



Universidade Federal
de Campina Grande

Universidade Federal de Campina Grande - UFCG
Centro de Ciências e Tecnologia – CCT
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química

Dissertação de Mestrado

Uso de Metamodelos na Otimização do Processo de Secagem do Carvão

Girrad Nayef Rached Farias

Campina Grande, Paraíba, Brasil

2022

Girrad Nayef Rached Farias

Uso de Metamodelos na Otimização do Processo de Secagem do Carvão

Dissertação de Mestrado submetida à Coordenadoria do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande - Campus de Campina Grande como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Área de concentração: Modelagem, simulação e otimização de processos químicos.

Orientador: Prof. Dr. Romildo Pereira Brito

Campina Grande, Paraíba, Brasil

2022

F224u

Farias, Girrad Nayef Rached.

Uso de metamodelos na otimização do processo de secagem do carvão / Girrad Nayef Rached Farias. – Campina Grande, 2022.

52 f. : il. color.

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2022.

"Orientação: Prof. Dr. Romildo Pereira Brito".

Referências.

1. Processos Químicos – Modelagem – Simulação e Otimização.
2. Carvão Mineral – Processo de Secagem.
3. RNA.
4. Algoritmo Genético.
5. Metamodelo. I. Brito, Romildo Pereira. II. Título.

CDU 66.011(043)

Girrad Nayef Rached Farias

Uso de Metamodelos na Otimização do Processo de Secagem do Carvão

Dissertação apresentada e aprovada em: 01.04.2022

Banca Examinadora:

ROMILDO PEREIRA BRITO:41912675404
Digitally signed by ROMILDO PEREIRA BRITO:41912675404
Date: 2022.05.03 11:15:57
+03'00'

Prof. Dr. Romildo Pereira Brito – DEQ/UFCG

Orientador



Prof. Dr. Wagner Brandão Ramos (DEQ/UFCG)

Examinador



Prof. Dr. Luís Gonzaga Sales Vasconcelos (DEQ/UFCG)

Examinador



Prof. Dr. Arioston Araujo De Moraes Junior (DEQ/UFPB)

Examinador

Campina Grande, Paraíba, Brasil, 01 de abril de 2022.



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
Rua Aprígio Veloso, 882, - Bairro Universitário, Campina Grande/PB, CEP 58429-900
Telefone: (83) 2101-1100
Site: <http://cct.ufcg.edu.br>

REGISTRO DE PRESENÇA E ASSINATURAS

ATA DA DEFESA PARA CONCESSÃO DO GRAU DE MESTRE, NO DOMÍNIO DA ENGENHARIA QUÍMICA, REALIZADA EM 01 DE ABRIL DE 2022

(Nº 508)

CANDIDATO(A): **Girrad Nayel Rached Farias**. COMISSÃO EXAMINADORA: Romildo Pereira Brito, Prof., Dr., UFCG, Orientador, Wagner Brandão Ramos, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, Luis Gonzaga Sales Vasconcelos, Prof., Dr., UFCG, Examinador Interno, Arioston Araújo de Moraes Júnior, Prof., Dr., UFPB, Examinador Externo. TÍTULO DA DISSERTAÇÃO: **"Uso de Metamodelos na Otimização do Processo de Secagem do Carvão"**. ÁREA DE CONCENTRAÇÃO Desenvolvimento de Processos Químicos. HORA DE INÍCIO: **09:30h** - LOCAL: **Sala Virtual, em virtude da suspensão de atividades na UFCG decorrente do corona vírus**. Em sessão pública, após exposição de cerca de 50 minutos, o(a) candidato(a) foi arguido(a) oralmente pelos membros da Comissão Examinadora, tendo demonstrado suficiência de conhecimento e capacidade de sistematização, no tema de sua dissertação, obtendo conceito **APROVADO**. Face à aprovação, declara o(a) orientador, achar-se a examinada, legalmente habilitado(a) a receber o Grau de Mestre Engenharia Química, cabendo a Universidade Federal de Campina Grande, como de direito, providenciar a expedição do Diploma, a que o(a) mesmo(a) faz jus. Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata, que é assinada por mim, Maricé Pereira de Araújo - Secretária do PPGEQ, os membros da Comissão Examinadora e o(a) candidato(a). Campina Grande, 01 de abril de 2022.

Maricé Pereira de Araújo
Secretária

Romildo Pereira Brito, UFCG
Orientador

Wagner Brandão Ramos, UFCG
Examinador Interno

Luis Gonzaga Sales Vasconcelos, UFCG
Examinador Interno

Arioston Araújo de Moraes Júnior, UFPB
Examinador Externo

Girrad Nayel Rached Farias
Candidato



Documento assinado eletronicamente por **WAGNER BRANDAO RAMOS, PROFESSOR DO MAGISTERIO SUPERIOR**, em 01/04/2022, às 11:03, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **LUIS GONZAGA SALES VASCONCELOS, PROFESSOR 3 GRAU**, em 01/04/2022, às 11:12, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **MARICE PEREIRA DA SILVA, SECRETÁRIA**, em 01/04/2022, às 14:02, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **Girrad Nayef Rached Farias, Aluno**, em 04/04/2022, às 18:01, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



Documento assinado eletronicamente por **ROMILDO PEREIRA BRITO, PROFESSOR 3 GRAU**, em 04/05/2022, às 23:05, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 8º, caput, da [Portaria SEI nº 002, de 25 de outubro de 2018](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site <https://sei.ufcg.edu.br/autenticidade>, informando o código verificador **2221953** e o código CRC **B97A3DC8**.

01/04/2022 15:54

E-mail de Departamento de Engenharia Química - UFCG - ASSINATURA DE ATA



Wagner Ramos <wagner.ramos@eq.ufcg.edu.br>

ASSINATURA DE ATA

1 mensagem

Arioston Júnior <ar_jjr@hotmail.com>

1 de abril de 2022 11:09

Para: "ppgeq@eq.ufcg.edu.br" <ppgeq@eq.ufcg.edu.br>, Wagner Ramos <wagner.ramos@eq.ufcg.edu.br>

Cc: Romildo Brito <brito.romildo@outlook.com>

Prezados, bom dia.

Na qualidade de membro da comissão examinadora da defesa de Dissertação intitulada "Uso de Metamodelos na Otimização do Processo de Secagem do Carvão", de Girrad Nayef Rached Farias, da qual participei por videoconferência, declaro ter recebido cópia da ata, que consta nos autos do processo nº 23096.012608/2022-84, a qual li e, embora não tenha podido assinar, é para todos os efeitos como se eu tivesse, pois está em perfeita conformidade com o que foi deliberado pela comissão e, portanto, estou de pleno acordo com seus termos.

Saudações,

Prof. Dr. Arioston Araújo de Moraes Júnior

Universidade Federal da Paraíba - UFPB, Centro de Tecnologia - CT
Departamento de Engenharia Química - DEQ, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química (PPGEQ-UFPB)

Laboratório de Modelagem Computacional e Controle de Processos-LABMC

<https://sigaa.ufpb.br/sigaa/public/docente/portal.jsf?siape=1860635>

Contato: (83) 99856-8006

Dedicatória

Dedico este trabalho a todos que participaram da minha vida, e que de alguma forma contribuíram para construir a pessoa que sou hoje. Sem vocês, não chegaria aqui.

Agradecimentos

À minha mãe, Soahd Arruda Rached, que foi a pessoa que me deu a base para ter tudo que tenho, mesmo em momentos difíceis nunca deixou faltar nada, e sempre prezou por uma boa educação, seja ela pessoal ou profissional, meu exemplo de esforço e dedicação.

Á minha avó, Lindalva Arruda, que tanto fez por mim e por meu irmão, quando minha mãe não estava presente, ela se fez mãe, por vários anos na minha vida, sinto muito sua falta, sempre vou levar a senhora no meu coração.

Aos meus irmãos Hafid e Raid, que além de familiares, foram meus amigos de verdade desde sempre, e que será para vida toda.

Ao meu pai, Flavio Alex, que juntamente com minha mãe me criou, e que carrego um pedaço da personalidade.

À Viviane Carneiro, pelo amor, carinho, e estar do meu lado desde 2017, me tornando uma pessoa melhor a cada dia.

Aos meus amigos que acompanharam meu desenvolver a muitos anos atrás, antes de começar essa jornada de cursar Engenharia Química.

Aos meus amigos e amigas de curso que desde 2014 estamos juntos nessa saga do curso e da vida, onde pude compartilhar o mesmo espaço e tempo com vocês.

Aos meus amigos LARCA/LABFREN e do Programa ALIANÇA, por vocês tenho muita admiração. Especialmente a Fabricia Sales, Gabriel Rodrigues, Neto Pereira e Luis Trovão.

Ao meu orientador Prof. Romildo Brito, por ser o exemplo de profissional que desejo me tornar.

Aos funcionários e demais professores da Universidade Federal de Campina Grande, aqueles que, com prazer, mostraram-me o poder do conhecimento. Em especial, aos professores Laércio Gomes, Vimário Simões, Wagner Brandão e Luis Gonzaga.

“Every new beginning comes from some other beginning's end.”

Dan Wilson

Resumo

O carvão mineral é um insumo utilizado como redutor e/ou fonte de energia em diversos processos. Esse combustível é encontrado de forma que não pode ser utilizado sem tratamento prévio, necessitando de operações para redução da granulometria e da umidade. Dessa forma, esse trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo fenomenológico do processo de secagem do carvão em Aspen Plus para servir de gerador de dados para a criação de metamodelos com base em Redes Neurais Artificiais, e assim, avaliar cenários de processo através de rotinas de otimização. Em conjunto foi aplicado Algoritmo Genético para determinação de arquiteturas da RNA, com intuito de reduzir o erro da predição do metamodelo. Com a simulação validada a partir de dados industriais, foi possível otimizar a arquitetura da rede, onde houve mudança do número de camadas e neurônios, contribuindo para melhora da predição do processo, obtendo erros médios de 0,01% até 1,66% das variáveis preditas. A otimização do cenário de operação, conseguiu reduzir de forma significativa o consumo dos combustíveis usados para aquecimento do gás de secagem, com todas as variáveis de qualidade do processo sendo atendidas, resultando em uma redução de 15% de gás de alto forno e 80% de gás natural, reduzindo o consumo energético do processo.

Palavras-chave: Carvão Mineral, RNA, Otimização, Algoritmo Genético, Metamodelo.

Abstract

Coal is an input used as a reducer and/or energy source in several processes. This fuel is found in such a way that it cannot be used without previous treatment, requiring operations to reduce granulometry and moisture. Thus, this work aims to develop a phenomenological model of the coal definition process in Aspen Plus to serve as a data generator for the creation of metamodels based on Artificial Neural Networks, and thus, to evaluate routine optimization process scenarios. Together, a Genetic Algorithm was applied to determine ANN architectures, in order to reduce the metamodel prediction error. With the simulation validated from industrial data, it was possible to optimize the architecture of the network, there was a change in the number of layers to two and neurons, contributing to improve the prediction of the process, obtaining average errors from 0.01% to 1.66 % of predicted variables. The optimization of the operating scenario managed to significantly reduce the consumption of fuels used for heating the drying gas, with all process quality variables being met, resulting in a reduction of 15% of blast furnace gas and 80% of natural gas, reducing the energy consumption of the process.

Keywords: Coal, RNA, Optimization, Genetic Algorithm, Metamodel.

Lista de Figuras

Figura 1 – Fluxograma simplificado do processo de secagem do carvão.....	20
Figura 2 – Fluxograma da simulação do processo de secagem implementado em Aspen Plus™	27
Figura 3 – Detalhamento da simulação da combustão.	29
Figura 4 – Modelo de uma Rede Neural Artificial (RNA).....	31
Figura 5 – Procedimento de construção e otimização do metamodelo baseado em RNA	35
Figura 6 – Fluxograma para resolução do problema de otimização do metamodelo.....	36
Figura 7 – Estrutura da RNA utilizada como metamodelo para o processo da secagem do carvão	40
Figura 8 – Predição da umidade do ar de secagem sem tratamento de dados	41
Figura 9 – Predição da umidade do ar de secagem com tratamento de dados.....	42
Figura 10 – Predição da umidade do ar de secagem com arquitetura otimizada	43
Figura 11 – Comportamento da função objetivo (consumo de combustíveis) a ser minimizada.....	45

Lista de Tabelas

Tabela 1 – Especificação dos componentes utilizados na modelagem fenomenológica.	28
Tabela 2 – Composição do gás natural e do gás de alto forno.....	30
Tabela 3 – Especificação das temperaturas das correntes medidas.....	39
Tabela 4 – Composição da corrente AIRDRYER.....	39
Tabela 5 – Erros médios de predição das metodologias	43
Tabela 6 – Resultados dos inputs otimizado da secagem do carvão para o cenário avaliado	46
Tabela 7 – Resultados dos outputs otimizado da secagem do carvão para o cenário avaliado	46

Lista de Símbolos e Abreviaturas

BFG	<i>Blast Furnace Gas</i>	16
GN	<i>Gás Natural</i>	16
IA	<i>Inteligência Artificial</i>	17
RNA	<i>Redes Neurais Artificiais</i>	17
PROXANAL	<i>Proximate Analysis</i>	22
ULTANAL	<i>Ultimate Analysis</i>	22
w_{ij}	<i>Pesos sinápticos</i>	24
w_{j0}	<i>Bias</i>	24
φ	<i>Função de Ativação</i>	24
x_j	<i>Vetor de entrada</i>	24
PCA	<i>Principal Component Analysis</i>	26
V_{Real}	<i>Valor Simulação Fenomenológico</i>	27
$V_{predito}$	<i>Valor Gerado Metamodelo</i>	27
y_i	<i>Valor Real</i>	27
\hat{y}_i	<i>Valor Predito</i>	27
n	<i>Conjunto de amostras</i>	27
y_{mean}	<i>Valor médio</i>	27
GA	<i>Genetic Algoritmos</i>	27

Sumário

Capítulo 1	18
Introdução.....	19
1.1. Descrição do Problema.....	19
1.2. Objetivos.....	21
1.3. Objetivos Específicos	21
1.4. Organização.....	21
Capítulo 2	23
Estado da Arte.....	24
2.1 Trabalhos de Referência.....	24
2.2 Considerações Finais	25
Capítulo 3	26
Metodologia.....	27
3.1 Modelagem Fenomenológica.....	27
3.2 Redes Neurais Artificiais e Metamodelos	30
3.3 Considerações Finais	36
Capítulo 4	38
Resultados.....	39
4.1 Validação do Modelo Fenomenológico e Desenvolvimento do Metamodelo.....	39
4.2 Otimização do Processo de Secagem do Carvão Através de um Metamodelo Baseado em Redes Neurais.....	44
4.3 Considerações Finais	47
Capítulo 5	48
Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros.....	49
Referências Bibliográficas	50

Capítulo 1

Introdução

Este capítulo introdutório apresenta uma visão geral sobre o trabalho, incluindo a motivação e os objetivos. Além disso, há também uma breve apresentação sobre a organização desta Dissertação de Mestrado

1.1. Descrição do Problema

O carvão mineral é um combustível fóssil extraído por meio da mineração, e sua formação ocorre pela decomposição da matéria orgânica. O soterramento dessa matéria por depósitos de argila, provoca o aumento de pressão e temperatura, concentrando os átomos de carbono e expulsando os átomos de oxigênio e hidrogênio (carbonificação) (Reis, 2014).

O carvão é utilizado na siderurgia e na fundição para a fabricação do coque (coqueificação), e nos processos de redução direta, como alternativa ao alto forno para a fabricação de aço.

Entretanto, esse combustível nem sempre é encontrado em condições de ser utilizado diretamente, necessitando de operações para redução da granulometria e/ou da umidade.

O processo de secagem do carvão tem influência direta nos processos subsequentes, devido a seu produto ser utilizado como combustível na produção do ferro gusa no alto forno. Para que o carvão seja utilizado é necessário reduzir a umidade, pois sua queima acontece de forma mais eficiente neste cenário (Dong et al., 2017).

A especificação desse parâmetro deve ser atingida com o menor custo de processamento, mantendo a produção e qualidade do carvão seco, visando estabilidade na produtividade em todas as épocas do ano. A energia térmica utilizada durante a secagem está relacionada à competitividade da empresa, devido ao custo final por tonelada de carvão seco produzida. A economia energética deve ser objetivada para encontrar o ponto de equilíbrio entre produtividade do processo e o consumo de combustíveis.

No processo de secagem, o carvão é introduzido diretamente na mesa de moagem, enquanto um moinho gira em rotação constante e o carvão se distribui de forma uniforme. Simultaneamente, a secagem é realizada a partir da injeção de gases em altas

temperaturas. O produto que passa pelo separador pneumático, apresenta a granulometria desejada. A Figura 1 apresenta o processo de secagem de forma simplificada.

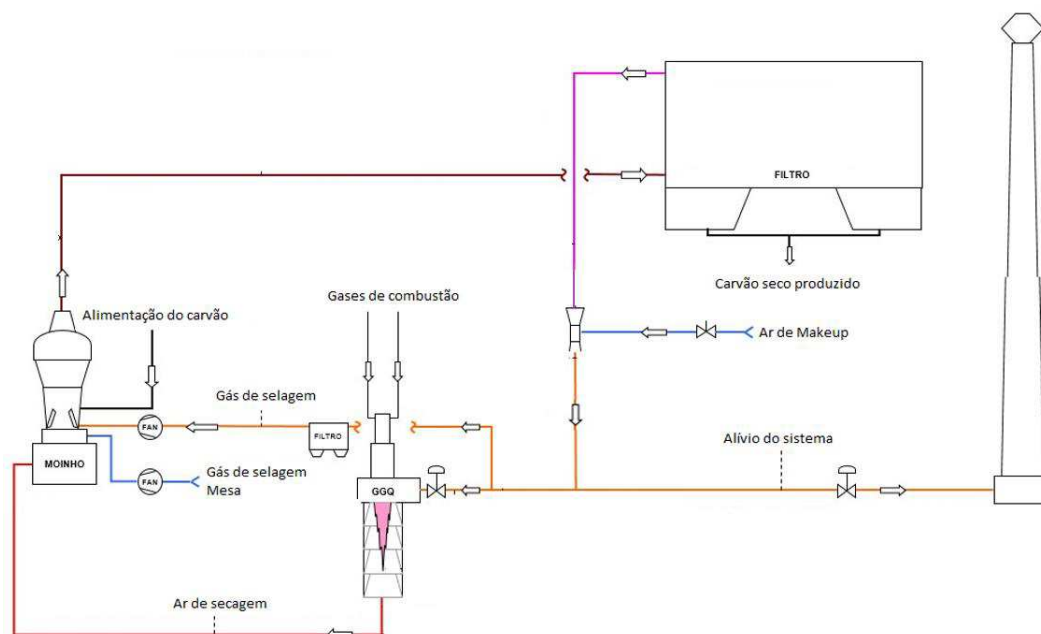


Figura 1 – Fluxograma simplificado do processo de secagem do carvão.

Após sair do secador, o carvão é encaminhado para filtros, onde ocorre a separação dos gases e do carvão particulado seco. Posteriormente, ocorre adição de ar no sistema e em seguida, parte desse gás é removido do processo, com o objetivo de reduzir a umidade presente na corrente. Na etapa seguinte o gás é reaquecido pela combustão na câmara.

A energia térmica utilizada no aquecimento dos gases de secagem provém da combustão dos gases de alto forno (BFG) e gás natural (GN), que deve fornecer a carga térmica necessária para que o carvão saia na umidade especificada para ser alimentado no alto forno.

Embora os simuladores comerciais apresentem diversas vantagens como modelos consolidados e grande conjunto de dados termodinâmicos, existe uma limitação devido ao uso de rotinas de otimização, por causa do elevado esforço computacional empregado. Nesse sentido, técnicas híbridas usando inteligência artificial (IA) e modelos

fenomenológicos auxiliam a implementação de rotinas de otimização no modelo do processo (Quirante, 2017).

1.2. Objetivos

O objetivo deste trabalho foi propor uma modelagem fenomenológica do processo de secagem do carvão usando o simulador Aspen Plus™, com o intuito de ser gerador de dados para um metamodelo baseado em RNA, que foi utilizado para otimização da estrutura da rede e das principais variáveis do processo, a partir de rotinas do Matlab®.

1.3. Objetivos Específicos

1. Simular o processo de secagem do carvão através do software *Aspen Plus*™;
2. Gerar um banco de dados através da ferramenta *Sensitivity* do *Aspen Plus*™;
3. Construir a Rede Neural Artificial (RNA) através do *Matlab*®;
4. Otimização da arquitetura da rede através do uso de Algoritmo Genético;
5. Otimização do processo a partir da rotina *fmincon*.

1.4. Organização

Este texto está organizado da seguinte forma:

No Capítulo 1 é descrito o processo de secagem do carvão no qual o detalhamento da secagem usada no estudo de caso para este trabalho está descrito, e as suas necessidades e técnicas utilizadas para a modelagem.

No Capítulo 2 é apresentado o estado da arte em relação aos trabalhos que serviram como base para a realização desta Dissertação de Mestrado.

No Capítulo 3 é discutida a metodologia desenvolvida para criação e implementação do modelo de inteligência artificial, juntamente com o modelo criado no software Aspen Plus.

No Capítulo 4 é apresentado inicialmente a validação estatística do modelo a partir da comparação entre os dados simulados (Fenomenológico e IA) e os dados de planta. Além

disso, os resultados principais obtidos a partir das análises conduzidas neste trabalho também serão apresentadas neste capítulo.

No Capítulo 5 são apresentadas as principais conclusões que foram obtidas através dos resultados.

Capítulo 2

Estado da Arte

Na literatura recente, as pesquisas acerca da utilização de inteligência artificial para o desenvolvimento de modelos que auxiliam na predição de processos industriais são abrangentes e utilizam diversos tipos e estruturas para encontrar a que mais se adequa a determinadas situações e comportamentos dos dados, pois o maior desafio está relacionado a grande variabilidade dos processos, necessitando cada vez mais de técnicas e modelos rigorosos que consigam determinar com precisão esses comportamentos.

2.1 Trabalhos de Referência

A modelagem com base em IA surgiu com o intuito de solucionar problemas onde os fatores que regiam o processo eram desconhecidos ou de difícil aplicação. A baixa capacidade de processamento e armazenamento de dados no período em que a IA foi desenvolvida limitou a aplicação deste tipo de modelagem. Com a modernização dos computadores e o desenvolvimento de sistemas integrados e com alta capacidade de armazenamento e processamento de dados, esse tipo de modelagem torna-se cada vez mais aplicável (HALL et al., 2016).

Dentre as técnicas de IA destacam-se: Support Vector Machine (SVM), Gaussian Process Regression, Arvore de Decisão, Redes Neurais Artificiais (RNA). Particularmente, as RNA possuem elevada capacidade de processamento de dados, velocidade e versatilidade, e é possível prever parâmetros importantes de um sistema não conhecido (Morais Júnior, 2011; Neves, 2016).

Kadri e Mouss (2017) desenvolveu um modelo híbrido de RNA e um algoritmo de Otimização de Colônia de Formigas (ACO) para diagnosticar a condição de um forno rotativo de clinquerização. Os autores utilizaram 20 variáveis do processo para o treinamento, dentre elas a pressão dos ciclones, temperatura do gás do ciclone, temperatura do clínquer e temperatura do ar secundário. Esse modelo apresentou ser computacionalmente mais rápido e preciso quando comparado com o modelo híbrido de SVM.

Esly et. al. (2004) empregaram redes neurais para descrever o processo de operação do reator de pré-branqueamento com oxigênio de uma planta de papel e celulose. Eles

aplicaram uma arquitetura de rede do tipo *feedforward* com 3 neurônios na camada intermediária e 11 variáveis de entrada treinadas. Foi observado uma melhora significativa da previsão da variável de saída; entretanto com o caráter dinâmico do processo, a RNA teve a precisão de aproximadamente 76% da variabilidade experimental.

Luo, et. Al. (2018) utilizaram a modelagem *Gaussian Process* (GP) de efeito misto ME-GP, com o objetivo prever o fluxo de fusão de um polímero por injeção, para preenchimento de moldes de diferentes formatos. A variável de interesse é a *melt-flow-length* (MFL), que é amplamente influenciada pela geometria recipiente. Foi observado que adotando uma significância de 95%, a utilização do modelo misto obteve um resultado superior, quando comparado à utilização do GP.

2.2 Considerações Finais

Este capítulo apresentou uma visão geral das principais referências utilizadas para o entendimento sobre a possibilidade de aplicação de inteligência artificial para predição no cenário industrial, e que a compreensão do processo que será aplicada essa técnica é fundamental para elencar variáveis com grande influência, para que resulte em um modelo com capacidade de predição.

Capítulo 3

Metodologia

Neste capítulo é abordado o desenvolvimento do modelo da secagem do carvão utilizado como estudo de caso. No software Aspen Plus e a posterior geração de metamodelos utilizando o Matlab, também as rotinas de otimização aplicadas na estrutura do RNA e para melhoria do processo.

3.1 Modelagem Fenomenológica

A modelagem fenomenológica do processo de secagem do carvão foi desenvolvida no Aspen Plus™, cujo fluxograma de processo (PFD) é mostrado na Figura 2. Para simular a secagem, foram selecionados os componentes envolvidos no processo, conforme mostra a Tabela 1.

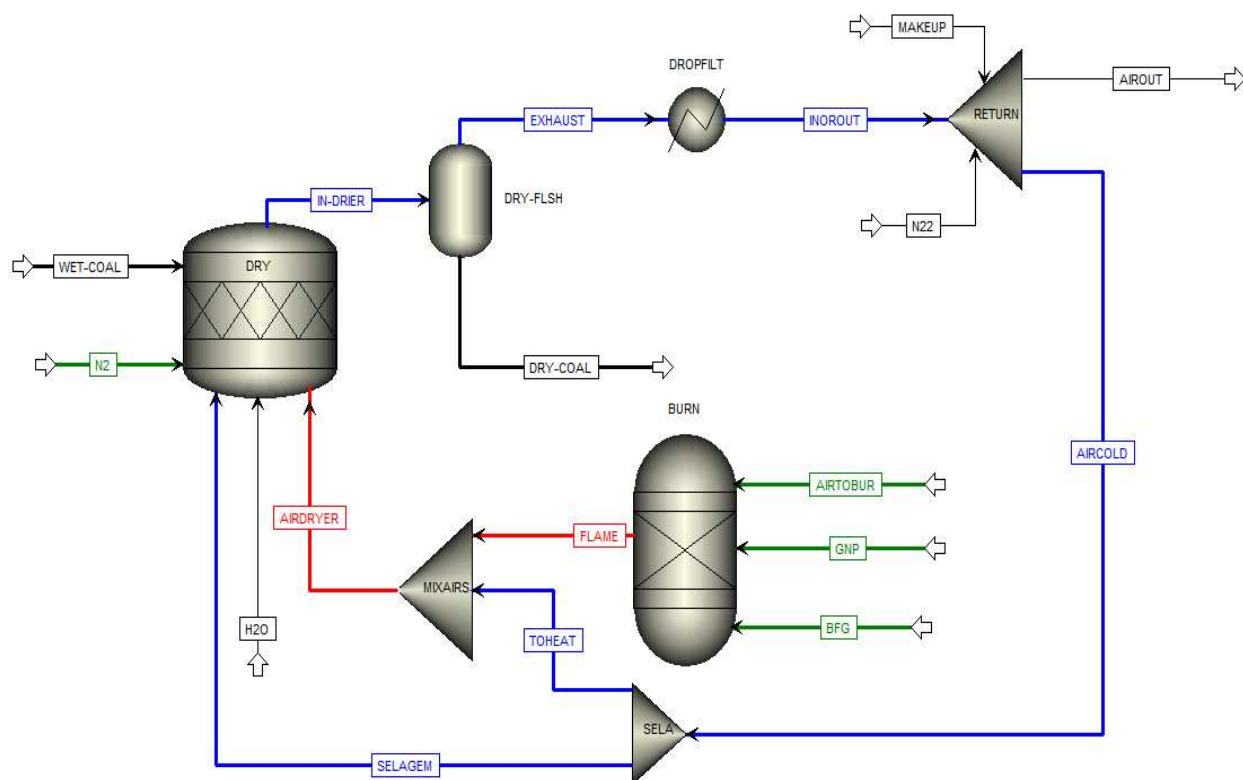


Figura 2 – Fluxograma da simulação do processo de secagem implementado em Aspen Plus™

Tabela 1 – Especificação dos componentes utilizados na modelagem fenomenológica.

Componente	Tipo	Fórmula
Água	Convencional	H ₂ O
Nitrogênio	Convencional	N ₂
Oxigênio	Convencional	O ₂
Carvão	Não Convencional	
Dióxido de Nitrogênio	Convencional	NO ₂
Hidrogênio	Convencional	H ₂
Monóxido de Carbono	Convencional	CO
Dióxido de Carbono	Convencional	CO ₂
Metano	Convencional	CH ₄
Acetileno	Convencional	C ₂ H ₂
Propano	Convencional	C ₃ H ₈

Para as correntes de carvão, definiu-se a presença de componentes não-convencionais. Uma vez que estes componentes não possuem fórmula química bem definida, utilizou-se as correlações HCOALGEN e DCOALIGT para calcular a entalpia e densidade destes compostos, respectivamente.

Foi definido o teor de umidade do carvão através do atributo da análise Proxanal e dos termos da análise Ultanal que correspondem ao teor de cinzas, carbono, hidrogênio, nitrogênio, cloro, enxofre e oxigênio (Araújo Neto, 2021).

Para representar a combustão, utilizou-se a rotina RGibbs, que considera a minimização da energia de Gibbs para o cálculo da combustão adiabática. Para a decomposição da água do carvão, foi utilizado o RStoic, e para simular as perdas térmicas presente nos filtros, foi utilizado trocadores de calor do tipo Heater.

A corrente GNP da Figura 2 representa a alimentação de gás natural e a BFG corresponde à alimentação do gás de alto forno. A corrente AIRTOBUR é a alimentação de ar para que ocorra a combustão. Após a queima a corrente FLAME irá se misturar com o gás frio TOHEAT, gerando a corrente quente que será utilizado na secagem (AIRDRYER).

A alimentação do carvão úmido representada pela corrente WET-COAL mistura-se com o gás de secagem, e após a troca térmica e remoção de umidade, é separado na corrente DRY-COAL, onde apresenta o carvão produzido com a umidade especificada.

Após a separação do carvão (DRY-COAL) dos gases (EXHAUST), é feita a adição de ar através da corrente MAKEUP e de nitrogênio pela corrente N₂. Após a mistura, parte do gás é eliminado do sistema AIROUT, e outra parte retorna, para que seja aquecido novamente na corrente AIRCOLD.

Parte do AIRCOLD é dividido para uma corrente de selagem (SELAGEM) e outra é enviada para ser aquecida pela corrente FLAME.

A Figura 3 apresenta o esquema da combustão que fornece energia para o sistema. Dois gases combustíveis foram utilizados para o aquecimento do ar de secagem, são eles: gás natural (GN) e o gás de alto forno (BFG).

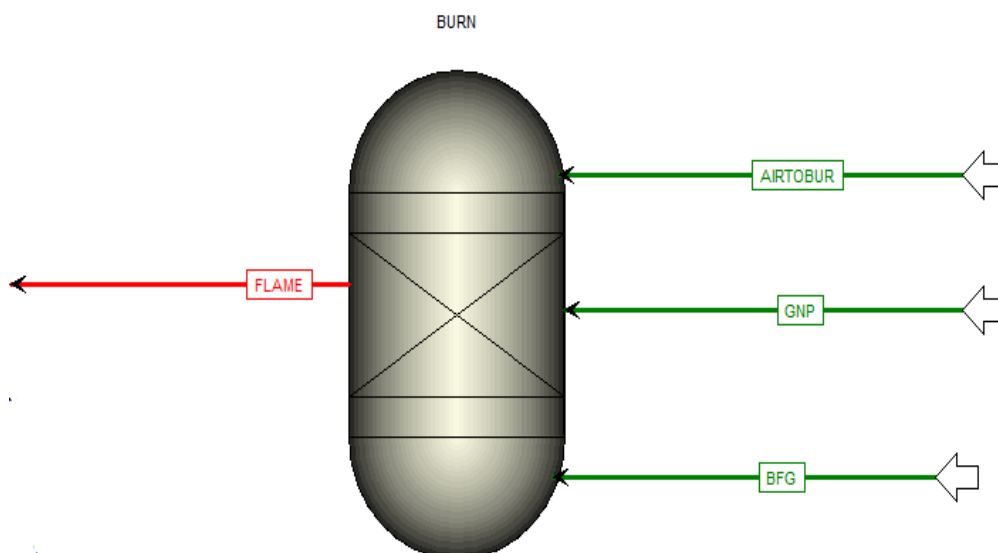


Figura 3 – Detalhamento da simulação da combustão.

As composições são especificadas nas correntes, utilizando o percentual de cada componente para determinar a composição total do gás natural e do gás de alto forno conforme apresentado na Tabela 2.

Tabela 2 – Composição do gás natural e do gás de alto forno.

Componente	Fração Molar	Fração Molar
	Gás natural	Gás de alto forno
CH ₄	0,89	-
N ₂	0,02	0,48
CO ₂	0,01	0,24
H ₂ O	-	0,235
CO	-	0,1918
C ₂ H ₂	0,0494	-
C ₃ H ₈	0,0216	-
C ₅ H ₁₂	0,009	-
H ₂	-	0,045

3.2 Redes Neurais Artificiais e Metamodelos

A partir da década de 80 as RNA começaram a ter um foco maior por ser uma alternativa para resolução de problemas complexos a partir da construção de algoritmos não convencionais. As RNA são sistemas paralelos, dispostos em camadas, formados por unidades de processamentos (nodos). Warren McCulloch e Walter Pitts (1943) desenvolveram os neurônios artificiais (preceptores) mais utilizados, com o objetivo de representar de forma matemática o funcionamento de um cérebro humano (BRAGA, 2000).

As RNA apresentam alto índice generalização, não-linearidade e adaptabilidade pela sua capacidade de aprendizagem e reconhecimento de padrões a partir de dados de entradas e saídas dos mais complexos sistemas, sendo responsáveis pela criação de modelos externos.

A estrutura básica da uma rede neural pode ser descrita com uma generalização do modelo desenvolvido por McCulloch e Pitts (McCulloch e Pitts, 1943) conforme apresentado na Figura 4, onde:

1. x_j representa os vetores de entradas;

2. w_{ji} representa os pesos sinápticos, responsáveis por ponderar os vetores de entrada;
3. w_{j0} representa o Bias, responsável por elevar ou reduzir a entrada no somatório;
4. O somatório (Σ) que simula o corpo do neurônio biológico;
5. $\varphi(\cdot)$ representa a função de ativação, que modela a forma como o neurônio responde a excitação, restringindo a amplitude do sinal de saída de um neurônio, podendo ser, dentre outros tipos, linear, degrau e tangente hiperbólica.

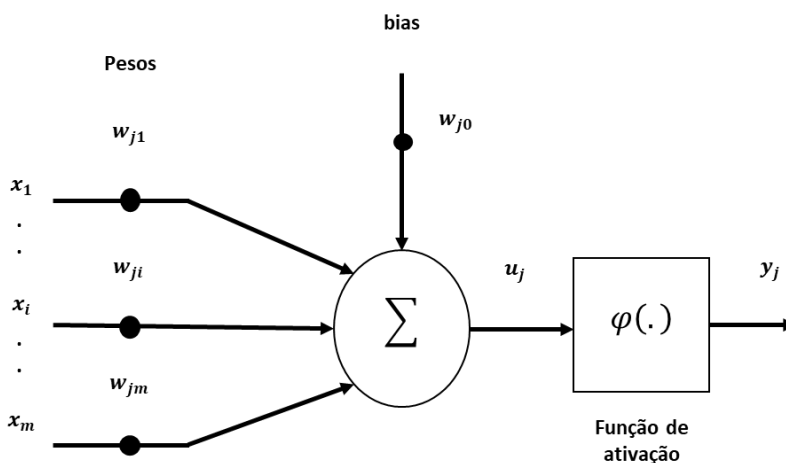


Figura 4 – Modelo de uma Rede Neural Artificial (RNA).
Fonte: Adaptado Silva et al. (2010) apud Neves (2016).

Matematicamente, a saída do j-ésimo neurônio é expresso pelas Equações (1) e (2):

$$u_j = \sum_{j=1}^m w_{ij}x_j \quad (1)$$

$$y_k = \varphi(u_j + w_{j0}) \quad (2)$$

Em geral, existem três arquiteturas básicas comumente utilizadas para construção de uma RNA:

- Rede *feedforward* de única camada: Nessa estrutura, os neurônios estão dispostos em camada de entrada e em camada de saída. Ou seja, não existe

camada intermediária. Em geral são utilizadas para resolução de problemas de regressão/classificação lineares.

- Rede *feedforward* de múltiplas camadas (MLP): Esse modelo possui uma ou mais camadas intermediárias ocultas. Essas camadas intermediárias servem para intervir entre a entrada externa e a saída da rede (HAYKIN, 2009). O aumento no número de camadas ocultas permite que a rede consiga extrair informações estatísticas de ordem mais elevada; em contrapartida, a complexidade da arquitetura aumenta, podendo impactar negativamente no esforço computacional.
- Rede *feedback* (recorrente): A principal característica deste tipo de rede é que os neurônios não são alimentados apenas com as informações de camadas anteriores, mas também recebem informações deles mesmos atrelado ao tempo ou instancia anterior (ELMAN,1990). Além disso, podem existir interconexões entre neurônios de uma mesma camada. Dentre os principais tipos de RNN destacam-se *Long short term memory* (LSTM) e *Gated recurrent units* (GRU).

Neste trabalho utilizou-se a rede do tipo MLP, e o treinamento da rede foi feito de forma que haja a codificação dos dados e ajuste dos pesos sinápticos, com o objetivo de reduzir os erros entre o valor de treinamento e a resposta da rede. A arquitetura *default* da rede fornecida para o treinamento é dada pela estrutura de 10 neurônios, 1 camada oculta e o método Levenberg-Marquardt.

Foi determinada uma sequência de 3 procedimentos para treinamento. O primeiro procedimento foi realizado com a estrutura *default*, sem utilizar nenhum processamento nos dados; no segundo realizou-se a normalização nos *inputs* e *outputs*, e a aplicação do método de *Principal Component Analysis* (PCA) nos *inputs*. O terceiro procedimento foi aplicado uma rotina de otimização para determinar a estrutura da rede, variando número de neurônios e de camadas, juntamente com a utilização de normalização e PCA.

A PCA é útil em situações em que a dimensão do vetor das variáveis de entrada é grande, mas os componentes dos vetores são altamente correlacionados (redundantes). Nesta situação, é desejável reduzir a dimensão dos vetores de entrada. Esta técnica tem três efeitos: i) ortogonaliza os componentes dos vetores de entrada, de forma que não

estejam correlacionados entre si; ii) ordena os componentes ortogonais resultantes (componentes principais) de modo que aqueles com a maior variação venham primeiro; iii) e elimina esses componentes que contribuem menos para a variação no conjunto de dados.

Para utilização do método da PCA, faz-se necessário a normalização dos dados, de forma que as variáveis tenham média igual a 0 (zero), e desvio padrão igual a 1 (um). Ao usar esse método no treinamento da rede, essas configurações devem ser usadas para transformar quaisquer entradas futuras que sejam aplicadas à rede, de modo que se torna parte da rede, assim como os pesos e vieses da rede.

Para a análise da performance da RNA, foi utilizado o erro médio entre as variáveis preditas e reais, expresso pela Equação (3). Além disso, a acurácia do modelo é avaliada pelo R^2 calculado pela Equação (4).

$$Error = \frac{|V_{Real} - V_{predito}|}{V_{Real}} \times 100 \quad (3)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - y_{mean})^2} \quad (4)$$

O valor de y_i são os valores obtidos da variável a ser predita a partir do estimador \hat{y}_i para um conjunto com n amostras que apresentam um valor médio y_{mean} .

Com o objetivo de melhorar a predição do modelo, foi proposta uma otimização através da rotina do Algoritmo Genético (GA), que visa variar a estrutura da rede durante o treinamento, buscando a melhor arquitetura, manipulando o número de camadas e de neurônios ocultos por camada. A função objetivo é formada pela soma dos erros médios das variáveis preditas, apresentada pela Equação (5).

$$Fobj = \sum_{i=1}^n Error_i \quad (5)$$

O GA representa uma classe de ferramentas versátil e robusta empregada na solução de problemas de otimização, mesmo não sendo considerado um método que force ao

máximo a função objetivo. Assim como outros métodos, por não empregarem o cálculo de derivadas, ou seja, atuarem diretamente na busca das soluções no espaço viável, ele é classificado como método direto ou de ordem zero. Um diferencial significativo desse método é que o mesmo não converge tão facilmente a extremos locais, uma vez que se trabalha com uma população de indivíduos e se realiza a varredura dentro de toda a região viável disponível.

O conjunto de dados usado para calcular esse erro foi selecionado a partir do *Latin Hypercube Sampling* (Equação (6)), com objetivo de abranger todo conjunto amostral para testar a precisão da rede.

$$x_j^i = \frac{\pi_j^i + U_j^i}{k}; 1 \leq j \leq n \text{ e } 1 \leq i \leq k \quad (6)$$

Onde k é o número de amostras, n é o número de variáveis de projeto, U é um valor randômico no intervalo $[0,1]$ e π é uma permutação aleatória independente da sequência de números inteiros $0,1, \dots, k - 1$. O subscrito j denota a dimensão do conjunto de dados, enquanto o sobrescrito i representa o número da amostra (Giunta et al. 2003).

A Figura 5 apresenta o procedimento utilizado para a construção do metamodelo baseado em RNA.

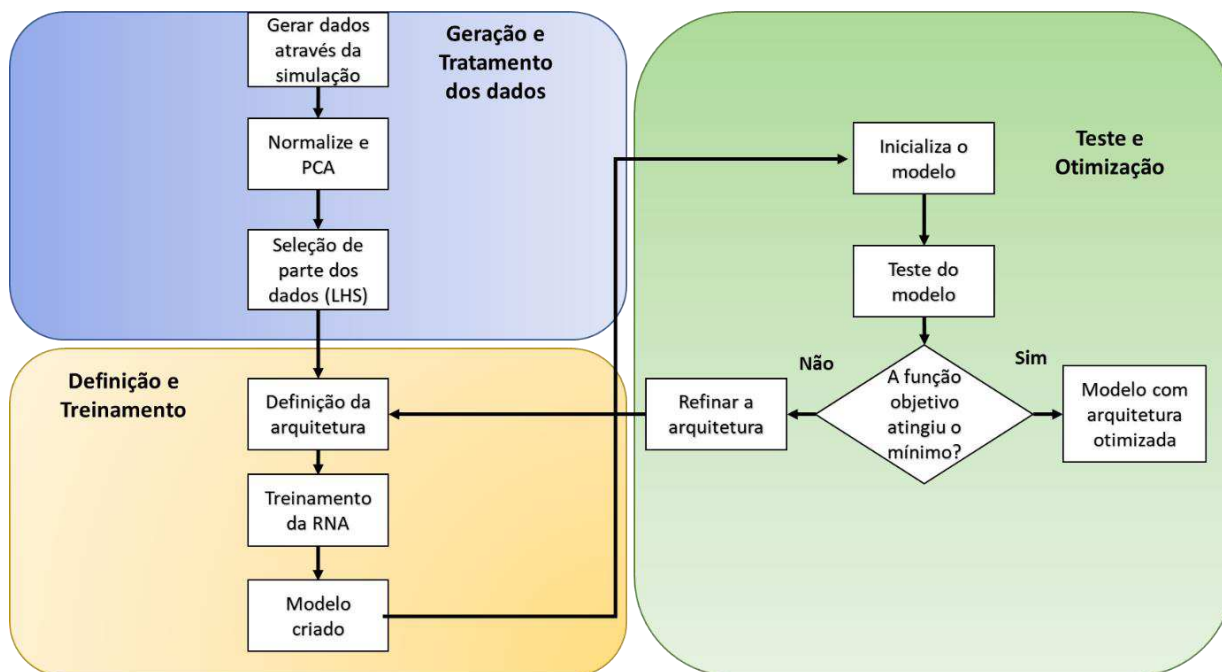


Figura 5 – Procedimento de construção e otimização do metamodelo baseado em RNA

O objetivo da etapa de otimização da secagem do carvão consiste em determinar os valores ótimos de vazão de combustíveis, BFG (x_9), e GN (x_8), com o intuito de minimizar o consumo de combustíveis, mantendo a produção e suas especificações. A função objetivo para redução desse consumo é representada pela Equação (7), sujeita às restrições descritas pelas Equações (8), (9) e (10).

As equações para restrição da função objetivo foram definidas a partir dos parâmetros de processo e qualidade, percentual de água presente no carvão produzido (% umidade) (y_2), percentual de água presente na corrente do ar de secagem (y_3), oxigênio residual após a reação de combustão do BFG e GN (y_5).

O cenário base é constituído por uma vazão de alimentação de carvão em 100 t/h (x_1) com umidade de 10% (x_2) e com uma temperatura de 25° (x_3). A partir desse contexto, as outras variáveis ficam disponíveis para manipulação dentro da otimização, em busca de novos cenários que minimizem a função objetivo proposta, na qual foi aplicado um fator multiplicador de 40 para GN, devido ao fato de que o BFG é 40 vezes mais barato que o gás natural.

$$f_{obj} = 40x_8 + x_9 \quad (7)$$

$$0,6 \leq y_2 \leq 1 \quad (8)$$

$$15 \leq y_3 \leq 30 \quad (9)$$

$$0,2 \leq y_5 \leq 1 \quad (10)$$

$$x_1 = 100 \quad (11)$$

$$x_2 = 10 \quad (12)$$

$$x_3 = 25 \quad (13)$$

Para a resolução do problema de otimização, o fluxograma na Figura 6 descreve o procedimento utilizado a partir da rotina *fmincon* do Matlab®.

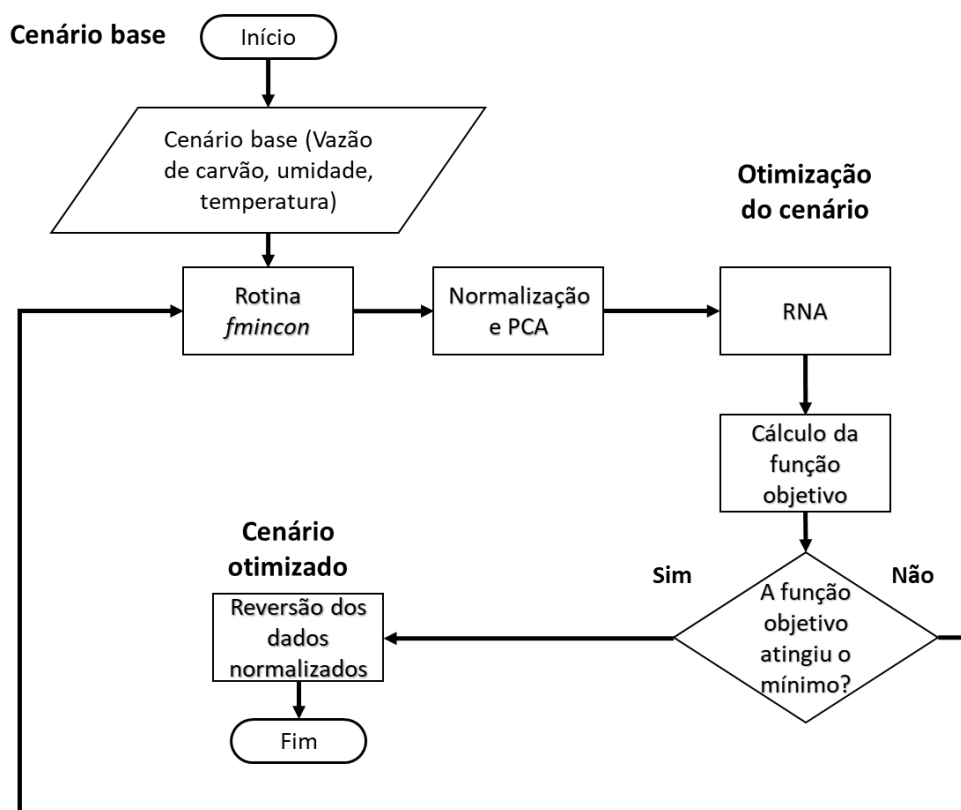


Figura 6 – Fluxograma para resolução do problema de otimização do metamodelo

3.3 Considerações Finais

Este capítulo abordou a modelagem fenomenológica do processo de secagem do carvão no Aspen Plus. Foi discutido a respeito das premissas adotadas (que incluem os componentes químicos e os blocos pré-modelados do Aspen Plus. Em seguida, foi

apresentado o detalhamento da modelagem e as particularidades da planta utilizada como estudo de caso, tais como vazões, temperaturas e composições.

Também foi abordado a modelagem do metamodelo baseado em Redes Neurais Artificiais, e as técnicas utilizadas para melhorar o processamento dos dados e capacidade de predição.

No próximo capítulo será apresentado a validação do modelo fenomenológico em relação aos dados de planta e a capacidade de predição de metamodelos criados a partir dos dados simulados obtidos a partir das análises de sensibilidade.

Capítulo 4

Resultados

Neste capítulo será apresentado inicialmente a validação estatística para os resultados obtidos pela simulação no Aspen Plus. Em seguida, a validação do metamodelo criado a partir dos dados gerados, e as suas arquiteturas propostas. Por fim, uma análise do cenário determinado pela rotina de otimização, visando a redução do consumo de combustível utilizado para aquecimento do gás de secagem.

4.1 Validação do Modelo Fenomenológico e Desenvolvimento do Metamodelo

A validação do modelo levou em consideração a temperatura e composição das principais correntes do processo. Um conjunto de dados da operação de uma planta que contém o processo de secagem do carvão foi utilizado para determinar os valores médios a serem validados. As Tabela 3 e Tabela 4 apresentam a comparação entre os resultados obtidos em Aspen Plus™ e os dados de planta.

Tabela 3 – Especificação das temperaturas das correntes medidas

Corrente	T_{Real} (°C)	T_{Simulado} (°C)	Erro (%)
EXHAUST	123,82	125,84	1,6
INOROUT	107,04	107,00	0,8
AIRCOLD	107,83	105,86	1,8
AIRDRYER	348,31	338,26	2,8

Tabela 4 – Composição da corrente AIRDRYER

Componente	Fração molar Real (%)	Fração molar simulada (%)	Erro (%)
H2O	25,94	24,23	6,5
O2	4,64	4,41	4,9
N2	53,62	55,33	3,1
CO2	15,79	15,98	1,2

Observa-se que os resultados obtidos através do uso do modelo fenomenológico representam bem a operação da secagem; o maior erro relativo foi observado na composição de água na corrente de ar de secagem (6.5%), porém, este desvio é aceitável dada a variabilidade natural desta variável no processo real.

O desenvolvimento do metamodelo baseado em RNA se deu pela geração de um conjunto de 11.000 dados pela ferramenta *Sensitivity Analysis* do Aspen Plus™. As variáveis de entrada e saída utilizadas para geração da RNA estão descritas na Figura 7.

Do conjunto de dados obtido pelo Aspen Plus™, 60% foram utilizados para treinamento, 15% para validação, 15% para testes e 10% foram utilizados para o cálculo do erro de predição e para auxiliar na otimização da estrutura da rede. A construção das RNA foi realizada através da *toolbox* Neural Network do Matlab®.

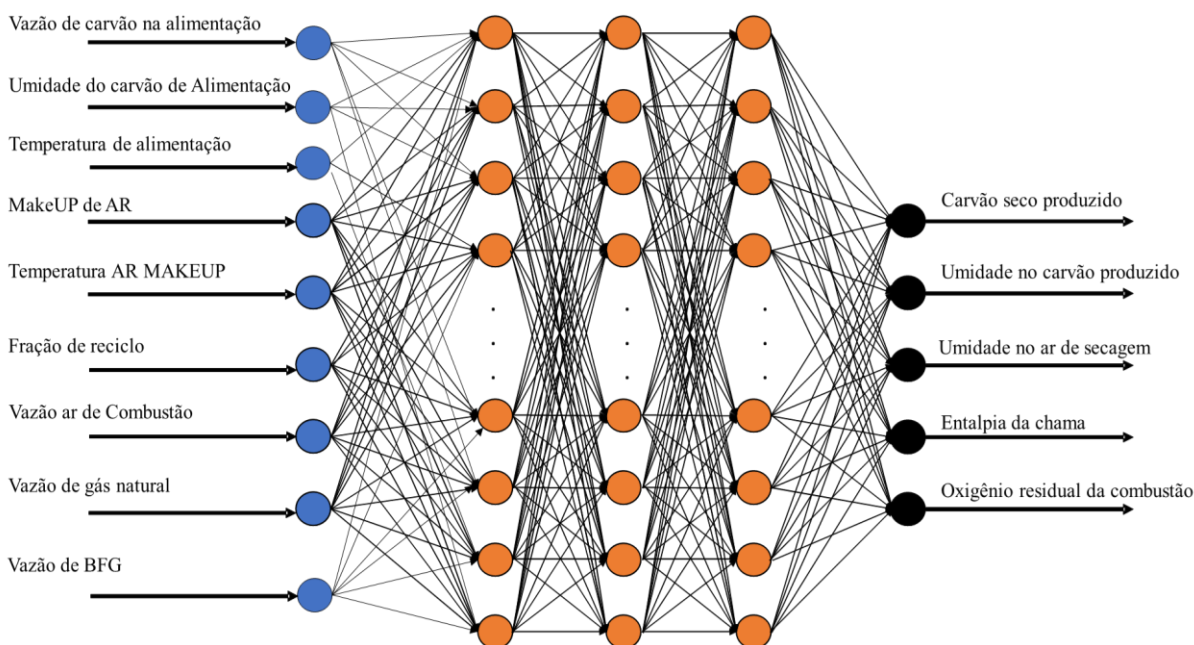


Figura 7 – Estrutura da RNA utilizada como metamodelo para o processo da secagem do carvão

A primeira estrutura proposta foi construída através da entrada direta dos dados sem nenhum pré-processamento, usando o treinamento padrão do Matlab®, ou seja, 10 neurônios, uma camada oculta e o método de Levenberg Marquardt para otimização dos pesos sinápticos. O gráfico apresentado na Figura 8 mostra o erro de predição e sua

distribuição pelo conjunto amostral de treinamento. Observa-se a Figura 8 para o output referente a umidade do ar de secagem ($y(3)$).

Todas as outras variáveis de saída apresentaram comportamento de erro similar, não atingindo uma predição satisfatória.

A segunda estrutura de treinamento foi montada com intuito de melhorar a predição a partir da aplicação da normalização e PCA para o conjunto de dados, usando o treinamento padrão do Matlab®. Devido ao uso da PCA o número de variáveis de input foi reduzindo para 8, a partir da geração de combinações lineares entre as variáveis. O gráfico apresentado na Figura 9 apresenta os erros de predição e sua distribuição pelo conjunto amostral para o output $y(3)$.

Todas as outras variáveis de saída apresentaram comportamento de erro similar, apresentando uma melhora significativa na predição. A melhoria no ajuste do modelo pode ser constatada a partir do valor do erro percentual menor em regiões (entre 23% e 27%) onde o modelo teve uma maior quantidade de dados de treinamento e um erro ligeiramente maior em regiões (entre 15 % e 17%) com baixa amostragem.

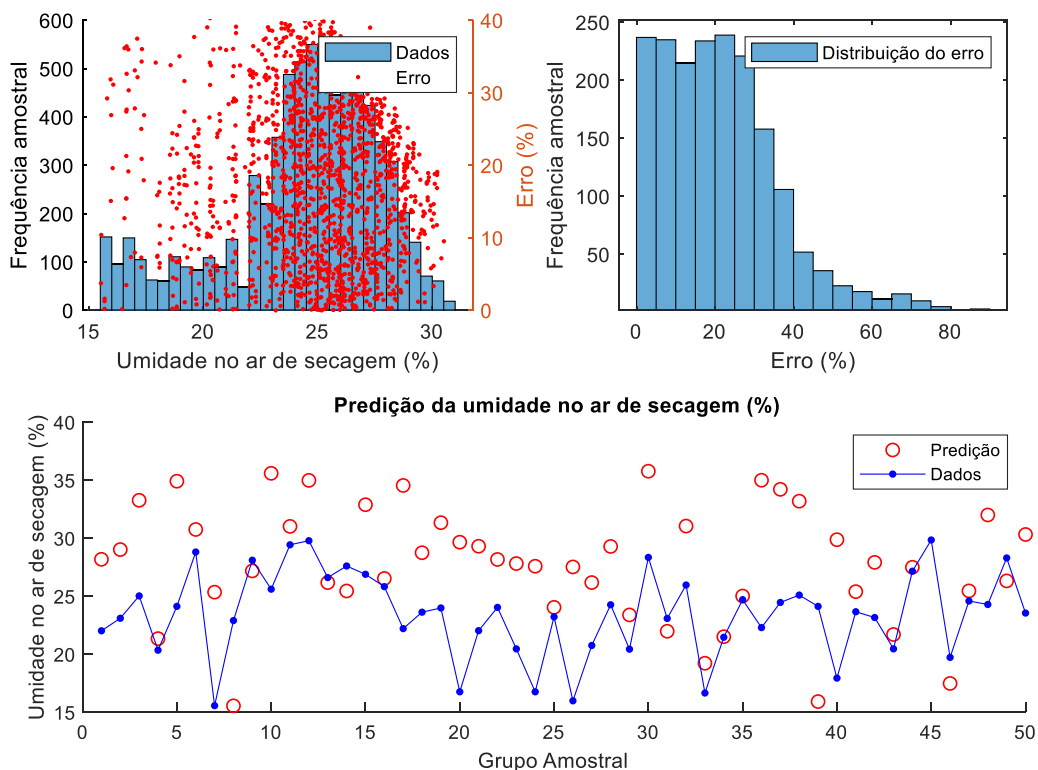


Figura 8 – Predição da umidade do ar de secagem sem tratamento de dados

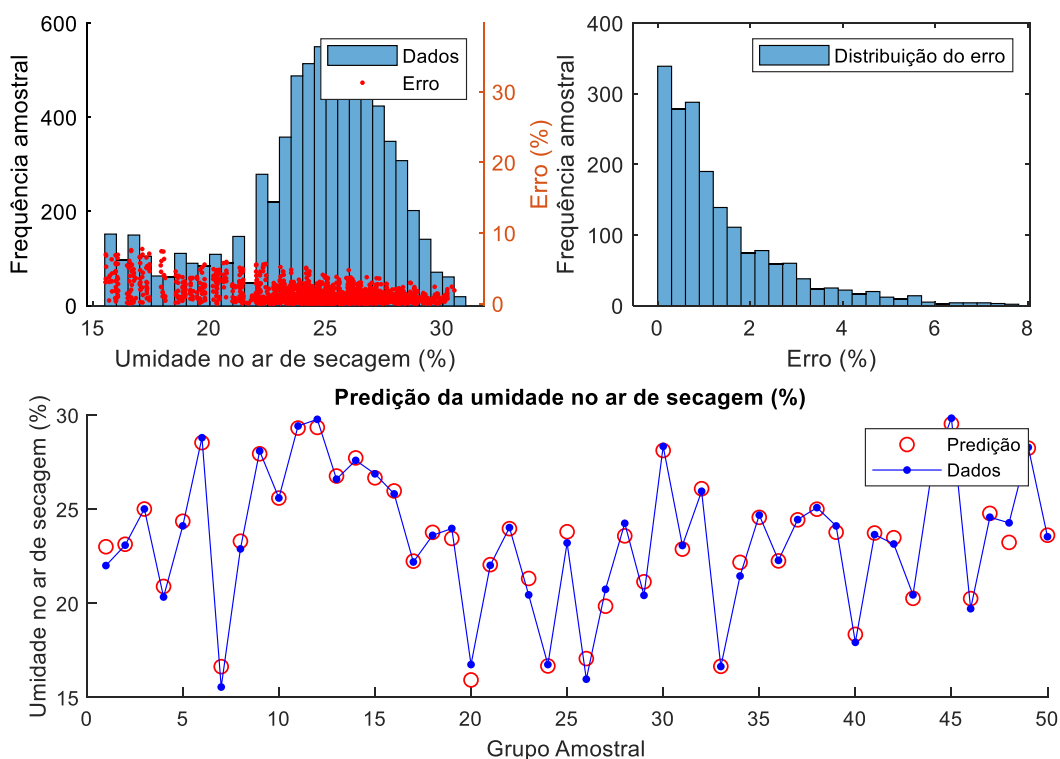


Figura 9 – Predição da umidade do ar de secagem com tratamento de dados

A terceira estrutura de treinamento foi obtida a partir da aplicação de uma rotina de otimização utilizando o método de algoritmo genético, visando melhorar a predição do modelo juntamente com a normalização e PCA para o conjunto de dados. A arquitetura resultante é composta por duas camadas ocultas, com 7 neurônios na primeira camada e 21 neurônios na segunda camada oculta. O gráfico apresentado na Figura 10 apresenta os erros de predição e sua distribuição pelo conjunto amostral o output $y(3)$.

Foi observado a melhora na predição em todas as variáveis a partir da técnica de otimização da arquitetura, apresentando um erro percentual baixo, mesmo em regiões com uma quantidade menor de dados de treinamento. A Tabela 5 apresenta o erro médio para cada uma das variáveis de saída do modelo, avaliadas para as três metodologias propostas.

O pré-processamento dos dados realizado através da normalização e posterior aplicação da técnica de PCA promoveu uma melhora significativa na capacidade de predição do modelo construído na metodologia 2, fato este observado a partir da redução do erro médio de predição. Além disso, a utilização dos dados processados juntamente

com a otimização da arquitetura do modelo (metodologia 3) utilizando o método de GA permitiu a obtenção do modelo mais robusto dentre as três estratégias utilizadas, indicando que a inclusão de uma camada oculta melhorou a capacidade da rede de lidar com a não-linearidade inerente aos dados do processo.

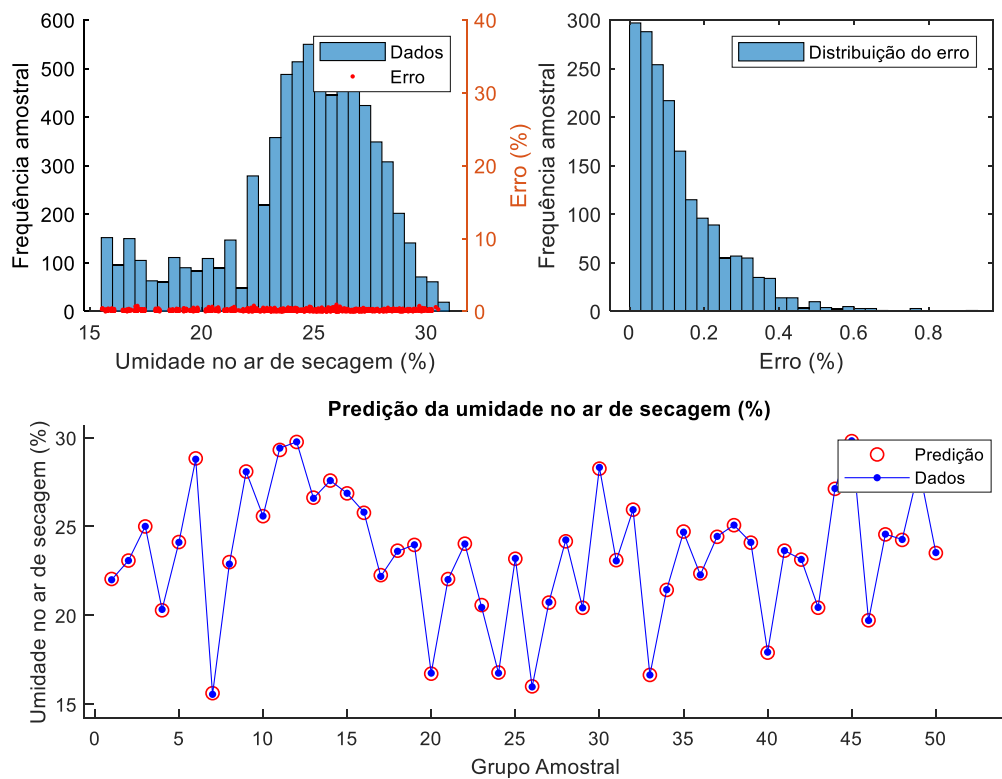


Figura 10 – Predição da umidade do ar de secagem com arquitetura otimizada

Tabela 5 – Erros médios de predição das metodologias

Metodologia	Erro médio	Erro médio	Erro médio	Erro médio	Erro médio
	$y(1)$ (%)	$y(2)$ (%)	$y(3)$ (%)	$y(4)$ (%)	$y(5)$ (%)
Primeira	88,95	184,94	21,45	4,74	99,62
Segunda	0,354	12,20	1,36	0,131	0,090
Terceira	0,079	1,66	0,134	0,012	0,020

4.2 Otimização do Processo de Secagem do Carvão Através de um Metamodelo Baseado em Redes Neurais

Para avaliação da otimização do processo, utilizou-se o modelo de RNA obtido a partir da metodologia 3, uma vez que apresenta a melhor capacidade de predição em relação aos outros 2 modelos criados. Os valores dos inputs e outputs para o caso base proposto bem como os valores otimizados estão descritos nas Tabela 6 e Tabela 7.

Os resultados da otimização indicam uma redução de 15,4% de BFG e de 80,51% de GN em comparação ao caso base. Esta redução foi obtida com um ajuste da relação ar/gás obtida a partir das seguintes modificações:

- Redução da vazão do ar de combustão
- Aumento da vazão do ar de make-up
- Aumento do reciclo no processo

As alterações corroboram para uma aproximação de uma relação ar/gás mais próxima da estequiométrica. Observou-se ainda um aumento na umidade do carvão produzido, mas mantendo dentro das especificações de produção desejadas, juntamente com todas as outras variáveis de restrição, que foram atendidas em sua totalidade.

A Figura 11 apresenta o comportamento da função objetivo ao longo da otimização. Observa-se que a manipulação dos inputs do modelo promove uma redução do valor da função objetivo, sendo a maior parte desta redução obtida até 40 iterações do algoritmo. A partir da iteração 160 nota-se que o *fmincon* não consegue propor valores que reduzam valor da função objetivo atendendo todas as restrições de especificação (Eq. (8), (9) e (10)).

Foi gerado um cenário analisado no processo de otimização do metamodelo, que visava a redução dos gases combustíveis utilizados no processo, em sua maior parte devido ao excesso de ar na combustão, fazia com que a eficiência fosse reduzida.

Na Figura 11 encontram-se os comportamentos da função objetivo, é possível perceber que seus valores tenderam para uma redução dos combustíveis, mantendo todas as variáveis de qualidade do processo, pois sempre que diverge desses valores, a função

recebe um valor incremental positivo, aumentando seu valor, com isso, convergindo sempre para cenários que obedecem às especificações.

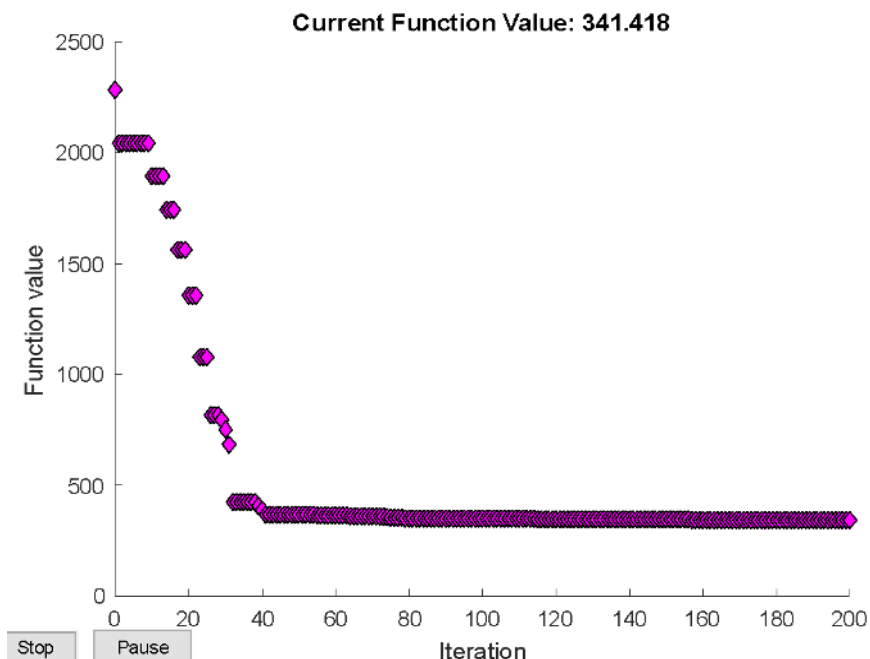


Figura 11 – Comportamento da função objetivo (consumo de combustíveis) a ser minimizada

Relacionado ao cenário descrito anteriormente, avaliou-se os parâmetros otimizados tanto das variáveis de inputs da RNA quanto os outputs, que são observados nas Tabela 6 e Tabela 7. O consumo dos combustíveis, o qual foi reduzido pela otimização do cenário na Figura 11 é apresentado na Tabela 7.

É possível perceber que no cenário no qual foi aplicado a rotina de otimização apresentou uma redução de 15,4% de BFG e de 80,51% de GN em comparação ao caso base, por efeito do ajuste da relação ar/combustível que no qual era usado em excesso.

No cenário otimizado, foi observado um aumento da vazão do ar de *make-up* e um aumento do reciclo no processo, com uma redução significativa da vazão de ar de combustão, reduzindo o oxigênio residual presente na chama mesmo após a reação com o BFG e GN, aproximando de uma relação ar/gás mais próxima do estequiométrico.

É observado um aumento na umidade do carvão produzido, mas mantendo dentro das especificações de produção desejadas, juntamente com todas as outras variáveis de restrição, que foram atendidas em sua totalidade.

Tabela 6 – Resultados dos inputs otimizado da secagem do carvão para o cenário avaliado

Cenário	Vazão de Carvão na alimentação (t/h)	Umidade do carvão de alimentação (%)	Temperatura de alimentação (°C)	Vazão de AR de MakeUP (kmol/h)	Temperatura do AR de MAKEUP (°C)	Fração de reciclo (%)	Vazão do AR de Combustão (kmol/h)	Vazão de GN (kmol/h)	Vazão do BFG (kmol/h)
Base	100	10	25	6,22	25	0,78	434,52	0,5201	398,64
Otimizado	100	10	25	13,38	25	0,798	230,31	0,1013	337,23

Tabela 7 – Resultados dos outputs otimizado da secagem do carvão para o cenário avaliado

Cenário	Carvão produzido (t/h)	Umidade do carvão produzido (%)	Umidade do ar de secagem (%)	Entalpia da chama (kJ/h) *10 ⁷	Oxigênio residual na chama (mol/h)
Base	90,54	0,6	24,02	-4,76	34,21
Otimizado	90,60	0,738	28,42	-4,03	0,97

4.3 Considerações Finais

Este capítulo apresentou os principais resultados obtidos através da modelagem fenomenológica e do metamodelo produzido a partir dela, desde a validação estatística até a avaliação dos cenários por meio de otimizações indicando pontos operacionais que resultam no menor consumo de combustível. No próximo capítulo serão apresentadas as conclusões deste trabalho e sugestões para possíveis trabalhos futuros.

Capítulo 5

Conclusões e Sugestões para Trabalhos Futuros

A simulação do processo de secagem do carvão foi realizada e validada no software Aspen Plus™, possibilitando a geração de dados com alta confiabilidade para que fosse possível criar um metamodelo robusto capaz de representar o processo com precisão.

A otimização da arquitetura da rede juntamente com o pré-processamento, contribuíram de forma significativa na redução do erro de predição, gerando maior confiabilidade para os valores preditos. Os maiores erros percentuais médios foram encontrados na variável de umidade do carvão produzido com 1,66% e o menor, a entalpia na chama resultando em 0,012% de erro médio.

A otimização do cenário de operação padrão, conseguiu reduzir de forma significativa o consumo dos combustíveis usados para aquecimento do gás de secagem, com todas as variáveis de qualidade do processo sendo atendidas, resultando em uma redução de 15% de gás de alto forno e 80% de gás natural, resultando em uma economia energética para o processo.

Como sugestões para trabalhos futuros, destacam-se as seguintes:

1. Desenvolver o modelo do secador utilizando blocos específicos e mais detalhados do Aspen para o processo de secagem (*dryer*);
2. Aplicar para outras técnicas de inteligência artificial para criação do metamodelo;
3. Utilizar outras técnicas de otimização para reduzir o esforço computacional e tempo para obtenção da arquitetura otimizada

Referências Bibliográficas

ASPEN TECH, ASPEN PLUS SOFTWARE-Data. Process Simulation Software. Version 9.0, 2016.

BRAGA, A. de.; LUDERMIR, T. B.; CARVALHO, A. C. P. de L. F. Redes Neurais Artificiais teoria e aplicações, Rio de Janeiro: LTC – Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., 2000.

HALL, Patrick; PHAN, Wen; WHITSON, Katie. The evolution of Analytics: Opportunities and Challenges for Machine Learning in Business. 1 ed. O’Reilly, 2016

HAYKIN, S. Redes Neurais: Princípios e prática. Tradução: Paulo Martins Engel. Bookman, 2ª edição. Porto Alegre, 2001.

GOLDBARG, M. C., LUNA, H. P. L. Otimização combinatória e programação linear: modelos e algoritmos. Rio de Janeiro: Campus, 2000.

VIANA, F. A. C., VENTER, G. and BALABANOV, V. “An Algorithm for fast Optimal Latin Hypercube Design of Experiments” International Journal for Numerical Methods in Engineering, Int. J. Numer. Meth. Engng 2010; 82: 135-156, 2010.

MA, Dong et al. An experimental study on the effects of air humidity on the spontaneous combustion characteristics of coal. Combustion science and technology, v. 189, n. 12, p. 2209-2219, 2017.

REIS, Carlos Henrique. Otimização de Hiperparâmetros em Redes Neurais Profundas.

MATLAB M. The language of technical computing. The MathWorks, Inc, 2012. Disponível em: <http://www.mathworks.com>.

KADRI, Ouahab; MOUSS, Leila Hayet. IDENTIFICATION AND DETECTION OF THE PROCESS FAULT IN A CEMENT ROTARY KILN BY EXTREME LEARNING MACHINE AND ANT COLONY OPTIMIZATION. **Academic Journal of Manufacturing Engineering**, v. 15, n. 2, 2017.

KARDUM, Marko. Rudolf Carnap–The Grandfather of Artificial Neural Networks: The Influence of Carnap’s Philosophy on Walter Pitts. In: **Guide to Deep Learning Basics**. Springer, Cham, 2020. p. 55-66.

ARAÚJO NETO, Ascendino Pereira de et al. Avaliação termo-ambiental de um processo Waelz modificado para tratamento de resíduos perigosos. 2021.

LUO, Linkai; YAO, Yuan; GAO, Furong; ZHAO, Chunhui. Mixed-effects Gaussian process modeling approach with application in injection molding processes. *Journal of Processes control*, v. 62, p. 37-43, 2018.

POWELL, M. J. D. (2007). *A view of Algorithms for Optimization without Derivatives*. Department of Applied Mathematics and Theoretical Physics, England.

PANI, A. K., VADLAMUDI, V., BHARGAVI, R. J., MOHANTA, H. K. (2011, July). Neural Network Soft Sensor Application in Cement Industry: Prediction of Clinker Quality Parameters, International Conference on Process Automation, Control and Computing, Coimbatore, India.

RAO, S. S. *Engineering Optimization Theory and Practice*. John Wiley & Sons, Inc., Hoboken, New Jersey, 4th edition, 2009.

VILLAR, S. B. B. L. *Metamodelagem Kriging E Sua Aplicação Na Otimização De Uma Unidade De Separação De Propeno Por Destilação*. Dissertação de mestrado – Universidade Federal de Campina Grande. 2016.

GOMES, M.V.C., Otimização sequencial por aproximações – Uma aplicação em tempo real para o refino de petróleo. Tese de D.Sc., Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2007.

BAIRD, C. Química Ambiental. Porto Alegre, Bookman, 2002. 622p.

ELMAN, Jeffrey L. Finding structure in time. *Cognitive science*, v. 14, n. 2, p. 179-211, 1990.

QUIRANTE, Natalia; CABALLERO, José A.; GROSSMANN, Ignacio E. A novel disjunctive model for the simultaneous optimization and heat integration. *Computers & Chemical Engineering*, v. 96, p. 149-168, 2017.

GIUNTA, Anthony; WOJTKIEWICZ, Steven; ELDRED, Michael. Overview of modern design of experiments methods for computational simulations. In: *41st Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. 2003. p. 649.

Fitch, F.: 1944, 'Review of McCulloch and Pitts 1943', *Journal of Symbolic Logic* 9(2), 49–50.