

Determinação da Concentração de Sólidos em um Reator de Polimerização Utilizando um Sensor Virtual

João Pedro Dall'Orto Gava Ravara, Pedro Mamone Neri*, Pedro Marques Durigam

Centro Universitário FEI, Engenharia Química, São Bernardo do Campo-SP, Brasil

**pedromamoneneri@hotmail.com*

RESUMO

O Polietileno de Alta Densidade (PEAD) e o Polietileno de Média Densidade (PEMD) são amplamente utilizados na indústria, sendo sintetizados em reatores Loop Slurry sob condições controladas. Este trabalho desenvolveu um sensor virtual baseado em Redes Neurais Artificiais (RNAs) para estimar a concentração de sólidos no reator, variável crítica para o processo. Foram coletados e analisados dados históricos de operação, normalizados e utilizados para treinar modelos no Matlab, com algoritmos como trainlm e funções de ativação como tansig e purelin. Foi utilizado o Teste de Hagan para otimização e foram treinados diferentes grupos de RNAs com configurações diferentes, obtendo-se um modelo com correlação de 0,999235 e capaz de prever a concentração de sólidos com erro inferior a 0,2%. Destacam-se o desempenho do algoritmo trainlm e a função purelin na camada de saída.

Palavras-chave: polietileno, redes neurais artificiais, concentração de sólidos, sensor virtual, eteno, matlab.

1. Introdução

A produção de PEAD é um processo essencial na indústria de plásticos, sua produção pode ocorrer através da tecnologia de um reator do tipo Loop Slurry, no qual o monômero de eteno é conduzido por um diluente (isobutano), entrando em contato com os sítios ativos do catalisador cromo adicionado, promovendo assim sua polimerização (Allemeersch, 2015).

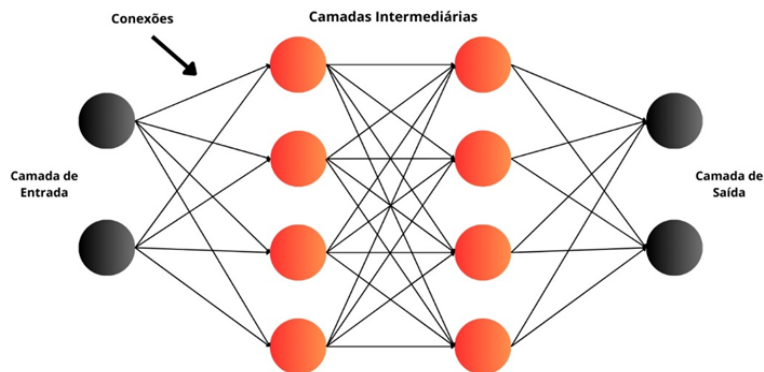
A operação do reator é realizada pela análise de diversas variáveis de processo e suas tendências no tempo. Uma dessas variáveis é a concentração de sólidos, no qual corresponde a quantidade de massa polimérica formada e controlada dentro do reator.

A medição da CS é realizada por um sistema físico de radiação ionizante instalado em umas das curvas do reator. Sua má funcionalidade ou a perda do equipamento pode gerar grandes instabilidades no controle do reator e assim levando até o entupimento dele.

Uma das alternativas encontradas para medição de parâmetros críticos são os sensores virtuais, que são algoritmos matemáticos que possibilitam uma estimativa em tempo real de variáveis de interesse, feita a partir de outras variáveis disponíveis (James et al., 2000).

Para realização dos sensores virtuais, esse trabalho fez a utilização de Redes Neurais Artificiais (RNAs) que são técnicas computacionais que realizam a previsão de cálculos complexos de forma iterativa.

Figura 1. Estrutura de uma RNA.



A camada de entrada é onde os dados são apresentados à rede, enquanto as camadas ocultas dispõem os neurônios responsáveis pelo processamento desses dados por múltiplos neurônios e, na camada de saída o resultado desse processamento é concluído e exposto, conforme a Figura 1.

2. Objetivo

Determinar a concentração de sólidos de um reator de polimerização de eteno tipo loop slurry numa planta petroquímica real de PEAD a partir de um sensor virtual.

2.1. Objetivos Específicos

- Obtenção da base de dados da planta;
- Tratamento e normalização dos dados;
- Construção gráfica das variáveis de processo e suas influências;
- Estruturação e treinamento das redes neurais;
- Validação do sensor virtual com os dados da planta;

3. Metodologia

Segundo Mattos (2022), a Análise de Componentes Principais selecionou as 8 variáveis mais influentes para a estimativa da concentração de sólidos, reduzindo as 11 iniciais ao eliminar aquelas com menor relevância e maior interdependência.

A base de dados coletada em regime estacionário, abrangendo resinas de alta densidade de diversas campanhas, será utilizada para treinar a RNA e possibilitar a medição online da concentração de sólidos, oferecendo uma alternativa ao sistema atual.

Tabela 1. Variáveis de entrada e de saída do modelo.

Variável de processo	Símbolo	Unidade
Potência da bomba de circulação	PtB	kW
Temperatura do reator	Tr	°C
Delta de temperatura do reator	Dtr	°C
Vazão de monômero	VzM	t/h
Vazão de diluente	VzD	t/h
Taxa de produção horária	TxP	t/h

Tempo de residência	Tao	min
Concentração de monômero	CcM	wt%
Concentração de sólidos	CS	%

Os dados foram organizados em uma planilha contendo 9 variáveis (8 de entrada e 1 de saída), conforme apresentado na Tabela 1, para 11 resinas de PEAD, com a maioria com 2 campanhas por resina. Campanhas com maior duração foram priorizadas, excluindo períodos de partida, parada e transições. Após seleção, os dados foram normalizados para uma escala de 0 a 1. A normalização foi seguida de randomização para evitar que a RNA aprenda padrões específicos da ordem dos dados, garantindo maior generalização do modelo.

O Teste de Hagan foi usado para definir a quantidade ideal de neurônios nas RNAs, analisando a relação entre o erro de simulação e o número de neurônios treinados. Para isso, foram criadas RNAs no Matlab com uma camada, utilizando diferentes algoritmos de treinamento e funções de ativação, abrangendo 3600 RNAs com até 20 neurônios.

Na etapa de treinamento e simulação, foram designados quatro grupos de RNAs, organizados com diferentes números de camadas e configurações de neurônios para otimizar o treinamento e reduzir a complexidade computacional. Os grupos 1 e 2, com uma camada oculta, e os grupos 3 e 4, com duas camadas ocultas, divididas com diferentes configurações na faixa de 1 a 20 neurônios.

Na etapa de simulação, foram selecionados 215 conjuntos de dados da base de dados normalizada de modo único para cada Grupo, conjuntos estes distintos dos utilizados nos treinamentos das RNAs para analisar a capacidade de predição de resultados da concentração de sólidos.

4. Resultados

O Teste de Hagan obteve um perfil característico decrescente, porém não foi eficaz para o modelo proposto, já que não evidencia em qual neurônio que se obtém o menor erro de simulação, apresentando erros baixos e constantes na faixa de 2 a 20 neurônios, mantendo a escolha de trabalhar com essa larga faixa nos grupos de RNAs.

Tabela 2. Resultados das simulações dos grupos.

Análise	Grupo 1	Grupo 2	Grupo 3	Grupo 4
R ²	0,999184	0,999183	0,999172	0,999235
Erro (%)	0,21109	0,21893	0,21040	0,1965

Comparando todas as RNAs, o Grupo 4 se destacou como a melhor arquitetura geral. Ele apresentou a mais alta correlação e o menor valor de erro médio de simulação, como pode ser observado na Tabela 2. Sua estrutura de duas camadas, mais robusta e complexa, garantiu maior precisão nas previsões da concentração de sólidos do reator. Apesar do tempo de simulação ter sido maior (10 horas em comparação com 0,75 horas dos Grupos 1 e 2), isso não afeta o tempo de resposta na aplicação real, pois a complexidade impactou apenas a etapa de treinamento. Assim, o Grupo 4 oferece a maior confiabilidade e precisão, tornando-se a melhor escolha entre todas as arquiteturas avaliadas.

Além disso, o algoritmo de treinamento trainlm e a função de ativação purelin na camada de saída foram predominantes nos grupos de simulação de RNAs.

5. Conclusão

A determinação da concentração de sólidos em reatores de polimerização utilizando sensores virtuais baseados em RNAs mostrou-se promissora para otimizar a produção de PEAD. A análise demonstrou a viabilidade do método, identificando variáveis críticas do processo que foram analisadas e construindo modelos confiáveis com dados tratados e normalizados, que garantiram precisão e evitaram a influência de outliers.

Os gráficos apresentados confirmaram o regime permanente, assegurando a estabilidade do reator e a consistência da base de dados utilizada, composta por aproximadamente 2000 horas de produção.

O Teste de Hagan evidenciou que redes com 2 a 20 neurônios são adequadas para o modelo, sem diferenças significativas entre elas, e confirmou-se a eficácia das RNAs treinadas. A melhor RNA do estudo foi encontrada no Grupo 4, com duas camadas ocultas, neurônios intercalados entre ímpares e pares, correlação de

Realização:

0,999235 e erro médio de 0,1965%, destacando-se como a mais eficiente para estimar a concentração de sólidos no reator.

Os resultados apontam que a implementação do sensor virtual poderá aumentar a confiabilidade do processo e melhorar a segurança operacional da planta de PEAD.

Agradecimentos: Os autores expressam sua profunda gratidão ao Prof. Dr. Luís Fernando Novazzi, pela orientação primorosa, paciência e pelas valiosas contribuições técnicas que foram fundamentais para a excelência deste estudo. Agradecemos a Milton Mattos, pela oportunidade de expansão de conhecimentos e pelo suporte técnico no desenvolvimento de sensores virtuais aplicados à indústria petroquímica. Ao Centro Universitário FEI, pela infraestrutura de ponta e pelo ambiente acadêmico que propiciou o desenvolvimento deste projeto premiado. Por fim, um agradecimento especial aos nossos familiares, pelo apoio incondicional, compreensão e incentivo durante toda a jornada da graduação e do mestrado..

Referências

P. Allemeersch: Polymerisation of Ethylene in Slurry Loop Reactors (1a. Ed.), [S.L.]: 2015.

S. C. James, R. L. Legge e H. Budman: On-line estimation in bioreactors: A review, Reviews in Chemical Engineering (16), 311–340, 2000.

M. F. C. de Mattos: Sensor Virtual Neural para determinação do índice de fluidez de PEAD e da concentração de sólidos de um reator Loop Slurry, Universidade Federal de São Paulo, Diadema: 2022.