UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS DE PROCESSO QUÍMICO DINÂMICO POR REDES NEURONAIS MULTICAMADAS E MAPAS AUTO-ORGANIZÁVEIS

MARTHA MARIA SMILGAT LEAL BRANDÃO

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS DA ESCOLA DE QUÍMICA DA UFRJ

ORIENTAÇÃO: PROF. MAURÍCIO BEZERRA DE SOUZA JÚNIOR, D.SC

RIO DE JANEIRO
2010

DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS DE PROCESSO QUÍMICO DINÂMICO POR REDES NEURONAIS MULTICAMADAS E MAPAS AUTO-ORGANIZÁVEIS

MARTHA MARIA SMILGAT LEAL BRANDÃO

DISSERTAÇÃO APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.).

ESCOLA DE QUÍMICA

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO

DEZEMBRO DE 2010

FICHA CATALOGRÁFICA

BRANDÃO, MARTHA MARIA SMILGAT LEAL.

Detecção e Diagnóstico de Falhas de Processo Químico Dinâmico por Redes Neuronais Multicamadas e Mapas Auto-Organizáveis / Martha Maria Smilgat Leal Brandão – Rio de Janeiro, 2010.

xviii, 100 f.: il.

Dissertação (Mestrado em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos) – Universidade Federal do Rio de Janeiro – UFRJ, Escola de Química – 2010.

Orientador: Maurício Bezerra de Souza Júnior

1. Controle de processos. 2. Detecção e diagnóstico de falhas. 3. Redes neuronais. 4. Processo Químico Dinâmico - Teses. I. De Souza Júnior, Maurício B. (Orient.). II. Universidade Federal do Rio de Janeiro. Escola de Química. III. Detecção e Diagnóstico de Falhas de Processo Químico Dinâmico por Redes Neuronais Multicamadas e Mapas Auto-Organizáveis.

DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS DE PROCESSO QUÍMICO DINÂMICO POR REDES NEURONAIS MULTICAMADAS E MAPAS AUTO-ORGANIZÁVEIS

MARTHA MARIA SMILGAT LEAL BRANDÃO

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM TECNOLOGIA DE PROCESSOS QUÍMICOS E BIOQUÍMICOS DA ESCOLA DE QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.) EM 17 DE DEZEMBRO DE 2010.

APROVADA POR:

Maurício B. de Souza Jr

Prof. Maurício Bezerra de Souza Júnior, D.Sc.
Orientador

Ana Mehl

Ana Mehl, D.Sc.

Gilson Alexandre Pinto, D. Sc.

Rossana Folly

Prof^{a}. Rossana Odette Mattos Folly, D.Sc.

DEDICATÓRIA

Dedico este trabalho...

...aos meus pais, Antônio e Maria José, agradeço pela oportunidade de proporcionar-me educação privilegiada e pelo incentivo em todos estes anos. A conclusão deste mestrado é uma vitória de vocês!

...à minha querida avó pelo carinho e pela presença sábia em toda minha vida.

...aos meus irmãos Marco e Carolina para que saibam aproveitar as oportunidades que a vida nos dá.

...ao meu marido Antônio pela compreensão, carinho e força que muito contribuíram para a conclusão deste desafio.

...aos meus amigos da Chemtech, que vivenciaram comigo as dificuldades do dia a dia e sempre me incentivaram a continuar no caminho.

AGRADECIMENTOS

Este trabalho foi desafiador e emocionante! Agradeço a Deus pela força nas horas difíceis!

Agradeço aos meus pais Maria José e Antonio por terem me incentivado em todos os momentos, desde o início do mestrado até o final desta jornada. Muito Obrigada! Aos meus irmãos Carolina e Marco e a minha querida avó Iva pela torcida.

Agradeço ao meu amado marido Antonio por estar ao meu lado em todos os momentos e pelo incentivo para que pudesse completar este trabalho.

Agradeço a meu prezado orientador Prof. Maurício Bezerra de Souza Júnior pela orientação, confiança e enorme dedicação que o tornam um exemplo de orientador. Muito obrigada por ter me ajudado a conquistar esta etapa.

Agradeço aos meus amigos da Chemtech, especialmente a Izabel, Francisco Igor, Humberto, Vivian, Fernando e Adriana pelo incentivo, força e motivação. Obrigada também pela compreensão nos momentos em que eu não estava presente! Aos meus colegas Eduardo e Leonardo por estarem sempre disponíveis para me ajudar no Matlab.

Agradeço à CHEMTECH pela liberação, confiança, incentivo e compreensão.

RESUMO

BRANDÃO, Martha Maria Smilgat Leal. Detecção e Diagnóstico de Falhas de Processo Dinâmico por Redes Neuronais Multicamadas e Mapas Auto-Organizáveis. Orientador: Maurício Bezerra de Souza Júnior. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2010. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Tecnologia de Processos Químicos e Bioquímicos).

O aumento da produção industrial, a competitividade mundial e restrições cada vez maiores de segurança e ambientais fizeram crescer a busca por sistemas de controle e monitoramento de processos cada vez mais eficientes. Os processos industriais estão se tornando mais instrumentados, disponibilizando grande quantidade de variáveis e dados monitorados que podem ser utilizados por sistemas de detecção e diagnóstico de falhas. O processo em batelada é caracterizado por possuir natureza intrinsecamente dinâmica e ausência de estado estacionário. Isto impõe uma grande dificuldade no seu controle, bem como no tratamento das possíveis falhas operacionais. O objetivo deste trabalho foi o desenvolvimento de ferramentas de detecção e diagnóstico de falhas que auxiliem a operação do processo, permitindo o monitoramento automático das possíveis falhas em reator batelada. Foram utilizados dados simulados para a operação normal e sob efeito de falhas, a partir do início da reação em um modelo de reator batelada não-isotérmico, para estudo de detecção e diagnóstico de falhas baseado em redes neuronais. Foram estudadas e comparadas redes de classificação multicamadas (MLP, com neurônios *softmax* na camada de saída, e RBF) e redes de mapeamento auto-organizável (SOM), que geralmente empregam dados estáticos, de modo que foi também desenvolvido um algoritmo de pós-processamento para auxiliar na implementação dinâmica destas redes. As falhas foram detectadas e diagnosticadas ainda no início da batelada (1/10 do tempo total de batelada), possibilitando não só que se evitasse a condução até o final reação, como também a sua potencial correção. Este trabalho demonstrou o potencial das redes neuronais na detecção e diagnóstico de falhas em reatores batelada, permitindo novas abordagens desta técnica para outros tipos de modelos dinâmicos.

ABSTRACT

BRANDÃO, Martha Maria Smilgat Leal. Fault Detection and Diagnosis of Dynamic Chemical Process by Multi-Layer and Self-Organizing Maps Neural Networks. Advisor: Maurício Bezerra de Souza Júnior. Rio de Janeiro: UFRJ/EQ, 2010. M.Sc. Dissertation (Postgraduate Program on Technology of Chemical and Biochemical Processes).

The increase of industrial production, global competition and the growth of safety and environmental constraints have intensified the search for more efficient control and monitoring systems. Industrial processes are expanding their instrumentation resources, providing large amounts of variables and data to be monitored and used by fault detection and diagnosis (FDD) systems. Batch process is characterized by having inherent dynamic nature and absence of steady state, posing a great challenge in its control and treatment of the eventual operational faults. The objective of this work was to develop FDD tools that can help process operators, enabling automatic monitoring of the eventual batch reactor faults. FDD based on neural networks was studied using simulated data of normal and fault conditions of an exothermic batch reactor model. The study was based on classification multi-layered (MLP, with softmax neurons on exit layer, and RBF) and self-organizing maps (SOM) neural networks which are usually used to analyze static data, therefore a post-processing algorithm was implemented to aid the dynamic analysis of the networks. The faults were detected and diagnosed in the beginning of the batch (1/10 of batch total time), allowing their potential correction before the end of the process. This work has demonstrated the neural networks' potential for FDD of batch reactors, allowing future approaches of this technique for other types of dynamic models.

LISTA DE ABREVIATURAS

ASM – *Abnormal Situation Managment Consotium;*

ANN – *Artificial Neural Networks* ou Redes Neuronais Artificiais;

CSTR – *Continuous Stirred-Tank Reactor;*

FDD – *Fault Detection and Diagnosis*;

GMC – *Generic Model Control;*

HANN - *Hierarchical Artificial Neural Networks;*

ISA – *International Society of Automation*;

IFAC - *International Federation of Automatic Control;*

MPC – *Model Predictive Control*;

MLP – *Multilayer Perceptron;*

PLS – *partial least square* ou mínimos quadrados parciais;

P – Controlador Proporcional;

PCA – *Principal Component Analysis*;

PI – Controlador Proporcional e Integral;

PID – Controlador Proporcional Integral e Derivativo;

RBF – *Radial Basis Functions;*

SNN – *Statistica Neural Networks* (ferramenta do Statistica^{TM});

SOM – *Self-Organizing Maps*;

SOFM – *Self-Organizing Feature Maps;*

SPE – *square prediction error* ou erro quadrático da predição;

NOMENCLATURA

Modelo do Reator Químico em Batelada:

A – Área da seção transversal do reator;

PM_A – Peso molecular do reagente A;

PM_B – Peso molecular do reagente B;

PM_C – Peso molecular do produto C;

PM_D – Peso molecular do produto D;

C_{pA} – Capacidade calorífica do reagente A;

C_{pB} – Capacidade calorífica do reagente B;

C_{pC} – Capacidade calorífica do produto C;

C_{pD} – Capacidade calorífica do produto D;

C_{pj} – Capacidade calorífica do fluido refrigerante;

C_{pr} – Capacidade calorífica do reator;

U – Coeficiente global de transferência de calor do reator;

F_j – Vazão de fluido refrigerante;

V_j – Volume da jaqueta;

k_{11} – Constante 1 da reação 1;

k_{12} – Constante 2 da reação 1;

k_{21} – Constante 1 da reação 2;

k_{22} – Constante 2 da reação 2;

N_A – Número de mols do reagente A;

N_B – Número de mols do reagente B;

N_C – Número de mols do produto C;

N_D – Número de mols do produto D;

T_{r0} – Temperatura inicial do reator;

T_{jin} – Temperatura de entrada do fluido refrigerante;

T_j – Temperatura do fluido refrigerante;

Q_r – Quantidade de calor no reator;

Q_j – Quantidade de calor no fluido refrigerante.

Letras Gregas:

ΔH_1 – Calor de reação para a reação 1;

ΔH_2 – Calor de reação para a reação 2;

ρ_j – Massa específica do fluido refrigerante.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Seqüência operacional de um reator em batelada 7

Figura 2.2 – Esquema de controle de um reator batelada com jaqueta não-isotérmico (SEBORG, EDGAR, MELLICHAMP e DOYLE,2011) 9

Figura 3.1 – Esquema do ciclo de monitoração do processo (CHIANG, RUSSELL e BRAATZ, 2001)..... 13

Figura 3.2 – Esquema geral dos diferentes métodos de supervisão com gerenciamento de falhas (ISERMANN, 2006) 17

Figura 3.3 – Classificação dos sistemas de diagnóstico (Adaptado de VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003a)..... 19

Figura 3.4 – Estrutura do cérebro humano (FAUSETT, 1993) 20

Figura 3.5 – Estrutura da Rede *Feedforward* com uma única camada (HAYKIN, 2001) 21

Figura 3.6 – Estrutura da Rede *Feedforward* com mais de uma camada escondida (HAYKIN, 2001) 22

Figura 3.7 – Estrutura da Rede *Feedback* com retroalimentação na camada de saída... 22

Figura 3.8 – Estrutura da Rede *Feedback* com retroalimentação na camada de entrada 23

Figura 3.9 – Esquema do aprendizado supervisionado 23

Figura 3.10 – Esquema do aprendizado não-supervisionado 24

Figura 3.11 – Esquema de uma rede linear (HAYKIN, 2001) 25

Figura 3.12 – Modelo matemático de um neurônio (DE SOUZA Jr., 2008) 26

Figura 3.13 – Arquitetura da rede RBF 28

Figura 3.14 – Modelo da Rede SOFM bi-dimensional 30

Figura 4.1 – Esquema do reator químico em batelada não-isotérmico 35

Figura 4.2 – Reator batelada em malha aberta 40

Figura 4.3 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada..... 40

Figura 4.4 – Comportamento das temperaturas do reator e do fluido refrigerante durante o tempo de batelada..... 41

Figura 4.5 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada para aumento na adição dos reagentes A e B..... 42

Figura 4.6 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa durante o tempo de batelada para aumento na adição dos reagentes A e B..... 43

Figura 4.7 – Esquema reator batelada em malha fechada 43

Figura 4.8 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada..... 44

Figura 4.9 – Comportamento das temperaturas do reator e do fluido refrigerante durante o tempo de batelada 44

Figura 4.10 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 1. 47

Figura 4.11 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 1 47

Figura 4.12 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 2. 48

Figura 4.13 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 2 49

Figura 4.14 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 3. 50

Figura 4.15 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 3 50

Figura 4.16 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 4. 51

Figura 4.17 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 4 52

Figura 4.18 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 5. 53

Figura 4.19 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 5 53

Figura 4.20 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 6. 54

Figura 4.21 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 6 55

Figura 4.22 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 7. 56

Figura 4.23 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 7 56

Figura 4.24 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 8. 57

Figura 4.25 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 8 58

Figura 5.1 – Parâmetros de entrada e saída das redes neuronais 61

Figura 5.2 – Comparação dos comportamentos das falhas na primeira meia hora após início da reação – Teste 1 65

Figura 5.3 – Comparação dos comportamentos das falhas meia hora após início da reação – Teste 2 68

Figura 5.4 – Comparação dos comportamentos das falhas meia hora após início da reação – Teste 3 70

Figura 5.5 – Proporção de ativações em cada classe para os dados relativos à corrida de classe NORMAL para o Teste 1 72

Figura 5.6 – Mapeamento topológico do treinamento de Kohonen para o Teste 1 mostrando a localização dos *clusters* 74

Figura 5.7 – Proporção de ativações em cada classe para os dados relativos à corrida 1 para o Teste 4 76

Figura 5.8 – Mapeamento topológico do treinamento de Kohonen para o Teste 4 mostrando a localização dos *clusters* 78

Figura 5.9 – Comparação das trajetórias da temperatura do reator ente as Falhas 2 e 12 80

Figura 5.10 – Comparação das trajetórias da temperatura do reator entre as falhas 9-5 e 11-6..... 81

Figura 5.11 – Percentual de classificação dos neurônios frente à aplicação da Falha 9 82

Figura 5.12 – Percentual de classificação dos neurônios frente à aplicação da Falha 1082

Figura 6.1 – Fluxograma com sugestão de algoritmo de apoio operacional 85

Figura 8.1 – Modelo reator batelada em malha aberta 93

Figura 8.2 – Modelo reator batelada em malha fechada..... 97

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Exemplos de Falhas, Defeitos e Mau Funcionamentos (adaptado de ISERMANN, 2006) 14
Tabela 4.1 – Parâmetros do modelo do reator batelada (Adaptado de SOUSA, 2010) . 38
Tabela 4.2 – Variáveis ao final da batelada para o sistema operando sem falhas 41
Tabela 4.3 – Variáveis ao final da batelada para o sistema operando sem falhas 45
Tabela 4.4 – Falhas aplicadas no sistema em malha fechada 45
Tabela 5.1 – Corridas consideradas 59
Tabela 5.2 – Testes para aplicação da técnica de FDD 60
Tabela 5.3 – Quantitativo de dados para treinamento e seleção das redes 61
Tabela 5.4 – Desempenhos das redes no Teste 1 63
Tabela 5.5 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 1 64
Tabela 5.6 – Desempenhos das redes no Teste 2 66
Tabela 5.7 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 2 67
Tabela 5.8 – Desempenhos das redes no Teste 3 68
Tabela 5.9 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 3 69
Tabela 5.10 – Resultados do treinamento de Kohonen para o Teste 1 71
Tabela 5.11 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 1 71
Tabela 5.12 – Resultados treinamento de Kohonen para o Teste 4 75
Tabela 5.13 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 4 75
Tabela 5.14 – Falhas para teste de generalização das redes 79
Tabela 5.15 – Aplicação do algoritmo “winner” para verificação do desmepenho das redes RBF e MLPs após aplicação de novas magnitudes de falhas 79
Tabela 5.16 – Aplicação do algoritmo “winner” para as redes SOFM após aplicação de novas magnitudes de falhas 81

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 ..... **1**
1. INTRODUÇÃO **1**
1.1 Motivações 1
1.2 Objetivo 3
1.3 Organização do trabalho 3

CAPÍTULO 2 ..... **5**
2. REATORES QUÍMICOS EM BATELADA **5**
2.1 Introdução 5
2.2 Reatores Químicos em Batelada 7
2.2.1 Controle de Reatores em Batelada 8

CAPÍTULO 3 ..... **12**
3. DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS **12**
3.1 Fundamentos 12
3.2 Definições Importantes 13
3.3 Características dos Sistemas de Detecção e Diagnóstico de Falhas 15
3.4 Métodos de Detecção e Diagnóstico de Falhas 18
3.4.1 Redes Neuronais Artificiais 20
3.5 Revisão de aplicações de FDD em processos químicos 31
3.5.1 Aplicações baseadas em redes neuronais 32
3.5.2 Aplicações Baseadas em Sistemas Híbridos 34

CAPÍTULO 4 ..... **35**
4. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO REATOR EM BATELADA COM REAÇÃO EXOTÉRMICA **35**
4.1 Modelagem do processo 35
4.2 Simulação do sistema em malha aberta 39
4.2.1 Sistema em malha aberta operando com falhas 41
4.3 Sistema em malha fechada 43
4.3.1 Sistema em malha fechada operando com falhas 45

CAPÍTULO 5 59
5. APLICAÇÃO DE TÉCNICA DE FDD BASEADA EM REDES NEURONAIS 59
5.1 Introdução 59
5.2 Aplicação das Redes Neuronais para FDD 61
5.2.1 Aplicação das Redes Lineares, MLP e RBF 62
5.2.2 Análise das redes SOFM com treinamento de Kohonen 70
5.2.3 Desempenho das redes selecionadas para casos novos 79

CAPÍTULO 6 83
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS 83

CAPÍTULO 7 86
7. REFERÊNCIAS 86

APÊNDICES 92
8. APÊNDICE I 93
8.1 Reator batelada em malha aberta 93
8.2 Reator batelada em malha fechada 97

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

1.1 Motivações

As falhas constituem problemas críticos para a operação das plantas de processo atuais. Falhas humanas, em equipamentos e instrumentos, ou até mesmo no sistema de controle podem resultar em acidentes com perdas de vidas e consequências drásticas para o meio ambiente. Acidentes como o da plataforma da Petrobras P-36 em 2001 foram causados por uma combinação de falhas operacionais e erros humanos que resultaram na perda de 11 vidas humanas, além de poluição ambiental e um prejuízo de cerca de cinco bilhões de dólares (VENKATASUBRAMANIAN, 2003).

Com o crescente aumento da produção nas indústrias e a competitividade mundial, a demanda por sistemas de controle e monitoração de processos eficientes também cresceu. Os sistemas de controle padrão (PID, controle preditivo, etc.) foram desenvolvidos para manterem as condições de operação dentro dos limites especificados, compensando os efeitos das perturbações e mudanças que ocorrem no processo. No entanto, há condições anormais de operação, que tais controladores não conseguem tratar da maneira adequada, as chamadas falhas (CHIANG, RUSSELL e BRAATZ, 2001). Assim, a busca por sistemas de detecção e diagnóstico se tornou uma necessidade cada vez maior (CHEN e LIAO, 2002).

De acordo com CHIANG, RUSSELL e BRAATZ (2001), o aumento da procura por sistemas de detecção e diagnóstico de falhas pode ser explicado pelo fato de os processos industriais estarem se tornando cada vez mais instrumentados, resultando em grande quantidade de dados disponíveis para utilização na monitoração. Estes dados ficam armazenados em computadores robustos, sob forma de históricos do processo, e são extremamente necessários para análise da operação. Isto levou ao desenvolvimento de ferramentas de detecção e diagnóstico baseadas na análise destes históricos, eliminando a

necessidade de se utilizar modelagem do processo. Dentre estas ferramentas, pode-se citar as redes neuronais artificiais que serão abordadas nesta dissertação.

As redes neuronais são ferramentas matemáticas utilizadas para classificação de variáveis frente a determinados padrões de dados apresentados às mesmas, muito empregadas como ferramenta de detecção e diagnóstico. O objetivo principal de sua utilização nesta dissertação foi a necessidade de se usar uma ferramenta com capacidade de identificação e classificação não somente do evento "falha", como também do tipo da falha ocorrida.

O objetivo principal das ferramentas de detecção e diagnóstico é dar suporte à operação da planta. Sua utilização é necessária para coletar, analisar e interpretar os dados do processo disponíveis, de forma a realizar detecção e diagnóstico precoces das falhas e reduzir as paradas e condições de emergência na planta causadas pelas mesmas.

Os processos em batelada são empregados na manufatura de produtos de alta qualidade por indústrias como a química, farmacêutica e bioquímica. Sua principal característica é a utilização de reatores em batelada para geração do produto desejado em tempo finito. A monitoração *on-line* destes processos garante a consistência e qualidade do produto final e está alinhada com a detecção de alterações nas condições de operação que possam impactá-las (CHOI, MORRIS e LEE, 2008).

Atualmente, o objetivo principal dos processos em batelada é a redução da variabilidade do produto, que pode ser causada por alterações nos tempos de resposta da operação, flutuações nas utilidades disponíveis, falhas nos equipamentos/instrumentos, falta de precisão no projeto e alterações na qualidade da matéria-prima (COTT e MACCHIETTO, 1989). Nos processos onde as reações em batelada são altamente exotérmicas, nas quais são liberadas grandes quantidades de energia, os problemas são ainda maiores. São necessárias monitorações constantes das vazões, concentrações de entrada dos reagentes nos reatores, bem como controle de temperatura rígido destes equipamentos, de forma a não ocorrerem danos nos mesmos. Além disso, é necessário um sistema de refrigeração eficiente, cuja utilização é imprescindível para controle de temperatura dos reatores. Geralmente, os produtos gerados por estes processos são de

grande valor agregado, e quaisquer falhas no controle e monitoração das variáveis envolvidas pode gerar um prejuízo econômico muito grande para estas indústrias.

Com base nas características expostas, nas necessidades operacionais e importâncias econômicas e ambientais, os processos industriais com reatores em batelada poderão se beneficiar com a implementação de ferramentas de detecção e diagnóstico de falhas.

1.2 Objetivo

Esta dissertação tem como objetivo geral o desenvolvimento de ferramentas que permitam o monitoramento automático dos parâmetros operacionais, de forma a auxiliar o operador na melhor condução de processos em batelada de natureza dinâmica intrínseca. As ferramentas projetadas são baseadas em redes neuronais multicamadas (MLP e RBF) e de mapeamento auto-organizável e em um algoritmo de pós-processamento das redes. Um problema específico de um reator batelada altamente não-linear – submetido a distúrbios na composição inicial e na operação – foi investigado.

Como objetivos específicos destacam-se:

i. Comparar os padrões de redes investigadas em termos de desempenho;

ii. Verificar a capacidade do sistema, do ponto de vista da detecção rápida das falhas em sua base de dados;

iii. Verificar a capacidade do sistema proposto na detecção de falhas em novos dados.

1.3 Organização do trabalho

A presente dissertação está organizada conforme descrito a seguir. O Capítulo 2 apresenta uma breve revisão bibliográfica sobre reatores químicos em batelada. O Capítulo 3 refere-se a uma breve revisão sobre as técnicas de detecção e diagnóstico de falhas utilizando redes neuronais. O Capítulo 4 apresenta a modelagem do reator batelada utilizado como estudo de caso e a simulação das falhas no mesmo. O Capítulo 5 apresenta a metodologia e os resultados obtidos aplicando-se a ferramenta de redes neuronais na

análise das falhas do modelo. O Capítulo 6 refere-se às conclusões e propostas para trabalhos futuros. O Capítulo 7 contém as referências utilizadas na elaboração desta dissertação. O Apêndice I apresenta os simuladores usados para modelagem do reator batelada.

CAPÍTULO 2

2. REATORES QUÍMICOS EM BATELADA

2.1 Introdução

Os processos em batelada são caracterizados pela produção de quantidades finitas de material, através do processamento ordenado de matéria-prima (ANSI/ISA, 1995). Os reatores em batelada representam meios versáteis de produção de gêneros de alto valor agregado, especialmente nas indústrias química, bioquímica e farmacêutica. São muito utilizados para fabricação de grande variedade de produtos com diferentes características, como tempo de conversão, entalpia de reação, viscosidade, dentre outros (HUA, ROHANI e JUTAN, 2004).

Os diferentes objetivos da produção podem ser críticos para a obtenção dos produtos, bem como para a operação econômica e segura da planta. Em alguns casos, por razões de segurança, a redução do calor de reação pode ser um ponto crítico; em outros, um controle rígido de temperatura ou concentração podem ser os fatores mais importantes para se satisfazer as especificações do produto (FRIEDRICH e PERNE, 1995).

De acordo com BONVIN (1998), as principais preocupações das indústrias de processos em batelada são:

1. Segurança: Além de razões ecológicas, é importante considerar que algumas reações químicas são exotérmicas e, caso não haja controle apropriado, a temperatura do reator pode fugir ao controle e ocasionar acidentes.

2. Qualidade do produto: Garantia da baixa variabilidade da especificação do produto final, especificando grau de pureza rigoroso para as matérias-primas envolvidas na produção.

3. Capacidade de ampliação da produção: Devem ser desenvolvidos estudos consistentes em laboratório para se facilitar as ampliações das instalações e, consequentemente, da produção, respeitando-se as leis ambientais.

4. Produtividade: Desenvolvimento de estratégias de redução do tempo da operação, de forma a permitir o processamento de mais corridas por dia ou semana.

5. Flexibilidade: Adequação dos equipamentos disponíveis para adaptação das políticas operacionais em plantas multi-porpósito.

Alguns fatores técnicos e econômicos tornam os processos em batelada mais vantajosos em relação aos contínuos (BARKER e RAWTANI, 2005):

- Consistem de unidades de processamento mais simples como tanques, misturadores e agitadores;

- A planta de processamento em batelada pode ser multi-propósito, ou seja, o mesmo equipamento pode ser utilizado para processar vários produtos dentro de suas especificações;

- Possuem sistemas de controle e alguns equipamentos mais rigorosos que os processos contínuos;

- Possuem maior facilidade de ampliação dependendo dos requisitos de mercado e da demanda.

SEBORG *et al*. (2011) destacam como principais vantagens dos processos em batelada em relação aos contínuos:

- A possibilidade de ajuste da duração da batelada em função do atendimento das especificações de qualidade dos produtos;

- A natureza repetitiva do processo, o que possibilita a realização de melhorias de uma operação para outra;

- São mais lentos, o que é bastante vantajoso para a monitoração do processo, já que as melhorias nas condições de operação podem ser implementadas e verificadas em tempo real.

2.2 Reatores Químicos em Batelada

Os reatores químicos em batelada são constituídos de um tanque com agitador e um sistema integral de aquecimento / refrigeração, dependendo da natureza da reação química processada. O projeto de um reator químico batelada pode ser considerado como um problema de definição de determinado número de especificações que devem ser seguidas, para se atingir o objetivo da produção. Torna-se necessária a observação das restrições impostas pela operabilidade da planta, disponibilidade de utilidades, segurança, custo de operação, dentre outros (FRIEDRICH e PERNE, 1995).

A operação dos reatores em batelada é descontínua e basicamente, segue a sequência ou receita pré-definida, ilustrada na Figura 2.1 (MAJOZI, 2010). O tempo total da batelada, como é denominada a operação do reator, é a soma dos tempos de adição dos reagentes e catalisadores, ocorrência da reação química e descarga dos produtos.

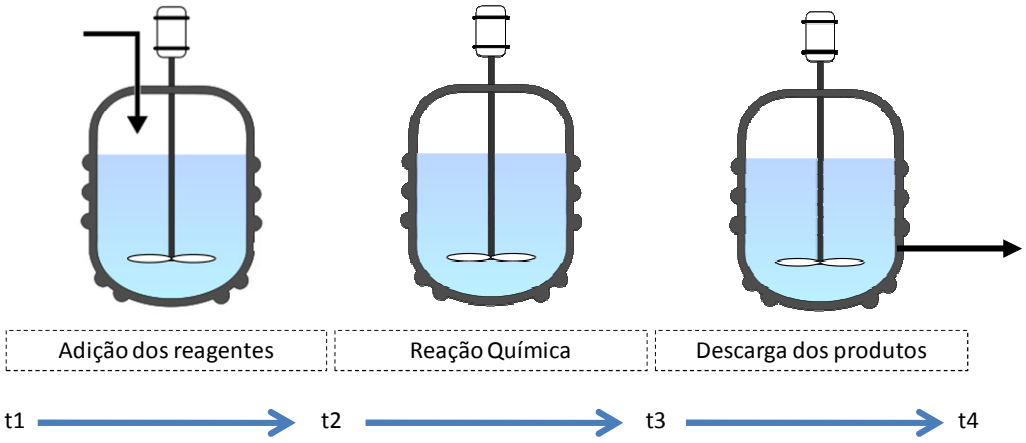

Figura 2.1 – Seqüência operacional de um reator em batelada

As reações químicas que ocorrem nos reatores em batelada podem ser classificadas como exotérmicas ou endotérmicas. De forma a manter o reator e demais componentes da reação na temperatura desejada, utiliza-se um sistema de aquecimento / refrigeração, cuja função é adicionar / remover calor do equipamento. Um dos sistemas mais comuns é composto por um dispositivo tubular, denominado jaqueta, no qual é injetado um fluido

que pode ser utilizado para refrigerar ou aquecer o reator, dependendo do objetivo operacional.

A presente dissertação abordará reatores em batelada com reação exotérmica. Os demais tipos podem ser mais bem explanados na literatura.

2.2.1 Controle de Reatores em Batelada

Os processos em batelada oferecem um dos mais interessantes e desafiadores problemas nas áreas de modelagem e controle devido a sua natureza dinâmica inerente. O uso do controle de processos permitiu a automação destes reatores e o aumento de suas eficiências.

Segundo MUJTABA, AZIZ e HUSSAIN (2006), o controle de um reator em batelada é simples e consiste basicamente em controlar seu carregamento, temperatura e saída de produto (esvaziamento do reator). Os reatores químicos em batelada com reações exotérmicas devem possuir uma estratégia de controle mais precisa que os demais, já que as reações químicas que ocorrem em seu interior liberam grande quantidade de calor. O aumento excessivo da temperatura do reator pode prejudicar não só sua estrutura, mas a dos demais equipamentos a jusante do mesmo, bem como a dos instrumentos utilizados para sua monitoração e controle. Além disso, um descontrole da temperatura no interior do reator pode modificar as características do produto final. Nestes casos, os reatores necessitam de um sistema de refrigeração eficiente, capaz de ajudar a reduzir a temperatura do equipamento, que pode se apresentar como um parâmetro bastante instável. De acordo com ZHOU *et al*. (2008) a operação de reatores químicos batelada exotérmicos é afetada por sua temperatura inicial, que deve sempre ser monitorada no início da batelada.

A Figura 2.2 ilustra um exemplo de variáveis controladas em um reator batelada exotérmico com jaqueta.

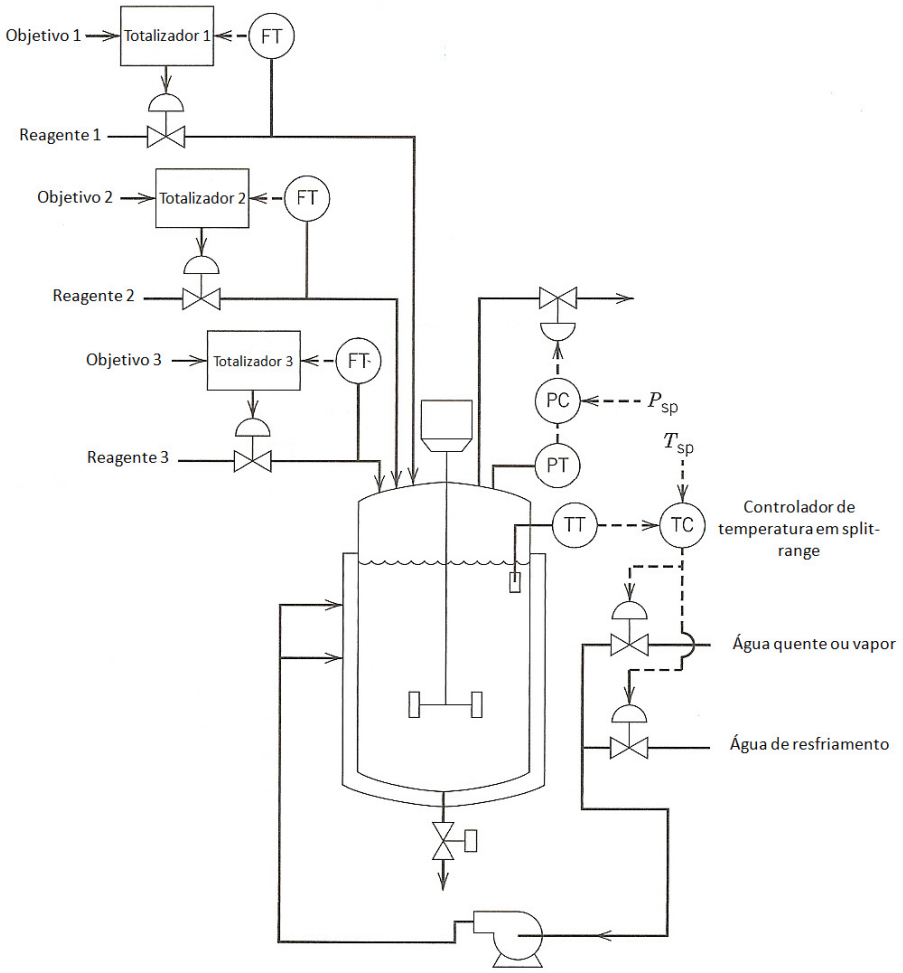

Figura 2.2 – Esquema de controle de um reator batelada com jaqueta não-isotérmico (SEBORG, EDGAR, MELLICHAMP e DOYLE, 2011)

Os principais desafios operacionais do controle dinâmico dos reatores batelada são caracterizados por situações reais como a não-linearidade do processo, a falta de estabilidade das condições de operação, as incertezas nas reações químicas, os erros de modelagem, as perturbações desconhecidas no processo, restrições nas variáveis e limitações em suas medições em tempo real (HUA, ROHANI e JUTAN, 2004).

A não-linearidade do processo está relacionada ao modo como as variáveis de projeto deste tipo de reator se relacionam entre si. Geralmente, os principais parâmetros da reação como as concentrações dos reagentes e produtos, a temperatura do reator e a temperatura do fluido refrigerante são modelados por equações não-lineares, o que dificulta o projeto de controle dos mesmos.

A falta de estabilidade das condições de operação e as incertezas na cinética das reações químicas estão relacionadas à característica inerentemente dinâmica do processo, e ao fato de estas reações serem extremamente exotérmicas. Isto significa que as condições de operação no início da batelada são bem diferentes das condições ao final da mesma. Além disso, produtos indesejados podem ser formados, alterando a especificação do produto final (BONVIN, 1998).

O desenvolvimento de modelos confiáveis de processos em batelada é bastante desafiador. Na maioria das plantas em batelada das indústrias químicas, existem reações paralelas à reação principal que nem os modelos mais acurados são capazes de mapear (BONVIN, 1998).

As perturbações do processo estão relacionadas a fatores como erros de operação e problemas nos equipamentos e instrumentos operantes. Existem inúmeras perturbações que não são totalmente previsíveis, como por exemplo, impurezas nos reagentes, que podem ocasionar alta variabilidade na produção (SEBORG *et al.*, 2011). Além disso, o aumento da temperatura no reator é um evento dinâmico importante que pode ser medido, mas deve ser monitorado e controlado através de uma malha de controle apropriada (BONVIN, 1998).

A controlabilidade do processo pode ser prejudicada quando uma determinada variável se torna uma restrição à sua operação. Isto ocorre devido aos altos *ranges* de operação e à ausência de um ponto de operação, devido a sua natureza dinâmica, que dificulta o projeto do reator (BONVIN, 1998).

Os sensores de medição *on-line* nem sempre estão disponíveis ou possuem precisão suficiente para medir os amplos *ranges* de operação. Além disso, algumas amostras são retiradas do processo e analisadas no laboratório. A incapacidade de medição de uma determinada variável em tempo real reduz a margem de segurança do processo, levando inclusive a alta variabilidade do produto (SEBORG *et al.*, 2011).

Existem muitos trabalhos sobre diferentes abordagens e ferramentas de controle de reatores em batelada publicados na literatura. Alguns trabalhos representativos serão revistos a seguir.

HUA, ROHANI e JUTAN (2004) propõem um método de controle em cascata que combina otimização e controle para aperfeiçoamento da operação, apesar da condição de conhecimento parcial da taxa de reação. O esquema de controle foi modelado através de equações não-lineares de balanços de massa e energia e mostrou a eficiência do controle em cascata em processos onde existem incertezas na modelagem.

ROTSTEIN e LEWING (1992) utilizaram ferramentas de estabilidade robustas para o projeto de controladores de temperatura lineares de um reator em batelada. Os controladores resultantes, do tipo PI e PID, podem tolerar incertezas no ganho do processo e dinâmicas não-modeladas. A desvantagem desta abordagem é a dificuldade no desenvolvimento do modelo linear, já que os reatores em batelada não operam em estado estacionário.

COTT e MACCHIETTO (1989) desenvolveram um controlador usando uma ferramenta de estimativa baseada em modelo para o calor liberado durante a reação exotérmica em um reator em batelada. A parte de controle *feedback* foi projetada a partir de um algoritmo de GMC (*Generic Model Control*) e demonstrou ser bastante robusta em relação às alterações nos parâmetros e incertezas do modelo, já que este algoritmo introduz uma ação integral ao controle de forma a compensá-las.

RAMIREZ e ALVAREZ (2005) desenvolveram uma estratégia de controle robusta para regulação de temperatura em reatores químicos em batelada e semi-batelada. O controlador *feedback* é composto por um sistema de linearização por aproximação de I/O, equipado com um estimador de balanço calorimétrico. Baseando-se nos resultados de perturbações, os autores comprovaram que o controlador *feedback* pode rastrear a trajetória da temperatura ajustando apenas a estimativa de um parâmetro.

CAPÍTULO 3

3. DETECÇÃO E DIAGNÓSTICO DE FALHAS

Este capítulo apresenta uma revisão bibliográfica de alguns dos principais métodos utilizados para detecção e diagnóstico de falhas em processos químicos, bem como das ferramentas utilizadas neste estudo. Assim, uma breve revisão sobre os fundamentos de detecção e diagnóstico de falhas é apresentada no item 3.1. O item 3.2 apresenta a terminologia utilizada na presente dissertação. As características dos sistemas de detecção e diagnóstico de falhas são apresentadas no item 3.3. O item 3.4 descreve as ferramentas e métodos utilizados neste estudo. O item 3.5 apresenta as referências de aplicações das técnicas de detecção e diagnóstico de falhas em processos químicos.

3.1 Fundamentos

As demandas crescentes de sistemas de alto desempenho, a qualidade dos produtos e a eficiência do custo de produção são fatores que contribuem para o desenvolvimento de sistemas de monitoração e controle mais seguros e confiáveis. A forma mais tradicional de melhorar a confiabilidade de um sistema é aumentar a qualidade, segurança e robustez dos componentes do mesmo, como sensores, atuadores e controladores. Mesmo assim, um sistema livre de falhas não pode ser garantido. Por esta razão, a monitoração de processos e o diagnóstico de falhas se tornaram partes fundamentais dos sistemas automáticos de controle atuais (DING, 2008).

Os mais frequentes tipos de falhas que ocorrem em processos químicos são: falhas em atuadores (como alimentação elétrica, falhas em bombas e válvulas), falhas no processo (como variações abruptas de alguns parâmetros, reações indesejáveis devido a impurezas nos insumos) e falhas nos sensores (CACCAVALE *et al.*, 2009).

Além da detecção da falha, alguns outros procedimentos estão associados à monitoração do processo, como a identificação e o diagnóstico da falha e a recuperação do

processo exposto à ocorrência da mesma. A detecção da falha é a determinação de sua ocorrência. Uma detecção prévia pode possibilitar a prevenção de problemas, uma vez que o operador pode tomar decisões para evitar graves perturbações no processo. A identificação da falha é a determinação de quais variáveis são mais relevantes no seu diagnóstico. O propósito deste procedimento é voltar a atenção do operador do processo aos subsistemas mais pertinentes ao diagnóstico da falha, de forma a eliminá-la de maneira mais eficiente. O diagnóstico da falha determina o tipo, a localização, a magnitude e a duração da falha. A recuperação do processo, também chamada "intervenção", é a remoção do efeito da falha, sendo necessária para o fechamento do ciclo de monitoração do processo (Figura 3.1). Assim, toda vez que uma falha é detectada, os procedimentos descritos são empregados na respectiva sequência; de outra forma, apenas o processo de detecção de falha é repetido (CHIANG, RUSSELL e BRAATZ, 2001).

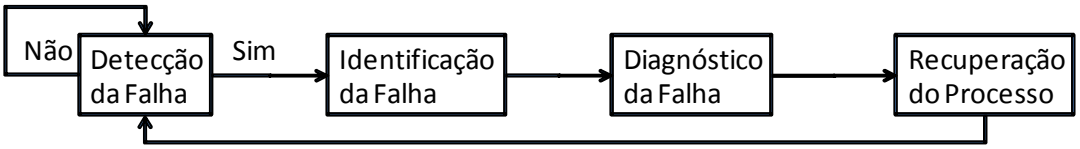

Figura 3.1 – Esquema do ciclo de monitoração do processo (CHIANG, RUSSELL e BRAATZ, 2001)

A detecção precoce e acurada de uma falha é um atributo desejável. Contudo, o desafio no seu reconhecimento é devido ao fato de uma resposta rápida ao diagnóstico da falha e um desempenho tolerável durante a operação normal serem dois objetivos conflitantes (VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003a).

3.2 Definições Importantes

O termo "falha" (do inglês *fault*) é definido por HIMMELBLAU (1978) como o distanciamento do limite aceitável de uma variável observada ou parâmetro calculado associados a um processo.

De acordo com ISERMANN (2006), a falha é um desvio não permitido de pelo menos uma propriedade característica do sistema das condições aceitável, usual e padrão. Como se trata de uma condição anormal, a falha pode causar redução ou perda da

capacidade operacional de uma função requerida, e pode ocorrer em um processo que esteja ou não em operação.

O defeito (do inglês *failure*) difere-se da falha por ser uma interrupção permanente de um sistema realizar uma determinada operação sob condições especificadas. Trata-se de um evento que pode ser decorrente de uma ou mais falhas. Já o mau funcionamento (do inglês *malfunction*) pode ser definido como a interrupção temporária da operação de um sistema e também pode ser resultado de uma ou mais falhas. Geralmente o mau funcionamento aparece após o início de uma operação ou pelo aumento do *stress* de um determinado sistema (ISERMANN, 2006).

A tabela a seguir apresenta uma comparação da ocorrência dos eventos descritos acima.

Tabela 3.1 – Exemplos de Falhas, Defeitos e Mau Funcionamentos (adaptado de ISERMANN, 2006)

Processo	**Falha**	**Efeito**	**Defeito**	**Mau Funcionamento**
Iluminação elétrica	Relé com contatos corroídos	Ocasional falta de condutividade elétrica	-	Interrupção da luz
	Ruptura de cabo	Falta de condutividade elétrica	Falta de luz	-
Válvula Pneumática	Vazamento na linha de suprimento de ar	Lentidão na operação e limitação na posição de abertura/fechamento	-	Não corresponde ao comando do controlador por algum tempo
	Corrosão dos internos	Alta fricção mecânica	Desvio permanente do controle	-

Processo	Falha	Efeito	Defeito	Mau Funcionamento
Motor elétrico	Desgaste	Alta resistência da armadura	-	Torque ocasionalmente interrompido e alteração de velocidade
	Rompimento de cabo na excitação da bobina	Falta de fluxo elétrico	Falta de torque e de velocidade	-

3.3 Características dos Sistemas de Detecção e Diagnóstico de Falhas

De acordo com ISERMANN (2006), os sistemas de controle automáticos atuais possuem funções supervisórias que se destinam a indicar estados não permitidos ou indesejados do processo, e executar as ações apropriadas, de forma a mantê-lo nas condições de operação especificadas e evitar danos e acidentes. As funções de medição e controle, supervisão e monitoração distinguem-se de acordo com seus níveis de hierarquia, conforme apresentado na Figura 3.2:

a) Monitoração: As variáveis medidas são comparadas com os valores de tolerância e, caso estejam fora destes limites, são gerados alarmes para orientação do operador;

b) Proteção automática: No caso de o processo se encontrar em um estado perigoso, a função de monitoração geralmente inicia a ação de mitigação apropriada;

c) Supervisão com diagnóstico de falhas: As variáveis do processo são medidas e comparadas, são gerados os sintomas através da detecção de mudanças, e o

diagnóstico de falhas é realizado para propiciar ao operador a tomada de decisão apropriada.

d) Ações de supervisão e gerenciamento das falhas: Dependendo da classe de risco das falhas detectadas, as seguintes ações podem ser tomadas:

- transferência do sistema para condição segura, ou seja, parada do processo;
- transferência do sistema para condição confiável, ou seja, alteração de algumas condições de operação de forma a reduzir seus riscos;
- reconfiguração utilizando outros sensores, atuadores ou componentes redundantes;
- inspeção para realizar um diagnóstico detalhado através de medições adicionais;
- manutenção para retirada, troca ou ajuste do(s) agente(s) causador(es) da falha;
- reparo para remoção da falha.

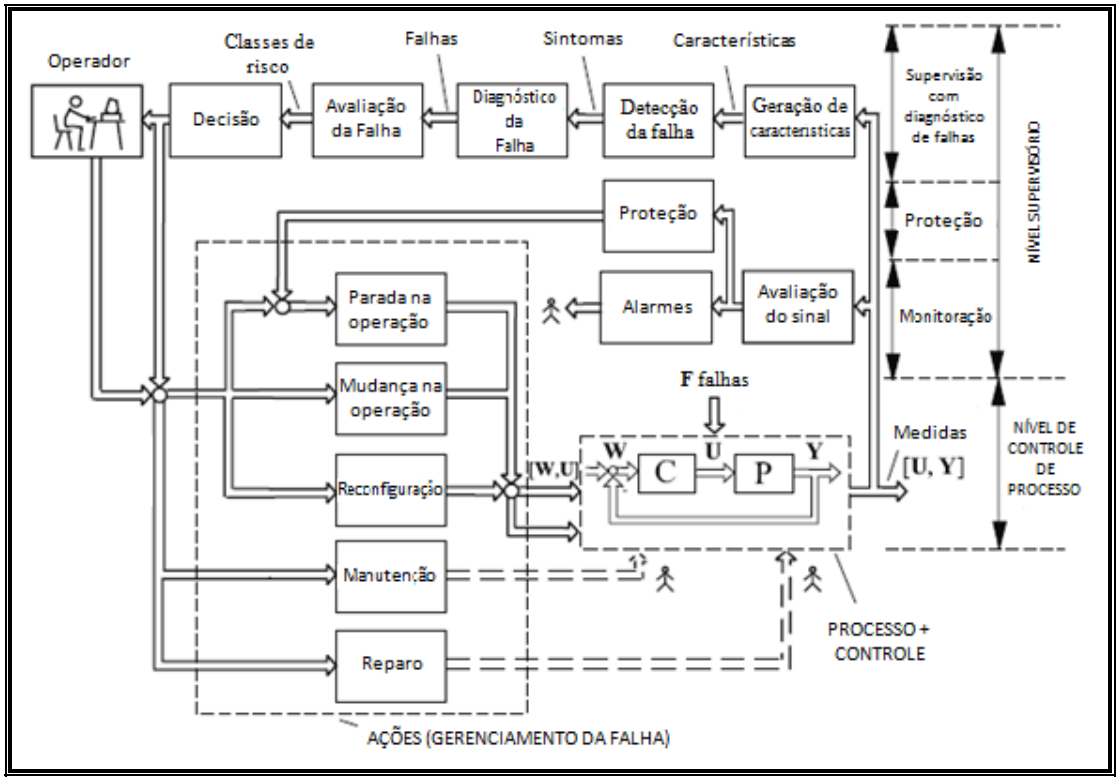

Figura 3.2 – Esquema geral dos diferentes métodos de supervisão com gerenciamento de falhas (ISERMANN, 2006)

As funções descritas nos itens a) e b) são as mais utilizadas nas plantas de processo, devido a sua simplicidade e confiabilidade. Já as citadas nos itens c) e d) são complementares às primeiras e foram desenvolvidas de forma a auxiliar o operador na tomada de decisão. Embora sejam mais elaboradas, as funções citadas nos itens c) e d) necessitam de um sistema de detecção e diagnóstico de falhas com os seguintes requisitos (DASH e VENKATASUBRAMANIAN, 2000):

- Rapidez na detecção e diagnóstico;
- Isolabilidade, ou seja, capacidade de realizar distinção entre as diferentes falhas;
- Robustez a ruídos e incertezas de medição;
- Capacidade de decisão, dadas as condições de operação correntes, se o processo está em seu funcionamento normal ou não, identificando as possíveis alterações e se suas causas são ou não conhecidas;

- Capacidade de classificação do erro ocorrido;
- Adaptabilidade, ou seja, caso as condições de processo se alterem devido a perturbações ou condições ambientais, o sistema deve ser adaptável a estas mudanças;
- Facilidade de Explanação, identificando não só a fonte da falha, mas fornecendo informações de sua origem e propagação na operação;
- Mínimo esforço de modelagem, de forma a propiciar um sistema de classificação em tempo real mais rápido;
- Balanço entre baixa complexidade computacional e altos níveis de armazenamento de informações;
- Capacidade de identificação de múltiplas falhas.

3.4 Métodos de Detecção e Diagnóstico de Falhas

Os algoritmos de diagnóstico contemplam dois importantes componentes: o domínio do conhecimento "a priori" e a estratégia de busca da falha. O conhecimento pode ser baseado em modelo ou em dados históricos do processo (VENKATASUBRAMANIAN *et al.,* 2003 a). O conhecimento baseado em dados históricos não requer a modelagem de um sistema, apenas uma base de dados temporais coletados nas condições normais de operação. Já o baseado em modelo, necessita de medições de um conjunto de variáveis de processo, que são comparadas com suas estimativas preditas via modelo matemático do sistema (CACCAVALE *et al.*, 2009).

Os métodos baseados em modelo matemático podem ser quantitativos ou qualitativos. Os quantitativos requerem duas etapas: a verificação de inconsistências ou resíduos (diferença entre várias funções das saídas e os valores esperados destas funções sob condições sem falhas) entre o comportamento real e o esperado, e a escolha de uma regra de decisão para diagnóstico. Neste tipo de estratégia, são empregadas estimativas de estado e de parâmetros. Os resíduos gerados são examinados e funções de decisão são calculadas baseadas nos resíduos e regras de decisão (lógica) (DE SOUZA Jr., 2005). Os

métodos qualitativos envolvem modelos causais ou hierarquias de abstração (VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003b).

Os métodos baseados em dados históricos necessitam apenas da disponibilidade do histórico dos dados de processo. Existem formas diferentes pelas quais estes dados podem ser transformados e apresentados como um conhecimento "a priori" para um sistema de diagnóstico. Uma destas formas é denominada extração de características que pode ser qualitativa ou quantitativa. Existem dois grandes métodos que extraem informação histórica qualitativa: os sistemas especialistas e os baseados em modelagem de tendências. Os métodos que extraem informações quantitativas podem ser classificados como estatísticos ou não estatísticos (VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003c).

A Figura 3.3 traz uma síntese dos principais métodos apresentados acima.

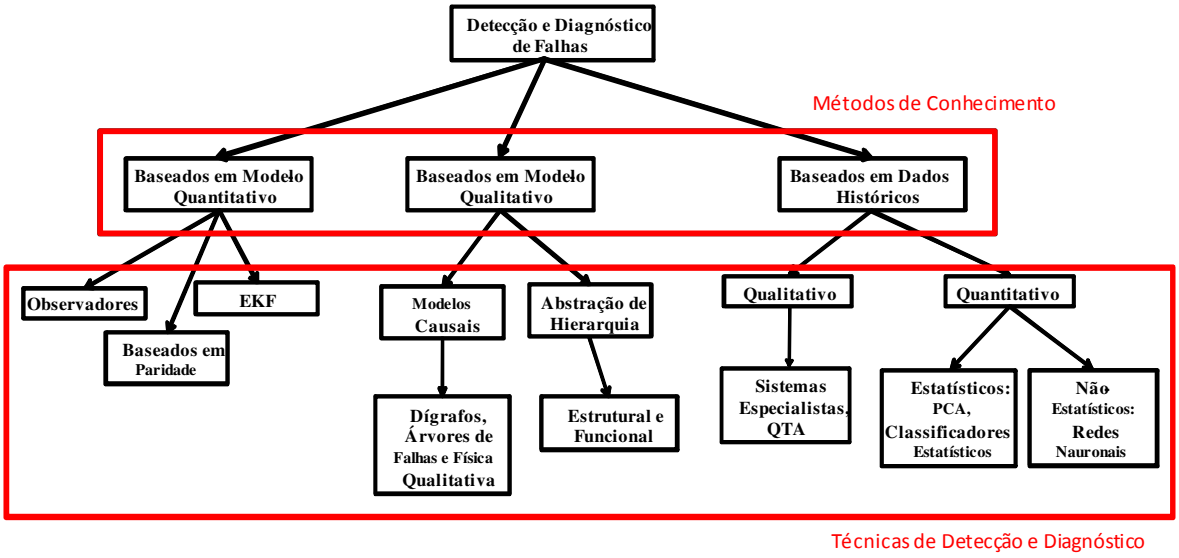

Figura 3.3 – Classificação dos sistemas de diagnóstico (Adaptado de VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003a)

De acordo com VENKATASUBRAMANIAN *et al.*, 2003, estudos comparativos identificam que cada método possui vantagens e desvantagens, e que nenhum método isolado possui todas as características desejáveis para um bom sistema de diagnóstico. Na visão dos autores, alguns dos métodos citados podem se complementar resultando em sistemas de diagnóstico mais eficientes. A integração das características complementares de cada um é o caminho para o desenvolvimento de sistemas híbridos que podem ultrapassar suas limitações.

A presente dissertação abordará as redes neuronais, que são métodos quantitativos baseados em dados históricos. Os demais métodos podem ser mais bem detalhados nos artigos e livros citados posteriormente. A partir deste ponto da dissertação, a metodologia de detecção e diagnóstico de falhas será mencionada como FDD.

3.4.1 Redes Neuronais Artificiais

As redes neuronais artificiais (RNA – do inglês *Artificial Neural Networks - ANN*) são ferramentas de processamento de informações não-lineares inspiradas no funcionamento do cérebro humano. O cérebro é composto de cerca de 10 bilhões de neurônios que são utilizados para o processamento das informações (HAYKIN, 2001). Os neurônios estão maciçamente interconectados através de *links* de conexão denominados sinapses. Cada neurônio possui estruturas ramificadas de entrada, denominadas dendritos, e de saída, denominadas axônios. Através da sinapse, o axônio de uma célula conecta-se aos dendritos de outra (DE SOUZA Jr., 2008).

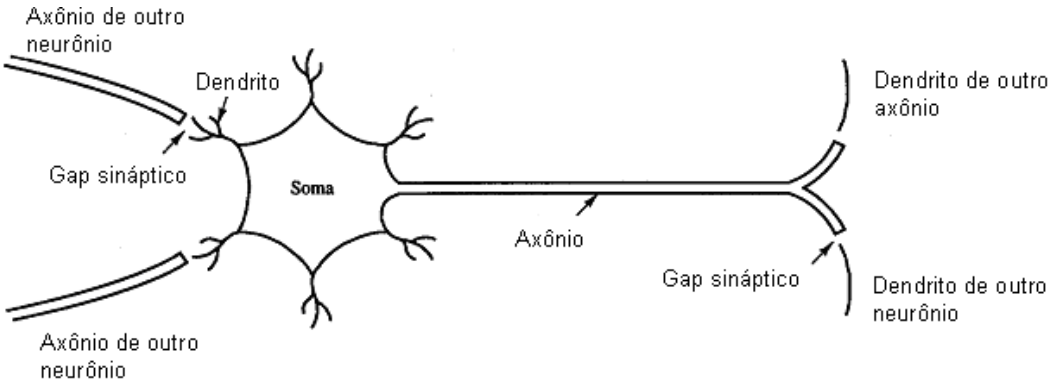

Figura 3.4 – Estrutura do cérebro humano (FAUSETT, 1993)

A grande vantagem das redes neuronais é que, uma vez treinadas, produzem um mapeamento das entradas e/ou saídas de forma mais rápida e precisa que muitas modelagens determinísticas rigorosas (MUJTABA, AZIZ e HUSSAIN, 2006). A grande desvantagem das redes é a incapacidade para grandes extrapolações (MEDINA e PAREDES, 2009).

3.4.1.1 Arquiteturas das Redes Neuronais

A arquitetura de uma rede neuronal está relacionada com a maneira como seus neurônios se organizam e com o algoritmo de aprendizado utilizado em seu treinamento. Segundo HAYKIN (2001), existem três diferentes classes de arquitetura:

1. Redes *Feedforward* com uma única camada: Neste tipo de arquitetura, os neurônios são organizados em uma única camada. Existe uma camada de entrada e uma única camada de neurônios de saída e a denominação *feedforward* deve-se ao fato do fluxo da informação ser sempre no sentido da camada de entrada para a camada de saída, conforme a Figura 3.5.

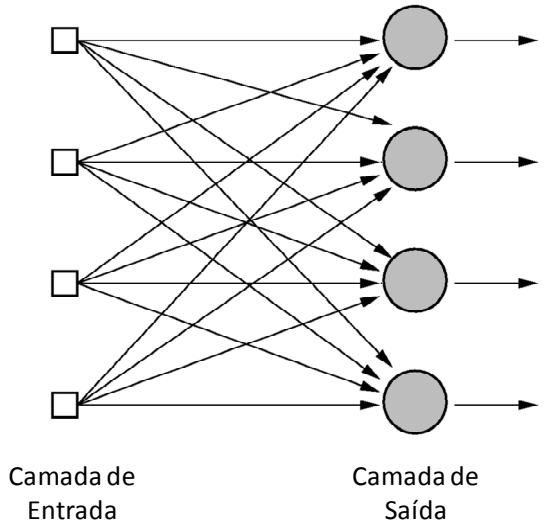

Figura 3.5 – Estrutura da Rede *Feedforward* com uma única camada (HAYKIN, 2001)

2. Redes *Feedforward* multi-camadas: Esta classe se distingue por possuir uma ou mais camadas escondidas de neurônios, chamados neurônios escondidos ou unidades escondidas. Os nós da camada de entrada fornecem os sinais de entrada ou elementos de ativação que são aplicados aos neurônios da segunda camada (primeira camada escondida). Os sinais de saída desta camada são utilizados como entradas para a próxima camada, e assim por diante, dependendo do número de camadas escondidas da rede. O conjunto de sinais de saída da última camada constitui as respostas da rede às ativações da camada de entrada. A Figura 3.6 representa a arquitetura desta rede.

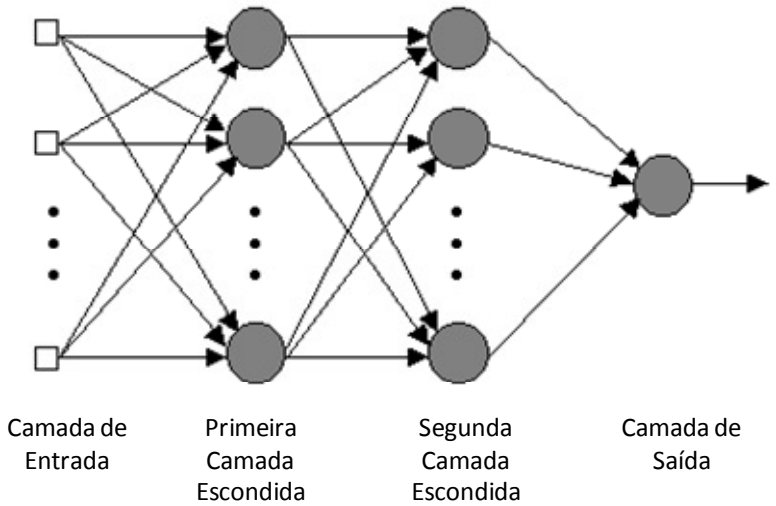

Figura 3.6 – Estrutura da Rede *Feedforward* com mais de uma camada escondida (HAYKIN, 2001)

3. Redes *Feedback* ou Recorrentes: Esta arquitetura se distingue da *feedforward* pelo fato de possuir uma ou mais retroalimentações. Pode possuir ou não camadas escondidas e se caracteriza pelo fato de os sinais de saídas serem enviados de volta à camada de entrada, ao próprio neurônio camada de saída, ou aos neurônios das camadas escondidas. A Figura 3.7 e a Figura 3.8 ilustram estas situações.

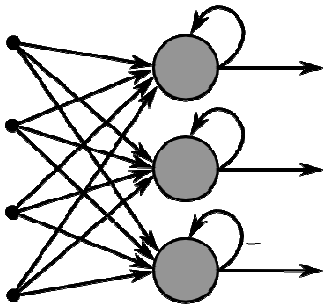

Figura 3.7 – Estrutura da Rede *Feedback* com retroalimentação na camada de saída

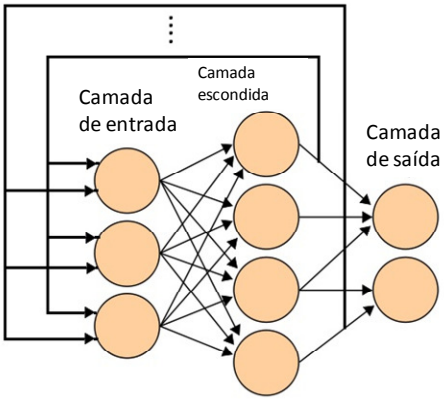

Figura 3.8 – Estrutura da Rede *Feedback* com retroalimentação na camada de entrada

3.4.1.2 Tipos de treinamento das redes neuronais

Uma rede neuronal torna-se capaz de processar eficientemente dados numéricos após uma etapa denominada *treinamento*, na qual é submetida a diversos padrões de dados de entrada e saída. Os métodos de treinamento podem ser classificados em duas categorias (DE SOUZA Jr, 2005):

- Supervisionado: método no qual existe um "professor" que orienta a rede sobre o comportamento correto a ser seguido diante das variáveis de entrada. Isto significa que as redes são treinadas por experiência, de acordo com os padrões de dados de estrada e saída apresentados as mesmas. Assim, ela modifica seus parâmetros a fim de se obter as saídas desejadas. Um modelo interno do processo é criado pela rede, permitindo a predição de novos padrões de dados de entrada, através de interpolações e extrapolações.

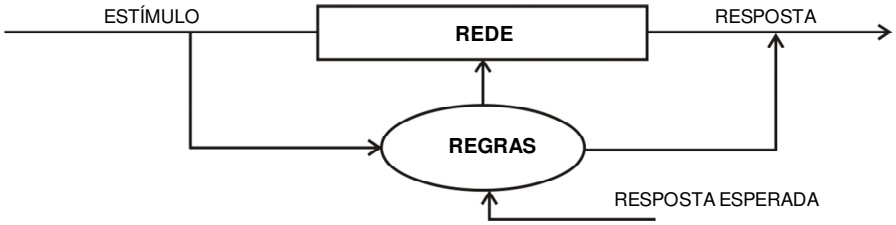

Figura 3.9 – Esquema do aprendizado supervisionado

- Não-Supervisionado: método no qual a rede aprende de forma autônoma. Não existe um "professor" indicando a resposta desejada para os padrões de entrada.

Os dados de entrada são apresentados a rede, que descobre alguma propriedade nos mesmos e aprende como predizer estas propriedades nas suas saídas, sem qualquer orientação.

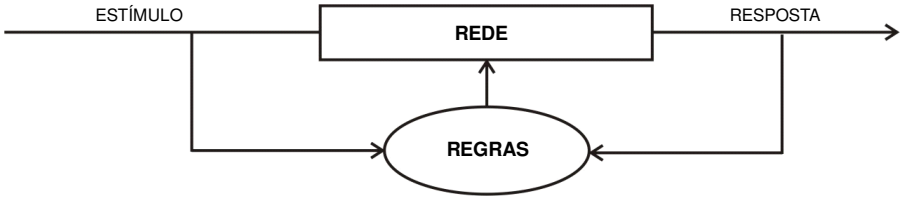

Figura 3.10 – Esquema do aprendizado não-supervisionado

3.4.1.3 Aplicações das Redes Neuronais

As redes neuronais são muito utilizadas como técnica de detecção e diagnóstico de falhas na predição do comportamento de sistemas. De forma geral, são utilizadas em dois tipos de problema (DE SOUZA Jr., 2008):

- Classificação: O objetivo é determinar a que classe pertence um determinado número de entradas. Neste caso, a saída requerida é uma variável nominal, que pode ser composta por apenas um estado ou muitos estados.

- Regressão: O objetivo é prever o valor de uma variável contínua. Neste caso, a saída requerida é uma variável numérica.

As redes neuronais não são capazes de executar as tarefas de regressão e classificação simultaneamente, ou seja, durante o treinamento dos dados é especificado apenas um tipo de problema (http://www.statsoft.com/textbook/neural-networks/).

3.4.1.4 Tipos de Redes Neuronais

Esta dissertação não abrangerá extensa revisão sobre os tipos de redes neuronais, uma vez que se trata de um assunto amplamente discutido na literatura utilizada como referência deste capítulo. Neste trabalho, foram exploradas e aplicadas as redes neuronais Lineares, MLP, RBF e Mapas Auto-Organizáveis, que estão entre as mais aplicadas e representativas.

3.4.1.4.1 Redes Lineares

As redes neuronais lineares possuem apenas duas camadas: uma de entrada e uma de saída. Os dados de entrada são propagados da camada de entrada com *n* neurônios para a camada de saída com *m* neurônios, conforme a Figura 3.11.

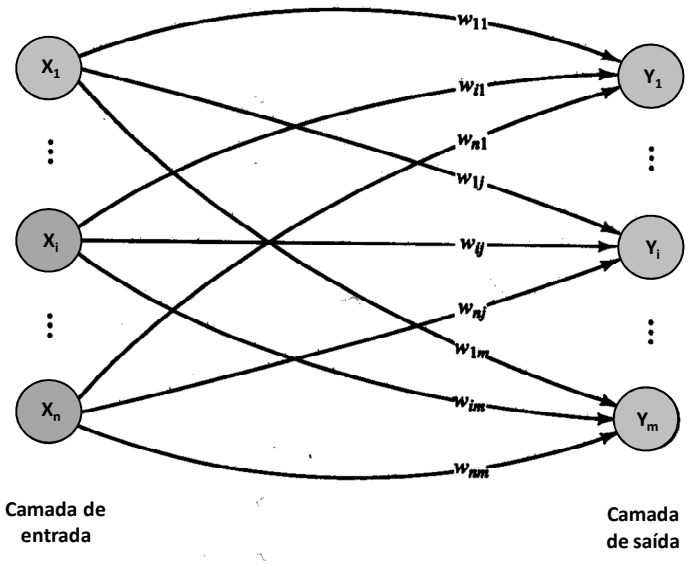

Figura 3.11 – Esquema de uma rede linear (HAYKIN, 2001)

A camada de saída possui como função de ativação um somatório ponderado de suas entradas (DE ALENCAR e DE SOUZA Jr., 2007):

$$y_m(x) = \sum_{k=1}^{n} w_k \cdot x_k \tag{3.10}$$

Geralmente, utiliza-se este tipo de rede quando outra com modelagem mais complexa não produz um bom ajuste dos dados. O treinamento mais comum para este tipo de rede é realizado através do algoritmo *Pseudo-Inverse*.

3.4.1.4.2 Redes Perceptron Multi-Camadas (MLP)

As redes MLP possuem arquitetura *feedfoward* e seus neurônios são denominados *perceptrons*. São compostas de camadas de entrada, saída e escondidas. O número de neurônios de entrada e saída são definidos pelo problema a ser estudado, e o número de camadas escondidas é definido na solução do problema.

O modelo matemático de um neurônio da camada *k* de uma rede é ilustrado na Figura 3.12. Cada *link* de conexão dos sinais de entrada *s* é associado a um peso *w*, cuja função é multiplicar o sinal transmitido. Cada neurônio aplica uma função de ativação *F(.)*, geralmente não-linear, à soma dos sinais de entrada com seus respectivos pesos, de forma a determinar o sinal de saída para a próxima camada *k+1*(FAUSETT, 1993). Existe ainda, um parâmetro externo aplicado à soma dos sinais de entrada, denominado *bias* (θ), cuja função é aumentar ou diminuir o efeito dos sinais de entrada da função de ativação, dependendo se esta é positiva ou negativa (HAYKIN, 2001).

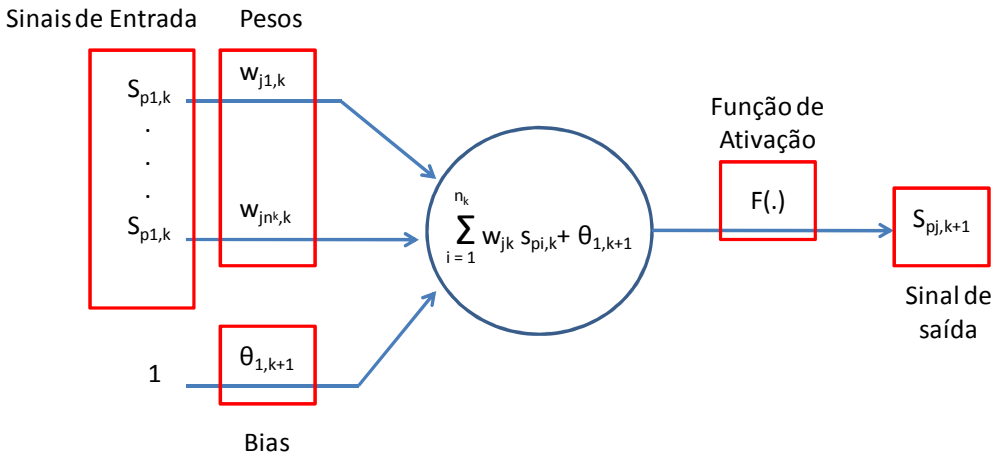

Figura 3.12 – Modelo matemático de um neurônio (DE SOUZA Jr., 2008)

O processamento dos sinais de entrada pelo neurônio é modelado por:

$$\lambda_{pj,k+1} = \left[\sum_{i=1}^{nk} w_{ijk}\, s_{pi,k} \right] + \theta_{j,k+1} \tag{3.11}$$

O neurônio produz uma resposta para este sinal, $s_{pj,\,k+1}$ de acordo com a função de ativação *F(.)* (DE SOUZA Jr., 2008), que pode ser classificada de acordo com os seguintes tipos:

- Linear:

$$F(\lambda_{pj,k+1}) = \lambda_{pj,k+1} \tag{3.12}$$

- Sigmoidal:

$$F(\lambda_{pj,k+1}) = [1 + \exp(-\lambda_{pj,k+1})]^{-1} \quad (3.13)$$

- Tangente Hiperbólica:

$$F(\lambda_{pj,k+1}) = \tanh(\lambda_{pj,k+1}) \quad (3.14)$$

- Softmax:

$$F(\lambda_{pj,k+1}) = \exp(\lambda_{pj,k+1}) \cdot \left[\sum_i (\exp(\lambda_{pi,k+1})) \right]^{-1} \quad (3.15)$$

O treinamento da rede determina e modifica seus pesos e *biases*, usando dados históricos, de forma a aperfeiçoar sua atuação na predição dos valores de saída do sistema. Existem vários algoritmos de treinamento das redes MLP, mas os mais empregados são o *backpropagation*, desenvolvido por Rumelhart, Hinton e Williams (1986) e o método do gradiente conjugado.

3.4.1.4.3 Redes RBF

As redes neuronais de base radial (do inglês *Radial Basis Functions – RBF*) são redes multicamadas, que possuem mais neurônios que as redes *feedforward* e necessitam de menos tempo de treinamento. Possuem três camadas: uma camada de entrada linear, uma camada escondida não-linear e uma camada de saída linear.

A camada de entrada possui N neurônios, onde N é a dimensão do vetor de entradas $x = x_1, x_2, ..., x_N$. As conexões da camada de entrada não são ponderadas e conduzem os sinais de entrada para a camada escondida, que possui H neurônios. As funções de ativação dos neurônios da camada escondida são Gaussianas. A Figura 3.13 ilustra a arquitetura deste tipo de rede.

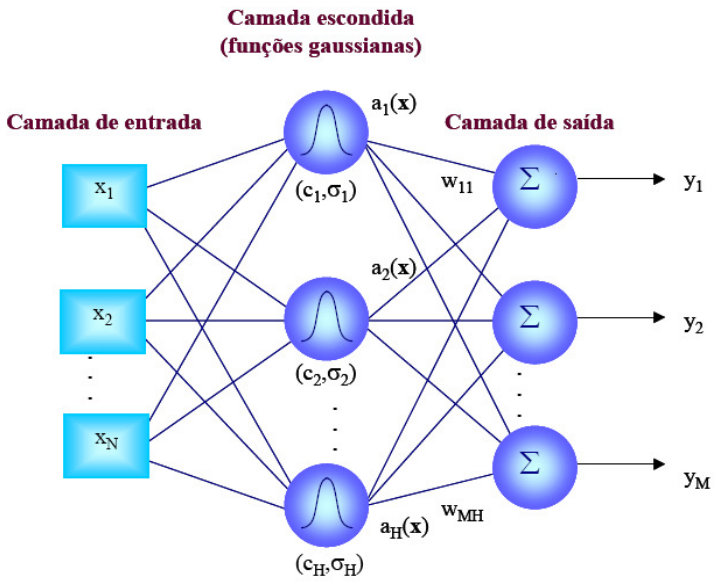

Figura 3.13 – Arquitetura da rede RBF

As funções de ativação gaussianas possuem valor máximo em seu centro c_h, e decrescem à medida que existe um aumento de distância em relação à c_h. Por esta razão, cada neurônio da camada escondida possui uma região de ativação finita. A região de ativação é determinada a partir da distância euclidiana entre o vetor de entradas x e o seu centro c_h, ponderada pela constante σ_h, denominada fator de escala ou desvio padrão (DE SOUZA Jr., 2008):

$$a_h(x) = \exp\left(\frac{-\|x - c_h\|^2}{\sigma_h^{\,2}}\right) \tag{3.16}$$

Os sinais que deixam a camada escondida são conduzidos à camada de saída, que possui M neurônios de função de ativação soma linear, onde M corresponde ao número de variáveis de saída. Cada conexão entre a camada escondida e a camada de saída possui um peso w_{mh}. A saída da rede é dada pela soma das entradas ponderadas:

$$y_m(x) = \sum_{h=1}^{H} w_{mh} \cdot a_h(x) \quad \text{onde} \quad m = 1, \ldots, M \tag{3.17}$$

A partir dos sinais de saída da última camada, determina-se qual dos *M* neurônios é o vencedor. Em termos práticos de classificação, verifica-se em qual dos *M* padrões se classificam os dados pertencentes ao vetor de entradas *x* (DE SOUZA Jr., 2008).

O treinamento das redes RBF é realizado em três estágios:

1. Localização dos centros: os centros (c) armazenados em uma camada escondida radial são otimizados usando-se técnicas de treinamento não supervisionado e são localizados através do algoritmo *K-means*. Este algoritmo estabelece os centros para refletir o agrupamento dos dados.

2. Estabelecimento dos desvios: O espalhamento dos dados é refletido nos desvios (σ), que podem ser estabelecidos pelo método *P-Nearest Neighbor*.

3. Otimização linear: Uma vez estabelecidos os centros, os valores da matriz de pesos entre a camada escondida e a camada de saída são ajustados usando uma técnica de regressão linear (otimização por mínimos quadrados).

3.4.1.4.4 Redes SOFM

As redes neuronais SOFM (do inglês – *Self-Organizing Feature Maps – SOFM* ou *SOM*) são baseadas no conceito de *Mapeamento Auto-Organizável de Características* desenvolvido por Teuvo Kohonen em 1982. Caracterizam-se pela possibilidade de aprendizagem não-supervisionada, na qual não é necessário especificar uma variável de saída (DE SOUZA Jr., 2008).

O desenvolvimento das redes SOFM foi baseado no funcionamento do cérebro humano, que é organizado em regiões com funções bem definidas. O sistema nervoso funciona como uma estrutura de processamento de informações a partir de impulsos químicos e elétricos. Isto significa que as entradas sensoriais são mapeadas em diferentes regiões do cérebro, de forma topologicamente ordenada, de modo que cada tipo de entrada ativa uma determinada região por reconhecimento de padrão.

De acordo com SONG e HOPKE (1996), a rede SOFM possui duas camadas de neurônios: uma camada de entrada e uma camada de saída, conforme ilustrado na Figura

3.14. A camada de entrada funciona apenas como uma passagem para o vetor de entrada. A camada de saída possui neurônios ordenados em uma matriz bi-dimensional, ou mapa topológico, onde cada um deles é associado a um vetor peso e recebe informações do vetor de entrada. A dimensão dos vetores peso é igual ao número de espécies medidas do vetor de entrada.

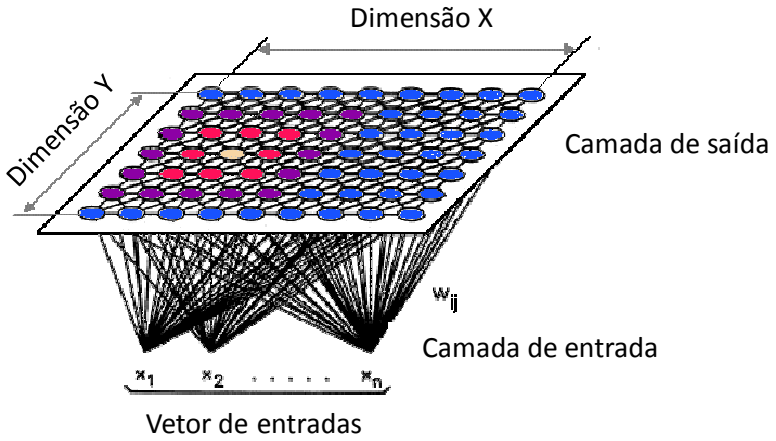

Figura 3.14 – Modelo da Rede SOFM bi-dimensional

No treinamento aplicado a este tipo de rede, denominado *treinamento de Kohonen*, os pesos associados aos neurônios modificam-se e tendem a grupos característicos, sob influência da distribuição dos dados de entrada. O neurônio com maior resposta a um determinado padrão de vetor de entrada tem seus pesos atualizados. Os pesos dos neurônios vizinhos também são atualizados, garantindo caráter competitivo à rede. No início do treinamento, as vizinhanças de atualização são grandes e vão se reduzindo no decorrer do mesmo, favorecendo a seletividade entre os padrões de entrada e formando regiões de maior atividade em torno do neurônio vencedor (BOTTER *et al*, 2005). Estas regiões são denominadas *clusters* e ficam mais próximas do vetor de entrada. Assume-se que este vetor são grupos de padrões de elementos semelhantes. Um padrão específico tenderá a controlar um neurônio específico, rotacionando o seu vetor peso em direção ao centro da classe, tornando-o mais provável de ser o ganhador quando qualquer neurônio daquele padrão for aplicado na entrada da rede (DE SOUZA, 2008). O neurônio que "vence" a competição é denominado *winner-takes-all* ou neurônio vencedor.

O algoritmo de treinamento de Kohonen possui seguintes etapas (DE SOUZA Jr., 2008):

1. Aplica-se um vetor de entradas x na rede;

2. Calcula-se a distância euclidiana d_j (no espaço de dimensão N) entre x e o vetor do peso w_j de cada neurônio :

$$d_j = \sqrt{\left[\sum_i \left(x_i - w_{ij}\right)^2\right]} \tag{3.18}$$

3. O neurônio que possuir o vetor peso (w_c) mais próximo de x é declarado o vencedor. w_c torna-se o centro de um grupo de vetores que residem dentro de uma distância d de w_c.

4. Treina-se o grupo de vetores pesos vizinhos para todos os pesos dentro de uma distância d de w_c:

$$w_j(t+1) = w_j(t) + \alpha\left[x - w_j(t)\right] \tag{3.19}$$

   Onde α é a taxa de treinamento ou aprendizado da rede, que pode variar de 0 a 1.

5. Executam-se os passos de 1 a 4 para cada vetor de entrada.

Embora nenhuma variável de saída seja requerida pelas redes SOM, é permitido que se atribua uma variável de saída categórica para utilizar como um guia na rotulagem dos *clusters* observados (DE SOUZA Jr., 2008).

3.5 Revisão de aplicações de FDD em processos químicos

Existe uma grande demanda para trabalhos acadêmicos e industriais na área de detecção e diagnóstico de falhas em processos químicos, especialmente os dinâmicos, já que ainda são pouco explorados. O IFAC (*International Federation of Automatic Control*) possui um comitê técnico para estudo e investimentos no desenvolvimento desta área. Há também um consórcio internacional, englobando empresa e universidades, voltado para investigações na área de gerenciamento de eventos anormais (*Abnormal Situation Managment Consotium* – ASM – http://www.asmconsortium.net/Pages/default.aspx e http://www.safeprocess.es.aau.dk).

Os itens a seguir relacionam algumas das principais publicações sobre aplicações de FDD em processos químicos.

3.5.1 Aplicações baseadas em redes neuronais

O estudo de aplicações de FDD em processos químicos realizado por Himmelblau em 1978 (HIMMELBLAU, 1978) foi um marco importante para o desenvolvimento e aplicação desta técnica.

HOSKINS e HIMMELBLAU (1988) descrevem as características das redes neuronais recomendadas para FDD em processos químicos e demonstram como uma rede neuronal artificial pode aprender e identificar as falhas de forma bem sucedida. O estudo de caso foi baseado num processo químico com três reatores CSTR em estado estacionário e em uma rede MLP *feedfoward* com algoritmo *backpropagation*.

VENKATASUBRAMANIAN, VAIDYANATHAN e YAMAMOTO (1990) estudaram FDD em reatores químicos em estado estacionário utilizando redes neuronais. Foram analisadas falhas em sensores e o efeito da degradação de diferentes unidades escondidas no desempenho da rede, através de dois tipos de arquitetura de redes: com uma camada e multi-camadas. De acordo com os autores, geralmente, uma única falha é causada por um conjunto de sintomas e as redes treinadas para detecção de uma única falha são capazes de diagnosticar, de forma acurada, padrões resultantes da ocorrência de múltiplas falhas.

SORSA, KOIVO e KOIVISTO (1991) utilizaram uma rede MLP com função de ativação tipo tangente hiperbólica para FDD em um sistema com um CSTR e um trocador de calor. A rede treinada foi capaz de reconhecer, detectar e classificar as falhas corretamente após três mil ciclos de treinamento. Contudo, os autores reconhecem como desvantagens o lento treinamento da rede e o fato de necessitarem de novo treinamento após o surgimento de uma nova falha.

VAIDYANATHAN e VENKATASUBRAMANIAN (1992) realizaram um estudo sobre o uso de redes neuronais para FDD em processos dinâmicos. Utilizaram como estudo de caso a detecção e diagnóstico de falhas em um reator CSTR utilizando-se uma rede

feedforward e o algoritmo *backpropagation* para treinamento. Foram utilizados, como vetores de entrada das redes, dados brutos e a média destes dados no intervalo de amostragem. As saídas desejadas da rede na etapa de treinamento foram discretizadas utilizando-se métodos linear e exponencial.

FAN, NIKOLAOU e WHITE (1993), realizaram um estudo sobre FDD em processos químicos em estado estacionário, utilizando redes neuronais artificiais. Uma rede *backpropagation* convencional foi reforçada com a inclusão de unidades funcionais em sua camada de entrada, técnica que constituiu uma ampliação da capacidade da rede de representar relações não-lineares complexas e possibilitou o diagnóstico simultâneo de múltiplas falhas e seus níveis de correspondência em um processo químico.

WATANABE et al. (1994), estudaram um novo tipo de arquitetura de redes neuronais para FDD em um reator químico, denominadas HANN (*Hierarchical Artificial Neural Networks*), e a melhor forma de treinamento para os padrões apresentados às redes. As redes HANN dividem um grande número de padrões em conjuntos menores para uma classificação mais eficiente pelas redes neuronais. Uma das vantagens deste tipo de arquitetura é que falhas múltiplas podem ser detectadas nos novos padrões, mesmo que a rede tenha sido treinada para uma única falha.

WANG (1995) apresentou uma nova abordagem sobre FDD de atuadores em sistemas dinâmicos não-lineares. O algoritmo de diagnóstico é desenvolvido e realiza uma estimativa da falha para que o erro entre a saída do sistema e o modelo seja minimizado. Foram estudados sistemas não-lineares desconhecidos, utilizando-se redes neuronais *feedforward*, para estimativa do sistema sem falhas. Estas redes treinadas foram utilizadas para realizar FDD de sistemas conhecidos e produziram boas estimativas das falhas.

FUENTE e VEGA (1999) estudaram a aplicação de FDD usando redes neuronais em processos biotecnológicos. De acordo com os autores, os métodos de detecção e diagnóstico convencionais são baseados em modelos estáticos e dinâmicos do processo, sendo as falhas, mudanças de estado ou de condição de operação causadas pelo mau funcionamento da planta.

ROMAGNOLI *et al*. (2009) estudaram a implementação de algumas abordagens topológicas para modelagem e análise de dados de processo, utilizando-se SOM. O estudo foi baseado num processo de tratamento de gás e o objetivo consistia na identificação de modos operacionais importantes e variáveis de processo sensíveis para posterior definição da estratégia de controle a ser empregada.

Salienta-se oportunamente, que as referências acima apresentadas tratam de investigações realizadas, em sua maioria, em processos químicos estacionários. Esta dissertação, ao revés, trata de FDD usando redes neuronais em processo químico dinâmico, visando aumentar o número de pesquisas existentes nesta área de conhecimento.

3.5.2 Aplicações Baseadas em Sistemas Híbridos

Alguns autores propõem a utilização de sistemas híbridos, compostos de mais de um método de detecção e diagnóstico de falhas.

VENKATASUBRAMANIAN e MYLARASWAMY (1997) diagnosticaram que não existe nenhum método isolado de detecção e diagnóstico de falhas mais eficaz que a combinação de vários métodos. O estudo baseia-se em modelos com classificadores estatísticos e métodos de reconhecimento de padrão aplicados a uma unidade industrial de craqueamento catalítico.

CHEN e LIAO (2002) abordaram monitoramento de falhas em processos dinâmicos utilizando redes neuronais e PCA (*Principal Component Analysis*). As redes foram utilizadas para aprender a dinâmica normal do sistema e transformar o processo em um modelo matemático não-linear. A PCA foi utilizada para geração de gráficos de monitoramento baseados nos resíduos da diferença entre os valores das variáveis preditas pelo processo e os valores preditos pela rede neuronal. Assim, os autores concluíram que as duas técnicas aplicadas em conjunto são mais eficazes do que suas aplicações individuais.

CAPÍTULO 4

4. MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO REATOR EM BATELADA COM REAÇÃO EXOTÉRMICA

4.1 Modelagem do processo

O modelo estudado nesta dissertação é baseado em um reator químico batelada não-isotérmico, com sistema de refrigeração, estudado por HUA, ROHANI e JUTAN (2004) e por SOUSA (2010) e ilustrado na Figura 4.1, no qual ocorrem as seguintes reações químicas exotérmicas:

$$(1) \qquad A + B \rightarrow C$$

$$(2) \qquad A + C \rightarrow D$$

onde C é o produto desejado e D o indesejado.

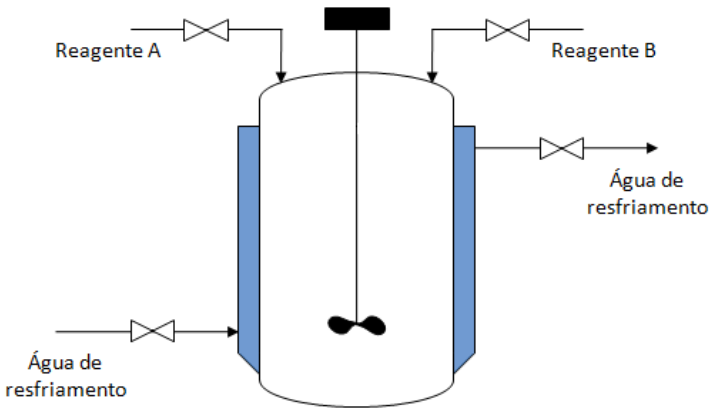

Figura 4.1 – Esquema do reator químico em batelada não-isotérmico

As alimentações dos reagentes A e B duraram quinze minutos cada, sendo A alimentado primeiro e B logo após o final da alimentação de A. O tempo total de alimentação foi de trinta minutos. Após a adição dos reagentes, um catalisador da reação

foi adicionado ao reator, em tempo desprezível para a simulação, e o sistema de refrigeração foi imediatamente acionado. O tempo total de batelada foi de cinco horas.

As equações de modelagem deste sistema, propostas por HUA, ROHANI e JUTAN (2004), são listadas a seguir:

1. Balanços de massa por componente:

$$\frac{dN_A}{dt} = -R_1 - R_2 \tag{4.1}$$

$$\frac{dN_B}{dt} = -R_1 \tag{4.2}$$

$$\frac{dN_C}{dt} = R_1 - R_2 \tag{4.3}$$

$$\frac{dN_D}{dt} = R_2 \tag{4.4}$$

onde:

$$R_1 = k_1 \cdot N_A \cdot N_B \tag{4.5}$$

$$R_2 = k_2 \cdot N_A \cdot N_C \tag{4.6}$$

$$k_1 = \exp\left(k_{11} - \frac{k_{12}}{(T_r + 273{,}15)} \right) \tag{4.7}$$

$$k_2 = \exp\left(k_{21} - \frac{k_{22}}{(T_r + 273{,}15)} \right) \tag{4.8}$$

2. Balanço de Energia:

   - Reator:

$$\frac{dT_r}{dt} = \frac{Q_r + Q_j}{N_r \cdot C_{p_r}} \tag{4.9}$$

   - Camisa de refrigeração:

$$\frac{dT_j}{dt} = \frac{F_j \cdot \rho_j \cdot C_{p_j} \cdot (T_{jin} - T_j) - Q_j}{V_j \cdot \rho_j \cdot C_{p_j}} \tag{4.10}$$

onde:

$$Q_j = U \cdot A_h \cdot (T_j - T_r) \tag{4.11}$$

$$Q_r = (-\Delta H_1) \cdot R_1 + (-\Delta H_2) \cdot R_2 \tag{4.12}$$

$$N_r = N_A + N_B + N_C + N_D \tag{4.13}$$

$$C_{p_r} = \frac{(C_{p_A} \cdot N_A + C_{p_B} \cdot N_B + C_{p_C} \cdot N_C + C_{p_D} \cdot N_D)}{N_r} \tag{4.14}$$

Cabe ressaltar que para a modelagem deste problema, as massas específicas dos reagentes de do fluido refrigerante foram consideradas constantes frente às variações de temperatura.

3. Condições iniciais da reação:

$N_A(0)$ = 12 kmol; $N_B(0)$ = 12 kmol; $N_C(0)$ = 0 kmol; $N_D(0)$ = 0 kmol; $T_r(0)$ = 20 °C; $T_j(0)$ = 20 °C.

4. Parâmetros do modelo: Os parâmetros das equações do modelo estão descritos na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 – Parâmetros do modelo do reator batelada (Adaptado de SOUSA, 2010)

Parâmetro	Definição	Valor
A_h	Área da seção transversal do reator	6,24 m^2
PM_A	Peso molecular do reagente A	30 kg/kmol
PM_B	Peso molecular do reagente B	100 kg/kmol
PM_C	Peso molecular do produto C	130 kg/kmol
PM_D	Peso molecular do produto D	160 kg/kmol
C_{pA}	Capacidade calorífica do reagente A	75,31 kJ/kmol°C
C_{pB}	Capacidade calorífica do reagente B	167,36 kJ/kmol°C
C_{pC}	Capacidade calorífica do produto C	217,57 kJ/kmol°C
C_{pD}	Capacidade calorífica do produto D	334,73 kJ/kmol°C
C_{pj}	Capacidade calorífica do fluido refrigerante	1,8828 kJ/kmol°C
$(-\Delta H_1)$	Calor de reação da reação 1	41840 kJ/kmol
$(-\Delta H_2)$	Calor de reação da reação 2	25105 kJ/kmol
U	Coeficiente de transferência de calor do reator	0,6807 kW/°Cm^2
F_j	Vazão de fluido refrigerante	0,0058 m^3/s
V_j	Volume da jaqueta	0,6912 m^3
ρ_j	Massa específica do fluido refrigerante	1000 kg/m^3
k_{11}	Constante 1 da reação 1	20,9057
k_{12}	Constante 2 da reação 1	10000
k_{21}	Constante 1 da reação 2	38,9057
k_{22}	Constante 2 da reação 2	17000

Parâmetro	Definição	Valor
N_{A0}	Número de mols inicial do reagente A	12 kmol
N_{B0}	Número de mols inicial do reagente B	12 kmol
N_{C0}	Número de mols inicial do reagente C	0 kmol
N_{D0}	Número de mols inicial do reagente D	0 kmol
T_{r0}	Temperatura inicial do reator	20°C
T_{jin}	Temperatura de entrada do fluido refrigerante	26,4°C
T_j	Temperatura do fluido refrigerante	20°C

Para simplificação do modelo, os tempos de abertura e fechamento das válvulas foram considerados desprezíveis e foi admitido que elas possuíssem abertura e fechamento rápidos (SOUSA, 2010).

A modelagem do reator químico em batelada foi desenvolvida no MATLAB-SIMULINK™ Versão 7.1, conforme apresentado no APÊNDICE I. As próximas seções apresentam os resultados da simulação do sistema em malha aberta e em malha fechada.

4.2 Simulação do sistema em malha aberta

O sistema em malha aberta é composto pelo reator batelada, válvulas de adição dos reagentes, de adição e retirada de fluido refrigerante, bem como de instrumentos de medição e transmissão para monitoramento das temperaturas do reator, da camisa e da entrada de fluido refrigerante, conforme ilustrado na Figura 4.2.

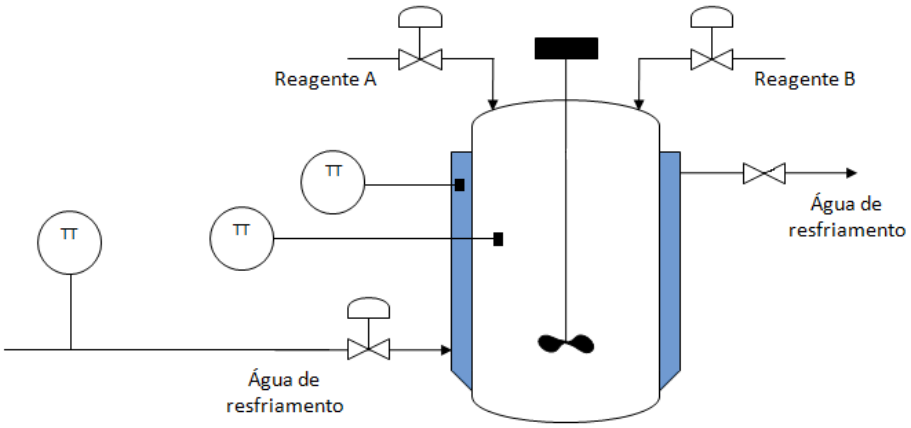

Figura 4.2 – Reator batelada em malha aberta

Foi realizada simulação nas condições consideradas como normais, observando-se o comportamento das quantidades dos componentes da reação, bem como das temperaturas do reator e da camisa, conforme ilustrado na Figura 4.3 e na Figura 4.4. Os dados foram coletados de dez em dez segundos desde o início da adição dos reagentes até o final da batelada.

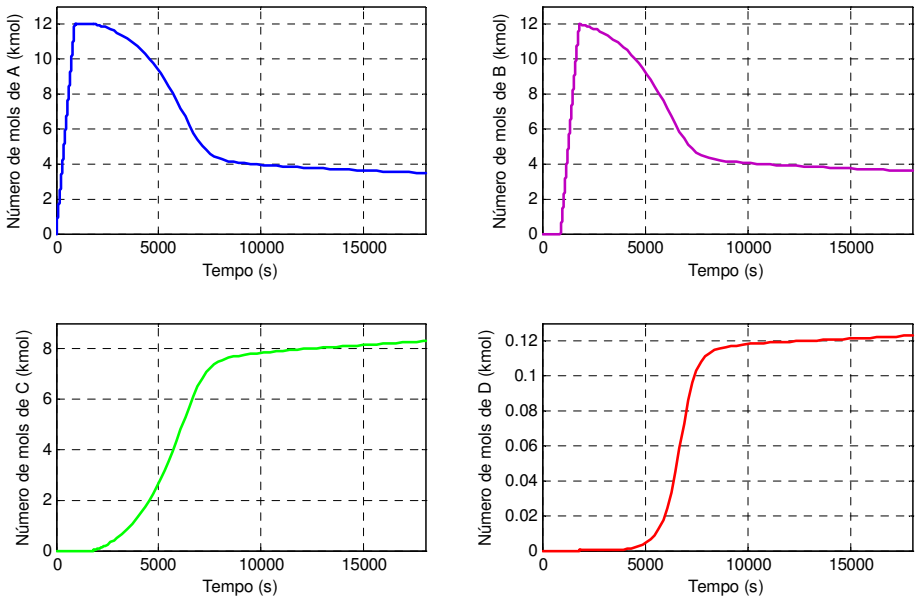

Figura 4.3 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada

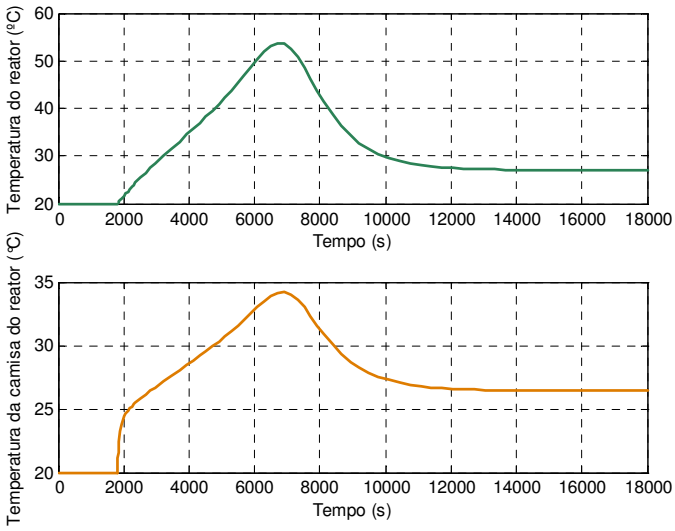

Figura 4.4 – Comportamento das temperaturas do reator e do fluido refrigerante durante o tempo de batelada

A reação se inicia após o final da adição dos dois reagentes (A e B), no tempo de trinta minutos. Verifica-se que, ao final da batelada, os reagentes A e B não foram totalmente consumidos e formou-se muito pouco produto indesejado (D). Além disso, a temperatura do reator atinge valores próximos a 55°C. A Tabela 4.2 mostra os valores do número de moles de cada um dos componentes da reação e das temperaturas do reator e da camisa ao fim da batelada.

Tabela 4.2 – Variáveis ao final da batelada para o sistema operando sem falhas

Componente	Valor
N_A (kmol)	2,2775
N_B (kmol)	2,6080
N_C (kmol)	9,0348
N_D (kmol)	0,3438
T_r (°C)	26,7307
T_j (°C)	26,4963

4.2.1 Sistema em malha aberta operando com falhas

Foram testadas as seguintes falhas no sistema em malha aberta:

1. Falha nas válvulas de adição dos reagentes A e B que resultam em falhas na composição inicial dos mesmos;

2. Falha na temperatura de entrada de fluido refrigerante.

A primeira falha descrita acima foi aplicada aumentando-se a vazão dos reagentes A e B, simulando uma falha nas válvulas de controle de adição dos reagentes. A vazão do reagente A foi aumentada em 8% no tempo de 7,5 minutos, enquanto a vazão do reagente B foi aumentada em 8% no tempo 22,5 minutos. Os resultados obtidos são apresentados na Figura 4.5 e na Figura 4.6.

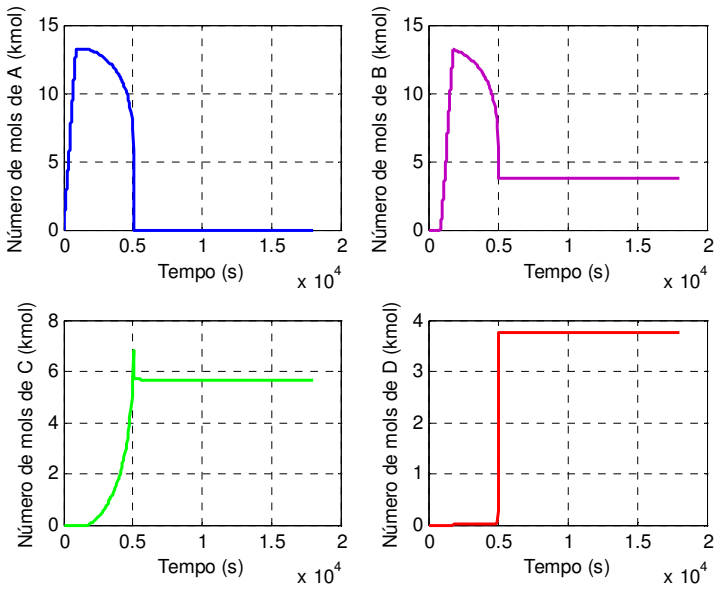

Figura 4.5 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada para aumento na adição dos reagentes A e B

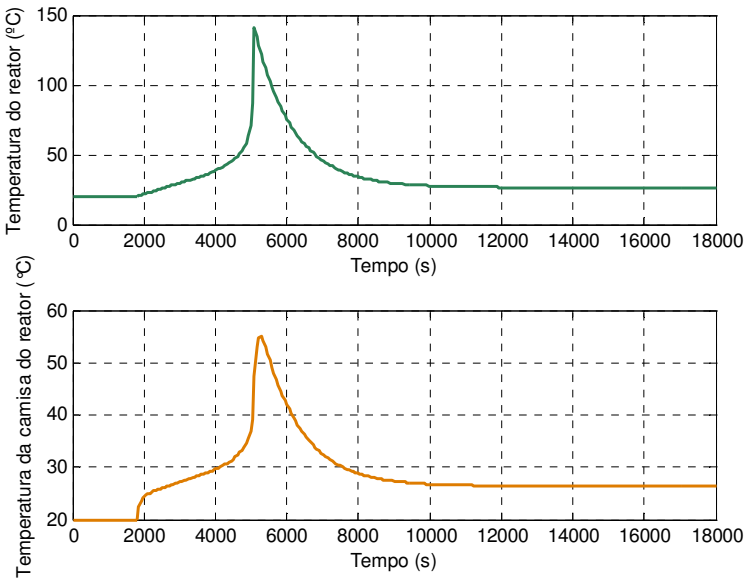

Figura 4.6 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa durante o tempo de batelada para aumento na adição dos reagentes A e B

É importante ressaltar que este é um sistema muito instável, onde pequenas variações na carga causam variações muito grandes nas temperaturas. Após a observação do gráfico da temperatura do reator, ilustrado na Figura 4.6, optou-se por realizar o estudo de detecção e diagnóstico das falhas em malha fechada, já que o comportamento acima indica que o reator poderia sofrer danos mecânicos, em função da alta variação de sua temperatura. Além disso, um sistema em malha fechada se constitui de um cenário mais interessante para aplicação das falhas, pelo fato de apresentar um processo mais próximo da realidade industrial, onde existe controle das temperaturas do reator e da camisa.

4.3 Sistema em malha fechada

O sistema em malha fechada é composto pelo reator batelada, válvulas de adição dos reagentes e de adição e retirada de fluido refrigerante, bem como de instrumentos de temperatura, para controle das temperaturas do reator, da camisa, além da monitoração da temperatura de entrada de fluido refrigerante. Foram sintonizados, dois controladores em cascata, sendo o primário (mestre) um controlador PI, e o secundário (escravo) um controlador P. A Figura 4.7 ilustra o esquema do sistema do reator em malha fechada.

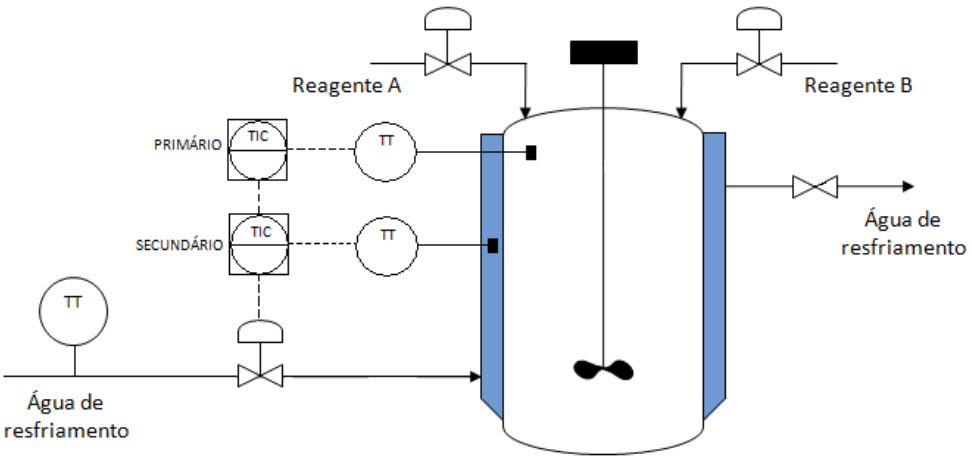

Figura 4.7 – Esquema reator batelada em malha fechada

Foi realizada simulação nas condições consideradas normais, observando-se o comportamento das quantidades dos componentes da reação e das temperaturas do reator e

da camisa, ilustrados na Figura 4.8 e na Figura 4.9. Os dados foram coletados de dez em dez segundos desde o início da adição dos reagentes até o final da batelada.

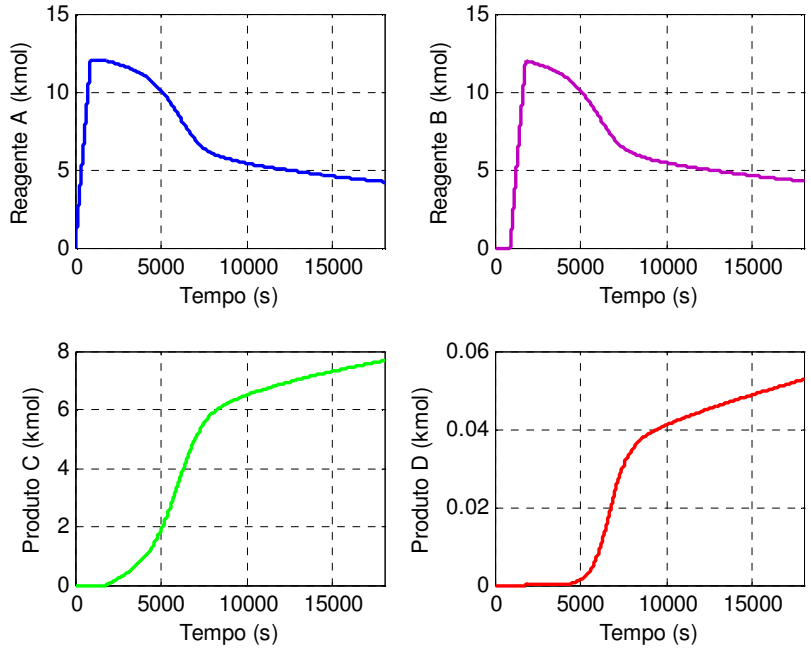

Figura 4.8 – Comportamento dos componentes da reação química durante o tempo de batelada

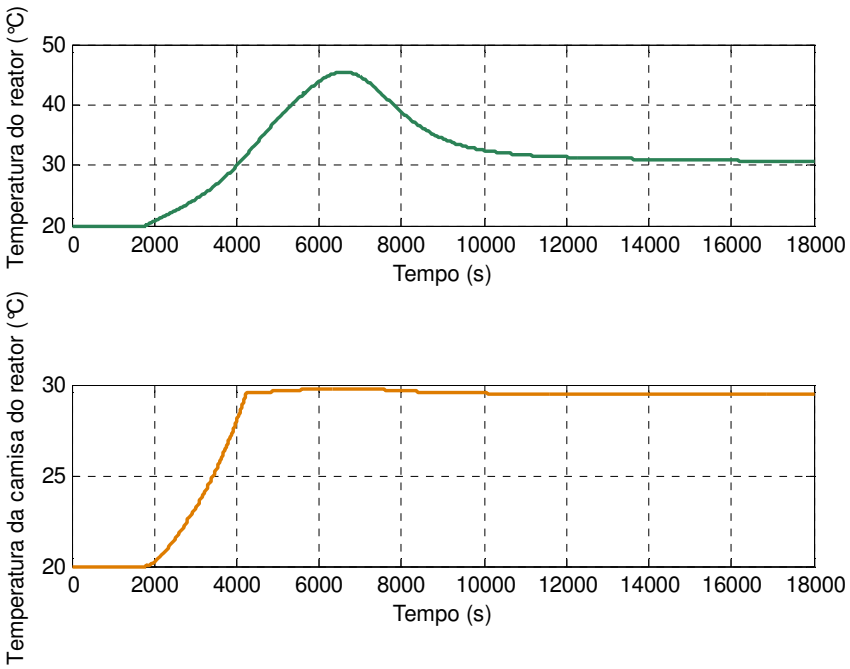

Figura 4.9 – Comportamento das temperaturas do reator e do fluido refrigerante durante o tempo de batelada

Observando-se os gráficos acima, verifica-se que a presença dos controladores em cascata proporcionou uma operação mais segura e com menores variações nas temperaturas.

A Tabela 4.3 mostra os valores do número de moles de cada um dos componentes da reação e das temperaturas do reator e da camisa ao fim da batelada. As quantidades finais dos reagentes ficaram maiores que no modelo em malha aberta, mas em compensação formou-se bem menos produto indesejado.

Tabela 4.3 – Variáveis ao final da batelada para o sistema operando sem falhas

Componente	Valor
N_A (kmol)	4,2367
N_B (kmol)	4,2759
N_C (kmol)	7,6584
N_D (kmol)	0,0524
T_r (°C)	30,6078
T_j (°C)	29,4735

4.3.1 Sistema em malha fechada operando com falhas

Para o sistema descrito acima, foram aplicadas as seguintes falhas:

Tabela 4.4 – Falhas aplicadas no sistema em malha fechada

Falha	Descrição
Falha 1 (F1)	Aumento do número de mols na alimentação do reagente A
Falha 2 (F2)	Redução do número de mols na alimentação do reagente A
Falha 3 (F3)	Aumento do número de mols na alimentação do reagente B
Falha 4 (F4)	Redução do número de mols na alimentação do reagente B
Falha 5 (F5)	Aumento do número de mols na alimentação do reagente A e do reagente B

Falha	Descrição
Falha 6 (F6)	Redução do número de mols na alimentação do reagente A e do reagente B
Falha 7 (F7)	Aumento do número de mols na alimentação do reagente A e redução do reagente B
Falha 8 (F8)	Redução do número de mols na alimentação do reagente A e aumento do reagente B
Falha 9 (F9)	Aumento da temperatura de entrada de fluido refrigerante
Falha 10 (F10)	Redução da temperatura de entrada de fluido refrigerante

As falhas na adição dos reagentes foram aplicadas em tempos equivalentes a metade do tempo total de adição de cada um, ou seja, em 7,5 e 22,5 minutos, respectivamente. Foram consideradas falhas em variáveis que não são geralmente medidas por instrumentação *on-line*, como as composições dos reagentes, que na maioria das vezes são medidas ao final da reação através da verificação da especificação do produto. Por esta razão, optou-se por desconsiderar na simulação as falhas relacionadas ao aumento/redução na temperatura de adição do fluido refrigerante (F9 e F10), pois podem ser detectadas de imediato pelo sistema de monitoração ou até mesmo pelo sistema de diagnóstico do instrumento.

4.3.1.1 Aplicação da Falha 1

Aplicou-se um aumento de 10% no número de mols do reagente A, a partir do tempo de 7,5 minutos, ou seja, na metade do tempo equivalente a sua adição no reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.10 e na Figura 4.11.

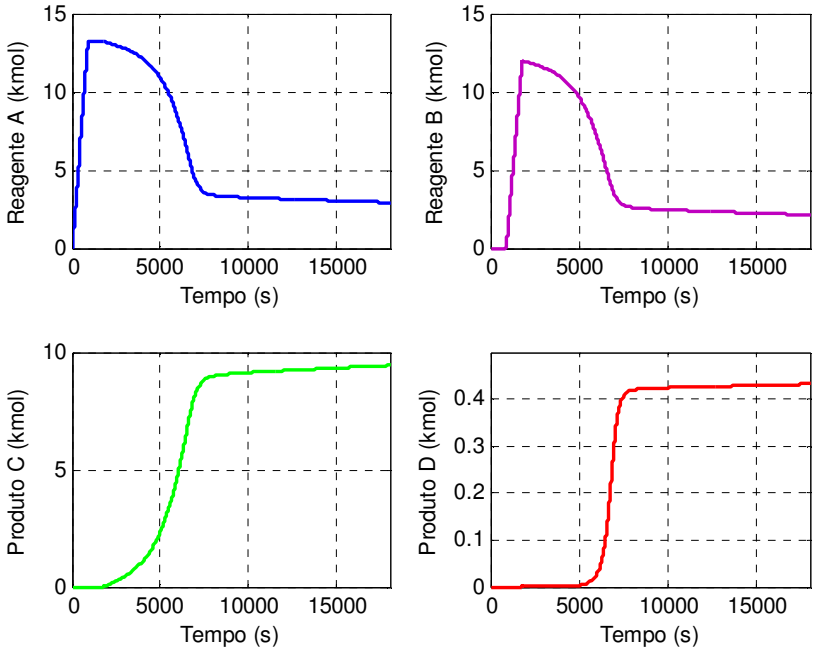

Figura 4.10 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 1

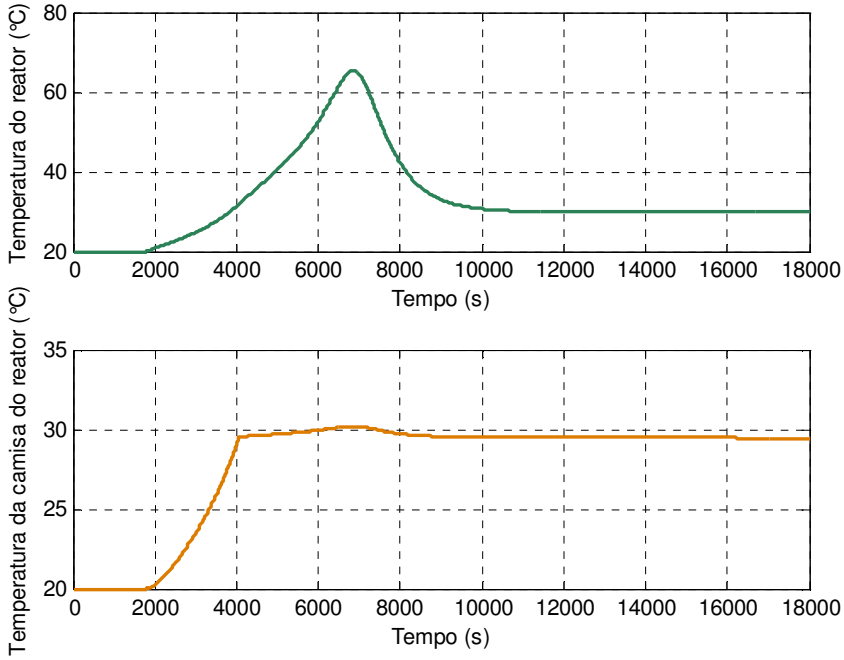

Figura 4.11 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 1

Comparando-se os resultados dos gráficos com os da condição normal, verifica-se que houve um aumento tanto na quantidade do produto indesejado (D) como na do

desejado (C). Em relação às temperaturas, a do reator foi mantida sob controle, com pico bem inferior ao de 120°C provocado pelo mesmo tipo de perturbação em malha aberta, e a da camisa permaneceu estável.

4.3.1.2 Aplicação da Falha 2

Foi aplicada uma redução de 10% no número de mols do reagente A, a partir do tempo de 7,5 minutos, ou seja, na metade do tempo equivalente a sua adição no reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.12 e na Figura 4.13.

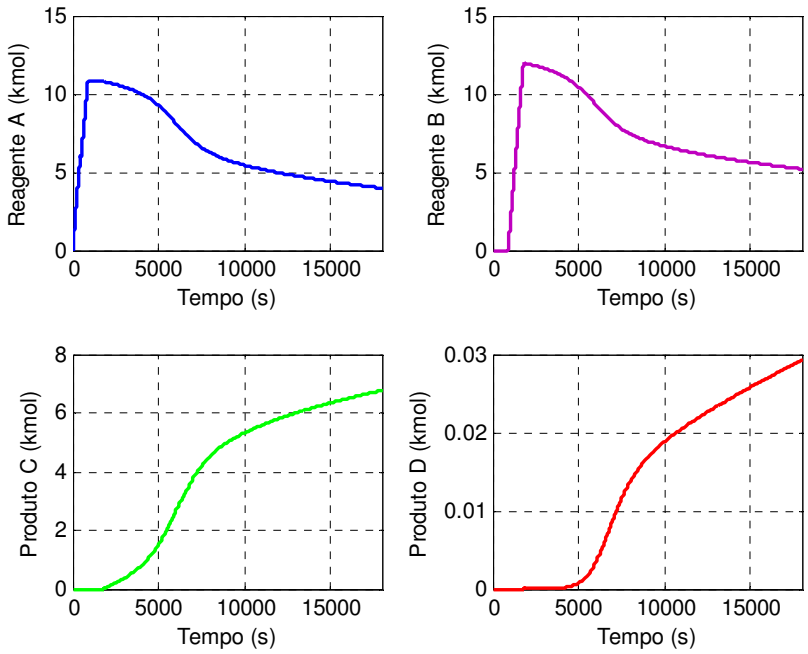

Figura 4.12 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 2

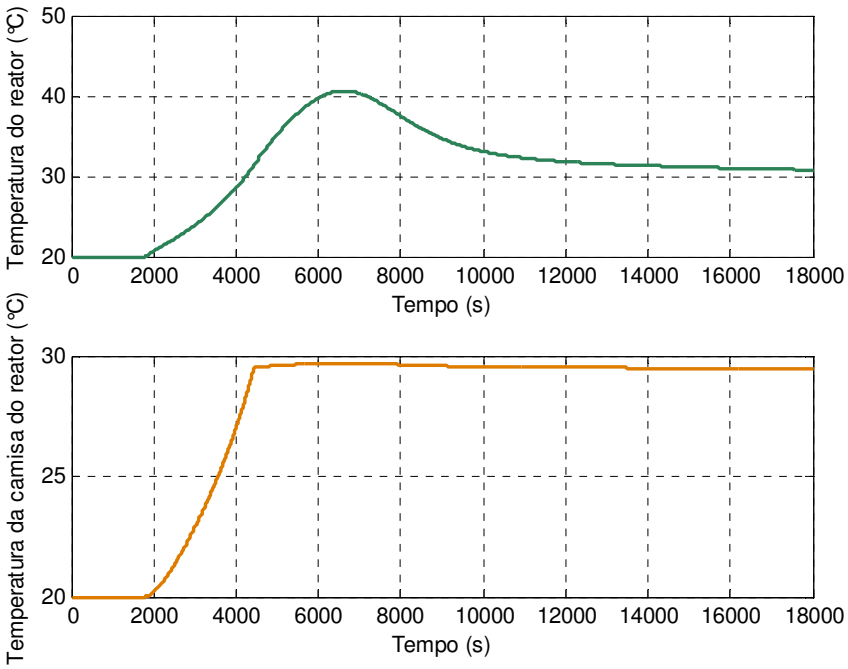

Figura 4.13 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 2

Comparando-se os resultados dos gráficos com os da condição normal, verifica-se que houve uma redução nas quantidades dos produtos desejado (C) e indesejado (D), e que as mesmas ficaram bastante instáveis até o final da batelada. Em relação às temperaturas, ambas foram mantidas em valores muito próximos aos da condição normal.

4.3.1.3 Aplicação da Falha 3

Foi aplicado um aumento de 10% no número de mols do reagente B, a partir do tempo de 22,5 minutos, ou seja, na metade do tempo equivalente a sua adição no reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.14 e na Figura 4.15.

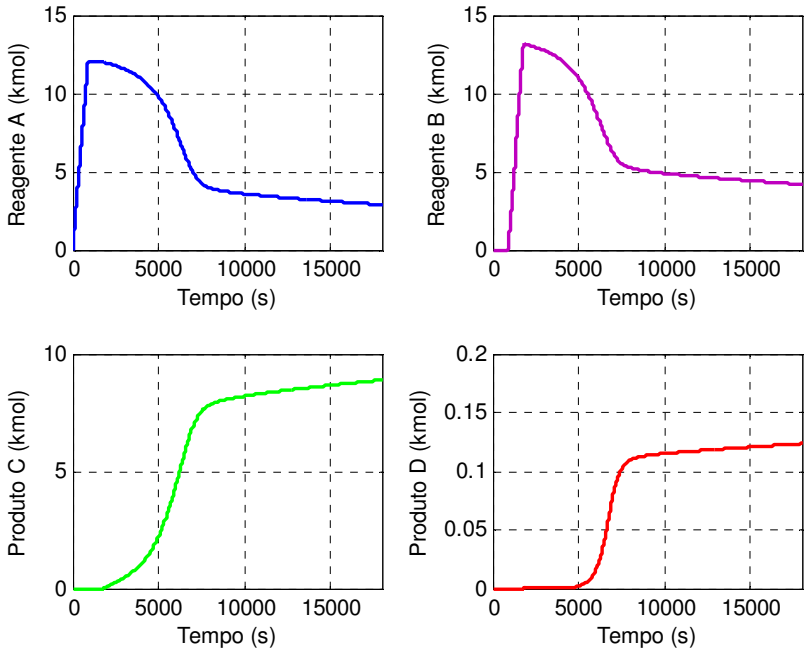

Figura 4.14 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 3

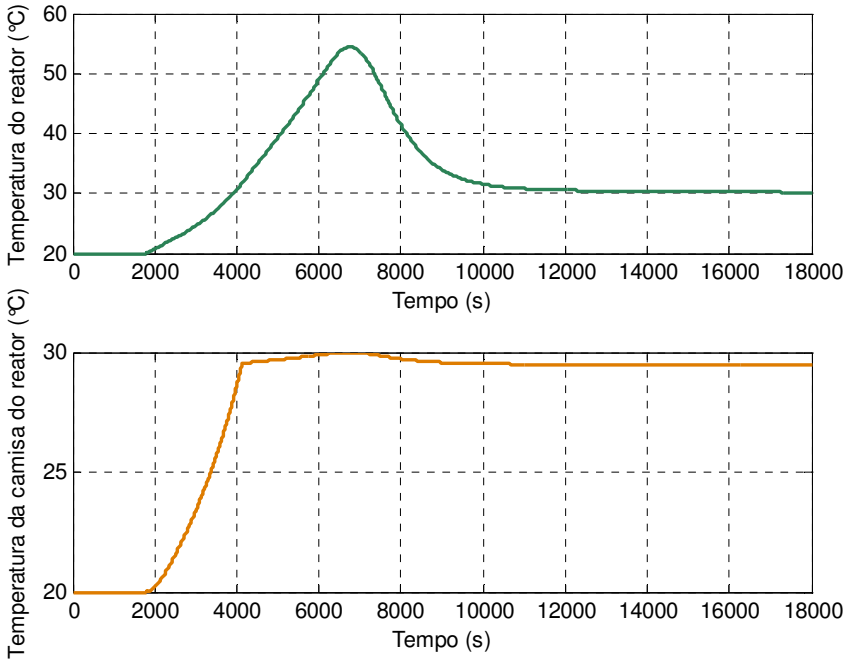

Figura 4.15 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 3

Comparando-se os resultados dos gráficos com os da condição normal, verifica-se que houve um aumento nas quantidades dos produtos desejado (C) e indesejado (D). Em relação às temperaturas, a do reator apresentou um pico, no decorrer da formação dos produtos, que permaneceu controlado em cerca de 50°C. Já a temperatura da camisa, sofreu um leve aumento no mesmo período, mas permaneceu estável até o final da batelada.

4.3.1.4 Aplicação da Falha 4

Foi aplicada uma redução de 10% no número de mols do reagente B, a partir do tempo de 22,5 minutos, ou seja, na metade do tempo equivalente a sua adição no reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.16 e na Figura 4.17.

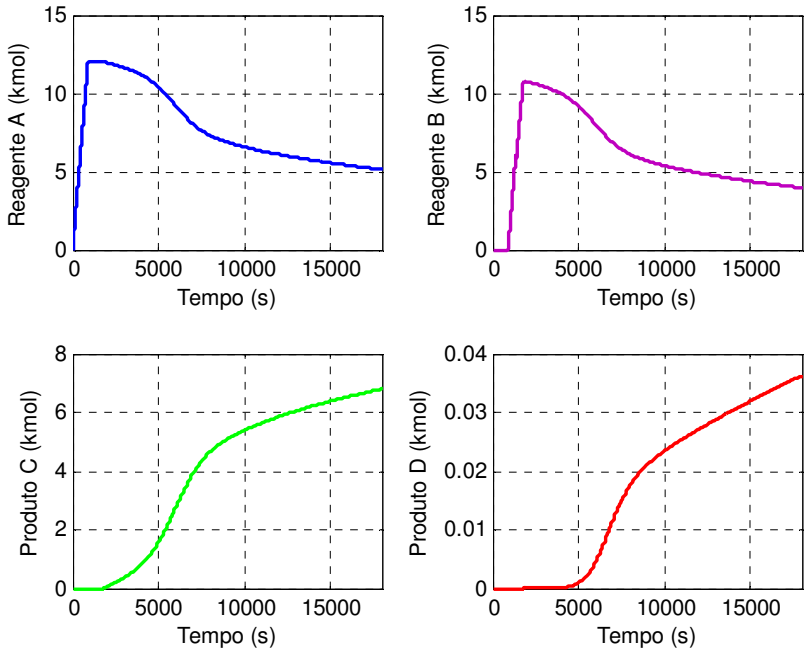

Figura 4.16 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 4

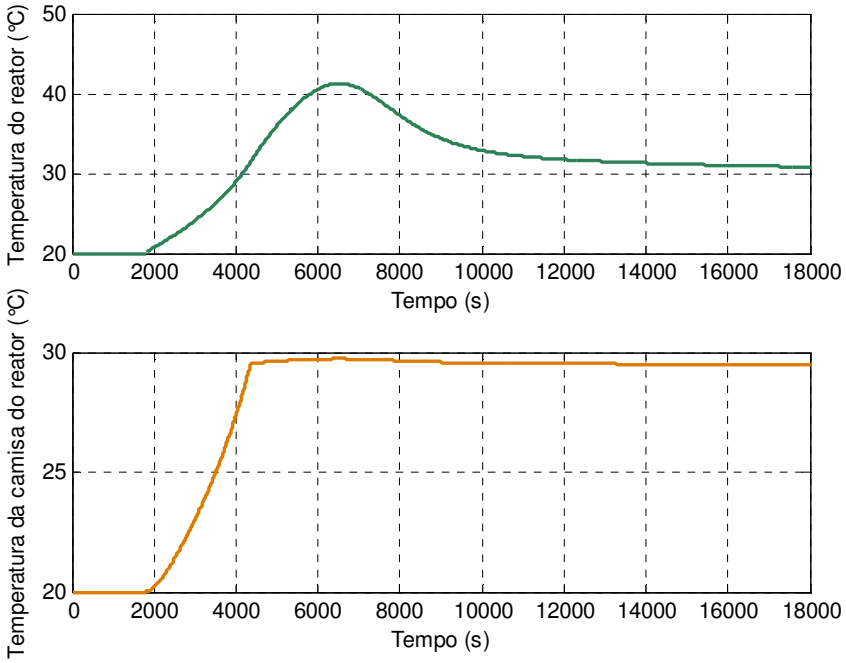

Figura 4.17 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 4

Comparando-se os resultados dos gráficos com os da condição normal, verifica-se que houve uma redução nas quantidades dos produtos desejado (C) e indesejado (D), e que as mesmas ficaram bastante instáveis até o final da batelada. Em relação às temperaturas, a do reator foi mantida em valor muito próximo ao da condição normal e a da camisa permaneceu estável até o final da batelada.

4.3.1.5 Aplicação da Falha 5

Foram aplicados aumentos de 8% nos números de mols dos reagentes A e B, a partir dos tempos de 7,5 e 22,5 minutos, respectivamente, equivalentes a metade dos tempos de suas adições ao reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.18 e na Figura 4.19.

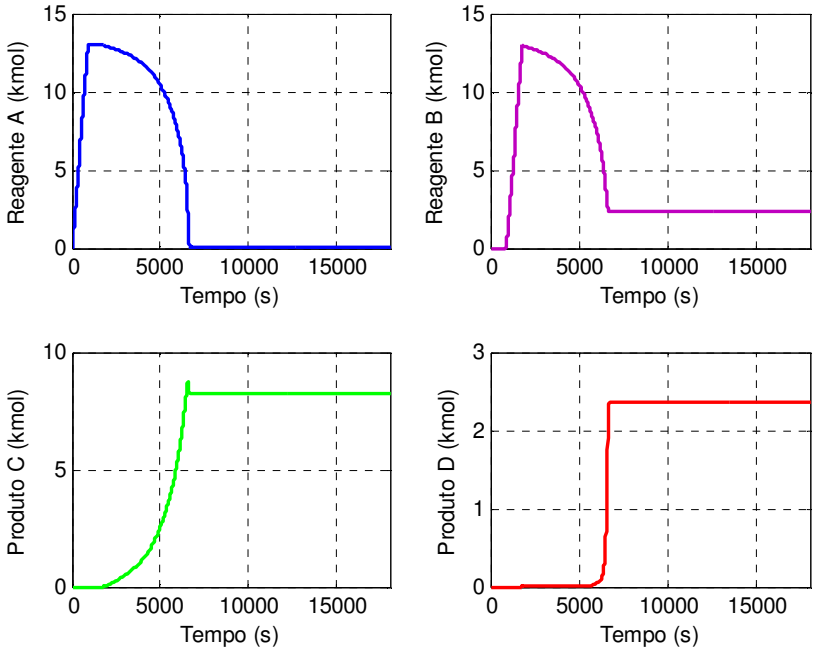

Figura 4.18 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 5

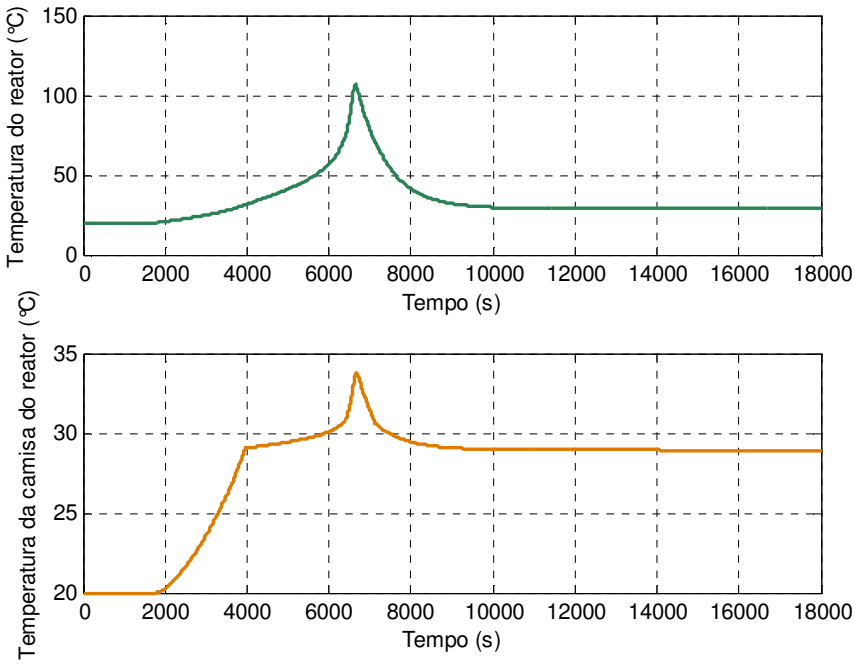

Figura 4.19 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 5

Analisando-se os resultados gráficos e comparando-se com a condição normal, verifica-se que para um aumento simultâneo dos reagentes, o reagente A é totalmente

consumido, gerando maior quantidade do produto indesejado (D). A temperatura do reator aumentou bastante, mas foi controlada, já que o aumento de mesma magnitude apenas no reagente A em malha aberta, provocou um pico de 140°C nesta temperatura. Com o aumento da temperatura do reator, consequentemente, a temperatura da camisa também aumentou.

4.3.1.6 Aplicação da Falha 6

Foram aplicadas reduções de 8% nos números de mols dos reagentes A e B, a partir dos tempos de 7,5 e 22,5 minutos, respectivamente, equivalentes a metade dos tempos de suas adições ao reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.20 e na Figura 4.21.

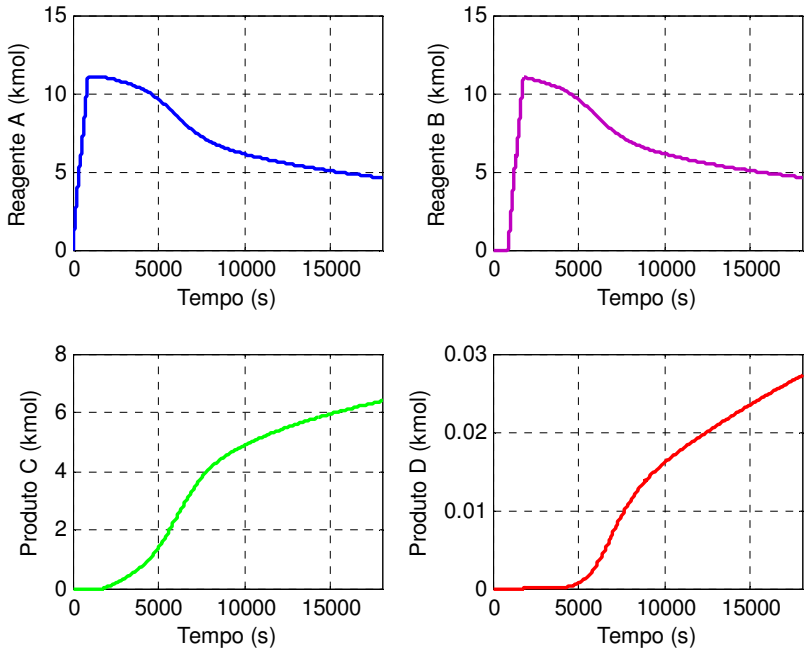

Figura 4.20 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 6

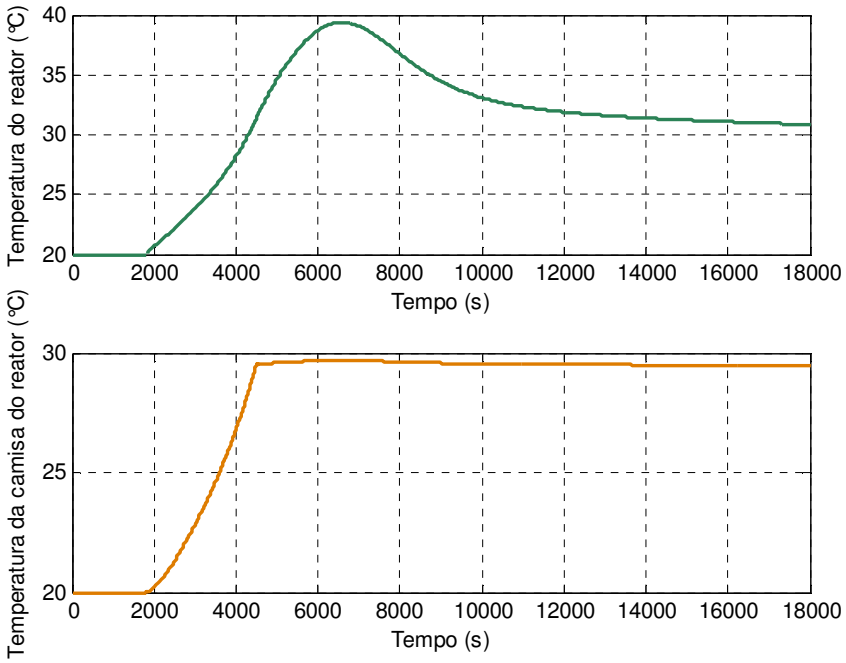

Figura 4.21 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 6

As reduções das quantidades dos reagentes (A e B) tornaram o sistema bastante instável em termos de formação de produtos. Houve menor conversão tanto no produto desejado (C), como no indesejado (D). Em virtude das menores conversões, as temperaturas do reator e da camisa foram controladas, sendo que a primeira teve um pico inferior ao mesmo período da condição normal.

4.3.1.7 Aplicação da Falha 7

Foram aplicados aumento de 8% do número de mols do reagente A e redução de 8% no número de mols do reagente B, a partir dos tempos de 7,5 e 22,5 minutos, respectivamente, equivalentes a metade dos tempos de suas adições ao reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.22 e na Figura 4.23.

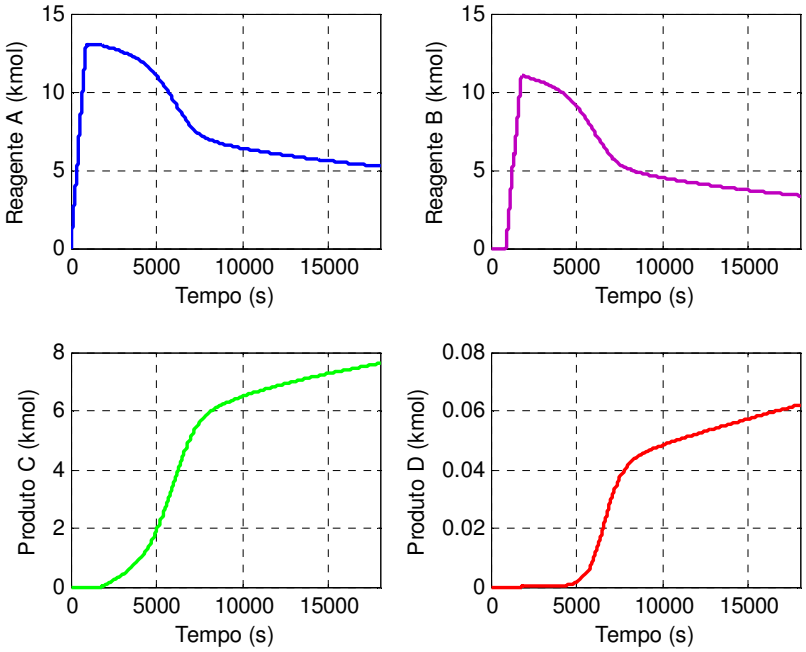

Figura 4.22 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 7

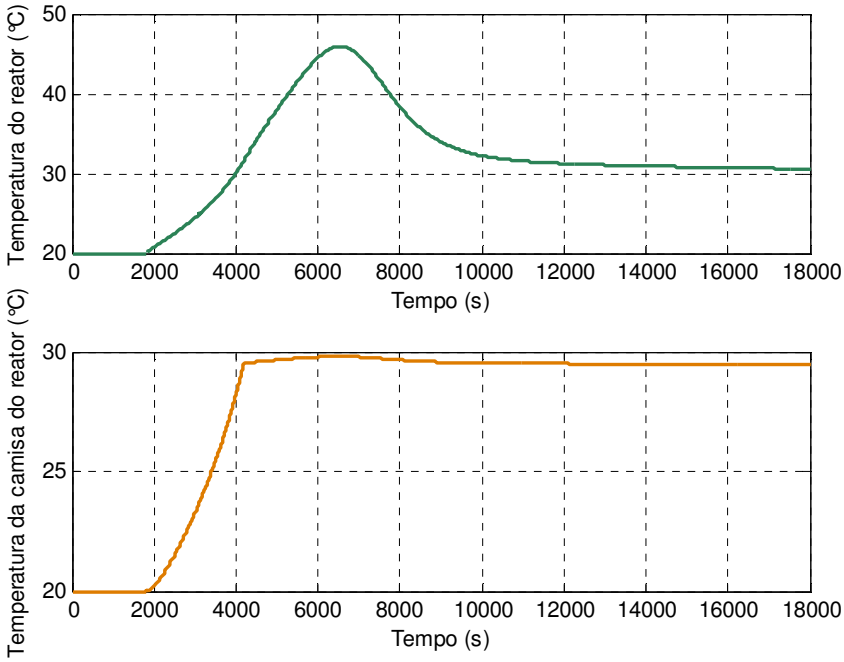

Figura 4.23 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 7

Embora a quantidade de reagente A tenha sido aumentada, a redução da quantidade do reagente B compensou este aumento, já que tanto as quantidades dos produtos desejado (C) e indesejado (D) como as temperaturas do reator e da camisa ficaram próximas dos seus valores na condição normal.

4.3.1.8 Aplicação da Falha 8

Foram aplicados redução de 8% no número de mols do reagente A e aumento de 8% no número de mols do reagente B, a partir dos tempos de 7,5 e 22,5 minutos, respectivamente, equivalentes a metade dos tempos de suas adições ao reator. Os resultados gráficos são ilustrados na Figura 4.24 e na Figura 4.25.

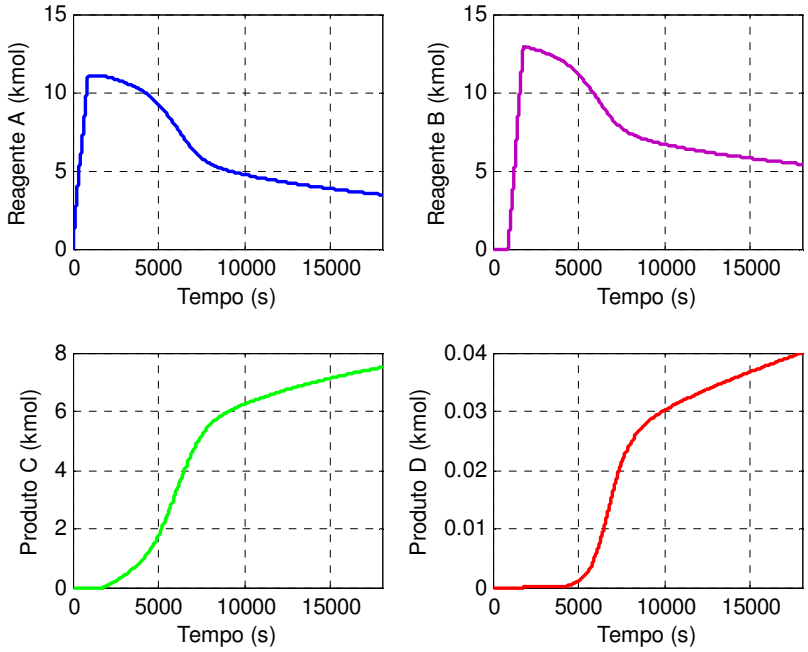

Figura 4.24 – Comportamento dos componentes da reação após aplicação da Falha 8

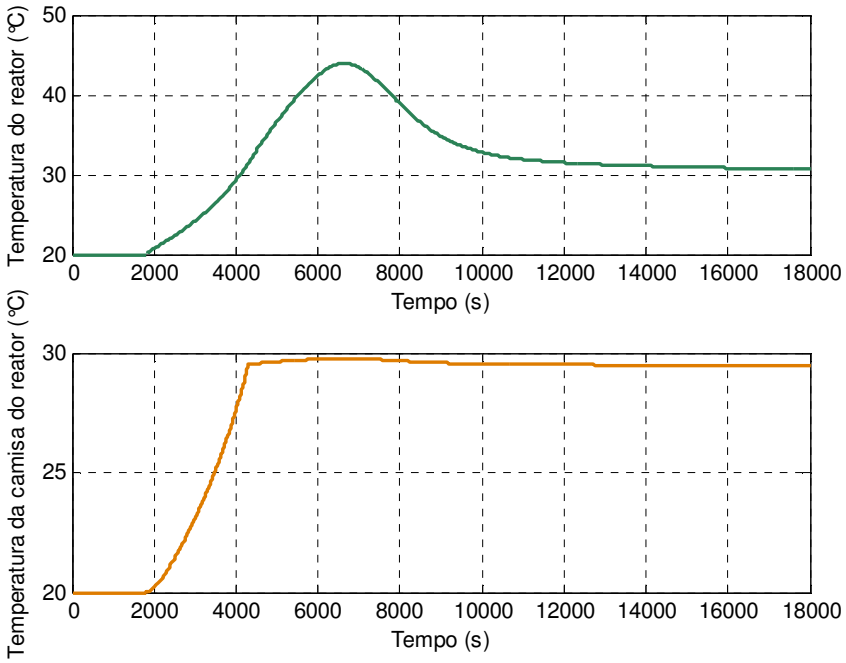

Figura 4.25 – Comportamento das temperaturas do reator e da camisa após aplicação da Falha 8

A redução da quantidade do reagente A e o aumento do reagente B não geraram grandes variações nas quantidades dos produtos desejado (C) e indesejado (D), bem como nas temperaturas do reator e da camisa, já que todos estes parâmetros obtiveram comportamentos muito parecidos com o da operação normal.

CAPÍTULO 5

5. APLICAÇÃO DE TÉCNICA DE FDD BASEADA EM REDES NEURONAIS

5.1 Introdução

Para a aplicação da técnica de FDD, foram realizados testes em tempos com durações diferentes, considerados a partir do início da reação, de forma a se verificar o desempenho das redes neuronais na classificação das falhas, conforme descrito na Tabela 5.1 e na Tabela 5.2. O objetivo é realizar a detecção da falha o mais rápido possível, de forma que se possa corrigi-la antes de comprometer definitivamente o resultado da batelada.

Tabela 5.1 – Corridas consideradas

Corrida	Descrição
1	Dados da operação "NORMAL", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
2	Dados da operação com "FALHA 1", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
3	Dados da operação com "FALHA 2", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
4	Dados da operação com "FALHA 3", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
5	Dados da operação com "FALHA 4", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
6	Dados da operação com "FALHA 5", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
7	Dados da operação com "FALHA 6", em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
8	Dados da operação com "FALHA 7", em

Corrida	Descrição
	intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação
9	Dados da operação com “FALHA 8”, em intervalos de tempo de 0,5, 1 ou 2 h após o início da reação

Tabela 5.2 – Testes para aplicação da técnica de FDD

Teste	Corridas Consideradas	Falhas Consideradas	Duração da corrida	Descrição
1	1, 2, 3, 4 e 5	F1, F2, F3 e F4	0,5h, 1h ou 2h	Para este teste, foi considerada a condição normal, classificada como “NORMAL” e as falhas 1, 2, 3 e 4, agrupadas apenas como “FALHA”.
2	1, 2, 3, 4 e 5	F1, F2, F3 e F4	0,5h ou 1h	Para este teste, foi considerada a condição normal, classificada como “NORMAL” e as falhas classificadas de acordo com seus tipos: “F1”, “F2”, “F3” e “F4”.
3	1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8 e 9	F1, F2, F3, F4, F5, F6, F7 e F8	0,5h ou 1h	Para este teste, foi considerada a condição normal, classificada como “NORMAL” e as falhas classificadas de acordo com seus tipos: “F1”, “F2”, “F3”, “F4”, “F5”, “F6”, “F7” e “F8”.

5.2 Aplicação das Redes Neuronais para FDD

A aplicação da técnica de FDD foi realizada através da utilização de redes neuronais artificiais de classificação do tipo linear, MLP, RBF e SOM (treinamento de Kohonen) com dados de corridas relativos aos testes descritos acima.

O treinamento das redes foi realizado no *software* STATISTICA™ Versão 7.0 (Módulo *STATISTICS NEURAL NETWORKS - SNN*) escolhendo-se aleatoriamente dois terços dos dados para treinamento e um terço para validação ou seleção. O número total de dados para treinamento e seleção em cada corrida é apresentado na Tabela 5.3:

Tabela 5.3 – Quantitativo de dados para treinamento e seleção das redes

Duração da corrida	Número de dados em cada corrida	Número total de dados nos testes 1, 2	Número total de dados no teste 3	Número de dados para treinamento – testes 1,2 / 3	Número de dados para seleção – testes 1,2 / 3
0,5h	181	905	1629	603 / 1086	302 / 543
1h	361	1805	3249	1203 / 2166	602 / 1083
2h	721	3605	6489	2403 / 4326	721 / 2163

Foram utilizados como dados de entradas e saídas das redes os parâmetros ilustrados na Figura 5.1. Cabe ressaltar que, geralmente, a saída de uma rede neuronal é um valor numérico, mas quando de trata de um problema de classificação, o SNN é capaz de converter valores de saída numéricos em variáveis nominais, de acordo com a quantidade de classificações informadas ao programa.

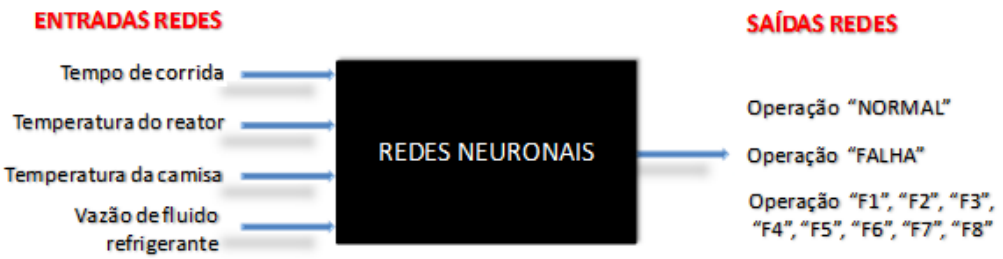

Figura 5.1 – Parâmetros de entrada e saída das redes neuronais

Para cada teste e cada duração da corrida simulada, quinhentas redes foram treinadas e as dez melhores foram salvas, mantendo-se a diversidade, ou seja, pelo menos uma rede de

cada tipo foi salva. A seleção da melhor rede foi feita levando-se em consideração a análise dos parâmetros da coluna *Desempenho de Seleção*, o menor tempo após o início da reação, e a quantidade de parâmetros que cada rede necessita para classificar todos os dados de entrada. Para problemas de classificação, quanto mais próximo de 1 (100%) for o valor do *Desempenho de Seleção*, melhor é a capacidade da rede de classificar corretamente e realizar generalização para dados novos.

O cálculo do número de parâmetros da rede (N_p) para as redes multicamadas foi feito através do número de neurônios da camada de entrada (N_i), do número de neurônios da camada escondida (N_h) e do número de neurônios da camada de saída (N_o):

$$N_p = (N_i \cdot N_h) + N_h + (N_h \cdot N_o) + N_o \tag{5.1}$$

Um algoritmo de pós-processamento também foi desenvolvido, de modo a avaliar o desempenho da melhor rede selecionada sob o ponto de vista de seu índice de acertos individuais em cada corrida, de forma a comprovar sua eficácia de classificação por corrida específica e não somente no desempenho geral (coluna *Desempenho de Seleção*). Este algoritmo, denominado aqui de "winner", realiza os seguintes passos:

i. A cada tempo de amostragem (dez segundos) avalia a classificação da rede;

ii. Decorrida uma janela de tempo equivalente ao tempo de duração da corrida, avalia que classe recebeu o maior número de indicações pela rede;

iii. Se o número de indicações for maior que um critério pré-estabelecido de 70%, a classe vencedora é indicada à corrida.

5.2.1 Aplicação das Redes Lineares, MLP e RBF

As redes Lineares, MLP e RBF foram aplicadas para classificação das falhas nos Testes 1, 2 e 3. Os resultados são descritos nas seções a seguir.

5.2.1.1 Resultados para o Teste 1

Foram treinadas redes Lineares, MLP e RBF com corridas de meia, uma e duas horas e selecionadas as dez melhores redes em cada tempo de corrida. Os resultados gerais do treinamento são apresentados na Tabela 5.4.

Tabela 5.4 – Desempenhos das redes no Teste 1

Duração da Corrida	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
0,5h	MLP 4:4-1-1:1	0,484245	0,523179
	MLP 4:4-10-1:1	0,485904	0,526490
	MLP 4:4-10-1:1	0,475954	0,523179
	MLP 4:4-10-1:1	0,490879	0,519868
	Linear 4:4-1:1	0,512438	0,473510
	RBF 4:4-24-1:1	0,791045	0,705298
	RBF 4:4-49-1:1	0,940299	0,867550
	RBF 4:4-36-1:1	0,859038	0,784768
	RBF 4:4-47-1:1	0,928690	0,844371
	RBF 4:4-48-1:1	0,877280	0,814570
1h	MLP 4:4-2-1:1	0,510391	0,456811
	MLP 4:4-3-1:1	0,499584	0,496678
	MLP 4:4-4-1:1	0,532835	0,504983
	MLP 4:4-10-1:1	0,541978	0,506645
	Linear 4:4-1:1	0,514547	0,450166
	RBF 4:4-96-1:1	0,854530	0,784053
	RBF 4:4-109-1:1	0,833749	0,745847
	RBF 4:4-113-1:1	0,865337	0,787375
	RBF 4:4-114-1:1	0,900249	0,873754
	RBF 4:4-115-1:1	0,863674	0,807309
2hs	MLP 4:4-3-1:1	0,576779	0,564060
	MLP 4:4-5-1:1	0,585518	0,589018
	MLP 4:4-6-1:1	0,592593	0,583195
	MLP 4:4-10-1:1	0,584686	0,589018
	Linear 4:4-1:1	0,488140	0,467554
	RBF 4:4-399-1:1	0,940075	0,895175
	RBF 4:4-458-1:1	0,945069	0,893511
	RBF 4:4-493-1:1	0,934249	0,886023
	RBF 4:4-599-1:1	0,945069	0,901830
	RBF 4:4-598-1:1	0,955888	0,905158

Observando-se os resultados na tabela acima, embora as redes com melhores desempenhos de seleção sejam as do tipo RBF para corridas de duas horas, verificou-se que a rede RBF com resultados de corridas de meia hora também apresentou um bom desempenho de seleção (aproximadamente 87%) com um número de parâmetros mais parcimonioso (295), sendo esta a rede selecionada. Assim, é possível detectar falha no reator após trinta minutos do início da reação, de forma a se evitar maiores danos provocados pela mesma. A rede RBF selecionada possui quatro neurônios na camada de entrada, quarenta e nove na camada radial escondida e um na camada de saída.

Foi feita uma análise de seu desempenho de classificação através do algoritmo "winner" para as corridas de meia hora, conforme descrito na Tabela 5.5:

Tabela 5.5 – Aplicação do algoritmo "winner" para a melhor rede do Teste 1

Resultados Estatísticos Rede RBF					
Corrida	**Classes dos dados**	**Número de Casos**	**Número de Acertos**	**% Acertos**	**Classe vencedora**
1	NORMAL	181	166	92	NORMAL
2	FALHA (F1)	181	181	100	FALHA
3	FALHA (F2)	181	181	100	FALHA
4	FALHA (F3)	181	164	91	FALHA
5	FALHA (F4)	181	147	81	FALHA

Ao final do treinamento da rede, o SNN fornece uma análise de sensibilidade que informa a ordem de importância de cada variável de entrada para a rede, ou seja, qual variável de entrada mais influencia no seu desempenho de classificação. De acordo com esta análise a variável de entrada que mais afeta sua capacidade de classificação é a temperatura do reator, razão pela qual esta foi a única variável utilizada como parâmetro de comparação. Ou seja, pode-se acompanhar flutuações não medidas na composição da carga, através de outra variável medida (temperatura do reator). Comparando-se os índices de acerto acima com o comportamento desta temperatura na primeira meia hora de reação, percebe-se que algumas falhas possuem trajetórias muito parecidas com a da operação normal, conforme ilustrado na Figura 5.2, o que pode ter gerado confusão na classificação

realizada pela rede. Por esta razão as Falhas 3 e 4, bem como a operação normal possuem índices de acerto menores que as demais.

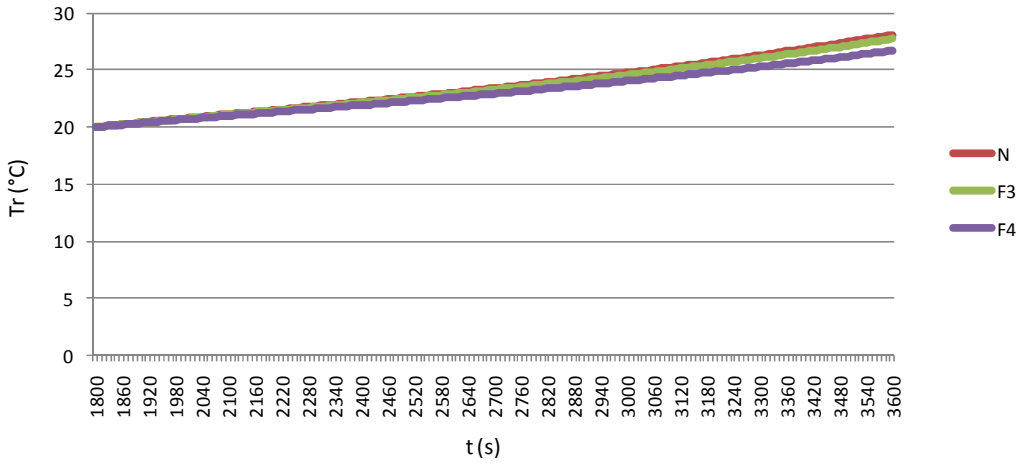

Figura 5.2 – Comparação dos comportamentos das falhas na primeira meia hora após início da reação – Teste 1

Através das análises anteriores, verificou-se que a classificação realizada pela rede RBF para o Teste 1 foi bem sucedida, já que foi possível acertar a classificação dos eventos de falha para as corridas de meia hora, o que possibilita a intervenção do operador para evitar a propagação da mesma.

5.2.1.2 Resultados para o Teste 2

Foram treinadas redes Lineares, MLP e RBF com corridas de meia e uma hora e selecionadas as melhores redes em cada tempo de corrida. Cabe ressaltar que, em face ao bom desempenho das redes no teste anterior, para os tempos de meia e uma hora, o tempo de duas horas foi descartado. Os resultados gerais do treinamento são apresentados na Tabela 5.6.

Tabela 5.6 – Desempenhos das redes no Teste 2

Duração da Corrida	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
0,5h	MLP 4:4-5-5:1	0,917081	0,880795
	MLP 4:4-7-5:1	0,935323	0,897351
	MLP 4:4-9-5:1	0,953566	0,923841
	MLP 4:4-10-5:1	0,936982	0,943709
	Linear 4:4-5:1	0,406302	0,324503
	RBF 4:4-104-5:1	0,951907	0,850993
	RBF 4:4-120-5:1	0,958541	0,927152
	RBF 4:4-140-5:1	0,960199	0,907285
	RBF 4:4-146-5:1	0,971808	0,930464
	RBF 4:4-160-5:1	0,970149	0,930331
1h	MLP 4:4-6-5:1	0,922693	0,933555
	MLP 4:4-7-5:1	0,926850	0,946844
	MLP 4:4-8-5:1	0,926018	0,941860
	MLP 4:4-10-5:1	0,938487	0,951827
	Linear 4:4-5:1	0,398171	0,372093
	RBF 4:4-200-5:1	0,890274	0,787375
	RBF 4:4-213-5:1	0,901912	0,838870
	RBF 4:4-241-5:1	0,926018	0,868771
	RBF 4:4-242-5:1	0,938487	0,863787
	RBF 4:4-243-5:1	0,923525	0,867110

Embora o melhor desempenho tenha sido da rede MLP para corridas de uma hora, verificou-se que a rede MLP com resultados de corridas de meia hora também apresentou um desempenho de seleção muito satisfatório (aproximadamente 94%), além de um número de parâmetros (105) parcimonioso. Assim, é possível detectar falha no reator após trinta minutos do início da reação, de forma a se evitar maiores danos à mesma. A rede MLP selecionada possui quatro neurônios na camada de entrada, dez na camada escondida e cinco na camada de saída, sendo um para cada classe. As funções de ativação utilizadas durante o treinamento foram a linear para a camada de entrada, hiperbólica para a escondida e *softmax* para a de saída.

Foi feita uma análise de seu desempenho de classificação através do algoritmo "winner" para as corridas de meia hora, conforme descrito na Tabela 5.7:

Tabela 5.7 – Aplicação do algoritmo "winner" para a melhor rede do Teste 2

Resultados Estatísticos Rede MLP					
Corrida	**Classes dos dados**	**Número de Parâmetros**	**Número de Acertos**	**% Acertos**	**Classe vencedora**
1	NORMAL	181	170	94	NORMAL
2	F1	181	181	100	F1
3	F2	181	178	98	F2
4	F3	181	163	90	F3
5	F4	181	158	87	F4

Assim como no Teste 1, conforme a análise de sensibilidade realizada, a variável de entrada que mais afeta a capacidade de classificação da rede é a temperatura do reator, razão pela qual esta foi a única variável utilizada como parâmetro de comparação. Comparando-se os índices de acerto apresentados acima com os comportamentos da temperatura do reator frente à ocorrência de cada falha, ilustrados na Figura 5.3, é possível afirmar que os erros de classificação sejam decorrentes de semelhanças nas trajetórias. Isto significa que, em alguns períodos, a Falha 3 pode ter sido confundida com a Falha 1 e a Falha 4 com a Falha 2, ou até mesmo com a operação normal. Embora algumas corridas tenham obtido índices de acertos menores que outras, de forma geral, o desempenho da rede foi muito bom, já que ela conseguiu identificar com eficiência diferentes tipos de falhas apresentadas. Pode-se considerar que o desempenho desta rede foi melhor que o da RBF diante dos fatores apresentados acima, o que demonstra que este tipo de rede é mais indicado para modelos com mais categorias de falhas.

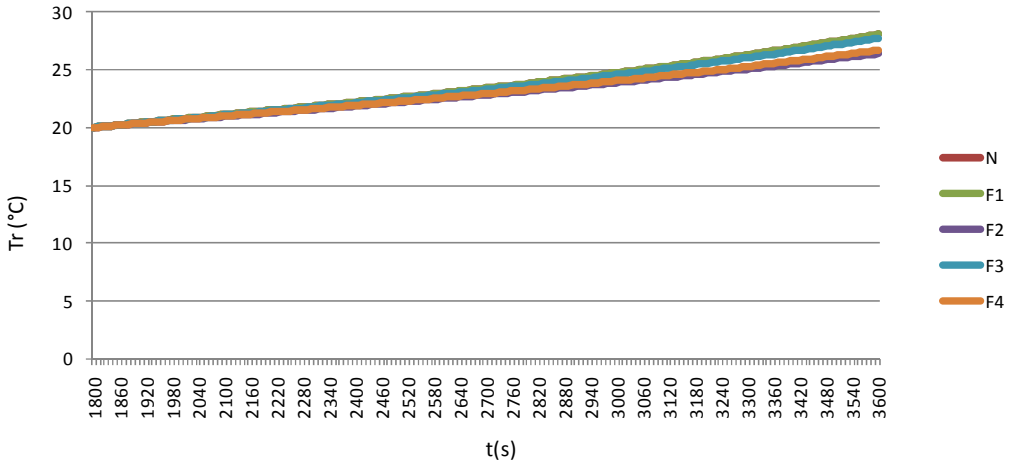

Figura 5.3 – Comparação dos comportamentos das falhas meia hora após início da reação – Teste 2

5.2.1.3 Resultados para o Teste 3

Assim como no Teste 2, foram treinadas redes Lineares, MLP e RBF apenas para corridas de meia e uma hora, e selecionadas as melhores redes em cada tempo de corrida. Os resultados gerais do treinamento são apresentados na Tabela 5.8:

Tabela 5.8 – Desempenhos das redes no Teste 3

Tempos de Corridas	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
0,5h	MLP 4:4-5-9:1	0,805709	0,810313
	MLP 4:4-6-9:1	0,814917	0,812155
	MLP 4:4-7-9:1	0,849908	0,850829
	MLP 4:4-10-9:1	0,894107	0,885820
	Linear 4:4-9:1	0,212707	0,191529
	RBF 4:4-67-9:1	0,597606	0,430939
	RBF 4:4-101-9:1	0,616943	0,418048
	RBF 4:4-153-9:1	0,735727	0,539595
	RBF 4:4-230-9:1	0,783610	0,506446
	RBF 4:4-265-9:1	0,815838	0,537753
1h	MLP 4:4-7-9:1	0,845799	0,831025
	MLP 4:4-8-9:1	0,832872	0,830102
	MLP 4:4-9-9:1	0,836565	0,825485
	MLP 4:4-10-9:1	0,870268	0,875346
	Linear 4:4-9:1	0,234534	0,205910

Tempos de Corridas	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
	RBF 4:4-338-9:1	0,843029	0,651893
	RBF 4:4-437-9:1	0,879501	0,691597
	RBF 4:4-616-9:1	0,909972	0,733149
	RBF 4:4-660-9:1	0,922899	0,724838
	RBF 4:4-675-9:1	0,928901	0,746076

Verificou-se que a rede MLP com resultados de corridas de meia hora apresentou um bom desempenho de seleção (aproximadamente 89%) e um número de parâmetros (149) parcimonioso em comparação com as demais redes obtidas, sendo esta a rede selecionada. A rede MLP selecionada possui quatro neurônios na camada de entrada, dez na camada escondida e nove na camada de saída, um para cada classe. As funções de ativação utilizadas durante o treinamento foram a linear para a camada de entrada, hiperbólica para a escondida e *softmax* para a de saída.

Foi feita uma análise de seu desempenho de classificação através do algoritmo "winner" para as corridas de meia hora, conforme descrito na Tabela 5.9:

Tabela 5.9 – Aplicação do algoritmo "winner" para a melhor rede do Teste 3

Resultados Estatísticos Rede MLP					
Corrida	**Classes dos dados**	**Número de Parâmetros**	**Número de Acertos**	**% Acertos**	**Classe vencedora**
1	NORMAL	181	141	78	NORMAL
2	F1	181	148	82	F1
3	F2	181	169	93	F2
4	F3	181	176	97	F3
5	F4	181	173	96	F4
6	F5	181	177	98	F5
7	F6	181	159	88	F6
8	F7	181	168	93	F7
9	F8	181	141	78	F8

Conforme realizado nos testes anteriores, podem-se associar os índices de acertos na classificação das falhas com as semelhanças de trajetórias da temperatura do reator

frente à aplicação das mesmas, como ilustrado na Figura 5.4. Verifica-se também que o índice de acertos da corrida 2 para a aplicação da falha 1 não é mais 100%, o que indica que a introdução de um maior número de tipos de classes à rede pode ter aumentado seu erro de identificação das falhas.

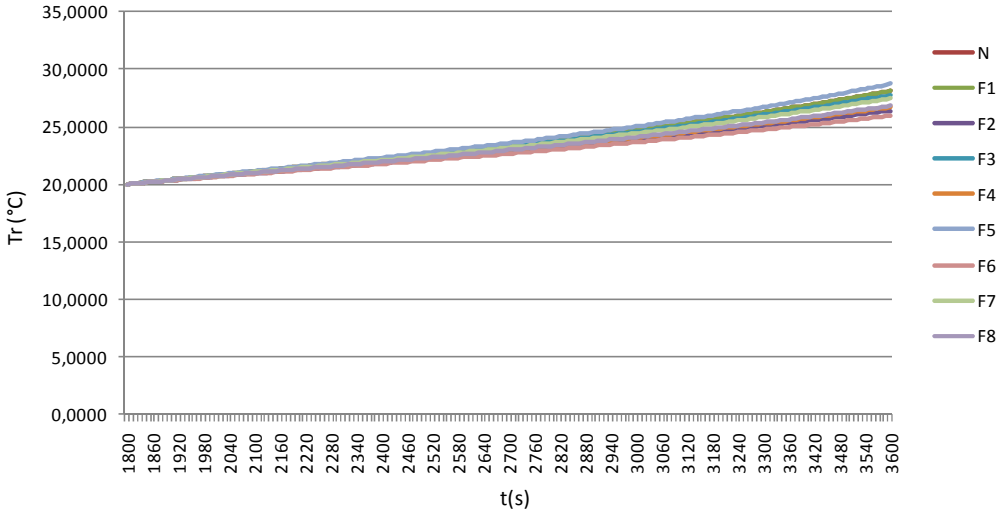

Figura 5.4 – Comparação dos comportamentos das falhas meia hora após início da reação – Teste 3

5.2.2 Análise das redes SOFM com treinamento de Kohonen

As redes SOFM são baseadas no conceito de *clusters*, conforme descrito no Capítulo 3. Assim, quanto maior o número de diferentes classes de padrões apresentadas às mesmas, maior a probabilidade de sobreposição dos *clusters*. Por esta razão, este tipo de rede foi utilizado somente no Teste 1, onde só existem somente dois tipos de classificação. Além disso, foi proposto mais um teste para esta rede, denominado Teste 4, no qual foram treinadas redes SOFM para classificação entre operação "NORMAL" e "FALHA", considerando as oito falhas descritas na Tabela 4.4.

5.2.2.1 Resultados para o Teste 1

Foram treinadas redes SFOM com algoritmo de Kohonen, para corridas de meia, uma e duas horas, e selecionadas as melhores redes em cada tempo de corrida. Os resultados são apresentados na Tabela 5.10:

Tabela 5.10 – Resultados do treinamento de Kohonen para o Teste 1

Tempos de Corridas	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
0,5h	SOFM 3:3-69:1	0,769486	0,708609
1h	SOFM 4:4-152:1	0,826268	0,750831
2h	SOFM 4:4-305:1	0,856846	0,836106

Ao contrário das redes anteriores, o melhor desempenho de seleção da rede SOFM foi para o maior tempo de corrida, já que as redes com tempos menores apresentaram desempenhos apenas regulares. Foi selecionada então a terceira rede, com quatro neurônios na camada de entrada e trezentos e cinco na camada radial de saída. Para esta rede também foi feita uma análise de seu desempenho de classificação através do algoritmo "winner" para as corridas de duas horas, conforme descrito na tabela a seguir:

Tabela 5.11 – Aplicação do algoritmo "winner" para a melhor rede do Teste 1

Resultados Estatísticos Treinamento de Kohonen					
Corrida	Classes dos dados	Número de Parâmetros	Número de Acertos	% Acertos	Classe vencedora
1	NORMAL	721	411	57	?
2	FALHA (F1)	721	649	90	FALHA
3	FALHA (F2)	721	680	94	FALHA
4	FALHA (F3)	721	619	86	FALHA
5	FALHA (F4)	721	705	98	FALHA

Embora todos os índices de acerto tenham ficado bons para as corridas com classe falha, esta rede não conseguiu classificar de forma satisfatória os dados da condição normal, ou seja, esta classe não foi a vencedora na corrida 1. As redes SFOM, possuem uma diferença na metodologia de classificação em relação às demais redes. Durante o treinamento da rede, existe uma etapa, conhecida como *Voronoi Neighbor*, no qual são verificadas todas as classes de treinamento e contabilizadas quantos padrões de cada classe são atribuídos a cada neurônio. É fornecida uma proporção de 70% para padrões da mesma classe, ou seja, cada neurônio que é ativado por no mínimo esta proporção de padrões com

a mesma classe, é identificado com o nome da mesma (NORMAL ou FALHA). Caso exista alguma ambiguidade e classes diferentes estejam ativando o mesmo neurônio em proporções aproximadas – por exemplo, se o mesmo neurônio for ativado por 60% de dados da classe "NORMAL" e 40% de dados da classe "FALHA" – o neurônio não recebe nenhuma destas identificações e é classificado como "UNKOWN".

Analisando-se os resultados para a classe "NORMAL", conforme Figura 5.5, verifica-se que apenas 55% dos dados ativaram neurônios com a classe normal.

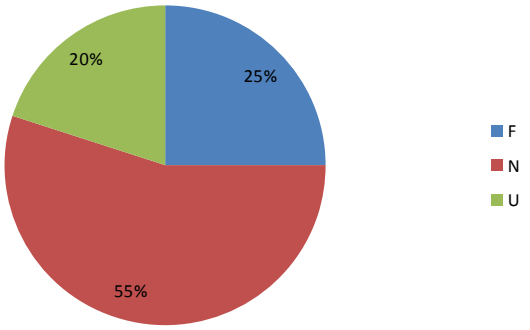

Figura 5.5 – Proporção de ativações em cada classe para os dados relativos à corrida de classe NORMAL para o Teste 1

Para contornar este problema, sugere-se treinar a rede para mais pontos e para maiores magnitudes de falhas de forma que a aprimorar seu mapeamento e classificação, diminuindo a quantidade de classificações "UNKNOWN" e aumentando o índice de acertos.

Em tem termos práticos, o treinamento de Kohonen fornece um mapeamento topológico dos neurônios e possibilita a localização da região vencedora, bem como a posição de cada padrão de entrada em relação aos neurônios, conforme ilustrado na Figura 5.6. Esta figura representa a camada de saída da rede SFOM, sendo que cada quadrado representado é um neurônio, com sua legenda de classificação ao lado (F para FALHA, N para NORMAL e U para UNKNOWN). Para cada caso, os neurônios marcados de preto representam a proximidade (ou nível de ativação) a um determinado caso, sendo quanto mais próximo do neurônio vencedor, os seus vizinhos recebem um sombreamento mais escuro. O neurônio vencedor na Figura 5.6 é destacado de vermelho. Este processo não é

simultâneo, já que o SNN fornece a posição individual a cada tempo de amostragem. A identificação da localização de cada falha foi feita manualmente, através da análise da posição de cada neurônio em relação ao seu tipo de falha, de modo a representar a formação de *clusters* no mapa topológico.

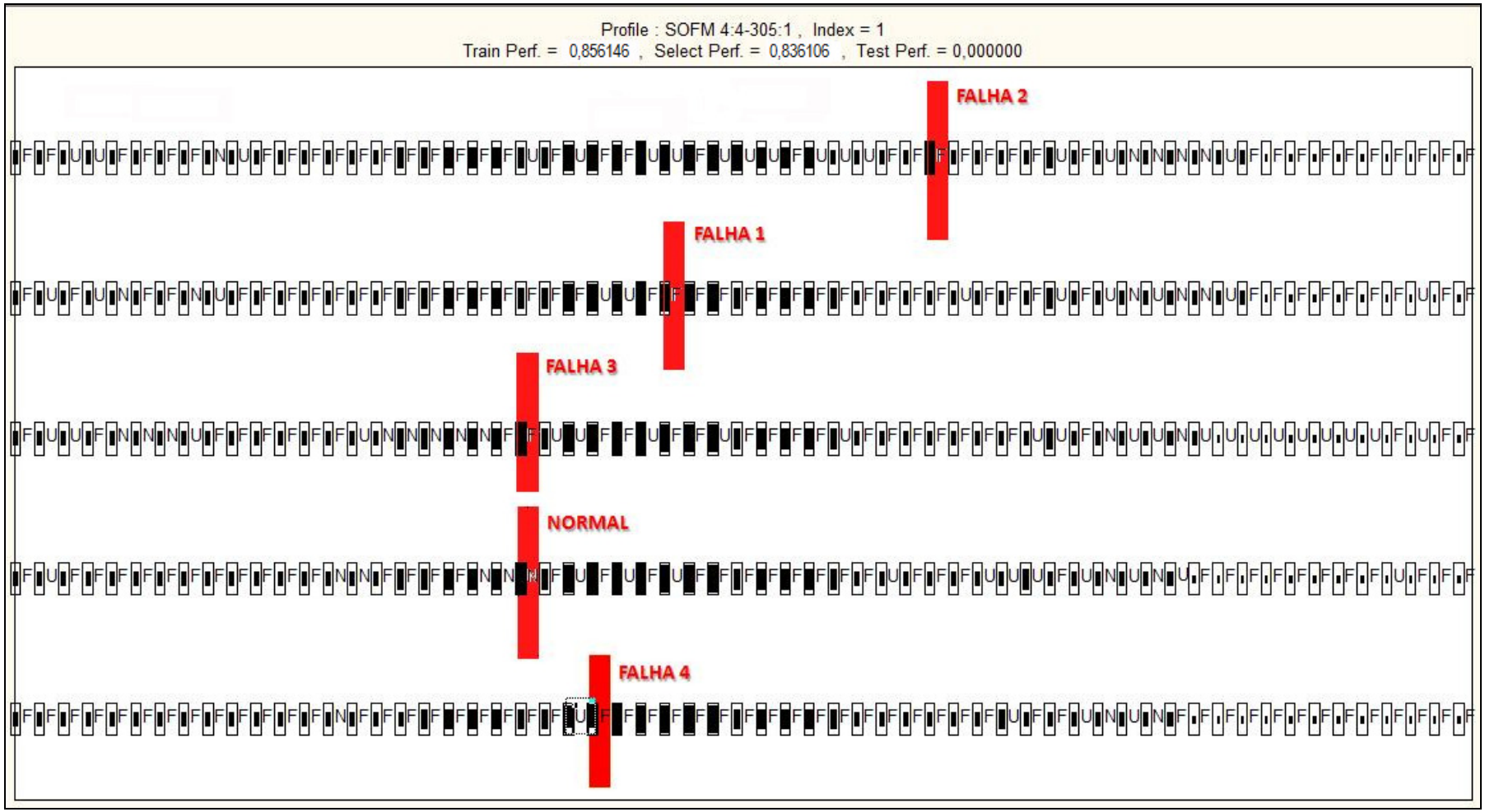

Figura 5.6 – Mapeamento topológico do treinamento de Kohonen para o Teste 1 mostrando a localização dos *clusters*

Embora o resultado para a classe “NORMAL” tenha ficado abaixo do aceitado, o desempenho geral para as outras classificações foi bem representativo. Assim, foi realizado o Teste 4, com objetivo de realizar a classificação entre operação “NORMAL” e “FALHA”, considerando-se as oito falhas citadas na Tabela 4.4.

5.2.2.2 Resultados para o Teste 4

Foram treinadas redes SFOM com algoritmo de treinamento de Kohonen, para corridas de meia, uma e duas horas, e selecionadas as melhores redes em cada tempo de corrida.

Tabela 5.12 – Resultados treinamento de Kohonen para o Teste 4

Tempos de Corrida	Redes	Desempenho de Treinamento	Desempenho de Seleção ou Validação
0,5h	SOFM 3:3-140:1	0,827808	0,771639
1h	SOFM 4:4-285:1	0,829640	0,788550
2h	SOFM 4:4-558:1	0,865696	0,840499

Assim como no Teste 1, o melhor desempenho de seleção foi o da rede com maior tempo de corrida, já que as redes com tempos menores apresentaram desempenhos regulares. Foi selecionada então a terceira rede, com quatro neurônios na camada de entrada e quinhentos e cinqüenta e oito na camada radial de saída. Para esta rede também foi feita uma análise do desempenho de classificação, através do algoritmo “winner”, conforme apresentado na Tabela 5.13:

Tabela 5.13 – Aplicação do algoritmo “winner” para a melhor rede do Teste 4

Resultados Estatísticos Treinamento de Kohonen					
Corrida	Classe dos dados	Número de Parâmetros	Número de Acertos	% Acertos	Classe vencedora
1	NORMAL	721	172	24	?
2	FALHA (F1)	721	706	98	FALHA
3	FALHA (F2)	721	716	99	FALHA
4	FALHA (F3)	721	700	97	FALHA
5	FALHA (F4)	721	698	97	FALHA

Resultados Estatísticos Treinamento de Kohonen					
Corrida	**Classe dos dados**	**Número de Parâmetros**	**Número de Acertos**	**% Acertos**	**Classe vencedora**
6	FALHA (F5)	721	711	99	FALHA
7	FALHA (F6)	721	717	99	FALHA
8	FALHA (F7)	721	721	100	FALHA
9	FALHA (F8)	721	631	86	FALHA

Assim como no Teste1, a corrida 1 não obteve classe vencedora, pois apenas 24% dos dados ativaram a classe "NORMAL", conforme ilustrado na Figura 5.7. Para os demais tempos de corrida, a rede apresentou desempenho significativo.

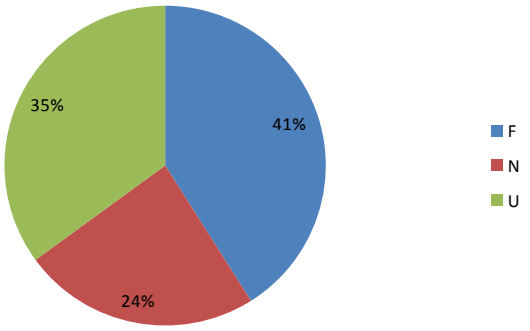

Figura 5.7 – Proporção de ativações em cada classe para os dados relativos à corrida 1 para o Teste 4

O mapeamento topológico dos neurônios fornecido pelo treinamento de Kohonen encontra-se ilustrado na Figura 5.8, sendo recomendado um treinamento com mais casos e para maiores magnitudes de falhas de forma que a aprimorar seu mapeamento e classificação, diminuindo a quantidade de classificações "UNKNOWN" e aumentando o índice de acertos.

O treinamento de Kohonen forneceu um mapeamento topológico dos neurônios, possibilitando a localização da região vencedora, bem como a posição de cada padrão de entrada em relação aos neurônios, conforme ilustrado no mapa topológico da Figura 5.8. Cada quadrado representado é um neurônio, com sua legenda de classificação ao lado (F para FALHA, N para NORMAL e U para UNKNOWN). Para cada caso, os neurônios

marcados de preto representam a proximidade (ou nível de ativação) a um determinado caso, sendo quanto mais próximo do neurônio vencedor, os seus vizinhos recebem um sombreamento mais escuro. O neurônio vencedor na Figura 5.8 é destacado de vermelho. Assim como no Teste 1, a identificação da localização de cada falha foi feita manualmente, através da análise da posição de cada neurônio em relação ao seu tipo de falha, de modo a representar a formação de *clusters* no mapa topológico.

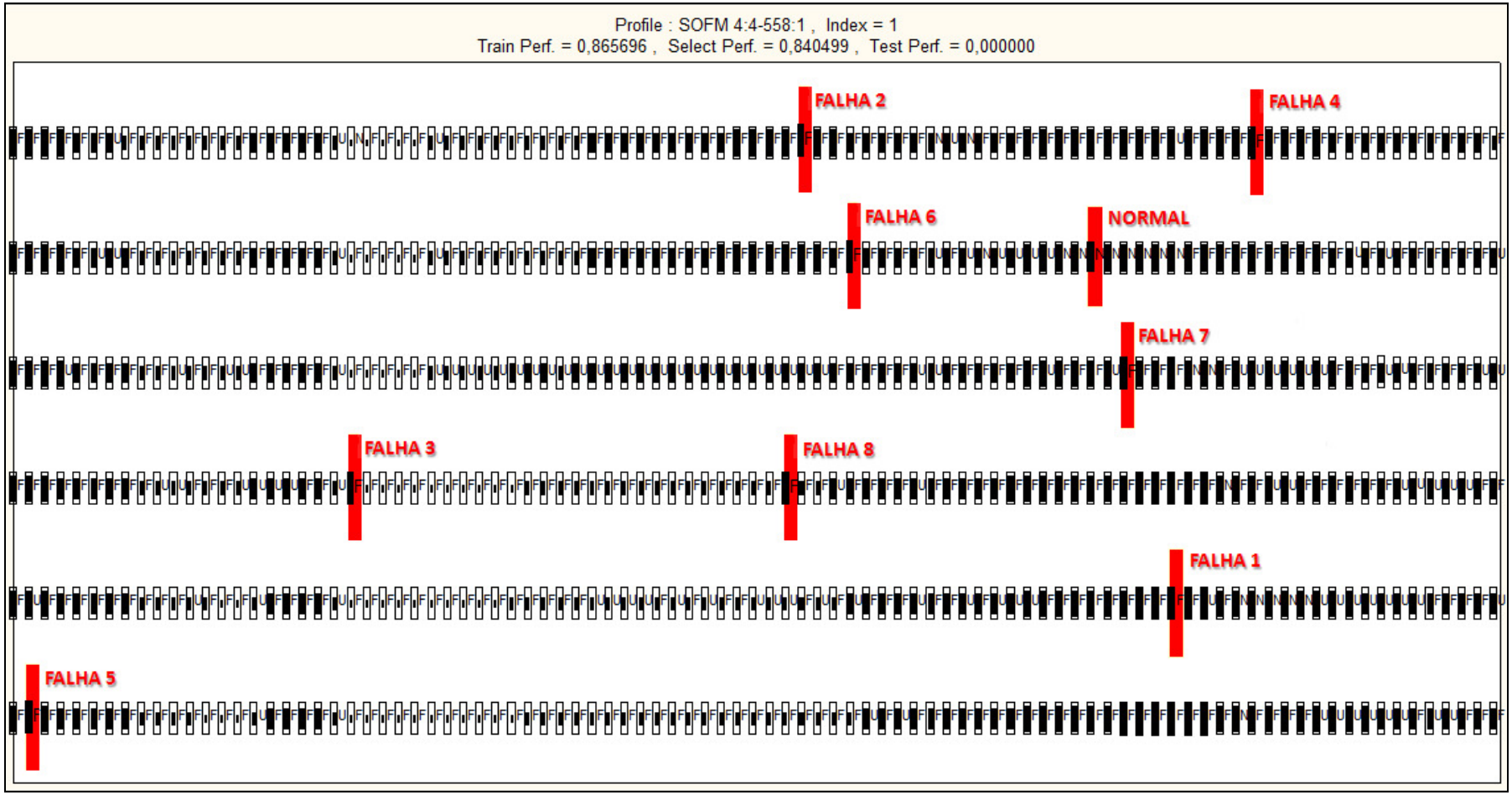

Figura 5.8 – Mapeamento topológico do treinamento de Kohonen para o Teste 4 mostrando a localização dos *clusters*

5.2.3 Desempenho das redes selecionadas para casos novos

Para as redes selecionadas nos Testes 1, 2, 3 e 4 foram realizados novos testes, de forma a se avaliar seus desempenhos frente à novos dados. Pelo fato de as primeiras falhas aplicadas possuírem magnitudes relativamente baixas, já que o modelo dinâmico do reator é muito sensível a distúrbios, foram simulados e coletados dados de perturbações um pouco maiores, pois as de menores magnitudes poderiam ser confundidas com a operação normal do reator. A Tabela 5.14 descreve as novas falhas:

Tabela 5.14 – Falhas para teste de generalização das redes

Duração da corrida	Falha	Descrição
0,5 h	9	Aumento de 15% na de adição do reagente A
0,5 h	10	Aumento de 15% na adição do reagente B
0,5 h	11	Redução de 15% na adição do reagente A
0,5 h	12	Redução de 15% na adição do reagente B

Para as novas falhas, foi utilizado o algoritmo "winner" de forma a se avaliar as capacidades de acerto das redes RBF e MLPs, conforme apresentado na Tabela 5.15:

Tabela 5.15 – Aplicação do algoritmo "winner" para verificação do desmepenho das redes RBF e MLPs após aplicação de novas magnitudes de falhas

Falha	% Acertos Rede RBF	% Acertos Rede MLP 1 (rede do Teste 2)	% Acertos Rede MLP 2 (rede do Teste 3)
9	100	100	2
10	99	85	76
11	100	99	7
12	100	2	85

As redes RBF e MLP 1 apresentaram índices de acertos muito bons para as Falhas 9, 10 e 11. Para a Falha 12, a rede MLP 1 não obteve êxito na classificação, o que pode ser explicado pela semelhança no comportamento da temperatura entre as Falhas 2 e 12, conforme ilustrado na Figura 5.9. Assim, diante da aplicação da Falha 12, a rede MLP 1

classificou a maior parte dos seus dados como Falha 2, já que seus comportamentos foram idênticos no período de meia hora.

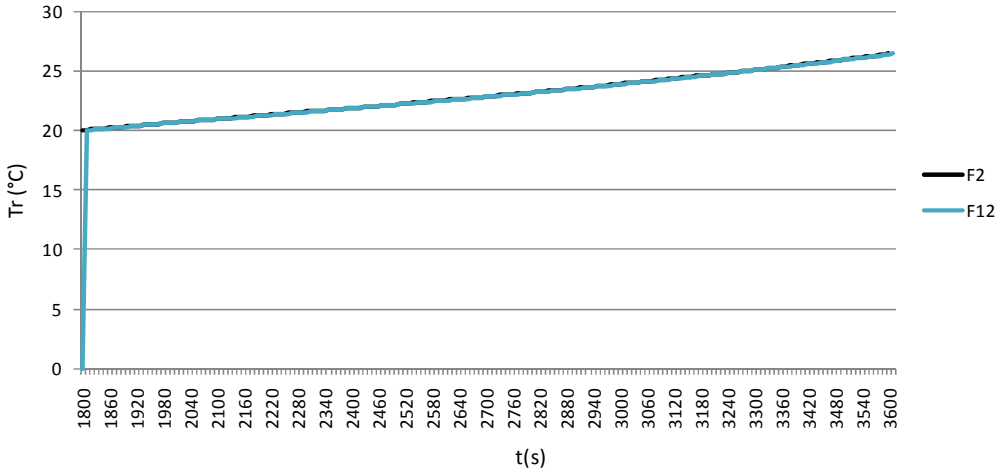

Figura 5.9 – Comparação das trajetórias da temperatura do reator ente as Falhas 2 e 12

A rede MLP 2 foi a que obteve pior desempenho neste teste. As Falhas 9 e 11, foram confundidas com as Falhas 5 e 6, respectivamente, conforme ilustrado na Figura 5.10. Isto é explicado pelo fato de as Falhas 9 e 5, bem como a 11 e a 6 provocarem comportamentos muito semelhantes na temperatura do reator. Para se evitar este tipo de equívoco, recomenda-se apresentar mais dados à rede para cada tipo de falha, de forma a aprimorar seu treinamento para o reconhecimento dos padrões de variações de temperatura.

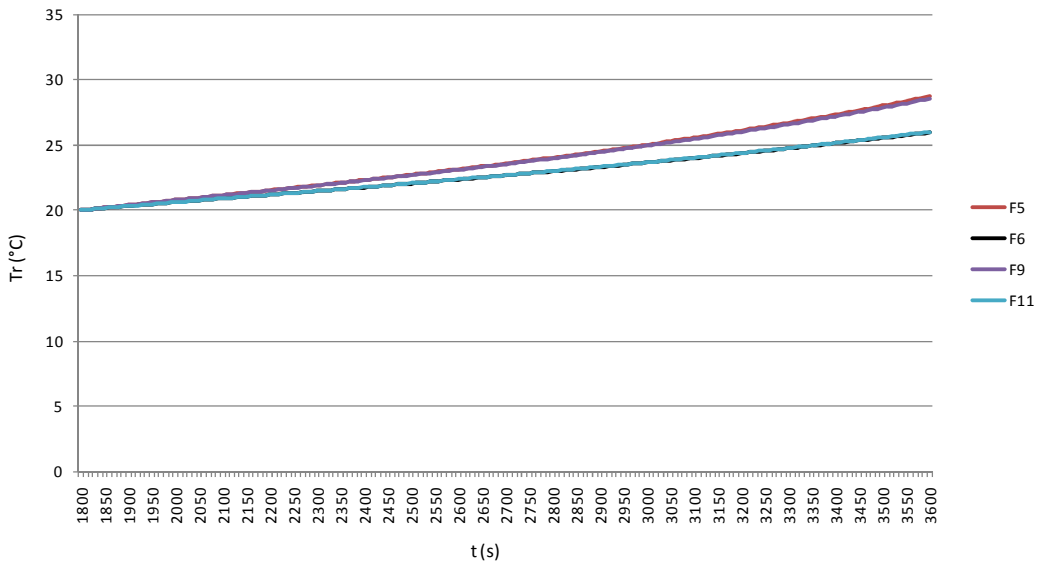

Figura 5.10 – Comparação das trajetórias da temperatura do reator entre as falhas 9-5 e 11-6

As redes SOFM também foram avaliadas quanto ao reconhecimento das novas falhas, através do algoritmo "winner" e os resultados encontram-se listados Tabela 5.16:

Tabela 5.16 – Aplicação do algoritmo "winner" para as redes SOFM após aplicação de novas magnitudes de falhas

Falha	% Acertos Rede SOFM 1	% Acertos Rede SOFM 2
9	86	90
10	86	98
11	94	99
12	94	99

Ambas as redes apresentaram bons desempenhos para generalização de falhas. A primeira rede apresentou índice de acertos um pouco pior para as duas primeiras falhas, pelo fato de seus neurônios serem classificados como "UNKNOWN" ou "NORMAL" para a Falha 9 e "UNKONWN" para a Falha 10, conforme ilustrado na Figura 5.11 e na Figura 5.12.

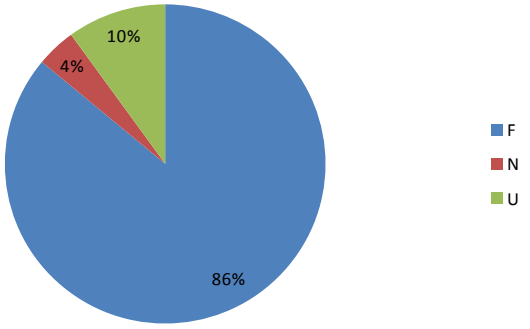

Figura 5.11 – Percentual de classificação dos neurônios frente à aplicação da Falha 9

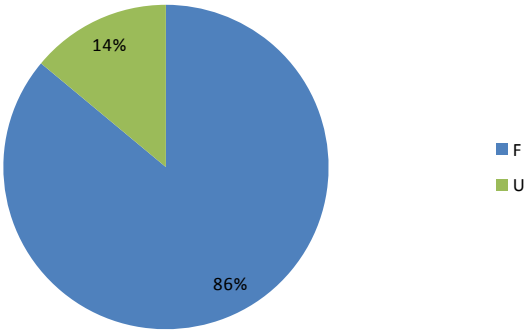

Figura 5.12 – Percentual de classificação dos neurônios frente à aplicação da Falha 10

CAPÍTULO 6

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

As redes neuronais têm sido estudadas para FDD desde o primeiro trabalho sobre o uso de redes neuronais na engenharia química, de HOSKINS e HIMMELBLAU (1988). Contudo, as variáveis analisadas no trabalho citado eram booleanas e as condições estáticas.

Nesta dissertação foram utilizadas as redes neuronais artificiais para realização de FDD baseada em dados de um modelo dinâmico de reator batelada. Além dos resultados de desempenho das redes fornecido pelo SNN, foi desenvolvido um algoritmo para uso dinâmico das classificações da rede, de forma a permitir sua utilização ao longo de uma corrida. Dos resultados obtidos, pode-se concluir que:

i. A técnica de FDD para modelo de reator batelada teve um bom desempenho frente ao reconhecimento das falhas investigadas, principalmente para tempos pequenos, próximos do início da reação (1/10 do tempo total de batelada);

ii. Para o Teste 1, tanto a rede RBF como a SOFM apresentaram bons resultados. A rede RBF apresentou um maior número de acertos que a SOFM e é mais indicada para o mapeamento das falhas genéricas. A rede SOFM apresenta grande potencial de classificação, mas seu treinamento deve ser aprimorado apresentando-se mais dados à mesma, de forma a aumentar sua eficácia de acertos;

iii. As redes MLP (com funções de ativação softmax na camada de saída) são mais indicadas para classificação do tipo de falha já que apresentaram bons resultados nos Testes 2 e 3, com números de parâmetros muito menores que os das redes RBF;

iv. As redes demonstraram capacidade de extrapolação para as novas condições de falhas estudadas preliminarmente. Para se evitar as confusões entre as classes recomenda-se treinar um maior número dados de forma a melhor capacitá-las a realizar as diferenciações entre os tipos de falha.

v. A técnica de FDD baseada em SOFM para falhas genéricas possui um potencial a ser explorado, já que este tipo de rede é capaz de fornecer um mapeamento gráfico das regiões de falha, que poderia auxiliar ao operador na identificação das mesmas;

vi. Assim como para o sensor de temperatura de entrada de fluido refrigerante na camisa do reator, pode-se aliar à técnica de FDD uma etapa prévia de diagnóstico dos sensores de processo (desvios de medidas, picos de medição e verificação de limites), de forma a se aproveitar as informações disponibilizadas pelos mesmos.

As ferramentas abordadas nesta dissertação têm como objetivo auxiliar ao operador na identificação das falhas, permitindo um diagnóstico antecipado das mesmas, para melhor condução do processo.

Como trabalhos futuros sugerem-se o aumento do número de dados simulados do modelo do reator, de forma a se apresentar mais padrões às redes, bem como o aumento da quantidade e tipos de falhas, mapeando-se assim as falhas gerais passíveis de ocorrência em processos em batelada.

É importante ressaltar que o controlador do sistema em malha fechada deve ser aprimorado, de forma a conseguir controlar perturbações maiores na carga do reator. Um controlador MPC (*Model Predictive Control*) não-linear ou um GMC (*Generic Model Control*), ambos possivelmente atenderiam melhor ao modelo dinâmico.

As redes SFOM apresentaram um desempenho surpreendente frente à classificação das falhas. Apesar de o modelo do reator ser bastante dinâmico e muito instável, o treinamento de Kohonen foi eficaz para a maior parte das falhas. Para melhoria da detecção da operação normal, recomenda-se apresentar mais padrões normais a este tipo de rede, como variações pequenas de 1 a 2%, de forma que a mesma consiga mapear tanto a

operação correta como pequenos ruídos que possam a vir provocar uma classificação errônea. Recomenda-se também aplicar pequenos ruídos nas condições de falha, de forma a se aperfeiçoar a distinção entre cada classe.

Em face ao bom resultado obtido nesta dissertação sugere-se a adoção de um algoritmo, ilustrado na Figura 6.1, de forma a ser utilizado como ferramenta de apoio operacional na detecção e diagnóstico de falhas em reatores batelada.

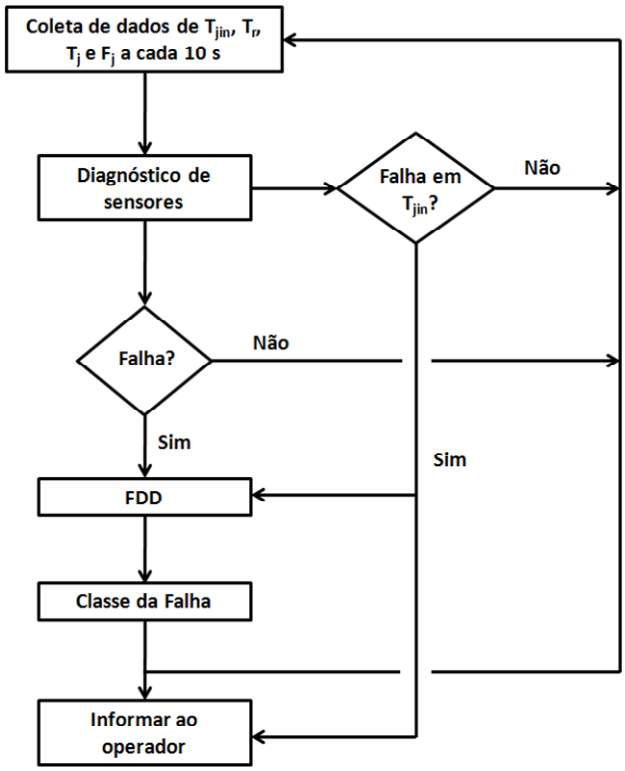

Figura 6.1 – Fluxograma com sugestão de algoritmo de apoio operacional

Espera-se que os resultados da presente dissertação contribuam para o desenvolvimento e aprimoramento de ferramentas de detecção de diagnóstico de falhas em processos em batelada, auxiliando ao operador na tomada de decisões, evitando assim acidentes e paradas da planta, melhorando a qualidade da operação.

CAPÍTULO 7

7. REFERÊNCIAS

1. ANSI/ISA-88.01-1995, *Batch Control, Part 1: Models and Terminology*, p. 98.

2. BARKER, M.; RAWTANI, J. *Practical Batch Process Management*, Elsevier, 2005, p. 178.

3. BONVIN, D. *Optimal operation of batch reactor – a personal view*. Journal of Process Control 8, 1998, p. 355-368.

4. BOTTER, E. A.; NASCIMENTO JUNIOR, C. L.; YONEYAMA, T. *Redes neurais auto-organizáveis para classificação de sinais eletrocardiográficos atriais*. Revista Integração 40, 2005, p. 51-56.

5. CACCAVALE, F.; PIERRI, F.; IAMARINO, M.; TUFANO, V. *An integrated approach to fault diagnosis for a class of chemical batch processes*. Journal of Process Control 19, 2009, p. 827-842.

6. CASTRO, N. *et al. Uso da análise em componentes principais para monitoramento de desempenho em uma planta de produção de eteno.* XVII CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 2008, Recife.

7. CHEN, J.; LIAO, C. M. *Dynamic process fault monitoring based on neural network and PCA.* Journal of Process Control 12, 2002, p. 277-289.

8. CHEN, J.; LIU, K. C. *On-line batch process monitoring using dynamic PCA and dynamic PLS models.* Chemical Engineering Science 57, 2002, p. 63–75.

9. CHIANG, L. H.; RUSSELL, E. L.; BRAATZ, R. D. *Fault detection and diagnosis in industrial systems*. Springer, 2001. Cap. 1-4, p. 1-55.

10. CINAR, A.; PALAZOGLU, A.; KAYIHAN, F. *Chemical process performance evaluation.* Taylor & Francis Group, 2007, Cap. 1-5, p. 1-114.

11. COTT, B.J.; MACCHIETTO, S. *Temperature control of exothermic batch reactors using generic model control*. Industrial and Engineering Chemistry Research 28, 1989, p. 1177.

12. DASH, S.; VENKATASUBRAMANIAN, V. *Challenges in the industrial applications of fault diagnostic systems*. Computers and Chemical Engineering 24, 2000, p. 785-791.

13. DE ALENCAR, J. R. B.; DE SOUZA Jr, M. B. *Redes neuronais artificiais: aplicações nas ciências farmacêuticas – uma revisão*. Revista Brasileira de Farmácia 88, 2007, p. 145-152.

14. DE SOUZA Jr., M. B. *Modelagem Heurística para Diagnóstico, Automação e Controle de Equipamentos e Sistemas***.** Relatório PROJETO MCT/FINEP/Ação Transversal – Cooperativos 02/2004, 2005.

15. DE SOUZA Jr., M. B. *Redes Neurais Artificiais na Engenharia Química***.** Apostila da disciplina de Redes Neurais. Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2008.

16. DING, S. X. *Model-based fault diagnosis techniques: design schemes, algoritms and tools*. Springer, 2008. Cap. 1, p. 1-11.

17. DOAN, X.; SRINIVASAN, R. *Dynamic PCA for phase identification of rifamycin b fermentation in multi-substrate complex media*. International Symposium on Advanced Control of Chemical Process. Brazil, 2006.

18. FAN, J. Y.; NIKOLAOU, M.; WHITE, R. E. *An approach to fault diagnosis of chemical processes via neural networks*. American Institute of Chemical Engineers 39, 1993, p. 82-88.

19. FAUSETT, L. *Fundamentals of Neural Networks – Architectures, Algorithms and Applications*. Prentice Hall, 1993. Cap1, p. 1-25.

20. FRIEDRICH, M.; PERNE, R. *Design and Control of Batch Reactors*. Computers & Chemical Engineering 19, 1995, p. 357-368.

21. FUENTE, M. J.; VEGA, P. *Neural networks applied to fault detection of a biotechnological process*. Engineering Applications of Artificial Intelligence 12, 1999, p. 569-584.

22. HAYKIN, S. *Redes Neurais: Princípios e Práticas*. 2ª ed. Rio Grande do Sul: Bookman, 2001. 900 p.

23. HIMMELBLAU, D. M. *Fault detection and diagnosis in chemical and petrochemical processes*. Elsevier, Amsterdam, 1978, 414 p.

24. HOSKINS, J. C.; HIMMELBLAU, D. M. *Artificial neural network models of knowledge representation in chemical engineering*. Computers and Chemical Engineering 12, 1988, p. 881-890.

25. HUA, X., ROHANI, S., JUTAN, A. *Cascade closed-loop optimization and control of batch reactors*. Chemical Engineering Science 59, 2004, p. 5695-5708.

26. ISERMANN, R. *Model-based fault-detection and diagnosis – status and application*. Annual Reviews in Controls 29, 2005, p. 71-85.

27. ISERMANN, R. *Fault-diagnosis systems: an introduction from fault-detection to fault tolerance*. Springer, 2006. Cap. 1-2 e 13, p. 1-30 e 267-278.

28. KOHONEN, T. *Self-Organizing Maps.* Springer, 2001. Cap. 1-3, p. 1-175.

29. KU, W.; STORER, R. H.; GEORGAKIS, C. *Disturbance detection and isolation by dynamic principal component analysis*. Chemometrics and intelligent laboratory systems 30, 1995, p. 179-196.

30. MACGREGOR, J. F.; KOURTI, T. *Statistical process control of multivariate processes*. Control Engineering Practice 3, 1995, p. 403-414.

31. MAJOZI, T. *Batch Chemical Process Integration*. Springer, 2010, Cap.1, p. 22-32.

32. MAULUD, A.; ROMAGNOLI, J. *Batch/Semi-Batch Process Fault Detection and Diagnosis using Orthogonal Nonlinear Multi-Way PCA: Application to an emulsion co-polymerization process*. International Symposium on Advanced Control of Chemical Processes, vol. I, 2006, p. 273-278.

33. MEDINA, E. A.; PAREDES, J. I. P. *Artificial neural network modeling techniques applied to the hydrodesulfurization process*. Mathematical and Computer Modelling 49, 2009, p. 207-214.

34. MONTGOMERY, D. C. *Introdução ao controle estatístico da qualidade*. 4ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004, 532 p.

35. MUJTABA, M.; AZIZ, N.; HUSSAIN, M. A. *Neural Network based modeling and control in batch reactor*. Chemical Engineering Research and Design 84, 2006, p. 635-644.

36. RAMIREZ, J.A.; ALVAREZ, J. *Robust temperature control for batch chemical reactors*. Chemical Engineering Science 60, 2005, p. 7108-7120.

37. ROMAGNOLI, J. *et al*. *Topological Analysis of Industrial Process Data Using the SOM*. International Symposium on Process Systems Engineering, 2009. p. 1173-1178.

38. ROTSTEIN, G.T.; LEWIN, D.R. *Control of an unstable batch chemical reactor*. Computers and Chemical Engineering 16, 1992, p. 27.

39. RUMELHART, D.E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. *Parallel Distributed Processing: Explorations in the Microstructures of Cognition*, Vol. 1, Cambridge, MA: MIT Press, 1986, p. 318-362.

40. RUMELHART, D.E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. *Learning representations by back-propagating errors*, Nature 323, 1986, p. 533-536.

41. SORSA, T.; KOIVO, H. N.; KOIVISTO, H. *Neural Networks in Process Fault Diagnosis*. IEEE Transactions on Systems, Man and Cybernetics 21, N° 4, 1991, p. 815-825.

42. SEBORG, D. E.; EDGAR, T. F.; MELLICHAMP, D. A.; DOYLE, F. J. *Process Dynamics and Control.* 3nd Edition, John Wiley & Sons, 2011, p. 437-448.

43. SONG, X.; HOPKE, P. K. *Kohonen neural network as a pattern recognition method based on the weight interpretation*. Analytica Chimica Acta 334, 1996, p. 57-66.

44. SOUSA, N. G. *Propagação de comportamento anormal em sistemas híbridos dinâmicos*. 2010. 164 p. Dissertação (Mestrado em Ciências) - Pós-graduação em Engenharia Química, Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais.

45. VAIDYANATHAN, R.; VENKATASUBRAMANIAN, V. *Representing and Diagnosing Dynamic Process Data Using Neural Networks*. Engineering Applications of Artificial Intelligence 5, 1992, p. 11-21.

46. VENKATASUBRAMANIAN, V.; VAIDYANATHANI, R.; YAMAMOTO, Y. *Process Fault Detection and Diagnosis using Neural Networks – I. Steady-State Processes*. Computers and Chemical Engineering 14, 1990, p. 699-712.

47. VENKATASUBRAMANIAN, V.; MYLARASWAMY, D. *A hybrid framework for large scale process fault diagnosis.* Computers and Chemical Engineering 21, 1997, p. S935-S940.

48. VEDAM, H.; VENKATASUBRAMANIAN, V. *PCA-SDG based process monitoring and fault diagnosis*. Control Engineering Practice 7, 1999, p. 903-917.

49. VENKATASUBRAMANIAN, V. *Abnormal events management in complex process plants: challenges and opportunities in intelligent supervisory control*. Proceedings

Foundations of Computer-Aided Process Operations (FOCAPO 2003), 2003, p. 117-132.

50. VENKATASUBRAMANIAN, V. *et al. A review of process fault detection and diagnosis Part I: Quantitative model-based methods*. Computers and Chemical Engineering 27, 2003a, p. 293-311.

51. VENKATASUBRAMANIAN, V. *et al. A review of process fault detection and diagnosis Part II: Qualitative model and search strategies*. Computers and Chemical Engineering 27, 2003b, p. 313-326.

52. VENKATASUBRAMANIAN, V. *et al. A review of process fault detection and diagnosis Part III: Process history based methods*. Computers and Chemical Engineering 27, 2003c, p. 327-346.

53. WANG, H. *Actuator fault diagnosis for nonlinear dynamic systems*. Transactions of the Institute of Measurement and Control 17, 1995, p. 63-71.

54. WATANABE, K.; HIROTA, S.; HOU, LIYA; HIMMELBLAU, D. M. *Diagnosis of multiple simultaneous fault via hierarchical artificial neural networks.* American Institute of Chemical Engineers 40, 1994, p. 839-848.

55. ZHOU, H. *et al. The Dynamic Flexibility of Batch Exothermic Reaction System: Take into Account the Effect of the Initial Operational Temperature*. Chinese Journal of Chemical Engineering 16, 2008, p. 916-922.

SITES ACESSADOS

1. MATLAB versão 7.0. Disponível em: www.mathworks.com. Acessado em 09 de Agosto de 2010.

2. WIKIPÉDIA: http://pt.wikipedia.org. Acessado em: 10 de Julho de 2010. Disponível em: http://pt.wikipedia.org/wiki/Reator_em_batelada.

3. STATSOFT: http://www.statsoft.com.br. Acessado em 12 de Outubro de 2010. Dsiponível em http://www.statsoft.com.br/pt/downloads.php?pg=documentos.

4. STATSOFT: http://www.statsoft.com.br. Acessado em 15 de Outubro de 2010. Dsiponível em http://www.statsoft.com/textbook/neural-networks/.

5. NEURODIMENSION: http://www.nd.com/welcome/whatisnn.htm. Acessado em 15 de Outubro de 2010.

6. ASM: http://www.asmconsortium.net/Pages/default.aspx. Acessado em 03 de dezembro de 2010.

7. SAFE PROCESS: http://www.safeprocess.es.aau.dk. Acessado em 03 de dezembro de 2010.

APÊNDICES

8. APÊNDICE I

8.1 Reator batelada em malha aberta

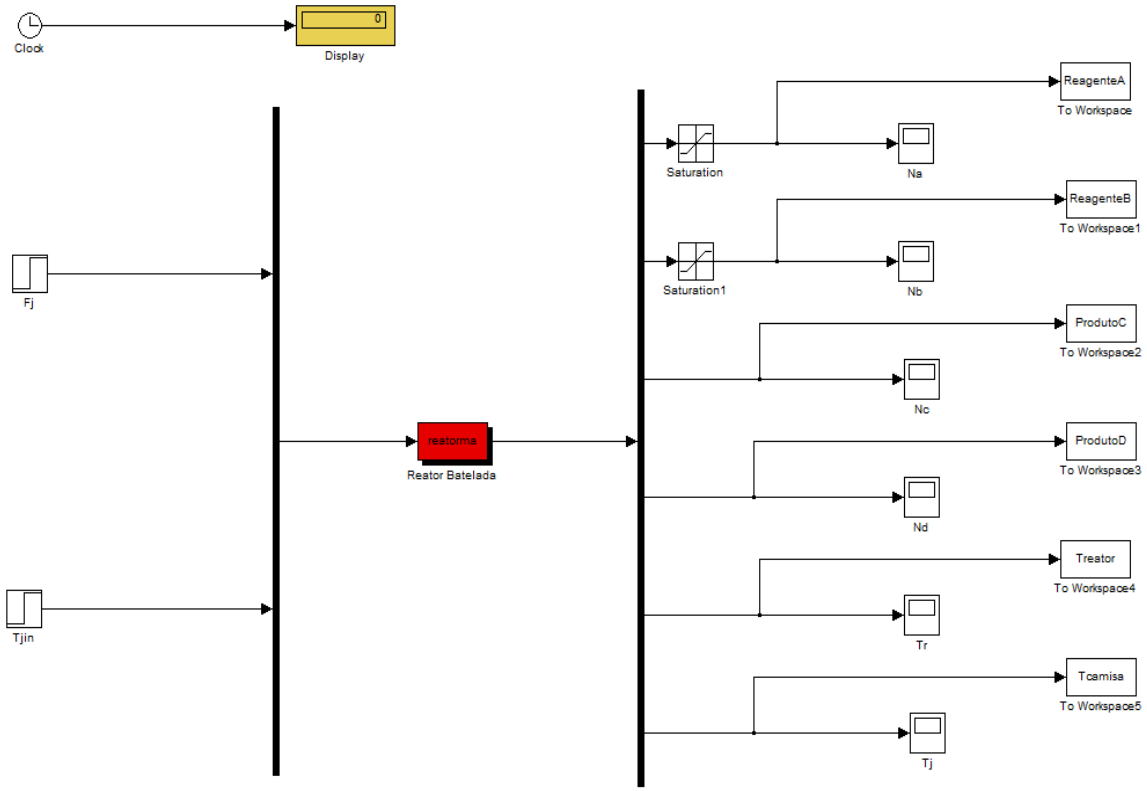

Figura 8.1 – Modelo reator batelada em malha aberta

```
function [dy,x0] = reator(t,x,u,flag)

switch flag

   case 0 % Dimensiona o sistema e inicializa os estados

      % dy=[estados,0,saídas,entradas,0,0]
         dy = [6,0,6,2,0,0];

      % Condições iniciais
         [conc_inicial, dim]  = concentracaoma;
            Na0  = conc_inicial(dim,1);
            Nb0 = conc_inicial(dim,2);
            Nc0  = 0;
            Nd0 = 0;
            Tr0 = 20;
            Tj0 = 20;
         x0  = [Na0 ; Nb0 ; Nc0 ; Nd0; Tr0; Tj0];

   case 1
            for i=1:6
         if x(i)<0
            x(i)==0;
         end
      end

%       Entradas sujeitas a degrau
%          Tjin = u(1);
%          Fj = u(2);


      % Cálculo das derivadas
%           Na  = x(1);
%           Nb = x(2);
%           Nc  = x(3);
%           Nd = x(4);
%           Tr = x(5);
%           Tj = x(6);

      % Parametros
         UA = 4.248;
         % Constante 1 para reação 1
         k11 = 20.9057;
         % Constante 2 para reação 1
         k12 = 10000;
         % Constante 1 para reação 2
         k21 = 38.9057;
         % Constante 2 para reação 2
```

```
        k22 = 17000;
        %Volume da jaqueta (m3)
        Vj = 0.6912;
        % Calor da reação 1 (kJ/kmol)
        dH1 = 41840;
        % Calor da reação 2 (kJ/kmol)
        dH2 = 25105;
        % Densidade do fluido refrigerante (kg/m3)
        rohj = 949;
        % Capacidade calorífica do componente A (kJ/kmol°C)
        Cpa = 75.31;
        % Capacidade calorífica do componente B (kJ/kmol°C)
        Cpb = 167.36;
        % Capacidade calorífica do componente C (kJ/kmol°C)
        Cpc = 217.57;
        % Capacidade calorífica do componente D (kJ/kmol°C)
        Cpd = 334.73;
        %Capacidade calorífica do fluido refrigerante (kJ/kg°C)
        Cpj = 1.8828;

    % Calculo da constantes das reaçoes
        k1 = exp(k11-(k12/(x(5)+273)));
        k2 = exp(k21-(k22/(x(5)+273)));

        Nr = x(1)+x(2)+x(3)+x(4);
        Cpr = (x(1)*Cpa+x(2)*Cpb+x(3)*Cpc+x(4)*Cpd)/Nr;


    % du(1)/dt
    dx(1) = -k1*x(1)*x(2) - k2*x(1)*x(3);
    % dNb/dt
    dx(2) = -k1*x(1)*x(2);
    % dNc/dt
    dx(3) = k1*x(1)*x(2) - k2*x(1)*x(3);
    % dNd/dt
    dx(4) = k2*x(1)*x(3);
    % dTr/dt
    dx(5)=((UA*(x(6)-x(5))) + (dH1*k1*x(1)*x(2) + dH2*k2*x(1)*x(3)))/(Nr*Cpr);
    % dTj/dt
    dx(6)= ((u(1)*rohj*Cpj*(u(2)-x(6))) - UA*(x(6)-x(5)))/(Vj*rohj*Cpj);

    % Vetor com i calculo das derivadas em cada passo de tempo
    dy = [dx(1) ; dx(2) ;  dx(3); dx(4); dx(5); dx(6)];

case 3 % Calcula as saídas
    for i=1:6
        if x(i)<0
            x(i)==0;
```

```
        end
      end


      % Utilizaçao das variaveis de saída
        Na  = x(1);
        Nb = x(2);
        Nc  = x(3);
        Nd = x(4);
        Tr = x(5);
        Tj = x(6);



      dy = [Na Nb Nc Nd Tr Tj];

    otherwise

      dy = [];

end
```

8.2 Reator batelada em malha fechada

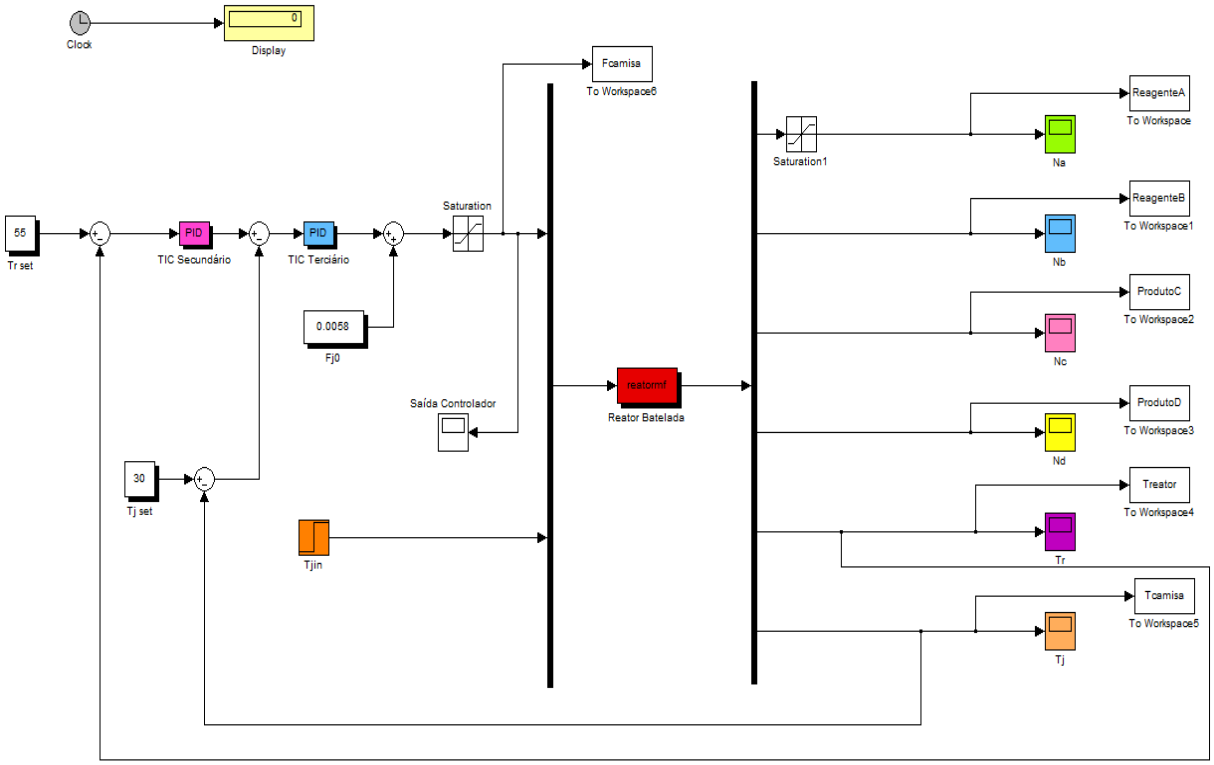

Figura 8.2 – Modelo reator batelada em malha fechada

```
function [dy,x0] = reator(t,x,u,flag)

switch flag

   case 0 % Dimensiona o sistema e inicializa os estados

      % dy=[estados,0,saídas,entradas,0,0]
         dy = [6,0,6,2,0,0];

      % Condições iniciais
         [conc_inicial, dim]  = concentracao;
            Na0  = conc_inicial(dim,1);
            Nb0 = conc_inicial(dim,2);
            Nc0  = 0;
            Nd0 = 0;
            Tr0 = 20;
            Tj0 = 20;
         x0  = [Na0 ; Nb0 ; Nc0 ; Nd0; Tr0; Tj0];

   case 1
            for i=1:6
         if x(i)<0
            x(i)==0;
         end
      end

%       Entradas sujeitas a degrau
%          Tjin = u(1);
%          Fj = u(2);


      % Cálculo das derivadas
%          Na  = x(1);
%          Nb = x(2);
%          Nc  = x(3);
%          Nd = x(4);
%          Tr = x(5);
%          Tj = x(6);

      % Parametros
         UA = 4.248;
         % Constante 1 para reação 1
         k11 = 20.9057;
         % Constante 2 para reação 1
         k12 = 10000;
         % Constante 1 para reação 2
         k21 = 38.9057;
```

```
        % Constante 2 para reação 2
        k22 = 17000;
        %Volume da jaqueta (m3)
        Vj = 0.6912;
        % Calor da reação 1 (kJ/kmol)
        dH1 = 41840;
        % Calor da reação 2 (kJ/kmol)
        dH2 = 25105;
        % Densidade do fluido refrigerante (kg/m3)
        rohj = 949;
        % Capacidade calorífica do componente A (kJ/kmol°C)
        Cpa = 75.31;
        % Capacidade calorífica do componente B (kJ/kmol°C)
        Cpb = 167.36;
        % Capacidade calorífica do componente C (kJ/kmol°C)
        Cpc = 217.57;
        % Capacidade calorífica do componente D (kJ/kmol°C)
        Cpd = 334.73;
        %Capacidade calorífica do fluido refrigerante (kJ/kg°C)
        Cpj = 1.8828;

    % Calculo da constantes das reaçoes
        k1 = exp(k11-(k12/(x(5)+273.15)));
        k2 = exp(k21-(k22/(x(5)+273.15)));

        Nr = x(1)+x(2)+x(3)+x(4);
        Cpr = (x(1)*Cpa+x(2)*Cpb+x(3)*Cpc+x(4)*Cpd)/Nr;


    % du(1)/dt
    dx(1) = -k1*x(1)*x(2) - k2*x(1)*x(3);
    % dNb/dt
    dx(2) = -k1*x(1)*x(2);
    % dNc/dt
    dx(3) = (k1*x(1)*x(2) - k2*x(1)*x(3));
    % dNd/dt
    dx(4) = k2*x(1)*x(3);
    % dTr/dt
    dx(5)=((UA*(x(6)-x(5))) + (dH1*k1*x(1)*x(2) + dH2*k2*x(1)*x(3)))/(Nr*Cpr);
    % dTj/dt
    dx(6)= ((u(1)*rohj*Cpj*(u(2)-x(6))) - UA*(x(6)-x(5)))/(Vj*rohj*Cpj);

    % Vetor com i calculo das derivadas em cada passo de tempo
    dy = [dx(1) ; dx(2) ;  dx(3); dx(4); dx(5); dx(6)];

case 3 % Calcula as saídas
    for i=1:6
        if x(i)<0
```

```
            x(i)==0;
        end
    end


    % Utilizaçao das variaveis de saída
      Na  = x(1);
      Nb = x(2);
      Nc  = x(3);
      Nd = x(4);
      Tr = x(5);
      Tj = x(6);

      x(:,1);

    dy = [Na Nb Nc Nd Tr Tj];

  otherwise

    dy = [];

end
```