente reagirá com a cal livre (em meio de fase líquida), para formar a alita (C_3S).



Através das reações químicas, em estado sólido, tem-se também:

- $CaO + SO_3 \rightarrow CaSO_4$ = sulfato de cálcio
- $CaO + C_2S \rightarrow 3 CaOSiO_2 = C_3S$ (alita)

Os compostos do clínquer podem ser visualizados na tabela, abaixo:

Tabela 2.2 Compostos do clínquer

<i>Fórmula</i>	<i>Nome</i>	<i>Símbolo</i>
$2CaO.SiO_2$	Silicato de dicálcio	C_2S
$3CaO.SiO_2$	Silicato de tricálcio	C_3S
$3CaO.Al_2O_3$	Aluminato de tricálcio	C_3A
$4CaO.Al_2O_3.Fe_2O_3$	Aluminoferrito de tetracálcio	C_4AF
MgO	Óxido de magnésio livre	Mg

Fonte: Manual Técnico Cimento Itaú – Grupo Votorantim

A base do cimento é o clínquer ou mais especificamente os quatro minerais do clínquer, C_3S , C_2S , C_3A e C_4AF , os quais constituem de 95-100% do clínquer. A capacidade deles reagirem que determina as propriedades ligantes do cimento Portland. Embora esses minerais reajam de maneira semelhante com a água, as taxas de reação deles diferem imensamente influenciando nas propriedades de resistência dos produtos de hidratação. A quantidade relativa dos quatro minerais é de importância fundamental para as propriedades do cimento.

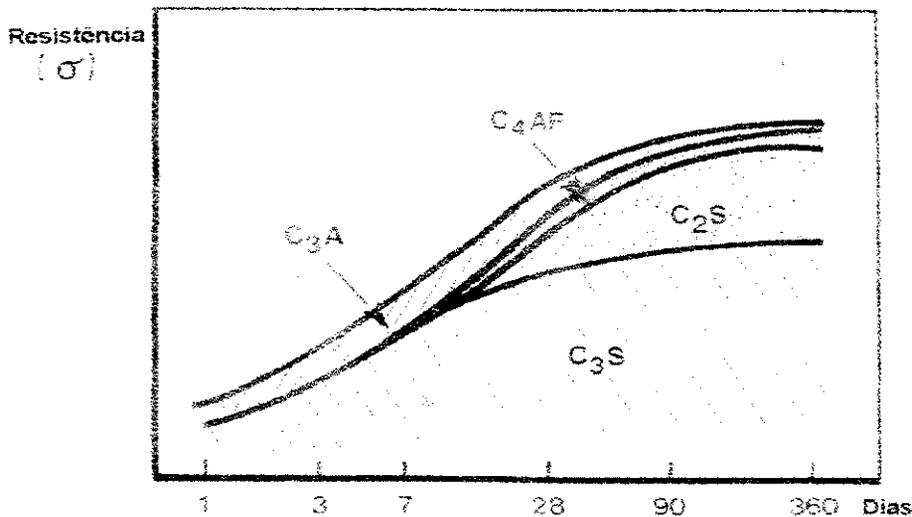


Figura 2.2 Relação dos componentes do clínquer com a resistência - FLSmidth

A Figura 2.2 mostra como os componentes do clínquer contribuem para o desenvolvimento da resistência de acordo com dados experimentais. A pequena quantidade restante consiste de sulfatos de álcalis, CaO livre e MgO.

CaO livre e MgO podem afetar a expansibilidade se presentes em grandes quantidades, mas desde que eles não causem expansão destrutiva, eles não têm influência direta no desenvolvimento da resistência do cimento. Por outro lado, um alto teor de CaO livre é normalmente uma indicação de clínquer mal queimado e isto será associado a um baixo conteúdo de C_3S e possivelmente a altos conteúdos de álcalis; então um alto teor de cal livre está na maioria das vezes indiretamente associado à queda nas propriedades da resistência.

2.2.5 Tipos de cimento

Cimento Portland é um produto que se obtém pela pulverização do clínquer constituído essencialmente por silicatos de cálcio hidráulicos, a que não se fizeram adições subseqüentes à calcinação, somente a de água e/ou a de sulfato de cálcio bruto, além de outros materiais, que podem ser intercominuídos com o clínquer, em teor que não exceda a 1%, à vontade do fabricante. A tabela 2.3 a seguir, mostra diversos tipos de cimento de acordo com as normas brasileiras, ABNT:

Tabela 2.3 Tipos de cimento atualmente definidos pelas normas da ABNT

TIPO	SIGLA	CLASSES	Clinker + Sulfato de Cálcio (%)	Escória Granul. de Alto Forno (%)	Material Pozolânico (%)	Material Carbonático (%)
Cimento Portland Comum	CP-I	25	100		0	
		32				
		40				
Cimento Portland Escória	CP-II-E	25	94 - 56	6 - 34		0 - 10
		32				
		40				
Cimento Portland Zircão	CP-II-Z	25	94 - 76		6 - 14	0 - 10
		32				
		40				
Cimento Portland Fumo	CP-II-F	25	94 - 90			6 - 10
		32				
		40				

Cimento Portland de Alto Forno	CP-III	25 32 40	65 - 25	35 - 70		0 - 5
Cimento Portland Pozolânico	CP-IV	25 32	85 - 55	-	15 - 40	0 - 5
Cimento Portland De Alta Res. Inicial	CP-V-ARI		100 - 95			0 - 5
Cimento Portland Resistente a Sulfatos	<p><u>São considerados cimentos resistentes a sulfatos:</u></p> <p>Cimentos CP-I e CP-II cujo teor de C₃A no clínquer é ≤ 8,0%.</p> <p>Cimento CP-III com teor de escória > 60,0%.</p> <p>Cimento CP-IV com teor de pozolana ≥ 25,0%</p> <p>Cimentos que comprovadamente indicam resistência a Sulfatos serão designados pela sigla original de seu tipo, acrescida de "RS".</p> <p>Ex. CP-I-S-32-RS, CP-III-32-RS</p>					

Fonte: Apostila de cimento das indústrias Votoran 2000

As especificações químicas em relação aos componentes químicos presentes na formulação de cada tipo de cimento Portland e podem ser vistas na Tabela 2.4 a seguir; que foram especificadas de acordo com as Associação Brasileira de Normas Técnicas(ABNT), ASTM (EUA) e CEE (Comunidade Econômica Européia).

Tabela 2.4 Especificações químicas de cimentos Portland:

Brasil (ABNT)					EUA (ASTM)	CEE
Tipo	Composição(%)				Tipo *	Tipo **
	Clínquer + sulfato de cálcio	Escória granulada	Material			
			Pozolânico	Carbonático		
CPI	100	-	-	-	-	I
CPII - S	100-95	-	-	0-5	-	-
CPII - F	94-100	-	-	6-10	II	II/(A ou B)
CPII - E	94-56	6-34	-	0-10	II	(S,D,P,Q)
CPII - Z	94-76	-	6-14	0-10	II	V,W,T ou L)
CPIII	65-25	35-70	-	0-5	IV, V	III/(A,B,C)
CPIV	85-45	-	15-50	0-5	IV, V	IV/(A ou B)
CPV – ARI	100-95	-	-	0-5	III	-

Fonte: Manual Técnico, Cimento, Cal e Argamassa, pertencente ao Cimento Itaú

*I - Para uso quando propriedades especiais especificadas não são "cobertas" por outros tipos;

II - Para uso geral, mais especificadamente quando moderada resistência ao sulfato ou moderado calor de hidratação é desejado;

III - Para uso quando alta resistência inicial é desejada;

IV - Para uso quando baixo calor de hidratação é desejado;

V - Para uso quando alta resistência ao sulfato é desejada.

** As composições variam bastante com relação às %' s de clínquer e aditivos, sem fazer referência ao sulfato de cálcio. Além disso, há especificações para outros tipos de cimento sem similares aos do Brasil e EUA.

Como foi visto nas tabelas anteriores, cada cimento possui a sua especificidade e composição, da qual a sua aplicação também pode ser considerada específica, como pode ser visto na Tabela 2.5, onde 1-possível utilização, 2 - indicado, 3 - mais indicado.

Tabela 2.5: Aplicações para os diversos tipos de cimento

Aplicações		Tipos de Cimento						
		CPI	CPII			CPIII	CPIV	CPV
			CPI-S	F	E			
		Comum	Composto			AF	Pozolânico	Ari
Aplicações	Peculiaridade							
Fundações	Resistência ao meio agressivo	1	1	3	3	2	2	-
Estrutura	Desforma a curto prazo	2	1	1	1	-	-	3
	Aderência/Plasticidade	1	1	1	1	1	1	3
Assentamento	Resistência a curto prazo	2	1	1	1	-	-	3
Artefatos	Resistência ao meio agressivo	-	-	1	1	3	3	-
Tubos concreto								
Concreto protendido	Alta resistência inicial	2	1	1	2	-	-	3
Obras marítimas	Resistência a cloretos e sulfatos	--	-	2	2	3	3	-
	Baixas temperaturas	-	1	2	2	3	3	-
Barragens								
Concreto projetado	Aderência	1	1	1	1	1	1	1
Argamassa armada		1	1	1	1	1	1	1

2.3 Moagem do cimento acabado

O último passo no processo de produção de compostos de cimento é a moagem final do clínquer com uma pequena quantidade de gesso (3-4%) junto com outros dois componentes em quantidade menor para produzir o pó de cimento multi-componente a fim

de atingir a área superficial específica e a resistência requeridas (HOSTEN and AVSAR, 1998).

O gesso (sulfato de cálcio hidratado) age com um elemento regulador (retardador) da pega. A maioria dos cimentos é produzida em moinho tubulares enchidos parcialmente com bolas de aço, onde o clínquer é resfriado e é geralmente moído com gesso natural ou com gesso sintético obtido como subproduto na indústria química. A carga da moagem média é tipicamente de 1/3 da carga necessária para se encher completamente o moinho e o material que vai sendo moído é acumulado no próprio moinho até o nível necessário para se encher os espaços vazios entre as bolas.

Moinhos de cimento são geralmente divididos dentro de um número de câmaras internas pelo encaixe dos diafragmas e variam em tamanho com uma potência entre 1000 e 6000 KW com uma produção de 25-150 t/h. Os moinhos maiores são mais atraentes devido ao seu baixo custo de capital total mas requerem um espaço maior para uma certa produção.

O cimento que é produzido é proveniente das três fábricas existentes na Fábrica de Rio Branco, de acordo com a Figura 2.3. Cada fábrica produz um tipo ou alguns tipos de cimento de acordo com o pedido do cliente. A Fábrica I, hoje em dia produz somente o cimento comum CPI e o cimento composto CPII-F, sendo que os 4 silos existentes têm a capacidade máxima de estoque de 3200, 4700, 4700 e 4700 toneladas respectivamente. Sendo que o estoque total das Fábricas I, II e III é em torno de 83550 toneladas.

A produção de cimento mensal proveniente dos moinhos de cimento gira em torno de 249725 toneladas por mês, sendo que o moinho Z5 que produz o cimento composto estudado CPII-F, possui uma produção mensal de 32314 toneladas por mês em quase 660 horas trabalhadas.

Os moinhos de rolos têm se tornado bem estabelecidos como um método de crescimento na capacidade de moagem final em circuitos no moinho de bolas. Um pré-moedor vertical é similar ao conceito da seção de moagem dos moinhos verticais de rolos concomitantemente utilizado na moagem de materiais crus e combustíveis sólidos. A pré-moagem é normalmente designada para operar parte da descarga do material recirculado à entrada. A recirculação do material direciona a um leito fixo mais denso o trajeto da moagem e resulta em uma operação mais suave no moinho, havendo então um grande

aumento na capacidade do moinho de bolas. Sem recirculação, uma instalação de pré-moagem pode aumentar a taxa de produção de um circuito de moinho de bolas acima de 30%. Com recirculação, o aumento cresce para 60%. O desenvolvimento de novas tecnologias para a moagem do clínquer durante 10 e 15 anos dá à indústria do cimento uma variedade de opções para o aumento do poder da moagem. (MELICK, 1997).

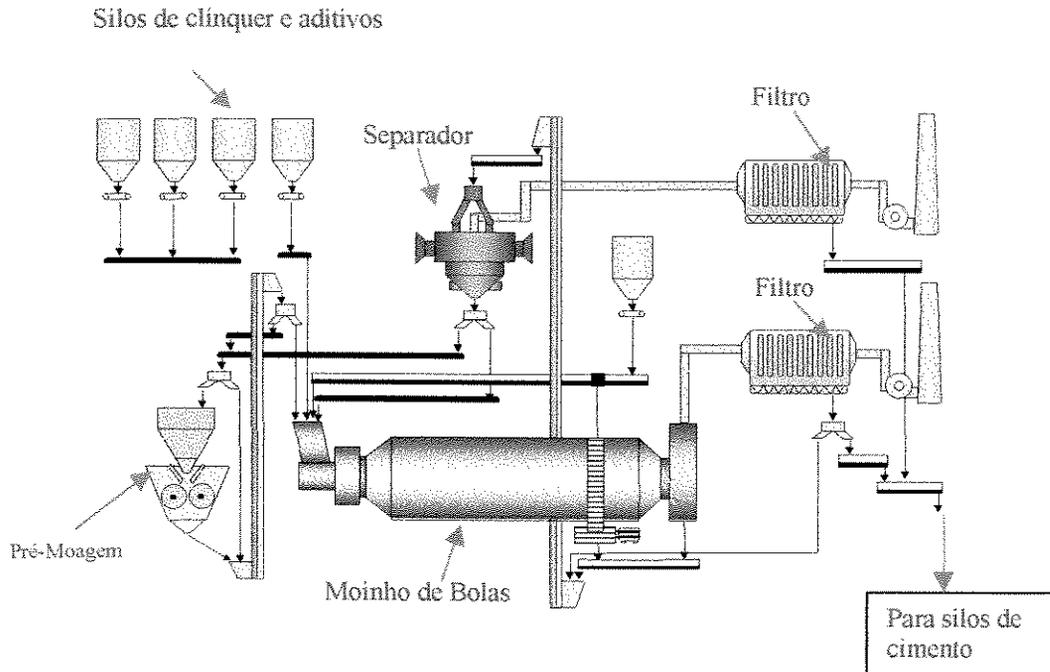


Figura 2.3: Processo de moagem do cimento na Fábrica Rio Branco

Sistemas que utilizam uma pré-moagem tal como o moinho de rolos ou uma prensa de rolos de alta pressão têm sido amplamente empregados nos últimos anos no processo final da moagem do cimento. Em ambos os sistemas, um moinho tubular é instalado em um estágio após o circuito de moagem e é utilizado exclusivamente para moagem fina. Entretanto, na maioria dos sistemas atuais as especificações para o moinho tubular não mudaram dos sistemas já existentes sem uma pré- moagem. É desejável que as

especificações do moinho tubular (bolas) devam ser atualizadas a fim de otimizar a eficiência da energia de cominuição.

Os principais componentes da moagem do cimento são:

- Clínquer;
- Calcário Aditivo;
- Escória e,
- Gesso.

O calcário aumenta a finura e o Blaine (análise física de medida de superfície específica) e reduz o custo.

A escória é utilizada para aumentar a resistência do cimento, reduzir a temperatura, reduzir o custo e também para ter uma moabilidade menor.

Os aditivos de moagem são substâncias que visam melhorar a fluidez, evitam a formação de *coating* (colagem) e reduzem a carga estática.

Das propriedades do cimento, tais como a sua resistência e o *set up*, dependem da distribuição do tamanho de partícula. Para um resultado, é necessário alcançar um controle melhor dessa distribuição, especialmente na região fina, sem redução da eficiência da energia de cominuição (ITO; SUTOH; MATSUDA, 1996).

O problema em questão, ou seja, avaliação e predição tem algumas tentativas já relatadas na literatura e para se determinar uma lei para esta predição de resistências mecânicas, na base de dados de mistura, nem sempre tem-se sucesso. Resistências mecânicas podem ser prontamente obtidas pelos concretos com tamanhos das partículas idênticos onde somente o tipo de cimento, proporções e razão H₂O/cimento se modifica. Entretanto, se estes são desejados para se predizer as resistências dos concretos que têm diferentes valores dos tamanhos de partículas dos parâmetros relatados, diferentes diâmetros de agregados máximos, tamanho das classes com frações de diferente peso, etc, aí se torna mais difícil encontrar a solução (LAI, and SERRA, 1997).

Normalmente após o cimento deixar o moinho ele será estocado por um período de tempo até ele ser usado. Neste período algumas mudanças podem ser introduzidas como vapor e CO₂ do ar. O processo de estocagem não é então levado em consideração devido a esse período de mudanças que podem ocorrerem serem muito imprevisíveis e não fazendo parte da rotina de produção de cimento.

2.3.1 Estocagem

O fator mais importante na produção de cimento de alta qualidade está na composição química e mineralógica do clínquer de cimento, mas isso não é o suficiente para assegurar um cimento de boa qualidade.

Após o clínquer ter deixado o forno, um número de diferentes operações são necessárias antes do consumidor receber o cimento:

- Moagem do clínquer com o gesso;
- Estocagem do cimento (e clínquer);

Transporte.

2.3.2 Silos

Se o cimento tem uma temperatura a cerca de 70°C ou abaixo, normalmente não ocorrerá nenhum problema durante a estocagem no silo.

Se a temperatura do cimento é cerca de 110°C ou acima, quando deixar o moinho, a temperatura - sem um resfriador de cimento- diminuirá somente cerca de 5°C durante o transporte a ainda estará muito alta quando o cimento entrar no silo.

O calor do silo de cimento é removido do cimento por ventilação de ar através das paredes do silo de cimento. Entretanto medições indicam que este resfriamento do cimento é um processo muito lento. Isto significa que a temperatura do cimento. Estará entre 5 - 10°C da temperatura que tinha quando entrou no silo, mesmo após 3-4 semanas de estocagem!

A estocagem em muito silos é portanto caracterizada por:

- Alta temperatura: $>70^{\circ}\text{C}$, sem nenhum contato com o lado externo.

A alta temperatura significa que o gesso estará desidratado, se isto não tiver acontecido no moinho. O sistema fechado significa que a água produzida pela desidratação do gesso fica no silo e a pré-hidratação ocorrerá.

Neste trabalho, essas ocorrências não serão levadas em conta devido a não periodicidade da mesma e também pelo fato das amostras analisadas serem estatisticamente iguais como será relatado adiante.

2.4 O Controle da Qualidade do produto final

O objetivo da produção de cimento é produzi-lo dentro dos limites impostos pela análise do material e pela economia do processo, atendendo a qualidade exigida pelo mercado. A qualidade do cimento é avaliada pelo seu desempenho como um material aglutinante na combinação com a água. Envolve um número de propriedades importantes para os usuários do cimento. Entre essas propriedades, a Resistência Mecânica à Compressão desenvolvida é normalmente a mais importante. Propriedades como o tempo de pega e expansibilidade são consideradas de importância secundária, e devem ser mantidas dentro dos limites de segurança recomendados.

As exigências da qualidade são normalmente formuladas em padrões de especificações que dão as características ao cimento que melhor preenchem a esses

padrões. As exigências especiais aparecem de solicitações de clientes ou como resultado da competição do mercado.

Para garantir o controle dessas propriedades, deve-se conhecer os parâmetros, tanto de composição do clínquer como do processo produtivo, que governam as propriedades do cimento acabado. Neste trabalho será focalizada a composição do cimento acabado, o cimento composto, CII-F.

As características do cimento estão relacionadas com as propriedades da matéria-prima- clínquer e gesso- modificadas pelas mudanças introduzidas nestes materiais no processo de moagem e estocagem.

2.4.1 Parâmetros de Monitoração

As condições de qualidade do produto final no cimento são influenciadas por vários parâmetros, dos quais são abordados neste trabalho, análises químicas e físicas, realizadas em Laboratório de Controle de Qualidade. Estas são baseadas na operacionalidade do sistema de moagem e expedição do cimento produzido, referente ao cimento composto CII-F, que interferem na Resistência Mecânica à Compressão de 3 dias do cimento estudado que deverá ser predita através das técnicas de Redes Neurais Artificiais. As informações fornecidas devem ser realistas e incluir as características do processo em foco para melhor predição do modelo.

Os principais parâmetros seguem abaixo:

- **Peneiras # 200 e #325 (retido):** ensaio físico realizado para a determinação da finura das partículas;
- **Blaine:** ensaio físico para a medida da superfície específica (cm^2/g);
- **Água de consistência:** ensaio físico realizado para se ter a relação massa água e massa cimento para a consistência normal de cimento;

- **Início e Fim de pega:** ensaios físicos realizados conjuntamente com a água de consistência através do tempo necessário para endurecimento do cimento;
- **% SiO₂:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% Al₂O₃ :** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% Fe₂O₃:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% CaO :** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% MgO:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% K₂O:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% Na₂O:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% SO₃:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% Resíduo insolúvel:** análise química para a determinação de resíduos insolúveis no cimento;
- **% CO₂:** análise química para a determinação desse composto no cimento;
- **% Perda ao fogo:** análise física para a determinação de carbonatos liberados na queima do clínquer de cimento.

2.4.2 Resistência Mecânica

A principal função do cimento é a de dar resistência mecânica ao concreto. Por este motivo, uma das principais preocupações durante a fabricação do cimento é a de que ele, uma vez pronto, seja capaz de endurecer e atingir uma determinada resistência mecânica mínima. O ensaio é executado com uma argamassa bem definida no que diz respeito a: traço, quantidade de água e proveniência e granulometria da areia. Nessa fase,

esta argamassa pode ser considerada como um concreto em escala reduzida, um micro-concreto.

Os corpos de prova executados com a argamassa padrão são submetidos a um carregamento numa prensa até o ponto de romper e a força empregada para levá-los à ruptura é a medida da capacidade do cimento de suportar cargas quando está formando parte de um concreto. Para uniformizar a maneira de expressar esta força é preferível utilizar o conceito de resistência que revela a força por unidade de área que a argamassa é capaz de suportar até o instante da ruptura.

Quando se aplica a qualquer corpo sólido uma força que tende a encurtá-lo, esta força é denominada força ou carga de compressão, que é medida em quilograma-força, kgf e a área em centímetros quadrados, cm^2 . A quebra, ou ruptura como é normalmente chamada, do corpo se dá quando ele não é mais capaz de suportar a carga que lhe está sendo aplicada. Assim, conclui-se que todo corpo sólido é capaz de suportar um carregamento limite, o qual uma vez ultrapassado, promove sua ruptura.

Esta capacidade de suportar uma carga crescente até o momento da ruptura é chamada de resistência aos esforços solicitantes. Cada corpo é capaz de resistir a diversos esforços como: tração, flexão, compressão, etc. Trataremos aqui apenas o que diz respeito aos esforços de compressão. Dizemos então que a tensão de compressão de um corpo será a força aplicada dividida pela área do corpo de prova.

A eleição do método de controle da resistência estipulado na norma do cimento foi feita considerando vários pontos de vista e levou ao uso de provetas manuais, que não requeriam demasiada quantidade de materiais, com as quais se podia determinar tanto a resistência à compressão quanto à flexotração, facilidade de compactação da mistura, e escolha de uma relação água/cimento (a/c) que se encontre dentro do campo freqüentemente empregado nas obras. Estas eram as exigências principais requeridas para selecionar o método a seguir para o controle da resistência.

Selecionou-se para a cura das provetas o procedimento de imersão em água, que mesmo que seja diferente do que realmente se aplica nas construções ou indústrias, permite obter condições constantes de umidade e de temperatura, indispensáveis quando se necessita obter resultados reproduzíveis no controle da resistência. Na realidade os valores

obtidos mediante a aplicação da norma representam dados comparativos. Assim, tais valores não implicam que no concreto vão se obter resistências iguais, mesmo quando neste último se empregue a mesma relação a/c utilizada nas provetas.

Neste trabalho a Resistência à Compressão de 3 dias será abreviada por R3.

2.5 REDES NEURAIIS ARTIFICIAIS

2.5.1 Introdução

Uma nova e emergente aproximação à representação do conhecimento que imita a arquitetura de distribuição adaptativa do cérebro humano, chamado de redes neurais artificiais (RNAs), provém da técnica alternativa para solucionar problemas (HOSKINS e HIMMELBLAU, 1998).

Desde os anos 80, há um crescimento muito grande em relação ao nível de atividades de pesquisa em redes neurais, acompanhados pela extensiva cobertura da imprensa popular. Enquanto muitos pesquisadores têm se esforçado para desenvolvimento dos princípios fundamentais e novos algoritmos, existe também um crescimento em direção às aplicações práticas. Realmente, nos últimos anos o assunto tem sido amadurecido ao ponto em que numerosas aplicações práticas estão sendo utilizadas como rotina.

De acordo com Braga, a solução de problemas através de Redes Neurais Artificiais é bastante atrativa, já que a forma como estes são representados pela rede e o paralelismo natural inerente à arquitetura das RNAs criam a possibilidade de um desempenho superior aos dos modelos convencionais. Em RNAs, o procedimento usual na solução de problemas passa inicialmente por uma fase de aprendizagem, em que o conjunto de exemplos é apresentado para a rede, a qual extrai automaticamente as características necessárias para representar a informação fornecida.

As redes neurais oferecem um poderoso conjunto de ferramentas para a resolução de problemas no reconhecimento de padrões, processamento de dados, e controle não-linear, que podem ser considerado como complemento para essas aproximações mais convencionais.

A seguir será apresentado um breve histórico e uma descrição detalhada dos usos e aplicações das técnicas de RNAs e o desenvolvimento matemático que as envolvem.

2.5.2 Um breve histórico

A origem das redes neurais artificiais, ou computação neural, vêm dos anos 40 com a publicação do trabalho de McCulloch e Pitts, *A Logical Calculus of Ideas Immanent in Nervous Activity*, onde é apresentada uma discussão sofisticada de redes lógicas de neurônios e novas idéias sobre máquinas de estados finitos, elementos de decisão limiar lineares e representações lógicas de várias formas de comportamento e memória.

Em 1949, com a publicação do livro *The Organization of Behaviour* por Hebb, em que ele propôs um mecanismo específico para aprendizagem em redes neurais, baseado nas conexões sinápticas biológicas. Mostrou a plasticidade da aprendizagem de redes neurais através da variação dos pesos de entrada dos neurônios.

Widrow e Hoff sugeriram uma regra de aprendizado, conhecida como regra de Widrow-Hoff, ou regra delta, que é ainda bastante utilizada. É baseada no método do gradiente para minimização do erro na saída de um neurônio com resposta linear.

No final da década de 50, Rosenblatt publicou o trabalho: *Principles of Neurodynamics*, que apresentou a estrutura de um perceptron, uma unidade de reconhecimento de padrões que é a base do neurônio de uma rede neural.

Em torno de 1969, Minsky and Papert publicaram o livro *Perceptrons* onde expunha as limitações de um perceptron isolado. Tal trabalho, adicionado ao alto custo computacional da época desestimulou os pesquisadores e as agências de financiamento a investirem em redes neurais, fazendo com que na década de 70 apenas aplicações com reconhecida eficácia, tais como reconhecimento de imagens, fossem desenvolvidas. Em 1998, Bizzoti e Carvalho utilizaram a técnica em navios provenientes das Marinhas do Brasil e dos Estados Unidos visando atingir a máxima performance com a utilização de dois sistemas: *multilayer perceptrons* e o *radial basis function*, atingindo resultados bastante satisfatórios.

Um dramático ressurgimento na década de 80 fez com que o interesse nas redes neurais artificiais aumentasse devido à publicação de importantes trabalhos tais como o da

energia de aproximação de Hopfield, *Neural Networks and Physical Systems with Emergent Collective Computational Abilities*, e o algoritmo de aprendizagem de retro-propagação (*backpropagation*) para perceptrons de múltiplas camadas primeiramente proposto por Werbos, modificado várias vezes, e então popularizado por Rumelhart e McClelland após a publicação do livro de dois volumes *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition*, em 1986.

A combinação desses fatores, acoplados com as falhas da Inteligência Artificial, conduziu a uma explosão do interesse na computação neural.

A década de 90 foi caracterizada por uma consolidação dos fundamentos teóricos do assunto assim como pelo seu sucesso em aplicações práticas, ocasionado pelo aumento do poder de cálculo dos microcomputadores e estações de trabalhos ('workstation') e redução do custo dos mesmos. Tenta-se, então, compensar o período de estagnação nesta área de pesquisa.

2.5.3 Redes neurais biológicas

O cérebro humano é conhecido como a estrutura mais complexa e sabe-se que representa um dos mais difíceis desafios à ciência.

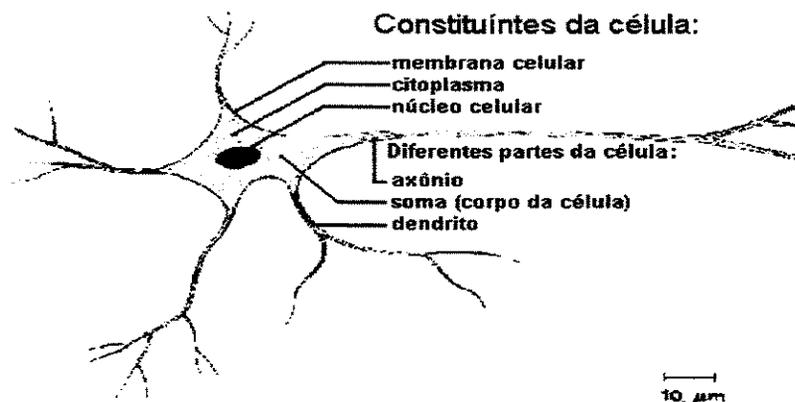


Figura 2.4 Neurônio Biológico

Contém cerca de 10^{11} células eletricamente ativas chamadas de neurônios. Eles existem em grande variedade de formas diferentes, embora tenham características comuns como indicado na Figura 2.3.

Como o próprio nome indica, as redes neurais artificiais são técnicas computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura neural de organismos inteligentes, numa tentativa de imitar o funcionamento do cérebro humano. São formadas por unidades básicas que buscam copiar a forma de ligação dos neurônios no cérebro humano.

Os neurônios agem através de um impulso elétrico (chamado de potencial de ação) que propaga do corpo da célula ao longo do axônio. Quando este sinal alcança uma sinapse, que corresponde à comunicação entre os neurônios, há o deslizamento dos transmissores neuro químicos que correm à junção sináptica para o próximo neurônio, representado na Figura 2.3. Dependendo do tipo de sinapse, o sinal pode aumentar (sinapse excitante) ou diminuir (sinapse inibidora). Cada sinapse tem um peso associado que determina a magnitude do efeito de um impulso no neurônio pós sináptico, essa conexões podem ser visualizadas na Figura 2.5. Cada neurônio, assim, computa um somatório dos pesos de entrada dos outros neurônios.

Uma propriedade para ambos tipos de redes neurais, tanto biológica como artificial, é a sua habilidade de modificar respostas como um resultado da exposição a sinais externos. Isso é geralmente referido como aprendizagem, e ocorre através das mudanças nos pesos das sinápses.

A ramificação dos dendritos provém de um conjunto de *inputs* ao neurônio, enquanto o axônio age como um *output*. Cada neurônio tipicamente faz conexões a muitos milhares de outros neurônios, tanto que o número total de sinápses no cérebro excede a 10^{14} . Embora cada neurônio seja um sistema de processamento de informação relativamente lento o paralelismo massivo do processamento de informação em muitas sinápses simultaneamente conduz a um potencial no processamento efetivo que excede aos supercomputadores de hoje em dia (BISHOP, 1994).

2.5.4 Redes neurais artificiais

A RNA é um instrumento computacional que tenta imitar o sistema de aprendizagem do cérebro humano. A propriedade chave dos sistemas neurais biológicos e artificiais está na sua habilidade de modificar respostas como um resultado de exposição a sinais externos. Isto é geralmente citado como aprendizagem e ocorre através da mudança da força das sinápses.

O neurônio artificial, proposto por MacCulloch e Pitts (1943), apresentado na Figura 2.5 pode ser considerado como uma função não linear que transforma um conjunto de variáveis de *input* x_i , ($i = 1, \dots, d$) em um conjunto de variáveis \hat{y} . Para distinguir um neurônio biológico do artificial, algumas vezes este último será chamado de unidade de processamento.

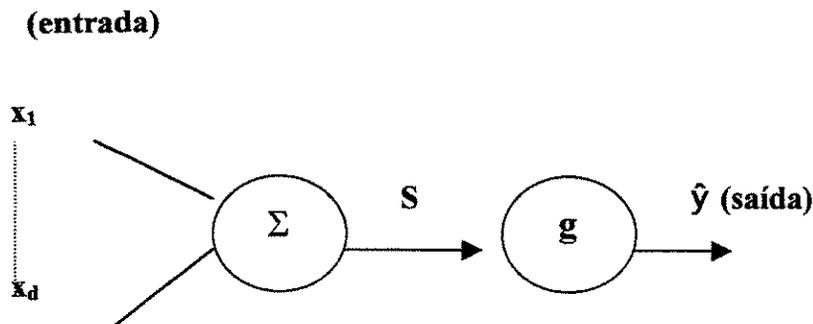


Figura 2.5: Modelo de McCulloch-Pitts.

No modelo de McCulloch-Pitts o sinal x_i do *input* i é primeiramente multiplicado por um parâmetro w_i conhecido como peso (que é análogo à intensidade sináptica do neurônio biológico) e é então somado a todos os *input* pesados para dar o *input* total para a unidade na forma

$$S = \sum_{i=1}^d w_i x_i + w_0, \quad (1)$$

onde o parâmetro de deslocamento w_0 é chamado de *bias* (e corresponde à descarga limite em um neurônio biológico). Formalmente, o *bias* pode ser considerado como um caso especial de um peso de um *input* extra cujo valor x_0 é permanentemente mantido em +1. Assim, pode-se escrever a equação (1) na forma

$$S = \sum_{i=0}^d w_i x_i, \quad (2)$$

onde $x_0 = 1$. Como os pesos e os *bias* podem apresentar qualquer sinal, as sinápses podem ser excitadoras ou inibidoras. O *output* \hat{y} da unidade é então dado pela operação sobre uma função de ativação g , assim

$$\hat{y} = g(S). \quad (3)$$

Algumas funções de ativação são apresentadas na Figura 2.6. O modelo original de McCulloch-Pitts usou a função degrau mostrada na Figura 2.6 (a). Na prática, a função sigmoideal (c) tem sido a função de ativação mais utilizada.

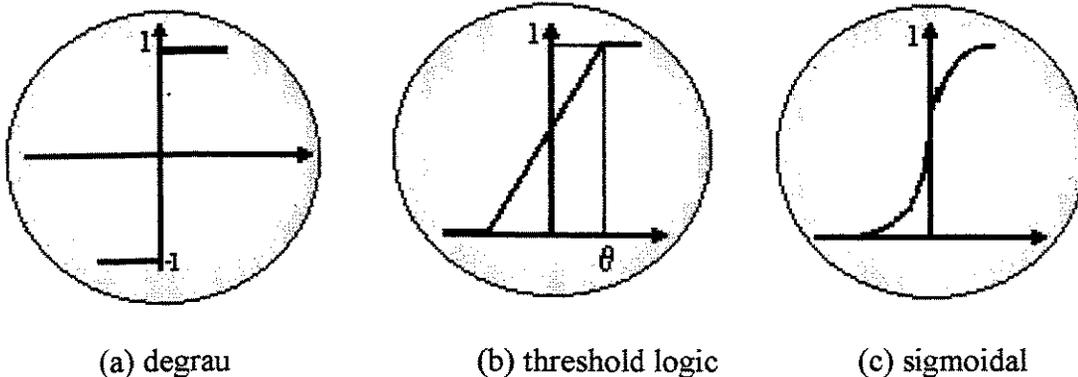


Figura 2.6: Algumas funções de ativação: (a) degrau, (b) thershold linear e (c) sigmoideal.

Nota-se então que este modelo simples de neurônios forma o elemento matemático básico dos modelos de redes neurais artificiais. Assim, através da conexão de vários elementos processadores é possível construir uma classe muito geral de mapeamento não linear, que pode ser aplicada aos mais variados problemas práticos. A adaptação dos

valores dos pesos, de acordo com um apropriado algoritmo de treinamento, pode permitir a aprendizagem em resposta aos dados externos.

2.5.4.1 Aprendizagem

A propriedade mais importante das RNAs é a habilidade de aprender de seu ambiente e com isso melhorar o seu desempenho. Isso é feito através de um processo iterativo de ajustes aplicados aos seus pesos, o treinamento. O aprendizado ocorre quando a rede neural atinge uma solução generalizada para uma classe de problemas.

Denomina-se algoritmo de aprendizado um conjunto de regras bem definidas para a solução de um problema de aprendizado. Existem muitos tipos de algoritmos de aprendizado específicos para determinados modelos de redes neurais, estes algoritmos diferem entre si principalmente pelo modo que seus pesos são modificados.

Outro fator importante é a maneira pela qual uma rede neural se relaciona com o ambiente. Nesse contexto existem os seguintes paradigmas de aprendizado:

- Aprendizado supervisionado, quando é utilizado um agente externo que indica à rede a resposta desejada para o padrão de entrada;
- Aprendizado não supervisionado (auto-organização), quando não existe um agente externo indicando a resposta desejada para os padrões de entrada, e
- Reforço, quando um crítico externo avalia a resposta fornecida pela rede.

2.5.4.2 Mapeamento não linear multivariado

Como citado anteriormente, as RNAs formam a base para um grande número de aplicações práticas. A Figura 2.7 apresenta um esquema de uma função não linear que

possui d variáveis independentes x_1, \dots, x_d e c variáveis dependentes $\hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_c$. De acordo com a nomenclatura utilizadas pelas redes neurais, os x 's são chamados de variáveis de *input* e os \hat{Y} 's de variáveis de *output*. Cada \hat{Y}_k pode ser uma função não linear arbitrária dos *inputs*.

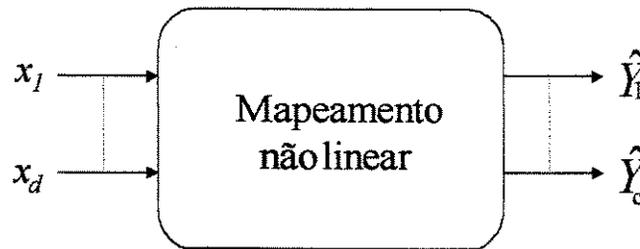


Figura 2.7: Esquema de uma função não linear geral mapeada a partir de um conjunto de variáveis de input x_1, \dots, x_d e um conjunto de variáveis de output $\hat{Y}_1, \dots, \hat{Y}_c$.

O cérebro humano possui a capacidade de processar informações e solucionar problemas tais que os computadores mais modernos não conseguem competir em muitos aspectos. (SHARDA et al, 1996).

A disponibilidade de informação está aumentando a sua importância na nossa sociedade. De fato, tem sido sugerido que nós estamos nos tornando uma sociedade da informação, tal que se tornará um dos mais valiosos recursos em muitas das nossas atividades, da administração de negócios à ciência.

É considerado que uma rede neural é uma caixa preta que pode aceitar uma série de dados de entrada (*inputs*) e produzir destes um ou mais dados de saída (*outputs*). Os valores de *input* podem ser do estoque de um supermercado e o *output*, uma recomendação para comprar ou vender estoques particulares; ou colocar os *inputs* dos movimentos de um objeto e *output* da reação do braço de um robô em um laboratório automatizado.

Para muitos usuários de redes neurais não é necessário saber exatamente o que ocorre dentro da caixa preta; não obstante eles serão capazes para aplicar redes neurais em tais problemas com sucesso. A transformação dos dados é realizada em unidades de

processamentos básicos, que realizam tarefas idênticas. Assim, como o nome implica, redes neurais consistem de neurônios conectados dentro da rede.

A rede neural, se considerada como uma caixa preta, transformará uma variável de entrada x dentro de uma variável de saída Y . As entradas e saídas das variáveis podem ser:

- Números reais, preferivelmente numa faixa de 0 a 1, ou -1 a +1; se eles estiverem fora da faixa, os dados de entrada devem ser pré-processados antes;
- Números binários, isto é, 0 e 1; ou
- Números bipolares, isto é, -1 e +1.

O número de entrada e saída das variáveis é limitada somente pela validade do *hardware* e tempo de computação. O número das variáveis de saída é geralmente menor que as de entrada.

Os problemas dirigidos pelas redes neurais podem ser muito variados. Nos níveis mais comuns eles podem ser divididos em quatro tipos básicos:

- Associação
- Classificação
- Transformação
- Modelagem

Logo, a seguir será apresentada um resumo histórico e descrição de suas utilidades e aplicações de redes neurais artificiais.

2.5.4.3 Comparação entre RNA e o ajuste polinomial

Fazendo-se uma analogia entre o treinamento de uma RNA e o problema de ajuste de uma curva utilizando um simples polinômio, considera-se por exemplo que este apresenta-se de ordem m dado por,

$$\hat{Y} = w_m x^m + \dots + w_1 x + w_0 = \sum_{j=0}^m w_j x^j. \quad (4)$$

A equação (4) pode ser considerada como um mapeamento não linear que possui os x 's como variáveis de *input* para produzir o \hat{Y} como variável de *output*. A forma precisa da função $\hat{Y}(x)$ é determinada pelos valores dos parâmetros w_0, \dots, w_m que são análogos aos pesos na rede neural, sendo w_0 análogo ao parâmetro *bias* da equação (1). Assim, este polinômio pode ser escrito na forma $\hat{Y} = \hat{Y}(x; w)$ como é feito para a maioria dos mapeamentos não lineares.

Existem dois fatores importantes em que as redes neurais diferem de um simples polinômio. Primeiramente, a RNA pode ter um número muito maior de variáveis de *input* e de *output* se comparado com o mapeamento polinomial. Em segundo lugar, a rede neural pode aproximar mais eficientemente uma classe muito grande de funções. Assim, para satisfazer as mesmas propriedades das RNAs, o mapeamento polinomial multivariado necessita de um número de coeficientes ajustáveis exponencialmente maior que os parâmetros a serem ajustados pela rede (BISHOP, 1994).

2.5.4.4 Funções erro e treinamento da rede

O problema de determinação dos valores dos pesos de uma rede neural é chamado de treinamento. Uma função erro apropriada é definida com relação a um conjunto de dados, e a busca dos parâmetros (pesos) é feita de modo a minimizar esta função.

Cada vetor de *input* $x^q = (x_1^q, \dots, x_d^q)$ do conjunto de dados tem um *output* desejado y^q . O erro para a saída k quando a rede é apresentada com o padrão q é dada por $\hat{y}(x^q; w) - y_k^q$. O erro total para o conjunto padrão total pode então ser definido como o quadrado dos erros individuais somados sobre todos os *outputs* e padrões. Isto fornece uma função erro, para o uso no treinamento da rede neural, na forma

$$E = \frac{1}{2} \sum_{q=1}^n \sum_{k=1}^c [\hat{y}_k(x^q; w) - y_k^q]^2. \quad (5)$$

Embora sendo a soma quadrática dos erros a forma mais comumente usada de função erro, pode-se notar que em alguns casos é mais apropriado tomar a média individual do erro quadrático, ou seja, dividir o erro pelo número total de observações (E/n).

2.5.5 Perceptron multi-camadas (MLP)

Quando RNAs de uma só camada são utilizadas, o mapeamento é realizado diretamente entre as variáveis de *input* e as de *output*, ou seja, não é possível a formação de uma representação interna. Tal restrição implica que variáveis de *input* resultem em variáveis de *output* similares, o que leva o sistema à incapacidade de aprender importantes mapeamentos.

O desenvolvimento do algoritmo de treinamento *backpropagation* mostrou ser possível treinar eficientemente redes com camadas intermediárias, resultando assim no modelo de RNAs mais utilizado atualmente, as redes Perceptron Multi-Camadas (MLP) (BISHOP, 1994). Hecht- Nilsen provaram que uma rede *feed foward* de três camadas de redes neurais poderia ser implementada em qualquer função definida sobre um subconjunto do Espaço Euclidiano (HONG-GUANG, JI-ZONG, 2000).

Nessas redes, cada camada tem uma função específica. A camada de *output* recebe os estímulos da camada intermediária e constrói a variável que será a resposta. As camadas intermediárias funcionam como extratoras de características, seus pesos são uma codificação das características apresentados pelas variáveis de *input* e permitem que a rede crie sua própria representação.

2.5.5.1 Arquitetura do perceptron multi-camadas

Na seção 2.5.4 introduziu-se o conceito de uma única unidade de processamento, descrita pelas equações (2) e (3). Considerando-se então um conjunto de m *outputs*, todos contendo *inputs* comuns, então é obtido uma rede neural tendo uma única camada de parâmetros adaptativos (pesos) como ilustrado na Figura 2.6. As variáveis de *output*, denotadas por \hat{y}_j , são dadas por

$$\hat{y}_j = g\left(\sum_{i=0}^d w_{ji} x_i\right), \quad (6)$$

onde w_{ij} é o peso do *input* i para a unidade j , e $g()$ é a função de ativação discutida anteriormente. Novamente pode-se incluir parâmetros *bias* como casos especiais de pesos provenientes de *inputs* extras $x_0 = 1$.

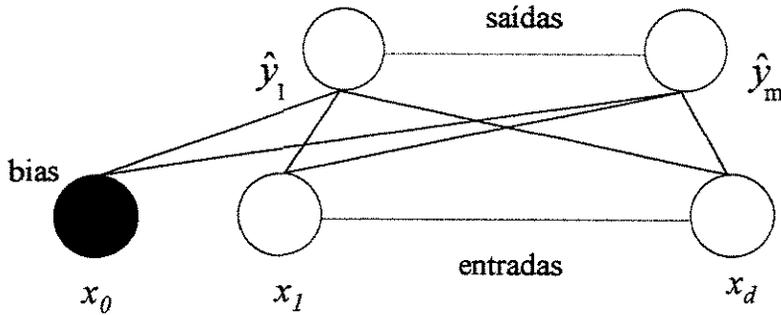


Figura 2.8: Estrutura de uma rede neural simples.

Na Figura 2.8, x_i representa os *inputs*, \hat{y}_j os *outputs* e as linhas que conectam as unidades de *input* e *output* representam os pesos correspondentes. O *input* extra $x_0 = 1$ é apresentado pelo círculo pintado e representa o parâmetro *bias*. As linhas que conectam o *bias* ao *output* representam os pesos, w_{j0} .

Enquanto o tipo de rede apresentado na Figura 2.8 tem algumas aplicações práticas, um classe muito mais poderosa de redes neurais é obtida se forem consideradas redes com pelo menos uma camada intermediária entre os *inputs* e *outputs*, como mostra a Figura 2.9 a seguir:

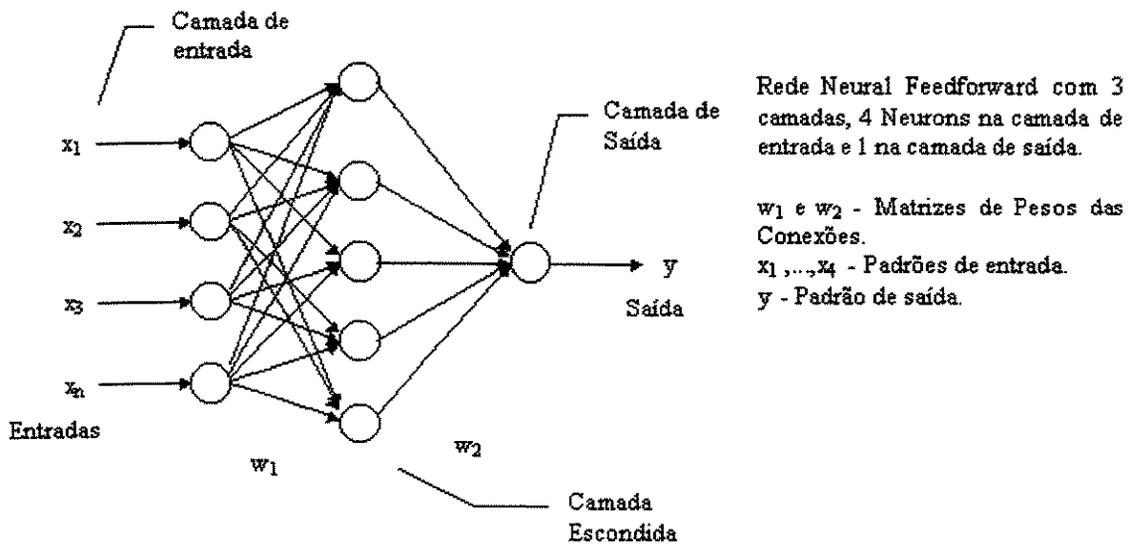


Figura 2.9: Estrutura de uma rede neural contendo uma camada intermediária (escondida).

A ativação das unidades da camada intermediária é dada pela Equação (2) e os *outputs* da rede são obtidos pela ativação sobre as saídas da camada intermediária, ou seja

$$\hat{Y}_k = G\left(\sum_{j=0}^m W_{kj} \hat{y}_j\right), \quad (7)$$

onde, W_{kj} representa os pesos na segunda camada conectando a unidade intermediária j à unidade de output k . Neste caso também pode ser introduzido uma unidade intermediária extra com ativação $y_0 = 1$ como o *bias* para as unidades de saída. O termo *bias* (para as unidades intermediárias e de *output*) têm o importante papel de garantir que as redes neurais possam representar mapeamentos não lineares. Combinando-se então as Equações (6) e (7), tem-se a expressão completa para a transformação representada pela rede,

$$\hat{Y}_k = G\left(\sum_{j=0}^m W_{jk} g\left(\sum_{i=0}^d w_{ji} x_i\right)\right). \quad (8)$$

Novamente, cada componente da equação acima corresponde a um elemento do diagrama na Figura 2.9. Note que as funções de ativação g e G não precisam necessariamente ser a mesma.

2.5.6 Algoritmos de treinamento

Para treinar a rede, os pesos das conexões são modificadas de acordo com a informação que foi aprendida. A rede aprende por comparação do *output* para cada *input* padrão com um *output* alvo para o padrão, então calculando o erro e retro-propagando uma função erro através da rede (YEH, 1998).

A função erro pode ser considerada geometricamente como uma superfície ajustando-se sobre o espaço dos pesos, como mostrado na Figura 2.10, e o problema de treinamento da rede corresponde à pesquisa pelo mínimo global w_4 da superfície do erro.

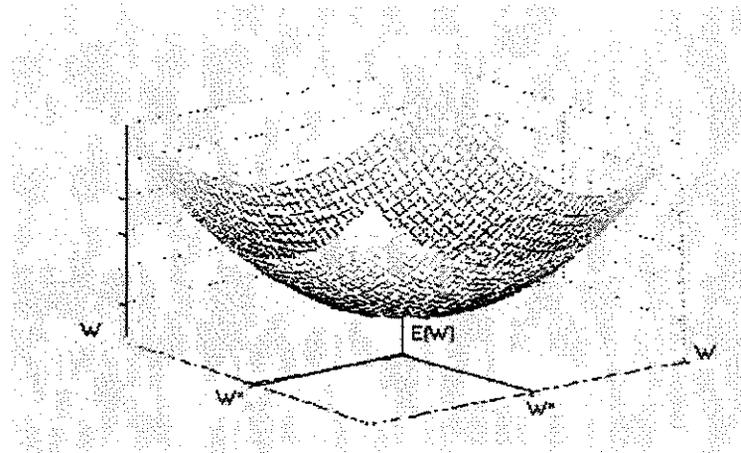


Figura 2.10: Desenho esquemático da superfície da função erro $E(w)$.

Para uma rede multi-camadas a função erro é altamente não linear em função dos pesos, e a pesquisa pelo mínimo geralmente procede de modo iterativo, começando por alguns pontos encontrados no espaço dos pesos. Alguns algoritmos encontram os mínimos locais mais próximos, enquanto outros são capazes de escapar dos mínimos locais e oferecer a possibilidade de encontrar o mínimo global. Em geral, a superfície de erro é extremamente complexa e para muitas aplicações práticas um bom mínimo local pode ser suficiente para encontrar resultados satisfatórios.

Muitos algoritmos executam a minimização da função erro através das derivadas desta com relação aos pesos da rede. Estas derivadas formam as componentes do vetor gradiente $\nabla E(w)$ da função erro, que, em um dado ponto no espaço dos pesos, dá o gradiente da superfície do erro.

Um dos mais importantes fatores da classe das funções de mapeamento não lineares dado pela MLP é que existe um procedimento computacional eficiente para avaliar as derivadas da função erro, baseadas na técnica de retro-propagação do erro, ou seja, no algoritmo de *backpropagation*.

2.5.6.1 Algoritmo *backpropagation*

A maioria das aplicações das Redes Neurais Artificiais são baseadas no paradigma de *backpropagation*, que utiliza o método de gradiente descendente para minimizar a função erro (YEH, I., 1998).

Durante o treinamento com o algoritmo *backpropagation*, a rede opera em uma seqüência de dois passos. Primeiro, um conjunto de variáveis é apresentado à camada de *input* da rede. A atividade flui através da rede, camada por camada, até que a resposta seja produzida pela camada de *output*. No segundo passo, o *output* obtido é comparado ao *output* desejado para esse conjunto particular. Se esta não estiver correta, o erro é calculado. O erro é propagado a partir da camada de *output* até a camada de *input*, e os pesos das conexões das unidades das camadas internas vão sendo modificados conforme o erro retro-propagado.

Assim, vê-se que a formulação matemática do algoritmo de *backpropagation* consiste num problema de atualização dos pesos em função do erro.

Para a formulação matemática deste problema é considerada uma rede contendo apenas uma camada intermediária. Primeiramente tem-se que a função da soma quadrática dos erros - ou resíduos, equação (5) - pode ser escrita como a soma dos quadrados dos resíduos em relação a cada padrão separadamente,

$$E = \sum_{q=1}^n E^q \quad E^q = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^c [\hat{Y}_k(x^q; \mathbf{w}) - y_k^q]^2, \quad (9)$$

onde $\hat{Y}(x; \mathbf{w})$ é dado pelo mapeamento da rede, equação (8). Assim, para a obtenção da derivada total considera-se a derivada para cada padrão separadamente.

Nas próximas etapas do desenvolvimento matemático omite-se o índice q referente aos pontos de dados. Considerando inicialmente as derivadas com relação aos

pesos na segunda camada (a camada de pesos das unidades intermediárias para as de *output*), rescreve-se as variáveis de *output* da rede na forma,

$$\hat{Y}_k = G(A_k), \quad A_k = \sum_{j=0}^m W_{kj} \hat{y}_j. \quad (10)$$

As derivadas com relação aos pesos da camada de *output* podem então ser escritas como,

$$\frac{\partial E^q}{\partial W_{kj}} = \frac{\partial E^q}{\partial A_k} \frac{\partial A_k}{\partial W_{kj}}. \quad (11)$$

Introduzindo-se a definição,

$$\delta_k \equiv \frac{\partial E^q}{\partial A_k}. \quad (12)$$

Então, usando-se a equação (10), tem-se a derivada na forma,

$$\frac{\partial E^q}{\partial W_{kj}} = \delta_k \hat{y}_j. \quad (13)$$

A expressão para δ_k pode ser encontrada pelas equações (9), (10) e (12), logo

$$\delta_k = G'(A_k) [\hat{Y}_k - y_k]. \quad (14)$$

Como δ_k é proporcional à diferença entre o *output* da rede e o valor desejado, algumas vezes ele é citado como um erro. Note que, para as funções de ativação sigmoideal a derivada $G'(A)$ é facilmente expressada em termos de $G(A)$, ou seja

$$G'(A) = G(A) [1 - G(A)], \quad (15)$$

logo, o tempo computacional para gravação na implementação do algoritmo é pequeno.

De maneira a encontrar a expressão correspondente para a derivada com relação aos pesos na primeira camada, tem as ativações das unidades intermediárias na forma

$$\hat{y}_j = g(a_j), \quad a_j = \sum_{i=0}^d w_{ji} x_i. \quad (16)$$

Então a derivada requerida é escrita como,

$$\frac{\partial E^q}{\partial w_{ji}} = \frac{\partial E^q}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}}. \quad (17)$$

Da equação (16) nota-se que $\frac{\partial a_j}{\partial w_{ji}} = x_i$. Então definindo-se

$$\delta_j \equiv \frac{\partial E^q}{\partial a_j}, \quad (18)$$

a derivada tem a forma,

$$\frac{\partial E^q}{\partial w_{ji}} = \delta_j x_i. \quad (19)$$

Note que a equação (19) tem a mesma forma que a derivada para os pesos da segunda camada dada pela equação (13); assim, a derivada do erro para um dado peso que conecta uma unidade de *input* à uma unidade intermediária é dada pelo produto dos δ 's para a unidade intermediária e o valor da variável de *input*.

Finalmente, a expressão para os δ 's é obtida facilmente pela regra de derivadas parciais,

$$\delta_j = \frac{\partial E^q}{\partial a_j} = \sum_{k=1}^c \frac{\partial E^q}{\partial A_k} \frac{\partial A_k}{\partial a_j}. \quad (20)$$

Usando-se as equações (10), (12) e (16) obtém-se

$$\delta_j = g'(a_j) \sum_{k=1}^c W_{kj} \delta_k. \quad (21)$$

A expressão da equação (21) pode ser interpretada em termos do diagrama da rede como uma propagação de sinais do erro, dado por δ_k , retro-propagando através da rede partindo dos pesos da camada de *output*, sendo esta a origem do termo *backpropagation*.

Um importante fator para os cálculos das derivadas é sua eficiência computacional.

Geralmente o número de pesos é muito maior que o número de unidades de processamento, e a contribuição dominante do erro propagado ou retro-propagado é proveniente da avaliação da soma dos pesos (com a avaliação da função de ativação sendo negligenciada). Entretanto, a técnica de *backpropagation* permite que todas as derivadas sejam avaliadas usando uma única direção de propagação, ou seja, a retro-propagação, através do uso das equações (13) e (19) (OLIVEIRA, 2000).

2.5.7 RNAs aplicadas a processos químicos

Para a maioria dos problemas em processos em engenharia uma grande faixa de funções pode ser utilizada para ajustar aceitavelmente qualquer conjunto de dados. Na prática, a escolha de uma função arbitrária, tal como polinomial, é feita amplamente nas bases da conveniência do ajuste. O último critério, talvez o mais crucial, pode ser somente encontrar uma função que não seja arbitrária, mas que seja baseada em algum modelo físico, exato ou aproximado, do sistema a ser representado (PONTON, 1993).

A grande maioria dos processos químicos apresenta fortes não-linearidades que dificultam bastante a obtenção de modelos fenomenológicos, a ponto de em alguns casos conseguir-se apenas um modelo extremamente simplificado de validade em condições específicas.

É exatamente neste nicho que as redes neurais surgem como uma técnica interessante a ser empregada devido à sua característica de aprender o que ocorre no processo.

O problema da obtenção de modelos para representar adequadamente o comportamento dinâmico dos dados não é fácil. A natureza do processo em si, a falta de bom entendimento e descrição dos fenômenos envolvidos, a disponibilidade, a confiança, o conjunto de dados completos e a estimativa do número de parâmetros envolvidos são os maiores fatores contribuintes para esse problema (BECK, 1990).

Entretanto, o sucesso da modelagem e controle de processos via rede neural depende fortemente do conhecimento das principais variáveis do processo, além de se ter uma base de dados de boa qualidade, ou seja, que contenha todas as informações importantes do processo e o domínio desejado.

O algoritmo de treinamento *backpropagation* tem sido utilizado com sucesso no treinamento de redes neurais artificiais para vastas aplicações. Ele ajusta os pesos numa retro-propagação da rede consistindo de várias camadas de entrada e uma camada de saída (SAVKOVIC and STEVANOVIC, 1994).

2.6 TESTE DE HIPÓTESES

2.6.1 Introdução

A coleta e análise de dados são componentes importantes do método científico aplicado ao processo de desenvolvimento do conhecimento. A pesquisa científica é um processo de aprendizado orientado. A aplicação dos métodos estatísticos torna esse processo tão eficiente quanto possível, ainda mais quando utilizado como apoio a outros métodos matemáticos.

Dados são utilizados tanto para tentar refutar teorias existentes como para revisar velhas teorias e também para formular novas. Teorias e hipóteses deveriam ser sempre contrastadas com dados coletados, se possível, de experimentos planejados. Se os dados contrariam a teoria, deveria se procurar um outro modelo teórico que explicasse os dados experimentais e que tivesse de acordo com o conhecimento anterior.

Um hipótese ordinariamente consiste de designar um valor para um ou mais parâmetros. O valor assumido é geralmente baseado em experiências passadas. Decisões devem ser muitas vezes feitas sobre processos e produtos baseados na amostra de dados. Afim de alcançar essas decisões, o processo chamado “Teste de Hipóteses” pode ser utilizado. Esse teste é simplesmente um regra pela qual uma hipótese é aceita ou rejeitada. Tais regras são baseadas em estatísticas simples, chamadas de testes estatísticos quando são utilizados para verificar hipóteses (FLOTT, 1996).

2.6.2 Decisões Estatísticas

O processo de aprendizado pode ser colocado, de uma forma sistemática, como um ciclo. Uma hipótese inicial é estabelecida e, através de um processo de dedução, estabelecemos certas conseqüências, as quais devem ser confrontadas com dados experimentais. Quando as conseqüências não concordam com os dados, é necessário modificar as hipóteses através de um processo de indução. Nova hipótese é formulada e inicia-se o ciclo novamente. Em muitas situações onde não existe uma teoria, uma análise

exploratória de dados pode fornecer um ponto de partida para formular hipóteses e dar início ao ciclo.

Quando se coleta dados, eles vêm “contaminados” por erros de diversas naturezas (erros de medida, variabilidade no material experimental, etc) e uma ferramenta que possibilita tratar esse “ruído” é a Estatística.

Os quatro passos para a construção de um teste são:

- Formalização do teste, ou tradução do problema a ser resolvido na forma de um teste de hipóteses;
- Construção de um critério para realizar o teste;
- Derivação de uma distribuição de referência para comparar o critério;
- Cálculo do nível de significância do teste.

Após a hipótese nula e alternativa tem sido estabelecido que o próximo passo mais importante é especificar o nível de confiança. Isto é uma simples mas arbitrária determinação de quanto o usuário se sentirá seguro. O nível de confiança é chamado de risco α . São comuns níveis de confiança de 90, 95 ou 99%. No caso de cartas de controle, o nível de 99,73% corresponde ao 3σ que é geralmente usado. A notação “ $p=0,05$ ” poderia aparecer após a determinação da hipótese. Essas determinações significam que existe uma probabilidade de que o valor verdadeiro da variável estará dentro da área de interesse.

2.6.3 Erros do Tipo I e II

O valor p é usado freqüentemente nos testes de hipótese, onde se rejeita ou não uma hipótese nula que representa a probabilidade de se cometer um erro do tipo I, pois se

está rejeitando a hipótese nula quando é verdadeira. Um valor que é muito utilizado é 0,05, isto é, rejeita-se a hipótese nula quando o valor de p for menor que 0,05 (MINITAB, 2001).

Quando a hipótese nula é aceita, não significa que a hipótese é verdadeira. Significa que não existe nenhuma razão em acreditar que não é verdadeira; que é importante, se a diferença é sutil. Não existe nenhuma diferença válida estatisticamente entre os valores que estão sendo testados. Se a hipótese nula é rejeitada, significa que existe suficiente prova válida estatisticamente para indicar que a determinação original é falsa.

Se uma hipótese for rejeitada quando deveria ser aceita, diz-se que foi cometido um erro do Tipo I. Se, por outro lado, for aceita uma hipótese que deveria ser rejeitada, diz-se que foi cometido um erro do Tipo II. Em ambos os casos ocorreu uma decisão errada ou um erro de julgamento.

Para que quaisquer testes de hipóteses ou regras de decisão sejam bons, eles devem ser planejados de modo que os erros de decisão sejam reduzidos ao mínimo. Isso não é uma tarefa simples, portanto para um dado tamanho de amostra, a tentativa de diminuir um certo tipo de erro é acompanhada, em geral, pelo acréscimo de outro tipo. Na prática, um tipo de erro pode ser mais importante do que outro, de modo que se deve procurar uma acomodação que favoreça a limitação do erro mais sério. O único caminho para a redução de ambos os tipos de erros consiste em aumentar o tamanho da amostra, o que pode ou não ser possível.

MATERIAIS E MÉTODOS

Este trabalho foi desenvolvido com o auxílio do Laboratório de Modelagem e Simulação de Processos Químicos - LMSPQ da Faculdade de Engenharia Química da Universidade Estadual de Campinas - UNICAMP. E contou com as seguintes ferramentas computacionais e metodologia apresentadas a seguir.

3.1 Ferramentas Computacionais

Utilizaram-se os seguintes pacotes computacionais:

- *Minitab*, para o pré-processamento dos dados através do Teste Estatístico de Hipóteses e
- *Neuro Solutions Educator* para a aplicação das técnicas de Redes Neurais Artificiais na modelagem.

3.2 Metodologia

A metodologia utilizada é apresentada com o objetivo de esclarecer o desenvolvimento deste trabalho.

3.2.1 Pesquisa bibliográfica

Neste tópico são tratadas as informações necessárias à aplicação das técnicas de modelagem por Redes Neurais Artificiais (RNAs), assim, como foram detalhadas no capítulo 2, o processo moagem e expedição do cimento CII-F, bem como as análises e fatores que influenciam na predição da Resistência à Compressão de 3 dias.

3.2.1.1 Locais de Amostragem

O controle de qualidade do cimento é feito nas etapas de produção e estocagem e é realizado em várias etapas, como uma rotina, desde a mina até a expedição do mesmo. Neste trabalho levará em conta somente a etapa de moagem e expedição de cimento, conforme mostrado na Figura 3.1.

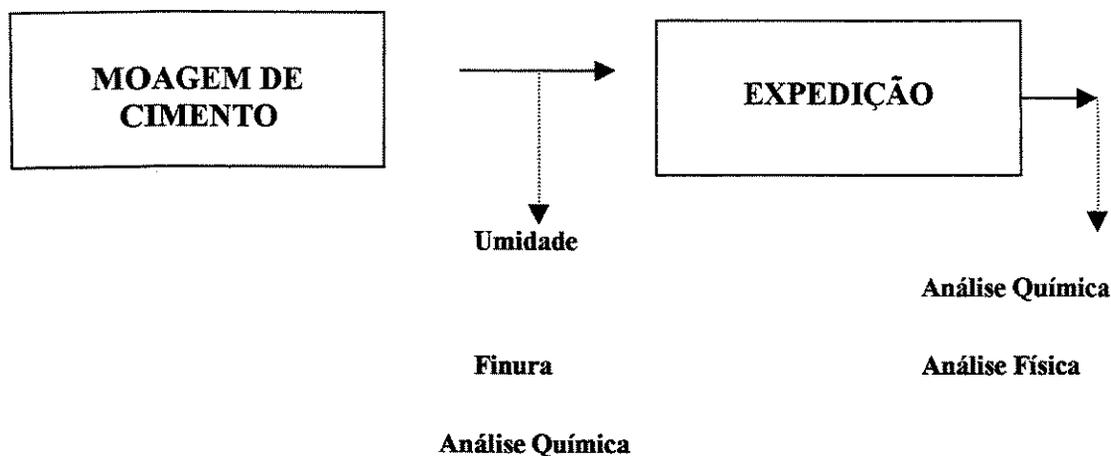


Figura 3.1: Pontos de coleta e análise na rotina de controle de qualidade da moagem e expedição do cimento

3.2.2 Pré-processamento dos dados

Primeiramente, foi necessário fazer a organização dos dados fornecidos pela Votorantim Cimentos, devido ao sistema estudado ser em relação à moagem e expedição do cimento. Existem análises laboratoriais similares e outras não. Essas análises físicas e químicas são realizadas diariamente, mas somente os dados relativos ao ano de 2000 foram utilizados devido serem os únicos existentes após às mudanças realizadas em relação aos anteriores.

Foram definidos os parâmetros a serem modelados pelo estudo, inclusive a igualdade dos dois sistemas em questão, moagem e expedição, foi verificada, aumentando-se assim, o número de conjunto de dados. Inicialmente foram consideradas todas as análises, tanto físicas quanto, químicas, sendo que os itens perda ao fogo e fim de pega foram posteriormente desprezados e os motivos serão discutidos na próxima seção e capítulo.

3.2.2.1 Determinação da igualdade estatística dos parâmetros

A igualdade estatística foi um teste realizado com os parâmetros, ou seja, com o resultado das análises físicas e químicas disponíveis. Esse Teste de Hipóteses teve como objetivo verificar a igualdade de dois conjuntos devido a existência de poucos dados referentes à produção de cimento do ano de 2000, o que poderia prejudicar a modelagem do sistema. Chegou-se à conclusão que os parâmetros poderiam ser comparados pelo Teste e verificar assim a sua igualdade estatística dos sistemas de moinho de cimento e expedição, para um limite de confiança de 95%.

Para a realização do teste foi necessário a utilização do *software Minitab*, e determinou-se que para os parâmetros perda ao fogo e fim de pega que, o primeiro não possui igualdade estatística, pois a média do conjunto de dados de cimento produzido (prod) é diferente do conjunto de dados do cimento para expedição (ensac) para um limite de confiança de 95%, e o segundo apresentou um comportamento muito semelhante ao parâmetro início de pega, o que pode ter sido desprezado pela simulação, para facilitar a modelagem reduzindo o número de *inputs* testados pela rede. Estes resultados serão vistos e discutidos no próximo capítulo.

O número de dados aumentou consideravelmente após a realização do teste de hipóteses, com a junção dos dois conjuntos de dados de análises (prod+ensac) houve a necessidade de um conjunto completo de dados de maneira que se pôde correlacionar as variáveis de entrada e a variável de saída para a predição da Resistência à Compressão de 3 dias (R3).

3.2.2.2 Detecção de *outliers*

A detecção de *outlier* (JACKSON, 1991) apresenta dois passos: primeiramente, detecção de objetos atípicos, seguido pela identificação de *outliers*. Embora métodos numéricos, como a medida total da variabilidade - T^2 , permitam detectar as amostras que estão fora de controle, a identificação positiva do objeto atípico requer conhecimento do processo e procedimento de aquisição de dados.

Neste presente trabalho, foram encontrados alguns objetos atípicos pelo estudo do sistema em questão, mas nenhum foi excluído, pois podem existir pelos erros envolvidos nos procedimentos das análises. O fato principal dessa não exclusão é devido à Resistência Mecânica à Compressão de 3 dias poder ser prevista mesmo fora de seus valores pré-estabelecidos e também pelo número reduzido de dados o que fez com que se trabalhasse com o conjunto inteiro de dados.

3.2.2.3 Determinação dos parâmetros a serem utilizados para a predição de R3

Devido à existência de algumas lacunas, alguns dados tiveram que ser descartados para se ter um conjunto completo de *input-output*.

A determinação dos parâmetros para a predição de R3 foi realizada mediante a análise dos mesmos e foi verificado que a análise física de Perda ao Fogo foi descartada, como também o parâmetro Fim de Pega devido a sua constância correspondente à análise de Início de Pega, que já foram relatadas anteriormente e serão objeto de discussão no próximo capítulo.

Outro parâmetro descartado foi a análise física de Expansibilidade à Quente, devido a sua inexistência nas análises realizadas pela expedição (ensac).

Contudo, o número inicial de parâmetros era de 18 *inputs* para 1 *output*, sendo que, após analisados e filtrados, estes dados puderam ser reduzidos em 15 *inputs* para 1 *output* a serem simulados pela rede.

Cada um dos parâmetros de entrada, ou seja, das análises químicas e físicas realizadas pelo cimento produzido e expedido corresponde a um neurônio da 1ª camada, sendo o parâmetro de saída a R3.

3.2.3 Desenvolvimento do modelo

Para se desenvolver o modelo para a predição da Resistência à Compressão de 3 dias, foram estudadas as seguintes técnicas:

- Teste de Hipóteses, com auxílio da estatística, para o pré-processamento dos dados
- Redes Neurais Artificiais, para a obtenção do modelo.

3.2.3.1 Números de amostras e parâmetros

Como em qualquer método de generalização de um conjunto de dados é necessário que o número deles fornecidos, ou apresentados para tal deva ser o maior possível, ou seja, um número suficientemente grande ou qualitativo do modo que a rede consiga aprender através dos exemplos apresentados. Portanto, a rede neural pode muitas vezes ser treinada para solucionar um problema desde que uma quantidade suficiente de dados representativos seja disponível para constituir um bom conjunto de treinamento (SUNG, 1998; ZURADA, 1992; HERTZ et al., 1991).

Devido ao número reduzido de dados disponíveis, tentou-se evitar que a razão entre número de amostras e de parâmetros ficasse muito grande e prejudicasse o ajuste dos parâmetros para a generalização da rede.

3.2.3.2 Divisão dos dados para treinamento, validação e teste

Os dois primeiros passos do processo de desenvolvimento de redes neurais artificiais são a coleta de dados relativos ao problema e sua separação em um conjunto de treinamento e um conjunto de testes. Essa tarefa requer a análise cuidadosa da situação para eliminar ambigüidades e minimizar erros nos dados. Além disso, os dados selecionados devem ser significativos e cobrir amplamente o domínio do problema.

Normalmente os dados selecionados são separados em duas categorias: dados de treinamento, que são utilizados para o treinamento da rede e dados de teste, que serão utilizados para verificar sua performance sob condições reais de utilização.

Neste trabalho, foram utilizados dois conjuntos, o de treinamento e de validação, onde este é chamado de conjunto de teste por conveniência, devido ao número reduzido de dados disponíveis para a criação de um terceiro conjunto.

3.2.3.3 Determinação da topologia da rede

Neste trabalho foi utilizada a rede do tipo *backpropagation feedforward*, sendo uma camada intermediária, variando-se o número de neurônios desta de 5 a 30, e também variando-se os algoritmos de atualização dos pesos como *Momentum* e *Delta - Bar - Delta* (DBD).

Existem metodologias, dicas e truques na condução de tarefas para se determinar a topologia da rede. Normalmente estas escolhas são feitas de forma empírica. A definição da configuração de redes neurais ainda é considerada uma arte, que requer grande experiência de projetistas.

■ Número de camadas e neurônios

Utilizou-se somente uma camada intermediária, que de acordo com os trabalhos já publicados mostrou ser adequada para a realização de modelagem de diversos processos, sendo satisfatória somente a variação do número de seus neurônios.

Trabalhou-se com 15 neurônios de *input* do conjunto final de dados, após a realização de descartes pelo Teste de Hipóteses e por análises dos dados a serem simulados. De acordo com a complexidade do problema pela grande quantidade de parâmetros, foi necessário treinar também uma quantidade relativamente grande de neurônios intermediários, ou seja, até 30. Na camada de saída o número de neurônios corresponde ao número de variáveis a serem preditas pela rede, ou seja, um único neurônio, referente a R3.

■ Função de transferência

Geralmente utiliza-se as funções de transferência sigmoidal e tangente hiperbólica por apresentarem melhores ajustes aos mais variados modelos não-lineares.

Estas duas apresentaram resultados satisfatórios, mas de acordo com o erro de treinamento, a função de transferência sigmoidal mostrou melhor desempenho e foi a escolhida para os neurônios da camada intermediária e para os neurônios de *output*.

3.2.3.4 Treinamento e Teste da rede

Mais recentemente, foi apontado que a função de erro quadrático médio é geralmente utilizada para se otimizar os pesos das conexões dos modelos de redes neurais (FORTIN et al., 1997).

As vantagens do uso da função da MSE (erro quadrático médio) é que ela pode ser calculada facilmente, onde penaliza erros grandes e deriva parcialmente em relação aos pesos que podem também serem calculados facilmente e aproxima à uma distribuição normal (MASTERS, 1993).

Assim, a decisão de parada do treinamento foi baseada no erro do conjunto de teste (validação). Um erro de 0.01 foi tomado como critério. Foram testadas diversas vezes a topologia da rede escolhida para que conduzisse a um erro mínimo de parada já estabelecido, diminuindo a ocorrência de erros locais.

3.2.3.5 Integração do modelo

Após o treinamento e análise da rede, um modo de se ter a validade da mesma é através da integração ao sistema a ser aplicado, ou seja, ao sistema de moagem e estocagem do cimento CII-F. Esta etapa ainda se encontra em desenvolvimento e brevemente poderá ser colocada em prática na empresa.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo serão apresentados e discutidos os resultados obtidos pela realização do trabalho em questão.

Um fator importante, objetivo deste estudo, foi a construção de redes neurais capazes de prever a Resistência à Compressão, treinadas com dados fornecidos pela fábrica. Normalmente um grande conjunto de dados é requerido para que esses valores cubram uma ampla faixa de condições e é necessário que a rede seja bem treinada. Neste trabalho, o número de dados industriais foi um fator limitante devido a mudanças ocorridas no processo para o ano 2000, invalidando os dados referentes aos anos anteriores, mas que mostraram-se suficientes para a generalização da rede.

Aqui serão mostradas as análises e tratamentos dos dados, bem como as redes treinadas e testadas para alcançar o melhor resultado para a predição da Resistência à Compressão de 3 dias.

4.1 Tratamento Inicial dos Dados

Ao contrário de dados obtidos de resultados de simulações, os dados industriais não são bem comportados, e apresentam certas características que obrigam a um maior cuidado no treinamento da rede. Entre essas características podemos citar:

- Ruídos: alguns dados no conjunto de treinamento terão grande influência dos ruídos provenientes das análises realizadas em laboratórios. Interferem no treinamento da rede pois mascaram ou causam certos desvios na relação entre a variável medida e a variável a ser predita. No caso de dados obtidos por simulação em alguns tipo de trabalho, mas não este, todos os resultados são provenientes de uma relação bem definida entre as variáveis.

- O domínio dos dados de treinamento corresponde ao período em que esses dados foram coletados ou fornecidos. Caso existam mais dados após essa coleta a rede deve ser retreinada para ter uma generalização das condições normais da fábrica se houverem ou não períodos de casos extremos no processo.
- Os dados referentes às análises tidas como parâmetros para o estudo são obtidos das amostras coletadas e medidas diariamente no laboratório de qualidade, sendo que a análise de Resistência à Compressão é medida após 3 dias de cura daquela referida amostra, havendo portanto atraso em relação às demais.
- A utilização de dados industriais deve garantir que todas as relações envolvidas no processo sejam contempladas ao modelo. Dados de simuladores desenvolvem redes que podem ser treinadas freqüentemente com pouca dificuldade, no entanto, existirão simplificações peculiares e também as condições incluídas no modelo do simulador. As variáveis utilizadas no treinamento da rede neural serão as mesmas usadas posteriormente como dados de entrada em cada simulação. Portanto, a utilização de dados provenientes da fábrica garante que a informação necessária esteja disponível, assim como o aplicativo em desenvolvimento.

As variáveis iniciais do estudo referentes às análises físicas e químicas, no sistema de moagem de e expedição do cimento CPII-F, realizadas pela empresa são no total de 18. Sendo que, seus valores máximos e mínimos são mostrados na Tabela 4.1 a seguir:

Tabela 4.1 Variáveis estudadas e seus valores máximo e mínimo

Variável	Valor máximo	Valor mínimo
Peneira #200 (%)	2,70	1,40
Peneira #325 (%)	15,60	9,20
Blaine (m ² /Kg)	515	324
Água de Consistência (%)	26,90	24,80
Início de Pega (horas)	5,25	2,07
Resistência 3 dias (MPa)	29.7	21.6

%SiO ₂	18,90	17,08
%Al ₂ O ₃	4,90	4,01
%Fe ₂ O ₃	2,87	2,64
%CaO	60,68	58,68
%MgO	6,77	5,20
%K ₂ O	1,31	0,95
%Na ₂ O	0,24	0,00
%SO ₃	4,04	2,54
%Resíduo Insolúvel	2,59	0,76
%CO ₂	4,93	2,42

Devido ao tratamento e estudo das variáveis das análises pôde-se notar que uma das variáveis, a análise de expansibilidade a quente, não pertence aos dois sistemas em estudo, somente à expedição do cimento, sendo então descartada.

Inicialmente, tratou-se em estudar o sistema de moagem de cimento para se prever a Resistência Mecânica de 3 dias (R3) do cimento para expedição. A variável R3 da moagem de cimento também conjuntamente com as demais variáveis foi utilizada nessa rede como variável de entrada. A variável de saída seria a R3 referente à expedição. Essa alternativa não foi viável devido à impossibilidade da rede aprender em virtude do número muito reduzido de dados para uma quantidade grande de *inputs* não apresentando assim resultados coerentes. Assim os dados de moagem e ensacamento (expedição) foram reunidos.

A variável fim de pega pode ser excluída desse estudo, em virtude de apresentar um comportamento correspondente à variável início de pega. A relação de correspondência pode ser vista na Figura 4.1 a seguir.

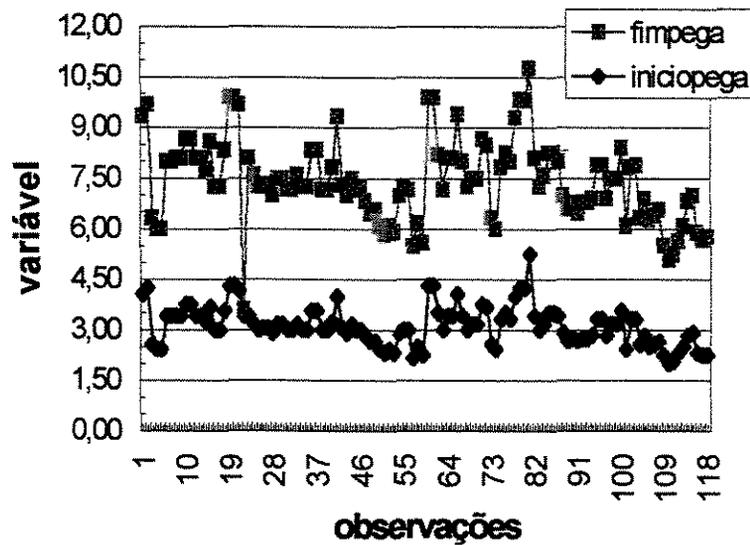


Figura 4.1 Dispersão das variáveis início e fim de pega

Tanto uma como outra poderia ser descartada, sendo que fim de pega foi a escolhida. A permanência dessa ou da outra não traria uma influência positiva na simulação dos dados, pois com menos *inputs* a rede trabalha com menor sobrecarga dos pesos pelo número de dados e capacidade de generalização é maior, diminuindo-se também a ocorrência de *overtraining*.

4.2 Igualdade Estatística

Com a finalidade de aumentar o número de dados de forma criteriosa, decidimos, com a ajuda dos engenheiros da Votorantim Cimentos, adotar a alternativa de se fazer o

Teste de Hipóteses, como descrito na seção 2.6 dos dois conjuntos de dados fornecidos do ano 2000, os dados do cimento produzido e do ensacamento, referentes ao cimento CII-F.

Com a junção dos dados dos dois sistemas em questão (prod + ensac), após a realização do Teste de Hipóteses foi comprovado que todas as variáveis de *input* com exceção da variável Perda ao Fogo são estatisticamente iguais. Essa análise pôde ser concluída devido ao seu valor *p* ser maior que 0.05, ou seja, para um limite de confiança de 95% e um risco α de 0.05. Na Tabela 4.2 abaixo, são relacionados todos os valores de *p* encontrados para cada variável de *input*.

Tabela 4.2 : Relação dos valores de *p* referente às variáveis de *input*

<i>Input</i>	<i>p</i>	Situação
Peneira #200	0.057	Utilizada na rede
Peneira #325	0.500	Utilizada na rede
Blaine	1.0	Utilizada na rede
Água de Consistência	0.720	Utilizada na rede
Início de Pega	0.629	Utilizada na rede
Perda ao Fogo	0.017	Descartada
SiO ₂	0.208	Utilizada na rede
Al ₂ O ₃	0.899	Utilizada na rede
Fe ₂ O ₃	0.741	Utilizada na rede
CaO	0.531	Utilizada na rede
MgO	0.663	Utilizada na rede
K ₂ O	0.867	Utilizada na rede
Na ₂ O	0.475	Utilizada na rede
SO ₃	0.985	Utilizada na rede
Resíduo Insolúvel	0.566	Utilizada na rede
CO ₂	0.295	Utilizada na rede

4.3 Conjunto final de dados

Após vários tratamentos, filtragem dos dados, pode-se obter o conjunto final dos dados das análises químicas e físicas realizadas pela empresa, sendo que agora, a rede possui 15 variáveis de *input*. O esquema simplificado de uma rede neural geral do tipo *backpropagation* para o caso estudado é mostrado na Figura 4.2:

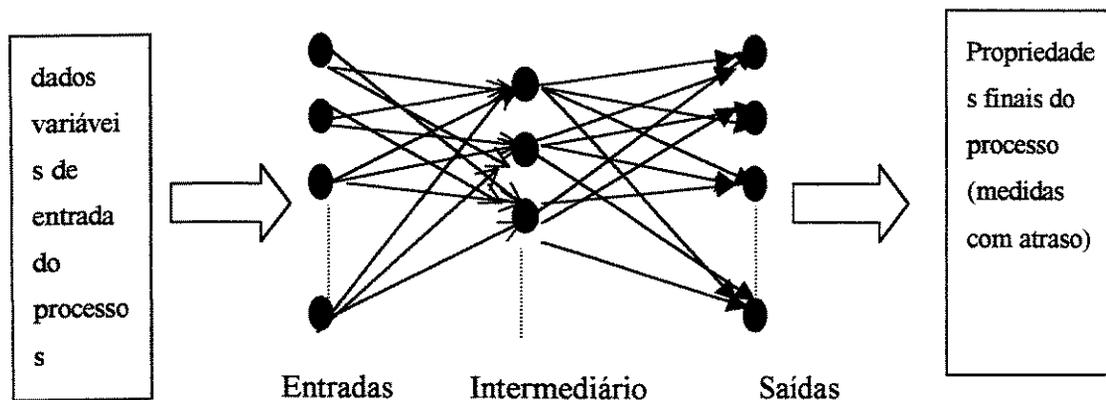


Figura 4.2: Esquema simplificado de uma rede neural do tipo *backpropagation*

4.3 Treinamento

Os parâmetros que foram simulados e modelados pelas técnicas de redes neurais tiveram para treinamento 124 conjuntos de dados. Onde 20% desses dados foram tomados como teste. Foram testados vários tipos de rede que serão mostradas e discutidas na próxima seção.

Após estabelecidas as condições e funções a serem utilizadas para o treinamento, chegou-se a conclusão que, de acordo com a seção 3.2.3.3, a rede foi treinada utilizando-se o algoritmo de *backpropagation*, e função de transferência sigmoideal e tangencial hiperbólica, tanto na camada intermediária como na de saída (*output*), onde 20% dos dados fornecidos foram destinados para teste e o restante para treino da rede. A Tabela 4.3 a seguir mostra os melhores resultados finais das redes de treinamento:

Tabela 4.3: Configurações das redes treinadas

Função	Normalização	Nº de neurônios (cam. Interm)	Erro (teste)	Rteste	Rtreino
Tanh	(-1,+1)	13	0.0599868	0.617	0.926
Tanh	(-1,+1)	15	0.0497732	0.800	0.86
Tanh	(-1,+1)	17	0.0470548	0.820	0.738
Tanh	(-1,+1)	22	0.0533448	0.790	0.840
Tanh	(-1,+1)	25	0.0421903	0.849	0.845
Tanh	(-1,+1)	27	0.043044	0.846	0.827
Sigmoidal	(0,1)	5	0.0101807	0.830	0.770
Sigmoidal	(0,1)	7	0.00979083	0.859	0.775
Sigmoidal	(0,1)	10	0.00988832	0.850	0.768
Sigmoidal	(0,1)	15	0.00999217	0.838	0.793
Sigmoidal	(0,1)	17	0.0102074	0.839	0.853
Sigmoidal	(0,1)	20	0.00987369	0.845	0.768
Sigmoidal	(0,1)	22	0.0129923	0.800	0.698
Sigmoidal	(0,1)	25	0.00975687	0.846	0.780
Sigmoidal	(0,1)	27	0.010574	0.830	0.780

Vários tipos de redes foram treinadas, onde foram variadas as funções de transferência, os extremos de normalização dos *outputs*, o número de neurônios e estruturas de atualização dos pesos.

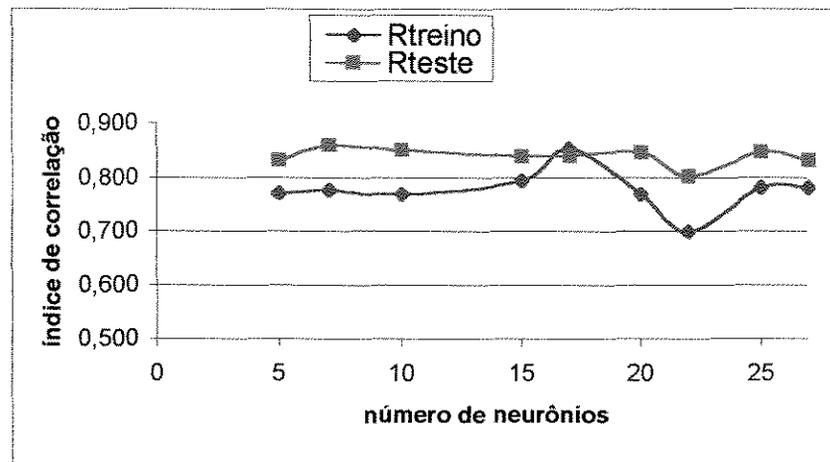


Figura 4.3 Efeito do número de neurônios na camada intermediária com o índice de correlação do conjunto de treino e teste.

A função de transferência sigmoidal, com extremos de normalização entre (0,1) e com 17 neurônios na camada intermediária, apresentou o melhor resultado de índice de correlação e erro de teste. Pôde-se constatar que a relação entre o número de neurônios e o índice de correlação não esteve bem definida, como pode ser visto na Figura 4.3. Foram realizadas ainda simulações com extremos de (0,1,0,9) para a função sigmoidal, mas não significaram uma variação considerável dos resultados obtidos. Assim como critério de parada do erro para 0,001, onde também não apresentaram índice de correlações consideráveis.

Através dos dados treinados que produziram melhores resultados criado através de correlações. Na realidade, a técnica de geração de correlações pode e deve ser usada para todos os casos, tendo-se o cuidado de verificar que existem correlações entre as variáveis de entrada, não somente a correlação entre a variável x_i (*input*) com a variável \hat{Y}_j (*output*).

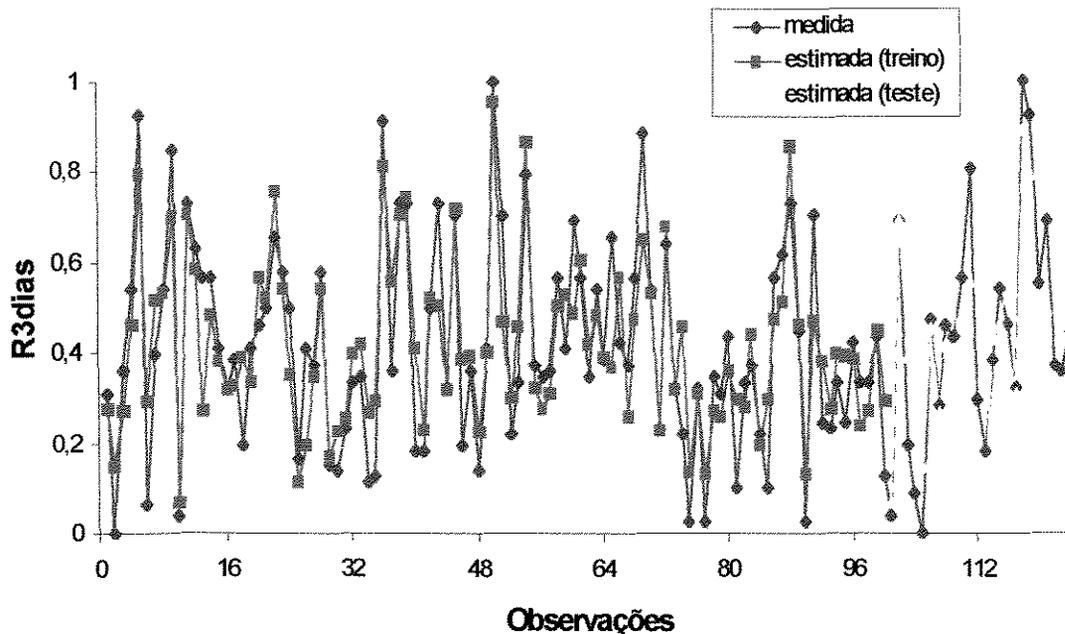


Figura 4.4: R3 dias medida vs estimada utilizando a técnica de RNA

A Figura 4.4 mostra a ajuste dos dados medidos e estimados pela rede que apresentou melhor resultado.

Considerando-se todos os resultados obtidos pelas técnicas de modelagem de RNA, verificou-se que a melhor performance para a predição da R3 é obtida quando os dados são simulados a partir do conjunto resultante da junção dos sistemas (prod + ensac), com a eliminação da variável Perda ao Fogo, utilizando-se uma rede composta por 17 neurônios na camada intermediária (escondida, *hidden*, etc) para os 124 dados correlacionados de medição.

A correlação entre os dados medidos e estimados referentes à rede resultante são mostradas na Figura 4.5, a seguir:

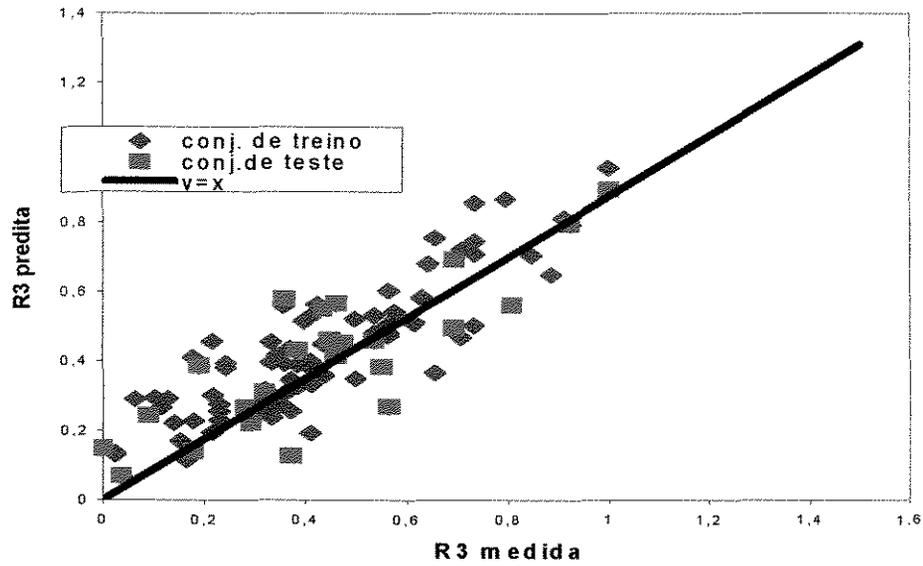


Figura 4.5: Correlação entre a R3 medida e estimada pelo método de RNA

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5.1 Conclusões

O objetivo desta dissertação foi demonstrar a capacidade de se treinar uma rede com todas as suas peculiaridades para simular uma parte do processo de produção de cimento com os dados reais de planta.

Notou-se que o grau de predição dos valores obtidos pelo treinamento satisfaz às finalidades deste trabalho e que podem ser aplicadas para simulações que ocorrem na realidade com seus devidos cuidados após a validação do modelo.

O trabalho foi desenvolvido com a colaboração da Votorantim Cimentos, onde os dados fornecidos pertenciam à Fábrica de Rio Branco- Rio Branco do Sul, PR. O aplicativo em desenvolvimento poderá ser utilizado pela fábrica. Com este conclui-se que a fábrica tem a vantagem de prever com tempo a variável em questão e fazer as suas correções caso esteja fora das normas e não perder o seu lote de cimento já produzido, ou seja, evitando que haja um desperdício enorme.

A interação entre a Universidade e a Indústria é muito conveniente para ambas as partes porque a troca de conhecimento leva ao desenvolvimento de pesquisas aplicadas e à inclusão de tecnologias de ponta nos processos industriais.

Algumas dificuldades enfrentadas neste trabalho devem ser ressaltadas devido às decisões tomadas para solução do problema em questão:

- (a) Os dados referentes ao ano de 1999 fornecidos pela empresa não tinham uma periodicidade, ou seja, seus valores eram provenientes da média das amostras de vários dias, dificultando a determinação do valor real da amostra analisada. Assim, somente os dados do ano 2000, onde as amostras eram analisadas diariamente foram utilizados, devido à confiabilidade para a realização deste trabalho;

- (b) De acordo com o treinamento realizado pela rede, notou-se que a rede pode aprender, para o conjunto de dados estudado, adequadamente pois treinou-se várias vezes a fim de evitar que ocorressem erros locais, o que prejudicaria os resultados;
- (c) O número reduzido de dados fez com que se avaliasse a possibilidade de junção dos dados das análises de *prod* e *ensac* através do Teste de Hipóteses e se concluísse ser estatisticamente verdadeira, tornando, assim, um número de dados maior para treinamento;
- (d) Os resultados das simulações foram tratados em Excel, onde as repetições são inúmeras afim de se evitar erros de cálculo. As conferências foram realizadas com frequência.

5.2 Sugestões

Como o tempo é um fator altamente limitante para um projeto de mestrado, tentou-se colocar todas as idéias obtidas nesse pequeno espaço de tempo.

Muitas sugestões são feitas; a princípio que este trabalho é apenas o início de uma série de outros que estão sendo realizados e que estão por vir. Ainda há muito o que se pesquisar e desenvolver em redes neurais e em processos de fabricação de cimento.

Outras formas de redes neurais poderiam ser estudadas, como por exemplo, no *software* comercial onde os dados desta tese foram simulados, existem recursos que podem fazer com que haja modificações em linguagem C++ para desenvolver outras redes, de acordo com os parâmetros operacionais requeridos pelo usuário, entre outras idéias.

Um tema que seria interessante é que a fábrica poderia implementar uma rede desenvolvida para coletar informações em todos os pontos de análise ou operação, facilitando assim, a rapidez com que esses dados podem ser obtidos e através dessa coleta ter uma periodicidade maior de anotações dos valores dos dados obtidos referentes às análises realizadas, para assim, obter-se um maior número de dados para estudos futuros.

Sugere-se que em estudo futuro possa-se analisar a influência de cada peso (w_i), referentes aos neurônios de *input* no neurônio(s) de *output*, como já foi citado e realizado em alguns trabalhos já publicados (ELGIBALBY and ELKAMEL, 1998).

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AGUIAR, H.C.I.L, "Modelagem de digestores kraft contínuo: redes neurais e modelo híbrido". Campinas, Faculdade de Engenharia Química / Unicamp, Tese – Mestrado, 2000.

BARNES, P., "Structure and Performance of Cements, Applied science publishers, London and New York, 1983.

BAUER, L.A.F., Materiais de Construção 1; Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro, 2^o ed. 1985.

BISHOP, C.M., "Neural Networks and their Applications", Rev. Sci. Instrum., v.65, n.6, 1803-1831, 1994

BRAGA, A . P., et al., "Redes Neurais Artificiais (Teoria e suas Aplicações), São Paulo, Editora LTC, 2000.

BRITISH PATENT 5022 dated 21 October 1824 to JOSEPH ASPDIN for "An Improvement in the Modes of Producing an Artificial Stone".

CARDOSO, C., DIREITINHO, F., "Comparative study on energy indicators for the cement sector in Brazil na the E.C.C.", CEETA/IDAE, Seminary ECC/Brazil, Energy Intensive Sectors, IPT-SP, São Paulo, Brazil, 1992.

CIMENTO VOTORAN, Apostila sobre o Processo de Fabricação do Cimento, Votorantim 2000.

CZERNIN, W., "La Química del Cemento, Barcelona, Espanha, Ediciones Palestra, 1963.

EB-208, Cimento Portland Composto, Especificação; ABNT, Associação Brasileira de Normas Técnicas; Rio de Janeiro, Julho, 1991.

ELGIBALBY, A A and ELKAMEL, A M., " A new correlation for predictiong hydrate formation condition for various gas mixtures and inhibitors", Fluid Phase Equilibria, p.23-42, 1998.

FLOTT, L.W., "Quality Control: Test of Hypothesis", Metal Finishing, September, 1996.

FORTIN, V., QUARDA, T.B.M.J., BOBÉE, B., Comment on "These use of artificial neural networks for the prediction of water quality parameters" by H.R. Maris and G.C. Dandy. *Water Resources Research*, v.33, n.10, p.2423-2424, 1997.

GAMBALE, E. A. et al, "Estudo de Inibidores de Expansão da Reação álcali-agregado; 2^o Seminário Goiânio de Engenharia Estrutural, 114-143, Goiânia, Setembro 1989.

GONTARSKI, C.A., "Avaliação da utilização de redes neuronais aplicadas a processos químicos". Campinas, Faculdade de Engenharia Química / Unicamp, Tese – Doutorado, Dezembro, 200b.

HAYKIN, S., "Neural Networks", MacMillan College Publishing company, New York, 1994.

HECHT-NIELSEN, R., "Theory of the Back-Propagation Neural Network", *Neural Networks for Perception*, v.2, p. 65-93, Academic Press, San Diego, CA, 1991.

HERTZ, J., KROGH, A and PALMER, R.G., "Introduction to the theory of neural computation. Addison-Wesley, redwood City, CA, USA, 1991.

HONG-GUANG, N., JI—ZONG, W., " Prediction of compressive strenght of concrete by neural networks, *Cement and Concrete Research*, v.30, p.1245-1250, 2000.

HOSKINS, J.C. and D.M.HIMMENBLAU, "Artificial neural network model of knowledge representation in chemical engineering", *Computers and Chem. Eng.*, v.12, n. 9-10, 881-890, 1988.

HOSTEN, C., AVSAR, C., "Grindability ofd mixtures of cement clinker and trass", *Cement and Concrete Research*, v. 28, n.11, 1519-1524, 1998.

[HTTP:// www.abpc.org.br](http://www.abpc.org.br) (Site da Associação Brasileira de Cimento Portland).

HUCKALF, H.; Stand und Möglichkeiten der reionellen Energieanwendung beim Zementklinkerbrand. Zement- Kalk- Gips; 41 Jahrgang, n.4,153-157, 1988.

ITO, V.M., SUTOH, K. MATSUDA, T., "Zekleinerungskinetik in Zementrohrmühlen", ZKG International, v.49, n.11, 1996.

IZAGUIRRE, J. R., " Características y correcta aplicación de los diversos tipos de cemento", editores técnicos asociados s.a., Barcelona, España, 1976.

JACKSON, J.E., " A user guide to principal components", Wiley Press, New York, 1991.

LAI, S., SERRA, M., "Concrete strength prediction by means of neural network", Constructions and Building Materials, v.11, n. 2, 93-98, 1997.

LEA, F. M., "The Chemistry of Cement and Concrete, 3^o ed., Chemical publishing company inc., New York, USA, 1970.

LUDERA, L.M.V., "Berechnungsmethoden fur zyklonvorwarmer von Drehrofen. Drehrofen"; Zement- Kalks- Gips, 41 Jahrgang, n 11, 551-558, 1988.

MANUAL TÉCNICO, Cimento Itaú, Grupo Votorantim Cimentos, 2000.

MASTERS, T., "Practical Neural Network Recipes in C++. Academic Press, San Diego, CA, 1993.

MELICK, J. H. , "Selection and installation of a vertical roller mill for clinker pregrinder, IEE Transactions on Industry Applications, v. 33, n. 1, Jan/Feb,1997.

MINITAB STATISTICAL SOFTWARE, Minitab Inc.. All rights reserved, USA, 1997.

MONTGOMERY, D.C., "Introduction to Statistical Quality Control, Arizona State University, John Wiley and Sons Ed., Second Edition, 1990.

OLIVEIRA, KARLA SANTOS. "Aplicação das técnicas de redes neurais e de análise de componentes principais na modelagem de uma lagoa aerada da RIPASA S/A". Campinas: Faculdade de Engenharia Química / Unicamp. Tese –Mestrado, 2000.

PETENATE, A., COLACIOPPO, R., "Apostila de Métodos estatísticos para modelagem de dados ambientais, Especialização em Engenharia Ambiental, Faculdade de Engenharia Química / Unicamp, Campinas, 2000.

PONTON, J.W. and KLEMES, J., "Alternatives to neural networks for inferential measurement", *Computers Chem. Eng.*, v. 17, n. 10, 991-1000, 1993.

SAVKOVIC – STEVANOVIC, J., "Neural networks for process analysis and optimization: modelling and applications", *Computers Chem. Eng.*, v.18, n.11, p.1149-1155, 1994.

SHARDA, R., WANG, J., "Neural networks and operations research/mangement science", *European Journal of Operational Research*, v.93, p. 227-229, 1996.

SCHOFIELD, C.G., "Homogenisation/ Blending Systems Design and Control for Minerals Processing, v.2 (series on bulk materials handling), Trans Tech Publications, first edition, 1980.

SILVA, R.J., "O Desenvolvimento de Novos Sistemas de Precalcinação Visando a Economia de Energia"; V Congresso Brasileiro de Energia, Rio de Janeiro, v 2-3, 568-577 novembro,1988.

Sindicato Nacional da Indústria de Cimento: Relatório Anual do SNIC,1991.

SMIDTH, F.L., "International Cement Production Seminar: Quality of Cement and Chemical Changes in the Cement During Grinding and Storage", Plant Services Division, 1989.

SPIEGEL, M. R., "Estatística", Coleção Schaum, Editora Mcgraw-Hill do Brasil Ltda., 1974.

SUNG, A.H., "Ranking importance of input parameters of neural networks", Expert Systems with Applications, n.15, p. 405-411, 1998.

YEH, I.C., "Modeling of strength of high- performance concrete using artificial neural networks", Cement and Concrete Research, v. 28, n.12,1797-1808, 1998.

ZUPAN, Z., GASTEIDER, J. "Neural Networks for Chemists", New York, USA, 1993.

ZURADA, J.M., MALINOWSKI, A.& CLOETE, J., "Sensitivity analysis for minimization of input data dimension for feed forward neural network", Proceedings of IEEE International Symposium on Circuits and Systems. London, IEEE Press, 1994.