

i UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
ÁREA DE CONCENTRAÇÃO SISTEMAS DE PROCESSOS
QUÍMICOS E INFORMÁTICA

*DETECÇÃO DE FALHAS EM UM REATOR
DE PIRÓLISE DE ETANO.
DESENVOLVIMENTO DE UM SISTEMA BASEADO
EM REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.*

Autor:

Arnaldo José Bannwart Antunes.

Orientador:

Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira.

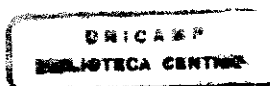
Co-orientadora:

Profa. Dra. Ana Maria Frattini Fileti.

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 - SP

Junho de 2001.



N.º CHAMADA: T/ UNICAMP
An89d
 V. Ex.
 TCM30 BC/ 46133
 PROC. 16-392/01
 C ☐ D ☒
 PREÇO R\$ 11,00
 DATA 17-08-01
 V.º CPD

CM00158846-8

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

An89d Antunes, Arnaldo José Bannwart.
 Detecção de falhas em um reator de pirólise de etano.
 Desenvolvimento de um sistema baseado em redes
 neurais artificiais / Arnaldo José Bannwart Antunes. --
 Campinas, SP: [s.n.], 2001.

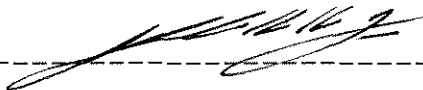
Orientadores: João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira,
 Ana Maria Frattini Fileti.
 Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de
 Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Redes neurais (Computação). 2. Localização de falhas
 (Engenharia). 3. Pirólise. I. Pereira, João Alexandre
 Ferreira da Rocha. II. Fileti, Ana Maria Frattini. III.
 Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de
 Engenharia Química. IV. Título.

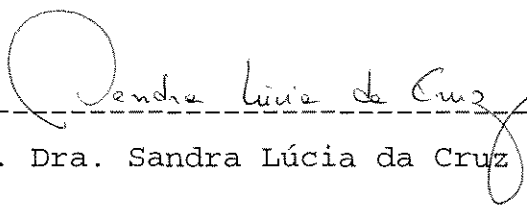
Tese de Mestrado defendida por Arnaldo José Bannwart
Antunes e aprovada em 20 de junho de 2001 pela banca
examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira -
Orientador



Dr. Alexandre Nunes Ponezi - CPQBA/UNICAMP



Profa. Dra. Sandra Lúcia da Cruz - FEQ/UNICAMP

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Mestrado defendida por Arnaldo José Bannwart Antunes e aprovada pela banca examinadora em 20 de Junho de 2001.



Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira
Orientador

AGRADECIMENTOS

A Deus, pela presença constante e oportunidade e atributos concedidos.

Ao meu orientador, Prof. Dr. João Alexandre Ferreira da Rocha Pereira, pelo incentivo e paciência.

A minha co-orientadora Profa. Dra. Ana Maria Frattini Fileti pela atenção dispensada.

Aos meus pais, Fernando e Vilma, minhas irmãs, Ana Carolina e Juliana e outros familiares que deram ajuda e apoio incomensuráveis.

A Christiane Matsuo e família pela amizade e apreço.

Ao Arlan de Souza, Andréia da Silva e Joseane Neves pela grande ajuda na transição para o uso de software livre.

Aos funcionários e demais professores da FEQ.

Ao CAPES pelo apoio financeiro.

RESUMO:

A natureza transiente dos processos industriais e erros operacionais exigem atenção especial aos limites inferior e superior de variáveis críticas ao processo. A atividade de verificação se essas variáveis estão dentro de sua faixa normal é chamada de detecção de falhas. A ocorrência de falhas traz consequências indesejáveis à eficiência do processo. As falhas podem ser identificadas pela análise de seus sintomas, como trocas térmicas indesejadas, baixos níveis de purificação e reatividade. A ocorrência frequente de falhas reduz a vida útil dos equipamentos, aumentando os custos de produção.

O presente estudo desenvolve uma metodologia de detecção de falhas baseada em redes neurais, que é aplicada num reator de pirólise do etano, um processo muito importante na indústria petroquímica. A conversão do etano e a seletividade do etileno são os parâmetros usados para definir as condições de falha e normalidade. Um simulador do processo foi usado para selecionar as faixas de operação para o treinamento da rede, que é feito com o algoritmo de aprendizado supervisionado backpropagation.

Também é mostrada a influência dos parâmetros de aprendizado mais importantes sobre a convergência e o desempenho de detecção de falha, ou seja, a capacidade de reconhecer os vários modos de operação do reator. Diferentes arquiteturas de redes são usadas e os valores de taxa de aprendizado e termo de momentum são variados. Para haver uma maior aproximação com um processo real, os dados processados contém vários níveis de ruído: baixo, médio, alto e muito alto. A partir de simulações, observou-se que o sistema de detecção apresentou desempenho satisfatório para redes com duas camadas ocultas, com vários nódulos. As redes com menos parâmetros livres não apresentaram uma porcentagem de classificação correta aceitável.

Palavras-chave: redes neurais, detecção de falhas e pirólise do etano.

ABSTRACT:

The transient nature of the industrial processes and operational errors demand special attention to the upper and lower critical limits of the process variables. The activity to verify whether the variables are within normal operation range is called fault detection. The fault occurrence bring undesired consequences to process efficiency. Faults may be identified through the analysis of its synthoms, such as undesired thermal exchanges, low purification level or reaction yield. Frequent fault occurrence may reduce equipments lifetime, increasing production costs.

The present work intend to develop a fault detection methodology based on neural network. It is applied to ethylene production from ethane pyrolysis. This is an important reaction in the petrochemical processes. The ethane conversion and ethylene selectivity are the parameters used to define the normal and faulty operational conditions. A process simulator was used to select the critical variable ranges for the neural network learning procedure. The supervised backpropagation algorithm was used.

It is also intended to show the influence of the most important learning parameters over the convergence and fault detection performance, i. e., the capability to recognize the various modes of faults and the normal operation of a pyrolysis reactor. Different neural networks architectures are used and the momentum term and learning rate are varied over a convenient range. In order to get closer to the real industrial operational condition, the patterns sets of low, medium, high and very high noise level are analyzed. It was observed from numerical simulations tests that the developed fault detection presented good performance for some two hidden layers architectures with several hidden nodes. The neural networks with less free parameters did not present acceptable correct classification rate.

Keywords: neural networks, fault detection and ethane pyrolysis.

ÍNDICE:

CAPÍTULO-1 INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO-2 FALHAS EM PROCESSOS QUÍMICOS.....	4
2.1 INTRODUÇÃO.....	5
2.2 DETECÇÃO DE FALHAS.....	8
2.2.1 TREINAMENTO DE OPERADORES.....	9
2.2.2 SISTEMAS ESPECIALISTAS.....	12
2.2.3 ÁRVORE DE FALHAS.....	15
2.3 CONCLUSÃO.....	17
CAPÍTULO-3 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.....	19
3.1 INTRODUÇÃO.....	20
3.2 REDES NEURAIS ARTIFICIAIS.....	21
3.2.1 O NEURÔNIO ARTIFICIAL.....	24
3.2.2 ARQUITETURAS DE REDES NEURAIS.....	28
3.3 O APRENDIZADO NEURAL.....	31
3.3.1 PARADIGMA SUPERVISIONADO.....	33
3.3.2 PARADIGMA NÃO SUPERVISIONADO.....	36
3.3.3 PARADIGMA DE REFORÇO.....	36
3.4 APLICAÇÕES À DETECÇÃO DE FALHAS.....	37
3.5 CONCLUSÃO.....	40
CAPÍTULO-4 PIRÓLISE DO ETANO.....	43
4.1 INTRODUÇÃO.....	44
4.2 CONSIDERAÇÕES FÍSICAS E QUÍMICAS.....	45
4.3 DESCRIÇÃO DO PROCESSO INDUSTRIAL.....	48
4.3.1 O REATOR.....	52
4.4 VARIÁVEIS DE OPERAÇÃO.....	55
4.4.1 TEMPERATURA.....	55
4.4.2 TEMPO DE RESIDÊNCIA.....	58
4.4.3 PRESSÃO PARCIAL DOS HIDROCARBONETOS.....	60
4.5 CONCLUSÃO.....	63

CAPÍTULO-5 MODELAGEM E DETECÇÃO DE FALHAS.....	65
5.1 INTRODUÇÃO.....	66
5.2 MODELAGEM DO REATOR.....	66
5.2.1 O PROGRAMA DE SIMULAÇÃO.....	68
5.3 REDES NEURAIS.....	69
5.3.1 ALGORITMO DE RETROPROPAGAÇÃO DE ERROS....	69
5.3.2 APLICAÇÃO DA METODOLOGIA.....	74
 CAPÍTULO-6 RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	 77
6.1 INTRODUÇÃO.....	78
6.2 O TREINAMENTO DA REDE.....	78
6.2.1 DETERMINAÇÃO DAS CONDIÇÕES OPERACIONAIS. .	80
6.2.2 VARIÁVEIS USADAS NO TREINAMENTO.....	84
6.3 RESULTADOS.....	86
6.3.1 REDES COM UMA CAMADA OCULTA.....	87
6.3.2 REDES COM DUAS CAMADAS OCULTAS.....	90
6.4 CONCLUSÕES.....	99
 CAPÍTULO-7 CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA	
TRABALHOS FUTUROS.....	100
7.1 CONCLUSÕES.....	101
7.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	103
 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	 105
 ANEXO-A PROGRAMAS.....	 112
 ANEXO-B RESULTADOS DE SIMULAÇÕES.....	 130

NOMENCLATURA:**Letras latinas**

- A - fator de frequência (s^{-1})
 A_h - área de transferência de calor (m^2 por m^3 de volume de reator)
 a - nível de ativação do nódulo
 $B = \log A$
 b - inclinação da função de ativação
 $C = E_a / (2,3R)$
 C_A - concentração do componente A ($kmol/m^3$)
 c_t - capacidade térmica ($kJ/kmol K$)
 D_t - diâmetro do reator (m)
 d - vetor dos valores desejados dos nódulos de saída
 E - erro quadrático
 E_a - energia de ativação (J)
 e - vetor dos sinais de erro
 F - fator de fricção de Fanning
 f - função de ativação
 ΔG° - variação da energia livre de Gibbs no estado padrão (J/mol)
 g - velocidade mássica ($kg/m^2 s$)
 ΔH_r - calor de reação (J/mol)
 K - constante de equilíbrio
 K_p - constante de equilíbrio em termos de pressões parciais
 k - constante da taxa de reação (s^{-1})
 M - número de nódulos de saída
 N - número de exemplos no conjunto de treinamento
 n - número de iteração
 n_p - número de mols do componente p ($kmol$)
 P - pressão total (Pa)
 p - pressão parcial (Pa)
 Q - fluxo de calor (kW/m^2)
 R - constante universal dos gases ideais ($8,314 J/mol.K$)
 r - taxa de reação
 S - área de seção transversal (m^2)
 T - temperatura absoluta (K)

t - tempo (s)
 U - coeficiente global de transferência de calor ($\text{kW/m}^2 \text{ K}$)
 u - velocidade no reator (m/s)
 w - matriz dos ganhos sinápticos
 Δw - atualização do ganho sináptico
 X_A - conversão do componente A
 x - vetor dos sinais de entrada num nóduo
 Y - fração molar em fase gasosa
 y - vetor dos sinais de saída do nóduo
 z - distância axial (m)

Letras gregas

α - termo de momentum
 α_{pq} - coeficiente estequiométrico do componente p na reação q
 δ - gradiente local
 η - taxa de aprendizado
 ρ - densidade (kg/m^3)
 Θ - termo limiar

Subscritos

$A, B, \dots, F$ - espécies químicos
 eq - equivalente
 f - final
 i, j, k - índices relativos a nódulos
 J - camisa
 med - médio
 p - componente químico
 q - reação química

Siglas

AE - abordagem ao equilíbrio
 RPP - relação entre pressões parciais

Capítulo 1

Introdução

1 - INTRODUÇÃO:

A viabilidade das indústrias químicas modernas depende da eficiência em se manter o processo dentro de faixas restritas que resultem em condições satisfatórias de produção. Esse aspecto exige o desenvolvimento de mecanismos mais sofisticados para garantir que o processo opere de forma segura, estável e economicamente viável. Recentemente, o aspecto ambiental tornou-se um importante fator para avaliar a operação do processo. Mesmo sem considerar a ocorrência de todas as falhas não inerentes ao processo, composto em sua maioria por mal funcionamento de equipamentos e erros humanos, a própria natureza transiente do processo químico seria suficiente para justificar o desenvolvimento de um mecanismo de detecção de falhas. Elas podem ser entendidas como um desvio, acima de um nível tolerável, de variáveis críticas para o processo. A ocorrência de falhas traz consequências indesejáveis, como perda de eficiência de purificação, trocas térmicas indevidas, baixa conversão de reagentes. Importantes recursos como calor, eletricidade e matéria-prima também são desperdiçados pelo surgimento de falhas no processo. O considerável nível de interatividade entre as operações de um processo pode conduzir a um efeito cascata que, a partir de um falha, pode comprometer boa parte da produção da planta. Além disso, as operações unitárias que operam condições indesejadas têm sua vida útil reduzida devido ao desgaste excessivo, aumentando os custos de produção. Outro impacto negativo sobre o custo surge porque, sem um mecanismo de detecção de falhas, é preciso comprar um equipamento mais robusto, e mais caro, para amortecer o desgaste irregular causado pelas falhas.

Em vista disso, é desenvolvida uma metodologia baseada em redes neurais artificiais, para fazer um reconhecimento de padrões, sobre os sinais vindos de um equipamento. Ou seja, recebido um sinal, a rede neural deverá classificá-lo entre um modo "normal" de operação ou alguma modalidade pré-estabelecida de falha. Embora existam outras metodologias

empregadas na detecção de falhas, a escolha das redes neurais pode ser justificada por não precisar de um modelo matemático do processo, pela sua adequação em condições não-lineares e por responder rapidamente à mudanças nos objetivos de controle. O aspecto de aprendizado das redes neurais também é de grande interesse por incrementar o desempenho da rede a medida que ela mantém-se em contato com o processo.

O objeto usado para detecção de falha é um reator de pirólise do etano. É um processo de grande importância por ser o meio mais viável de produção em grande escala do etileno, que tem aplicação na obtenção de vários compostos em indústrias de derivados orgânicos. Essa extensa aplicação do etileno pode ser explicada pela baixa reatividade dos alcanos, que são encontrados em grandes concentrações nas frações obtidas diretamente do petróleo. A reação é muito rápida, altamente endotérmica e pode ser razoavelmente sensível às condições operacionais devido à algumas reações que ocorrem simultaneamente.

O presente estudo pretende mostrar a influência dos parâmetros mais importantes sobre a convergência do aprendizado e no desempenho de classificação, ou seja, na capacidade de reconhecimento de vários modos de falhas e da operação normal para o reator de pirólise. Para se aproximar das condições reais encontradas na indústrias, foram feitos conjuntos de padrões com diversos níveis de ruído.

Capítulo 2

Falhas em processos químicos

Análise da literatura

2.1 - INTRODUÇÃO:

A crescente complexidade dos processos nas atuais indústrias químicas demanda grande atenção às condições operacionais que podem ocorrer fora dos padrões normais, ou seja, à ocorrência de falhas que têm impacto sobre aspectos econômicos e de segurança. O desenvolvimento dos processos também possibilita o aumento do volume de massa e energia processados. Esse fator agrava as consequências de uma falha e eleva os custos de um período de inoperância da planta.

A complexidade dos processos engloba dois fatores que claramente aumentam o dano potencial causado pelas falhas: o uso de materiais mais sofisticados e a alta interligação entre os equipamentos, vide integração energética. O emprego de materiais de alta tecnologia, e de alto valor agregado, reduz a margem de erros operacionais aceitáveis para manter a lucratividade do processo. Por exemplo, um catalisador de alto custo deve ter seus limites de operação rigorosamente respeitados para não abreviar sua atividade. A interligação excessiva entre as unidades favorece a propagação de uma falha, podendo comprometer boa parte da produção. O mau funcionamento de um reator pode levar a um subresfriamento ou condensação parcial do vapor condensado, que é necessário para aquecer uma outra corrente do processo. Assim uma falha pode afetar outros equipamentos, além dos que estão diretamente conectados à unidade onde a falha surgiu.

NIMMO (1995) afirma que os erros humanos são responsáveis por 40% das falhas operacionais e que o risco é maior nos processos em batelada. Para esses casos existem algumas particularidades:

- Conhecimento insuficiente sobre as condições operacionais de produtos diferentes;
- A mudança freqüente de produtos facilita a contaminação;
- A medida que o equipamento ganha complexidade não é fornecido um melhor treinamento.

O aparecimento de correntes fora de especificação

dentro do processo não são os únicos, nem os piores, danos causados pelas falhas. A operação distante das condições normais também conduz a acidentes com um amplo espectro de intensidade: desde o leve ferimento de um operador até uma explosão que comprometa toda a planta. Evidentemente, muitas dessas consequências mais graves decorrem de erros na manutenção e de pequenas falhas que não foram corrigidas devidamente.

A operação fora dos padrões é duplamente prejudicial em relação ao custo dos equipamentos. Além de acelerar seu desgaste, reduzindo o tempo de vida útil, ela requer a compra de unidades mais robustas e caras para suportar esses desvios de operação. Todo equipamento é projetado para abrigar uma faixa normal de operação, conforme figura 2.1. A detecção de falhas é uma avaliação feita a partir dos sinais enviados pelos sensores. A respectiva condição operacional deve ser localizada claramente em uma das áreas mostradas na figura. Contudo, os critérios que permitem apontar uma condição como faltosa são subjetivos e dependem de cada caso e do julgamento de cada pessoa envolvida na detecção da falha. Ou seja, o estado de um processo pode ser faltoso em determinadas condições e ser considerado normal em outras.

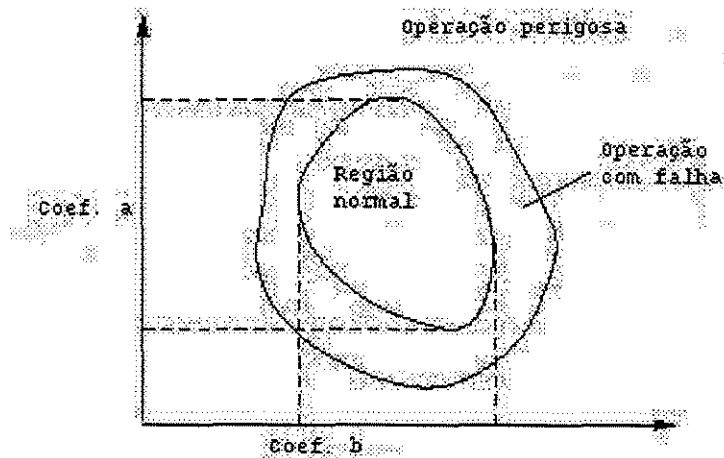


Fig. 2.1: Regiões de operação.

ZHAO, LU e YUAN (2000) descrevem como práticas apropriadas de operação e manutenção da planta aprimoram as condições de segurança e reduzem a probabilidade de falhas. A operação da planta é entendida como observação do processo, identificação dos problemas imediatos ou potenciais e tomada de decisão no sentido de evitar ou resolver quaisquer falhas. Por outro lado, a manutenção ocupa-se de atividades que mantenham o processo operando de maneira suave e contínua, tais como: inspeções, planejamento de manutenções, limpeza, lubrificação, reparos e substituições.

As principais causas do desvio das condições especificadas são má distribuição, mistura imprópria, pontos quentes, super aquecimento, esforço indevido em eixos, lubrificação deficiente, bloqueio, sedimentação, adesão, vazamento, defeito na construção, queda de energia elétrica, falha de instrumentação, envenenamento do catalisador, cavitação, presença de contaminantes, corrosão, erro em procedimentos operacionais, incrustação, erro humano e efeitos climáticos (HIMMELBLAU, 1978). Algumas causas podem ter origem não na operação, mas no próprio projeto do equipamento. KLETZ (1976) cita um caso em que um tanque entrou em colapso porque uma quantidade de líquido frio foi adicionado ao tanque, que continha líquido quente. Havia uma válvula para alívio de pressão, mas não uma válvula para vácuo.

NIMMO (1995) mostra a importância da previsão de falhas no projeto de equipamentos. Um operador de forno de craqueamento de etano - assunto de interesse do presente estudo - é forçado a assumir o controle quando o sistema de controle avançado fica instável durante uma perturbação na planta. Num equipamento projetado da maneira convencional, o operador precisa calcular o balanço de massa e alguns parâmetros para auxiliar o controlador. Uma dificuldade em reagir corretamente pode trazer sérios danos ao forno. Por outro lado, um sistema projetado para levar em conta essas falhas poderia fazer esses cálculos automaticamente, fornecer o procedimento correto e antecipar ações corretivas. Esse método mostra a necessidade de agilizar o acesso a

informações relevantes aos operadores, mantendo computadores próximos aos equipamentos.

É estimado que a presença de falhas tenha um custo anual de US\$ 16 bilhões, somente para a indústria petroquímica dos Estados Unidos (NIMMO, 1995). Nesta estimativa, não estão computados custos indiretos como danos ambientais, danos pessoais e impacto na qualidade de vida na vizinhança da planta. Mas foram considerados prejuízos com equipamentos do processo, perda na produção do equipamento danificado e perdas devido a outras ineficiências causadas não diretamente pelo equipamento danificado.

Muitas vezes, a falha em si não é o principal responsável por um acidente maior. A falta de conhecimento, mau uso de recursos, diagnose errada, ação incorreta e lentidão na resposta também contribuem para o agravamento da situação.

2.2 - DETECÇÃO DE FALHAS:

O primeiro passo para se projetar um sistema de detecção de falhas é conhecer o processo. Cada processo tem particularidades que definem a distribuição de trabalho entre computador e operador. Esse conhecimento pode ser obtido pela elaboração de um detalhado modelo matemático que descreva quantitativamente a dependência entre as variáveis. Alternativamente, alguns métodos precisam somente de dados históricos do processo e de evidências inferidas a partir deles (DASH e VENKATASUBRAMANIAM, 2000). Por isso, é importante manter um histórico com as informações relacionadas com a ocorrência de falhas. Essas informações são úteis para determinar as causas e para elaborar um procedimento para trazer a operação de volta ao normal. É desejado que o sistema seja robusto, que não tenha uma queda abrupta de desempenho na presença de ruídos ou incertezas. A interface entre sistema e operador deve ser de fácil interação para uma melhor análise de causas e efeitos da falha.

Possivelmente, as condições normais de operação podem sofrer alterações devido a mudanças estruturais no processo (configuração de tubos, adição ou retirada de equipamentos ou retrofit) ou devido a mudanças nas especificações ou quantidade de produto.

MYLARASWAMY e VENKATASUBRAMANIAM (1997) descrevem o projeto de um sistema híbrido de diagnose, motivado pela incapacidade intrínseca dos métodos tradicionais de satisfazerem todas as necessidades de um sistema completo de diagnose, que são: (i) detecção imediata, (ii) variedade de falhas diagnosticáveis, (iii) resolução, (iv) robustez ao ruído, (v) facilidade de implementação e manutenção, (vi) desempenho em tempo real e exigências computacionais, (vii) facilidade de explicação, (viii) detecção de novas falhas, (ix) adaptabilidade.

EO et al. (2000) propõe um sistema distribuído de detecção e diagnose de falhas, de maneira que a planta seria dividida entre vários agentes que monitoram apenas sua respectiva área. Essa metodologia parece adequada para as plantas modernas de grandes dimensões. Um determinado agente tem comunicação com os agentes vizinhos e esse fluxo de informações tem início quando uma falha é observada, com o objetivo de verificar qual a influência do setor vizinho sobre ela. Desse modo, a seção do processo que deu origem à falha é localizada e o agente responsável por elas estabelece as prováveis causas. Os agentes são programas que concentram sua atenção numa unidade do processo e tem uma base de conhecimento sobre ela.

Segundo DASH e VENKATASUBRAMANIAM (2000), não há um único sistema que possua todas as atribuições necessárias. Assim, um conjunto de métodos atuando de modo complementar e coordenado será a resposta para futuros desenvolvimentos.

2.2.1 - Treinamento de operadores:

A indústria química moderna é marcada por rápidas transformações nos processos e na tecnologia empregada. Em

particular, essas transformações são claramente notadas na área de controle e monitoramento de processos devido ao uso disseminado de computadores, cujo desenvolvimento é mais acelerado que outras tecnologias. Neste ambiente, somente um treinamento contínuo e aprimorado pode assegurar que os operadores cumpram satisfatoriamente função de manter os equipamentos operando de forma segura e eficiente. O treinamento deve ser balanceado com atividades teóricas e práticas, que podem ser desenvolvidas no próprio local de trabalho.

Apesar da grande quantidade de sistemas automáticos e programas de computador, um número considerável de falhas pode ser reconhecido pelos próprios operadores da planta. Geralmente uma falha vem acompanhada de alguma alteração perceptível no processo, podendo haver cheiro ou ruído atípicos, vibração excessiva, meio reacional com cor alterada, formação de espuma ou tubos com paredes mais quentes que o normal. Na verdade, um operador tem várias ações corretivas manuais que auxiliam na remediação de efeitos indesejados ou, pelo menos, a atenuá-los. Sua experiência lhe confere um grande conjunto de regras práticas, que são simuladas por alguns programas de computador usados em tomada de decisões.

Dada a grande participação de erros humanos nas falhas, pode-se concluir que a qualidade técnica dos operadores é de suma importância para o bom funcionamento da planta. Os operadores de várias áreas - mecânica, elétrica, manutenção - devem ter um conhecimento básico sobre o processo para que possam trabalhar de forma coordenada. O supervisor deve reprimir relações de acentuada competitividade entre seus subordinados porque elas atrapalham o compartilhamento de informações e o aprendizado do grupo.

Em vista disso, a comunicação entre os membros da equipe deve ser estimulada. O trânsito de informações produz um ciclo virtuoso, no qual um operador que incorpora novas informações ao seu conhecimento já adquirido pode gerar novas conclusões sobre o processo. Se essas novas informações forem compartilhadas com o grupo, o ciclo ganha um novo impulso e

todos aumentam sua compreensão sobre o processo químico e sua confiança para atuar de forma correta sobre ele.

Operadores responsáveis pelo controle de processos adotam, basicamente, duas atitudes distintas em relação ao equipamento sendo supervisionado. Alguns não mantêm sua atenção voltada continuamente ao processo e só depois de um sinal claro da presença de uma falha, como um alarme, ele passa a executar os procedimentos necessários para trazer o processo de volta à normalidade. Agindo assim, ele estará sempre reagindo a um problema já existente, tentando remediar um situação que já teve um certo avanço sobre a área de operação faltosa, o que sempre torna o trabalho mais difícil. Esse tipo de conduta é prejudicial ao processo porque diminui o tempo de uma resposta adequada em relação à falha, aumenta o número de eventos indesejáveis que acompanham as falhas e reduz a confiabilidade do processo. A ação do operador é fundamentalmente corretiva. Por outro lado, o operador pode ficar monitorando o processo de forma mais permanente, procurando pequenos sinais que indiquem o prenúncio de uma falha e agindo prontamente caso eles tornarem-se significativos. Ocasionalmente, o operador até provoca deliberadamente um leve distúrbio no processo para verificar seu comportamento. Neste caso, a ação do operador é preventiva.

Segundo BULLEMER e NIMMO (1998), um bom programa de treinamento deve contar com três componentes importantes:

- Verificação de necessidades: são definidas quais as características desejadas em relação a cada operador em sua função específica;
- Desenvolvimento: monitores com experiência, conhecimento, motivação e habilidade interpessoais são selecionados para conduzir o treinamento;
- Avaliação: critérios são estabelecidos para determinar em que medida o programa atinge seus objetivos. O impacto do programa na produtividade e desempenho dos operadores também é considerada.

Se uma planta contar com um eficiente sistema de controle, não haverá muitas situações para que os operadores acumulem experiência e conhecimento suficientes para lidar com condições operacionais desfavoráveis. Por isso, são empregados simuladores no treinamento de operadores para eles entenderem melhor a dinâmica do processo e ficarem mais confiantes na ocorrência de uma falha real. Além disso, eles podem testar várias soluções possíveis e verificar qual delas é menos danosa para o processo.

DOIG e REINTEN (1979) desenvolveram um processo simulado que mostra a sensibilidade do processo a vários tipos de falhas embora não sejam consideradas falhas que provoquem a parada do processo, foram incluídas falhas que perturbam globalmente o processo (vazamentos), falhas no reator (mudanças de temperatura e concentração dos reagentes), nos fluxos materiais (bloqueio de linhas, válvulas parcialmente fechadas, bombas ou sopradores inadequados) e na separação de fases (transferências indevidas de massa e calor).

SHIN e VENKATASUBRAMANIAM (1996) propõem um sistema tutor inteligente, com interface multimeios, para aprimorar o treinamento num ambiente interativo sofisticado. As simulações são em tempo real que avalia e critica as ações do operador.

2.2.2 - Sistemas especialistas:

Um especialista é conhecido como alguém com um grande conhecimento sobre um assunto específico e que, por isso, resolve problemas com muita precisão e eficiência. Caso esse conhecimento possa ser codificado de um modo passível de ser processado por um programa seria muito conveniente porque a avaliação feita pelo especialista pode ser simulada repetidas vezes e numa velocidade muito maior. Um programa que simula o raciocínio, o julgamento e a tomada de decisão de um especialista na resolução de problemas é chamado de sistema especialista e tem várias aplicações, inclusive a detecção de falhas nos processos químicos. Esses sistemas são conhecidos

com uma combinação de conhecimento e mecanismos de inferência. Assim, dado um problema, o programa confronta esses dados com as informações conhecidas e tira conclusões para achar a solução. Os sistemas especialistas são adequados em muitas situações porque grande parte dos problemas numa planta são de natureza qualitativa, e não puramente matemática.

Como já foi mencionado, o nível de grande complexidade dos processos atuais os torna mais suscetíveis a falhas. O interesse por respostas rápidas e precisas reduz a participação dos operadores em alguns casos por falta de conhecimento técnico. Além disso, há uma grande quantidade de informação gerada pelo processo, direta e indiretamente, num curto período de tempo.

Geralmente, o conhecimento é colocado no formato de sentenças do tipo SE... ENTÃO... , ou seja, causa e efeito. A primeira parte da sentença contém um raciocínio, uma explicação. A segunda parte é a conclusão, o fato que, provavelmente, ocorrerá caso a primeira parte seja verdadeira. Dois exemplos de regras seriam

SE a alimentação ultrapassar 10 m³/h,
ENTÃO a coluna será inundada.

SE a vazão da corrente R-04 estiver baixa,
ENTÃO a válvula V-02 deve estar fechada.

Há duas abordagens principais para a aplicação de sistemas especialistas. A primeira se faz pela mera compilação do conhecimento desejado, tem caráter qualitativa e não conta com um modelo do fenômeno que será avaliado pelo sistema. A outra abordagem possível é quantitativa e requer um modelo para gerar um conhecimento mais profundo.

Basicamente, existem duas maneiras de buscar a informação necessária no conjunto de regras. Quando se tem algumas condições e se deseja saber qual o evento que pode resultar disso, o objetivo é fazer projeções para o futuro, inferir. Neste caso, são pesquisadas quais são as regras que

tenham causas coincidentes com as condições apresentadas, sabendo que uma regra pode ter uma consequência que seja a causa de uma outra. Assim são inferidos eventos que, provavelmente, ocorrerão.

O caminho no sentido inverso também é de grande utilidade. Se as causas de um evento inesperado devem ser investigadas, o raciocínio toma a forma de uma análise dos fatos conhecidos. Para isso, a conclusão das regras SE-ENTÃO são comparadas como o evento observado. Novamente, as causas de um regra podem ser as consequências de outras, que revelam novas causas e assim por diante. No final, é provável que se encontre um conjunto de falhas que ajudem a explicar o evento inesperado. Desse modo a sequência de eventos que resultou na falha é descoberta até à raiz do problema.

A detecção e diagnose também é feita pela elaboração de hipóteses, que são aceitas ou rejeitadas conforme sua consistência com o conhecimento disponível para o sistema.

SHUM et al. (1988) desenvolveram uma metodologia não convencional, baseada em níveis hierárquicos que direciona o problema para um especialista mais indicado. É uma estrutura onde vários sistemas especialistas são distribuídos em camadas que vão de um conhecimento mais genéricos até um mais específico. A medida que o problema percorre essa estrutura, ele é analisado por sistemas que decidem para qual outro sistema, com um conhecimento mais restrito e mais profundo, o problema deve ser encaminhado. A cada hipótese rejeitada, todo um ramo de nódulos especialistas é desconsiderado. O problema deve ser considerado resolvido quando a informação fornecida pelo sistema for suficientemente clara e com detalhamento adequado. Por exemplo, a informação de que um controlador eletrônico não esteja funcionando corretamente não precisa ser avaliada mais detalhadamente para saber quantos componentes estão com defeito.

RICH e VENKATASUBRAMANIAM (1987) propuseram um sistema especialista, batizado MODEX (Model Oriented Diagnostic EXpert), que supera os problemas de falta de flexibilidade e dependência do processo, que são observadas nas abordagens

tradicionais. Esse sistema formula modelos causais baseados na estrutura e no funcionamento das unidades de processamento, adquirindo um conhecimento mais profundo sobre o processo químico. Além disso, o modelo não falha abruptamente na análise de condições novas, como aconteceria para um sistema especialista convencional. Assim como na ação humana, esse sistema mais evoluído fornece soluções parciais ou sugestões razoáveis nos casos mais complicados.

2.2.3 - Árvore de falhas:

Árvore de falhas é um método qualitativo de estabelecer causas prováveis das falhas ocorridas, bem como os meios mais convenientes para remediá-las. É feito um diagrama, no qual blocos de textos explicativos são conectados por operadores lógicos e representa um raciocínio que descreve as etapas que deram origem à falha. Essas etapas são colocadas numa sequência de causa e efeito. Normalmente o evento indesejado é colocado no topo da árvore e séries de eventos que levam a ele são postos abaixo. A apresentação gráfica das árvores torna mais clara a compreensão entre um grande número de eventos associados à falha. Assim, é mais simples identificar o que deve ser corrigido para bloquear essas sequências danosas ao processo.

Segundo POWERS e TOMPKINS (1974), as árvores de falhas foram aplicadas com sucesso na indústria aeroespacial e menos frequentes nas indústrias químicas devidos aos seguintes motivos:

- Os processo ainda não eram complexos o suficiente para justificar seu uso;
- O processamento químico era considerado robusto. Mesmo com falhas em diversos equipamentos o processo global continuava operando razoavelmente;
- Ao contrário de uma viagem ao espaço, numa planta há o recurso de parada do processo com uma nova partida subsequente;
- Há muita incerteza sobre a reatividade dos produtos químicos processados numa faixa mais ampla do que a

operação normal;

- O comportamento dos sistemas químicos são de difícil previsão em condições extremas;
- A construção de uma árvore de falhas de alta qualidade era muito trabalhosa, podendo consumir anos de pesquisa;

A construção de uma árvore de falhas é um processo dedutivo. Para se avançar um nível abaixo, é preciso descobrir suas causas; caso haja mais de uma, haverá ramificações. Primeiramente, é necessário especificar qual evento deve ocupar o topo da árvore. Ou seja, a falha a partir da qual serão descritos os eventos que a detonaram. Como já foi mencionado, todo sistema de detecção de falhas exige um certo grau de conhecimento sobre o processo, embora alguns não exijam um modelo matemático. As propriedades físicas e químicas como reatividade, inflamabilidade, corrosividade e toxidez são muito influentes na construção de uma árvore de falhas que tenha o enfoque voltado para as condições de segurança do processo. Como não é viável considerar todas as falhas possíveis, somente aquelas com uma probabilidade razoável de ocorrer ou que resultem em acidentes de certa gravidade são levadas em conta. Portanto, o nível de toxidez de um componente, dada a probabilidade de um vazamento, pode ser decisivo na inclusão do tal vazamento como uma falha relevante na estrutura da árvore. Ou seja, a diferença entre um produto que cause um mal estar momentâneo e outro que provoque sérios danos à saúde deve ser conhecida para que a construção da árvore seja criteriosa.

Juntamente com a colocação apropriada dos operadores lógicos, a confiabilidade do método depende da escolha de eventos necessários e suficientes para serem conectados. Ou seja, numa árvore consta que o evento A dê origem ao evento B. Essa árvore será consistente se realmente houver precisão da ocorrência de A para ocorrer B - evento necessário - e se B não depender de algum outro evento diferente de A - evento suficiente.

O encadeamento de eventos é feito até se atingir um

ponto cuja causa não se consegue ou não se deseja determinar. Além disso, com as frequências desses eventos mais básicos da árvore, pode-se inferir a probabilidade da ocorrência do evento no topo da árvore.

Depois de pronta, a árvore de falhas deve ter sua funcionalidade verificada, aplicando-a num processo real ou simulado. Isso é necessário para detectar algumas imperfeições nas informações contidas e fornecidas pela árvore antes de ser realmente posta em prática, quando uma informação errada pode não somente dificultar o caminho de volta do processo para as condições normais, como também agravar os efeitos de uma falha. Assim, a árvore é reestruturada e testada novamente. É preciso também eliminar a presença de eventos fisicamente inconsistentes, como o aquecimento de uma corrente pelo resfriamento de outra.

RICH e VENKATASUBRAMANIAM (1987) enumeram algumas limitações do uso de árvores de falhas:

- Uma árvore feita manualmente para um processo complexo torna-se muito vasta e suscetível a erros;
- Os analistas usam julgamentos subjetivos;
- As árvores concentram-se em uma condição faltosa por vez;
- O conhecimento mostrado numa árvore não pode ser generalizado para outros processos.

2.3 - CONCLUSÃO:

Uma vez estabelecidos os prejuízos causados pelas falhas nos processos e a necessidade de detectá-los, é proposto o desenvolvimento de uma metodologia baseada em técnicas de redes neurais. Este método de detecção apresenta algumas vantagens em relação aos que foram apresentados. Apesar de não fornecer uma explicação compreensível sobre as causas das falhas e prováveis conseqüências, como nos métodos qualitativos de sistemas especialistas e árvores de falhas, as redes neurais não precisam de um conhecimento detalhado, com ou sem modelo matemático, sobre o processo e têm a habilidade do aprendizado, ou seja, a melhoria de desempenho

conforme recebe sinais sobre o comportamento do processo. Além disso, caso haja alguma alteração na faixa de operação normal, a rede ajusta-se automaticamente para detectar as falhas nas novas condições, ao contrário dos outros métodos que carecem de um operador externo que proceda precisamente com os ajustes necessários.

A metodologia a ser desenvolvida em redes neurais será aplicada num reator de pirólise para produção de etileno. Apesar de ser um processo criado há muito tempo, ainda é de fundamental importância por ser a única rota economicamente viável na produção em grande escala do etileno, que é um componente de larga aplicação em indústrias de derivados orgânicos.

Existem vários trabalhos sobre a detecção de falhas por redes neurais. LEGER, GARLAND e POEHLMAN (1998) avalia o uso de redes neurais com estatísticas de soma cumulativa para testar a detecção de falhas num modelo de transporte de calor de um reator nuclear. VENKATASUBRAMANIAM e CHAN (1989) compara o uso de um sistema especialista e de redes neurais para um processo de craqueamento catalítico fluidizado. VORA, TAMBE e KULKARNI (1997) utilizam as redes não somente para detectar a presença de falhas como também seu grau de desvio em relação à faixa operacional desejada, para um reator contínuo não isotérmico. HOSKINS, KALIYUR E HIMMELBLAU (1991) não se limitam a monitorar as falhas em um equipamento, é mostrada a capacidade de detecção numa planta de ácido clorídrico com um grande número de sensores e falhas. Contudo, o presente estudo é motivado pela escassez, e possível inexistência, de aplicações voltadas especificamente para a produção de etileno via pirólise. Esse processo é particularmente interessante para um sistema de detecção de falhas devido à complexidade do sistema reacional e ao grande número de produtos possíveis, cuja distribuição depende sensivelmente das condições operacionais.

Capítulo 3
Redes Neurais Artificiais
Análise da literatura

3.1 - INTRODUÇÃO:

Desde que foi criado, o computador tem sido uma ferramenta de grande utilidade devido à constante melhoria de desempenho dos componentes e utilidade dos programas. Contudo, sua maneira de processar informações exige que o programador resolva o problema através de um conjunto bem definido de regras (algoritmo), de maneira que o computador recebe todas as instruções numa seqüência lógica que indique exatamente como deve proceder. Assim, ele pode executar as instruções quantas vezes forem necessárias de forma serial, com grande velocidade e precisão. Ou seja, grande parte do trabalho é realizado pelo programador, que precisa elaborar lista de instruções passo-a-passo para ter o problema resolvido. Os computadores são tão detalhistas quanto à qualidade das instruções que um algoritmo eficiente deve ser, de certa forma, perfeito, visto que grande parte do tempo de desenvolvimento de um programa é gasto com a sua depuração.

Contudo, este modo de processamento torna o computador menos adequados para certas tarefas que não podem ser descritas de maneira eficiente na forma de um algoritmo, tais como o reconhecimento de padrões (formas geométricas, voz) e controle motor. Geralmente, nesses casos as informações exigem um processamento de caráter paralelo, e não serial. O processamento paralelo é desempenhado pelo cérebro humano, que consegue realizar essas tarefas de maneira rápida e de forma natural, sem grande esforço. Apesar dessa maior facilidade, o cérebro tem uma velocidade de processamento consideravelmente menor que um computador. Tipicamente, os neurônios são de 5 a 6 ordens de grandeza mais lentos que um chip de computador. Eventos num chip ocorrem na faixa de nanosegundos (10^{-9} s), enquanto que os eventos neurais ocorrem na faixa de milisegundos (10^{-3} s). Apesar disso, a distribuição em paralelo acelera o processamento porque vários núcleos estão trabalhando ao mesmo tempo para resolver o problema (HAYKIN, 1994).

Essa diferença no tratamento das informações, pode ser constatado em alguns exemplos práticos. Um computador pode

resolver rapidamente e com um algoritmo simples, problemas que podem levar muito tempo para as pessoas comuns, como ordenar um lista telefônica com milhares de nomes ou obter a soma de uma coluna com centenas de números de sete ou oito dígitos. Por outro lado, na área de reconhecimento de padrões, seria muito trabalhoso ensinar um computador o reconhecimento de letras escritas. Cada letra (padrão) exigiria um grande detalhamento sobre a colocação dos pontos e posição e comprimento relativos dos traços. Ainda assim, todo esse trabalho poderia não ajudar o reconhecimento se houver uma pequena variação, como a letra ser escrita com outra caligrafia.

Além disso, o cérebro tem uma grande capacidade em, ao longo da interação e recepção de estímulos do ambiente, detectar aspectos importantes das informações processadas e generalizar esses conceitos para aplicá-los em situações semelhantes no futuro. Esse processo descreve, de um maneira geral, o aprendizado. Por exemplo, quando uma criança consegue obter resultado da operação $444 + 333$, depois de ter visto que $4 + 3 = 7$ e $44 + 33 = 77$ ela não somente memorizou os resultados anteriores como entendeu e generalizou o processo da operação matemática. Pode-se dizer que essa é uma das diferenças marcantes entre o computador e o cérebro. Enquanto este consegue solucionar problemas novos observando e interpretando a solução de problemas antigos, aquele apenas pode armazenar em sua memória as soluções já usadas, sem a possibilidade de progredir, de modo espontâneo, à um comportamento inteligente.

3.2 - REDES NEURAIS ARTIFICIAIS:

Rede neural é um grande conjunto de unidades altamente interligadas, que forma um sistema de processamento distribuído em paralelo. Este sistema é apropriado para a resolução de problemas que envolvem uma grande quantidade de dados e que sejam complicados demais para uma abordagem mais tradicional através de uma sequência lógica de procedimentos claros e bem definidos, como um algoritmo. O termo foi

cunhado pela análise do cérebro (rede neural biológica dos animais superiores). No cérebro humano, as células nervosas (neurônios) são as unidades de processamento que formam a rede. A conexão de várias unidades de processamento aumenta consideravelmente o poder de computação. Enquanto que um neurônio pode desempenhar uma única operação lógica, uma rede deles pode simular qualquer expressão lógica finita (MCCULLOCH e PITTS, 1943).

De maneira geral, a rede neural biológica tem a função de processar e interpretar os estímulos provenientes do ambiente externo, através dos sentidos, produzindo alguma resposta a este estímulo, que pode ser a aquisição de conhecimento (cognação), um movimento muscular ou a classificação de um novo padrão entre os já conhecidos.

ELSASSER (1958) descreve vários aspectos importante da rede neural biológica. Ele afirma que quando um histologista olha para o cérebro, ele vê algo que lembre um grande computador, um certo número de componentes básicos que se repetem várias vezes. Toda complexidade reside em interconexões inumeráveis e não na variedade de estruturas básicas. Até onde se sabe, o cérebro é constituído exclusivamente por neurônios, que não fazem nada a não ser conduzir pulsos eletroquímicos de um extremidade à outra. Alguns neurônios conduzem sinais que deixam o cérebro e outros chegam à ele, mas, sem esses casos extremos, neurônios ligam-se a outros neurônios. Portanto se alguém deseja estudar os fundamentos fisiológicos da memória, deveria começar com um tipo de modelo de neurônios interconectados. Não se pode afirmar que este modelo seja inteiramente verdadeiro, mas ele é simples e se apresenta baseado em dados anatômicos. Não há nenhuma evidência anatômica de um órgão que armazene a imensa quantidade de informação as pessoas retém na memória. A fisiologia do cérebro não traz nenhum sinal de um aparato de sensores.

As unidades de processamento de uma rede neural artificial são chamados, por analogia, de neurônios artificiais ou nódulos. Sua criação foi uma tentativa de simular, e não copiar, alguns aspectos mais gerais de

funcionamento de um neurônio biológico. Deve-se enfatizar que essa unidade de processamento é uma simplificação muito rudimentar de um neurônio verdadeiro.

O sinal que é transmitido pelo neurônio biológico é de natureza elétrica e está associado com a movimentação de íons de sódio e potássio através da membrana que delimita a célula nervosa. Enquanto o neurônio não está transmitindo um impulso nervoso, estado que é chamado de potencial de repouso, o potencial elétrico mantido no interior da célula é ligeiramente negativo em relação ao exterior graças à um mecanismo chamado de bomba de sódio. Um potencial menos negativo ou mais negativo que o potencial de repouso deixa a célula na condição despolarizada ou hiperpolarizada, respectivamente. O impulso nervoso é consequência de uma onda de despolarização, que é causada por um desequilíbrio no fluxo de íons entre a célula e o meio, definindo o chamado potencial de ação. Se sinais em número suficiente chegarem ao nódulo durante um curto período de tempo, período de soma latente, ele dispara um sinal de, aproximadamente, 100 mV pelo axônio (MEHROTRA, MOHAN e RANKA, 1997).

Ao contrário do que se poderia pensar a princípio, não existe continuidade na ligação entre os neurônios da rede. O espaço vazio entre dois neurônios chama-se sinapse nervosa, que fica compreendida entre a região pré-sináptica, definida pelo ponto terminal do axônio da célula cujo sinal é proveniente, e a região pós-sináptica, representada por uma ramificação do dendrito do neurônio que recebe o sinal. A conexão sináptica é feita por uma substância chamada de neurotransmissor que, ao chegarem na região pós-sináptica, induz uma nova movimentação de íons que produzem um impulso nervoso que flui pelo ramo do dendrito (fig. 3.1). Assim, fica caracterizada a transferência de sinal entre as unidades da rede neural biológica. É importante notar que as conexões não ocorrem com a mesma eficiência, as sinapses podem tanto inibir como excitar o dendrito que dará prosseguimento ao impulso nervoso, alterando a intensidade do sinal.

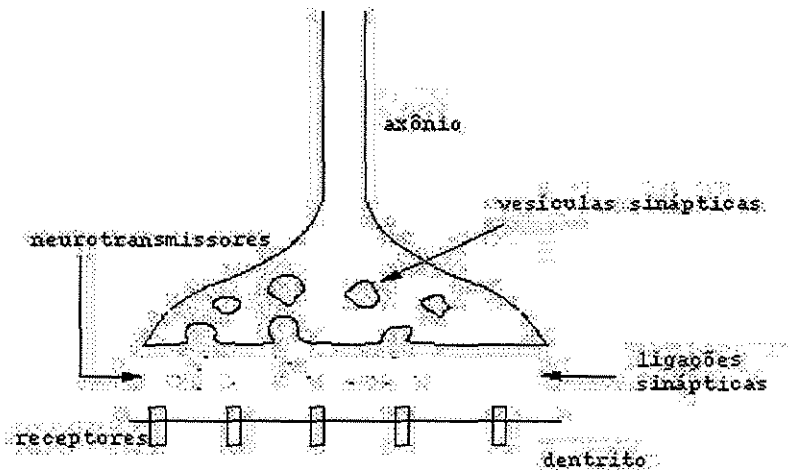


Fig. 3.1: Sinapse nervosa. (BEALE e JACKSON, 1990)

O fato de um neurônio receber um impulso não implica que ele necessariamente deverá gerar um impulso que será propagado pela rede. Existe uma barreira de despolarização mínima a ser superada. Todos os sinais que chegam à região pós-sináptica, tanto os de caráter inibitório como os de caráter excitatório, convergem para o corpo celular, onde são integrados (somados) e o resultado deve ultrapassar um valor mínimo, chamado de limiar de disparo, para que ocorra a onda de despolarização e, por consequência, o impulso nervoso.

3.2.1 - O Neurônio Artificial:

Assim como uma rede neural biológica é um conjunto de células que, estando altamente interligadas, trocam informações para o funcionamento do sistema como um todo, os neurônios artificiais - perceptrons - são os blocos de construção de uma rede neural artificial. Eles são as unidades responsáveis pelo processamento e transmissão das informações que fluem pela rede. É através do trabalho coordenado dos nódulos, ou seja, do processamento distribuído, que a rede consegue atingir seus objetivos. O perceptron foi proposto por ROSENBLATT (1961) como um sistema auto-organizador. Seu primeiro propósito foi de esclarecer o

problema de funcionamento cerebral a partir de sua estrutura, apresentando também aplicações como reconhecedor de padrões (BLOCK, 1962).

A analogia entre os neurônios biológico e artificial é muito grosseira e essa foi a intenção dos seus criadores. A partir de um universo de detalhes pertinentes ao estudo neurológico da célula nervosa, extraiu-se apenas os aspectos mais importantes e globais do seu funcionamento. No entanto, esses aspectos são suficientes para conferir potencial para que a rede possa resolver os problemas para os quais ela foi projetada. MCCULLOCH e PITTS (1943) recebem o crédito por desenvolver o primeiro modelo de um neurônio artificial, que é bastante simplificado e tem com características:

- A atividade do neurônio era do tipo binário;
- Um certo número de sinapses deveriam ser excitadas dentro de um período de tempo - período de adição latente - para excitar o neurônio;
- O atraso determinante da sistema nervoso é devido ao atraso sináptico - tempo entre os pulsos que chegam ao neurônio e o próprio pulso;
- A atividade de qualquer sinapse inibitória cancela absolutamente a excitação do nódulo;
- A estrutura da rede não muda com o tempo.

Essencialmente, o nódulo calcula a soma dos sinais de entrada, e dela subtrai um valor que simula o limiar de disparo. O valor obtido é chamado de nível de ativação e é submetido a uma função matemática, conhecida por função de ativação ou função de transferência. O resultado dessa função é o sinal de saída do neurônio artificial. A figura 3.2 oferece uma visão geral desse modelo.

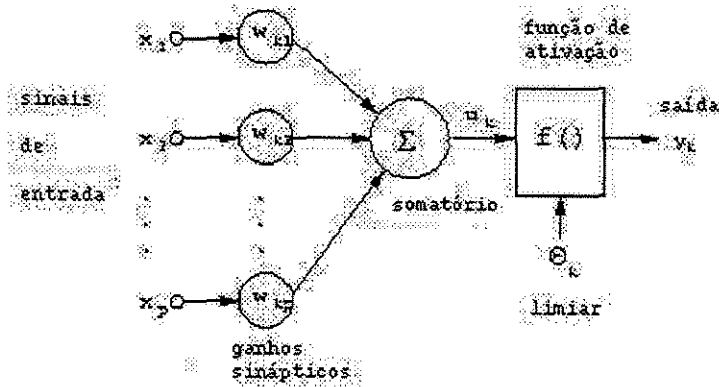


Fig. 3.2: Modelo do neurônio artificial. (HAYKIN, 1994).

O nódulo pode ser representado pelas equações:

$$a_j = \sum_{i=1} x_i w_{ij} - \theta \quad (3.1)$$

e

$$y_j = f(a_j) \quad (3.2)$$

Os componentes do vetor x correspondem aos sinais de saída dos nódulos que alimentam a unidade representado na figura e são análogos aos impulsos nervosos na região pré-sináptica. Os componentes da matriz w são chamados de ganhos sinápticos e representam um caráter qualitativo e quantitativo das sinapses nervosas de excitar ou inibir os impulsos que são transmitidos por elas, podendo assim, ter um sinal positivo ou negativo. Para simplificar a notação, o termo limiar θ pode ser incorporado no somatório da equação (3.1), de modo que se tenha

$$a_j = \sum_{i=0} x_i w_{ij} \quad (3.3)$$

Sendo $x_0 = -1$ e $w_0 = \theta$.

As parcelas $x_i \cdot w_{ij}$ que são somadas para o cálculo do nível de ativação do nódulo, com exceção daquela referente ao termo limiar, são análogas aos sinais nas regiões pós-sinápticas dos neurônios biológicos, ou seja, são os impulsos

que sofreram a influência das conexões sinápticas.

O modelo de neurônio artificial foi proposto em 1943 por W. McCulloch e W. Pitts, com um particularidade de produzir um saída binária, ou seja, havia somente duas possibilidades para o resultado da função de ativação: saída, que correspondia ao valor 1, ou não-saída, que correspondia ao valor 0. Assim, a função de ativação era uma função degrau, representada pela equação:

$$\begin{aligned} f(a) &= 1 \text{ se } a \geq 0 \\ \text{ou} \\ f(a) &= 0 \text{ se } a < 0 \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde o parâmetro de ativação é definido pela equação (3.3).

Conforme o aparecimento de problemas que não possam ser resolvidos dessa forma, a teoria evoluiu para funções que fossem estritamente crescentes, tivessem aproximação assintótica nos extremos e apresentassem diferenciabilidade em todo o intervalo de sua definição. Por isso, a grande maioria das redes neurais aplicadas atualmente empregam a função sigmóide, representada na figura 3.3, que é escrita como:

$$f(a) = \frac{1}{1 + e^{-ba}} \quad (3.6)$$

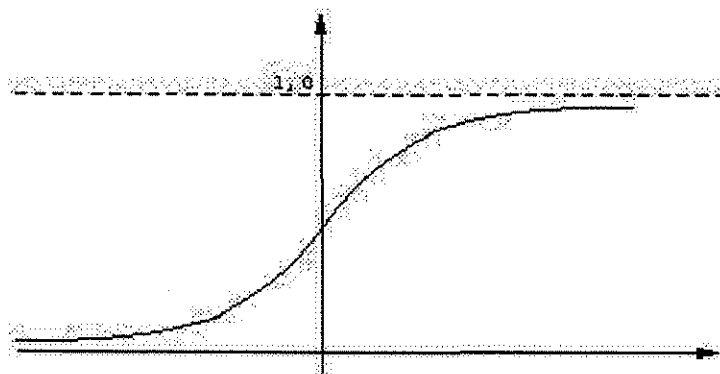


Fig. 3.3: Função sigmóide.

O parâmetro b é usado definir a inclinação da curva, se ele tender a infinito, a curva tende a uma função degrau.

Além da função sigmóide, também pode ser usada a função tangente hiperbólica, eq. 3.7, por apresentar características análogas:

$$f(a) = \tanh\left(\frac{a}{2}\right) = \frac{(1 - \exp(-a))}{(1 + \exp(-a))} \quad (3.7)$$

Contudo, esta função fornece números no intervalo de $[-1; +1]$, ao contrário da função sigmóide tradicional que está restrita ao intervalo $[0; 1]$.

3.2.2 - Arquiteturas das Redes Neurais:

O notável poder de computação cerebral, obviamente, não se deve somente à capacidade isolada da célula nervosa, mas, em muito maior grau, à maneira como uma imensa quantidade dessas células está estruturada. Elas estão organizadas de maneira a se comunicar com muitas outras, ou seja receber e enviar informações. Para enfatizar a importância desse fator numérico, basta observar a estimativa de que existem 10^{10} neurônios no cérebro e que cada um deles está ligado a 10^4 outros. Em relação às redes artificiais, um comportamento semelhante é observado. O uso de um único nódulo é suficiente apenas para a solução de problemas muito simples, como a simulação de funções booleanas (lógicas) básicas como E e OU. Uma única unidade já não é suficiente para simular funções um pouco mais sofisticadas, como XOR (ou-exclusivo). Portanto deve-se concluir que os problemas mais complicados devem ser resolvidos por um conjunto de unidades interconectadas, que formam um sistema de processamento distribuído, cuja filosofia básica é dividir um grande trabalho por um número razoável de unidades simples. Assim, cabe ao projetista estabelecer qual o número de nódulos e as conexões entre eles.

Considerando a interação entre uma rede neural e o ambiente externo, pode-se classificar os nódulos que a compõem. Os sinais enviados pelo ambiente são recebido e

distribuídos pelos nódulos de entrada. Eles estão ligados aos nódulos ocultos, que são responsáveis pela maior parte do processamento. Finalmente, os nódulos de saída definem a resposta aos estímulos de entrada.

A maneira que as unidades e suas respectivas ligações estão dispostas é chamada de arquitetura da rede neural. A forma mais geral possível é aquela chamada de totalmente conectada, onde todas as unidades estão ligadas às demais. A figura 3.4 mostra um exemplo, bem como os respectivos ganhos sinápticos.

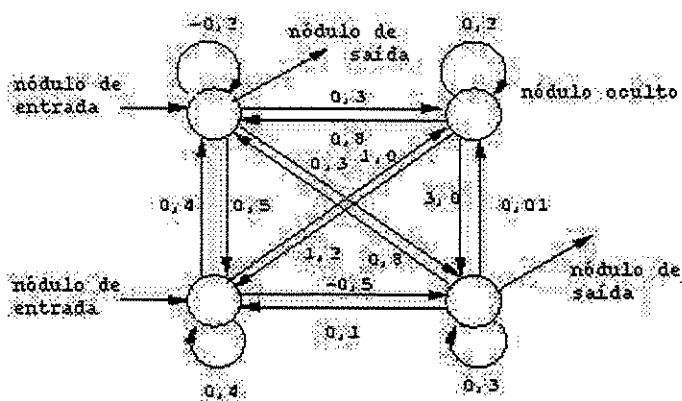


Fig. 3.4: Arquitetura totalmente conectada.

(MEHROTRA, MOHAN e RANKA, 1997)

É notável a presença de ligações recursivas, ou seja, o sinal de saída retorna ao próprio nódulo de origem. Essa prática também é uma forma de retro-alimentação, onde o sinal de entrada é parcialmente influenciado pelo sinal de saída. A arquitetura totalmente conectada possui um aspecto que não é análogo à rede biológica, onde um neurônio não pode estar ligado a um outro que se encontra muito distante (MEHROTRA, MOHAN e RANKA, 1997).

Os nódulos também podem ser agrupados em camadas de acordo com a função de cada um. Deve haver uma camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas e uma camada de saída, cada uma com as respectivas unidades. Nessa organização em camadas o arranjo mais utilizado, chamado de rede neural feedforward. Neste caso, um nódulo somente pode se comunicar

com outro da camada seguinte, no sentido entrada-saída da rede. Uma rede dessa categoria (fig. 3.5) pode ser denominada de rede feedforward totalmente conectada, onde cada nódulo se liga a todos os outros da próxima camada, ou de parcialmente conectada, onde não existem todas as conexões.

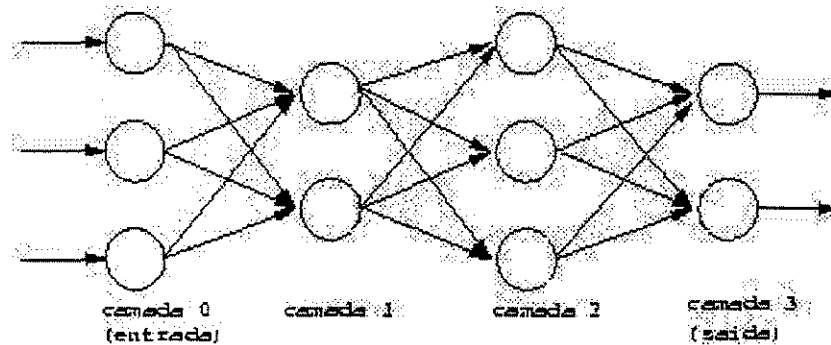


Fig. 3.5: Arquitetura feedforward.
(MEHROTRA, MOHAN e RANKA, 1997)

De modo simplificado, é costume descrever a arquitetura da rede através de uma sequência de números referentes ao nódulos de cada camada. Assim, a rede da figura 3.5 é descrita como 3-2-3-2. Ainda analisando essa figura, pode-se notar que existem quatro fileiras de nódulos. Contudo, não há processamento nos nódulos de entrada, também chamados de nódulos de ligação direta. A função deles é apenas de distribuir os sinais de entrada pelos nódulos da primeira camada oculta. Logo, essa rede pode ser denominada como tendo três camadas.

O número de camadas é um parâmetro importante porque, um maior número de camadas implica numa natureza mais complexa das informações passíveis de serem tratadas pela rede neural. No que diz respeito à classificação de padrões, um maior número de camadas implica numa maior liberdade para o ajuste da superfície de separação entre as classes. Segundo o teorema de Kolmogorov, para se criar uma região de

complexidade arbitrária, não é necessária mais que três camadas de processamento efetivo (BEALE e JACKSON, 1990). A figura 3.6 mostra algumas regiões de separação que podem ser conseguidas em função do número de camadas.

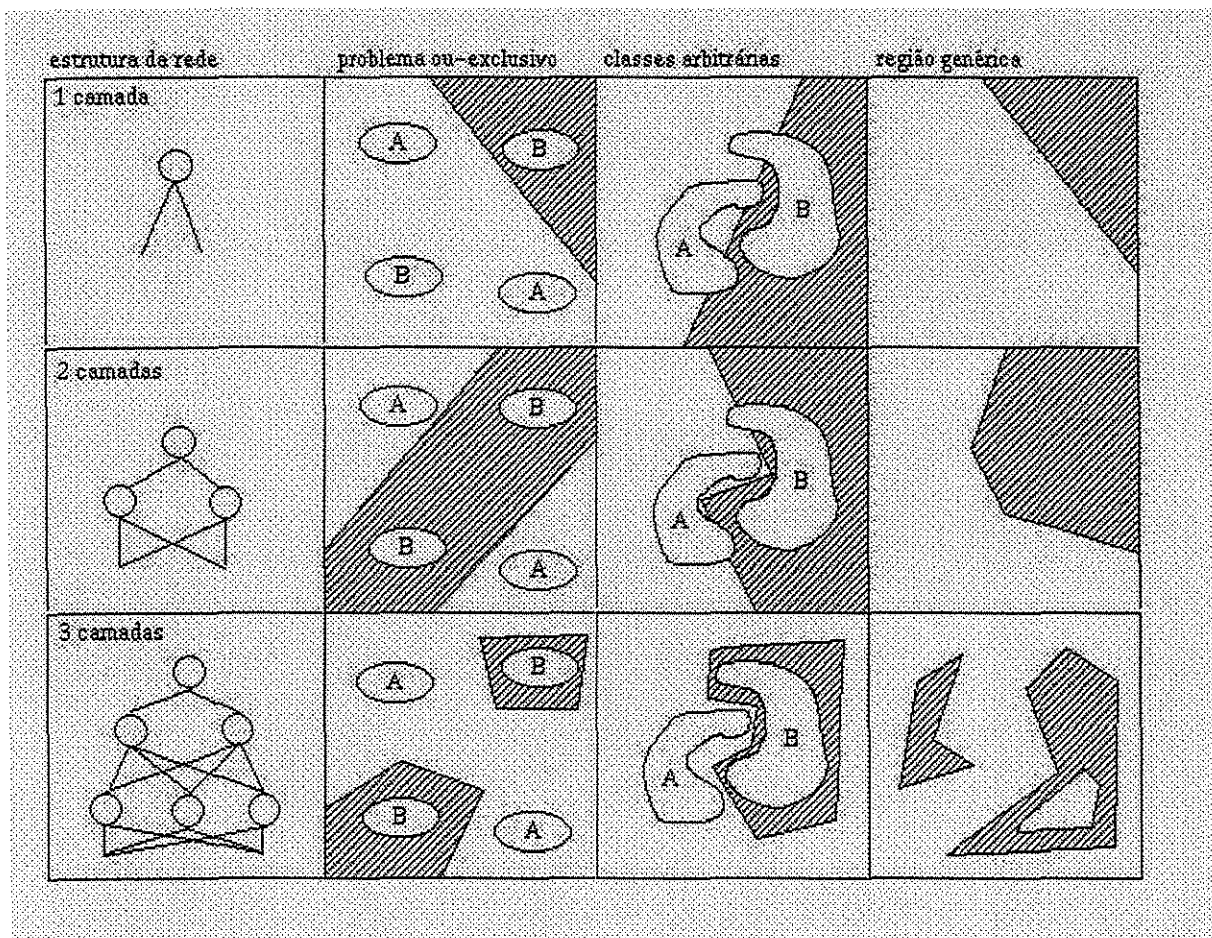


Fig. 3.6: Capacidade de classificação conforme a arquitetura.

Evidentemente, não foram apresentadas todas as arquiteturas possíveis de uma rede neural, mas as que são encontradas com maior frequência na prática.

3.3 - O APRENDIZADO NEURAL:

O processo de aprendizagem é um dos fatores que mais favorecem o uso das redes neurais em aplicações a sistemas complexos, com muitas variáveis ou que exijam grande flexibilidade. É o aprendizado, também chamado de

treinamento, que mostra à rede como deve ser seu comportamento quanto ao tratamento das informações recebidas. Traçando assim, os objetivos desejados. Para um programa de computador, aprender significa imitar a capacidade humana de, conforme a interação com o ambiente, adquirir e aprimorar seus conhecimentos e usá-los para resolver problemas com maior facilidade.

O treinamento ocorre por uma série de alterações nos ganhos sinápticos, conforme a equação

$$w_{ij}(n+1) = w_{ij}(n) + \Delta w_{ij}(n) \quad (3.8)$$

onde os termos $w_{ij}(n+1)$ e $w_{ij}(n)$ representam os ganhos sinápticos novo, a ser usado na próxima iteração ($n+1$), e o antigo, que foi usado na iteração (n), respectivamente. O cálculo do termo de adaptação $\Delta w_{ij}(n)$ é feito conforme um dos vários algoritmos de aprendizado que, segundo HAYKIN(1994), deve ser escolhido de acordo com a função a ser desempenhada pela rede. Entre as mais comuns estão: aproximação de funções complexas, associação de padrões, classificação de padrões e controle.

HEBB(1949) foi o primeiro a elaborar o mecanismo de aprendizado fisiológico para a modificação da sinápsse. Ele estabeleceu que, quando o axônio de uma célula A está perto o suficiente para excitar a célula B e, de modo repetitivo e persistente, participa do seu disparo, algum processo de crescimento ou mudança metabólica ocorre em uma ou ambas as células no sentido de aumentar a eficiência de A disparar B.

Essa relação entre o comportamento das duas células e a alteração na força sináptica entre elas pode ser percebida no algoritmo hebbiano de aprendizagem, que é um dos mais simples. Dado o nível de ativação a_i , do nódulo i , e a_j , do nódulo j , o ajuste da conexão sináptica entre eles é dado por

$$\Delta w_{ij} = c a_i a_j \quad (3.9)$$

onde c é uma constante pequena, para garantir a estabilidade na convergência. É notável que essa simples equação encerra o conceito estabelecido por Hebb. Ou seja, se um sinal de atividade positivo favorece o disparo do nódulo j , então um sinal positivo de i resulta num aumento de ganho sináptico

w_{ij} . Obviamente, isso fortalece a conexão entre os dois núdulos e aumenta a influência do núdulo i sobre o disparo do núdulo j , conforme o mecanismo de Hebb.

A adaptação desses parâmetros está inserida num processo em que a rede neural é estimulada por uma determinada quantidade de exemplos dos sinais que deverão ser processados pela rede durante sua operação. De acordo com certos paradigmas de aprendizagem, os ganhos sinápticos são ajustados de modo a melhorar a qualidade dos sinais de saída, ou seja, da resposta da rede neural ao ambiente.

3.3.1 - Paradigma supervisionado:

Durante o treinamento, para cada estímulo recebido do ambiente, existe uma resposta que representa perfeitamente a finalidade da rede neural e é chamada de resposta desejada. No entanto, como os ganhos sinápticos são iniciados de maneira aleatória, há uma diferença entre a resposta obtida pela rede e a resposta desejada, conhecida como erro. Assim, o paradigma supervisionado pode ser interpretado como um professor responsável por indicar qual deve ser a modificação nos ganhos sinápticos específicos para que o erro seja reduzido até um nível aceitável (fig. 3.7).

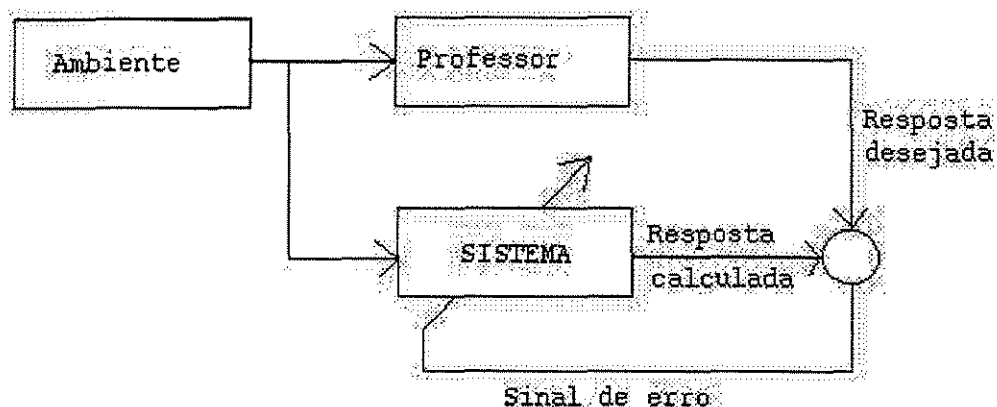


Fig. 3.7: Esquema do treinamento supervisionado.

Portanto, o treinamento supervisionado requer que sejam processados pela rede pares de exemplos entrada-saída, que deve ser aproximados por ela. A cada par de exemplos corresponde uma iteração. Sendo $d_k(n)$ o sinal de saída desejado do nóculo de saída k na iteração n e $y_k(n)$, o sinal de saída obtido, pode-se calcular o erro referente a este nóculo

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) \quad (3.10)$$

Para se verificar a proximidade entre os parâmetros valores de $d_k(n)$ e $y_k(n)$ de todos os nóculos, usa-se a soma

$$E(n) = \frac{1}{2} \sum_k e_k^2(n) \quad (3.11)$$

Contudo, a avaliação de desempenho ao longo de todos os N pares de treinamento - conjunto de treinamento - é feita pela média

$$E_{med} = \frac{1}{N} \sum_n E(n) \quad (3.12)$$

A influência dos ganhos no erro $E(n)$ pode ser visualizado numa superfície multidimensional, onde as variáveis $w_{ij}(n)$ e E são as coordenadas. Desse modo, o objetivo é de atingir um valor de mínimo global para E . Para isso, a alteração dos ganhos sinápticos $w_{ij}(n)$ em alguns algoritmos é baseada não somente nos valores dos erros $e_k(n)$, como também no gradiente da função $E(n)$, que resulte no seu decréscimo. A figura abaixo mostra uma típica superfície de erro bidimensional.

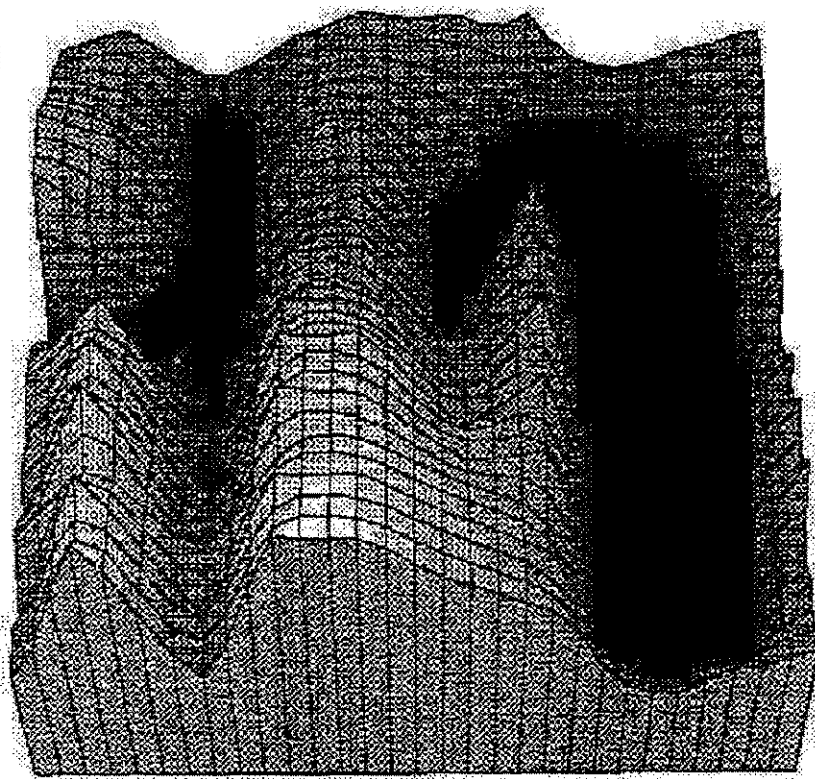


Fig. 3.8: Superfície de erro (BEALE e JACKSON, 1990).

Idealmente, cada iteração deve ser um passo em direção do ponto de mínimo global da superfície. No entanto, dependendo da escolha do algoritmo de aprendizagem ou certos parâmetros desse algoritmo, a convergência pode ser prejudicada. Além da possibilidade de que o aprendizado fique restrito a um ponto de mínimo local, pode haver lentidão excessiva ou um caráter oscilatório muito acentuado quando a convergência tem dificuldade em acompanhar a trilha que conduza ao mínimo global.

SELFRIEDE (1958) compara um processo de aprendizagem, a tentativa de se atingir um ponto extremo numa superfície, com um homem cego que tenta subir um morro, uma vez que não se conhece a topografia da superfície de erro. Da mesma forma que um homem cego examinaria um pequena área em sua volta para decidir qual direção, provavelmente, chegará ao pico mais rapidamente, pode-se partir de um vetor aleatório e, a cada iteração, verificar o resultado da adição de pequenos

vetores em diversas direções.

3.3.2 - Paradigma não supervisionado:

Ao contrário dos outros dois paradigmas, o ajuste de ganhos sinápticos não é consequência de nenhuma avaliação se a resposta a um determinado estímulo foi satisfatória ou não. A princípio, não existe uma resposta considerada correta ou errada para os sinais de entrada, o que existe é uma competição entre os nódulos da camada de saída no sentido de escolher qual deles produz um sinal de saída com maior intensidade. Ou seja, os sinais recebidos pela camada de entrada são enviados, através das respectivas conexões, para a camada de saída, e aquele nódulo com maior sinal é definido como sendo apto a responder ao padrão do estímulo dado. Assim, os ganhos sinápticos que levam ao nódulo vencedor são incrementados às custas dos demais. Portanto, a cada classe de padrões similares, haverá um nódulo especializado que será ativado mais facilmente que os outros e, dessa maneira, os diversos padrões são reconhecidos.

A competição entre os nódulos de saída pode ser vista como uma consequência da limitação de recursos, fazendo uma analogia com sistemas biológicos (MEHROTRA, MOHAN e RANKA, 1997). No cérebro, manter sinapses e conexões fortes requer recursos que são limitados. Esses recursos seriam desperdiçados se um grande número de neurônios respondessem de forma similarmente intensa para certas padrões. O mecanismo de competição pode ser visto como uma forma de assegurar respostas neurais seletivas a vários estímulos.

3.3.3 - Paradigma de reforço:

Assim como os algoritmos supervisionados de aprendizagem, o método de reforço conta com a presença de um avaliador do sinal emitido pela rede neural. No entanto, este sinal não é comparado com um sinal desejado para que haja treinamento. Não existe uma resposta objetiva que seja tida

como correta para cada estímulo. A cada sinal de entrada, o avaliador, também chamado de crítico, fornece um escalar que serve para medir o desempenho da rede.

A idéia em que se baseia este paradigma é o de explorar o ambiente para tentar encontrar quais são os parâmetros ajustáveis que se aproximam de um comportamento pretendido. Como não existem, a princípio, os padrões de respostas desejadas, não há como a rede receber uma informação direta sobre qual deve ser a direção indicada para a melhoria de desempenho.

Segundo MILLER, SUTTON e WERBOS (1990), as informações direcionais podem ser estimadas pela diferenciação do pontos discretos de entrada e saída ou por tentativa e erro, observando quais são as alterações que produzem um maior aprimoramento. O treinamento por reforço tem uma característica de estabelecer uma forte ligação entre uma situação favorável e as ações que levaram à ela. Por outro lado, se algumas ações produzem uma situação desfavorável, a ligação é mais fraca e isso reduz a probabilidade de repetição dessas ações.

Neste paradigma existe um conflito entre decidir se o sistema deve alterar o curso do comportamento para obter mais informações direcionais ou se deve usar as informações já obtidas para buscar a melhoria de desempenho (WHITE e SOFGE, 1992).

3.4 - APLICAÇÕES À DETECÇÃO DE FALHAS:

Todo mecanismo de controle deve contar com três aspectos fundamentais na sua interação com o processo químico: medição, decisão e atuação. Primeiramente, é necessário que o mecanismo seja alimentado por informações referentes ao processo, através de sensores que medem variáveis selecionadas. Assim, esse conjunto de dados é interpretado de acordo com os objetivos do sistema de controle, ou seja, é tomada uma decisão sobre o que deve ser feito para manter o processo operando de forma mais

satisfatória possível. Finalmente, é acionado um equipamento, geralmente uma válvula, que efetivamente exerce o controle sobre uma variável do processo.

Neste contexto, as redes neurais contribuem a interpretação dos dados provenientes do processo. Elas são ensinadas a reconhecer um determinado estado do processo como pertencente à uma classe de operação. Na detecção de falhas, as diversas classes representam as modalidades de falha e a operação considerada normal. Ou seja, a função a ser desempenhada pela rede é a de estabelecer um mapeamento entre as condições operacionais e seus respectivos significados.

Em tempos passados, grande parte da detecção de falhas era feita pelos próprios operadores que, observando o comportamento e a dinâmica do processo, utilizava seu conhecimento adquirido e até mesmo intuição para determinar se há ocorrência de alguma falha. Quanto mais experiente fosse o operador, melhor seria a qualidade de seu diagnóstico. As redes neurais automatizam essa atividade. Da mesma forma que o operador, a rede lê um vetor de medidas do processo e determina em que categoria esse padrão se ajusta que forma a ter maior similaridade com os demais elementos. O conjunto de treinamento faz o papel do conhecimento adquirido pelo operador na contínua avaliação do processo. Assim como no caso do operador, um treinamento mais longo tende a aprimorar o desempenho da rede. Uma prova disso é que, nos casos mais complexos, é recomendado que os sinais sejam enviados para duas redes neurais: uma delas em treinamento e outra executando a classificação desejada. Passado um certo tempo, a rede que estava em treinamento passa a classificar e vice-versa. Dessa forma, qualquer ajuste no processo é prontamente incorporado ao treinamento.

Facilitando a interpretação dos sinais vindos do processo, as redes neurais tornam mais rápida e segura a tomada de decisão sobre o que fazer a respeito de uma condição do processo. Não é necessário que a atenção do operador esteja voltada a várias informações. Essa tarefa é delegada à rede que transforma todas essas informações numa mensagem simples do tipo: falha no reator, alta temperatura.

Várias características das redes neurais são particularmente interessantes para a detecção de falhas: alta velocidade computacional devido ao intenso paralelismo, alta robustez devido à representação distribuída e capacidade de adaptação, aprendizado e generalização. Esta última tem grande utilidade, considerando a natureza não-estacionária dos processos químicos. Um sinal é classificado corretamente pela rede mesmo que não faça parte do conjunto de treinamento, é suficiente que haja apenas similaridade com os dados de sua classe no treinamento. Na verdade, as redes neurais generalizam até mesmo sinais numa faixa mais ampla que o treinamento (HOSKINS e HIMMELBLAU, 1990).

LERGER, GARLAND e POEHLMAN (1998) apontam algumas limitações no uso das redes. Primeiramente, é preciso considerar todas as falhas que se deseja detectar. Deve-se começar com um conjunto básico de falhas e incorporar novas falhas à conforme elas se mostrarem relevantes. Em segundo lugar, os dados disponíveis nos registros de operação da planta podem não ser em quantidade suficiente para o treinamento adequado da rede, uma vez que, obviamente, não é desejado que as falhas ocorram frequentemente. Neste caso, os dados registrados podem ser usados para validar o desenvolvimento de um programa de simulação, que produzirá mais dados para o treinamento. Deve ser notado que, além das redes neurais, existem outros métodos estatísticos para o reconhecimento de padrões, que é uma técnica usada se a elaboração de um modelo ou a obtenção de informações sobre o mecanismo do processo for de grande complexidade.

VORA, TAMBE e KULKARNI (1997) comentam particularidades sobre alguns algoritmos de aprendizagem usados na detecção de

falhas. As redes RBF (*Radial Basis Function*) têm habilidade de rápida aprendizagem e generalização satisfatória. As redes baseadas em ART (*Adaptive Resonance Theory*) possuem as características estabilidade-plasticidade, ou seja, aprendem padrões novos sem esquecer os já aprendidos. Quanto à retropropagação de erros, apesar de ser um método robusto e eficiente, ele pode apresentar dificuldades na detecção de múltiplas falhas quando apenas uma rede é empregada (FAN, NIKOLAOV e WHITE, 1993).

O emprego de redes neurais na detecção de falhas é motivado, em parte, por restrições apresentadas pelos métodos que a precederam nesta função. Os sistemas especialistas, por exemplo, têm o inconveniente da dificuldade na aquisição de conhecimento, ausência de aprendizado e imprevisibilidade de resposta fora do conhecimento adquirido. Além disso, a não necessidade de um modelo é uma grande vantagem para as redes neurais em relação aos métodos que precisam dele, no que se refere à detecção de falhas. Além de poupar o trabalho, por vezes muito complexo, na construção do modelo, um erro contido no modelo pode gerar alguns alarmes falsos ou impedir que falhas reais sejam detectadas.

Para a detecção de falhas em situações que envolvam um conjunto considerável de equipamentos ou mesmo uma planta inteira, um série de redes neurais podem ser colocadas para aumentar a resolução da detecção de falhas. Uma rede mais ampla vigiaria toda a planta e, detectada uma falha numa região, uma segunda rede seria acionada para analisar essa região. Assim, o procedimento continua até que se tenha uma localização da origem da falha.

3.5 - CONCLUSÃO:

O sistema de processamento em paralelo confere às redes neurais artificiais várias qualidades que são altamente adequadas para a solução de muitos problemas de engenharia. No que se refere à detecção de falhas, essas características conferem grande vantagem às redes neurais em relação aos outros métodos.

A presença de funções de ativação do tipo sigmóide e similares aprimoram a não-linearidade da rede. Esse é um aspecto particularmente valioso para várias aplicações em engenharia química, devido à existência de muitos processos intrinsecamente não-lineares.

O uso de redes neurais em um sistema dispensa o conhecimento prévio de um modelo do sistema e de informações detalhadas sobre seus mecanismos internos. O aprendizado neural permite à rede que ela ajuste uma série de parâmetros, que lhe dão o conhecimento necessário para desempenhar a tarefa desejada. Uma vez treinada, a rede é capaz de simular as relações existentes entre os sinais de entrada e saída. Por exemplo, suponha que se queira fazer previsões do tempo usando redes neurais. Isso é possível desde que se tenha um conjunto suficientemente grande de dados representativos que descrevam uma série de variáveis meteorológicas (umidade do ar, velocidade do vento, temperatura) que sejam correlacionados de modo confiável a certos estados do tempo (frio, calor, chuva). Todas essas informações são usadas para que a rede ajuste certos parâmetros e possa reproduzir e generalizar as relações representadas pelos dados. Portanto, não existe a necessidade de entender o funcionamento de fenômenos atmosféricos para se aplicar as redes neurais. Esse exemplo ilustra a adequação das redes para tarefas de mapeamento entrada-saída, que é feito para generalizar uma relação do tipo causa e efeito se apenas alguns exemplos particulares estão disponíveis. Essa independência em relação ao processo onde é aplicada revela outra vantagem das redes neurais: sua portabilidade. Uma vez conhecida a metodologia, uma mesma rede neural, com algumas modificações, pode ser aplicada a uma grande número de processos químicos, fazendo dela uma ferramenta muito versátil.

Além disso, as redes neurais são providas de tolerância a falhas, aspecto que parece ser típico de sistemas distribuídos. Ser tolerante a falhas significa que o sistema não terá seu desempenho significativamente prejudicado se uma pequena parte de suas unidades de processamento se tornar inoperante. Isso é consequência da partilha do trabalho

computacional entre um número razoável de unidades que, sendo independentes, reduzem muito a probabilidade de a ineficácia de alguns se propagar por toda a rede. Para um sistema que se destina a funções vitais como manter a segurança e a estabilidade do processo, a tolerância a falhas aumenta em muito a confiabilidade das redes neurais. Esse aspecto é análogo à rede biológica no sentido de que uma pessoa que sofreu um dano cerebral localizado ainda pode manter grande parte das funções cerebrais operando normalmente. Na verdade, grandes áreas do cérebro podem ser removidas sem que haja uma evidente perda permanente no funcionamento (BLOCK, 1962).

Capítulo 4

Pirólise do Etano

Análise da literatura

4.1-INTRODUÇÃO:

A indústria petroquímica produz uma série de matérias-primas para fábricas de plásticos, fibras sintéticas, detergentes e outros derivados orgânicos. Contudo, essa variedade não é proveniente, de forma direta, do gás natural e do primeiro fracionamento do petróleo, que são compostos basicamente saturados e cuja reatividade é mediana. Assim, existem importantes processos petroquímicos que produzem os compostos insaturados mais relevantes, como acetileno, etileno, propileno e butadieno.

O etileno era produzido industrialmente pela liquefação e fracionamento dos gases do forno de coque, por desidratação do álcool etílico ou ainda pela hidrogenação parcial do acetileno. De acordo com CHAUVEL e LEFEBVRE (1986), essas rotas de obtenção persistiram em muitos países até o final da segunda guerra mundial, quando a pirólise de gases e naftas passou a ser adotada. Em 1920, uma planta piloto operando com etano e propano foi construída pela Union Carbide e Carbo Co. Mas foi somente em 1946 que a Shell Chemical construiu seu primeiro complexo petroquímico usando gases da refinaria como alimentação.

O craqueamento por vapor consiste na pirólise de hidrocarbonetos saturados do gás natural e frações do petróleo, na presença de vapor. Ele produz etileno, mas também propileno e outros produtos insaturados, inclusive aromáticos, dependendo da alimentação e das condições operacionais.

A importância do etileno pode ser medida pelo número de derivados orgânicos sintetizados a partir dele. Como derivados diretos, podemos citar: poli-etileno, dibrometo de etileno, óxido de etileno, álcool etílico, etil benzeno, dicloreto de etileno, éter dietílico. Ainda há derivados indiretos, tais como: estireno, etileno glicol, acetaldeído, cloreto de vinila, etanolamina, ácido acético, anidrido acético e acetato de vinila (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1966b). Deve-se considerar também que muitos desses compostos são parte fundamental na produção de vários outros.

4.2 - CONSIDERAÇÕES FÍSICAS E QUÍMICAS:

Os hidrocarbonetos insaturados são estáveis em relação aos saturados somente em altas temperaturas, conforme a figura 4.1. Nela, a formação dos produtos é tanto mais favorecida quanto mais negativa for a diferença $\Delta G^{\circ}_{\text{prod}} - \Delta G^{\circ}_{\text{reag}}$. Portanto, a produção de etileno, a partir do etano, é significativa acima de 750 °C.

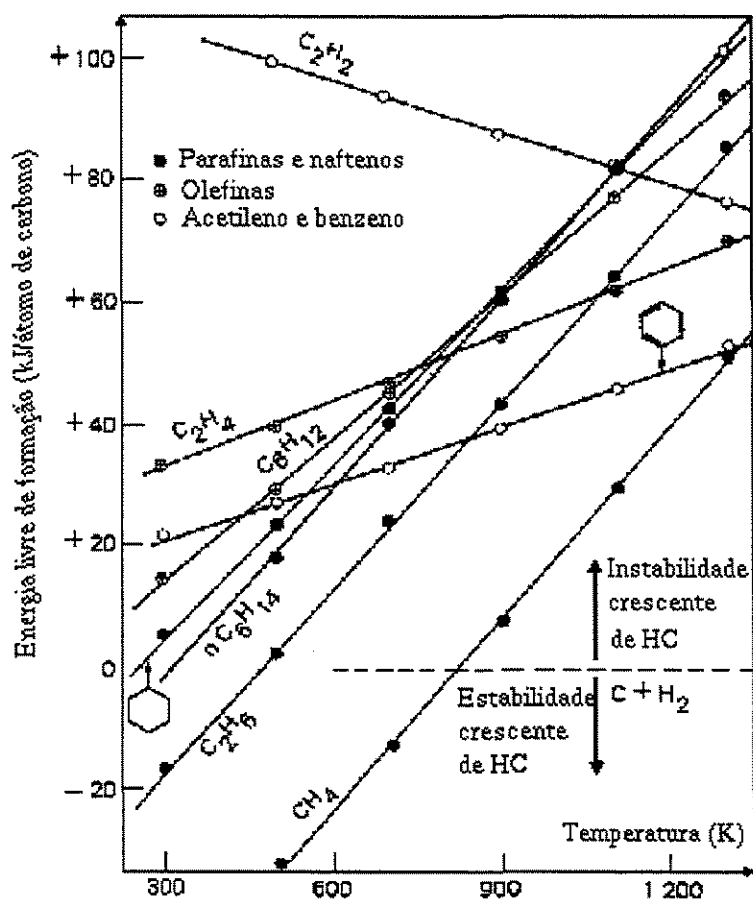


Fig. 4.1: Estabilidade termodinâmica de hidrocarbonetos (CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

Analisando a estrutura da molécula dos hidrocarbonetos, nota-se que há possibilidade de reações de craqueamento, quebra da ligação C-C com 345 kJ/mol, e desidrogenação, quebra da ligação C-H com 423 kJ/mol (CHAUVEL e LEFEBVRE,

1986).

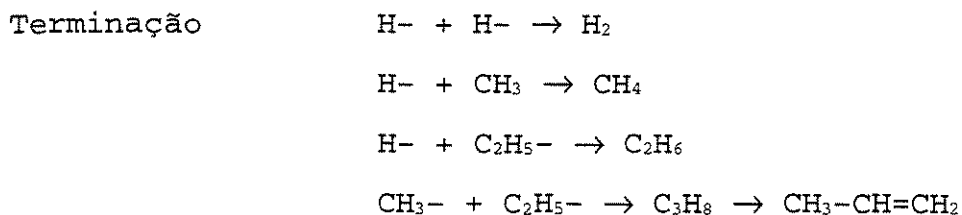
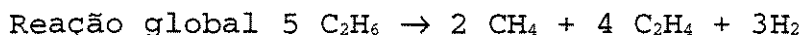
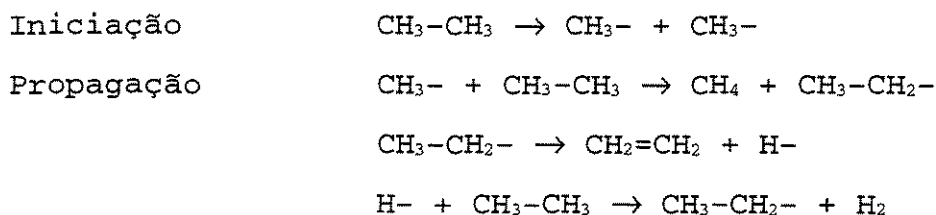


$$\Delta G^\circ = 75200 - 142T \quad \text{em J/mol} \quad (4.1)$$



$$\Delta G^\circ = 125400 - 142T \quad \text{em J/mol} \quad (4.2)$$

Rice estabeleceu em 1930 o mecanismo da pirólise de hidrocarbonetos por ação de radicais livres (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1967b). A cadeia começa pelo craqueamento do etano, formando dois radicais livres metila que atacam uma nova molécula de etano, dando início à cadeia mostrada abaixo



As características termodinâmicas e cinéticas impõem, em linhas gerais que haja considerável adição de calor, limitação da pressão parcial de hidrocarbonetos no reator e tempos de residência muito pequenos.

O mecanismo tendo o etano como reagente é o mais simples, conhecido e previsível. A cadeia de reações sempre tem início com a quebra da ligação C-C, de menor energia, e formação de radicais metila. No caso de um reagente com cadeia carbônica maior, existem mais possibilidades de quebra

de ligação e é mais difícil determinar qual o radical formado. Por isso, a variedade de produtos é maior e sua distribuição é bastante dependente das condições operacionais. É uma situação complexa onde certos produtos produzidos inicialmente (hidrogênio, metano, etileno e propileno) podem sofrer novas reações de hidrogenação ou desidrogenação. Reações de condensação podem gerar ciclenos e aromáticos. A primeira etapa da cadeia de reações, a quebra da ligação entre carbonos, é determinante na taxa de reação. Assim, a pirólise pode ser acelerada pela adição de radicais livres vindos de fontes externas à pirólise (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1967c). Os principais produtos da pirólise são hidrogênio, metano e etileno. Em menores quantidades estão presentes acetileno, propano, propileno, aromáticos e compostos C_4 e C_5 .

Segundo ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967b), a pirólise de um hidrocarboneto individual é uma reação de primeira ordem, representada pela seguinte equação na forma integrada

$$kt = 2,3 \log\left(\frac{1}{1-X_A}\right) \quad (4.3)$$

A constante da taxa pode ser calculada pela equação de Arrhenius

$$k = A e^{-E_a/RT} \quad (4.4)$$

que é escrita mais convenientemente como

$$\log K = B - (C/T) \quad (4.5)$$

Para os principais reagentes usados de forma isolada esses parâmetros cinéticos são mostrados na tabela 4.1

TABELA 4.1

Composto	B	C	Ea (J/mol)
etano	14,6737	28.452	302.776
propileno	13,8334	26.450	281.470
propano	12,6160	23.524	250.333
isobutano	12,3173	22.550	239.967
n-butano	12,2545	22.160	235.817
n-pentano	12,2479	21.811	232.103

A reatividade do etileno pode ser medida pela experiência de KINNEY e CROWLEY (1954). Em pressão atmosférica e 1090K, 27,5% do etileno reagiu em 0,54s. Os principais produtos foram hidrogênio, metano, etano, propileno, butadieno e um líquido aromático. Entre os produtos, 83% tinham peso molecular superior ao etileno, o que prova sua tendência em sofrer reações de adição, incluindo polimerização.

4.3 - DESCRIÇÃO DO PROCESSO INDUSTRIAL:

Industrialmente, o processo de pirólise é dividido em seção quente, onde se situa o forno que abriga a reação e a seção fria, onde ocorre a purificação dos produtos e a recuperação energética.

A figura 4.2 mostra a seção quente do processo com a alimentação de naftas, que é análoga à pirólise alimentada por etano. Dentro do forno, os gases atravessam uma zona de convexão (parte 1) e uma de radiação (parte 2). A alimentação entra no forno pela zona de convexão, onde é pré-aquecida e misturada com o vapor, também pré-aquecido na convexão. A pirólise propriamente dita ocorre na zona de radiação, uma vez que a temperatura apropriada para a reação foi atingida e uma parte do calor recebido é usado para satisfazer a qualidade endotérmica da pirólise. Para evitar a polimerização quando a reação se prolonga além do ponto desejado, dado que o etileno produzido tem reatividade considerável, o efluente do forno é resfriado num trocador

indireto com água (parte 3) e, numa segunda etapa, diretamente com o reciclo dos componentes mais pesados da pirólise (parte 4 e 5). A distância entre a saída do forno e o resfriamento deve ser pequena para impedir um tempo de residência adicional. Uma coluna (parte 8) purifica o produto desejado.

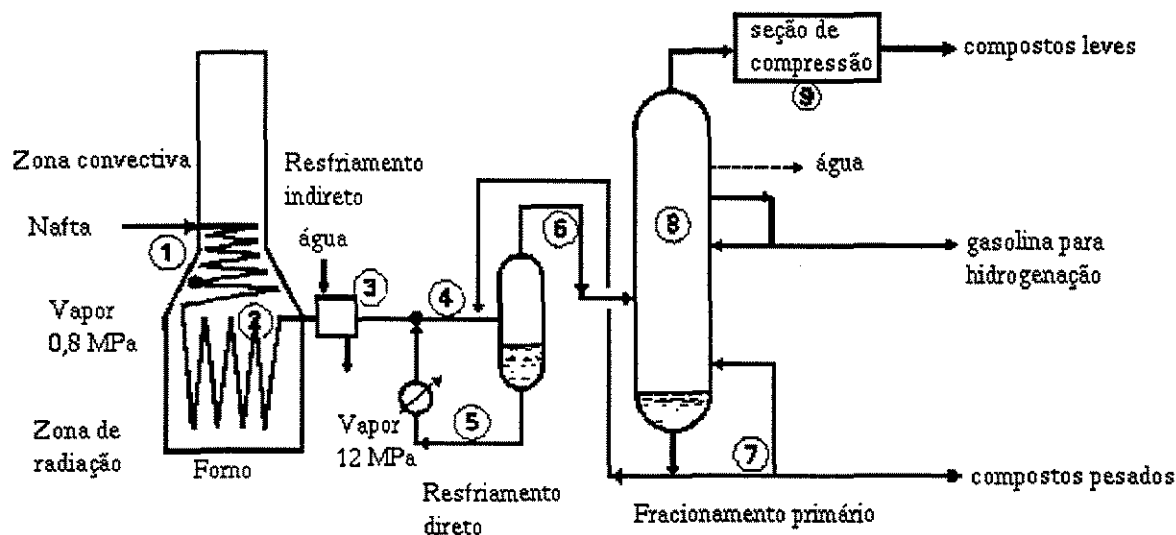


Fig. 4.2: Unidades do craqueamento com vapor
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

Enquanto a pirólise primária de compostos saturados é endotérmica e relativamente rápida, as reações secundárias de polimerização e condensação são moderadamente exotérmicas e mais lentas. Ou seja, elas são desfavorecidas nas condições normais da pirólise. Para isso, é preciso, principalmente, manter o tempo de residência e a pressão parcial dos hidrocarbonetos baixas. A figura abaixo mostra o perfil de temperatura nos casos de um tubo limpo e de um tubo impregnado com coque. Segundo CHAMBERS e POTTER (1974), os componentes que formam a camada de coque atravessam uma película gasosa e chegam à parede do tubo sofrendo um rápido aquecimento da ordem de 80°C. A literatura indica a possibilidade de reações de desidrogenação que produzem carbono (WOEBCKE, CHAMBERS e VIRK, 1973). Uma vez que a camada de coque é formada, ela funciona como um catalisador para os precursores do coque que a atravessam (KINNEY e

DELBEL, 1954).

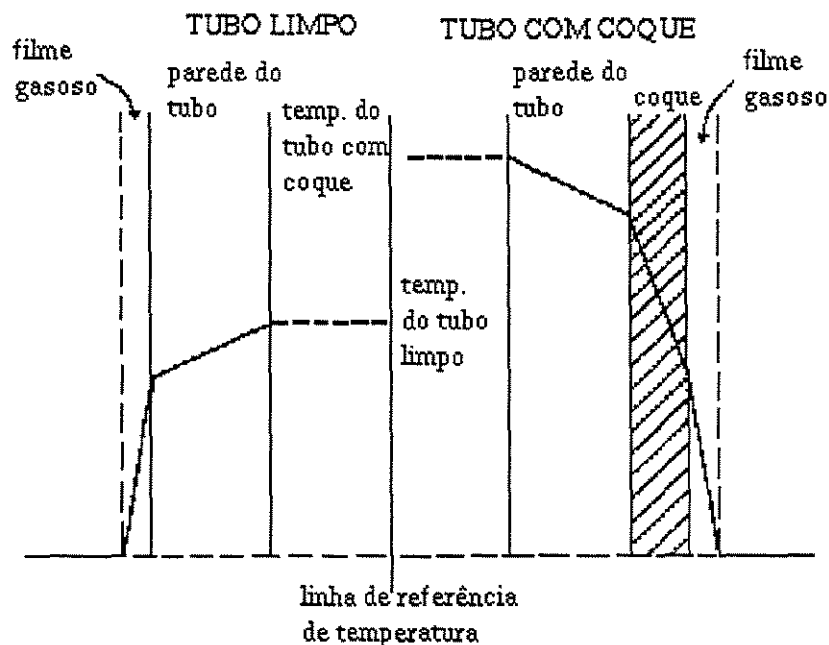


Fig. 4.3: Perfis de temperatura num tubo impregnado de coque e num tubo limpo (CHAMBERS e POTTER, 1974).

ENNIS, BOYD e ORRISS (1975) apontam algumas particularidades que dificultam o estudo da pirólise:

- O sistema consiste de muitas reações de radicais livres ocorrendo simultaneamente. Isso torna impraticável um tratamento teórico rigoroso e força o projetista a empregar métodos empíricos e semi empíricos;
- Os tempos de reação são curtos (0,1-1,0s), o que complica a medição de uma concentração intermediária numa amostra e a determinação de uma taxa de reação;
- O sistema não é isotérmico nem isobárico e a densidade varia de forma não linear com a conversão, dificultando a interpretação de resultados experimentais.

Na produção do etileno, a escolha da alimentação é de grande importância. Dela dependem a quantidade e composição

dos produtos secundários e o projeto do reator. Segundo ZDONIK, GREEN e HALLEE (1966c), o reator pode ser conectado a uma refinaria de petróleo que forneça uma mistura gasosa de hidrocarbonetos leves (etano, propano), que deve ser complementada com uma fonte auxiliar no caso de flutuações na quantidade e composição desse fornecimento, devido à inconstância na composição do petróleo. A alimentação com etano puro é uma das mais desejáveis devido à alta produção de etileno com quantidades mínimas de subprodutos. O uso de propano é indicado caso haja interesse em outros produtos além do etileno, principalmente propileno. Ainda menos recomendado para a produção de etileno com pureza razoável, é o butano, de cadeia normal ou ramificada, porque existe a desvantagem adicional na separação de buteno e butadieno na corrente dos efluentes. No caso das naftas, a produção do etileno é dependente da sua composição e de condições operacionais. Por exemplo, se os compostos secundários da pirólise não são desejados, a nafta deve ter alto teor de parafinas normais e a conversão deve ser mantida alta.

Portanto, as plantas que não empregam o etano como reagente precisam encontrar alguma destinação útil para os produtos secundários, seja na sua purificação ou no seu uso como combustível. De acordo com ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967a), há subprodutos, como o propileno, que são reciclados juntamente com o etano e propano para aumentar a produção de etileno, ainda que, sob certas circunstâncias, esse reciclo pode favorecer a formação de aromáticos condensados.

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1969) enumeram itens que devem ser os objetivos de um forno de craqueamento operando em condições ótimas:

- Alto grau de seletividade das olefinas desejadas, mantendo os subprodutos em quantidades mínimas;
- Manter a operação em condições de longos períodos entre duas limpezas sucessivas para retirada de incrustações;
- Acomodar variações previsíveis de quantidade e composição na alimentação;

- Flexibilizar a operação no sentido de possíveis mudanças na distribuição desejada dos produtos;
- Operar de forma mais contínua e econômica possível;
- Prover o aquecimento com combustíveis disponíveis na própria planta e buscar a eficiência térmica;
- Projetar um número de tubos em U para cada forno de modo que o número de fornos seja adequado para o tamanho da planta.

HUANG, QIAN e SHAO (2000) desenvolveram uma abordagem para que os operadores possam monitorar e controlar a planta de etileno por computador em tempo real. A interação entre operador e computador é facilitada para manter o processo em suas condições ótimas o maior tempo possível.

4.3.1 - O reator:

Após 1960, os tubos colocados dentro do reator, que eram arranjados horizontalmente, passaram a ser colocados verticalmente com a idéia de reduzir o tempo de residência e aumentar a temperatura de saída (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1966a). Os principais arranjos são mostrados na figura 4.4.

É interessante notar o último projeto de tubos mostrado abaixo. Dois tubos de pequeno diâmetro, para manter o tempo de residência baixo são colocados paralelamente desde a entrada do reator, onde as reações indesejadas de formação de aromáticos condensados são insignificantes, e se fundem em um único tubo num ponto próximo à saída. Com esse arranjo, a incrustação, que é inevitável no final do tubo fica menos intensa.

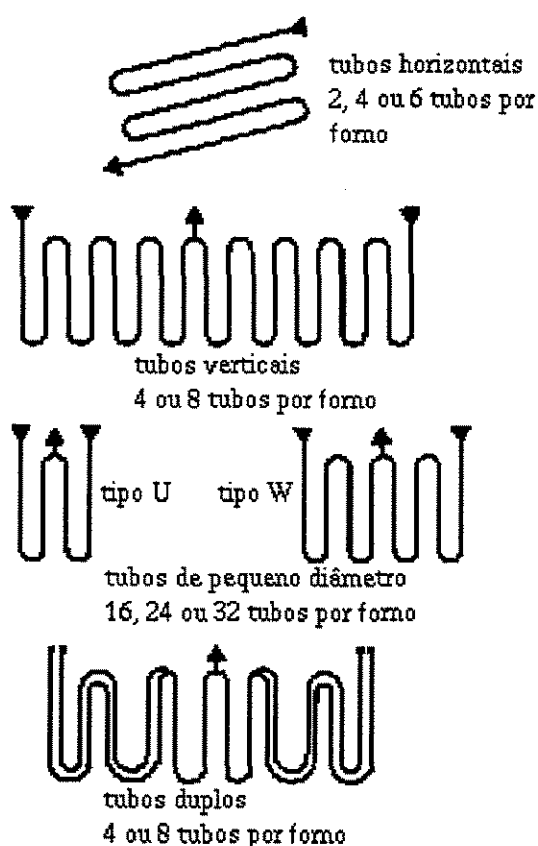


Fig. 4.4: Projeto dos tubos de pirólise
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

A figura 4.5 mostra o forno que abriga as zonas de convexão e radiação. Com os tubos dispostos verticalmente (b), existe a vantagem de dividir o volume do forno em duas celas e diminuir a perda de calor pelo uso de uma parede comum, o que não ocorre nos tubos horizontais (a). As paredes são construídas de material refratário que suporta 1700-1800°C. Para evitar uma chama direta sobre os tubos, as paredes são aquecidas por queimadores que utilizam subprodutos da pirólise como combustível, principalmente o metano.

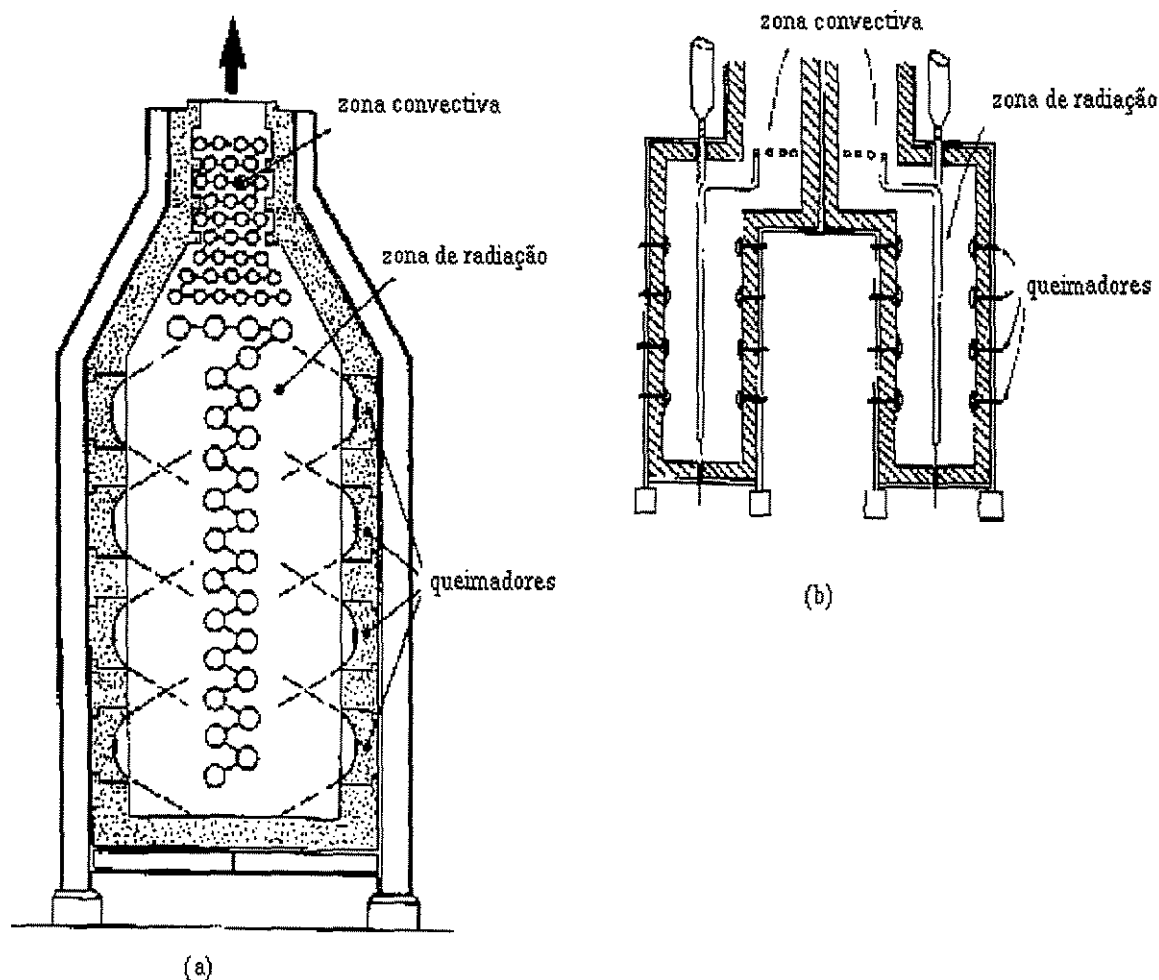


Fig. 4.5: disposição dos tubos no reator
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

VELENYI, SONG e FAGLEY (1991) afirmam que os tubos do reator de etano são feitos de ligas metálicas de excelente resistência contra deformação e oxidação em altas temperaturas. O problema inerente das ligas de promover deposição de carbono em sua superfície é discutido, havendo uma comparação entre dois modelos de reator.

KOZLOV e MASHATYREV (1989) relacionam condições com a necessidade de parada para limpeza dos tubos do reator. Como o nível de presença de incrustação não pode ser medido durante a operação, ele é estimado indiretamente pela temperatura de saída do reator e do sistema de resfriamento e purificação.

4.4 - VARIÁVEIS DE OPERAÇÃO:

A produção de etileno é muito dependente das condições operacionais no reator. As principais variáveis são temperatura, que define o nível de ativação do sistema, o tempo de residência, que não permite reações posteriores à pirólise, a pressão e a razão entre vapor e etano que regula a pressão parcial dos hidrocarbonetos. MURPHY, CARROLL e KLOMOWSKI (1995) analisam a distribuição dos produtos para alguns reagentes específicos, assim como a influência das condições operacionais.

4.4.1 - Temperatura:

Como a pirólise do etano ocorre somente a temperaturas acima de 700°C, um determinado comprimento do reator é usado para aquecer a mistura de reagentes até esse nível. A figura 4.6 mostra o perfil de temperatura ao longo do tubo.

A mudança brusca na inclinação indica o início da reação que, sendo endotérmica, disponibiliza menos calor para o aquecimento da mistura. Deve ser lembrado que o comprimento do reator é colocado de forma indireta na figura 4.6, pelo número de tubos em U. Na prática, a temperatura de saída do reator é um indicador importante da operação do processo. No caso do etano, essa temperatura deve ficar na faixa de 800-850°C.

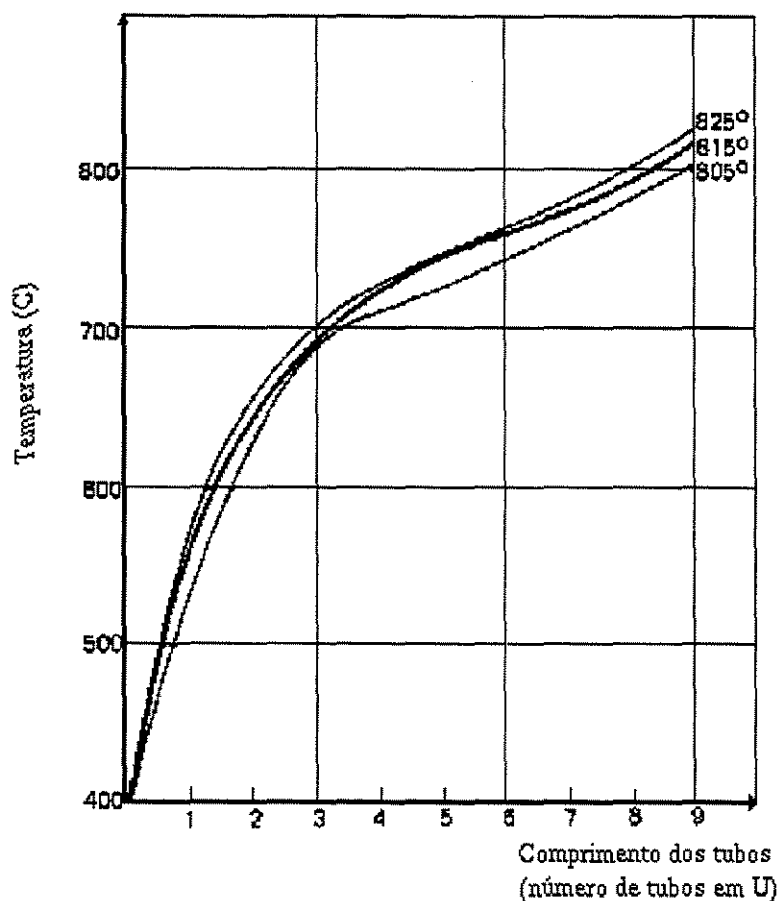


Fig. 4.6: Perfil de temperatura
(CHAUVEL e LEFEBVRE, 1986).

A temperatura abaixo de um limite mínimo prejudica a conversão do etileno, uma vez que o meio reacional não atingiu um nível energético adequado. Por outro lado, temperaturas acima de 900-1000°C favorecem a formação de hidrocarbonetos aromáticos, que é indesejado porque ele se deposita nas paredes dos tubos, dificultando a troca térmica. Ele é removido periodicamente por combustão controlada.

A cadeia de reações da pirólise começa pela quebra de uma ligação C-C, com formação de radicais que atacam um hidrogênio de uma molécula de reagente. Há diferença de reatividade entre os hidrogênio situados em carbonos primários, secundários ou terciários. Os carbonos primários tem a ligação mais forte, e os terciários, a mais fraca. Para ilustrar a influência da posição do hidrogênio sobre o

produto formado, considerando a molécula de propano, se o hidrogênio atacado esteja num carbono primário, o radical propila formado libera um radical metila e usa as valências livres para fazer uma ligação dupla, produzindo, no final, etileno e metil. Por outro lado, se o hidrogênio pertencer a um carbono secundário, o radical isopropila formado libera mais um hidrogênio e o resultado final é propeno e hidrogênio atômico. A probabilidade de um hidrogênio ser atacado é dada pelo produto entre a reatividade relativa do hidrogênio e o número de hidrogênios com a mesma reatividade. Considerando isso, ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967e) mostram como a temperatura altera as reatividades relativas, influenciando na distribuição dos produtos formados.

TABELA 4.2

Temperatura (°C)	Reatividade relativa		
	Primário	Secundário	Terciário
300	1	3,0	33
600	1	2,0	10
1000	1	1,6	5

A reatividade relativa e a influência da temperatura sobre ela justifica o uso do etano como reagente mais apropriado quando o etileno é o único produto desejado. A simplicidade de sua estrutura restringe o número de possibilidades durante a cadeia de reações.

A influência da temperatura pode ser avaliada por sua relação com a constante de equilíbrio da reação considerada, levando em conta sua qualidade de endo ou exotermia. Resolvendo a equação de van't Hoff, temos

$$\frac{d(\ln K)}{dT} = \frac{\Delta H_r}{RT^2} \rightarrow \log K = -\left(\frac{\Delta H_r}{2,3RT}\right) + \text{const} \quad (4.6)$$

Sendo assim, caso a reação seja endotérmica, a elevação de temperatura desloca o equilíbrio na direção dos produtos. Por outro lado, a constante de equilíbrio se torna menor com

o aumento de temperatura nas reações exotérmicas.

Segundo ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968a), as reações que produzem olefinas como



são altamente endotérmicas. Essas equações são o resultado global da cadeia de reações. No caso da etano, a reação global pode ser desmembrada em



onde a primeira é levemente exotérmica e a segunda é altamente endotérmica.

As reações em que duas espécies químicas reagem e formam outras duas não têm, como regra, um comportamento consistente quanto a absorver ou liberar energia. Elas podem tanto ser exotérmicas, termicamente neutras como ligeiramente endotérmicas. A formação de aromáticos ocorrem dessa maneira, ou seja, são reações bimoleculares, como



Mesmo sabendo que um aumento de temperatura inibe a produção de aromáticos, a constante de equilíbrio tem um alto valor de 374.000 a 925°C. Além disso, essas reações também contam com altas taxas de reação, ou seja, em determinadas condições, a produção de compostos aromáticos é favorecida por aspectos cinéticos e termodinâmicos.

4.4.2 - Tempo de residência:

Para um reator com um gradiente de temperatura tão grande quanto na pirólise do etano, o cálculo do tempo de residência precisa ser simplificado. Assim, o tempo de residência considerado é aquele necessário para atingir a mesma conversão numa reator isotérmico com a temperatura de saída. O tempo de residência t e a conversão X_A se relacionam

por

$$\ln \frac{1}{1-X_A} = k t \quad (4.13)$$

onde k é a constante da taxa da reação, que varia segundo a lei de Arrhenius

$$k = A e^{-E_a/RT} \quad (4.14)$$

Portanto,

$$\ln \frac{1}{1-X_A} = \int_0^t k dt' = \int_0^t A e^{-E_a/RT} dt' \quad (4.15)$$

onde t é o tempo de residência até a seção transversal com temperatura T .

No reator isotérmico, o tempo de residência equivalente é dado pela taxa de reação na temperatura final k_f

$$\ln \frac{1}{1-X_A} = k_f t_{eq} = A e^{-E_a/RT} t_{eq} \quad (4.16)$$

$$\int_0^t k dt' = k_f t_{eq} \rightarrow t_{eq} = \frac{\int_0^t k dt'}{k_f} \quad (4.17)$$

Assim como no caso de temperaturas acima do limite de operação normal, a formação de compostos aromáticos de alto peso molecular é favorecida por uma falha que aumente o tempo de residência. Ou seja, se as olefinas produzidas mantiverem-se por um tempo suficiente dentro do reator, elas poderão sofrer novas desidrogenação, produzindo acetileno e diolefinas. Elas tem reatividade ainda maior que o etileno e são facilmente adicionadas na produção de aromáticos, como o benzeno, e poliaromáticos.

CHAMBERS e POTTER (1974), analisam a influência de alguns fatores sobre o tempo de residência. É concluído que, para um diâmetro de tubo constante e velocidade fixa um comprimento menor do tubo em U leva a uma redução no tempo de residência. Para que a conversão seja mantida, a temperatura deve ser aumentada. Portanto, para um diâmetro específico, a temperatura máxima do tubo estabelece um limite para seu

comprimento. Além desse limite, o comprimento pode ser diminuído somente com uma redução no diâmetro. Também é mencionado que, mesmo que o tempo de residência seja inversamente proporcional à velocidade mássica, esse efeito é amortecido porque um aumento na velocidade mássica também aumenta a densidade média da mistura. É estimado que um aumento de 100% na velocidade mássica, reduza em 20% o tempo de residência, além de trazer o efeito indesejado de incrementar a pressão parcial dos hidrocarbonetos.

A figura 4.7 abaixo mostra a dependência entre o diâmetro e a produção de etileno, mantendo constantes a velocidade mássica, a conversão, composição da alimentação e pressão parcial de hidrocarbonetos.

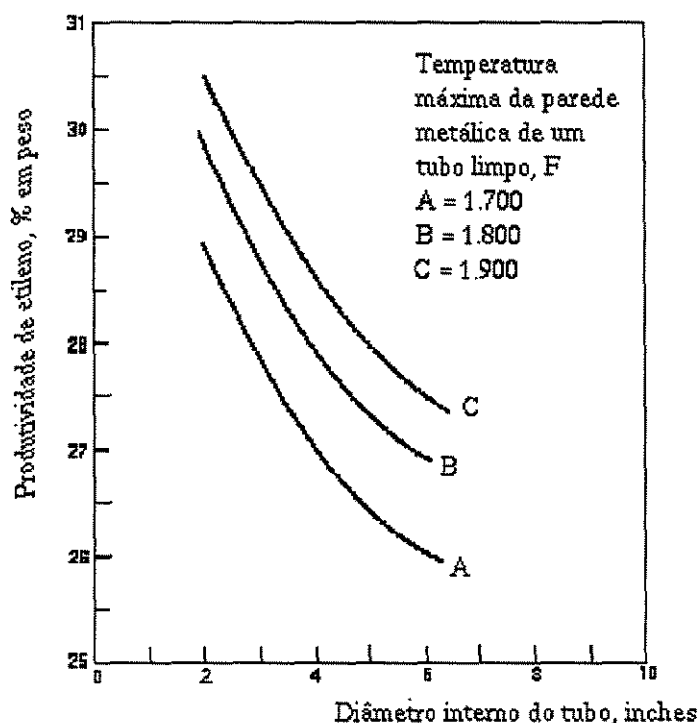


Fig. 4.7: Influência do diâmetro do tubo sobre a produção de etileno (CHAMBERS e POTTER, 1974).

4.4.3 - Pressão parcial dos hidrocarbonetos:

A pirólise da etileno é mais favorecida em condições de baixa pressão parcial de hidrocarbonetos, que também é ideal

no sentido de impedir a produção de moléculas condensadas. Por isso, o hidrocarboneto reagente é diluído com vapor para aumentar a seletividade da reação em favor dos produtos desejados.

Além dessa função, o vapor introduzido também tem a finalidade de (a) introdução de calor na alimentação, (b) diminuir a quantidade de calor por metro de reator e (c) auxiliar na remoção de compostos aromáticos condensados que se deposita nos tubos pela reação: $C + H_2O \leftrightarrow CO + H_2$. Contudo, essa reação requer uma temperatura de 1000°C, e não tem um papel decisivo na limpeza dos tubos. No entanto o vapor dilui a concentração de componentes aromáticos, inibindo seu depósito nos tubos do reator e depois dele. Ele tem um efeito oxidante suficiente sobre o tubo metálico para diminuir o efeito catalítico do ferro e níquel na formação de carbono (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1968c). O uso de vapor tem algumas desvantagens como o aumento do volume de material processado e, portanto, um custo maior no projeto do forno. A separação entre vapor e hidrocarbonetos exige grandes áreas de condensação. A quantidade de vapor geralmente é expressa em termos da razão mássica entre vapor e reagente. Para o etano, esse valor oscila na faixa de 0,2-0,4.

A influência da pressão sobre as muitas reações envolvidas da pirólise depende do número de moléculas que atuam como reagentes e produtos. Pelo princípio do deslocamento de equilíbrio, uma variação na pressão parcial dos hidrocarbonetos provoca um deslocamento do equilíbrio no sentido de amenizar essa variação. Ou seja, num aumento de pressão, o equilíbrio favorece o lado de menor volume gasoso.

ZDONIK, GREEN e HALLEE (1968b) usam o conceito de abordagem de equilíbrio para explicar a resposta do sistema a uma variação de pressão. Para uma reação em fase gasosa, define-se a razão de pressões parciais (RPP) como o produto das pressões dos produtos pelo produto da pressão dos reagentes. A abordagem ao equilíbrio (AE) é definida por

$$AE = \frac{RPP}{K_p} \quad (4.18)$$

onde K_p é a constante de equilíbrio escrita em termos de pressões parciais. Portanto, numa reação que comece com reagentes puros, o valor de AE é zero e tende à unidade, conforme a reação caminha para o equilíbrio. Inversamente, se a reação inicia com produtos puros, AE tem um valor infinito que tende à unidade com o passar do tempo.

Assim, conforme o número de moléculas na equação química temos uma relação distinta entre variação de pressão e abordagem ao equilíbrio. No caso da reação



temos

$$RPP = \frac{P_B P_C}{P_A} = P \frac{Y_B Y_C}{Y_A} \quad (4.20)$$

onde P é a pressão total dos hidrocarbonetos e Y, a fração molar. Portanto

$$AE = \frac{P(Y_B Y_C)/Y_A}{K_p} \quad (4.21)$$

Um aumento de P provoca um incremento momentâneo em AE. O equilíbrio será restaurado deslocando-se na direção dos reagentes. Como essa reação é um formato típico da produção de etileno, é confirmado que ela é favorecida por baixas pressões de hidrocarbonetos. Além disso, o emprego das baixas pressões é corroborado pela análise das reações indesejadas de adição de olefinas, que tem o formato



$$RPP = \frac{P_F}{P_D P_E} = \frac{1}{P} \frac{Y_F}{Y_D Y_E} \quad (4.23)$$

$$AE = \frac{1}{P} \frac{Y_f / (Y_d Y_e)}{K_p} \quad (4.24)$$

Ou seja, um aumento de pressão reduziria a abordagem ao equilíbrio, que somente poderia retornar ao seu valor unitário de equilíbrio favorecendo a produção de F, que não condiz com o objetivo da pirólise. A figura abaixo mostra como um aumento de pressão é prejudicial ao etileno.

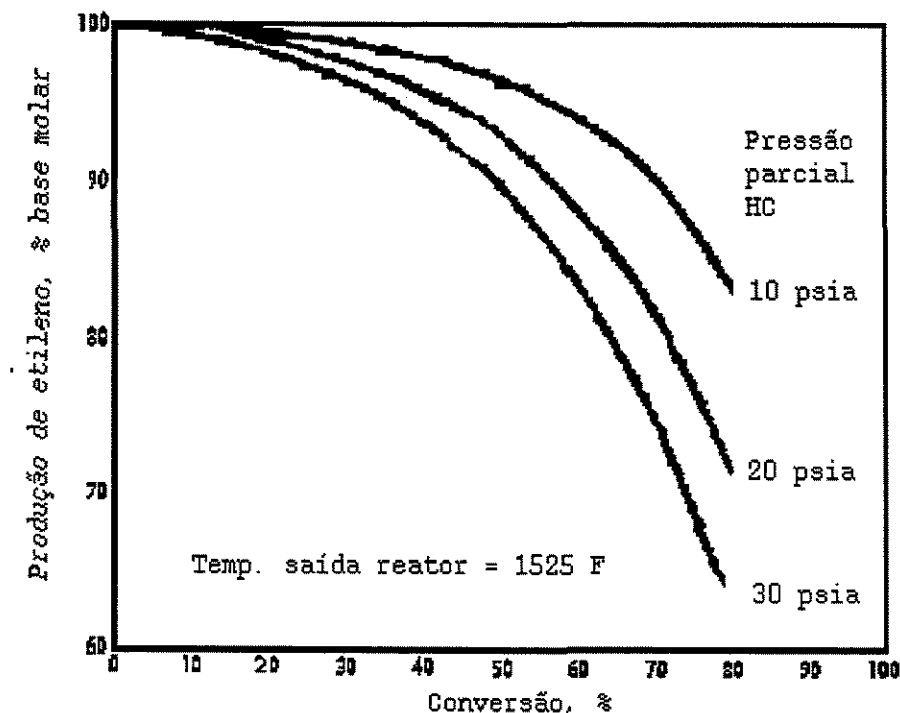


Fig. 4.8: Influência da pressão sobre a produção de etileno (ZDONIK, GREEN e HALLEE, 1968b).

4.5 - CONCLUSÃO:

A literatura relata a importância do processo de pirólise para produção, em larga escala, do etileno. Atualmente, há interesse na melhoria das plantas e expansão na capacidade produtiva. Logo, o processo é bastante relevante para justificar o desenvolvimento de ferramentas que melhoram sua operação, como no caso da detecção de falhas.

PICCIOTTI (1997a) afirma que, apesar de muitas tentativas de se encontrar novos processos para a produção do etileno, o modo convencional de craqueamento com vapor ainda é o mais vantajoso economicamente. Além das tentativas de fornecer calor com um leito sólido inerte circulante, pesquisas tem focado na busca de um catalisador certo para a desidrogenação oxidativa de hidrocarbonetos leves ou na dimerização oxidativa do metano. Um processo baseado na

desidratação do metanol também tem sido desenvolvido. Mesmo depois de cinquenta anos, a pirólise térmica homogênea é o principal processo nas refinarias mais modernas e competitivas. PICCIOTTI (1997b) descreve mais alguns processos alternativos para o etileno. Além disso, é estabelecido um panorama do desenvolvimento do processo de pirólise nos últimos anos e aponta algumas tendências para o futuro, tais como: (a) o uso de reagentes de menor custo, (b) aumento na capacidade de cada unidade e maior flexibilidade com a alimentação, (c) surgimento de novos processos viáveis a partir do metano e metanol, (d) desenvolvimento de sistemas de pirólise catalítica a altas temperaturas, apesar das restrições cinéticas e termodinâmicas. Por fim, é colocado que as rotas alternativas serão soluções em situações muito particulares e que a produção de etileno em grande escala ainda será dominada pela pirólise por muitos anos. FISCHER e NAJM (1998) relatam um caso de aumento na produção de etileno pela substituição de equipamentos e pelo emprego de materiais mais sofisticados.

Capítulo 5
Modelagem do Reator e Detecção
de Falhas

5.1 - INTRODUÇÃO:

Neste capítulo é explicada a modelagem do reator de pirólise, assim como a do sistema de detecção de falhas baseado em redes neurais. Também é comentado o procedimento para treinamento e verificação da eficiência de classificação de falhas da rede neural treinada.

5.2 - MODELAGEM DO REATOR:

O estudo das falhas no processos exige que se conheça quais são as condições que a produzam. Essas condições operacionais foram determinadas através de um programa de simulação encontrado na literatura (RAMAN, 1985). Mais recentemente, JOO et al. (2000) também desenvolveram um programa que simula o forno de craqueamento num ambiente gráfico e amigável ao usuário. É baseado na modelagem rigorosa dos componentes do processo e é para alimentação com nafta.

Considerando que a conversão e a temperatura, variem ao longo do reator, as equações do balanço de massa e energia são:

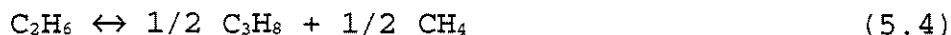
$$\frac{d}{dz}(uC_A) - r_A = 0 \quad (5.1)$$

$$u\rho C_t \frac{dT}{dz} + (-\Delta H_r)r_A + UA_h(T - T_j) = 0 \quad (5.2)$$

onde A_h é a área de troca térmica por unidade de volume. As condições de entrada são:

$$\begin{aligned} \text{em } z = 0 \quad C_A &= C_{A0} \\ T &= T_0 \end{aligned}$$

Essas equações podem ser integradas numericamente, sabendo-se que a variação da densidade ρ , devido à variação de temperatura e às reações, pode interferir na velocidade linear u . O autor negligencia todos os efeitos difusionais e considera a série de reações propostas por FROMENT et al. (1976), onde as principais reações são



Como o tempo de residência é muito pequeno, as reações reversas são negligenciáveis. A decomposição de C_2H_2 , que forma carbono, e as reações entre carbono e vapor não são consideradas para preservar a simplicidade.

Na simulação, massa, energia e queda de pressão são integradas simultaneamente. É mais conveniente escrever a equação de balanço de massa em termos do número de mols das espécies reagentes do que em termos de concentração, devido à variação de volume com a reação.

Convencionando que o coeficiente estequiométrico α_{ij} do componente i e da reação j seja positivo para produtos e negativo para reagentes, o balanço de massa por componente fica

$$\frac{dn_p}{dz} + S \sum_q \alpha_{pq} r_q = 0 \quad (5.8)$$

onde S é a área de seção transversal do reator. O balanço de energia fica

$$\left(\sum_p n_p c_{t,p} \right) \frac{dT}{dz} + S \sum_q r_q (-\Delta H_r)_q - Q(z) \pi D_t = 0 \quad (5.9)$$

sendo Q o fluxo endotérmico de calor, variável com a distância, e D_t é o diâmetro interno do tubo. Finalmente, a queda de pressão é calculada por

$$-\frac{dP}{dz} = \frac{2F}{D_t} \frac{g^2}{\rho_{med}} \quad (5.10)$$

onde F é o fator de fricção de fanning para um tubo retilíneo, que é uma hipótese mantida por simplicidade, g é a velocidade mássica e ρ_{med} é a densidade molar da mistura

gasosa. A pressão normalmente é baixa e a lei dos gases ideais pode ser usada. Mais uma simplificação pode ser feita escrevendo a equação (5.10) na forma de diferenças.

Rigorosamente, o calor de reação varia com a temperatura ao longo do reator, e é calculado usando dados apropriados de capacidade térmica. Entretanto, é usado um valor médio para cada reação, considerando uma faixa previsível de temperatura no reator.

Tanto a queda de pressão quanto o fluxo de calor nos tubos é influenciado pela curvatura dos tubos em U. Essa influência é ignorada.

5.2.1 - O programa de simulação:

A listagem do programa, escrito em Fortran, é mostrada na seção anexa A.1. O sistema de equações (5.8) e (5.9) é integrado segundo o procedimento Runge-Kutta-Gill na subrotina RKG, que é escrita de modo genérico e poderia ser usada para qualquer sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Os integrandos da equação diferencial são calculados na subrotina CRACK.

Todas as informações sobre pesos moleculares, parâmetros da equação de Arrhenius para todas as constantes de taxa de reação, calores de reação, coeficientes que relacionam a capacidade térmica com temperatura e coeficientes entre temperatura e viscosidade estão colocados no subprograma BLOCK DATA sob blocos COMMON apropriados.

A relação entre capacidade térmica e temperatura é expressa como uma função polinomial sobre a faixa de temperatura

$$c_{t,p} = a_p + b_p T + c_p T^2 \quad (5.11)$$

enquanto que a relação entre viscosidade e temperatura é dada por

$$\mu_p = a_p \exp\left(\frac{b_p}{T}\right) \quad (5.12)$$

A queda de pressão é calculada na função PRDROP. Ela é

subtraída da pressão total do intervalo anterior para obter a pressão no final do novo intervalo. A densidade é calculada com essa pressão, pela lei dos gases ideais. No cálculo da queda de pressão, a viscosidade da mistura é obtida no subprograma VISMIX, com a equação de Wilke. Finalmente, a conversão de etano e distribuição dos produtos são calculados a cada intervalo e impressas.

Os dados de entrada incluem dimensões do reator, pressões de entrada, temperatura e composição, fluxo de calor, vazão de alimentação, razão de alimentação com vapor. A matriz dos coeficientes das reações também é especificada.

Examinando o resultados de simulações, pode-se notar dados que mostram a confiabilidade do programa. A literatura traz alguns indicadores para a avaliação da factibilidade da operação do reator: a temperatura de saída do reator varia de 800,0-850,0 °C e a pressão de saída é de, aproximadamente 100,0 kPa (abs).

5.3 - REDES NEURAIS:

5.3.1 - Algoritmo de retropropagação de erros:

Esse algoritmo, também conhecido como regra delta generalizada, foi desenvolvido para solucionar o problema da falta de um procedimento de aprendizagem confiável para redes com núdulos ocultos em sua arquitetura. A autoria do algoritmo é creditada a RUMELHART e MCCLELLAND (1986) e foi criado a partir da regra delta (WIDROW e HOFF, 1960), que garantia um modo de convergência para as redes sem uma camada oculta. A retropropagação de erros é tida como o mais popular algoritmo para aprendizado supervisionado, devido à sua robustez e versatilidade. O ajuste dos ganhos sinápticos depende principalmente de dois fatores: o direcionamento dado pelo vetor gradiente na superfície de erro e a magnitude do próprio sinal de erro. Um grande erro significa que o nível de classificação ainda está muito distante do desejado e os ganhos sinápticos devem ser ajustados significativamente.

Esse ajuste também depende da direção na qual cada ganho sináptico pode contribuir ao máximo para reduzir o erro, que é definida pelo vetor oposto ao gradiente na superfície de erro.

Sendo um paradigma supervisionado, o treinamento requer a apresentação de um série de pares entrada-saída de exemplos. Os sinais de saída processados pela rede são comparados com uma saída desejada e o treinamento, que visa reduzir essa discrepância, ajusta os ganhos sinápticos de acordo com essa diferença. Portanto, se o sinal calculado pela rede for igual à saída desejada nenhum aprendizado é realizado.

Na iteração n , correspondente à apresentação do n -ésimo par de exemplos, o sinal de erro do nóculo de saída j é dado pela diferença entre o valor desejado para esse nóculo, $d_j(n)$, e o valor calculado pela rede, $y_j(n)$,

$$e_j(n) = d_j(n) - y_j(n) \quad (5.13)$$

O erro calculado em relação à todos os M nósulos de saída é dado por

$$E(n) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^M e_j^2(n) \quad (5.14)$$

Finalmente, o erro que se objetiva reduzir é calculado pela média relativa a todos os N pares de exemplos

$$E_{med} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E(n) \quad (5.15)$$

Considerando que o nóculo j receba o sinal do nóculo i , $y_i(n)$, pela conexão de ganho sináptico $w_{ij}(n)$, tem-se que o nível de atividade do nóculo j é

$$a_j(n) = \sum_{i=0}^I w_{ij}(n) x_i(n) \quad (5.16)$$

onde I é o número total de nóculo que enviam sinais para j , e $w_{0j}(n)$ corresponde ao limiar de j . Logo, dada a função de ativação $f(x)$, o sinal de saída de j é

$$y_j(n) = f(a_j(n)) \quad (5.17)$$

Conforme será visto abaixo, é preciso que a função de ativação seja contínua e diferenciável. O algoritmo baseia-se em ajustar cada ganho sináptico $w_{ij}(n)$ de maneira proporcional à sua influência no erro $E(n)$, ou seja, $\partial E(n) / \partial w_{ij}(n)$, que é chamado de fator de sensibilidade e determina a direção na busca do ponto ótimo. Esse fator é calculado pela regra da cadeia

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)} = \frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial a_j(n)} \frac{\partial a_j(n)}{\partial w_{ij}(n)} \quad (5.18)$$

Diferenciando a eq.(5.14) com relação à $e_j(n)$, tem-se

$$\frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} = e_j(n) \quad (5.19)$$

Diferenciando a eq.(5.13) com relação à $y_j(n)$, tem-se

$$\frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} = -1 \quad (5.20)$$

Logicamente,

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial a_j(n)} = f'(a_j(n)) \quad (5.21)$$

E, finalmente, diferenciando a eq.(5.17) com respeito à $w_{ij}(n)$, obtém-se

$$\frac{\partial a_j(n)}{\partial w_{ij}(n)} = y_j(n) \quad (5.22)$$

Substituindo as quatro equações anteriores na eq.(5.18), tem-se

$$\frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)} = -e_j(n) f'(a_j(n)) y_j(n) \quad (5.23)$$

A correção $\Delta w_{ij}(n)$ aplicada ao ganho sináptico $w_{ij}(n)$ é definida pela regra delta como sendo proporcional ao fator de sensibilidade,

$$\Delta w_{ij}(n) = -\eta \frac{\partial E(n)}{\partial w_{ij}(n)} \quad (5.24)$$

onde η é um parâmetro chamado de taxa de aprendizagem que define qual a fração do ajuste deve ser efetivamente aplicada ao ganho sináptico. O sinal negativo significa que $w_{ij}(n)$ deve ser alterado no sentido contrário ao aumento máximo de $E(n)$, numa tentativa de localizar o sentido provável de sua redução máxima. Substituindo a eq.(5.23) na eq.(5.24),

$$\Delta w_{ij}(n) = \eta \delta_j(n) y_j(n) \quad (5.25)$$

onde o gradiente local $\delta_j(n)$ é definido por

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial e_j(n)} \frac{\partial e_j(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial a_j(n)} = e_j(n) f'(a_j(n)) \quad (5.26)$$

No caso de j ser um nódulo de saída. É importante notar que o ajuste depende não somente do erro encontrado entre o sinal de saída calculado e o desejado, mas também da derivada da função de ativação, onde normalmente é empregada a função sigmóide (eq. 3.6). Esta função produz valores no intervalo $[0;1]$ e tem uma derivada pequena nesses extremos. Portanto, como os valores desejados são escolhidos próximos aos extremos, conclui-se que o ajuste dos ganhos sinápticos é insignificante se a saída da rede encontrar-se no extremo correspondente à saída desejada. Nesta situação tanto o sinal de erro como o valor da derivada serão pequenos.

No caso do nódulo j não se encontrar na camada de saída, seu gradiente local não poderá ser obtido em função de $e_j(n)$. O sinal de erro para este nódulo é determinante recursivamente através dos sinais de erros dos nódulos nos quais o nódulo j está conectado. Para isso, a eq.(5.26) é escrita como

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} \frac{\partial y_j(n)}{\partial a_j(n)} = -\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} f'(a_j(n)) \quad (5.27)$$

Sendo k o índice que representa os nódulos da camada de saída, a derivada restante, de acordo com a eq.(5.14), é dada

por

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = \sum_k [e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial y_j(n)}] = \sum_k [e_k(n) \frac{\partial e_k(n)}{\partial a_k(n)} \frac{\partial a_k(n)}{\partial y_j(n)}] \quad (5.28)$$

onde

$$\frac{\partial e_k(n)}{\partial a_k(n)} = \frac{\partial}{\partial a_k(n)} (d_k(n) - f_k(a_k(n))) = -f'(a_k(n)) \quad (5.29)$$

e

$$\frac{\partial a_k(n)}{\partial y_j(n)} = \frac{\partial}{\partial y_j(n)} \left(\sum_{j=0}^q w_{jk}(n) y_j(n) \right) = w_{jk}(n) \quad (5.30)$$

onde q indica o número de nódulos que se conecta ao nódulo k. portanto, voltando à eq.(5.28), tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} &= - \sum_k (e_k(n) f'(a_k(n)) w_{jk}(n)) \\ &\rightarrow \frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = - \sum_k (\delta_k(n) w_{jk}(n)) \end{aligned} \quad (5.31)$$

Finalmente, é determinado a equação para o cálculo do gradiente local de um nódulo oculto j:

$$\delta_j(n) = f'(a_j(n)) \sum_k (\delta_k(n) w_{jk}(n)) \quad (5.32)$$

Assim, a equação para o ajuste do ganho sináptico é obtido pela regra delta generalizada:

$$\Delta w_{ij}(n) = \eta \delta_j(n) y_i(n) + \alpha \Delta w_{ij}(n-1) \quad (5.33)$$

Os parâmetros η , taxa de aprendizagem, e α , termo de momentum, estabelecem um compromisso entre a velocidade de convergência e seu caráter oscilatório. Altos valores η de α e tendem a acelerar a convergência, mas provocam dificuldade na aproximação do ponto desejado. O ajuste nos ganhos sinápticos é suficientemente grande para que a convergência oscile em torno do ponto de mínimo desejado. Por outro lado, pequenos valores de η e α tornam o processo mais lento e aumentam a possibilidade da convergência ficar estagnada numa região de mínimo local, mas promovem uma busca mais minuciosa

na superfície do erro. A introdução de $\Delta w_{ij}(n-1)$ traz estabilidade à convergência. Ele incrementa $\Delta w_{ij}(n)$ caso seus sinais sejam iguais, mostrando que o sentido de ajuste de w_{ij} está se repetindo e a intensidade do ajuste pode aumentar. Entretanto, se os sinais de $\Delta w_{ij}(n-1)$ e $\Delta w_{ij}(n)$ forem diferentes, a intensidade do ajuste é diminuída, o que é razoável numa situação em que o sentido do ajuste de w_{ij} varia.

A aplicação do algoritmo justifica o nome de retropropagação de erro. Ou seja, somente depois do cálculo dos ajustes de ganho sinápticos da última camada é que os ajustes da penúltima podem ser obtidos e assim por diante até se chegar aos ganhos sinápticos à frente da camada de entrada.

A modificação desses parâmetros pode ser feita ao final da apresentação de todo o conjunto de treinamento ou a cada par de exemplos entrada-saída. É recomendado que a ordem dos exemplos seja alterada de modo aleatória a cada apresentação do conjunto de treinamento. Isso tende a fazer a busca pelo ponto ótimo aleatória nos ciclos de aprendizagem, evitando a possibilidade de ciclos restritos na evolução dos ganhos sinápticos (HAYKIN, 1994).

5.3.2 - Aplicação da metodologia:

Antes de executar o programa que ajusta os ganhos sinápticos (mostrado no anexo A.4), com o objetivo de reduzir o erro quadrático médio, devem ser executados dois programas auxiliares que geram dados a serem processados pela rede. Uma vez definida a quantidade de nódulos e camadas presentes na rede neural, ou seja, sua arquitetura, um desses programas auxiliares, mostrado no anexo A.2, cria um arquivo de dados contendo os valores iniciais dos ganhos sinápticos com valores aleatórios entre -1,0 e +1,0. O segundo programa auxiliar, anexo A.3, cria um arquivo de dados com os exemplos de entrada-saída usados no treinamento, estabelecidos de forma aleatória ao longo de faixas apropriadas. Este conjunto

de dados está no formato de uma matriz de cinco colunas e um número variável de linhas, que é estimada pela razão entre o número de ganhos sinápticos contidos na rede e a tolerância usada como critério de convergência (HAYKIN, 1994). Portanto, quanto maior for a rede e mais rigoroso for a convergência aceitável, maior será o tamanho do conjunto de treinamento.

As cinco colunas da matriz correspondem às quatro variáveis de entrada na rede (Temperatura de entrada, pressão de entrada, vazão mássica e razão mássica vapor/etano) juntamente com um índice que representa qual o nóculo de saída deve indicar sua respectiva falha. Antes de cada nova leitura de dados do conjunto de treinamento, todos os nóculos de saída tem o valor desejado iniciado como "normal". Conforme o índice da quinta coluna, que representa a classificação da condição operacional das quatro variáveis da mesma linha, um nóculo de saída tem seu valor desejado convertido para "falha". A função de ativação usada é a sigmóide que varia de -1,0 a +1,0. O valor -0,8 representa o estado "normal" e o valor +0,8 significa "falha". Os valores extremos da função sigmóide não são usados para representar essas condições porque o treinamento resultaria em ganhos sinápticos com valores absolutos extremamente altos. Para que o treinamento seja melhor aproveitado, a ordem de apresentação dos pares de exemplos deve ser alterada de forma aleatória a cada apresentação do conjunto de treinamento. Para isso, ao final de cada apresentação é alocada uma quantidade de memória suficiente para abrigar toda a matriz de dados, adicionada de uma sexta coluna, que contém um número aleatório entre 0,0 e 1,0. Assim, a ordem de apresentação é modificada ordenando-se, através do algoritmo *Shellsort*, os números da sexta coluna.

O programa que simula o aprendizado da rede neural é terminado se o erro quadrático médio for menor que a tolerância estabelecida (0,05) ou se o número de apresentações atinge um limite máximo (6.000). Em qualquer dos casos, é criado um outro arquivo com os ganhos sinápticos decorrentes da última atualização. Esse conjunto de valores é uma síntese do conhecimento adquirido pela rede durante o

período de treinamento. Esse conhecimento resulta na habilidade da rede neural na classificação.

Por fim, a qualidade desse conhecimento adquirido é quantificada por um programa, anexo A.5, que testa a eficiência de classificação da rede neural. A rede, juntamente com os valores finais dos ganhos sinápticos, classifica os exemplos de nível de ruído médio usados no treinamento e outros conjuntos com 50.000 pares de exemplos com todos os níveis de ruído. O resultado é dado na forma de porcentagem de exemplos classificados corretamente. A classificação de um exemplos é considerada correta se nenhum nóculo de saída apresentar um diferença maior que 0,20 entre o sinal de saída calculado pela rede e o desejado. O teste com vários níveis de ruído maiores que o nível usado no treinamento é um indicador do grau de confiabilidade da rede neural em situações de certa instabilidade, onde os sinais vindos do processo têm uma flutuação maior do que a esperada.

Para testar a confiabilidade dos programas envolvidos no sistema de detecção de falhas foram comparados os sinais de saída desejado e obtido por uma rede neural 4-10-10-8 para alguns exemplos particulares. Os resultados são mostrados na tabela 5.1.

TABELA 5.1

	Operação normal		Temperatura alta		Pressão baixa	
	Desej.	Calc.	Desej.	Calc.	Desej.	Calc.
Nóculo 1	-0.800	-0.780	0.800	0.807	-0.800	-0.774
Nóculo 2	-0.800	-0.886	-0.800	-0.793	-0.800	-0.793
Nóculo 3	-0.800	-0.784	-0.800	-0.812	-0.800	-0.806
Nóculo 4	-0.800	-0.766	-0.800	-0.839	-0.800	-0.804
Nóculo 5	-0.800	-0.808	-0.800	-0.812	-0.800	-0.818
Nóculo 6	-0.800	-0.798	-0.800	-0.790	0.800	0.805
Nóculo 7	-0.800	-0.774	-0.800	-0.799	-0.800	-0.801
Nóculo 8	-0.800	-0.906	-0.800	-0.788	-0.800	-0.798

Capítulo 6

Resultados e discussão

6.1 - INTRODUÇÃO:

De posse do programa que simula o reator, o passo seguinte é, segundo critérios muitas vezes subjetivos, estabelecer um ponto de operação considerado satisfatório. Em relação a ele, serão definidas as faixas de operação normal e com falha. Assim, de acordo com a metodologia apresentada no capítulo anterior, são obtidos resultados diferentes para redes neurais com arquiteturas e parâmetros de convergência distintos.

6.2 - O TREINAMENTO DA REDE:

Conforme mencionado, os dados para o treinamento da rede neural foram obtidos com o emprego de um programa que simula, em regime estacionário, a operação de pirólise do etano para produção de etileno. Os dados necessários para o simulador são:

- Dimensões do reator: comprimento e diâmetro do reator;
- Condições operacionais: temperatura de entrada, pressão de entrada, taxa de transferência de calor, vazão mássica de alimentação, razão mássica entre vapor/etano;
- Composição da alimentação;
- Coeficientes das reações consideradas, ou seja, da reação (5.3) a (5.7).

Para o estudo da detecção de falha, foram considerados constantes as dimensões do reator, a taxa de transferência de calor e a composição da alimentação (formada quase que exclusivamente por etano). São consideradas falhas as condições operacionais em que os valores de pressão de entrada, temperatura de entrada, vazão de alimentação ou razão mássica entre vapor/etano afastem-se demasiadamente de uma condição aceita como referência para a operação normal. Portanto, a rede neural deve classificar uma condição do reator entre oito modalidades de falha e a operação normal, conforme a figura 6.1.

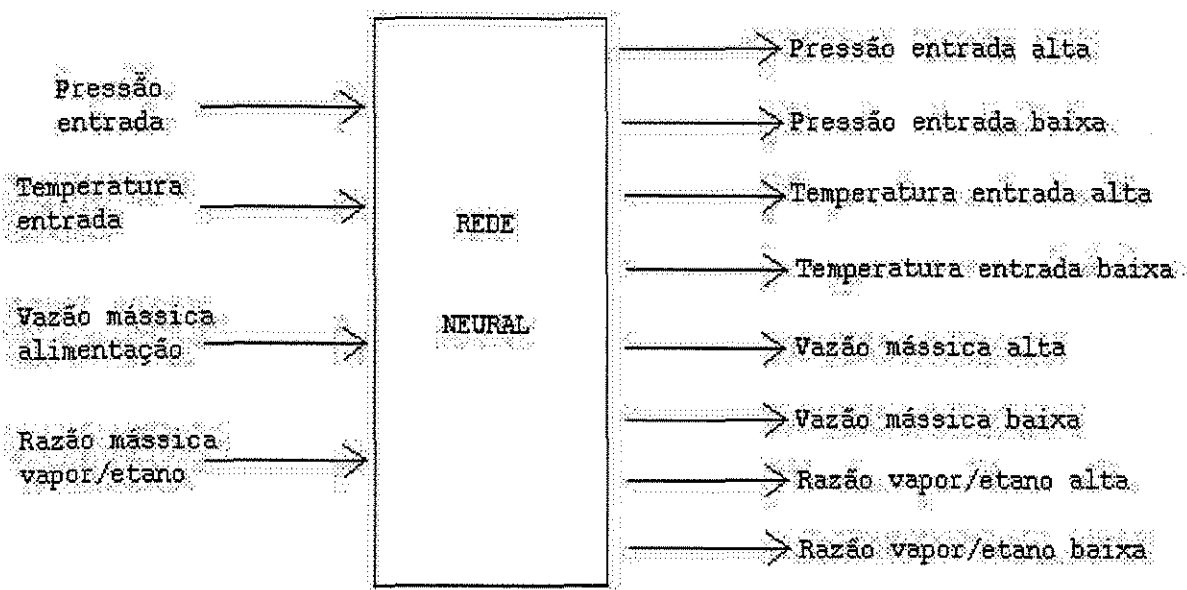


Fig. 6.1: Entrada/saída da rede neural.

Assim, as faixas correspondentes às falhas e operação normal seriam definidas a partir de um ponto de operação satisfatória do reator. A busca por este ponto teve início nos dados de um exemplo numérico contido na referência do próprio simulador. São eles:

Comprimento do reator = 100,00 m
 Diâmetro do reator = 0,108 m
 Pressão de entrada = 304,00 kPa, abs.
 Temperatura de entrada = 953,00 K
 Taxa de transferência de calor = 70,00 kW/m²
 Vazão mássica de alimentação = 0,63 kg/s
 Razão mássica vapor/etano = 0,40
 Composição de alimentação (em fração molar):
 Etano = 98,20%
 Etileno = 1,00%
 Propeno = 0,80%

Os dados acima resultavam numa conversão de 68,76%, seletividade de 78,19% e uma produção de etileno de 0,3154 kg/s. Para este trabalho a seletividade é definida pela razão entre a variação no número de moles de etileno e a

variação no número de moles de etano.

6.2.1 - Determinação das condições operacionais:

A princípio, tentou-se encontrar um ponto de máximo de produção de etileno, para que as regiões de falhas fossem definidas em torno dele. O uso do algoritmo *Simplex-Downhill* para a determinação do ponto de máximo fracassou pelas razões apontadas a seguir. A comodidade de utilizar um programa que simula um processo químico dá ao usuário a falsa liberdade para arbitrar quais são os dados usados na simulação. O usuário pode experimentar faixas de operação muito mais amplas do que as que são, na prática, aceitas pelo reator. Essa liberdade na escolha dos dados se revela falsa porque uma grande parte deles pode levar a situações infactíveis. São condições em que, apesar de otimizar a variável desejada, comprometem os resultados práticos de outras variáveis calculadas pelo programa. Por exemplo, para o programa de otimização, não há problema algum ao conduzir o processo para condições que aumentem a vazão mássica de etileno, mesmo que haja fração mássica negativa de algum componente na saída do reator. Na verdade, são objetivos diferentes: enquanto o algoritmo de otimização visa a apenas a busca de um ponto onde a variável desejada seja máxima, é necessário, para fins de detecção de falhas, que o processo seja analisado em condições operacionais que tenham significado prático.

O processo químico está sujeito a uma série de restrições, cujo conhecimento depende do contato com o equipamento real. Em muitas ocasiões, pressão, temperatura ou vazão de um fluido não podem ser aumentadas além de um certo nível porque isso poderia causar danos estruturais à tubulação presente no equipamento. Por isso, o ideal seria observar a operação do equipamento propriamente dito para se ter uma noção melhor da realidade e prevenir o uso de dados que não estejam baseados em critérios de maior solidez. Mesmo não havendo oportunidade de observar um reator de pirólise em operação, a literatura trouxe duas informações de grande

importância para a avaliação da factibilidade das condições pesquisadas: a temperatura de saída do reator é de 800,0-850,0 °C e a pressão de saída é de, aproximadamente 100,0 kPa (abs).

Além disso, a factibilidade não se restringe apenas a um ponto de operação. A natureza não-estacionária do processo químico exige que a região em torno desse ponto também tenha essa qualidade. Essa necessidade também dificultou a escolha de um ponto que servisse de referência para se obter o conjunto de treinamento da rede. Por exemplo, o ponto

Pressão entrada = 284,0 kPa

Temperatura entrada = 965,0 K

Vazão mássica = 0,69 kg/s

Razão vapor/etano = 0,46

resulta numa vazão mássica de etileno igual a 0,3301 kg/s, mas, segundo o resultado do simulador, ele não está numa região de factibilidade, como mostra a tabela B.1 do anexo. Outro exemplo é o ponto

Pressão entrada = 257,0 kPa

Temperatura entrada = 997,0 K

Vazão mássica = 0,68 kg/s

Razão vapor/etano = 0,32

que fornece uma vazão mássica de etileno ainda mais alta (0,3500 kg/s), mas a tabela B.2 mostra que ele não é compatível com a operação de um reator num processo real. Visto isso, concluímos que não é conveniente o uso da vazão de etileno como critério para estabelecer as faixas de operação normal e com falha. Além da grande dificuldade de se atingir o ponto de máximo, há um considerável número de pontos inconsistentes.

Na impossibilidade de adotar um ponto extremo como referência na definição de faixas de operação, surge uma segunda alternativa. Sabendo-se que, o processo reativo foi

colocado em função de quatro variáveis, fixando-se três delas, observa-se que a conversão de etano e a seletividade de etileno em relação ao etano variam em sentidos opostos ao longo da quarta variável. Logo, é mais viável encontrar um ponto em que conversão e seletividade sejam valores satisfatórios.

Na ausência de uma metodologia para otimização de conversão e seletividade, deve-se abandonar a idéia de chegar ao ponto ótimo. Essa atitude de desvincular a definição das faixas de normalidade com a busca de um ponto ótimo, notoriamente, encontra respaldo na literatura. Na apresentação do conjunto de treinamento os autores não especificam qual a variável que é otimizada por aqueles valores ou se quer mencionam qual o critério para obtenção daquele conjunto de dados. Ao que parece, não é valorizado o uso de métodos formais para chegar às faixas de operação. Outrossim, cada processo tem sua particularidade e cada pessoa pode estabelecer seus próprios critérios para definir uma condição operacional como normal ou falha. Ou seja, enquanto o ponto ótimo de operação é formalmente calculado, uma faixa normal de operação não requer tanto rigor. Ela pode ser demarcada mesmo sem o conhecimento do ponto máximo, sendo suficiente que ela não contenha pontos prejudiciais ao desempenho do processo. Uma prova disso, é que o treinamento pode ser feito com dados obtidos de um equipamento em operação, mesmo que não seja otimizada. Disso, é concluído que mais importante que buscar explicações que justifiquem a escolha das faixas de operação é o desempenho da rede neural sobre a faixa estabelecida. Autor de um livro que é citado várias vezes na literatura, HIMMELBLAU (1978), trata a questão de detecção de falhas sem ocupar-se com técnicas de otimização. Inclusive, menciona que os critérios que estabelecem as faixas de operação normal e com falha são de cunho pessoal, sendo reservada a cada pessoa uma maneira diferente de avaliar o processo.

Assim, a partir do ponto operacional da referência, a direção que leva a pontos de alta conversão e seletividade

foi estimada, variando-se uma variável e mantendo as outras fixas. Com isso, foi determinado um ponto de operação factível e com valores de seletividade e conversão consideravelmente superiores aos do ponto inicial:

Pressão entrada = 244,0 kPa

Temperatura entrada = 967,0 K

Vazão mássica = 0,53 kg/s

Razão vapor/etano = 0,40

obtendo-se conversão de 81.45%, seletividade de 81.47% e produção mássica de etileno igual a 0,3263 kg/s.

A procura por este ponto foi uma tentativa de buscar um equilíbrio entre dois extremos indesejados. De um lado está o ponto inicial que, apesar de ser passível de uma análise de detecção de falhas, pode ter seus resultados melhorados facilmente. Em contrapartida, é preciso manter uma certa distância de regiões com pontos infactíveis que, segundo resultados do simulador, começam a manifestar-se para vazões mássicas de etileno maiores que 0,3300 kg/s. Sendo a produção de etileno no ponto obtido de 0,3263 kg/s, pode-se dizer que o equilíbrio foi alcançado com razoável sucesso. Deve ser lembrado que não há uma solução única que satisfaça esse critério, certamente existem outros pontos de operação com resultados melhores que o ponto inicial e com valores representativos.

Determinado o ponto de referência, é preciso delimitar, para cada uma das quatro variáveis, as faixas de operação consideradas normais. Não há uma regra definida para estabelecer estas faixas. Geralmente, é considerado normal uma variação entre 3-5%.

Para que os sinais usados no treinamento da rede sejam mais próximos de um processo real, são feitos conjuntos de dados com diferentes níveis de ruídos: baixo (10% da variação normal), médio (15%), alto (20%) e muito alto (30%). Abaixo é mostrado, para cada variável, qual o instrumento usado na sua medição e as faixas de operação normal e com falha para os níveis de ruído considerados.

6.2.2 - Variáveis usadas no treinamento:

a) Pressão de entrada:

A tabela B.3 do anexo mostra a variação de pressão em torno do ponto de referência. A pressão na entrada do reator pode ser medida com o uso de um transdutor de pressão com saída elétrica. Entre os vários tipos, o de contato resistivo móvel pode ser adotado. Neste modelo, o deslocamento de um elemento elástico, como diafragma ou fole, varia uma resistência que, por sua vez, altera a intensidade do sinal elétrico (ISMAIL, GONÇALVES e BENEVENUTO, 1998). A tabela 6.1 mostra a faixa normal de pressão, juntamente com os dados usados no treinamento de pressão normal, alta e baixa para cada nível de ruído.

Tabela 6.1

Faixa normal	229,36-258,64 (kPa, abs.)		
Ruído baixo	223,50-229,36	241,07-246,93	258,64-264,20
Ruído médio	220,58-229,36	239,61-248,39	258,64-267,42
Ruído alto	217,65-229,36	238,14-249,85	258,64-270,35
Ruído muito alto	211,79-229,36	235,22-252,78	258,64-276,21

a) Temperatura de entrada:

Na tabela B.4 é mostrada a variação de temperatura. Um termopar pode ser empregado para medir a temperatura de entrada do reator. A tabela 6.2 mostra as faixas correspondentes.

Tabela 6.2

Faixa normal	937,99-996,01 (K)		
Ruído baixo	926,39-937,99	961,20-972,80	996,01-1007,61
Ruído médio	920,58-937,99	958,30-975,70	996,01-1013,42
Ruído alto	914,78-937,99	955,40-978,60	996,01-1019,22
Ruído muito alto	903,18-937,99	949,59-984,41	996,01-1030,82

c) Vazão mássica:

A região em torno do ponto de referência é apresentada na tabela B.5. A medição de uma vazão mássica é menos comum do que uma vazão volumétrica, que dispõe de mais instrumentos. A vazão mássica da alimentação do reator pode ser quantificada pelos medidores por rotação constante ou medidores por torque constante (ISMAIL, GONÇALVES e BENEVENUTO, 1998). A tabela 6.3 exhibe os valores encontrados para a vazão.

Tabela 6.3

Faixa normal	0,4982-0,5618 (kg/s)		
Ruído baixo	0,4855-0,4982	0,5236-0,5364	0,5618-0,5745
Ruído médio	0,4791-0,4982	0,5205-0,5395	0,5618-0,5809
Ruído alto	0,4728-0,4982	0,5173-0,5427	0,5618-0,5872
Ruído muito alto	0,4600-0,4982	0,5109-0,5491	0,5618-0,6000

d) Razão entre vapor/etano:

Na tabela B.6 estão os dados referentes à razão mássica. Para se medir essa variável, basta usar o mesmo instrumento descrito no item anterior e medir as vazões de alimentação e de vapor. A razão propriamente dita seria calculada por um computador para que essa informação alimente a rede neural. Neste caso, a tabela B.6. Finalmente, a tabela 6.4 os resultados obtidos.

Tabela 6.4

Faixa normal	0,3760-0,4240		
Ruído baixo	0,3664-0,3760	0,3952-0,4048	0,4240-0,4336
Ruído médio	0,3616-0,3760	0,3928-0,4072	0,4240-0,4384
Ruído alto	0,3568-0,3760	0,3904-0,4096	0,4240-0,4432
Ruído muito alto	0,3472-0,3760	0,3856-0,4144	0,4240-0,4528

6.3 - RESULTADOS:

O presente estudo pretende mostrar a influência dos parâmetros mais importantes no treinamento da rede sobre a convergência e sobre a habilidade da rede neural em detectar corretamente as falhas numa grande quantidade de padrões, tanto os que foram usados no treinamento como os que não foram. Diferentes arquiteturas foram testadas e os valores de taxa de aprendizado e termo de momentum são variados numa faixa conveniente de valores. Numa determinada arquitetura de rede, a variação desses parâmetros auxilia na busca por valores que resolvam de maneira satisfatória o compromisso entre uma rapidez e estabilidade na procura pelo ponto de erro mínimo. Ou seja altos valores de taxa de aprendizado e termo de momentum aceleram a convergência mas tendem a oscilar em torno dos pontos desejados. Por outro lado, valores muito baixos apresentam menos oscilação, mas tornam a convergência mais lenta. Quanto às arquiteturas, com o crescimento do número de nódulos na rede, o número de ganhos sinápticos cresce rapidamente, o que possibilita armazenar mais conhecimento, mas requer um maior número de ajustes, ou seja, a convergência pode ser mais lenta.

6.3.1 - Redes com uma camada oculta:

Sendo mais simples, as redes com uma camada oculta podem apresentar dificuldades na classificação de padrões. No entanto, seu emprego é justificado porque, a princípio, existe a possibilidade de apenas uma camada ser suficiente para atender ao problema proposto. A figura 6.2 mostra o nível de convergência conseguido com essa arquitetura. Por conveniência, os valores de taxa de aprendizagem e termo de momentum serão representados na forma $(\eta; \alpha)$, podendo também serem abreviados por t.a. e m.t., respectivamente.

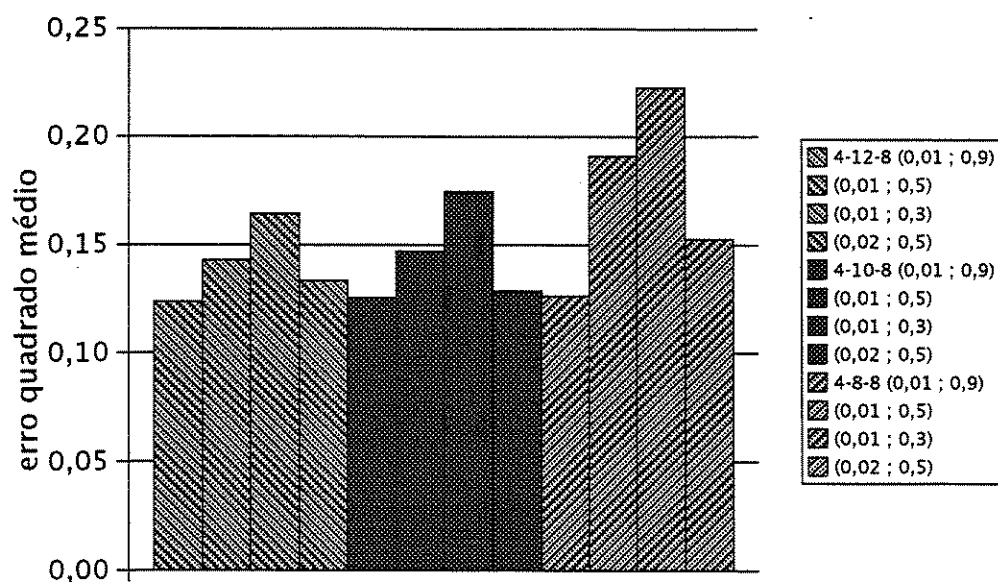


Fig. 6.2: Nível de convergência alcançado.

De acordo com os resultados da figura anterior é esperado que não haja um bom desempenho na tarefa de classificação, cujos resultados são mostrados a seguir.

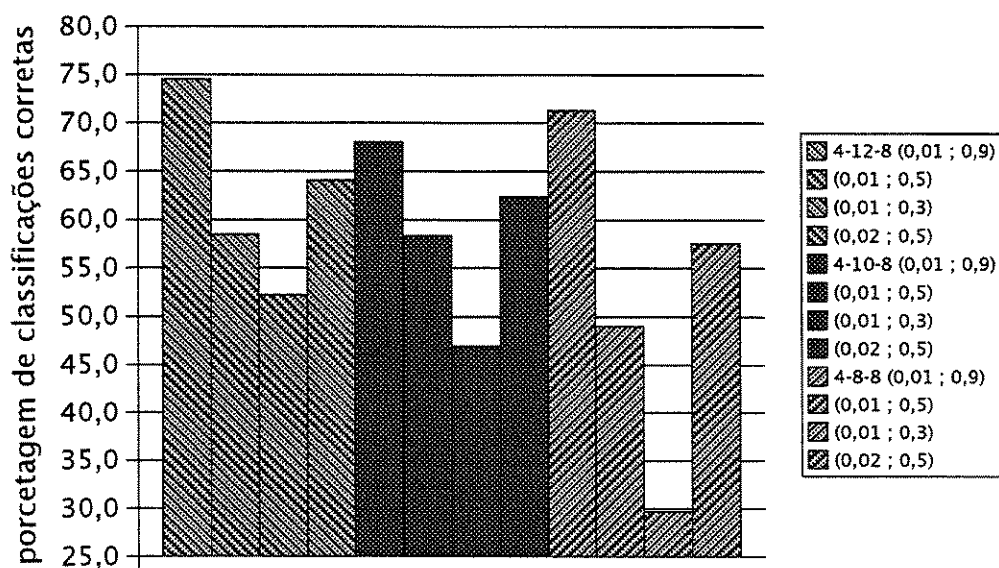


Fig. 6.3: Padrões usados no treinamento.

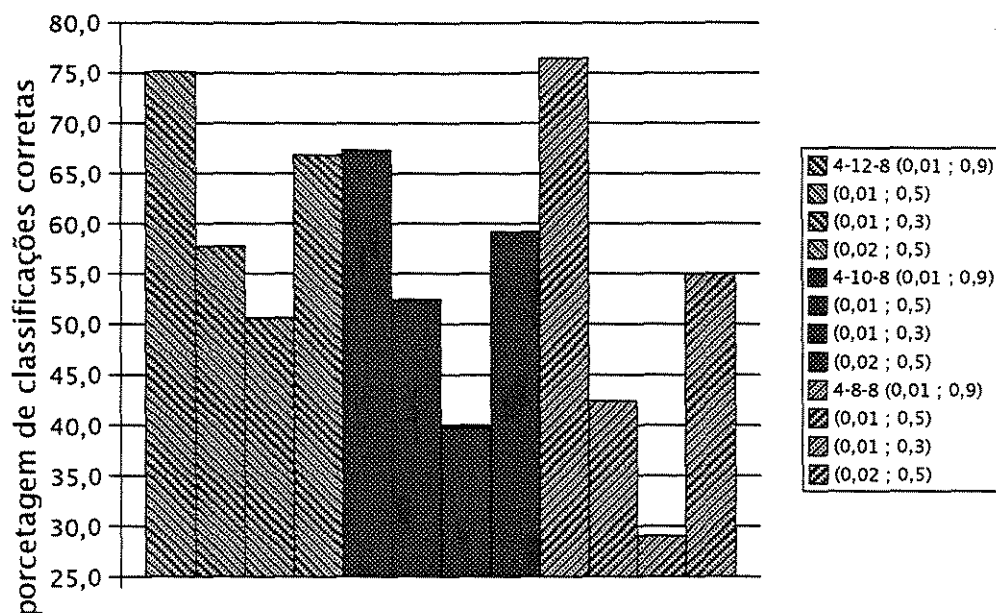


Fig. 6.4: Padrões não usados no treinamento (baixo ruído).

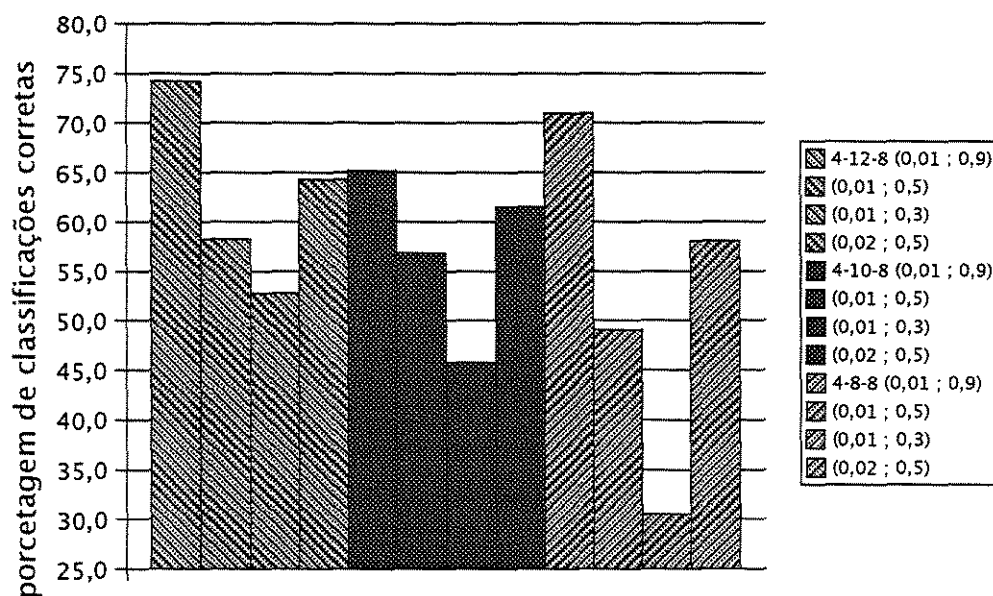


Fig. 6.5: Padrões não treinados (ruído mediano).

As figuras 6.6 e 6.7 mostram os resultados de um teste importante para a confiabilidade da rede neural, a classificação de sinais com um ruído superior ao usado no treinamento.

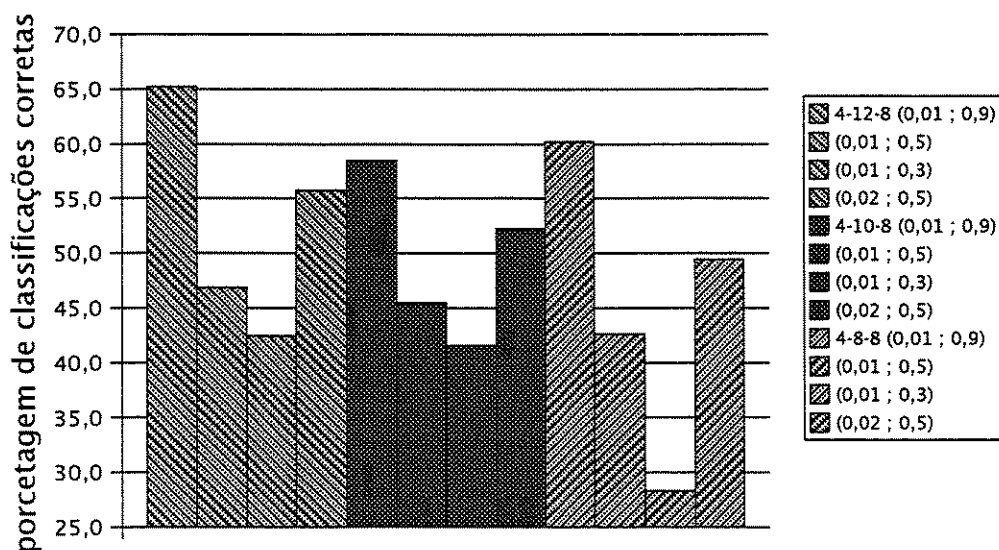


Fig. 6.6: padrões não treinados (ruído alto).

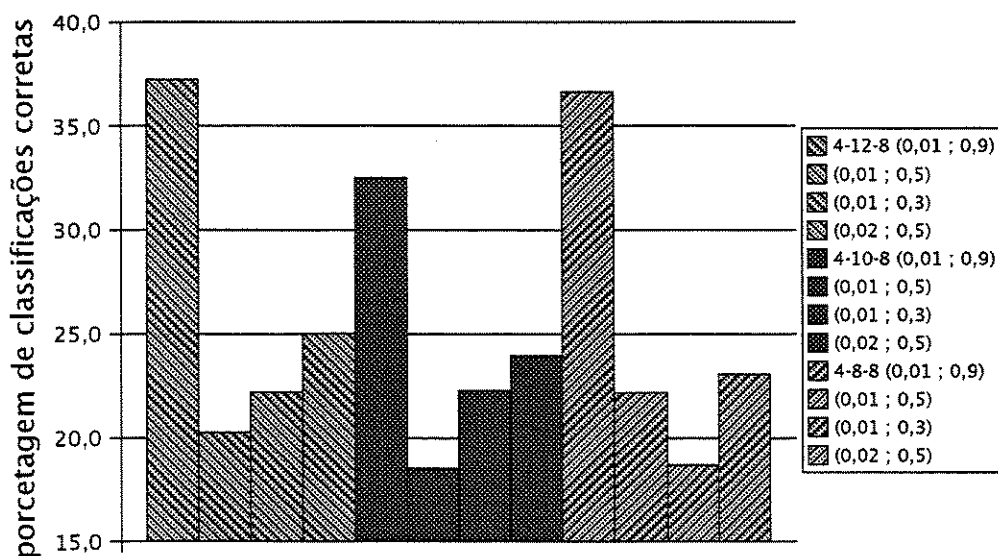


Fig. 6.7: Padrões não treinados (ruído muito alto).

Das figuras anteriores, pode-se concluir que as redes com apenas uma camada oculta não são apropriadas devido ao seu baixo índice de acerto. Para os sinais com nível de ruído alto e muito alto houve uma queda acentuada de desempenho. Talvez a criação das regiões que segregariam os padrões exija

um processamento mais complexo do que o oferecido por essa arquitetura.

6.3.2 - Redes com duas camadas ocultas:

A funcionalidade de uma rede neural é atribuída ao seu conjunto final de ganhos sinápticos. A evolução desses parâmetros, que são inicializados aleatoriamente, depende fortemente da escolha de valores adequados de taxa de aprendizado e termo de momentum. Dependendo da tarefa a ser realizada, uma pequena alteração nesses valores pode comprometer a convergência do algoritmo de aprendizado e resultar em ganhos sinápticos totalmente inúteis. Por isso, antes de avaliar os resultados de detecção de falhas para o reator, é mostrado a influência na escolha de η e α sobre a convergência.

A rede de arquitetura 4-10-10-8 com (0,01; 0,9) fornece resultados razoáveis em várias ocasiões e é tomada como padrão numa comparação com as outras. As figuras 6.8 e 6.9 mostram o que resulta da variação de um parâmetro, mantendo o outro fixo. Visivelmente, a convergência é favorecida pelo uso de pequenos valores de η , uma vez que um grande decréscimo no termo de momentum não é tão prejudicial à convergência quanto um pequeno aumento na taxa de aprendizado. Isto pode ser indício de um razoável grau de dificuldade da discriminação dos padrões. Ou seja, a superfície de erro é suficientemente irregular para inibir grandes ajustes nos ganhos sinápticos.

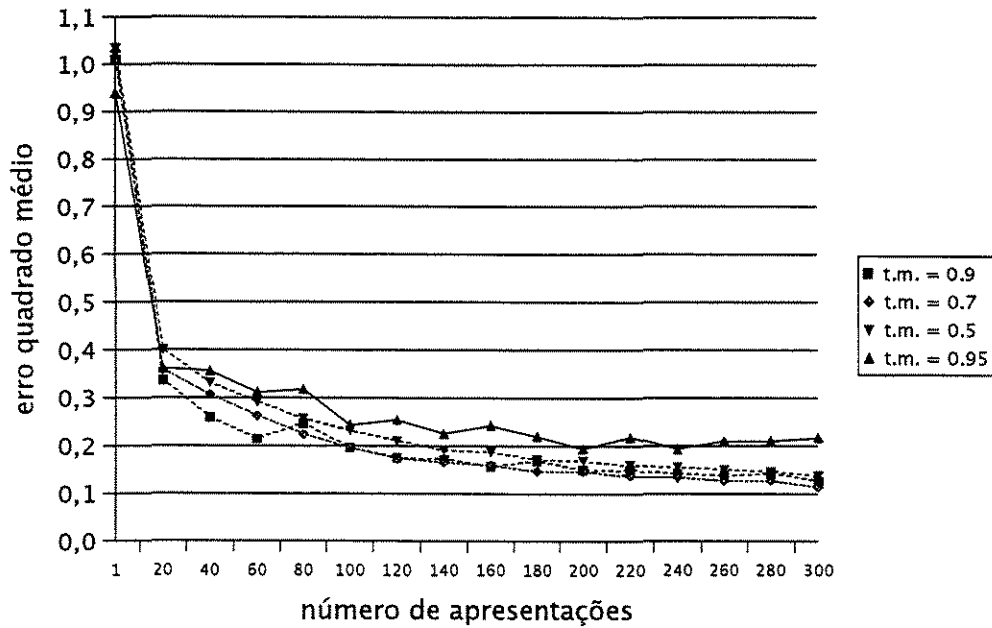


Fig. 6.8: Variação do termo de momentum no treinamento ($t.a. = 0,01$).

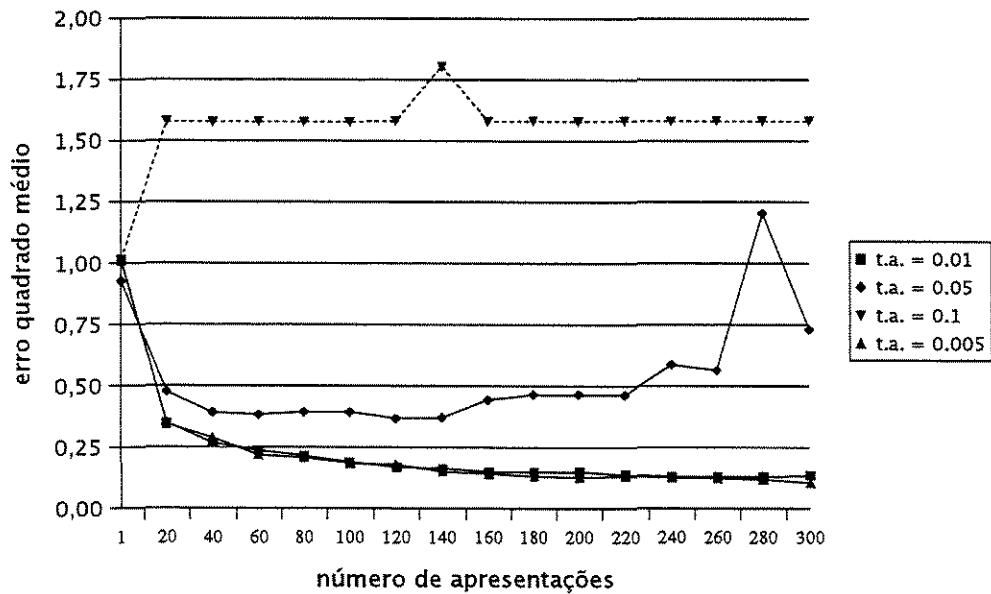


Fig. 6.9: Variação da taxa de aprendizado no treinamento ($m.t. = 0,9$).

Possivelmente, essa dificuldade seja uma consequência da adição de ruído no conjunto de treinamento. Assim, o objetivo de chegar a um erro quadrado médio suficientemente baixo somente é conseguido com pequenas alterações nos parâmetros ajustáveis. A figura 6.10 confirma esta

constatação.

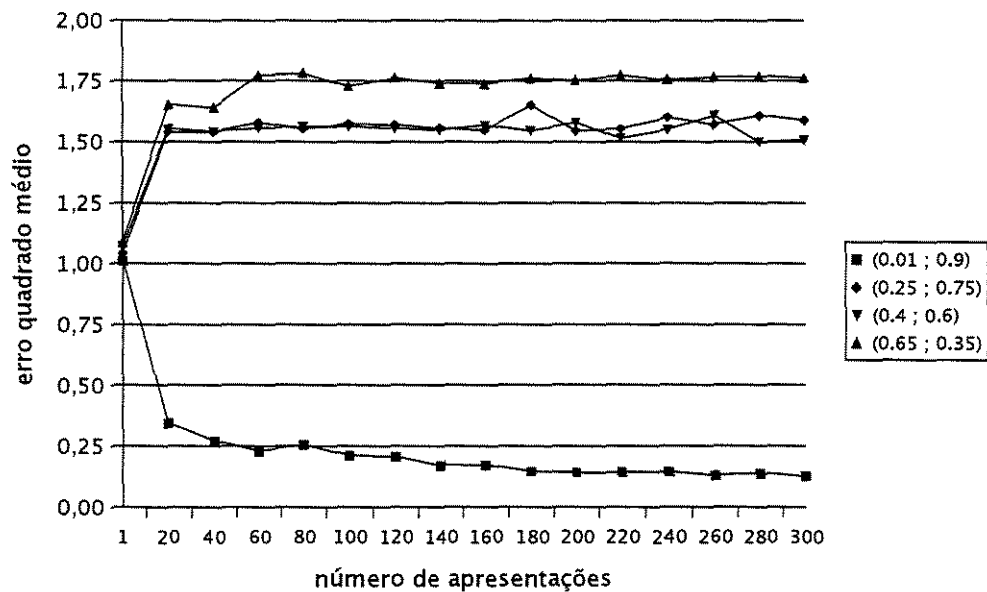


Fig. 6.10: Variação dos dois parâmetros no treinamento.

Apesar de um grande número de apresentações (6.000) para se chegar à convergência, nenhum aprendizado foi capaz de produzir um erro menor que 0,05. O menor valor foi de 0,064, como é mostrado na figura 6.12.

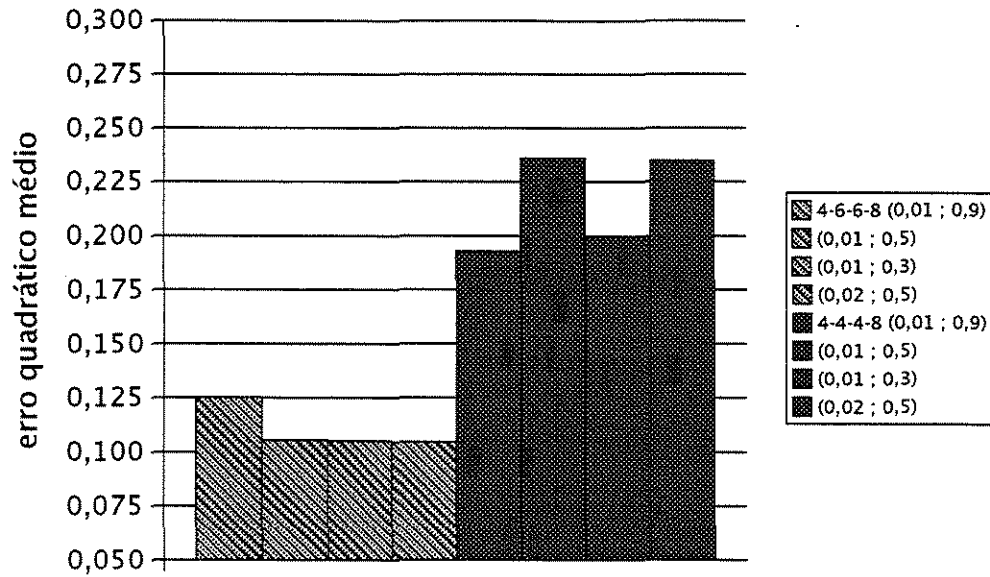


Fig. 6.11: Convergência obtida.

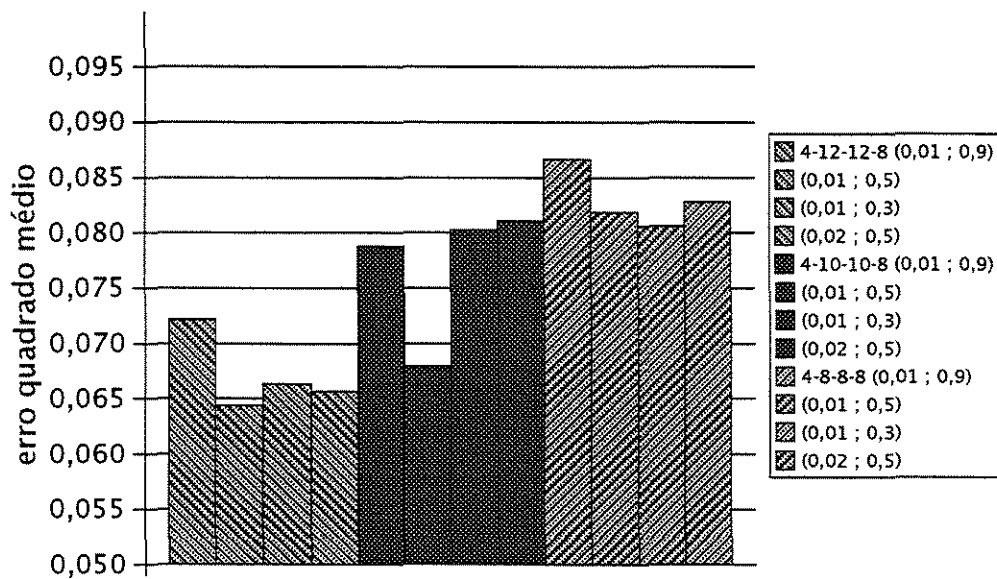


Fig. 6.12: Convergência obtida.

Embora somente o nível mediano de ruído fora usado no treinamento, padrões com outros níveis de ruídos são úteis para medir a qualidade do conhecimento adquirido durante o treinamento. Assim, para as cinco arquiteturas submetidas ao aprendizado é verificada a capacidade das redes neurais em classificar corretamente um conjunto razoavelmente grande de

padrões. Além dos usados na seção de treinamento, cada rede classifica um conjunto de 50.000 elementos, para cada nível de ruído, não treinados. O resultado deste teste é dado em forma de porcentagem de classificações corretas. Evidentemente, só é considerada correta a classificação do padrão que responder acertadamente nos oito núdulos de saída. As figura 6.13 e 6.14 mostram os resultados para os padrões usados no treinamento.

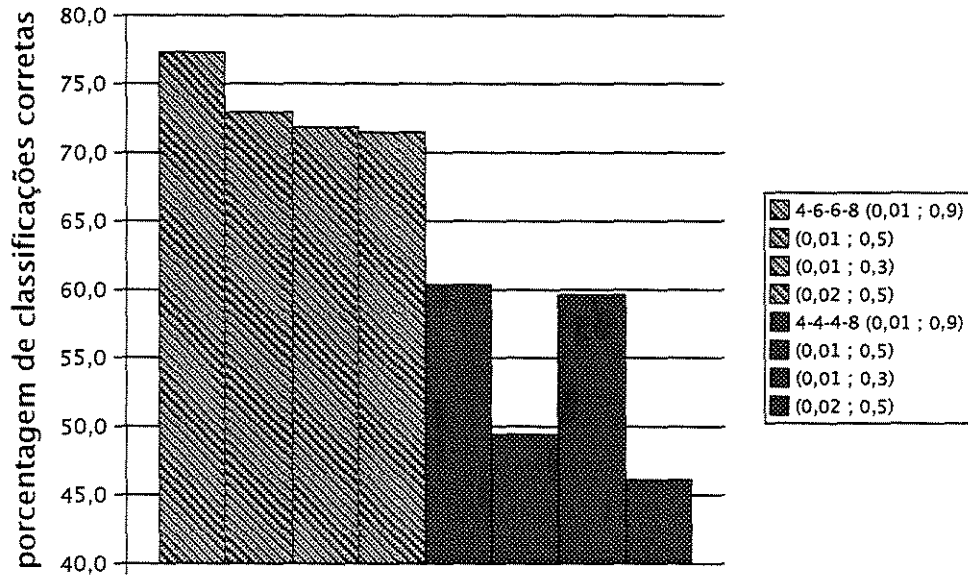


Fig. 6.13: Padrões usados no treinamento (nível de ruído médio)

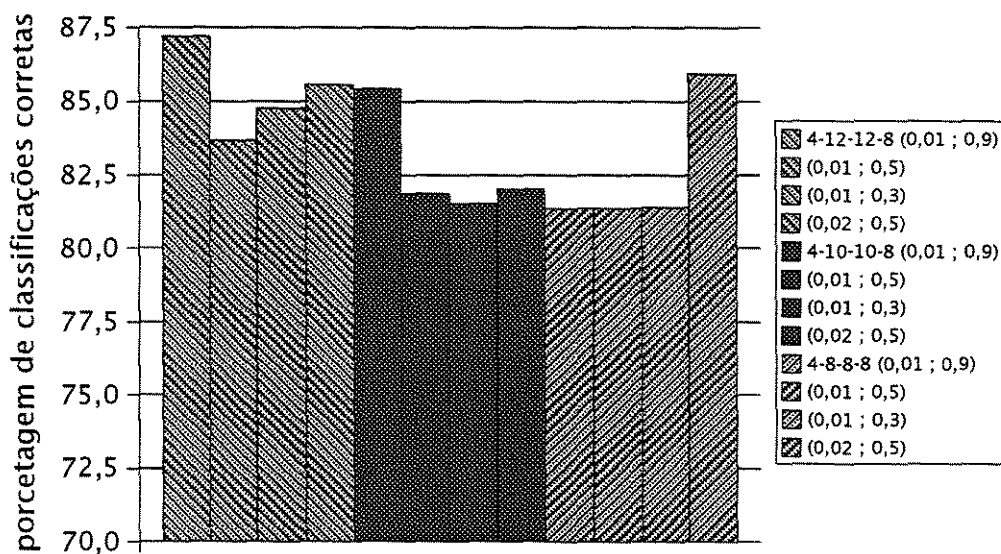


Fig. 6.14: Padrões usados no treinamento (nível de ruído médio).

As figuras seguintes exibem os resultados para padrões alheios ao treinamento, e com um nível de ruído menor e igual ao treinamento, respectivamente.

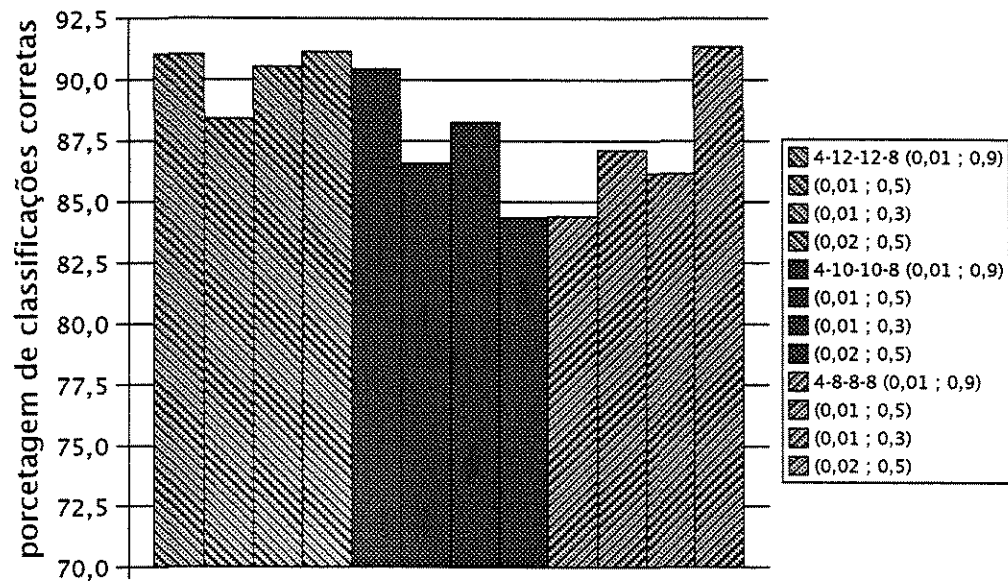


Fig. 6.15: Padrões não usados no treinamento (nível de ruído baixo).

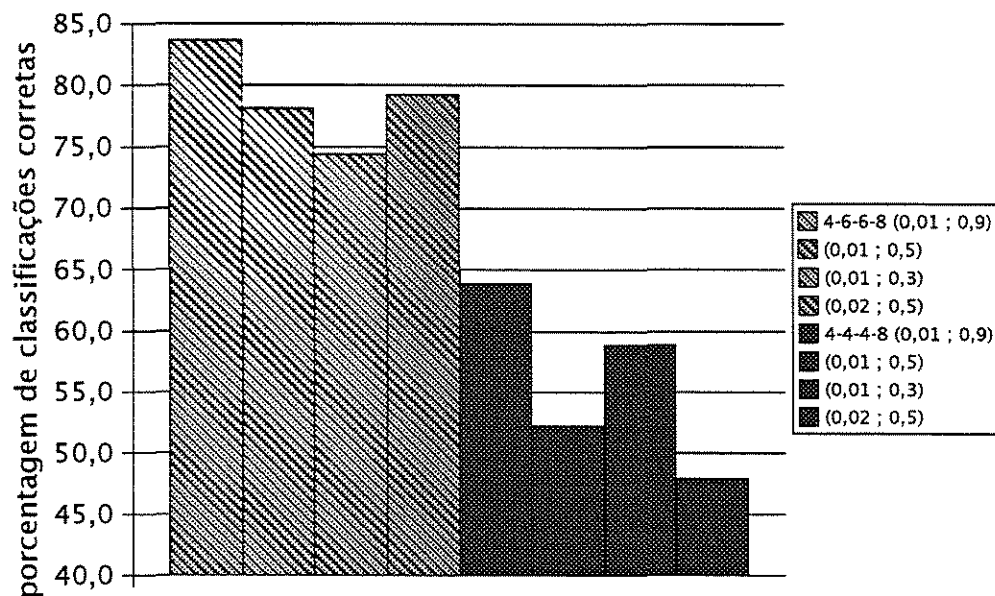


Fig. 6.16: Padrões não usados no treinamento (nível de ruído baixo).

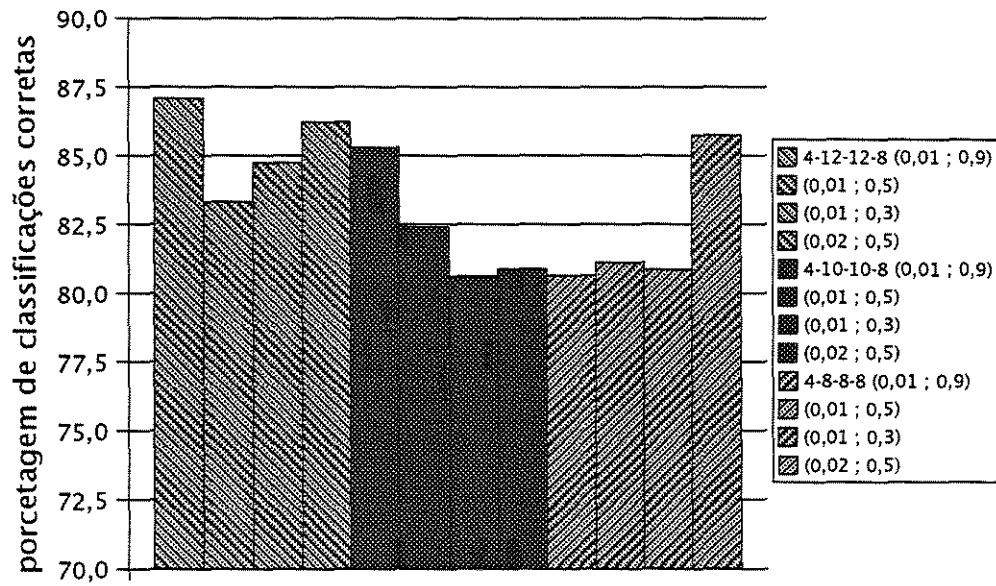


Fig. 6.17: Padrões não usados no treinamento
(nível de ruído médio).

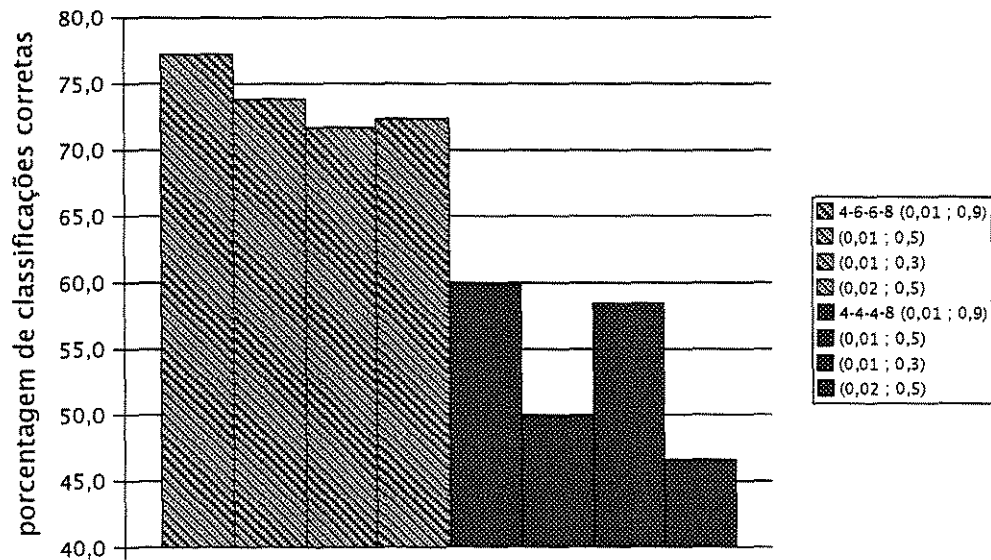


Fig. 6.18: Padrões não usados no treinamento
(nível de ruído médio).

Normalmente, as redes neurais tem a propriedade de generalizar os resultados para dados de uma faixa um pouco mais ampla que o treinamento. Para verificar essa qualidade, foram empregados sinais com um nível de ruído acima do mediano. O resultado é mostrado nas figuras 6.19 a 6.22.

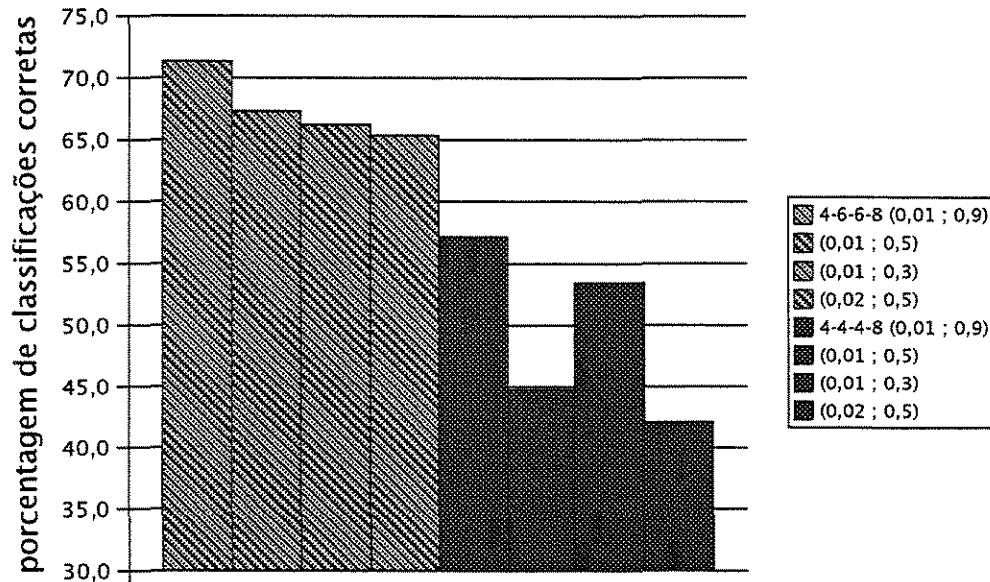


Fig. 6.19: Padrões não usados no treinamento (ruído alto).

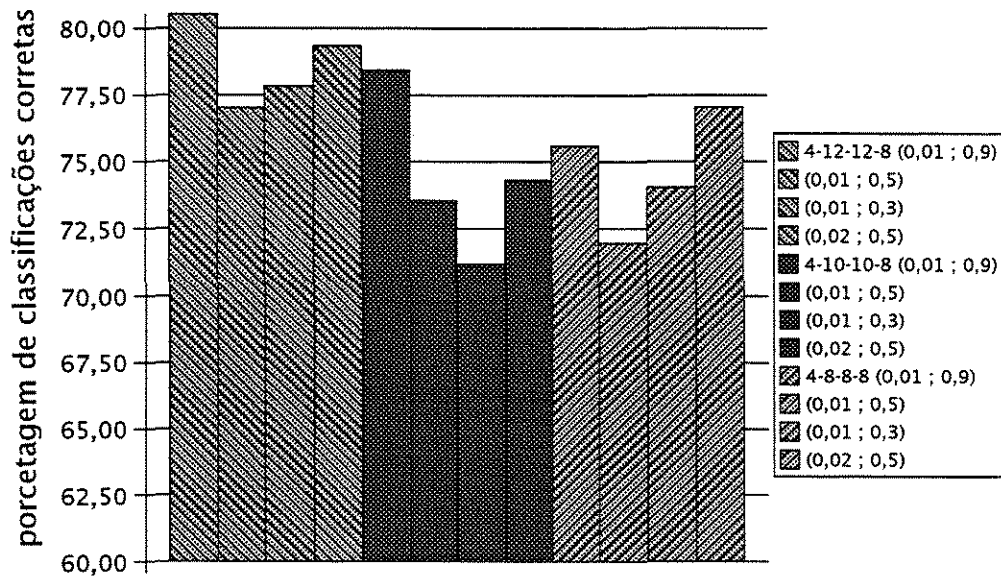


Fig. 6.20: Padrões não usados no treinamento (nível de ruído alto).

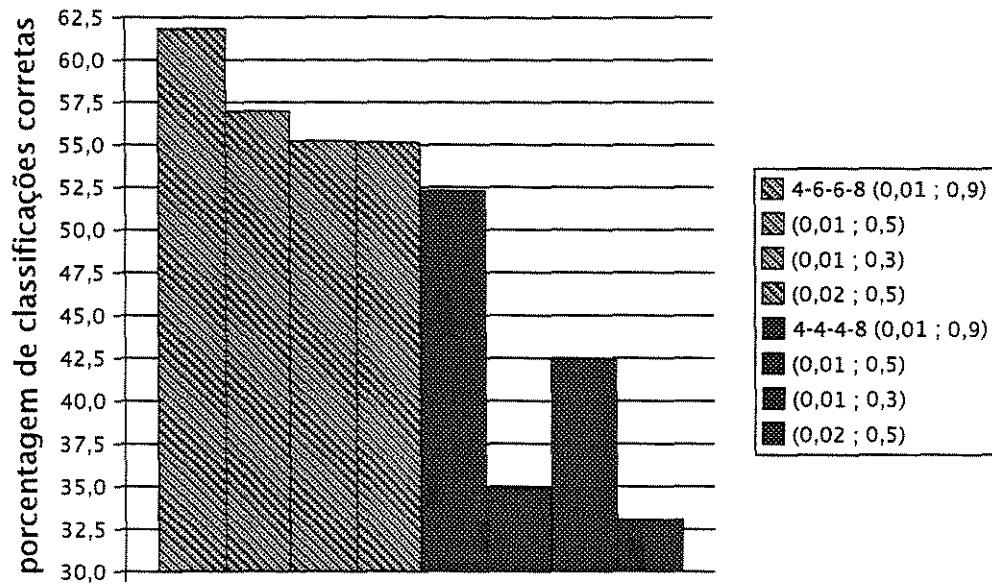


Fig. 6.21: Padrões não treinado (ruído muito alto).

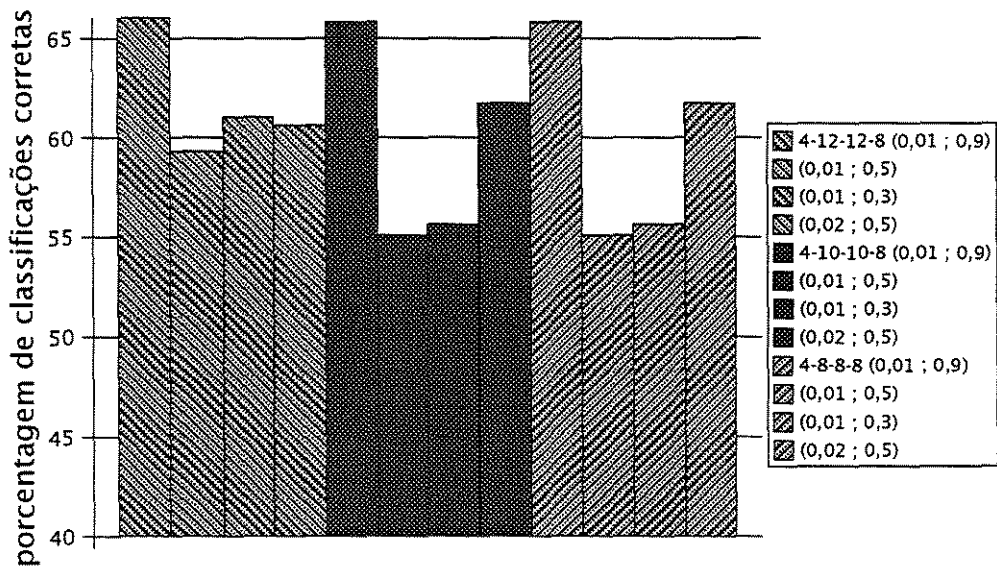


Fig. 6.22: Padrões não usados no treinamento
(nível de ruído muito alto).

Dos resultados apresentados na figuras anteriores, verifica-se que as redes com duas camadas ocultas apresentam um desempenho aceitável, sendo que redes com mais nós têm

melhores índices de acerto. Isso mostra que o conhecimento que se pretende adicionar à rede, via treinamento exige um certo número de parâmetros ajustáveis.

6.4 - Conclusões:

Além do desenvolvimento de um mecanismo, baseado em redes neurais, para detecção de falhas num reator de pirólise, foi objetivo do presente trabalho esclarecer as relações e influências dos diversos parâmetros presentes numa rede neural no sentido de aperfeiçoar o sistema. Os resultados exibidos nas figuras deste capítulo abrigam conclusões possivelmente valiosas para outros trabalhos correlatos. Foi enfatizado o cuidado necessário na escolha adequada, específica para cada caso, de taxa de aprendizagem e termo de momentum. Observou-se que uma pequena variação nesses parâmetros alterou completamente o resultado da convergência. O emprego de diferentes arquiteturas mostrou que, apesar de levar a um treinamento mais demorado, a utilização de mais núdulos internos deve ser consideradas nos casos de desempenho pobre na detecção de falhas. De fato, as redes com doze núdulos ocultos apresentaram, de um modo geral, melhores índices de classificação. Contudo, a desvantagem do aumento do tempo de treinamento também deve ser levada em conta. Os resultados também indicam que as redes neurais não tiveram uma queda brusca de desempenho quando foram expostas a ruídos de maior amplitude. Esse aspecto pode ser valioso para lidar com flutuações naturais num processo químico. Ou seja, caso algum mecanismo de controle da planta apresente defeitos que amplifiquem o desvio de uma variável, a rede neural ainda é considerada um instrumento confiável na detecção de falhas.

Essas considerações levam à conclusão de que métodos baseados em redes neurais possuem atribuições desejáveis para aplicações em sistemas de detecção de falhas.

Capítulo 7
Conclusões e sugestões para
trabalhos futuros

7.1 - CONCLUSÕES:

As principais contribuições deste trabalho de tese foram:

- Análise sobre a necessidade de sistemas de detecção de falhas em engenharia de processos. A importância deste assunto cresce a medida que se confirma a tendência de aumento da complexidade nos processos mais modernos;
- Discussão sobre características, vantagens e desvantagens de diversos métodos para detecção de falhas nos processos químicos;
- Desenvolvimento de uma metodologia baseada em redes neurais, para detecção de falhas num reator de pirólise do etano;
- Introdução de diversos níveis de ruídos aos dados processados pela rede neural, aproximando-se de uma abordagem mais prática;
- Discussão sobre critérios usados na detecção de falha e sobre o uso de simuladores para obtenção de dados para treinamento;
- Análise da influência de vários fatores tanto na convergência como na qualidade de classificação das redes neurais;
- Abordagem de aspectos importantes relacionados ao estudo de redes neurais e ao processo de pirólise.

Além disso, algumas conclusões devem ser apontadas. A conclusão mais evidente é que o desempenho da rede neural é influenciado consideravelmente pela escolha dos parâmetros usados. Entre eles estão o número de camadas ocultas, o número de nódulos em cada camada e os parâmetros de convergência. Os perfis de convergência obtidos para redes com duas camadas ocultas mostram que uma pequena variação em um dos parâmetros pode levar a valores de ganhos sinápticos finais totalmente diferentes quanto à sua eficiência na detecção de falhas.

As redes com apenas uma camada oculta não se mostraram

adequadas devido ao seu baixo índice de acerto, principalmente no caso de sinais com nível de ruído alto e muito alto. Houve uma queda brusca de desempenho para esses ruídos, o que é altamente indesejável num instrumento usado para manter o processo operando em condições seguras. Seu emprego poderia representar um grande risco à um processo, caso a falha se dê numa condição em que nos sinais vindos do processo tenham uma flutuação um pouco maior. Talvez seu baixo desempenho possa ser explicado, em parte, pelo teorema de Kolmogorov, citado no capítulo 3. Segundo este teorema, somente as redes neurais com duas camadas ocultas são capazes de produzir regiões arbitrárias para segregar os padrões. Portanto, neste caso, talvez, as redes neurais com apenas um camada oculta estejam apresentando a limitação intrínseca de não gerar regiões de complexidade suficiente.

Embora não atinja um nível desejado, a rede com duas camadas ocultas com oito nós esboça um desempenho aceitável. Redes mais complexas que ela, já podem ser consideradas confiáveis, principalmente a rede com doze nós em cada camada oculta. Mesmo frente à sinais de ruído muito alto ela apresentou índices de acertos aceitáveis, embora possa ser recomendado o uso de mecanismos para reduzir o ruído do sinal. Disso conclui-se que não basta uma escolha sensata em relação aos parâmetros de convergência, taxa de aprendizado e termo de momentum, a rede precisa ter um número mínimo de parâmetros ajustáveis para que poder adquirir o conhecimento necessário para a classificação desejada. Apesar de habilitar a rede à operar com mais eficiência num processo real, o ruído usado no treinamento, provavelmente, dificultou consideravelmente a convergência e a classificação. Dados os pontos centrais de referência de cada classe, o ruído produz padrões intermediários, ainda que mais próximos de um dos centros.

Analisando os resultados, poderia-se concluir que basta aumentar o número de nós nas camadas ocultas que, certamente, chegar-se-á numa configuração na qual se obtenha um desempenho sempre melhorado. Primeiramente, considera-se justo afirmar que um padrão de comportamento de algumas

arquiteturas não pode ser generalizado para outras. Ou seja, parece ser muito difícil, em alguns casos, prever o comportamento de redes neurais, dada uma alteração de arquitetura. Ainda assim, existe uma limitação de carácter prático que impede o crescimento exagerado do número de nódulos nas camadas ocultas. Quanto maior o número de nódulos numa rede, maior será a quantidade de exemplos usados no treinamento e maior será o tempo gasto no treinamento. Dependendo da aplicação da rede neural, esse fator pode ser uma séria desvantagem. Por exemplo, num processo são ligadas duas redes neurais, uma em treinamento e a outra exercendo a detecção de falhas. No instante em que uma rede termina o treinamento, elas trocam de função, com o objetivo de manter sempre uma rede com um treinamento atualizado fazendo a detecção de falhas. Assim, se houver um aumento considerável no tempo de aprendizagem, pode ser que o ganho no desempenho da rede não compense o maior intervalo entre a substituição da rede por outra com conhecimento mais atualizado.

Deve ser ressaltada uma limitação intrínseca de trabalhos de detecção de falhas aplicados a um processo específico. O fato de não existirem critérios universais bem estabelecidos para a definição do que seja uma falha cria uma certa dificuldade de adaptação de sistemas de detecção de falhas, como o desenvolvido no presente estudo, a processos similares. Tudo depende de quais variáveis são escolhidas para se estabelecer a detecção de falha, e quais são as faixas de operação normal. Contudo, a metodologia descrita neste trabalho pode ser aplicada com sucesso em outras situações.

7.2 - SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS:

Redes neurais são ferramentas que dão possibilidades a muitas variações. Existem três forma básicas de paradigmas de aprendizagem, cada um possuindo vários algoritmos úteis de aprendizagem. Obviamente, num mesmo algoritmo, várias arquiteturas podem ser usadas. Além disso, é possível criar

sistemas híbridos com outras técnicas de inteligência artificial, como o emprego de lógica Fuzzy. Assim, é muito difícil abordar muitas variações em apenas um trabalho. Por isso, é sugerido, para efeito de comparação, o desenvolvimento de um sistema com outro paradigma de aprendizado como o não-supervisionado, por exemplo. Essa metodologia introduziria um novo aspecto que seria a separação entre normalidade e falha feita pelo próprio programa. Poderiam também ser aplicados outros métodos de reconhecimento de padrões, para a detecção de falhas. Ainda no âmbito da inteligência artificial, a detecção de falhas também pode ser abordada por sistemas que utilizem mais conhecimento explícito do que dados numéricos operacionais do processo, como os sistemas especialistas.

Referências Bibliográficas

- BEALE, R. e T. JACKSON, *Neural computing*, IOP Publishing, 1990.
- BLOCK, H. D., *The perceptron: a model of brain functioning.I*, *Reviews of Physics*, 34, pág. 123-135, 1962.
- BULLEMER, P. e I. NIMMO, *Tackle abnormal situation management with better training*, *Chemical Engineering Progress*, p.43-54, january, 1998.
- CHAMBERS, L. E. e W. S. POTTER, *Design ethylene furnaces (Part 1: maximum ethylene)*, *Hydrocarbon Processing*, v.53, n.1, p.121-126, 1974.
- CHAUVEL, A. e G. LEFEBVRE, *Petrochemical processes*, vol. 1, Gulf Publishing Co., 1986.
- DASH, S. e V. VENKATASUBRAMANIAN, *Challenges in the industrial application of fault diagnostic systems*, *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.785-791, 2000.
- DOIG, I. D. e R. H. REINTEN, *Sensitivity of process to component faults*, *Computers and Chemical Engineering*, v.3, p.497-501, 1979.
- ELSASSER, W. M., *The Physical foundation of biology*, Pergamon Press, 1958.
- ENNIS, B. P., H. B. BOYD e R. ORRISS, *Olefin manufacture via milisecond pyrolysis*, *Chemtech*, v.5, n.11, p.693-699, 1975.
- EO, S. Y., T. S. CHANG, D. SHIN e E. S. YOON, *Cooperative problem solving in diagnostic agents for chemical processes*, *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.729-734, 2000.

- FAN, J. Y., M. NIKOLAOU e R. E. WHITE, An approach to fault diagnosis of chemical processes via neural networks, *AIChE journal*, v.39, n.1, p.82-88, 1993.
- FISCHER, W. e P. NAJM, South African furnace revamp improves ethylene yields, *Oil & Gas Journal*, v.96, n.31, p.56-61, 1998.
- FROMENT, G. F., B. O. van der STEERE, P. S. van DAMME, S. NARAYANANE A. G. GOOSSENS, *Ind. Eng. Chem. Process Des. Devel.*, **15**, 495, 1976. *apud* RAMAN, 1985.
- HAYKIN, S., *Neural networks*, Prentice-Hall Inc., 1994.
- HEBB, D. O., *The organization of behavior*, Wiley, 1949.
- HIMMELBLAU, D. M., *Fault detection and diagnosis in chemical and petrochemical processes*, Elsevier Scientific Publishing Co., 1978.
- HOSKINS, J. C. e D. M. HIMMELBLAU, *Artificial Intelligence in Process Engineering*, Academic Press Inc., 1990. Cap :Fault detection and diagnosis using artificial neural networks, p.
- HOSKINS, J. C., K. M. KALIYUR e D. M. HIMMELBLAU, Fault diagnosis in complex chemical plants using artificial neural networks, *AIChE Journal*, v.37, n.1, p.137-141, 1991.
- HUANG, S., S. J. QIAN e H. SHAO, Human-machine cooperative control for ethylene production, *Artificial Intelligence in Engineering*, v.9, n.3, p.203-209, 1995.
- ISMAIL, K. A. R., M. M. GONÇALVES e F. J. BENEVENUTO, *Instrumentação básica para engenharia*, ed. do autor, 1998.

- JOO, E., K. LEE, M. LEE e S. PARK, CRACKER - a PC based simulator for industrial cracking furnaces, *Computers and Chemical Engineering*, v.24, n.2-7, p.1523-1528, 2000.
- KINNEY, R. E. e D. J. CROWLEY, *Ind. And Eng. Chem.*, v.46, p. 258, fevereiro, 1954 apud ZDONIK, GREEN e HALLEE (1967d).
- KINNEY, C. R. e E. DELBEL, *Ind. Eng. Chem.*, v.46, p.548, 1954. apud CHAMBERS e POTTER, 1974.
- KLETZ, T. A., Some accidents that will take place in the coming year, *Meeting of the AIChE*, p.10-14, april, 1976 apud Himmelblau, 1976.
- KOZLOV, I. A. e I. L. NASHATYREV, Selection of operating conditions for pyrolysis furnaces in ethylene production, *Chemistry and Technology of Fuel and Oils*, v.24, n.5/6, p.204-206, 1989.
- LEGER, R. P., Wm. J. GARLAND e W. F. S. POEHLMAN, Fault detection and diagnosis using statistical control charts and artificial neural networks, *Artificial Intelligence in Engineering*, v.12, p.35-47, 1998.
- MCCULLOCH, W. S. e W. PITTS, A logical calculus of the ideas immanent in nervous activity, *Bulletin of Mathematical Biophysics*, 5, p.115-133, 1943.
- MEHROTRA, K., C. K. MOHAN e S. RANKA, *Elements of artificial neural networks*, MIT Press, 1997.
- MILLER, W. T., R. S. SUTTON e P. J. WERBOS, *Neural networks for control*, The MIT Press, 1990.
- MURPHY, D. B., R. W. CARROLL e J. E. KLONOWSKI, Analysis of products of high-temperature pyrolysis of various hydrocarbons, *Carbon*, v.35, n.12, p.1819-1823, 1997.

- MYLARASWAMY, D. e V. VENKATASUBRAMANIAN, A hybrid framework for large scale process fault diagnosis, *Computers and Chemical Engineering*, v.21 (suplemento), p.S935-S940, 1997.
- NIMMO, I., Adequately address abnormal operations, *Chemical Engineering Progress*, v.91, n.9, p.36-45, 1995.
- PICCIOTTI (a), M., Novel ethylene technologies developing, but steam cracking remains king, *Oil & Gas Journal*, v.95, n.25, p.53-58, 1997.
- PICCIOTTI (b), M., New ethylene routes are available but economics inhibit their use, *Oil & Gas journal*, v.95, n.26, p.71-74, 1997.
- POWERS, G. J. e F. C. TOMPKINS, Jr., Fault tree synthesis for chemical processes, *AIChE Journal*, v.20, n.2, p.376-387, 1974.
- RAMAN, R., *Chemical process computations*, elsevier Applied Science Publishers, 1985.
- RICH, S. H. e V. VENKATASUBRAMANIAN, Model-based reasoning in diagnostic expert systems for chemical process plants, *Computers and Chemical Engineering*, v.11, n.2, p.111-122, 1987.
- ROSENBLATT, F., *Principles of neurodynamics*, Spartan Books, 1961.
- RUMELHART, D. E. e J. L. MCCLELLAND, *Parallel distributed processing*, vol. 1, MIT Press, 1986.
- SELFRIDGE, O. G., Pandemonium: a paradigm for learning, *Proceeding of a symposium held at National Physics*

Laboratry, Londres, November, 1958, p.513-526.

SHIN, D. e V. VENKATASUBRAMANIAN, Intelligent tutoring system framework for operator training fod diagnostic problem solving, *Computers and Chemical Engineering*, v.20 (suplemento), p.S1365-S1370, 1996.

SHUM, S. K., J. F. DAVIS, W. F. PUNCH e B. CHANDRASEKARAN, An expert system approach to malfunction diagnosis in chemical plants, *Computers and Chemical Engineering*, v.12, n.1, p.27-36, 1988.

VALENYI, L. J., Y. SONG, J. C. FAGLEY, Carbon deposition in ethylene pyrolysis reators, *Ind. Eng. Chem. Res.*, p.1708-1712, 1991.

VENKATASUBAMANIAN, V., K. CHAN, A neural network methodology for process fault diagnosis, *AIChE Journal*, v.35, n.12, p.1993-2002, 1989.

VORA, N., S. S. TAMBE, B. D. KULKARNI, Counterpropagation neural networks for fault detection and diagnosis, *Computers and Chemical Engineering*, v.21, n.2, p.177-185, 1997.

WHITE, D. A. e D. A. SOFGE, *Handbook of intelligent control*, Multiscience Press. Inc., 1992.

WIDROW, B. e M. E. HOFF, Jr., *Adaptative switching circuits*, IRE Wescon Convection Record, pág. 96-104, 1960.

WOEBCKE, H. N., L. E. CHAMBERS e P. S. VIRK, The thermal synthesis and hydrogasification of aromatics compounds, *American Society National Meeting, Dallas (Texas)*, april, 1973. *apud* CHAMBERS e POTTER, 1974.

ZDONIK, S. B., E. J. GREEN e L. P. HALLEE, *Ethylene worldwide*, Oil & Gas Journal, v.64, n.48, p.62-66, 1966; v.64, n.49, p.108-114, 1966; v.64, n.51, p.75-80, 1966; v.65, n.1, p.40-47, 1967; v.65, n.26, p.96-101, 1967; v.65, n.28, p.192-196, 1967; v.65, n.30, p.86-88, 1967; v.65, n.34, p.86-89, 1967; v.66, n.11, p.99-107, 1968; v.66, n.15, p.71-77, 1968; v.66, n.22, p.103-108, 1968; v.67, n.19, p.220-222, 1969.

ZHAO, Y., M. L. LU e Y. YUAN, Operation and maintenance integration to improve safety, *Computers and Chemical Engineering*, v.24, p.401-407, 2000.

Anexo A

A.1 - Simulação do reator:

```

C-----
C
C      SIMULAÇÃO DO REATOR TUBULAR PARA CRAQUEAMENTO DO ETANO
C
C      D - DIÂMETRO INTERNO DO REATOR, M
C      L - COMPRIMENTO DO REATOR, M
C      P0 - PRESSÃO DE ENTRADA, KPA ABS.
C      T0 - TEMPERATURA DE ENTRADA, K
C      QF - FLUXO DE CALOR, KW/SQ.M
C      FEED - FLUXO MÁSSICO DE ALIMENTAÇÃO, KG/S
C      RATIO - RAZÃO DE DILUIÇÃO VAPOR/ENTANO, (KG/KG)
C      V(I) - MOLES DOS COMPONENTES I, I=1 TO N-1
C      V(N) - TEMPERATURA NO REATOR, K
C      Y - VETOR DE FRAÇÕES MOLARES
C      VISC - VISCOSIDADE = VISCA*EXP(VISCB/T)
C      MWT - VETOR DOS PESOS MOLECULARES
C      P - PRESSÃO NO REATOR, KPA ABS.
C      Z - COORDENADA AXIAL, M
C      XA - CONVERSÃO
C      S - ÁREA DE SEÇÃO TRANSVERSAL, SQ.M
C      TDEGC - TEMPERATURA, GRAUS CELSIUS
C      ALFA - MATRIZ DE REAÇÃO
C      STEAM - TOTAL DE MOLES DE VAPOR NA ALIMENTAÇÃO
C      YW(I,J) - FRAÇÃO MÁSSICA DO COMPONENTE I NA POSIÇÃO
C      AXIAL J
C      N - NO. DE EQUAÇÕES A SEREM INTEGRADAS
C-----
C
C      EXTERNAL CRACK
C      REAL L,MWT
C      DIMENSION Z(51),P(51),XA(51),TDEGC(51),Y(9),V(9),
C      $          VISC(9),YW(8,51)
C      COMMON /RM/ ALFA(8,5)
C      COMMON /MOLWT/ MWT(9)
C      COMMON /VISC/ VISCA(9),VISCB(9)
C      COMMON /SYSTEM/ D,S,PRES,STEAM,QF
C      DATA R /8.3143/
C
C      ... LEITURA DAS DIMENSÕES DO REATOR ...
C      READ (5,200) D,L
C
C      ... LEITURA DOS DADOS DO PROCESSO ...
C      READ (5,200) P0,T0,QF,FEED,RATIO
C      WRITE (6,201) D,L,P0,T0,QF,FEED,RATIO
C
C      ... LEITURA DOS ELEMENTOS DA MATRIZ DE REAÇÃO ...
C      READ (5,200) ((ALFA(I,J),J=1,5),I=1,8)
C
C      ... LEITURA DA COMPOSIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO (FRAÇÕES
C      MOLARES) ...
C      READ (5,200) (Y(I),I=1,8)
C
C      ... CONVERSÃO DA COMPOSIÇÃO DE ALIMENTAÇÃO PARA
C      FRAÇÕES MÁSSICAS ...
C      SUM = 0
C      DO 10 I=1, 8
10      SUM = SUM + Y(I)*MWT(I)
C      DO 20 I=1, 8
20      YW(I,1) = Y(I)*MWT(I)/SUM
C
C      ... DEFINIR MOLES INICIAIS DE COMPONENTES NA
C      ALIMENTAÇÃO ...
C      S = 3.1416 * D**2/4
C      G = FEED/S
C      DO 30 I=1, 8

```

```

30      V(I) = FEED*YW(I,1)/MWT(I)
        VC2H6 = V(5)
        STEAM = FEED*RATIO/MWT(9)
        NSTEP = 50
        NSTEP1 = NSTEP+1
        DZ = L/FLOAT(NSTEP)
        Z(1) = 0
        DO 40 J=1, NSTEP
40      Z(J+1) = FLOAT(J)*DZ
        N = 9
C
C      ... INÍCIO DA INTEGRAÇÃO RUNGE-KUTTA-GILL ...
        XA(1) = 0
        V(N) = T0
        P(1) = P0
        TDEGC(1) = T0-273.
        DO 90 J=1, NSTEP
        JP1 = J+1
        PRES = P(J)
        CALL RKG(V,Z(J),DZ,N,CRACK)
        TDEGC(JP1) = V(N)-273.
C
C      ... CALCULAR CONVERSÃO DE ETANO ...
        XA(JP1) = 1-V(5)/VC2H6
C
C      ... CALCULAR FRAÇÕES MOLARES DOS COMPONENTES ...
        TOTMOL = STEAM
        DO 50 I=1, 8
50      TOTMOL = TOTMOL+V(I)
        DO 60 I=1, 8
60      Y(I) = V(I)/TOTMOL
        Y(9) = STEAM/TOTMOL
C
C      ... CALCULAR VISCOSIDADE DOS COMPONENTES A TEMP. T ...
        DO 70 I=1, 9
70      VISC(I) = VISCA(I) * EXP(VISCB(I)/V(N))
C
C      ... CALCULAR VELOCIDADE AND DENSIDADE ...
        TOTVOL = TOTMOL*R*V(N)/PRES
        VEL = TOTVOL/S
        RHO = G*S*(1+RATIO)/TOTVOL
C
C      ... CALCULAR QUEDA DE PRESSÃO PARA O INTERVALO ...
        DELP = PRDROP(D,VEL,RHO,VISMIX(VISC,MWT,Y,9),1.E-4,DZ,FF)
        P(JP1) = P(J) - DELP*1.E-3
C
C      ... CALCULAR DISTRIBUIÇÃO DE PRODUTOS (KG/KG)- BASE SECA ...
        DO 80 I=1, 8
80      YW(I,JP1) = V(I)*MWT(I)/FEED
90      CONTINUE
C
C      ... IMPRIMIR PERFIS DE CONVERSÃO, TEMP. E PRESSÃO ...
        WRITE (6,202)
        WRITE (6,203) (Z(J),XA(J),TDEGC(J),P(J),J=1,NSTEP1)
C
C      ... IMPRIMIR PERFIS DE DISTRIBUIÇÃO DE PRODUTOS ...
        WRITE (6,204)
        DO 100 J=1, NSTEP1
100     WRITE (6,205) Z(J),(YW(I,J), I=1, 8)
        STOP
200     FORMAT (8F10.0)
201     FORMAT (/20X,'SIMULAÇÃO DE REATOR DE CRAQUEAMENTO
1      DE ETANO'/1H0,'DIA. REATOR=',F7.4, ' M.'/'
2      COMPRIMENTO REATOR=',F7.2,' M.'/' PRES. ENTRADA='
3      ,F6.2,' KPA,ABS.'/' TEMP. ENTRADA=',F6.2,' KELVIN'/'
4      FLUXO DE CALOR=',F6.2,' KW/SQ.M'/1H0,'FLUXO MÁSSICO DE
5      ALIMENTAÇÃO=',F6.2,' KG/(SQ.M) (S)'/' RAZÃO DE DILUIÇÃO

```

```

6 VAPOR/ETANO=' ,F5.2,' KG/KG'//)
202 FORMAT (/T6,'Z,METROS',T20,'CONVERSÃO,%',T37,
$ 'T,GRAUS .C',T51,'P,KPA ABS.'//)
203 FORMAT (4E15.4)
204 FORMAT (/20X,'COMPOSIÇÃO DE PRODUTOS(KG/KG)'//
1 T9,'Z',T20,'H2',T34,'CH4',T46,'C2H2',T59,'C2H4',
2 T72,'C2H6',T85,'C3H6',T98,'C3H8',T111,'C4H6'//)
205 FORMAT (9E13.3)
END

C
C
C BLOCK DATA
C-----
C
C MWT - VETOR DE PESOS MOLECULARES
C DELHR - VETOR CALORES DE REAÇÃO
C A - VETOR DE FATORES DE FREQUENCIA
C E - VETOR DE ENERGIAS DE ATIVAÇÃO
C CPCOE - COEFICIENTES NA EQUAÇÃO CAPACIDADE TÉRMICA-
C TEMPERATURA
C VISCA,VISCB - COEFICIENTES NA EQUAÇÃO VISCOSIDADE-
C TEMPERATURA
C-----
C
C REAL MWT
C COMMON /MOLWT/ MWT(9)
C COMMON /RATEK/ A(5),E(5)
C COMMON /HEAT/ DELHR(5),CPCOE(3,9)
C COMMON /VISC/ VISCA(9),VISCB(9)
C
C DATA MWT /2.016,16.032,26.016,28.032,30.048,42.048,
$ 44.064,54.048,18.0/
C
C DATA A /4.652E13,3.85E11,9.81E8,1.026E12,7.083E13/
C
C DATA E /2.7302E5,2.7319E5,1.5458E5,1.7275E5,2.5301E5/
C
C DATA DELHR /1.4453E5,-7.285E3,1.3331E5,-9.814E4,2.181E4/
C
C DATA CPCOE /27.143,.00927,-1.381E-5,19.251,.05213,1.197E-5,
1 26.821,.07578,-5.007E-5,3.806,.15659,-8.349E-5,5.409, 2
.17811,-6.938E-5,3.71,.23454,-11.602E-5,-4.225,.30626,
3 -15.864E-5,12.548,.27436,-15.449E-5,32.243,.00192,
4 1.056E-5 /
C
C DATA VISCA /4.23E-5,6.16E-5,6.33E-5,5.9E-5,5.82E-5,5.26E-5,
1 5.27E-5,6.23E-5,1.005E-4/, VISCB /-729.3,-755.1,
2 -820.9,-754.7,-792.2,-802.2,-788.7,-924.5,-1022.5/
C
C END
C
C
C SUBROUTINE RKG(Y,X,H,N,FUNCT)
C-----
C
C ESTE SUBPROGRAMA INTEGRA UM SISTEMA DE N EQUAÇÕES DE
C PRIMEIRA ORDEM PELO MÉTODO DE RUNGE-KUTTA-GILL
C Y - VETOR DE VARIÁVEIS DEPENDENTES
C X - VARIÁVEL INDEPENDENTE
C H - PASSO DA INTEGRAÇÃO
C N - NÚMERO DE EQUAÇÕES A SEREM INTEGRADAS
C FUNCT - NOME DA SUBROTINA QUE CALCULA OS INTEGRANDOS
C F - VETOR DE INTEGRANDOS
C-----

```

```

C      REAL K(4,20)
C      DIMENSION Y(N),F(20),Q(4,20),C1(3),C2(3),C3(3),C4(4)
C      DATA C1 /1.0,0.585786,3.414214/, C2 /0.0,0.1213203,
$ -4.1213203/, C3 /0.5,0.2928932,1.7071068/, C4
$ /0.,.5,.5,1./
C      DO 10 I=1, N
10     Q(1,I) = 0
C      DO 20 J=1, 4
C
C      ...  CALCULAR INTEGRANDOS ...
C      CALL FUNCT(F,Y,X+C4(J)*H,N)
C      DO 30 I=1, N
30     K(I,J) = H*F(I)
C      IF (J .EQ. 4) GO TO 50
C      DO 40 I=1, N
C      Q(J+1,I) = C1(J)*K(J,I)+C2(J)*Q(J,I)
40     Y(I) = Y(I)+C3(J)*(K(J,I)-Q(J,I))
20     CONTINUE
50     DO 60 I=1, N
60     Y(I) = Y(I)+K(4,I)/6.-Q(4,I)/3.
C      RETURN
C      END
C
C      SUBROUTINE CRACK(F,V,Z,N)
C
C-----
C
C      ESTE SUBPROGRAMA CALCULA INTEGRANDOS DO
C      SISTEMA DE EQUAÇÕES
C      K - VETOR DE CONSTANTES DE TAXA
C      RATE - VETOR DE TAXA DE REAÇÃO
C      R - CONSTANTE DOS GASES, KJ/(KMOL) (K)
C-----
C
C      REAL K(5)
C      DIMENSION F(N),V(N),RATE(5)
C      COMMON /RATEX/ A(5),E(5)
C      COMMON /HEAT/ DELHR(5),CPCOEF(3,9)
C      COMMON /RM/ ALFA(8,5)
C      COMMON /SYSTEM/ D,S,P,STEAM,QF
C      DATA R /8.3143/
C
C      ...  COMPUTA CONSTANTES DE TAXA ...
C      T = V(N)
C      DO 10 J=1, 5
10     K(J) = A(J)*EXP(-E(J)/(R*T))
C      NM1 = N-1
C      TOTMOL = 0
C      DO 20 I=1, NM1
20     TOTMOL = TOTMOL + V(I)
C      TERM = P/(R*T*TOTMOL)
C
C      ...  CALCULAR TAXAS DE REAÇÃO ...
C      RATE(1) = K(1)*V(5)*TERM
C      RATE(2) = K(2)*V(5)*TERM
C      RATE(3) = K(3)*V(6)*TERM
C      RATE(4) = K(4)*V(3)*V(4)*TERM**2
C      RATE(5) = K(5)*V(5)*V(5)*TERM**2
C
C      ...  CALCULAR INTEGRANDOS DAS EQUAÇÕES DE BALANÇO DE
C      MASSA ...
C      DO 30 I=1, NM1
C      F(I) = 0
C      DO 40 J=1, 5
40     F(I) = F(I) + ALFA(I,J)*RATE(J)
30     F(I) = F(I)*S

```

```

C ... CALCULAR CAPACIDADE TÉRMICA TOTAL ...
C CPSUM = STEAM*(CPCOE(1,9)+T*(CPCOE(2,9)+T*CPCOE(3,9)))
C DO 50 I=1, NM1
C CP = CPCOE(1,I)+T*(CPCOE(2,I)+T*CPCOE(3,I))
50 CPSUM = CPSUM + V(I)*CP
C
C ... INTEGRANDOS PARA A EQUAÇÃO DE BALANÇO DE ENERGIA ...
C SUM = 0
C DO 60 J=1, 5
60 SUM = SUM+RATE(J)*DELHR(J)
C F(N) = (-SUM*S+QF*3.1416*D)/CPSUM
C RETURN
C END
C
C
C
C
C FUNCTION VISMIX (VISC,MWT,Y,NC)
C
C -----
C
C ESTE SUBPROGRAMA CALCULA VISCOSIDADE DA MISTURA GASOSA
C USANDO A EQUAÇÃO DE WILKE
C NC - NÚMERO DE COMPONENTES
C MWT - VETOR DOS PESOS MOLECULARES
C Y - VETOR DE FRAÇÕES MOLARES
C VISMIX - VISCOSIDADE DA MISTURA GASOSA
C
C -----
C
C REAL MWT
C DIMENSION VISC(NC),MWT(NC),Y(NC)
C VISMIX = 0
C DO 10 I= 1,NC
C SUM = 0
C DO 20 J= 1,NC
C PHI = (1+SQRT(VISC(I)/VISC(J)))*(MWT(J)/MWT(I))**0.25)**2
$ / SQRT(8.*(1+MWT(I)/MWT(J)))
20 SUM= SUM+Y(J)*PHI
10 VISMIX=VISMIX+VISC(I)*Y(I)/SUM
C RETURN
C END
C
C
C
C FUNCTION PRDROP(D,U,RHO,VISC,EPS,L,FF)
C
C -----
C
C ESTE SUBPROGRAMA CALCULA QUEDA DE PRESSÃO NO
C ESCOAMENTO DE UM FLUIDO NEWTONIANO
C PRDROP - QUEDA DE PRESSÃO, PA
C V - VELOCIDADE SUPERFICIAL,M/S
C RHO - DENSIDADE, KG/CU.M
C D - DIAMETRO INTERNO DO TUBO, M
C L - COMPRIMENTO DO TUBO, M
C EPS - RUGOSIDADE DO TUBO, M
C RE - NÚMERO DE REYNOLDS
C FF - FATOR DE FRICÇÃO DE FANNING
C
C -----
C
C REAL L
C RE = D*U*RHO/VISC
C IF (RE .GT. 2100.) GO TO 10
C FF = 16./RE

```

```

10      GO TO 30
      RF = EPS/D
      IF ( RE .GT. 4000.) GO TO 20
      T1 = RF/3.7
      T2 = 5.02/RE
      TERM = ALOG10(T1-T2*ALOG10(T1+13./RE))
      FF = 1./(4.*ALOG10(T1)+T2*TERM)**2
      GO TO 30
20      FF = 1./(3.6*ALOG10(RE/(0.135*(RE*RF+6.5))))**2
30      PRDROP = 2.*FF*RHO*U**2*L/D
      RETURN
      END

```

A.2 - Iniciação dos ganhos sinápticos:

/*
O programa cria um arquivo de dados chamado "pesos_iniciais.dat", contendo valores aleatórios entre -1,0 e +1,0 no formato das matrizes w1(5, 12), w2(13,12), w3(13,8), onde:

w1 - pesos das conexoes entre os nodulos de entrada e a primeira camada oculta;
w2 - pesos das conexoes entre a primeira e a segunda camada oculta;
w3 - pesos das conexoes entre a segunda camada oculta e a camada de saída.

A Arquitetura da rede neural usada neste caso é 4-12-12-8. As matrizes possuem uma linha a mais por causa do parâmetro limiar.
*/

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>
#include <math.h>

```

```

#define NOD_ENTRADA 4
#define NOD_OCULTA_1 12
#define NOD_OCULTA_2 12
#define NOD_SAIDA 8

```

```
FILE *fp;
```

```
main (void)
```

```
{
    void iniciar_pesos(char st[5], int n_linhas, int n_colunas);
```

```
    long int ltime;
    unsigned int stime;
```

/*
É usada uma semente randômica, associada ao horário do sistema, para que a função rand() gere valores aleatórios diferentes a cada vez que o programa for executado.
*/

```

    if( (ltime = time(NULL)) == -1) {
        unsigned int semente;
        printf("ERRO:\nNao foi possivel usar o horario do sistema
como\nsemente randomica. Alterar argumento de srand()\n");
        printf("\nEntrar com nova semente (numero inteiro positivo): ");
        scanf("%u", &semente);
        printf("\n");
        srand(semente);
    }

```

```

else {
    stime = (unsigned int)ltime/2;
    srand(stime);
}

if(!(fp = fopen("pesos_iniciais.dat","w"))) {
    printf("ERRO:\nO arquivo pesos_iniciais.dat nao pode ser aberto.");
    exit(1);
}
/*
    Impressão dos dados no arquivo.
*/

iniciar_pesos("W1", NOD_ENTRADA + 1, NOD_OCULTA_1);
iniciar_pesos("W2", NOD_OCULTA_1 + 1, NOD_OCULTA_2);
iniciar_pesos("W3", NOD_OCULTA_2 + 1, NOD_SAIDA);
fclose(fp);
}

void iniciar_pesos(char st[5], int n_linhas, int n_colunas)
{
    float aleat();
    int i, j;

    fprintf(fp,"%s\n", st);
    for(i = 0 ; i < n_linhas ; i++) {
        for(j = 0 ; j < n_colunas ; j++)
            fprintf(fp,"%9lf\t",aleat());
        fprintf(fp,"\n");
    }
    fprintf(fp,"\n\n");
}

float aleat(void)
{
    float res;

    res = (float)((int)(pow(-1.0, rand()%2))*rand()/2147483647.0);

    return(res);
}

```

A.3 - O conjunto de treinamento:

```

/*
    Este programa cria um arquivo chamado "exemplos.dat", contendo os
    dados numéricos para treinamento da rede neural. O formato é o de uma
    matriz com uma grande número de linhas e cinco colunas, onde as quatro
    primeiras são ocupadas por valores de temperatura, razão mássica
    (vapor/etano), pressão e vazão mássica de alimentação. A quinta coluna
    contém um número que representa uma condição operacional entre as
    seguintes:

```

- Temperatura alta.
- Temperatura baixa.
- Razao (vapor/etano) alta.
- Razao (vapor/etano) baixa.
- Pressao alta.
- Pressao baixa.
- Vazao de alimentacao alta.
- Vazao de alimentacao baixa.
- Operacao normal.

```

    Primeiramente, são definidos os valores de falha, normalidade e nível
    de ruído para as quatros variáveis.
*/

```

```

#include <stdio.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>

#define TEMP_NORMAL 967.00
#define TEMP_FAL_SUP 1004.71
#define TEMP_FAL_INF 929.29
#define TEMP_RUIDO 8.70

#define RAZAO_NORMAL 0.4000
#define RAZAO_FAL_SUP 0.4312
#define RAZAO_FAL_INF 0.3688
#define RAZAO_RUIDO 0.0072

#define PRES_NORMAL 244.00
#define PRES_FAL_SUP 263.03
#define PRES_FAL_INF 224.97
#define PRES_RUIDO 4.39

#define VAZAO_NORMAL 0.5300
#define VAZAO_FAL_SUP 0.5713
#define VAZAO_FAL_INF 0.4887
#define VAZAO_RUIDO 0.0095

int main(void)
{
    float aleat(void);

    int num_exemplo, i, total;
    float tmp[5], indice;
    long int ltime;
    unsigned int stime;

    FILE *fp_exemp;

    /*
        É usada uma semente randômica, associada ao horário do sistema, para
        que a função rand() gere valores aleatórios diferentes a cada vez que o
        programa for executado.
    */

    if( (ltime = time(NULL)) == -1) {
        unsigned int semente;
        printf("ERRO:\nNao foi possivel usar o horario do sistema
        como\nsemente randomica. Alterar argumento de srand()\n");
        printf("\nEntrar com nova semente (numero inteiro positivo): ");
        scanf("%u", &semente);
        printf("\n");
        srand(semente);
    }
    else {
        stime = (unsigned int)ltime/2;
        srand(stime);
    }

    printf("Entre com o total de exemplos: ");
    scanf("%d", &total);
    printf("\n");

    if(!(fp_exemp = fopen("exemplos.dat","w"))) {
        printf("ERRO:\nO arquivo exemplos.dat nao pode ser aberto.");
        exit(1);
    }

    /*
        Em cada linha da matriz, as variáveis são iniciadas com os valores

```

normais. Os valores de operação com falha são substituídos pelo comando switch segundo uma ordem pre-estabelecida.

```

*/
for(num_exemplo = 1 ; num_exemplo <= total ; num_exemplo++) {
    tmp[0] = TEMP_NORMAL + TEMP_RUIDO*aleat();
    tmp[1] = RAZAO_NORMAL + RAZAO_RUIDO*aleat();
    tmp[2] = PRES_NORMAL + PRES_RUIDO*aleat();
    tmp[3] = VAZAO_NORMAL + VAZAO_RUIDO*aleat();
    indice = -10.0; /* Este indice indicara operacao normal, deve ser
negativo para diferenciar-se dos demais */

    switch((num_exemplo + 8) % 9) {
    case 0 : tmp[0] = TEMP_FAL_SUP + TEMP_RUIDO*aleat();
            indice = 0.5;
            break;
    case 1 : tmp[0] = TEMP_FAL_INF + TEMP_RUIDO*aleat();
            indice = 1.5;
            break;
    case 2 : tmp[1] = RAZAO_FAL_SUP + RAZAO_RUIDO*aleat();
            indice = 2.5;
            break;
    case 3 : tmp[1] = RAZAO_FAL_INF + RAZAO_RUIDO*aleat();
            indice = 3.5;
            break;
    case 4 : tmp[2] = PRES_FAL_SUP + PRES_RUIDO*aleat();
            indice = 4.5;
            break;
    case 5 : tmp[2] = PRES_FAL_INF + PRES_RUIDO*aleat();
            indice = 5.5;
            break;
    case 6 : tmp[3] = VAZAO_FAL_SUP + VAZAO_RUIDO*aleat();
            indice = 6.5;
            break;
    case 7 : tmp[3] = VAZAO_FAL_INF + VAZAO_RUIDO*aleat();
            indice = 7.5;
            break;
    }

    /*
    Impressao de dados no arquivo.
    */
    for(i = 0 ; i < 4 ; i++)
        fprintf(fp_exemp, "%f\t", tmp[i]);
    fprintf(fp_exemp, "%f\n", indice);
    }
    fclose(fp_exemp);
    return 0;
}

float aleat(void)
{
    float res;

    res = (float)((int)(pow(-1.0, (float)rand()))*rand()/2147483647.0);

    return(res);
}

```

A.4 - Aprendizado da rede neural:

```

/*
    Este programa destina-se ao aprendizado da rede neural. Através do
    processamento dos exemplos de treinamento, os ganhos sinápticos são
    ajustados no sentido de reduzir a diferença entre a resposta calculada
    pela rede e a resposta desejada. O resultado, ou seja, o conjunto de

```

valores finais dos parâmetros ajustáveis é salvo no arquivo "pesos_finais.dat".

As principais variáveis usadas no programa são:

x - vetor dos sinais de entrada;
h1 - vetor dos sinais de saída da primeira camada oculta;
y - vetor dos sinais de saída calculados pela rede;
d - vetor dos sinais de saída desejados;
w1 - matriz de ganhos sinápticos entre a camada de entrada e a primeira camada oculta;
delta_w1 - termo de ajuste de w1;
delta_w1_ant - termo de ajuste de w1 na iteração anterior;
soma_h1 - nível de ativação para os nódulos da primeira camada oculta;
soma_y - nível de ativação para os nódulos da camada de saída;
e - vetor dos sinais de erro;
alfa - termo de momentum;
eta - taxa de aprendizagem;
ind_saida - indica qual o nódulo de saída deve apontar uma falha.

```

*/
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>

#define IT_MAX      6000
#define NOD_ENTRADA  4
#define NOD_OCULTA_1 12
#define NOD_OCULTA_2 12
#define NOD_SAIDA    8
#define NORMAL      -0.8
#define FALHA        0.8

#define FUNC_TRANSF(x) ((2.0*(1.0/(1.0 + exp(-x)))) - 1.0)
#define DER_FUNC_TRANSF(x) (0.5*(FUNC_TRANSF(x) + 1.0)*(1.0 -\
FUNC_TRANSF(x)))

FILE *fp_exemplos, *fp_salvar_pesos;

int main(void)
{
    void embaralhar_exemplos(int n_exemplos);
    void salvar_pesos(float *matriz_w1, float *matriz_w2, float
*matriz_w3);
    float somatorio(float *entrada, float *pesos, int num_nodulos, int\
comp_linha, int indice);
    float norma, x[NOD_ENTRADA + 1], h1[NOD_OCULTA_1 + 1], h2[NOD_OCULTA_2 +
\ 1], y[NOD_SAIDA], d[NOD_SAIDA];
    float w1[NOD_ENTRADA + 1][NOD_OCULTA_1], w2[NOD_OCULTA_1 + 1] \
[NOD_OCULTA_2], w3[NOD_OCULTA_2 + 1][NOD_SAIDA];
    float delta_w1[NOD_ENTRADA + 1][NOD_OCULTA_1], delta_w2[NOD_OCULTA_1 +
1]\ [NOD_OCULTA_2], delta_w3[NOD_OCULTA_2 + 1][NOD_SAIDA];
    float delta_w1_ant[NOD_ENTRADA + 1][NOD_OCULTA_1],\
delta_w2_ant[NOD_OCULTA_1 + 1][NOD_OCULTA_2], delta_w3_ant[NOD_OCULTA_2 +\
1] [NOD_SAIDA];
    float soma_h1[NOD_OCULTA_1], soma_h2[NOD_OCULTA_2], soma_y[NOD_SAIDA],\
e[NOD_SAIDA];
    float alfa, eta, soma_erro, ind_saida, erro, erro_medio;
    float grad_local3[NOD_SAIDA], grad_local2[NOD_OCULTA_2],\
grad_local1[NOD_OCULTA_1];
    int i, j, k, l, num_exemplos, num_apres;
    char nome_matriz_pesos[5];

    FILE *fp_pesos;

    if(!(fp_pesos = fopen("pesos_iniciais.dat", "r"))) {
        printf("ERRO:\nno arquivo pesos_iniciais.dat nao pode ser aberto.");
        exit(1);
    }
}

```

```

x[NOD_ENTRADA]    = -1.0;
h1[NOD_OCULTA_1]  = -1.0;
h2[NOD_OCULTA_2]  = -1.0;

/*
  Leitura dos valores iniciais dos ganhos sinápticos.
*/

fscanf(fp_pesos,"%s", nome_matriz_pesos);
for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
  for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++)
    fscanf(fp_pesos, "%f", &w1[i][j]);

fscanf(fp_pesos,"%s", nome_matriz_pesos);
for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
  for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
    fscanf(fp_pesos, "%f", &w2[j][k]);

fscanf(fp_pesos,"%s", nome_matriz_pesos);
for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
  for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
    fscanf(fp_pesos, "%f", &w3[k][l]);

fclose(fp_pesos);

for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
  for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++)
    delta_w1[i][j] = 0.0;

for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
  for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
    delta_w2[j][k] = 0.0;

for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
  for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
    delta_w3[k][l] = 0.0;

printf("\n ENTRADA DE DADOS:\n");
printf("\tEntre com a taxa de aprendizagem: ");
scanf("%f", &eta);
printf("\n");
printf("\tEntre com o momentum: ");
scanf("%f", &alfa);

for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
  d[l] = NORMAL;

if(!(fp_exemplos = fopen("exemplos.dat","r+"))) {
  printf("ERRO:\nO arquivo exemplos.dat nao pode ser aberto.");
  exit(1);
}

/*
  Início do loop mais abrangente, cujo objetivo e obter um erro medio
  menor que uma certa tolerancia
*/

num_apres = 1;

do {
  soma_erro = 0.0;
  num_exemplos = 0;
/*
  Início do loop que processara os pares de exemplos fornecidos.
*/

```

```

while((fscanf(fp_exemplos,"%f%f%f%f", &x[0], &x[1], &x[2], &x[3]))
!=\ EOF) {
    fscanf(fp_exemplos, "%f", &ind_saida);
    if((int)ind_saida >= 0)
        d[(int)ind_saida] = FALHA;

    norma = sqrt(x[0]*x[0] + x[1]*x[1] + x[2]*x[2] + x[3]*x[3]);
    x[0] = x[0]/norma;
    x[2] = x[2]/norma;

    for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++) {
        soma_h1[j] = somatorio(x, w1, NOD_ENTRADA, NOD_OCULTA_1, j);
        h1[j] = FUNC_TRANSF(soma_h1[j]);
    }

    for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++) {
        soma_h2[k] = somatorio(h1, w2, NOD_OCULTA_1, NOD_OCULTA_2, k);
        h2[k] = FUNC_TRANSF(soma_h2[k]);
    }

    for(erro = 0.0, l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++) {
        soma_y[l] = somatorio(h2, w3, NOD_OCULTA_2, NOD_SAIDA, l);
        y[l] = FUNC_TRANSF(soma_y[l]);
        e[l] = d[l] - y[l];
        erro += 0.5*e[l]*e[l];
    }

    soma_erro += erro;

    for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
        for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++)
            delta_w1_ant[i][j] = delta_w1[i][j];

    for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
        for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
            delta_w2_ant[j][k] = delta_w2[j][k];

    for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
        for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
            delta_w3_ant[k][l] = delta_w3[k][l];

    /*
    Cálculo dos termos de ajuste.
    */

    for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++) {
        grad_local3[l] = e[l]*DER_FUNC_TRANSF(soma_y[l]);
        for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
            delta_w3[k][l] = eta*grad_local3[l]*h2[k] + \
        alfa*delta_w3_ant[k][l];
    }

    for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++) {
        float soma_grad_local = 0.0;

        for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
            soma_grad_local += grad_local3[l]*w3[k][l];
        grad_local2[k] = soma_grad_local*DER_FUNC_TRANSF(soma_h2[k]);
        for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
            delta_w2[j][k] = eta*grad_local2[k]*h1[j] + \
        alfa*delta_w2_ant[j][k];
    }

    for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++) {
        float soma_grad_local = 0.0;

```

```

        for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
            soma_grad_local += grad_local2[k]*w2[j][k];
        grad_local1[j] = soma_grad_local*DER_FUNC_TRANSF(soma_h1[j]);
        for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
            delta_w1[i][j] = eta*grad_local1[j]*x[i] + \
alfa*delta_w1_ant[i][j];
    }

/*
   Atualização dos parâmetros ajustáveis.
*/

    for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
        for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++)
            w1[i][j] += delta_w1[i][j];

    for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
        for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
            w2[j][k] += delta_w2[j][k];

    for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
        for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
            w3[k][l] += delta_w3[k][l];

    num_exemplos++;
    if((int)ind_saida >= 0)
        d[(int)ind_saida] = NORMAL;
}

/*
   Fim do loop que processa os pares de exemplos.
*/

    erro_medio = soma_erro/((float)num_exemplos);
    printf("\n Apresentacao Num. %04d -> Erro medio = %f\n", num_apres,
erro_medio);
    num_apres++;

    embaralhar_exemplos(num_exemplos);
    rewind(fp_exemplos);

    if(num_apres > IT_MAX) {
        printf("\nERRO:\nO numero de iteracoes atingiu o limite maximo
(%d).\n", IT_MAX);
        salvar_pesos(w1, w2, w3);
        exit(1);
    }

    } while(erro_medio > 0.05);

/*
   Fim do loop mais abrangente.
*/

    fclose(fp_exemplos);
    printf("\n\n Convergencia bem sucedida!!!\n Erro medio = %f\n\n", \
erro_medio);

    salvar_pesos(w1, w2, w3);
    return 0;
}

float somatorio(float *entrada, float *pesos, int num_nodulos, int \
comp_linha, int indice) {
    float somat;
    int cont;

```

```

    somat = 0.0;
    for(cont = 0 ; cont < (num_nodulos + 1) ; cont++)
        somat += *(entrada + cont) * *(pesos + cont*comp_linha + indice);
    return (somat);
}

void embaralhar_exemplos(int n_exemplos)
{
    void shellsort(float a[][NOD_ENTRADA + 2], const int lin, const int col);

    float *matriz_exemplos;
    long int ltime;
    unsigned int stime;
    int p, q;

    if( (ltime = time(NULL)) == -1) {
        unsigned int semente;
        printf("ERRO:\nNao foi possivel usar o horario do sistema como \
\nsemente randomica. Alterar argumento de srand().\n");
        printf("\nEntrar com nova semente (numero inteiro positivo): ");
        scanf("%u", &semente);
        printf("\n");
        srand(semente);
    }
    else {
        stime = ltime/2;
        srand(stime);
    }
    if(!(matriz_exemplos = malloc((NOD_ENTRADA + 2)*(n_exemplos + \
10)*sizeof(float)))) {
        printf("\nERRO:\nFalha na alocao dinamica de memoria\n");
        exit(1);
    }
    rewind(fp_exemplos);

    for(p = 0 ; p < n_exemplos ; p++) {
        for(q = 0 ; q < (NOD_ENTRADA + 1) ; q++)
            fscanf(fp_exemplos, "%f", (matriz_exemplos + q + p*(NOD_ENTRADA + \
2)));
        *(matriz_exemplos + NOD_ENTRADA + 1 + p*(NOD_ENTRADA + 2)) = \
(float)rand()/2147483647.0;
    }

    shellsort(matriz_exemplos, n_exemplos, (NOD_ENTRADA + 2));
    rewind(fp_exemplos);
    for(p = 0 ; p < n_exemplos ; p++) {
        for(q = 0 ; q < (NOD_ENTRADA + 1) ; q++)
            fprintf(fp_exemplos, "%f\t", *(matriz_exemplos + q + p*(NOD_ENTRADA \
+ 2)));
        fprintf(fp_exemplos, "\n");
    }
    free(matriz_exemplos);
}

void salvar_pesos(float *matriz_w1, float *matriz_w2, float *matriz_w3)
{
    void escrever_pesos(char st[5], float *w, int n_linhas, int n_colunas);

    if(!(fp_salvar_pesos = fopen("pesos_finaisd.dat", "w"))) {
        printf("ERRO:\nO arquivo pesos_finaisd.dat nao pode ser aberto.");
        exit(1);
    }
    escrever_pesos("W1", matriz_w1, NOD_ENTRADA + 1, NOD_OCULTA_1);
    escrever_pesos("W2", matriz_w2, NOD_OCULTA_1 + 1, NOD_OCULTA_2);
    escrever_pesos("W3", matriz_w3, NOD_OCULTA_2 + 1, NOD_SAIDA);
    fclose(fp_salvar_pesos);
}

```

```

}

void escrever_pesos(char st[5], float *w, int n_linhas, int n_colunas)
{
    int i, j;

    fprintf(fp_salvar_pesos, "%s\n", st);
    for(i = 0 ; i < n_linhas ; i++) {
        for(j = 0 ; j < n_colunas ; j++)
            fprintf(fp_salvar_pesos, "%f\t", *(w + j + i*n_colunas));
        fprintf(fp_salvar_pesos, "\n");
    }
    fprintf(fp_salvar_pesos, "\n\n");
}

void shellsort(float a[][NOD_ENTRADA + 2], const int lin, const int col)
{
    unsigned int gap;
    float tmp[col];
    unsigned int i, j, k;

    for(gap = lin/2 ; gap > 0 ; gap = gap == 2 ? 1 : gap / 2.2)
        for(i = gap ; i < lin ; i++) {

            for(k = 0 ; k < col ; k++)
                tmp[k] = a[i][k];

            for(j = i ; j >= gap && tmp[col - 1] < a[j - gap][col - 1] ; j -=
\ gap)

                for(k = 0 ; k < col ; k++)
                    a[j][k] = a[j - gap][k];

                for(k = 0 ; k < col ; k++)
                    a[j][k] = tmp[k];
        }
}

```

A.5 - Medida de desempenho da rede neural:

```

/*
    Este programa analisa o desempenho de classificação correta de um
    conjunto de parâmetros ajustáveis, obtidos pelo treinamento. Para cada
    exemplo processado, é verificado se a resposta calculada pela rede se
    aproxima das respostas desejadas.
*/

```

```

#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <stdlib.h>
#include <time.h>

#define NOD_ENTRADA    4
#define NOD_OCULTA_1   12
#define NOD_OCULTA_2   12
#define NOD_SAIDA       8
#define NORMAL         -0.8
#define FALHA           0.8
#define TOLERANCIA      0.2001

#define FUNC_TRANSF(x) ((2.0*(1.0/(1.0 + exp(-x)))) - 1.0)

FILE *fp_exemplos;

int main(void)
{

```

```

float somatorio(float *entrada, float *pesos, int num_nodulos, int \
comp_linha, int indice);

float norma, x[NOD_ENTRADA + 1], h1[NOD_OCULTA_1 + 1], h2[NOD_OCULTA_2
+\ 1], y[NOD_SAIDA], d[NOD_SAIDA];
float w1[NOD_ENTRADA + 1][NOD_OCULTA_1], w2[NOD_OCULTA_1 + 1] \
[NOD_OCULTA_2], w3[NOD_OCULTA_2 + 1][NOD_SAIDA];
float soma_h1[NOD_OCULTA_1], soma_h2[NOD_OCULTA_2], soma_y[NOD_SAIDA];
int e[NOD_SAIDA];
float ind_saida;
int i, j, k, l, soma_e, num_acertos, num_exemplos;
char nome_matriz_pesos[5];

FILE *fp_pesos;

if(!(fp_pesos = fopen("pesos_finais.dat","r"))) {
    printf("ERRO:\nO arquivo pesos_finais.dat nao pode ser aberto.");
    exit(1);
}

x[NOD_ENTRADA] = -1.0;
h1[NOD_OCULTA_1] = -1.0;
h2[NOD_OCULTA_2] = -1.0;

/*
    Leitura dos ganhos sinápticos.
*/

fscanf(fp_pesos, "%s", nome_matriz_pesos);
for(i = 0 ; i < NOD_ENTRADA + 1 ; i++)
    for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++)
        fscanf(fp_pesos, "%f", &w1[i][j]);

fscanf(fp_pesos, "%s", nome_matriz_pesos);
for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 + 1 ; j++)
    for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++)
        fscanf(fp_pesos, "%f", &w2[j][k]);

fscanf(fp_pesos, "%s", nome_matriz_pesos);
for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 + 1 ; k++)
    for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
        fscanf(fp_pesos, "%f", &w3[k][l]);

fclose(fp_pesos);

for(l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++)
    d[l] = NORMAL;

if(!(fp_exemplos = fopen("exemplos.dat","r+"))) {
    printf("ERRO:\nO arquivo exemplos.dat nao pode ser aberto.");
    exit(1);
}

num_exemplos = 0;
num_acertos = 0;

while((fscanf(fp_exemplos, "%f%f%f%f", &x[0], &x[1], &x[2], &x[3])) != \
EOF) {
    fscanf(fp_exemplos, "%f", &ind_saida);
    if((int)ind_saida >= 0)
        d[(int)ind_saida] = FALHA;

    norma = sqrt(x[0]*x[0] + x[1]*x[1] + x[2]*x[2] + x[3]*x[3]);
    x[0] = x[0]/norma;
    x[2] = x[2]/norma;

```

```

for(j = 0 ; j < NOD_OCULTA_1 ; j++) {
    soma_h1[j] = somatorio(x, w1, NOD_ENTRADA, NOD_OCULTA_1, j);
    h1[j] = FUNC_TRANSF(soma_h1[j]);
}

for(k = 0 ; k < NOD_OCULTA_2 ; k++) {
    soma_h2[k] = somatorio(h1, w2, NOD_OCULTA_1, NOD_OCULTA_2, k);
    h2[k] = FUNC_TRANSF(soma_h2[k]);
}

for(soma_e = 0, l = 0 ; l < NOD_SAIDA ; l++) {
    soma_y[l] = somatorio(h2, w3, NOD_OCULTA_2, NOD_SAIDA, l);
    y[l] = FUNC_TRANSF(soma_y[l]);
    if( fabs(d[l] - y[l]) > TOLERANCIA)
        e[l] = 1;
    else
        e[l] = 0;

    soma_e += e[l];
}

if (soma_e == 0)
    num_acertos++;

num_exemplos++;

if((int)ind_saida >= 0)
    d[(int)ind_saida] = NORMAL;
}

fclose(fp_exemplos);

/*
  Impressão de resultados.
*/

printf("\n\n\tResultado:\n\tIndice de acerto: %4.2f %%\n\n",
100.0*((float)num_acertos/(float)num_exemplos));
printf("\tTotal de exemplos analisados: %d\n", num_exemplos);

return 0;
}

float somatorio(float *entrada, float *pesos, int num_nodulos, int \
comp_linha, int indice) {
    float somat;
    int cont;

    somat = 0.0;
    for(cont = 0 ; cont < (num_nodulos + 1) ; cont++)
        somat += *(entrada + cont) * *(pesos + cont*comp_linha + indice);
    return (somat);
}

```

Анехо В

Tabela B.1

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 TEMP. ENT.= 965,00 KELVIN
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 FLUXO MÁSSICO ALIM.= 0,69 KG/S
 RAZÃO ENTRE VAPOR/ETANO= 0,46

PRES. ENT.	PRES. SAIDA	TEMP. SAIDA	PRODUCAO
270.000	nan	nan	nan
271.000	nan	nan	nan
272.000	1640.467	-181.255	1.06150
273.000	297.459	797.558	0.33287
274.000	nan	nan	nan
275.000	-477.508	*****	*****
276.000	1334.558	729.903	0.31263
277.000	nan	nan	nan
278.000	nan	nan	nan
279.000	1593.203	624.674	0.35610
280.000	42.216	853.116	0.31971
281.000	nan	nan	nan
282.000	*****	nan	nan
283.000	-25.729	1922.651	-0.39498
284.000	151.207	826.279	0.33012
285.000	*****	*****	*****
286.000	17.442	911.275	0.28168
287.000	12.425	875.162	0.30413
288.000	594.493	778.165	0.33638
289.000	-87.143	*****	*****
290.000	-5.818	893.097	0.29140
291.000	78.322	855.878	0.31350
292.000	-419.201	*****	*****
293.000	-67.414	895.973	0.28753
294.000	-26.335	871.570	0.30272
295.000	-6.326	862.455	0.30790
296.000	7.058	856.844	0.31081
297.000	17.327	852.753	0.31277
298.000	25.798	849.517	0.31418
299.000	33.105	846.828	0.31526
300.000	39.590	844.523	0.31611

Tabela B.2

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 TEMP. ENT.= 997,00 KELVIN
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 FLUXO MÁSSICO ALIM.= 0,68 KG/S
 RAZÃO ENTRE VAPOR/ETANO= 0,32 KG/KG

PRES. ENT.	PRES. SAIDA	TEMP. SAIDA	PRODUCAO
245.000	nan	nan	nan
246.000	22.741	927.644	0.30784
247.000	249.644	809.935	0.35492
248.000	nan	nan	nan
249.000	254.235	815.713	0.35274
250.000	51.418	857.392	0.34393
251.000	nan	nan	nan
252.000	-95.574	*****	*****
253.000	-35.649	931.615	0.30224
254.000	nan	nan	nan
255.000	*****	nan	*****
256.000	-54.452	1049.325	0.23223
257.000	179.902	832.895	0.35003
258.000	-97.677	*****	*****
259.000	-7.120	913.845	0.30941
260.000	80.379	864.170	0.33608
261.000	-210.116	*****	*****
262.000	-46.965	903.561	0.31330
263.000	-16.026	881.378	0.32548
264.000	0.419	872.182	0.33007
265.000	11.876	866.373	0.33271
266.000	20.871	862.102	0.33448
267.000	28.406	858.712	0.33575
268.000	34.972	855.896	0.33671
269.000	40.843	853.483	0.33745

Tabela B.3

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 TEMP. ENT.= 967,00 KELVIN
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 FLUXO MÁSSICO ALIM.= 0,53 KG/S
 RAZÃO ENTRE VAPOR/ETANO= 0,40 KG/KG

PRES. ENT.	PRES. SAIDA	TEMP. SAIDA	CONVERSÃO	SELETIVIDADE
225.000	10.437	899.660	0.7724	0.8463
226.000	19.152	894.094	0.7781	0.8449
227.000	26.328	889.906	0.7826	0.8433
228.000	32.522	886.550	0.7863	0.8416
229.000	38.029	883.751	0.7894	0.8399
230.000	43.027	881.350	0.7921	0.8381
231.000	47.632	879.249	0.7946	0.8364
232.000	51.921	877.381	0.7968	0.8346
233.000	55.952	875.700	0.7988	0.8329
234.000	59.765	874.173	0.8007	0.8311
235.000	63.394	872.773	0.8024	0.8294
236.000	66.863	871.481	0.8041	0.8277
237.000	70.193	870.283	0.8056	0.8260
238.000	73.398	869.165	0.8071	0.8244
239.000	76.495	868.118	0.8084	0.8227
240.000	79.492	867.133	0.8097	0.8211
241.000	82.401	866.203	0.8110	0.8194
242.000	85.229	865.323	0.8122	0.8178
243.000	87.982	864.488	0.8134	0.8162
244.000	90.669	863.692	0.8145	0.8147
245.000	93.292	862.934	0.8155	0.8131
246.000	95.858	862.209	0.8166	0.8115
247.000	98.370	861.515	0.8176	0.8100
248.000	100.833	860.848	0.8185	0.8085
249.000	103.249	860.208	0.8195	0.8070
250.000	105.621	859.593	0.8204	0.8055
251.000	107.952	858.999	0.8213	0.8040
252.000	110.245	858.427	0.8221	0.8025
253.000	112.502	857.874	0.8230	0.8010
254.000	114.724	857.339	0.8238	0.7996
255.000	116.914	856.821	0.8246	0.7982
256.000	119.073	856.320	0.8254	0.7967
257.000	121.203	855.833	0.8261	0.7953
258.000	123.305	855.361	0.8269	0.7939
259.000	125.381	854.902	0.8276	0.7925
260.000	127.432	854.457	0.8284	0.7911

Tabela B.4

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 PRES. ENT.= 244,00 KPA, ABS.
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 FLUXO MÁSSICO ALIM.= 0,53 KG/S
 RAZÃO ENTRE VAPOR/ETANO= 0,40 KG/KG

TEMP. ENT.	TEMP. SAIDA	PRES. SAIDA	CONVERSÃO	SELETIV.
915.000	852.765	91.343	0.7706	0.8197
917.000	853.153	91.046	0.7723	0.8195
919.000	853.543	90.747	0.7740	0.8193
921.000	853.936	90.448	0.7757	0.8191
923.000	854.331	90.147	0.7774	0.8189
925.000	854.729	89.846	0.7791	0.8187
927.000	855.128	89.543	0.7807	0.8185
929.000	855.531	89.240	0.7824	0.8183
931.000	855.936	88.935	0.7841	0.8181
933.000	856.343	88.630	0.7858	0.8180
935.000	856.753	88.323	0.7875	0.8178
937.000	857.166	88.016	0.7892	0.8176
939.000	857.582	87.707	0.7909	0.8174
941.000	858.000	87.397	0.7926	0.8172
943.000	858.420	87.086	0.7943	0.8170
945.000	858.844	86.774	0.7960	0.8168
947.000	859.270	86.461	0.7976	0.8166
949.000	859.699	86.146	0.7993	0.8164
951.000	860.131	85.831	0.8010	0.8162
953.000	860.566	85.514	0.8027	0.8160
955.000	861.004	85.196	0.8044	0.8158
957.000	861.444	84.877	0.8061	0.8156
959.000	861.888	84.557	0.8077	0.8154
961.000	862.334	84.236	0.8094	0.8152
963.000	862.784	83.913	0.8111	0.8151
965.000	863.236	83.589	0.8128	0.8149
967.000	863.692	83.263	0.8145	0.8147
969.000	864.151	82.937	0.8161	0.8145
971.000	864.613	82.609	0.8178	0.8143
973.000	865.079	82.280	0.8195	0.8141
975.000	865.547	81.949	0.8212	0.8139
977.000	866.020	81.617	0.8228	0.8137
979.000	866.495	81.284	0.8245	0.8135
981.000	866.973	80.949	0.8262	0.8133
983.000	867.456	80.613	0.8278	0.8131
985.000	867.941	80.276	0.8295	0.8129
987.000	868.430	79.937	0.8312	0.8127
989.000	868.923	79.596	0.8328	0.8125
991.000	869.420	79.254	0.8345	0.8124
993.000	869.920	78.911	0.8361	0.8122
995.000	870.424	78.566	0.8378	0.8120
997.000	870.932	78.219	0.8394	0.8118
999.000	871.443	77.871	0.8411	0.8116
1001.000	871.958	77.521	0.8427	0.8114
1003.000	872.478	77.170	0.8444	0.8112
1005.000	873.001	76.817	0.8460	0.8110
1007.000	873.528	76.462	0.8477	0.8108
1009.000	874.059	76.105	0.8493	0.8106
1011.000	874.595	75.747	0.8510	0.8104
1013.000	875.135	75.387	0.8526	0.8102
1015.000	875.679	75.025	0.8542	0.8101
1017.000	876.228	74.662	0.8559	0.8099
1019.000	876.780	74.297	0.8575	0.8097

Tabela B.5

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 PRES. ENT.= 244,00 KPA, ABS.
 TEMP. ENT.= 967,00 KELVIN
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 RAZÃO ENTRE VAPOR/ETANO= 0,40 KG/KG

VEL. MASSICA	TEMP. SAIDA	PRES. SAIDA	CONVERSAO	SELETIV.
0.450	901.879	140.071	0.9631	0.7761
0.455	896.562	137.395	0.9549	0.7782
0.460	891.905	134.637	0.9462	0.7804
0.465	887.806	131.794	0.9373	0.7826
0.470	884.186	128.859	0.9282	0.7848
0.475	880.980	125.828	0.9190	0.7871
0.480	878.136	122.693	0.9096	0.7894
0.485	875.614	119.448	0.9002	0.7918
0.490	873.379	116.084	0.8907	0.7942
0.495	871.406	112.592	0.8812	0.7966
0.500	869.673	108.959	0.8717	0.7991
0.505	868.164	105.173	0.8622	0.8016
0.510	866.867	101.217	0.8527	0.8041
0.515	865.774	97.075	0.8431	0.8067
0.520	864.881	92.721	0.8336	0.8093
0.525	864.186	88.129	0.8240	0.8120
0.530	863.692	83.263	0.8145	0.8147
0.535	863.410	78.080	0.8049	0.8174
0.540	863.351	72.519	0.7952	0.8202
0.545	863.540	66.503	0.7855	0.8230
0.550	864.008	59.919	0.7756	0.8259
0.555	864.806	52.601	0.7656	0.8288
0.560	866.009	44.286	0.7553	0.8317
0.565	867.738	34.512	0.7447	0.8346
0.570	870.195	22.337	0.7335	0.8375
0.575	873.770	5.276	0.7213	0.8404
0.580	879.340	-28.123	0.7073	0.8430
0.585	889.753	317.511	0.6889	0.8446
0.590	935.657	-36.112	0.6381	0.8353
0.595	878.427	53.503	0.6842	0.8506

Tabela B.6

DIAM. REATOR = 0,1080 M
 COMP. REATOR= 100,00 M
 PRES. ENT.= 244,00 KPA, ABS.
 TEMP. ENT.= 967,00 KELVIN
 TAXA TRANSF. CALOR= 70,00 KW/M²
 FLUXO MÁSSICO ALIM.= 0,53 KG/S

RAZAO VAPOR/C2H6	TEMP. SAIDA	PRES. SAIDA	CONVERSAO	SELET.
0.350	859.797	103.546	0.8247	0.8065
0.355	860.115	101.720	0.8238	0.8073
0.360	860.446	99.855	0.8228	0.8080
0.365	860.791	97.950	0.8219	0.8088
0.370	861.151	96.003	0.8209	0.8096
0.375	861.528	94.009	0.8199	0.8105
0.380	861.922	91.969	0.8188	0.8113
0.385	862.333	89.877	0.8178	0.8121
0.390	862.765	87.731	0.8167	0.8130
0.395	863.217	85.528	0.8156	0.8138
0.400	863.692	83.263	0.8145	0.8147
0.405	864.191	80.933	0.8133	0.8155
0.410	864.716	78.530	0.8121	0.8164
0.415	865.270	76.051	0.8109	0.8173
0.420	865.854	73.487	0.8096	0.8182
0.425	866.471	70.832	0.8083	0.8191
0.430	867.126	68.076	0.8070	0.8200
0.435	867.821	65.209	0.8056	0.8210
0.440	868.560	62.219	0.8041	0.8219
0.445	869.349	59.089	0.8026	0.8229
0.450	870.194	55.803	0.8011	0.8238