FABIANO DA ROCHA STEIN

MODELAGEM DE PRODUÇÃO INDUSTRIAL DE CELULOSE KRAFT COM MODELOS ADITIVOS GENERALIZADOS E REDES NEURAIS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação do Mestrado Profissional em Tecnologia de Celulose e Papel, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

VIÇOSA
MINAS GERAIS - BRASIL
2010

FABIANO DA ROCHA STEIN

MODELAGEM DE PRODUÇÃO INDUSTRIAL DE CELULOSE KRAFT COM MODELOS ADITIVOS GENERALIZADOS E REDES NEURAIS

Dissertação apresentada à Universidade Federal de Viçosa, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação do Mestrado Profissional em Tecnologia de Celulose e Papel, para obtenção do título de *Magister Scientiae*.

_____
Prof. Jorge Luiz Colodette
(Co-Orientador)

_____
Prof. José Lívio Gomide
(Co-Orientador)

_____
Prof. Hélio Garcia leite
(Orientador)

A Deus.
À minha esposa Cátia.
Aos meus filhos Luís Felipe e Rafael, que são promessas de um Brasil Melhor.
Aos meus pais Reliquias e Marina, que através de amor, carinho e simplicidade transmitiram os verdadeiros ensinamentos.

AGRADECIMENTOS

À minha esposa e aos meus filhos, pela paciência, compreensão e incentivo.

À empresa Universidade Federal de Viçosa que me concedeu o privilégio de realizar o curso.

Ao professor Hélio Garcia Leite, pela orientação, pelos ensinamentos e pela amizade.

Ao Engº Cláudio Roberto da Silva Ferreira pela valiosa contribuição na geração dos dados, orientações, críticas e principalmente pela amizade.

Ao Gustavo Marcatti, pela imprescindível contribuição no processamento e análise dos dados.

A Mayra Silva, doutoranda em ciências florestais, pelo auxilio no treinamento das redes neurais.

À empresa Veracel Celulose S.A., por ceder os dados necessários para a realização desse trabalho, pela flexibilidade e incentivo.

A todos que direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

BIOGRAFIA

FABIANO DA ROCHA STEIN, casado, dois filhos, nasceu em Itaguaçú, estado do Espírito Santo em 18 de novembro de 1974.

Iniciou sua vida florestal com o ingresso no curso de Engenharia Florestal pela Universidade Federal de Viçosa no ano de 1993, concluindo o mesmo em agosto de 1999.

Em julho de 2000, ingressou na Empresa Celulose Nipo-Brasileira S/A (CENIBRA), onde atuou até abril de 2003.

Em julho de 2001, ingressou no curso de Pós-Graduação, *latu senso*, em Tecnologia de Celulose e Papel, oferecido pela Universidade Federal de Viçosa, por intermédio da Celulose Nipo-Brasileira S/A, concluindo em março de 2003.

Em maio de 2003, ingressou na Empresa Veracel Celulose S/A. para atuar na área de planejamento florestal e em setembro de 2009 passou a atuar na área de transporte e pátio de madeira.

Ano de 2008 surge uma nova oportunidade recheada de desafios. Ingressar no Mestrado Profissional em Tecnologia de Celulose e Papel ministrado pela Universidade Federal de Viçosa, paralelamente exercendo suas atividades profissionais na Veracel Celulose S/A.

CONTEÚDO

RESUMO.....vi

ABSTRACT.....vii

1. INTRODUÇÃO..... 1

2. REVISÃO DE LITERATURA..... 4

2.1. Descrição do processo de fabricação de celulose 4

2.2. Características da madeira..... 6

2.3. Variáveis de Processo..... 11

2.3.1. Variáveis associadas com a matéria-prima 11

2.3.2. Variáveis associadas com o processo 16

2.4. Modelos Aditivos generalizados..... 21

2.5. Redes Neurais Artificiais (RNA)..... 23

3. MATERIAL E MÉTODOS..... 39

3.1. Material 39

3.2. Métodos 41

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO 43

5. CONCLUSÕES..... 65

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS..... 66

APÊNDICES 70

RESUMO

STEIN, Fabiano da Rocha, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, Julho de 2010. **Modelagem de dados de indústria de celulose Kraft empregando modelos aditivos generalizados e redes neurais artificiais**. Orientador: Hélio Garcia Leite. Co-orientadores: Jorge Luiz Colodette e José Lívio Gomide.

No presente trabalho, dados observados em escala industrial, durante alguns anos, foram submetidos à modelagem empregando *modelos aditivos generalizados* (GAM) e *redes neurais artificiais* (RNA), como ferramentas para avaliar a influência de algumas variáveis, da madeira e do processo, sobre a produção do digestor e carga alcalina. Os modelos aditivos generalizados foram ajustados utilizando o software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2010), através da biblioteca “mgcv” (WOOD, 2006), específica para ajustes de modelos aditivos generalizados. Foram aplicados testes de significância para cada modelo ajustado. De forma complementar os dados foram analisados por meio de redes neurais artificiais. Foram ajustadas 100 RNA para relacionar a produção do digestor e a carga alcalina, com as variáveis: densidade da madeira, idade, precipitação, teor seco dos cavacos, densidade aparente dos cavacos, densidade básica dos cavacos, viscosidade da polpa e kappa. Nesta etapa do trabalho foi empregado o software Statistica (Statsoft, INC, 2007). Os resultados mostram que o Modelo Aditivo Generalizado (MAG) constitui uma boa opção para representar os fenômenos da indústria de celulose, em que as variáveis apresentam alta variabilidade e não há um rigoroso controle, diferentemente do que ocorre em dados provenientes de delineamentos experimentais. No caso do uso de RNA para estimar a produção do digestor e para carga alcalina também mostrou ser uma boa ferramenta, visto que as correlações entre os dados reais e estimados ficaram acima de 88% e 60%, respectivamente. Várias variáveis associadas com a matéria-prima e com o processo de polpação que foram estudadas apresentaram comportamento semelhante e/ou iguais o que a maioria dos estudos experimentais encontraram.

ABSTRACT

STEIN, Fabiano da Rocha, M. Sc., Universidade Federal de Viçosa, July, 2010. **Data Modeling of Kraft pulp industry using generalized additive models and artificial neural networks**. Advisor: Hélio Garcia Leite. Co-Advisors: Jorge Luiz Colodette and José Lívio Gomide.

In this study, data collected on an industrial scale for some years, underwent modeling using generalized additive models (GAM) and artificial neural networks (ANN) as tools to evaluate the influence of some variables, timber and process on production and digester alkali charge. Generalized additive models were fitted using the software R (R Development Core Team, 2010), through the library "mgcv" (Wood, 2006), specific settings for generalized additive models. Significance tests were applied for each model set. In order to supplement the data were analyzed using artificial neural networks. One hundred RNA were adjusted to relate to production and the digester alkali charge, and variables such as wood density, age, precipitation, dry content of wood chips, bulk density of chips, the wood basic density, pulp viscosity and kappa. In this step we employed the software Statistica (Statsoft, Inc., 2007). The results show that the Generalized Additive Model (GAM) is a good choice to represent the phenomena of the pulp industry, where the variables are highly variable and there is strict control, unlike what happens on data from experimental designs. Should the use of RNA to estimate the output from the digester alkali charge and also proved a useful tool, since the correlations between actual and estimated data were above 88% and 60% respectively. Several variables associated with the raw material and the pulping process that were studied showed similar behavior and / or equal to what the majority of experimental studies have found.

1. INTRODUÇÃO

O Brasil é uma potência mundial na produção de celulose Kraft branqueada de eucalipto. O fator determinante desse sucesso tem sido o forte investimento em pesquisa e desenvolvimento, a grande disponibilidade de áreas para plantação aliado às condições edafoclimáticas favoráveis ao cultivo de eucalipto. Há mais de 40 anos os centros de pesquisa públicos e privados investem no processo de melhoramento genético do eucalipto, por meio do qual foi possível selecionar árvores mais produtivas e resistentes. Isso resultou numa tecnologia 100% nacional na área florestal, compartilhada pelas empresas do setor, que colocou o país entre os grandes produtores de celulose do mundo (STEFANO, 2008).

Atualmente, o processo de polpação mais utilizado é o processo Kraft, que consiste em atuar na madeira em forma de cavacos, com uma combinação de dois reagentes químicos: hidróxido de soda (NaOH) e sulfeto de sódio (Na_2S), obtendo-se como resultado a dissolução da lignina e a liberação das fibras. As fibras liberadas constituem a “celulose” marrom ou massa marrom.

O cozimento kraft de produção de celulose apresenta uma seletividade relativamente baixa com relação às reações de remoção da lignina, e, durante o cozimento, são removidos os extrativos e parte dos carboidratos e da lignina. Ao final do cozimento, a taxa de remoção dos carboidratos continua significativa e a taxa de remoção de lignina diminui (FOELKEL, 1977).

Em todos os processos químicos de produção de celulose, as variáveis tempo de cozimento e temperatura de deslignificação são consideradas as mais importantes, pois afetam diretamente a remoção de lignina e a qualidade do produto final (MARQUES et al., 1979). Estas variáveis se relacionam de forma inversa, ou seja, quanto maior a temperatura, menor o tempo de cozimento.

Estes equipamentos podem ser classificados como reatores especiais, heterogêneos e complexos do ponto de vista de entendimento operacional. Nestes ocorrem muitas reações químicas, além de possuírem variáveis de processo de difícil medição.

A necessidade de estudar e ou predizer seu comportamento através de modelagem matemática tem sido o motivo de inúmeras pesquisas ao longo dos

anos (HARKONEN, 1987; MICHELSEN & FOSS, 1996; QIAN *et al.*, 1997; AL-AWAMI & SYDRAK, 1998; WISNEWSKI & DOYLE III, 1998; DOYLE III & KYIHAN, 1999; FERREIRA et al., 2000; WISNEWSKI, 2001; AGUIAR, 2001; QUEIROZ et al., 2004; KAYIHAN, 2002; CARDOSO et al., 2002; POLIT et al., 2002; POUGATCH et al., 2005; DUFOUR et al., 2005 e PADHIYAR et al., 2006).

De acordo com Shimoyama e Barrichello (1991), na fabricação de celulose são importantes os aspectos silviculturais associados a uma combinação de características físicas (p.ex., densidade básica), características anatômicas (dimensões das fibras) e composição química (teor de celulose, hemicelulose e lignina) da madeira. Esse conjunto de características químicas, físicas e anatômicas geralmente é interdependente. Por isso, dificilmente se consegue alterar uma propriedade sem que as demais também sejam afetadas.

Mais ainda, o custo da madeira tem grande impacto no custo variável de fabricação. Os produtores de celulose têm feito esforços para maximizar o rendimento de polpa através de programas de melhoramento florestal. Nos últimos anos esses programas têm buscado melhorias de parâmetros físicos e químicos da madeira para sua adequação ao processo de polpação. Em geral, os estudos de qualidade da madeira industrial têm dado ênfase à densidade básica.

Blake (2004) analisa as influências da densidade básica da madeira na qualidade da polpação Kraft e nas características da polpa. Foram analisados os requerimentos de carga de álcali para polpação, o rendimento do processo, as características do licor residual, a branqueabilidade e as propriedades físico-mecânicas da polpa branqueada. Vale ressaltar que este estudo não propôs um modelo matemático dessas influências.

Estudos realizados com diferentes espécies de eucaliptos não encontraram correlações bem definidas entre a densidade básica da madeira e a demanda de carga de álcali ou o rendimento do processo (MOKFIENSKI, 2003).

Segundo Wisnewski & Doyle III (2001) existem vários atributos nos digestores contínuos que desafiam uma boa modelagem e também são problemas para um bom controle do equipamento, dentre estes se destacam: a

variável #Kappa possui atrasos em sua medição; o tempo elevado de atraso entre as variáveis de entrada e seus efeitos no #Kappa; os digestores apresentam comportamento não linear; as variações biológicas da química da madeira estão sujeitas às variações aleatórias, não mensuráveis, em componentes como concentração, umidade e densidade, que são as principais fontes de variações contínuas na operação dos digestores. Identificar e conhecer as características físicas, químicas e anatômicas da madeira (cavacos) antes de sua entrada no processo de cozimento e utilizar estas informações para predição, trará grandes benefícios operacionais para o processo de produção de celulose.

Diante das adversidades encontradas nos processos industriais, o desenvolvimento de modelos matemáticos tem sido fonte de estudos de diversos pesquisadores. A utilização de Redes Neurais Artificiais (RNA) tem alcançado bons resultados especialmente em sistemas não lineares, com a maioria utilizando redes do tipo MLP (Multilayer Perceptron). Nas aplicações em indústrias de celulose e papel, vários autores têm estudado e descrito sobre estes modelos (GE, et al., 1998; LEMMETI et al., 1998; KASPARIAN & BATUR, 1998; PREMIER et al., 1999; HAYKIN, 2001; AGUIAR & FILHO, 2001; YU & GOMM, 2003; LAPERRIÈRE et al., 2004; DUFOUR et al., 2005; MALMBERG, et al., 2005; COSTA, et al., 2005; RUBINI & YAMAMOTO, 2006 e BARBER & SCOTT, 2007).

A maioria dos estudos em que foram avaliados os processos de produção de celulose Kraft foi conduzida empregando dados de delineamentos experimentais. No presente trabalho, dados observados em escala industrial, durante alguns anos, foram submetidos à modelagem empregando *modelos aditivos generalizados* (GAM) e *redes neurais artificiais* (RNA), como ferramentas para avaliar a influência de algumas variáveis, da madeira e do processo, sobre a produção do digestor e carga alcalina.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. Descrição do processo de fabricação de celulose

O processo polpa sulfato ou processo Kraft foi desenvolvido em 1879, na Alemanha, pelo pesquisador Dahl, no qual o polpeamento de madeiras é feito através de soda e sulfeto de sódio (ASSUMPÇÃO et al., 1988). Este processo tem como função dissolver a lignina[1], agente ligante das fibras na madeira, com o objetivo de liberar as fibras com o mínimo de degradação dos carboidratos (celulose[2] e hemicelulose[3]). Na etapa de cozimento da madeira, emprega o hidróxido de sódio (NaOH) e o sulfeto de sódio (Na_2S) como agente ativo na reação.

O processo de obtenção de celulose apresenta um subproduto denominado "licor negro". Este fluido contém a parte da madeira denominada lignina, combinada com os reagentes químicos utilizados no início do processo de polpação. Por razões econômicas e ambientais torna-se estritamente necessária a reutilização deste produto em um processo denominado recuperação de produtos químicos, que consiste na elevação do teor de sólidos e em seguida queimá-lo na caldeira de recuperação.

Os fundidos resultantes da queima do LN (Licor Negro) na CR (Caldeira de Recuperação) são dissolvidos em licor branco fraco com uma concentração entre 20 a 60 g/l. Após a dissolução, a mistura é tratada transformando-se em licor branco, que é utilizado no início do processo de polpação, fechando assim o ciclo de recuperação.

O processo Kraft, tem como principal vantagem, o sistema de recuperação dos produtos químicos a ele associado. Por outro lado, apresenta como desvantagens: o alto custo, as emissões de odores no ambiente, baixa

[1] *Lignina* é uma substância química, que confere rigidez à parede da célula e, nas partes da madeira, age como um agente permanente de ligação entre as células, gerando uma estrutura resistente ao impacto, compressão e dobra (D'ALMEIDA, 1988).

[2] *Celulose* é um polissacarídeo formado por unidades do monossacarídeo β-D-glucose, que ligam entre si através dos carbonos 1 e 4, dando origem a um polímero linear D'Almeida,1988).

[3] *Hemicelulose* é uma mistura de polímeros polissacarídeos de baixa massa molecular, os quais estão intimamente associados com a celulose no tecido das plantas (D'ALMEIDA,1988).

alvura após o cozimento e conseqüentemente maior custo de branqueamento com baixo rendimento entre 40 a 50% (ASSUMPÇÃO et al., 1988).

Após a etapa de cozimento, a polpa que deixa o digestor passa por uma lavagem de massa marrom. Em seguida, é pré-branqueada e branqueada através de um processo químico que envolve oxigênio, peróxido de hidrogênio, soda cáustica e dióxido de cloro. Finalmente a celulose branqueada é enviada para as etapas de secagem e enfardamento.

Uma boa qualidade da celulose, associada a baixos custos de produção, está intimamente correlacionada com os bons resultados no processo de polpação, daí a necessidade de um bom conhecimento e um bom rendimento durante a etapa do cozimento. Para isto, o #Kappa é uma variável de extrema importância para bons resultados operacionais.

Durante o processo de recuperação, o licor negro que sai do digestor é levado a um sistema de evaporadores de múltiplo efeito para que o mesmo aumente o seu conteúdo de sólidos. O licor mais concentrado é então queimado nas caldeiras de recuperação. Os sais fundidos resultantes são tratados e retornam à rota produtiva de celulose na forma de licor branco (NaOH e Na_2S). Assim, uma característica importante deste processo de recuperação dos sais inorgânicos é que as etapas envolvidas estão correlacionadas de forma a atribuir ao processo global uma natureza cíclica como mostra a Figura 1.

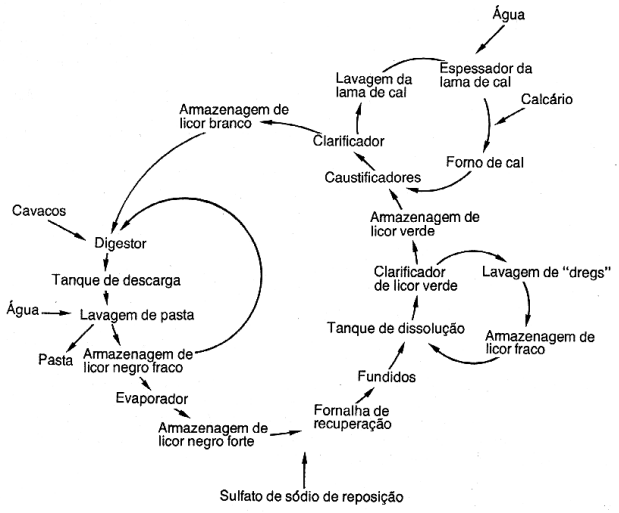


Figura 1: Diagrama cíclico do processo recuperação Kraft (ASSUMPÇÃO et al., 1988)

2.2.Características da madeira

A preocupação com a qualidade da madeira que entra em uma fábrica de celulose tem sido foco de muitos estudos, uma vez que o produto final sofre grande influência da matéria-prima que lhe deu origem. A madeira de eucalipto é a principal matéria-prima utilizada na produção de celulose Kraft branqueada no Brasil, produção esta que requer madeira adequada e bem selecionada para seja de baixo custo e de alta qualidade. Vários parâmetros são utilizados para a determinação da qualidade das madeiras de eucalipto. Esses parâmetros são normalmente classificados como físicos, químicos e anatômicos.

As características ou qualidade da madeira variam entre as espécies, entre árvores da mesma espécie, na mesma árvore e na seção transversal desta. A compreensão dessa variabilidade torna-se importante, pois o uso da árvore comercial está relacionadas a algumas de suas características principais. A variabilidade das características da madeira é influenciada pelas técnicas silviculturais, pelas alterações do câmbio em função da sua idade, pelos controles genéticos que governam sua forma e taxa de crescimento e pelas condições edafoclimáticas existentes na área de plantio (PANSHIN E DE ZEEUW, 1980). A madeira é constituída de vários elementos celulares, unidos entre si, o que forma tecidos diferenciados conforme a função que desempenham. Conforme Carvalho (2005) é o conjunto e arranjo do lenho que definem sua estrutura.

Karlson (2006) descreve que a madeira é composta principalmente por três tipos de materiais: celulose, hemicelulose e lignina e que sua composição relativa varia de acordo com cada espécie de árvore. Carvalho (2005) comenta que ainda que todas as madeiras sejam formadas basicamente pelos mesmos elementos, as modificações de forma, tamanho e arranjo dos componentes tornam diferentes as estruturas das diversas espécies. Afirma também que embora exista uma grande variabilidade da madeira dentro da mesma espécie e, até mesmo, dentro de uma mesma árvore, a estrutura básica das madeiras pertencentes a uma mesma espécie mantém-se constante. Esta característica torna possível a classificação e a identificação das madeiras através de

observações de seus elementos. Dentro de certos limites, o estudo da estrutura da madeira permite avaliar as possibilidades de sua aplicação.

As paredes celulares são constituídas de muitas substâncias orgânicas e inorgânicas. Consideram-se como substâncias orgânicas a lignina, proteínas e lipídios. Como substâncias protéicas importantes, têm-se a extensina, que dá rigidez à parede, e a α-expansina, que atua na expansão irreversível da parede. São também comuns as enzimas peroxidases, fosfatases entre outras (CARVALHO, 2005, p.33). Substâncias lipídicas como suberina, cutina e ceras tornam a parece celular impermeável à água. Dentre as substâncias inorgânicas podem ser citados a sílica e o carbonato de cálcio.

A parede celular forma-se externamente à membrana plasmática. As primeiras camadas formadas constituem a parede primária (PM) (Figura 2), onde a deposição das microfibrilas ocorre por intussuscepção, ou seja, por rearranjo entrelaçado. Entre as paredes primárias de duas células contíguas está presente a lamela média, ou mediana (LM) (Figura 2) (CARVALHO, 2005).

Em muitas células a parede primária é a única que permanece. Em outras, internamente à parede primária, ocorre à deposição de camadas adicionais que constituem a parede secundária. Nesta parede, as microfibrilas são depositadas por aposição, ou seja, por arranjo ordenado. A primeira, a segunda e a terceira camadas da parede secundária são designadas S1, S2 e S3, respectivamente, sendo delimitadas pela mudança de orientação da deposição, que varia nas diferentes camadas (Figura 2). A camada mais próxima da parede primária é denominada S1, a camada seguinte é a S2 representa cerca de 70 a 75% do total da parede celular descreve KOGA (1988). A camada S3 é semelhante a S1 e suas microfibrilas estão dispostas, aproximadamente, na direção perpendicular ao eixo da fibra de 60° a 90°. Durante a deposição da parede secundária inicia-se a lignificação. No caso de células mortas, a parede secundária delimita o lume celular (L).

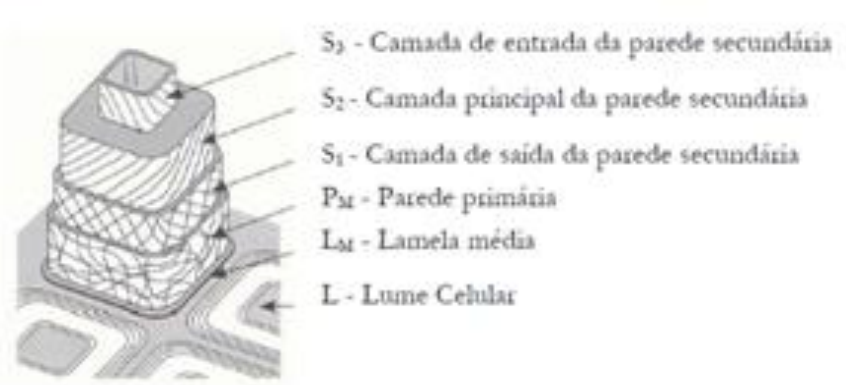


Figura 2: Ilustração de uma parede de células e organização das fibras

De acordo com Carvalho (2005), as paredes diferem em espessura, composição e propriedades físicas nas diferentes células. A união entre duas células adjacentes é efetuada através da lamela média (LM) que é constituída principalmente por lignina (KOGA, 1988, p. 33). A parede primária é mais espessada que a lamela média e geralmente se mostra bem mais fina em comparação à parede secundária. A parede primária possui alto teor de água, cerca de 65%, e o restante, que corresponde à matéria seca, é composta de 90% de polissacarídeos (30% de celulose, 30% de hemicelulose e 30% de pectina) e 10% de proteínas (expansina, extensina e outras glicoproteínas). Impregnações e, ou, depósitos de cutina, suberina e ceras podem estar presentes na parede primária de algumas células. A parede secundária possui um teor de água reduzido, devido à deposição de lignina que é um polímero hidrofóbico. A matéria seca é constituída de 65 a 85% de polissacarídeos (50-80% de celulose e 5 a 30% de hemicelulose) e 15 a 35% de lignina. A celulose é o maior componente da parede secundária, estando aparentemente ausentes as pectinas e glicoproteínas. Embora o processo de lignificação esteja associado à parede secundária, ele geralmente se inicia na lamela média e parede primária, de modo que estas também podem conter lignina quando da formação da parede secundária.

Os métodos convencionais para se avaliar a qualidade da madeira para a produção de celulose, incluem avaliação da sua densidade e polpabilidade. A densidade básica tem sido a mais destacada e considerada como principal parâmetro, pois é uma característica bastante complexa, resultante da

combinação de diversos fatores, incluindo a constituição química e morfológica da madeira. Esta propriedade é influenciada pelas condições de crescimento das árvores, como clima, solo, espaçamento e idade de corte (CARVALHO, 1997).

Mais recentemente, como critério para a seleção de clones superiores também tem sido considerada a química fina da madeira, especialmente quanto aos seus teores de celulose, hemicelulose, extrativos, ligninas e relação siringeila-guaiacila (S/G) da lignina. Estes parâmetros químicos são normalmente relacionados com os aspectos quantitativos de rendimento e consumo de produtos químicos durante os processos de polpação e branqueamento.

A uniformidade da madeira que entra no processo também deve ser levada em consideração, pois influencia diretamente na homogeneidade das operações de cozimento e de branqueamento. No caso da madeira de eucalipto, tem sido comprovado que a principal causa de heterogeneidade do cozimento está relacionada aos teores de lignina e de extrativos da madeira bem como à natureza química da lignina e dos compostos que compõem os extrativos. Em geral, os impactos de uma composição química adversa da madeira são caracterizados por alteração substancial das demandas de álcali ativo para o cozimento da madeira e de cloro ativo total para branqueamento da polpa Kraft produzida. Estas demandas, obviamente, têm relação direta com o rendimento da linha de fibras e com o custo total de produção da celulose.

Espécies de madeira que apresentam as melhores características para a produção de polpa celulósica são as que possuem maiores teores de carboidratos (celulose, hemicelulose) menores teores de extrativos, de lignina e maior relação SG[4]. siringila/guaiacila.

Composição:

- celulose: 40 a 50%;
- hemicelulose: 20 a 30%;
- lignina (guaiacila, co-polímero siringila-guaiacila): 25 a 35%;
- extrativos (resina, cera, gordura, açúcar, tanino): 2 a 4%;
- cinzas: < 0,5%;

[4] *Siringila/Guaiacila (S/G)* são tipos de lignina presentes na constituição química da madeira.

- Mn, Fe, Cu, Co, Zn: afetam o branqueamento que utiliza reagentes como ozônio (O_3) e peróxido de hidrogênio (H_2O_2), causam perda de viscosidade e reversão de alvura;
- Ca, Al, Si, Ba, Mg, Mn: causam incrustações na caldeira de recuperação, evaporadores e lavadores;
- P, N: nutrientes que afetam qualidade do efluente;
- K, Cl, Cr: corrosão e entupimentos na caldeira de recuperação;
- Cd, Cu, Ni, As, Hg, Zn, Cr: aumentam toxidez do efluente.

A Figura 3 mostra a relação e o rendimento para os principais componentes do *Eucalyptus grandis* (COLODETTE, 2004). Considerou-se uma estimativa para um processo com produção, tomando como referência o #Kappa igual 16 e rendimento depurado igual a 50%. Pode ser observado que dos 100 Kg de madeira, aproximadamente 50%, após a etapa de polpação, segue na linha de fibras como polpa marrom e o restante é extraído como licor negro fraco e é considerado como perdas, mas, no entanto é reaproveitado na etapa de recuperação.

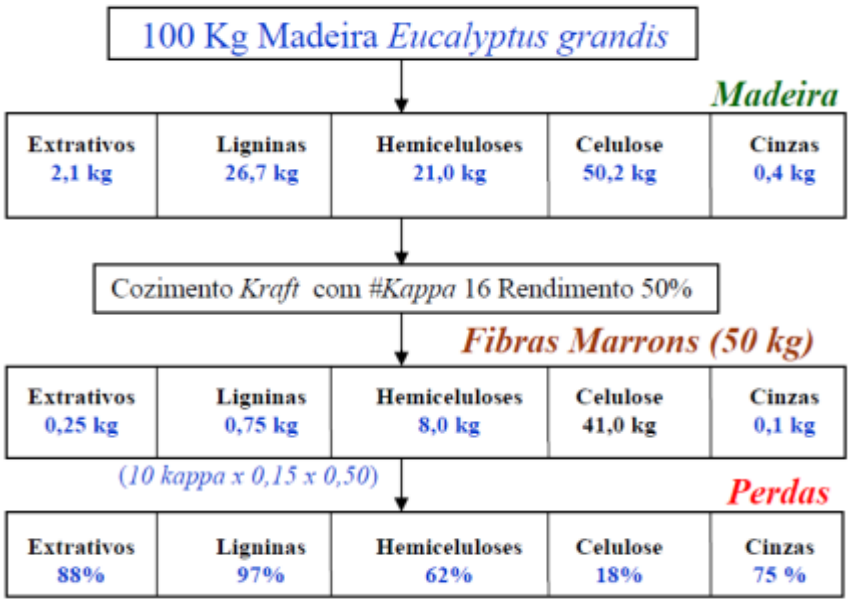


Figura 3: Rendimento do Eucalyptus grandis para um processo em produção com #Kappa=16 (COLODETTE, 2004)

2.3.Variáveis de Processo

O desempenho da polpação Kraft e a qualidade das polpas resultantes são influenciadas por variáveis associadas com a matéria-prima e com o processo de polpação (FENGEL E WENEGER, 1989; D'ALMEIDA, 1988), conforme analisado a seguir.

2.3.1. Variáveis associadas com a matéria-prima

Espécie da madeira alimentada no processo

De forma geral, a madeira proveniente de folhosas possui, quando comparadas às madeiras de coníferas, as seguintes características:

- fibras mais curtas (cerca de 1mm de comprimento);
- menor teor de lignina;
- maior teor de xilanas[5];
- maior facilidade de impregnação dos cavacos;
- maior facilidade de deslignificação;
- excelentes propriedades de impressão e escrita.

Dentre as espécies de eucalipto que possuem características desejáveis para a produção de celulose no Brasil, destacam-se *Eucalyptus grandis*, *Eucalyptus urophylla, Eucalyptus saligna* e alguns híbridos dessas espécies, notadamente *Eucalyptus grandis* e *urophylla* (COTTERIL e MACRAE, 1997). Em regiões mais frias, como no sul do Brasil, Chile e Península Ibérica, destacam-se o *Eucalyptus globulus* e o *Eucalyptus nitens*.

Presença da madeira juvenil e de topo

Da mesma forma que as diferenças na qualidade de cerne e alburno, embora do ponto de vista de obtenção de celulose, esse fato tenha pouca aplicação prática, pois se consome o tronco inteiro, cita-se as seguintes diferenças nas características de madeira juvenil e de topo:

[5] As xilanas são polissacarídeos como um esqueleto linear formado por unidades de xilose conectadas entre si pelos carbonos 1 e 4, através das ligações Beta (*β*) (D'ALMEIDA,1988).

- menor densidade;
- menor rendimento;
- fibras mais curtas e de paredes mais finas;
- menor comprimento e diâmetro dos elementos de vasos;
- parede celular mais fina;
- maiores ângulos das microfibrilas;
- maior proporção de fibras;
- menor proporção de vasos;
- maior teor de holocelulose.

Tempo de Armazenamento da Madeira

O tempo de armazenamento da madeira é também conhecido em muitas empresas como tempo pós-corte, ou seja, é o tempo que a tora leva para ser consumida após o abate da árvore. Normalmente, as toras permanecem empilhadas nas margens das estradas florestais por um a dois meses para perder água, reduzindo assim o peso da carga a ser transportada. Em geral, a madeira entregue na fábrica é destinada diretamente a área de picagem, onde é transformada em cavaco e é estocada ao ar livre ou em silos, onde permanece retida por 2 a 5 dias. A estocagem da madeira, principalmente na forma de cavaco, resulta numa leve degradação por evaporação e/ou oxidação de extrativos de baixo peso molécula. Além disso, a estocagem de madeira por longo tempo tem o potencial de degradação por fungos, com redução no rendimento geral do processo em celulose.

Idade da madeira

As diferenças entre as madeiras de eucalipto de uma mesma espécie ocorrem, principalmente, em função de fatores genéticos, ambientais e da idade da árvore. Alguns estudos (MAEGLIN, 1987, citado por CARVALHO, 1997; TRUGILHO *et al.*, 1996; SILVA *et al.*, 2005) mostram que a idade das madeiras influencia o seu potencial para a produção de celulose e papel, já que seus parâmetros de qualidade são fortemente influenciados pelas características físicas e químicas das madeiras.

Do ponto de vista prático, a idade é um fator de gerenciamento operacional das florestas e afeta as propriedades de interesse do processamento das seguintes formas:

- quanto maior a idade da árvore maior será sua densidade;
- quanto maior a idade maior é o RD (rendimento depurado);
- quanto maior a idade menor será o consumo específico (capacidade de conversão e polpa de celulose ou seja m³ de madeira / tonelada polpa).

A qualidade do produto final é afetada por diversas variáveis do processo e também da matéria-prima. Uma árvore pode possuir composição físico-química diferenciada dependendo da idade que se encontra na época da colheita. O efeito da idade das madeiras na constituição química e nas variáveis de processo, bem como nas características finais da polpa branqueada, torna-se um fato de grande interesse para as indústrias do setor, especialmente se considerando a possibilidade de cortes cada vez mais precoces.

Densidade básica da madeira

Em estudo conduzido por Wehr e Barrichello (1992) foi observado que os limites de densidade básica da madeira de eucalipto, para produção de celulose, deveriam estar entre 450 e 550 kg/m³. Os autores ressaltaram que madeiras leves levam à redução do rendimento em celulose (base volume), enquanto madeiras pesadas apresentam dificuldades na picagem e impregnação, consomem quantidades elevadas de reagentes e resultam em baixos rendimentos (base peso) e em elevados teores de rejeitos.

As alterações de densidade na madeira influenciam nas:

- alterações no processo de picagem;
- alterações no dimensionamento dos cavacos;
- alterações na densidade a granel dos cavacos;
- alterações no teor de rejeitos;
- variações no consumo específico de madeira em m³ / tonelada polpa;

- alterações do consumo de álcali efetivo;
- alterações no RD (rendimento depurado);
- variações na viscosidade;
- maior consumo de energia no refino.

De forma geral, a densidade causa vários efeitos em um processo de cozimento, e conseqüentemente nos processos de produção de celulose e do próprio papel, e se relaciona com as seguintes características (QUEIROZ et al., 2004):

- variação de volume específico aparente;
- variação de resistência à refinação;
- variação de resistência ao rasgo;
- variações nas características de opacidade;
- alterações nas características superficiais;
- alterações na qualidade de impressão;
- variação na resistência à tração;
- variação no alongamento;
- variação da resistência ao arrebentamento;
- variação da resistência a dobras;
- variação no peso específico aparente;
- alterações nas propriedades de ligação entre fibras;

Queiroz (2004) concluiu em seus experimentos, que a madeira de baixa densidade apresenta menor requerimento de álcali para produção de polpa, maior rendimento depurado e viscosidade da polpa mais elevada.

Dimensões do Cavaco

Segundo Foelkel (1978), citado por Wehr e Barrichello (1992), as dimensões dos cavacos são de fundamental importância para que ocorra uma impregnação homogênea e efetiva dos agentes químicos de cozimento para o interior da madeira. A distribuição efetiva e rápida dos agentes químicos assegura reações homogêneas durante o cozimento e conseqüentemente, alta qualidade da celulose produzida.

Wehr e Barrichello (1992), estudaram a influenciada espessura dos cavacos na qualidade da celulose Kraft e indicaram uma faixa ideal de 2 a 8 mm, com maior incidência de cavacos na faixa de 4 a 6 mm. Os autores ressaltaram que cavacos com espessura menor que 2 mm consomem maior quantidade de álcali, proporcionam menor rendimento e resultam em celulose de menor densidade e com menores resistências mecânicas, pois estão mais expostos às condições mais drásticas de polpação. Por outro lado, cavacos com espessuras superiores a 8 mm, muitas vezes associados à presença de nós e anomalias nas estrutura da madeira, necessitam de cozimentos mais longos e elevam o teor de rejeitos, com reflexos negativos no rendimento e na qualidade da celulose. Para madeiras de eucalipto, recomendam-se cavacos com comprimentos na faixa de 15 a 25 mm.

Em estudo com madeiras de *Eucalyptus grandis* de densidade variando de 450 a 550 kg/m³, Wehr e Barrichello (1992) observaram que, independente do tipo de madeira, nas condições de picagem e processo adotado, os cavacos entre 2 e 6 mm de espessura apresentaram os melhores resultados de cozimento.

Acessibilidade

Os agentes químicos do licor de cozimento (NaOH e Na_2S) penetram nos cavacos, mais especificamente nas camadas que formam as fibras e fibrilas, promovendo a dissolução e remoção de grande parte da lignina ali presente. A impregnação dos cavacos na polpação se dá por penetração física do licor e por difusão dos seus íons no interior dos cavacos. Essa impregnação depende da concentração do licor de cozimento, da sua sulfidez e da acessibilidade da madeira. A acessibilidade da madeira depende fortemente de suas características físicas, químicas e anatômicas. O acesso do licor ao interior do cavaco se dá pelos vasos em direção às fibras e, nestas, do lúmem através das paredes da fibra até a lamela média.

Segundo Gomide (1979), para atingir esse objetivo, é fundamental o conhecimento da natureza química dos componentes da madeira e de seus comportamentos químicos durante as operações de polpação.

2.3.2. Variáveis associadas com o processo

Tipo de digestor

É comum o uso de digestores contínuos tanto em modernização de fábricas existentes como em novos projetos. Esse equipamento, que se constitui num dos mais importantes e caros do projeto. As novas gerações de digestores contínuos (tipo Lo-Solids, Compact Cooking, etc.), resultado de cozimentos modificados, têm propiciado aumento de produção, de rendimento e de qualidade da polpa. No entanto, novas gerações de digestores descontínuos modificados (RDH, SuperBatch, Ennerbatch, etc.) oferecem alternativas de custo-benefício que concorrem com os digestores contínuos.

A tecnologia de cozimento utilizada na VERACEL é a chamada Lo-Solids. O objetivo básico desta metodologia é minimizar a concentração de sólidos oriundos da madeira nas fases de deslignificação principal e residual, mantendo as condições necessárias para um processo modificado. A tecnologia Lo-Solids oferece como benefícios:

• redução de picos de concentração de álcali;

• redução de picos de temperatura;

• mínima concentração de lignina ao final do cozimento;

• máxima sulfidez no início do cozimento.

Segundo Marcoccia et al. (1998) tem-se verificado que a concentração de sólidos de madeira dissolvidos pode ser reduzida em até 30%. No processo Lo-Solids, as condições de reação desejáveis são obtidas pela extração do licor negro do sistema várias vezes durante o processo de polpação. Cada uma das extrações é seguida de uma injeção de licor para reconstituição das concentrações de reagentes desejáveis. O cozimento Lo-Solids apresenta muitas vantagens dentre elas, destacam-se:

• o aumento da resistência e viscosidade da polpa;

• a redução da temperatura de cozimento e do uso de álcali;

• a melhoria na eficiência de lavagem no digestor;

• o cozimento mais uniforme;

• um melhor desempenho no deslocamento da coluna de cavacos dentro do digestor;

• a redução na demanda de reagentes químicos no branqueamento.

Devido a estas vantagens o processo Lo-Solids tem apresentando uma rápida expansão na sua aplicação industrial no mundo. Além disto, em várias fábricas observou-se uma redução no consumo específico de madeira da ordem de 8%, o que segundo Marcoccia et al. (1998) evidencia o aumento de rendimento devido ao uso deste processo.

Basicamente este tipo de cozimento objetiva:

• estabilizar o perfil de concentrações de carga alcalina ao longo do cozimento;

• concentrar maior número de íons sulfeto na fase de deslignificação inicial e no começo da fase principal de remoção de lignina, como forma de se proteger os carboidratos;

• uniformizar as temperaturas ao longo de cozimento, as quais são mantidas menores em relação ao que se fazia no passado;

• reduzir a concentração de lignina dissolvida e de íons de sódio, conseguindo-se isso pela troca constante dos licores conforme vão sendo extraídos os compostos da madeira;

• processar condições brandas de cozimento e uniformes, levando em consideração as principais variáveis do processo de cozimento Kraft.

Estes sólidos dissolvidos referem-se à lignina, celulose, hemicelulose, extrativos, metais e sais minerais, os quais são removidos da madeira e dissolvidos nos licores extraídos, durante o cozimento. Este processo inicia-se na impregnação, onde os cavacos recebem o licor de cozimento e são aquecidos até a temperatura de cozimento. O final da deslignificação refere-se à última zona de cozimento no digestor.

Sólidos de madeira dissolvidos são removidos do sistema pela extração do licor de impregnação consumido e/ou pelos múltiplos licores de cozimento consumidos ao longo do digestor. Em adição aos sólidos de madeira dissolvidos, água e químicos do cozimento também serão removidos em cada extração. A quantidade de água e álcali efetivo removido para uma dada extração dependerá do fluxo de extração e da concentração do licor extraído. A reposição de água deve ser realizada de maneira a satisfazer as necessidades do sistema hidráulico.

A reposição dos químicos do cozimento deve ser executada de forma a satisfazer o grau de deslignificação necessário ao longo do digestor.

Composição do licor branco de cozimento

Os componentes químicos ativos do processo de polpação são hidróxido de sódio (NaOH) e sulfeto de sódio (Na_2S), sendo caracterizados como álcali ativo (AA = NaOH + Na_2S) ou álcali efetivo (AE = NaOH + 0,5 Na_2S). Além desses, o licor branco contém carbonato de sódio (Na_2CO_3), que, junto com o álcali ativo, formam o álcali total titulável (ATT = NaOH + Na_2S + Na_2CO_3) ou o álcali total (ATT = + outros sais de enxofre), conforme descrito por Gomide (1979).

Um dos componentes ativos do licor branco é o sulfeto de sódio, e sua participação no licor branco é expressa pela sulfididade do licor, que é a relação percentual entre a quantidade de Na_2S e o álcali ativo (S = Na_2S x 100/AA). Em geral, essa sulfididade situa-se na faixa de 15-35%, expressa como NaOH. Acima de 35% a emissão de compostos malcheirosos aumenta exponencialmente. As perdas dos componentes ativos no processo são repostas pela adição direta de NaOH ou pela adição de Na_2SO_4 no licor preto concentrado, que é queimado na caldeira de recuperação.

Em geral, os componentes do álcali ativo são responsáveis pela dissolução inicial dos extrativos, pela degradação dos carboidratos e pela dissolução da lignina. O licor branco é preparado na planta de caustificação, e a sua concentração, expressa em termos de NaOH, varia de 130 a 140 g/l. A carga de licor branco é estabelecida volumetricamente, em função da madeira seca alimentada no processo. Tão importante quanto à carga de álcali aplicada no processo é a concentração uniforme do licor de cozimento. Logo, variações na concentração do licor alteram a carga de álcali e a qualidade da polpa marrom.

Carga Alcalina

A carga de álcali ativo aplicado na polpação Kraft de madeiras de eucalipto, até deslignificação equivalente a kappa 15-20, é da ordem de 15-20%, expressa como NaOH. Almeida et al. (2000) estudaram a dissolução dos constituintes químicos da madeira de eucalipto ao longo do processo de polpação Kraft convencional e constataram que a carga de alcalina aplicada

exerce efeito considerável na taxa de deslignificação e sobre a degradação das hemiceluloses, principalmente nas etapas iniciais de cozimento.

Ek et al. (2001), descrevem que o aumento da carga alcalina do cozimento proporciona redução significativa do rendimento total do processo de polpação. Segundo os autores a queda no rendimento acontece, no caso de madeira de folhosas, devido à degradação das xilanas, as quais são sensíveis ao aumento da carga alcalina, causando impactos negativos na seletividade do cozimento, a qual pode ser expressa pela relação viscosidade/número kappa ou rendimento/número kappa.

Alencar (2002) estudou o híbrido de *E. grandis* x *E. urophylla* com idades de 1 até 7 anos aplicando-se carga alcalina de 13%, 14%, 15%, 16% e 17% de álcali ativo como Na_2O. Foi constato que à medida que aumenta o nível de álcali dos cozimentos tem-se um incremento do nível de deslignificação e, conseqüentemente, redução do número kappa, do rendimento depurado, do teor de rejeitos e aumento da relação rendimento/kappa.

Colodette et al. (2000) descrevem que o teor de ácidos hexenurôricos de polpa Kraft de eucalipto reduz em torno de 26% quando a carga alcalina é aumentada de 16% para 24% e a temperatura de 160^{o}C para 170^{o}C, evidenciando a maior degradação desses grupos de ácidos sob condições de cozimento mais severas.

Relação licor/madeira

Na polpação, é importante a recirculação do licor de cozimento para aquecimento e distribuição na massa de cavacos. Para tanto, o licor branco aplicado é diluído com licor preto fraco até uma relação licor/madeira igual ou maior que 3/1.

Tempo e temperatura de cozimento (fator H)

Diversos estudos mostraram a interação das variáveis temperatura e tempo de cozimento, as quais foram agrupadas numa única variável: o fator H.

O pioneiro nestas pesquisas foi Vroon (1957). Este autor introduziu o conceito do fator H, que ainda hoje continua sendo utilizado. A partir dos

estudos de Vroon outros estudos e modelos foram desenvolvidos para o fator H (BUGAGER et al., 1979) e (MARQUES et al., 1979).

Em todos os processos químicos de produção de celulose, as variáveis tempo de cozimento e temperatura de deslignificação são consideradas as mais importantes, pois afetam diretamente a remoção de lignina e a qualidade do produto final (MARQUES et al., 1979). Estas variáveis se relacionam de forma inversa, ou seja, quanto maior a temperatura, menor o tempo de cozimento.

As madeiras comerciais de eucalipto, segundo Bugager et al. (1979), requerem um fator H na faixa de 600-800, correspondendo a temperaturas de 150-170^{o}C e duração de 60-90 minutos.

2.4. Modelos Aditivos generalizados

Os modelos aditivos generalizados (GAM) são uma extensão dos modelos lineares generalizados, nos quais cada variável independente não entra no modelo com o seu valor, mas sim, adotando uma função não paramétrica de forma não especificada, que é estimada a partir de curvas de alisamento; o modelo aditivo consiste da soma dessas funções. Sendo assim, não é necessário assumir uma relação linear e, ou, aditiva entre a variável dependente e a variável independente em estudo. A trajetória ou curva alisada proporciona a visualização não somente da forma, mas, também, apresentam as possíveis não linearidades nas relações estudadas, uma vez que não apresenta uma função paramétrica rígida (HASTIE E TIBSHIRANI, 1990). Conforme Conceição et al. (2001), este tipo de modelo baseia-se em funções não paramétricas (curvas de alisamento), em que a forma de associação entre as variáveis é definida pelos próprios dados.

Os modelos lineares (1) são pertencentes à classe dos modelos lineares generalizados. O procedimento de ajuste tem como objetivo estimar a E(Y |X1,X2 ..., Xp) usualmente por método de mínimos quadrados, sendo:

$$E(Y \mid X_1, X_2, \ldots, X_p) = \beta_0 + \beta_1 X1 + \beta_2 X_2 + \cdots + \beta_p X_p + e \qquad (1)$$

Sendo: Y a variável resposta; β_p os parâmetros a serem estimados; X_p o conjunto de variáveis preditoras e e representa o componente não explicado pelo modelo, sendo denominado como erro ou resíduo.

Os modelos aditivos generalizados (2) apresentam a mesma estrutura do modelo (1), porém as variáveis preditoras entram no modelo através de funções de formas não especificadas, representadas por: $fp(\ .\ )$, estimadas através de curvas de alisamento por processos interativos, conforme HASTIE E TIBSHIRANI(1990).

$$E(Y \mid X_1, X_2, \ldots, X_p) = \alpha + f_1(X_1) + f_2(X_2) + \cdots + f_p(X_p) + e \qquad (2)$$

Com a inclusão dessas funções, não é necessário assumir uma relação linear entre a variável resposta e as variáveis explicativas, como no Modelo Linear Generalizado. De fato, não é necessário nem mesmo conhecer previamente a forma dessa relação, mas é possível estimá-la a partir de um conjunto de dados (CONCEIÇÃO et al., 2001). Conforme esses autores, a curva alisada permite então descrever de forma refinada as possíveis relações

e associações entre as variáveis estudadas, uma vez que não apresenta a estrutura rígida de uma função paramétrica.

Os modelos aditivos generalizados são amplamente utilizados em diversas áreas do conhecimento, podendo-se destacar na área da medicina, mais especificamente em epidemiologia, sendo utilizados em estudos para descrever a intensidade de associações entre doenças respiratórias e variáveis climáticas e/ou níveis de poluentes presentes na atmosfera.

Conceição et. al., (2001) investigando a relação existente entre pneumonia e gripe e poluição atmosférica, utilizou-se o modelo aditivo generalizado de regressão de Poisson, tendo como variável dependente o número diário de atendimentos por pneumonia e gripe e como variáveis independentes as concentrações médias diárias dos poluentes atmosféricos. A análise foi ajustada para sazonalidade de longa duração (número de dias transcorridos), sazonalidade de curta duração (dias da semana), temperatura mínima, umidade média, períodos de rodízio e os atendimentos por doenças não-respiratórias em idosos.

Essa recente metodologia (HASTIE E TIBSHIRANI, 1986) é extremamente eficiente em modelar fenômenos complexos, em que as variáveis estudadas apresentam alta variabilidade, típicas de dados de origem de sistemas reais, onde não há um rigoroso controle das variáveis estudadas, diferentemente do que ocorre em dados provenientes de delineamentos experimentais.

Vários trabalhos têm sido publicados nos últimos anos nessa linha de pesquisa: Martins et al., (2001), Schwartz el al., (1996) dentre muitos outros. Conceição et. al., (2001), compara duas abordagens distintas para analisar esses tipos de dados, sendo os modelos lineares generalizados e os modelos aditivos generalizados, o último foi selecionado pela autora como o mais apropriado, pois evidenciou maior número de associações utilizando menos parâmetros que a metodologia concorrente.

2.5.Redes Neurais Artificiais (RNA)

Redes Neurais Artificiais são sistemas paralelos distribuídos compostos por unidades de processamento simples (nós) que calculam determinadas funções matemáticas (normalmente não-lineares). Tais unidades são dispostas em uma ou mais camadas e interligadas por um grande número de conexões, geralmente unidirecionais (do Braga et al., 2000). Na maioria dos modelos estas conexões estão associadas a pesos, os quais armazenam o conhecimento representado no modelo e servem para ponderar a entrada recebida por cada neurônio da rede. O funcionamento destas redes é inspirado em uma estrutura física do cérebro humano.

As RNAs têm sido utilizadas para solução de vários problemas computacionais e pode-se afirmar que esta utilização se dá em função das seguintes propriedades: não-linearidade; mapeamento de entrada; adaptabilidade; e generalização. Essas redes são capazes de solucionar problemas mais complexos em função de sua característica natural e do paralelismo interno inerente de sua arquitetura. Por isto, apresentam possibilidade de maior desempenho comparada com os modelos convencionais. A solução de problemas utilizando RNAs, passam pelos procedimentos: inicialmente é apresentado o problema (os dados de entrada); a RNA extrai automaticamente as características destas informações e aprendem com estas informações e sugerem um resultado.

RIBEIRO (2008) propôs um modelo matemático para predição do grau de cozimento (#Kappa) em um digestor contínuo para uma planta de celulose. Foi explorada a modelagem através de redes neurais artificiais, com a utilização de variáveis de processo de uma planta real. A tecnologia FT-NIR (Fourier Transform Near Infrared) foi usada para identificar os cavacos de madeira que entram no processo de cozimento. Associada a esta tecnologia, foi utilizada uma técnica de análise multivariada denominada PCA (Principal Components Analysis) para redução da dimensionalidade dos padrões de entrada do modelo. Foram utilizadas como entradas do modelo neural, variáveis de processo e as análises associadas aos espectros de freqüência da absorbância do infravermelho nos cavacos de madeira. Foram realizados testes utilizando métodos de otimização paramétrica não-linear para o

treinamento do modelo neural. Os resultados mostraram uma boa adequação na utilização destas técnicas para predição de variáveis no ramo industrial, especialmente o grau de cozimento em um digestor contínuo.

O modelo desenvolvido é capaz de predizer a variável #Kappa, possibilitando ações operacionais mais proativas e conseqüente redução da variabilidade desta. Apesar da complexidade do processo de cozimento, das inúmeras variáveis que interferem no grau de cozimento e o comportamento não linear dos digestores, a modelagem baseada em redes neurais ofereceu coeficientes de correlação satisfatórios entre os valores preditos e efetivamente medidos no processo.

PATAN e PARISINI (2005) desenvolveram um modelo neural para detecção e isolamento de defeitos e o aplicaram na planta de evaporação da empresa Lublin Sugar Factory. O procedimento consistiu na coleta e no tratamento dos dados de processo. Em seguida, as redes neurais foram construídas. A qualidade da modelagem foi avaliada com base no conceito estatístico da minimização da soma dos erros quadráticos. Para o treinamento das redes de classificação foi necessário um banco de dados defeituosos. Este foi gerado pela inclusão de erros de 5%, 10% e 15% nos sensores de processo em condições normais de operação. O procedimento de validação do modelo foi realizado com uma base de dados diferente da base de dados utilizada no treinamento da rede. Pelos resultados obtidos concluiu-se que as redes neurais artificiais podem ser utilizadas para criar sistemas de detecção e diagnóstico de defeitos.

ALMEIDA (2008) apresentou uma metodologia baseada na técnica modelo oculto de Markov (HHM - Hidden Markov Model), para se detectar situações anormais em caldeiras de recuperação química, ainda em estágio inicial, ou seja, antes de se alcançar uma condição indesejável. A situação monitorada foi o acúmulo de depósitos de cinzas sobre os equipamentos da sessão de transferência de calor convectivo, através das medições de perda de carga. Pelos resultados obtidos pode-se identificar a detecção precoce de situações anormais, robustez às incertezas e ruídos, adaptabilidade à dinâmica de processos, natureza explícita, desenvolvimento e implementação computacional factíveis.

A capacidade de reconhecer padrões não apresentados à RNA no período de treinamento é denominada capacidade de generalização e é uma característica importante para estes modelos. De acordo com Figueirêdo (2006) as RNAs são capazes de extrair informações não apresentadas de forma explícita através de exemplos. Assim, são capazes de atuar como mapeadores universais de funções multivariáveis.

Uma RNA possui a capacidade de auto-organização e de processamento temporal, que associado às demais características, as transformam em uma ferramenta extremamente atraente e poderosa na solução de problemas complexos. Especialmente no ramo industrial, vários autores têm utilizado destas técnicas (GE, *et al.*, 1998); (LEMMETI *et al.*, 1998); (KASPARIAN, 1998); (PREMIER *et al.*, 1999); (HAYKIN, 2001); (AGUIAR & FILHO, 2001); (YU & GOMM, 2003); (LAPERRIÈRE *et al.*, 2004); (DUFOUR *et al.*, 2005); (MALMBERG, *et al.*, 2005); (COSTA, *et al.*, 2005); (RUBINI & YAMAMOYO, 2006); (FIGUEIRÊDO, 2006) e (BARBER & SCOTT, 2007).

De acordo com Haykin (2001) um neurônio é uma unidade de processamento de informação que é fundamental para a operação de uma RNA. A descrição do modelo do neurônio proposto por McCulloch e Pitts (1969) resultou em um modelo com *n* terminais de entrada x_1, x_2,...,x_n (que representam os dendritos) e apenas um terminal de saída *y* (representando o axônio). Para emular o comportamento das sinapses, os terminais de entrada do neurônio têm pesos acoplados w_{k1}, w_{k2}, ...,w_{km} cujos valores podem ser positivos ou negativos. O efeito de uma sinapse particular *i* no neurônio é dado por $x_i w_i$. Os pesos determinam em que grau o neurônio deve considerar sinais de disparo que ocorrem naquela conexão. Uma descrição do neurônio artificial é mostrada na figura a seguir.

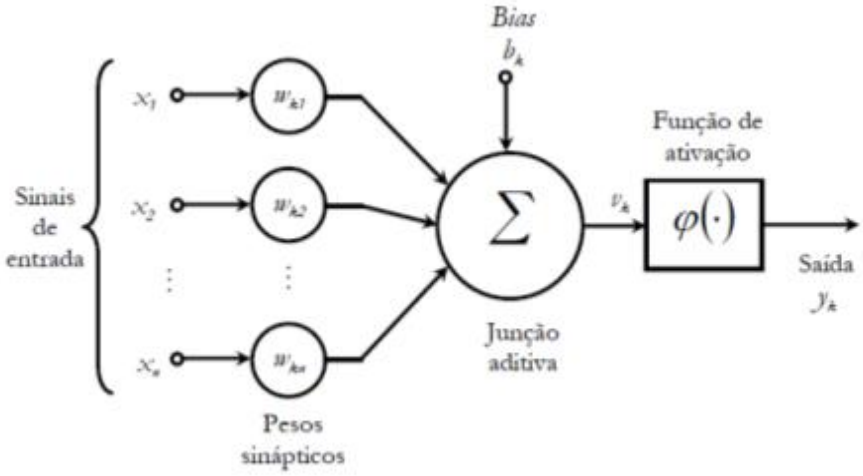


Figura 4 – Modelo de um neurônio artificial

Neste modelo não-linear (Figura 4), podem ser identificados três elementos básicos:

- **Sinapses:** ou conexão de entrada, caracterizadas por pesos ou forças próprias. Um sinal x_j na entrada da sinapse *j*, conectada ao neurônio *k* é multiplicado pelo peso sináptico w_{kj};
- **Junção aditiva:** responsável pela soma ponderada dos sinais de entrada;
- **Função de ativação:** restringe a amplitude da saída de um neurônio, limita o intervalo permissível de amplitude do sinal de saída. Podem ser do tipo linear e não-linear. Tipicamente o intervalo normalizado da amplitude da saída de um neurônio é escrito como o intervalo unitário fechado [0,1] ou alternativamente [-1,1].

O modelo neuronal apresentado na Figura 4 inclui também um *bias* aplicado externamente, representado por b_k. O *bias* tem o efeito de aumentar (se $b_k>0$), ou diminuir (se $b_k<0$) a entrada líquida da função de ativação.

Em termos matemáticos, pode-se descrever um neurônio ‘k’ escrevendo o seguinte par de equações (4.1) e (4.2):

$$v_k = \Sigma_{j=1}^{m} w_{kj} x_j \qquad (4.1)$$

$$y_k = \varphi(v_k + b_k) \qquad (4.2)$$

Onde x_1, x_2,...,x_n são os sinais de entrada; w_{k1}, w_{k2}, ..., w_{kn} são os pesos sinápticos do neurônio *k*; v_k é a saída do combinador linear devido aos sinais de entrada; b_k é o *bias*; $\varphi(.)$ é a função de ativação; e y_k é o sinal de saída do neurônio.

A função de ativação $\varphi(.)$ é responsável pela definição da saída do neurônio em função de seu nível interno de ativação v_k. Os tipos de função de ativação mais utilizadas são:

- Função limiar: ilustrada na Figura 5(a). A saída no neurônio é dada pela Equação 4.3.

$$\varphi(v) = \begin{cases} +1, para\ v \geq 0 \\ 0, para\ v < 0 \end{cases} \quad (4.3)$$

- Função linear: ilustrada na Figura 5(b). A saída no neurônio é dada pela Equação 4.4.

$$\varphi(v) = \alpha v \quad (4.4)$$

Sendo α um número real que define a saída linear para os valores de v.

- Função linear por partes: ilustrada na Figura 5(c). A saída no neurônio é dada pela Equação 4.5.

$$\varphi(v) = \begin{cases} +1, para\ v \geq 1 \\ u, para\ 0 < v < 1 \\ 0, para\ v \leq 0 \end{cases} \quad (4.5)$$

- Função sigmoidal logística: a saída no neurônio é dada pela Equação 4.6

$$\varphi(v) = \frac{1}{1 + e^{-\frac{v}{k}}} \quad (4.6)$$

- Função sigmoidal tangente hiperbólica: ilustrada na Figura 5(d). A saída no neurônio é dada pela Equação 4.7

$$\varphi(v) = \frac{1 - e^{-2v}}{1 + e^{-2v}} \quad (4.7)$$

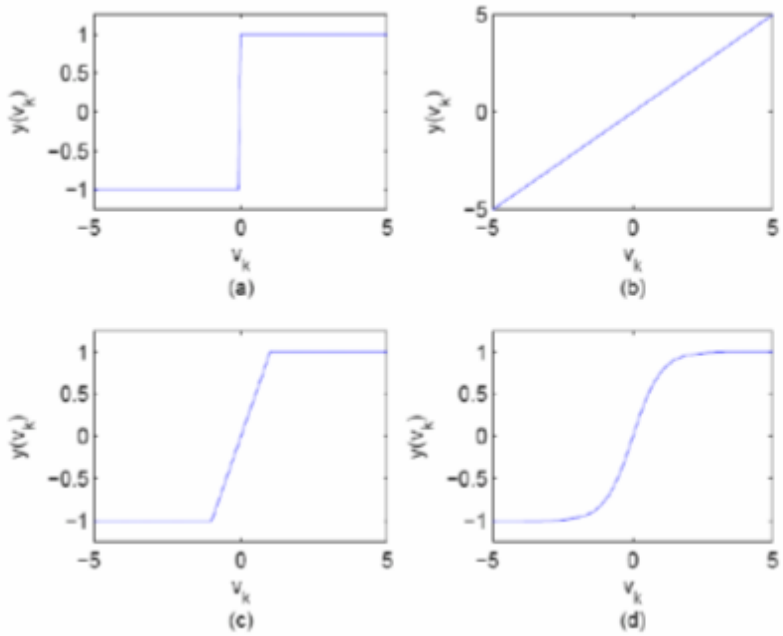


Figura 5: Funções de ativação: (a) Função limiar, (b) Função linear, (c) Função Linear por partes, (d) Função Sigmoidal tangente hiperbólica. Teixeira (2005)

Gama (2006) afirmou que a função de ativação sigmoidal é a mais utilizada em RNAs do tipo MLP (Multilayer Perceptron) pois é a que mais se aproxima de um neurônio biológico. Segundo Haykin (2001) a arquitetura é uma maneira pela qual os neurônios de uma RNA estão estruturados e a definição da arquitetura é de grande importância na sua concepção, uma vez que ela restringe o tipo de problema que pode ser tratado pela RNA. Podem-se identificar três tipos de arquitetura: redes alimentadas adiante (feedforward) de uma única camada; redes alimentadas adiante de múltiplas camadas (Multilayer Feedforward Networks) e redes recorrentes.

Redes com uma única camada de nós só conseguem resolver problemas linearmente separáveis. Redes recorrentes, por sua vez, são mais apropriadas para resolver problemas que envolvem processamento temporal. Fazem parte da definição da arquitetura os seguintes parâmetros: número de camadas da rede, número de nós da camada escondida, tipo de conexão entre os nós e a topologia da rede (Figura 5).

As RNAs de uma única camada possuem uma camada de entrada contendo nós fonte e uma única camada de saída, com nós computacionais. A camada de entrada não é considerada no número de camadas pelo fato dos neurônios de entradas serem especiais, cuja função é distribuir cada uma das entradas da rede (sem modificá-las) a todos os neurônios da camada seguinte.

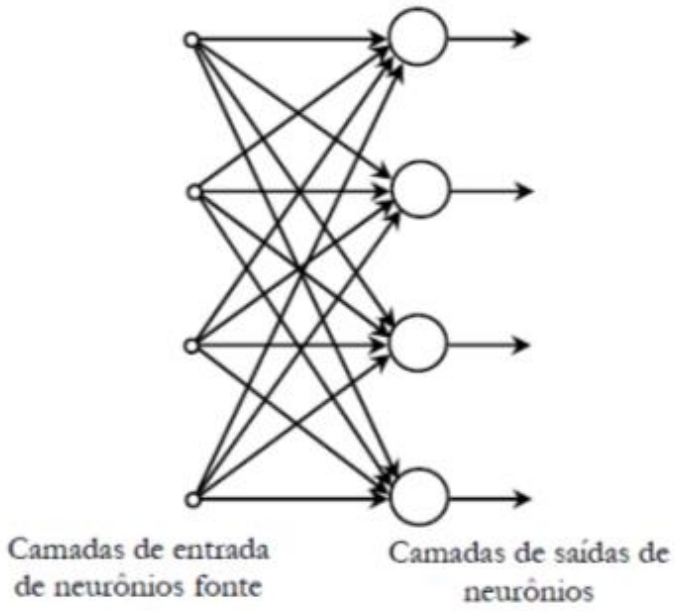


Figura 5: Rede alimentada adiante com uma única camada de neurônios, Haykin (2001)

As RNAs alimentadas adiante de múltiplas camadas diferem-se pela presença de uma ou mais camadas intermediárias. A função dos neurônios da camada escondida é extrair as estatísticas de ordem elevada (HAYKIN, 2001) (Figura 6). Uma RNA é dita totalmente conectada quando cada um dos nós de uma camada da rede está conectado a todos os nós da camada adjacente seguinte. Entretanto, se alguns dos elos de comunicação (conexões sinápticas) estiverem faltando na rede, pode-se dizer que ela está parcialmente conectada. A Figura 6 mostra um exemplo de RNA alimentada adiante, com duas camadas totalmente conectadas. As RNAs alimentadas adiante com múltiplas camadas (Multilayer Feedforward Networks) comumente denominadas de MLP (Multilayer Perceptron), são as redes mais difundidas na literatura (Figura 6).

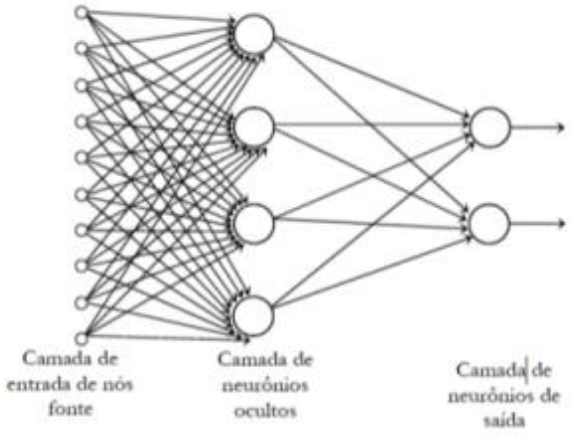


Figura 6: Rede alimentada adiante totalmente conectada com uma camada oculta Haykin (2001)

O projeto de uma RNA passa pelas seguintes etapas (Haykin, 2001): seleção da arquitetura com definição da quantidade de nós de entrada, nós escondidos e nós de saída; treinamento da RNA a partir de um conjunto de dados do processo; e validação da rede treinada a partir da avaliação das respostas da rede mediante a apresentação de dados não utilizados durante o treinamento, ou seja, avaliação de sua capacidade de generalização. As propriedades de uma RNA de fundamental importância são: a habilidade de aprender a partir de seu ambiente e a habilidade de melhorar o seu desempenho através da aprendizagem.

Uma rede neural aprende acerca de seu ambiente através de um processo iterativo de ajustes aplicados a seus pesos sinápticos e níveis de bias. Idealmente, a rede se torna mais instruída sobre o seu ambiente após cada iteração do processo de aprendizagem. Uma definição de aprendizagem no contexto das redes neurais foi expressa por Haykin (2001): “Aprendizagem é um processo pelo qual, os parâmetros livres de uma rede neural são adaptados através de um processo de estimulação pelo ambiente no qual a rede está inserida. O tipo de aprendizagem é determinado pela maneira pela qual a modificação dos parâmetros ocorre”. Esta definição do processo de aprendizagem implica na seqüência de eventos: a rede neural é estimulada pelo ambiente; a rede neural sofre modificações nos seus parâmetros livres como resultado desta estimulação; e a rede neural responde de uma maneira nova ao ambiente, devido às modificações ocorridas na sua estrutura interna.

De acordo com Braga et al. (2000) diversos métodos desenvolvidos para treinamento de RNAs podem ser agrupados em dois paradigmas principais: aprendizado supervisionado e aprendizado não supervisionado. O mais comum é o aprendizado supervisionado, onde as entradas e saídas desejadas para a rede são fornecidas por um supervisor (professor) externo. O objetivo é ajustar os parâmetros da rede de forma a encontrar uma ligação entre os pares de entrada e saída. Os exemplos mais conhecidos de algoritmos para aprendizado supervisionado são: a regra delta proposta por Wildrow & Hoff (1960) e a sua generalização para redes de múltiplas camadas, o algoritmo *backpropagation* desenvolvido por Rumelhart *et al.* (1986).

A rede tem sua saída calculada comparada com a saída desejada, sendo então calculado o erro da resposta atual. A cada padrão de entrada submetido à rede, compara-se a resposta desejada com a resposta calculada ajustando-se os pesos das conexões para minimizar o erro. A minimização da diferença é incremental já que pequenos ajustes são feitos nos pesos a cada etapa de treinamento de tal forma que estes caminhem para uma solução, se houver. A soma dos erros quadráticos de todas as saídas é normalmente utilizada como medida de desempenho da rede e também como função de custo a ser minimizada pelo algoritmo de treinamento.

O algoritmo back-propagation é o mais utilizado no treinamento de RNA de multicamadas do tipo MLP com uma ou mais camadas escondidas. Este algoritmo foi proposto por Rumelhart et al. (1986) e citado por Haykin (2001). Ele utiliza pares de entrada/saída desejada para ajustar os pesos da RNA, por meio de um mecanismo de correção de erro.

O treinamento através do algoritmo back-propagation ocorre de duas formas:

- **fase de propagação:** é utilizada para definir a saída da rede para um dado padrão de entrada, mantendo os pesos sinapticos fixos. O fluxo segue no sentido entrada/saída;
- **fase de retropropagação:** esta fase utiliza a saída desejada e a saída calculada pela RNA na fase de propagação, para ajustes dos pesos das conexões da rede. O fluxo de sinal de erro é inverso ao fluxo na fase de propagação.

O cálculo dos ajustes dos pesos pelo algoritmo de retropropagação do erro é dado pelas seguintes relações:

1. Cálculo da correção dos pesos, pela regra delta proposta por WILDROW e HOFF (1960) é mostrada na Equação 4.10.

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta \delta_i(n) y_i(n) \quad (4.10)$$

Sendo:

$\Delta w_{ji}(n)$ Correção no peso do neurônio *j* na iteração n;

η Taxa de aprendizagem;

$\delta_i(n)$ Gradiente local do neurônio *j* na iteração *n*;

$y_i(n)$ Sinal de entrada i do neurônio *j* na iteração *n*;

2. Cálculo do gradiente local, Equação 4.11:

- para um neurônio *j* na camada de saída;

$$\delta_j(n) = e_j(n)\varphi(v_j(n)) \quad (4.11)$$

Sendo $e_j(n)$ o erro entre a entrada e saída do neurônio *j* e a saída desejada da iteração *n*, $\varphi(v_j(n))$ é a derivada da função de ativação do neurônio *j* em relação à saída linear do neurônio, $v_j(n)$, na iteração *n*.

- para um neurônio j na camada intermediária, Equação 4.12;

$$\delta_j(n) = \varphi(v_j(n)) \sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n) \quad (4.12)$$

Sendo $\varphi(v_j(n))$ a derivada da função de ativação do neurônio *j* em relação à saída linear do neurônio na iteração *n* e $\sum_k \delta_k(n) w_{kj}(n)$ é a soma ponderada dos gradientes locais da camada seguinte na iteração *n*.

Como aparece o termo $\varphi(v_j(n))$ nas Equações 4.11 e 4.12 do cálculo do gradiente local, isso significa que as funções de ativação utilizadas em uma RNA do tipo MLP devem ser diferenciáveis.

O cálculo do δ (gradiente local) para cada neurônio do perceptron de múltiplas camadas requer o conhecimento da função de ativação $\varphi(\cdot)$ associada aquele neurônio. Para que haja esta derivação necessita-se que a $\varphi(\cdot)$ função seja contínua (HAYKIN, 2001, p.195). Em termos básicos, a diferenciabilidade é uma única exigência que a função de ativação deve

satisfazer. Um exemplo de uma função de ativação não-linear, continuamente diferenciável normalmente utilizada nos perceptrons de múltiplas camadas é a não-linearidade sigmóide; descreve-se duas formas desta função:

- função logística;
- função tangente hiperbólica.

O algoritmo *back-propagation* fornece uma "aproximação" para a trajetória no espaço de pesos calculada pelo método da descida mais íngreme. Quanto menor for o parâmetro da taxa de aprendizagem *η*, menor serão as variações dos pesos sinápticos da rede, de uma iteração para a outra e mais suave será a trajetória no espaço de pesos (HAYKIN, 2001, p.196). Por outro lado, se fizermos o parâmetro da taxa de aprendizagem *η* muito grande para acelerar a taxa de aprendizagem, as grandes alterações nos pesos sinápticos resultantes podem tornar a rede instável (oscilatória).

Um método simples para aumentar a taxa de aprendizagem, evitando o perigo da instabilidade, é alterar a "regra delta generalizada" mostrada na Equação 4.13, incluindo um termo de momento como mostrado por Rumelhart *et al.* (1986):

$$\Delta w_{ji}(n) = \alpha \Delta w_{ji}(\mathbf{n-1}) + \eta \delta_j(\mathbf{n}) y_i(\mathbf{n}) \qquad (4.13)$$

Sendo α um número positivo chamado de constante de momento, ele controla o laço de realimentação que age em torno de $\Delta w_{ji}(n)$.

A equação 4.13 é chamada de regra delta generalizada.

É chamado de época a apresentação de todos os padrões do conjunto de treinamento à rede. De acordo com Haykin (2001), para um dado conjunto de treinamento, o algoritmo *back-propagation* pode ser executado de dois modos distintos.

- modo seqüencial que é também de modo *on-line*, no qual o ajuste de pesos é realizado após a apresentação de cada padrão à rede. Neste modo, considerando um conjunto de treinamento com *m* padrões, ao final de uma época terão sido realizados *m* ajustes nos pesos;
- modo por lote ou batelada que é também chamado modo *batch*, no qual o ajuste de pesos é realizado após a apresentação de todos os padrões à rede. Ainda considerando um conjunto de

treinamento com *m* padrões, ao final de uma época será realizado apenas um ajuste nos pesos, porém este ajuste considera os erros obtidos em todos os padrões.

Haykin (2001) descreve que não existe critérios de parada bem formalizados para o algoritmo back-propagation, mas sim, critérios de parada razoáveis do ponto de vista prático e que são normalmente empregados. Alguns dos critérios são:

- pelo valor da norma euclidiana do vetor gradiente: o algoritmo converge quando a norma euclidiana do vetor gradiente atinge um limiar especificado;
- pelo valor da taxa de variação do erro médio quadrático: o algoritmo converge quando a taxa de variação do erro médio quadrático por época for suficientemente pequena;
- pela capacidade de generalização da rede: neste caso deve ser usado um conjunto de padrões, segregado do conjunto total de padrões, para validação.

As redes neurais de uma só camada resolvem apenas problemas linearmente separáveis. A solução de problemas não linearmente separáveis passa pelo uso de redes com uma ou mais camadas intermediárias, ou escondidas. Segundo Cybenko (1989) uma rede com uma camada intermediária pode implementar qualquer função contínua. A utilização de duas camadas intermediárias permite a aproximação de qualquer função.

As redes com múltiplas camadas são conhecidas como MLPs (*Multilayer Perceptron*) e apresentam um poder computacional muito maior do que aquele de uma rede sem camada intermediária. A precisão obtida e a implementação da função objetivo dependem do número de nós utilizados nas camadas intermediárias (Figura 7).

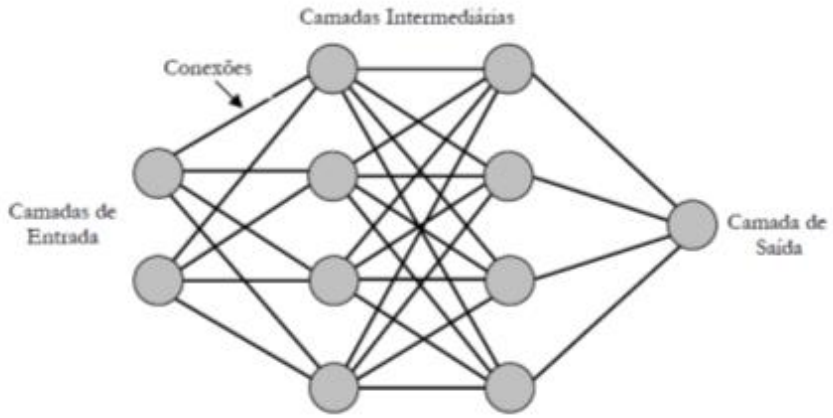


Figura 7 - Rede MLP típica com duas camadas intermediárias, Haykin, 2001

Em uma rede MLP o processamento realizado por cada nó é definido pela combinação dos processamentos realizados pelos nodos da camada anterior que estão conectados a ele. Quando se segue da primeira camada intermediária em direção a camada de saída, as funções implementadas se tornam cada vez mais complexas (FIGUEIRÊDO, 2006, p.72). O número de nós nas camadas intermediárias é em geral definido empiricamente. Este número depende fortemente da distribuição dos padrões de treinamento e validação da rede. De acordo com Braga *et al.* (2000) o número de neurônios na camada intermediária depende dos fatores: número de amostras de treinamento; quantidade de ruído presente nos exemplos; complexidade da função a ser aprendida; e distribuição estatística dos dados de treinamento.

Existem problemas que necessitam apenas de uma unidade de entrada e de uma unidade de saída, e outros que podem precisar de várias unidades intermediárias. O número de unidades intermediárias pode também, em alguns casos, crescer exponencialmente com o número de entradas. A solução neural mais eficiente é aquela em que o número de unidades cresce apenas

Capacidade de generalização em RNA é a capacidade desta, devidamente treinada, responder coerentemente a padrões desconhecidos. Ao termo “padrões desconhecidos” fica subentendido que seja um conjunto de padrões extraído da mesma população dos conjuntos de dados de treinamento, ou seja, dados com mesmas características estatísticas dos padrões de treinamento.

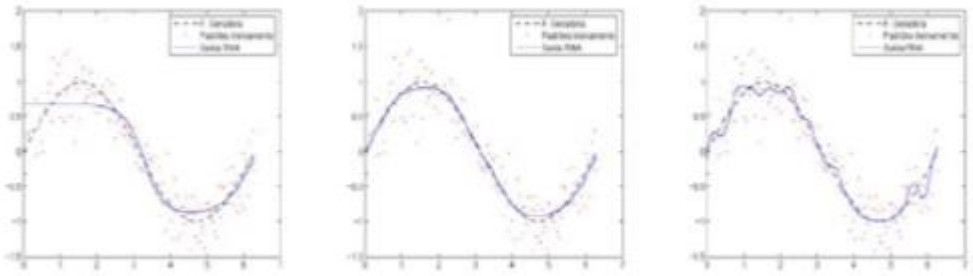
Segundo Teixeira (2001) a capacidade de generalização não é uma propriedade inerente às RNAs, ou seja, ela não é facilmente obtida

simplesmente submetendo a rede à fase de treinamento. Braga *et al.* (2000) descrevem que alguns fatores devem ser levados em consideração para se obter uma RNA com elevada capacidade de generalização e basicamente esta generalização sofre a influências: do tamanho e representatividade estatística do conjunto de dados de treinamento; da arquitetura da rede neural; e da complexidade física do problema abordado. Não existe uma regra para escolher o tamanho do conjunto de treinamento. Cada problema abordado requer uma quantidade de amostras capaz de representá-lo. Este parâmetro não é de simples estimativa dado que o domínio do problema nem sempre é conhecido a *priori*.

A escolha da arquitetura do modelo neural adequada à complexidade do problema é um dos maiores desafios no estudo da capacidade de generalização. Modelos com arquiteturas muito grandes elevam sua complexidade. Quando a complexidade do modelo é maior que a necessária para modelar o problema, a rede tende a ficar super-ajustada aos dados de treinamento, respondendo inadequadamente aos padrões de validação e testes.

Este fenômeno de super-ajuste do modelo aos dados de treinamento é comumente chamado de *overfitting* e, reduz a capacidade de um modelo generalizar. Porém, se a complexidade do problema supera a complexidade do modelo, este não é capaz de descrever e representar o domínio do problema, caracterizando assim o fenômeno de sub-ajuste ou *underfitting*. A Figura 8 ilustra o que pode ocorrer com o erro de generalização quando sob os efeitos de sub ajuste e super ajuste aos dados e treinamento. Nas Figuras 8a,b,c, a função geradora é uma senóide que varia de 0 a 2π que foi contaminada por um ruído de média 0 e desvio padrão 1. Apenas os pontos nas figuras foram submetidos às RNA para treinamento.

A Figura 8(a) mostra uma RNA que não foi capaz de modelar toda a complexidade do problema, gerando um modelo neural pobre em termos de generalização. Já na Figura 8(c) o modelo neural criado superou a complexidade da função geradora, passando a modelar o ruído presente nos dados, ficando também mal ajustado à função geradora. Apenas na Figura 8(b) o ajuste do modelo está compatível com a complexidade do problema e nota-se que a RNA buscou modelar a função geradora.



(8a) Underfitting *(8b) Ajuste Adequado* *(8c) Overerfitting*

Figura 8 - Problema de ajuste do modelo – (HAYKIN, 2001)

Braga *et al.* (2000), Teixeira (2001) e Takahashi (2006), afirmam que os fenômenos de *underfitting* e *overfitting* afetam a capacidade de generalização das RNA e buscar um equilíbrio pode ser uma tarefa árdua. Esses fenômenos sofrem influências pelo tamanho do conjunto de treinamento, pelo número de épocas de treinamento, e também pelo número de parâmetros livres (pesos) da RNA. De acordo com Haykin (2001) uma RNA que é projetada para generalizar bem, produzirá um mapeamento correto de entrada - saída mesmo quando as entradas forem um pouco diferentes dos exemplos utilizados para o treinamento da rede. Se uma rede é treinada em excesso, ela perde a habilidade de generalizar entre padrões de entrada – saída similares.

O método de treinamento com parada antecipada (*Early Stopping*) é uma técnica de treinamento baseada na divisão dos padrões em pelo menos dois conjuntos distintos de dados, mas com mesma representatividade estatística. Estes conjuntos são chamados normalmente de conjuntos de treinamento e de validação que após um período de estimação (treinamento) os pesos sinápticos e os níveis dos *bias*, do *perceptron* de múltiplas camadas são todos fixos e a rede opera no seu modo direto para frente. O erro de validação é então medido por cada exemplo do subconjunto de validação. Quando a fase de validação é completada, a estimação (treinamento) é reiniciada para um novo período e o processo é repetido.

O erro de treinamento deve ser monotonicamente decrescente a partir do início do treinamento, que deve ser interrompido no momento que este erro começa a crescer com os padrões de validação, embora o erro de treinamento ainda seja decrescente (TAKAHASHI, 2006, p.27). Esta sintonia indica que o

treinamento está levando a rede a uma condição de sobre ajuste e para evitá-lo o treinamento é interrompido e os parâmetros da RNA na época anterior são considerados como os parâmetros finais obtidos com o treinamento.

A Figura 5.10 mostra o comportamento dos erros de treinamento e de validação com dados ruidosos. Teixeira (2006) comenta que o processo de treinamento pode ser dividido em duas partes. Na primeira parte, caracterizada pelo início do treinamento até o ponto de mínimo da curva erro de validação, a rede se adapta somente às características principais dos dados, ou seja, aprende a função geradora. Na segunda parte, na medida em que o treinamento prossegue o ruído também começa a ser mapeado pela rede.

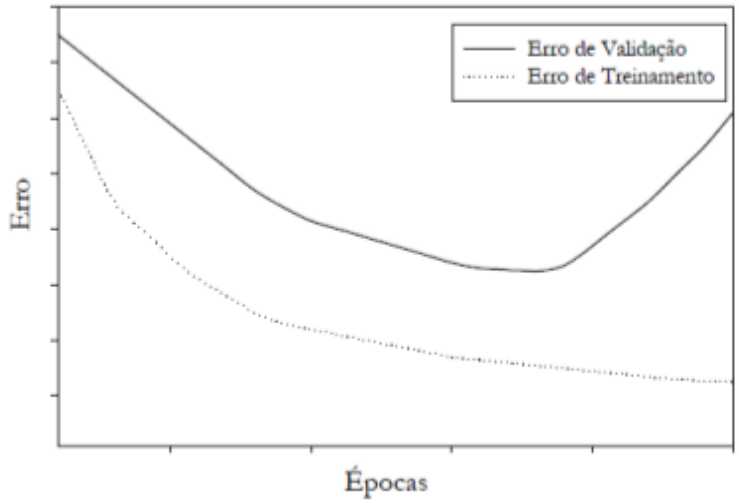


Figura 9 - Comportamento dos erros de treinamento e validação para uma RNA – (HAYKIN, 2001, p.243)

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1. Material

Os dados constantes deste estudo são provenientes do banco de dados (PIMS – Process Information Management System) da Veracel Celulose e foram obtidos com base em média diária. Alguns dados são provenientes de análises laboratoriais e outros de medidores online instalados em diversos pontos do processo. Os dados obtidos por análise de laboratório apresentam freqüência de amostragem muito inferior, obviamente, àqueles obtidos por medidores online, e geralmente tem a finalidade de monitoramento do processo. Os dados dos medidores online também são utilizados para monitoramento e melhoria de processo, mas o foco principal é gerar informações para ajuste e controle de processo. Os medidores online são calibrados pelo laboratório utilizando-se de procedimentos padrões.

A freqüência de análise dos parâmetros gerados e que foram disponibilizados para este estudo:

- Granulometria dos cavacos pós peneira – 3x dia
- Teor seco dos cavacos – 6x dia
- Teor de casca nos cavacos – 1x dia
- Densidade aparente dos cavacos – 6x dia
- Densidade básica dos cavacos – 3x dia
- Viscosidade da polpa da descarga do digestor – 1x dia
- Número kappa polpa da descarga do digestor – medidor online (cerca de 12 minutos por análise)
- Produção do digestor – calculado com base na velocidade da rosca que alimenta os cavacos
- Carga alcalina – definida para manter o número kappa objetivo de 18 a 18,5
- Sulfidez – medidor online (cerca de 10 minutos por análise)

Para minimizar que dados provenientes de condições instáveis de processo interferissem nas análises, os dados gerados para uma produção do digestor inferior a 3.000 ton foram excluídos da avaliação. Produções abaixo deste valor ocorrem somente quando há distúrbios no processo e não refletem a realidade. Além disso, os medidores online ficam sem referência e apresentam valores totalmente fora de controle.

Já os dados referente à madeira utilizada no abastecimento da fábrica, as informações foram geradas a partir do Sistema de Gestão Florestal – SGF, sistema em que são registradas as entradas e movimentações da madeira na fábrica antes da preparação do cavaco.

As informações utilizadas da madeira são densidade básica, idade e precipitação. A densidade é determinada antes de se realizar a colheita através de coleta de material pelo método destrutivo e em seguida analisado em laboratório. A idade é determinada quando se realiza o corte da floresta, tendo como base o Cadastro Florestal da empresa onde se tem os registros de plantio das áreas (data de plantio, material genético, etc). A precipitação é a quantidade de chuva esperada na região com base em dados históricos. Com base nestes dados são definidas as isoietas, que são linhas que ligam pontos de mesma precipitação, gerando assim os valores de precipitação para cada área de plantio, talhão, que são registrados no Cadastro Florestal da empresa. Na região de atuação da Veracel, a quantidade e distribuição anual das precipitações diminuem do litoral para o interior, ou seja, no sentido Leste/Oeste.

Para manter o banco de dados, industrial e florestal, na mesma base temporal, aos dados de abastecimento de madeira proveniente do SGF foi acrescido 2 dias, que se refere ao período de retenção da pilha de cavacos.

Utilizou-se neste estudo uma base de dados em escala industrial, cujo período foi de janeiro de 2006 a março de 2010, totalizando 1.537 observações.

3.2. Métodos

Os modelos foram ajustados utilizando o software R (R DEVELOPMENT CORE TEAM, 2010), através da biblioteca “mgcv” (WOOD, 2006), específica para ajustes de modelos aditivos generalizados.

As associações entre as variáveis estudadas foram representadas através de gráficos, em que a linha sólida representa os valores ajustados pelo modelo e as linhas pontilhadas representam o erro padrão, referentes aos valores ajustados, que pode ser interpretado como “intervalo de confiança”. As barras verticais presentes acima do eixo das abscissas representam os valores observados e sua dispersão ao longo da curva ajustada.

Foram aplicados testes de significância para cada modelo ajustado (Tabelas). Resultados significativos (p-valor*100 <= nível de significância adotado) indicam que existe associação significativa entre as variáveis estudadas, quanto menor o valor do p-valor, maior é a intensidade da associação. Em cada tabela existe a informação do grau de liberdade correspondente ao termo alisado, quanto menor é o grau de liberdade de alisamento mais próximo de linear é a associação entre as variáveis, sendo que os G.l. não podem assumir valores menores que 1, e quando este valor é exatamente 1, significa que existe associação linear simples entre as variáveis. Por exemplo, um valor de p-valor = 0,0050 significa uma associação significativa em nível de 0,5% de probabilidade.

Também foram confeccionados gráficos de superfície, em que as variáveis preditoras estão representadas nos eixos cartesianos do gráfico (ex: Carga Alcalina e Sulfidez) e as linhas de níveis representam a variável resposta (ex: Produção do Digestor). Quanto mais claro é o local no gráfico, maior é a grandeza da variável resposta.

De forma complementar os dados foram analisados por meio de redes neurais artificiais. A variável produção do digestor foi agrupada em classes com amplitude de 50 toneladas permitindo avaliar as correlações com as variáveis densidade da madeira, precipitação, teor seco de cavacos, densidade dos cavacos e Kappa. Da mesma forma, a carga alcalina foi agrupada em classes com amplitude de 0,3. Foram ajustadas 100 RNA para relacionar a produção do digestor e a carga alcalina, com as variáveis: densidade da madeira, idade,

precipitação, teor seco dos cavacos, densidade aparente dos cavacos, densidade básica dos cavacos, viscosidade da polpa e kappa. Nesta etapa do trabalho foi empregado o software Statistica (Statsoft, INC, 2007).

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

O desempenho da polpação Kraft e a qualidade das polpas resultantes são influenciados por variáveis associadas com a matéria-prima e com o processo de polpação (FENGEL e WENEGER, 1989; D'ALMEIDA, 1988).

Lanna et al., (2001) citado por Gomide et al., (2005) realizaram estudos com madeiras de clones de Eucalyptus e constataram algumas vantagens na utilização de madeiras com menor densidade. Essas vantagens corresponderiam à necessidade de utilização de menores cargas alcalinas com reflexos no rendimento e viscosidade da polpa celulósica. Entretanto Mokfienski et al. (2003), citado por Gomide et al. (2005), não encontraram correlações bem definidas entre densidade da madeira e a demanda por cargas alcalinas ou rendimento do processo. No presente trabalho a relação entre cargas alcalinas e densidade da madeira foi não-significativa (P>0,05), ou seja, não foram evidenciadas associações bem definidas, assim como Mokfienski et al., (2003). Este fato indica que o aumento ou a diminuição da densidade básica da madeira não permite qualquer inferência sobre a carga alcalina usando modelos aditivos generalizados.

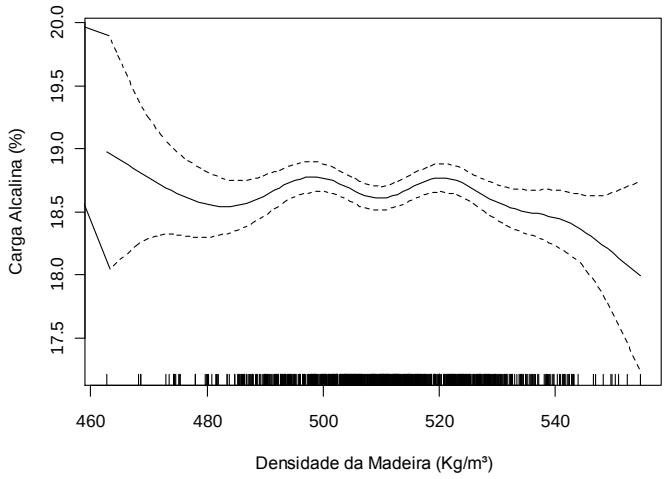


Figura 10: Curva Alisada da Carga Alcalina em função da Densidade da Madeira.

TABELA 1: Teste de Significância para Curva Alisada da Carga Alcalina em função da Densidade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	6,7
F	1,93
p-valor	0,053[ns]

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

[ns]Não-Significativo (P > 0,05).

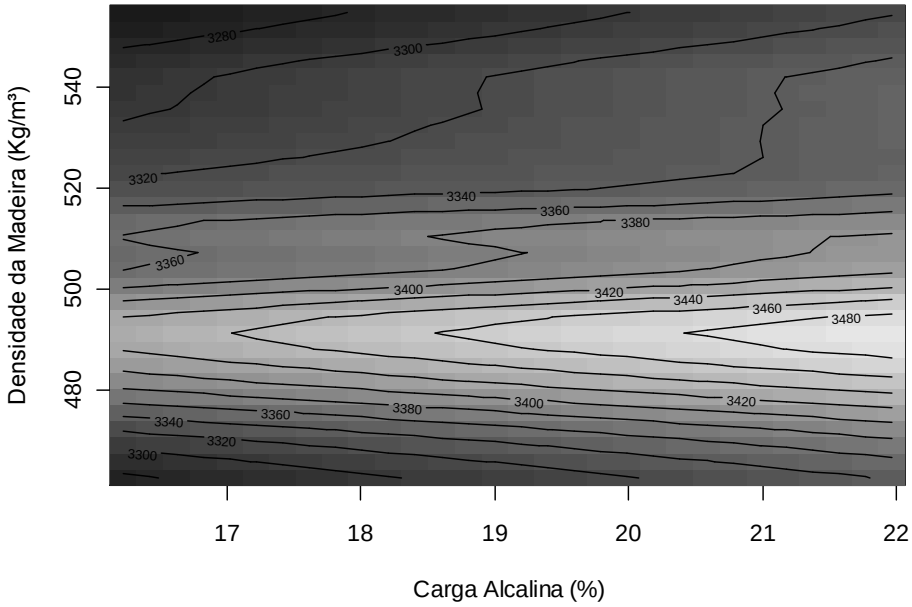


Figura 11: Produção do Digestor em Função da densidade da Madeira e Carga Alcalina.

Usando Redes Neurais Artificiais, pode-se constatar a correlação entre carga alcalina e densidade da madeira. Para isso a variável carga alcalina foi agrupada em classes com diversas amplitudes sendo que a amplitude de 0,3 permitiu verificar as seguintes correlações:

- **Densidade da madeira: -0,52**
- Idade: -0,20
- Precipitação: -0,36
- Teor seco dos cavacos: 0,17
- Densidade aparente dos cavacos: 0,25
- **Densidade básica dos cavacos: -0,54**
- Viscosidade da polpa: 0,05
- Kappa: 0,23

Ajustou-se RNAs (100) para estimar a carga alcalina (em classe de amplitude de 0,3) em função das variáveis (média na classe): densidade da madeira e densidade básica de cavacos (obs.: foram feitos vários testes com as demais variáveis, porém nenhum obteve resultado satisfatório). As melhores redes foram MLP 2:2-7-1:1 com r = 0,67 e MLP 2:2-5-1:1 com r = 0,68:

A Figura 12 evidencia a curva de tendência de validação da melhor rede obtida. Através dos gráficos da Figura 12 pode-se observar uma boa capacidade de resposta dos modelos treinados, pois os valores estimados pela RNA acompanham a tendência dos valores reais da variável Carga Alcalina medidos no processo.

Uma correlação linear de 0,67 da carga alcalina com a densidade da madeira pode ser observada no gráfico RNA1, quando comparadas à Carga Alcalina estimada e observada é evidenciado ainda os resíduos durante esta etapa de validação do modelo.

Avaliando a carga alcalina com a densidade básica do cavaco, têm-se uma correlação de 0,68, demonstrada no gráfico RNA2 da figura 12.

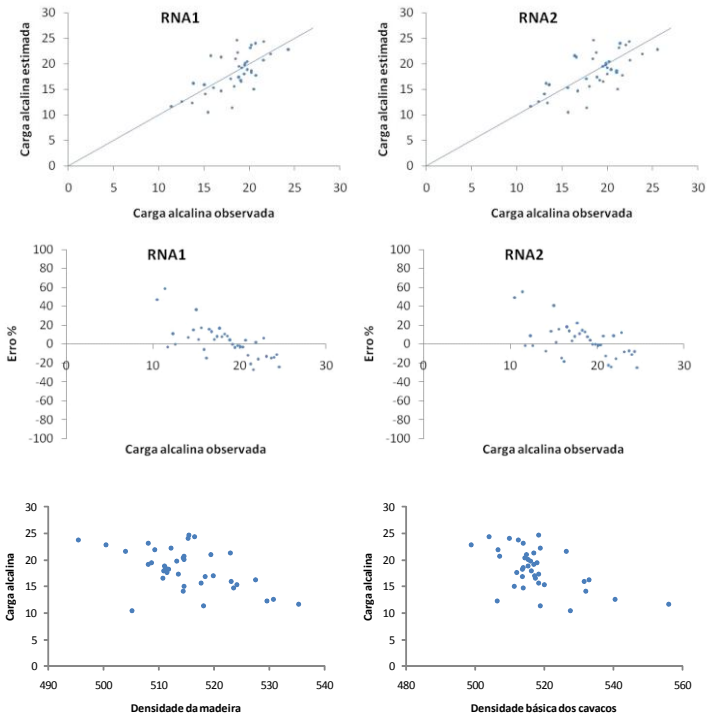


Figura 12: Carga Alcalina em função da Densidade da Madeira e da Densidade Básica dos Cavacos.

Com relação à produção, a densidade manifesta efeitos bem característicos (Figura 13), sendo que densidades entre 490 e 530 Kg/m³ foram responsáveis por maior produção de polpa celulósica.

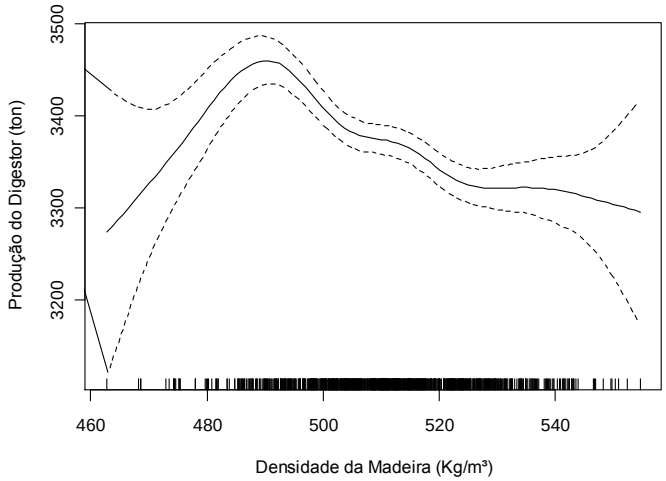


Figura 13: Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Densidade da Madeira.

TABELA 2: Teste de Significância para Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Densidade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	6,29
F	10,39
p-valor	2,75e-13***

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Considerando a possibilidade de cortes cada vez mais precoces, o efeito idade das madeiras na constituição química e nas variáveis do processo, bem como nas características finais da polpa branqueada, tornar-se uma variável de grande interesse para as indústrias do setor.

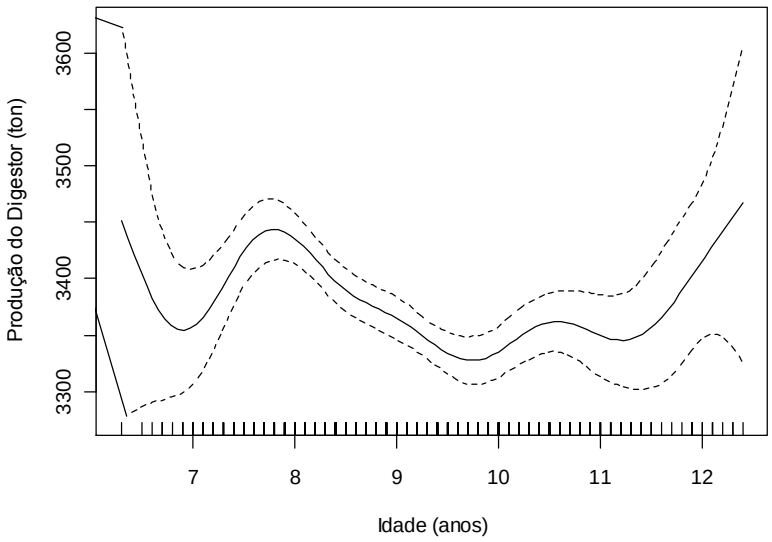


Figura 14: Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Idade.

TABELA 3: Teste de Significância para Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Densidade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Idade)[#]	7,96
F	5,96
p-valor	6,35e-08***

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Quando se analisa a produção em função da idade e da densidade da madeira (Figura 15), verifica-se que a densidade é mais limitante do que a idade. As faixas de maiores produções se encontram em uma classe restrita de densidade (480-500 Kg/m³), já para idade esse faixa é mais ampla, variando de 6 a 10 anos.

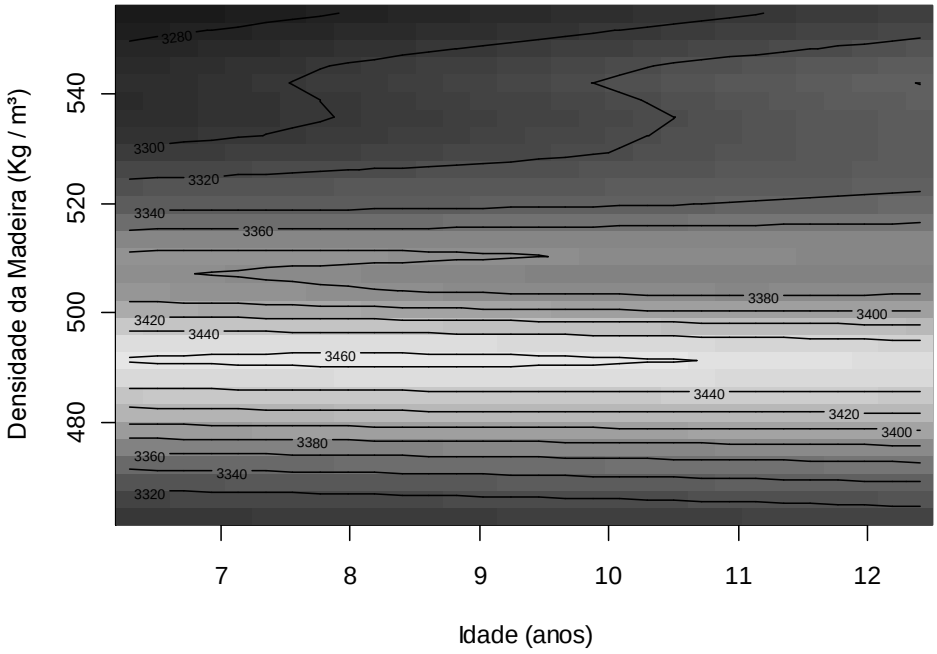


Figura 15: Produção do Digestor em função da Densidade Madeira e Idade da Madeira.

No período em avaliação, o abastecimento de madeira da fábrica ocorreu, em sua maioria, com madeiras cuja densidade básica estava no intervalo de 490-530 kg/m³sc (figura 16). Isso se deve ao fato de que havia estoque excedente de madeira e conseqüentemente a idade estava elevada, ou seja, entre 8-10 anos (figura 18). Vital et al. (1984) relataram que a densidade tende a aumentar com o aumento da idade das árvores, como conseqüência do aumento da espessura de parede celular e redução da largura das células.

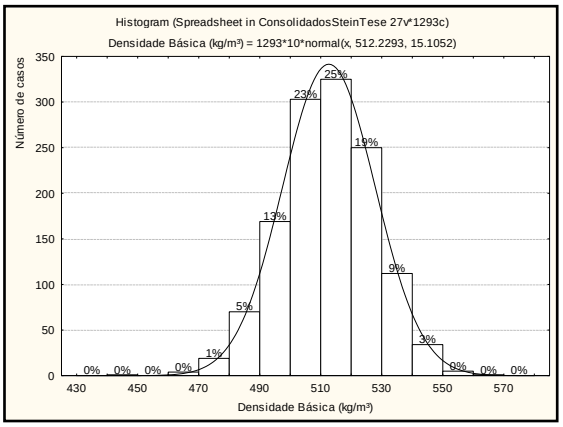


Figura 16: Gráfico de distribuição da densidade básica

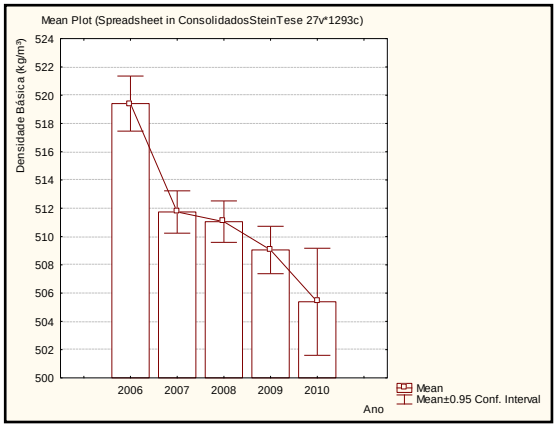


Figura 17: Gráfico de densidade básica por ano

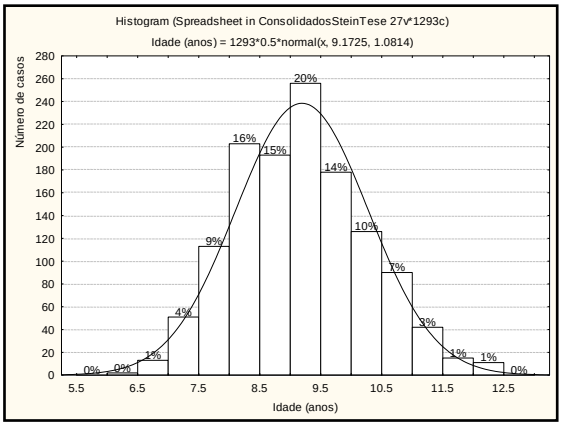


Figura 18: Gráfico de distribuição da idade da madeira

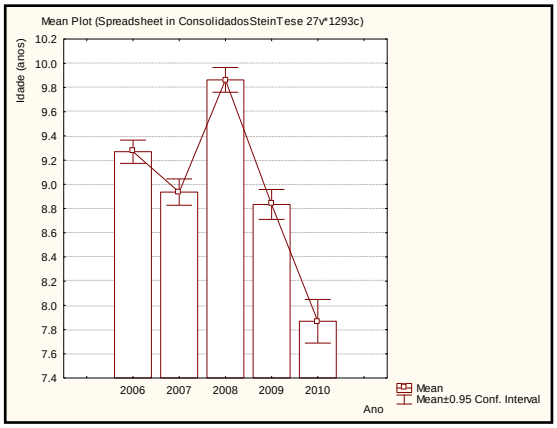


Figura 19: Gráfico de idade da madeira por ano

Para avaliar a aplicação de redes neurais artificiais na estimação da produção do digestor, esta variável foi agrupada em classes com diversas amplitudes. Com uma amplitude de 50 toneladas (função do Excel: ARREDMULTB(PRODUÇÃO;50)) foram obtidas as seguintes correlações:

- Densidade da madeira: -0,07
- Idade: -0,26
- Precipitação: 0,31
- Teor seco dos cavacos: -0,08
- **Densidade aparente dos cavacos: -0,70**
- Densidade básica dos cavacos: -0,05
- Viscosidade da polpa: 0,20
- **Kappa: 0,70**

Ajustou-se RNAs (100) para estimar a produção do digestor (em classe de amplitude de 50 toneladas) em função das variáveis (média na classe): densidade da madeira, idade, precipitação, teor seco dos cavacos, densidade aparente dos cavacos, densidade básica dos cavacos, viscosidade da polpa e kappa. A opção para otimizar a seleção das variáveis foi aplicada e as melhores redes (MLP 2-2-1 com r = 0,885 e MLP 2-2-1 com r = 0,883) selecionaram as variáveis: kappa e densidade aparente dos cavacos.

A Figura 20 evidencia a curva de tendência de validação da melhor rede obtida. Através dos gráficos da Figura 20 pode-se observar uma boa capacidade de resposta dos modelos treinados, pois os valores estimados pela RNA acompanham a tendência dos valores reais da variável Produção do Digestor medidos no processo.

Uma correlação linear de 0,885 da produção do digestor com o número kappa pode ser observada no gráfico RNA1. Quando comparadas às

produções estimadas e observadas, são evidenciados ainda os resíduos durante esta etapa de validação do modelo.

Avaliando a produção do digestor com a densidade aparente dos cavacos, obteve-se uma correlação de 0,883, demonstrada no gráfico RNA2 da figura 20.

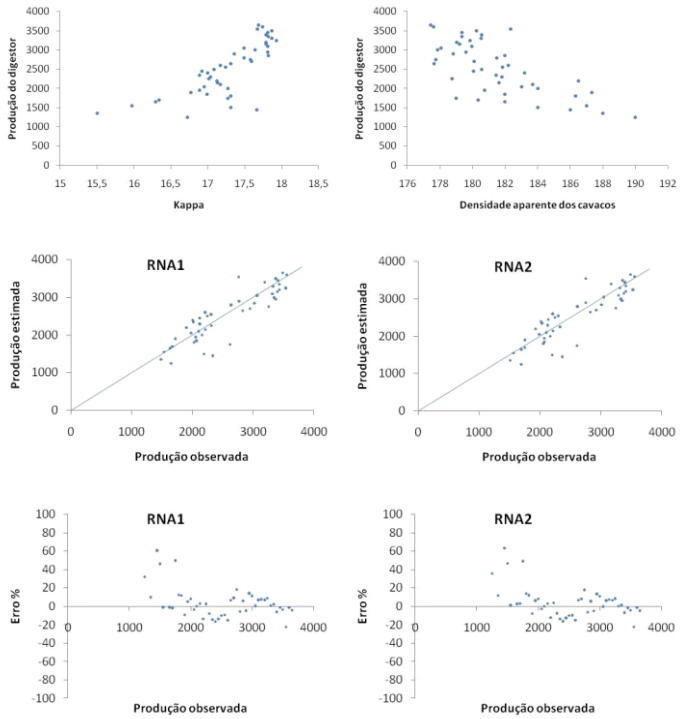


Figura 20: Produção do Digestor em função do Número Kappa e da Densidade Aparente dos Cavacos.

Vale ressaltar que a densidade aparente dos cavacos esta relacionada com o tamanho dos cavacos e com a densidade básica da madeira. Considerando que o tamanho do cavaco no processo é uniforme, a densidade básica da madeira tem influência direta nesta variável. Logo, para densidades aparentes maiores, devido aumento da densidade básica da madeira, se faz necessário ajustar o processo fabril para que não se tenha perda no processo de cozimento. Para isso há um aumento da carga alcalina para se manter o kappa objetivo. Não fazendo este ajuste, ocorrerá aumento do número kappa.

Para as relações densidade X viscosidade os resultados foram significativos, concordando com os resultados de Lanna et al., (2001), apesar da carga álcali ter sido não significativa (Tabela 1). O efeito da densidade sobre a viscosidade é linear, ou seja, quanto maior a densidade da madeira, maior é a viscosidade da polpa produzida (Figura 21).

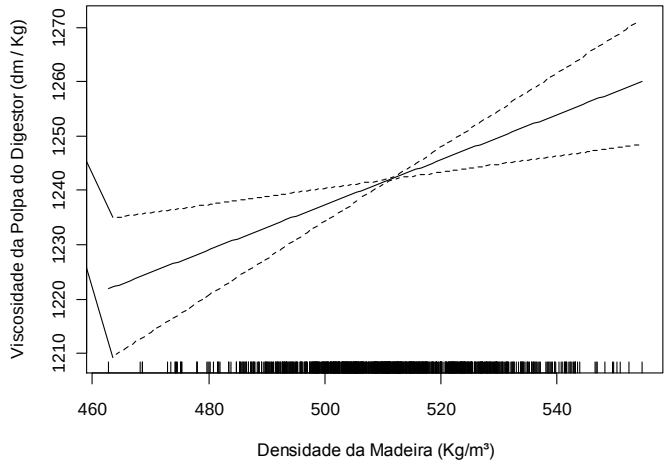


Figura 21: Curva Alisada da Viscosidade da Polpa do Digestor em função da Densidade da Madeira.

TABELA 4: Teste de Significância para Curva Alisada da Viscosidade da Polpa do Digestor em função da Densidade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	1
F	9,72
p-valor	0,0019**

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

** Significativo (P < 0,01).

Wehr (1991) observou que madeiras mais densa apresentam também maior teor de extrativos, maior teor de lignina e menor teor de hemiceluloses. Este mesmo autor descreveu ainda que madeira de maior densidade podem produzir cavacos com dimensões não uniformes e também dificultar a impregnação dos mesmos pelo licor de cozimento, levando ao incremento do consumo de reagentes químicos durante a polpação, aumentando o teor de rejeitos e reduzindo o rendimento do processo. Apesar disso, Shimoyama (1990) estudou E. grandis com 7 anos de idade e não constatou nenhuma relação entre densidade básica e composição química da madeira.

Garcia (1995) menciona que a densidade é resultado do conjunto de características anatômicas e químicas da madeira. Porém não está quantificado a influência individual desses parâmetros sobre a densidade da madeira, o que pode justificar os resultados obtidos em diferentes pesquisas.

Segundo Foelkel (1992), a densidade básica da madeira é importante para o processo de produção da polpa celulósica tendo em vista a influência que a mesma exerce sobre a quantidade de polpa produzida por unidade de volume de madeira consumido e, também, sobre a eficiência do processo de deslignificação.

A resposta da viscosidade da polpa celulósica em função da idade, pode ser observada na Figura 22. Maiores viscosidades foram alcançadas nas idades entre 8 e 10 anos. Deve-se atentar para a densidade maior nesta faixa de idade, pois isto resulta em mais celuloses e menos hemiceluloses, conferindo maior viscosidade à polpa.

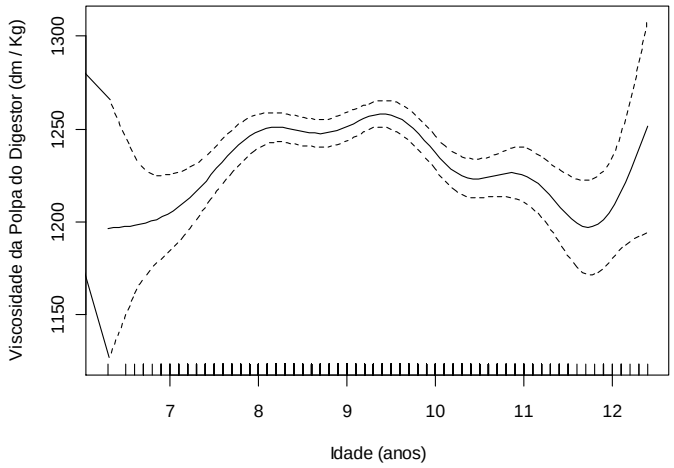


Figura 22: Curva Alisada da Viscosidade da Polpa do Digestor em função da idade da madeira.

TABELA 5: Teste de Significância para Curva Alisada da Viscosidade da Polpa do Digestor em função da Idade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Idade)[#]	8,14
F	6,84
p-valor	2,24e-09***

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Um maior valor de viscosidade indica maior preservação dos carboidratos e, conseqüentemente, melhores propriedades de resistência física, principalmente aquelas que dependem da ligação entre fibras.

Morais (2008) estudando o efeito da idade de dois clones de eucalipto no processo produtivo de celulose e no produto, encontrou uma boa correlação entre a quantidade de lignina e a idade das amostras para os dois clones estudados. O fato de o teor de lignina diminuir com a idade da madeira eram esperados, pois, segundo Trugilho et al. (1996), as espécies mais jovens tendem a possuir uma maior proporção de madeira juvenil, que é mais rica em lignina, do que a madeira madura.

Madeira com teor de lignina mais elevado requer condições mais drásticas de cozimento, propiciando maior degradação dos carboidratos, resultando em menor rendimento e sobrecarga na caldeira de recuperação, em razão da maior quantidade de sólidos dissolvidos no licor preto residual.

No presente ao avaliar a carga alcalina, associada à produção e viscosidade da polpa celulósica (Figuras 23 e 24), foram encontrados resultados semelhantes àqueles obtidos por Trugilho et al. (2004). Esses autores também verificaram que a carga alcalina apresenta efeito maior sobre a viscosidade do que sobre a produção de polpa. A relação entre carga alcalina, produção e viscosidade foi significativa (P<0,001), ou seja, apresentaram associações definidas, conforme tabelas 06 e 07.

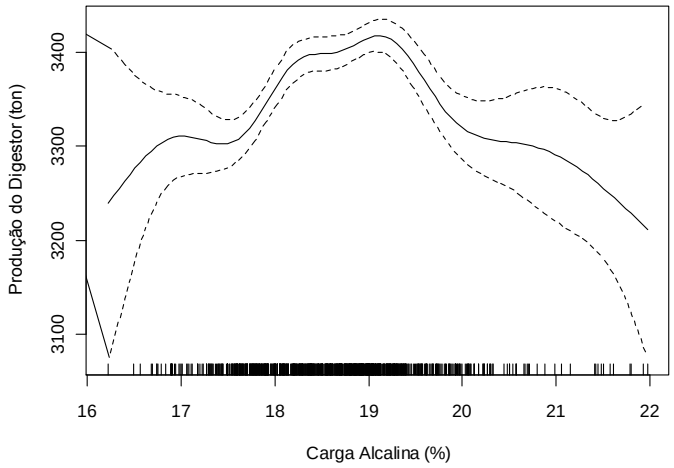


Figura 23: Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Carga Alcalina.

TABELA 6: Teste de Significância para Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Carga Alcalina.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Carga Alcalina)[#]	7,49
F	9,37
p-valor	4,93e-11***

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Ek et al. (2001) descreveram que o aumento da carga alcalina do cozimento proporciona redução significativa do rendimento total do processo de polpação. Segundo os autores a queda no rendimento acontece, no caso de madeira de folhosas, devido à degradação das xilanas, as quais são mais sensíveis ao aumento da carga alcalina, causando impactos negativos na seletividade do cozimento, a qual pode ser expressa pela relação viscosidade/número kappa ou rendimento/número kappa.

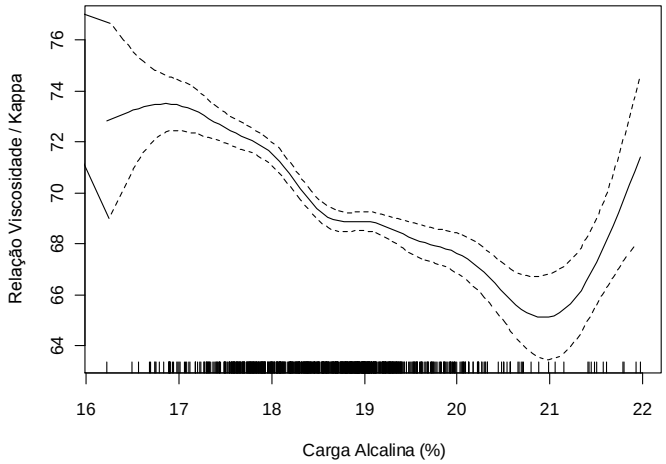


Figura 24: Curva Alisada da Relação Viscosidade/Kappa em função da Carga Alcalina.

TABELA 7: Teste de Significância para Curva Alisada da Viscosidade/Kappa em função da Carga Alcalina.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Carga Alcalina)[#]	7,957
F	29,14
p-valor	2e-16***

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

A diminuição da viscosidade com o aumento da carga alcalina ocorre porque maior carga alcalina causa uma degradação mais intensa dos carboidratos que constituem a parede das fibras celulósicas.

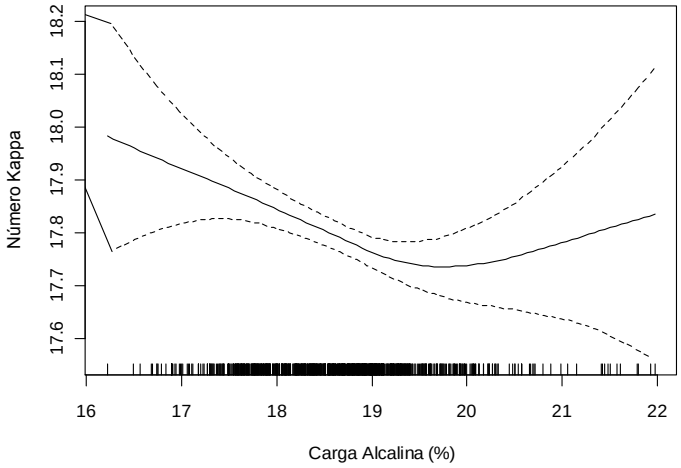


Figura 25: Curva Alisada do Kappa da polpa em função da Carga Alcalina.

TABELA 8: Teste de Significância para Curva Alisada do Número Kappa em função da Carga Alcalina.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Carga Alcalina)[#]	2,41
F	3,28
p-valor	0,019*

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

* Significativo (P < 0,05).

Almeida (2003) verificou que o aumento da carga alcalina proporciona aumento do nível de deslignificação e redução do número kappa. Porém não foi verificada redução do teor de lignina da polpa para carga alcalina aplicada, superior a 21% de álcali ativo. Esse valor é semelhante ao encontrado no presente trabalho, onde se observou inversão na curva a partir de 20% de carga alcalina. Na figura 26, pode-se verificar que para uma carga alcalina variando de 18 a 19,5%, e para um kappa variando 17 a 18,5, a produção diária da fábrica ficou em torno de 3.400 ton.

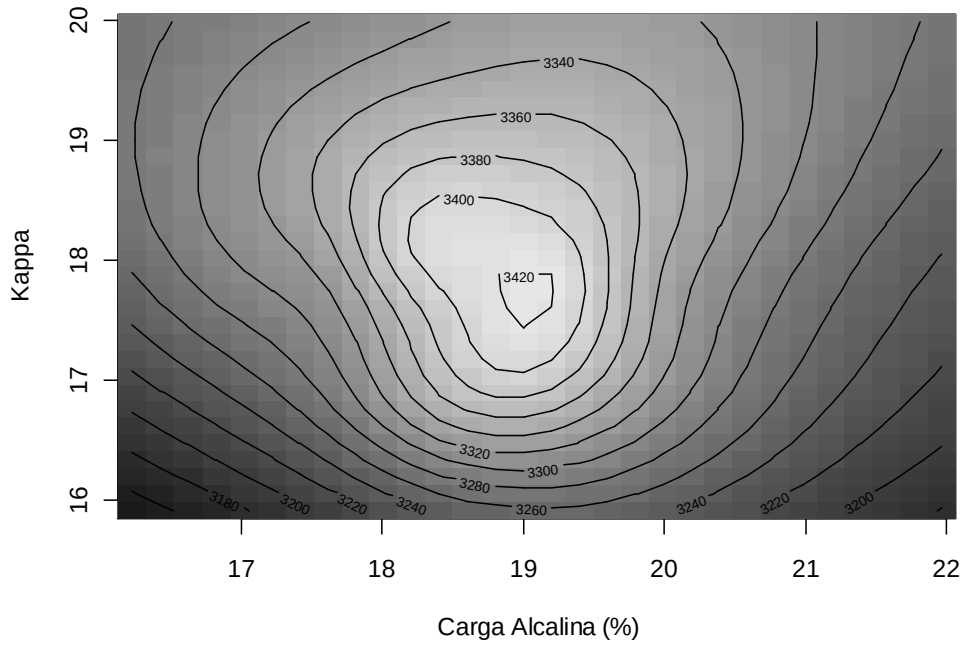


Figura 26: Produção do Digestor em função do Número Kappa e da Carga Alcalina.

Demanda de altas cargas de álcali constitui uma característica desfavorável, uma vez que provoca perda de rendimento, degradação mais intensa das cadeias dos carboidratos, sobrecarga da caldeira de recuperação e aumento do custo de produção.

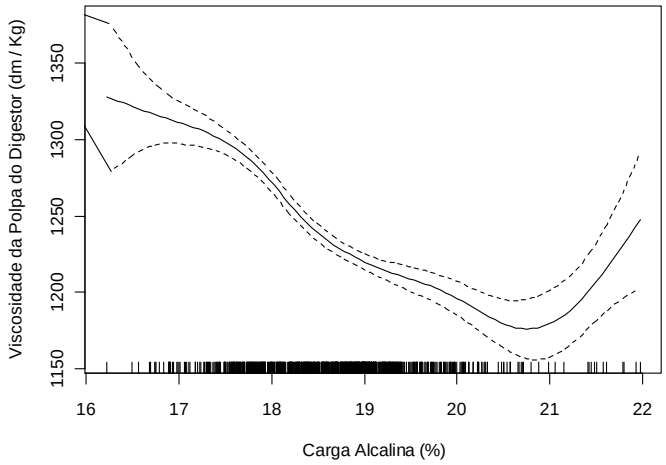


Figura 27: Curva Alisada da Viscosidade da Polpa em função da Carga Alcalina.

TABELA 9: Teste de Significância para Curva Alisada da Viscosidade da Polpa em função da Carga Alcalina.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Carga Alcalina)[#]	6,46
F	53,11
p-valor	2e-16***

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Apesar da viscosidade ser um parâmetro de classificação do produto, ela não impacta nas propriedades de resistência da celulose, desde que não fique abaixo de um limite crítico (cerca de 800). Viscosidade mais alta na descarga do digestor significa maior rendimento de celulose. Geralmente esta condição é alcançada com um consumo mais baixo de álcali.

O número kappa é um parâmetro importante para o processo de produção de polpa celulósica branqueada. Seu valor é um indicativo da quantidade de lignina presente na polpa, determinando dessa forma a estratégia envolvida na fase de branqueamento, quando do desenvolvimento de seqüências.

O número kappa é pré-estabelecido pelo processo industrial, a qual exerce influência sobre o rendimento do processo e propriedades da polpa celulósica. Entretanto, as características da matéria-prima madeira como teor de lignina, teor de extrativos, densidade básica e a espessura dos cavacos influenciam diretamente o parâmetro de kappa da polpa. Neste trabalho foi verificado um efeito linear da densidade sobre o kappa (Figura 28).

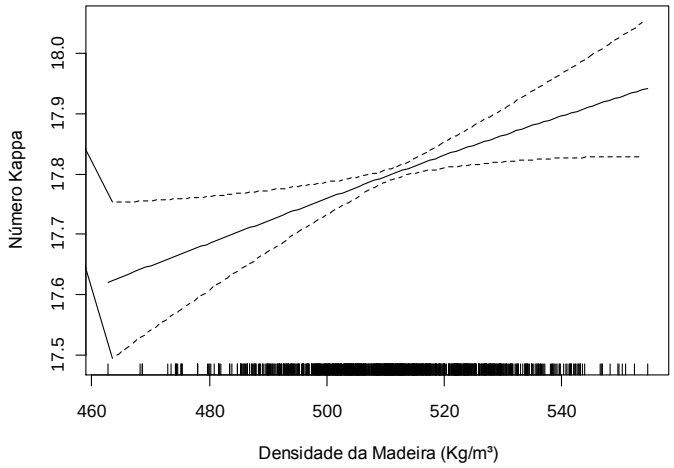


Figura 28: Curva Alisada do Número Kappa em função da Densidade da Madeira.

TABELA 10: Teste de Significância para Curva Alisada do Número Kappa em função da Densidade da Madeira.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	1,12
F	7,96
p-valor	0,0027**

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

** Significativo (P < 0,01).

Conforme Ganqiang et al. (1998), citado por Almeida (2003), o processo de polpação Kraft convencional produz polpa celulósica com qualidade para número Kappa variando entre 18 e 22 para madeiras folhosas. No presente trabalho os maiores valores de viscosidade e produção de polpa celulósica foram alcançados com número Kappa variando entre 17-19 (Figuras 29 e 30 respectivamente).

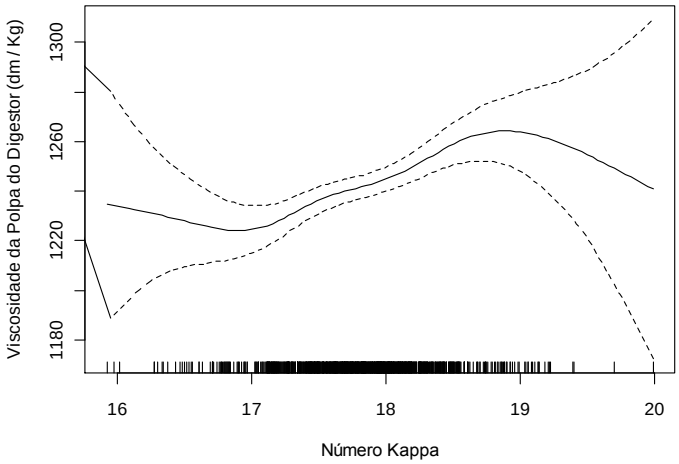


Figura 29: Curva Alisada da Viscosidade da Polpa em função do Número Kappa.

TABELA 11: Teste de Significância para Curva Alisada da Viscosidade da Polpa em função do Número Kappa.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Kappa)[#]	4,44
F	4,96
p-valor	8,7e-05***

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Quanto maior o kappa na descarga do digestor maior é a viscosidade e o rendimento, além de melhorar as propriedades de resistência da polpa. Entretanto não pode ser acima de 19-20, pois gera muito rejeito e elevado consumo de reagentes de branqueamento.

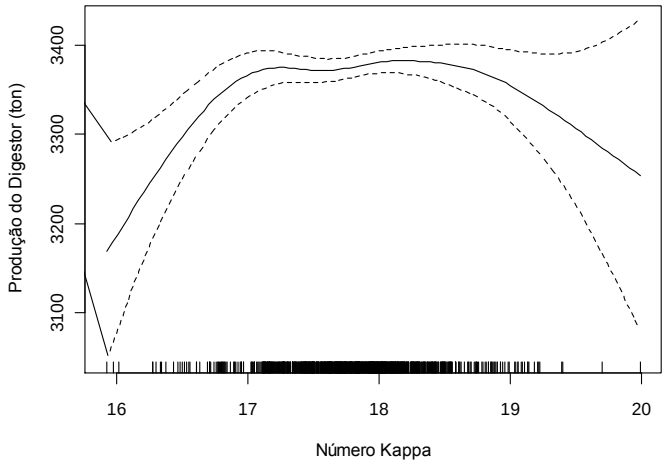


Figura 30: Curva Alisada da Produção do Digestor em função do Número Kappa.

TABELA 12: Teste de Significância para Curva Alisada da Produção do Digestor em função do Número Kappa.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Kappa)[#]	4,579
F	2,88
p-valor	0,0098**

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

** Significativo (P < 0,01).

Ganqiang et al. (1998) também chama a atenção para o fato de que a adoção de valores elevados de kappa culmina em maiores dificuldades de branqueamento da polpa, conseqüentemente um maior consumo de dióxido de cloro. Tal fato também foi constatado no presente estudo (Figura 31). Quanto maior o consumo de dióxido de cloro para uma mesma alvura, maior é o custo de produção. Além disso, causa impacto negativo nas características do efluente, gerando mais toxicidade.

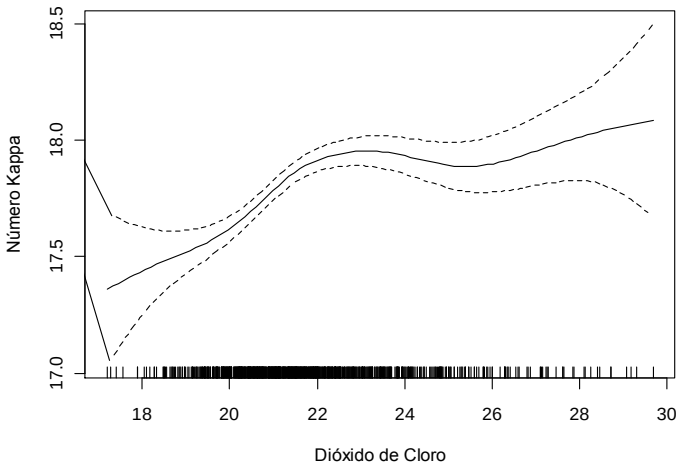


Figura 31: Curva Alisada do Número Kappa em função do Dióxido de Cloro.

TABELA 12: Teste de Significância para Curva Alisada do Número Kappa em função do Dióxido de Cloro.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Dióxido de Cloro)[#]	4,77
F	11,99
p-valor	8,86e-13***

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

O dióxido de cloro é um oxidante eletrofílico, relativamente seletivo, com ataque predominante nos anéis aromáticos dos fragmentos da lignina residual de polpa Kraft e, mais especificamente, nos grupos fenólicos livres.

Outro parâmetro avaliado neste estudo foi a Sulfidez, que é a quantidade de Na_2S presente no licor de cozimento em relação à quantidade de NaOH, a qual também pode variar, de acordo com as premissas de cada unidade industrial.

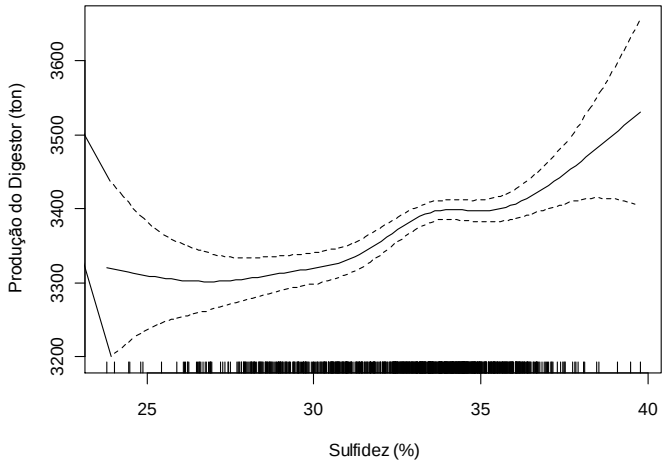


Figura 32: Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Sulfidez.

TABELA 13: Teste de Significância para Curva Alisada da Produção do Digestor em função da Sulfidez.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Sulfidez)[#]	5,23
F	10,21
p-valor	1,49e-11***

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

Muitas fábricas mantêm a sulfidez do licor branco na faixa entre 25-35%. O nível baixo crítico para a sulfidez não é bem definido e pode variar dependendo de outros parâmetros do sistema. Entretanto, há concordância que tanto a taxa de reação de cozimento e a qualidade da polpa são afetados negativamente à sulfidez inferior a 15%. Um nível mais alto é mantido para prover uma margem de segurança e permitir maior uso de iniciadores químicos contendo enxofre, mais baratos (por exemplo Na_2SO_4). Estudo de PHANEUF et al. (1998) demonstrou que redução da sulfidez, principalmente na faixa de 20 a 0%, resultou em decréscimo da viscosidade da polpa.

No presente estudo foi feita uma avaliação da relação Viscosidade/Número Kappa em função da Sulfidez. Verificou-se que há decréscimo acentuado da relação Viscosidade/Número Kappa para sulfidez menor que 27% e maior que 36% (Figura 33 e tabela 13).

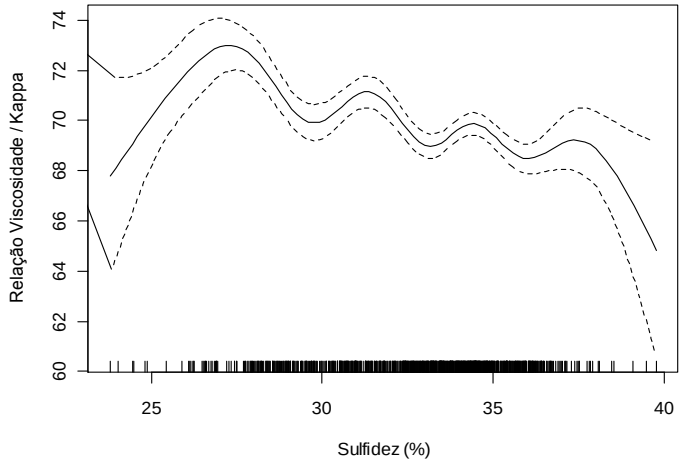


Figura 33: Curva Alisada da Relação Viscosidade/Kappa em função da Sulfidez.

TABELA 13: Teste de Significância para Curva Alisada da Relação Viscosidade/Kappa em função da Sulfidez.

Significância do termo alisado	
G.l. s (Sulfidez)[#]	8,63
F	9,08
p-valor	3,46e-13***

[#] Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.

*** Significativo (P < 0,001).

5. CONCLUSÕES

- Modelos Aditivos Generalizados (MAG) podem ser utilizados com eficiência para modelagem de dados de fabricas de celulose.

- Redes neurais artificiais são eficientes para estimar a produção do digestor em função de variáveis como densidade aparente dos cavacos e número kappa.

- Redes neurais artificiais são eficientes para estimar a carga alcalina em função de variáveis como a densidade da madeira e a densidade básica dos cavacos.

- O aumento da carga alcalina proporciona o aumento do nível de deslignificação e redução do número kappa. Porém, para carga alcalina superior a 20% não há redução do número kappa, com isso evidencia-se que a prática de cargas alcalinas maiores, visando exclusivamente à remoção de lignina, não se justifica.

- Considerando um mesmo número kappa final, um aumento na carga alcalina resultará em uma redução da viscosidade e do rendimento de celulose. O consumo elevado de álcali pode gerar gargalos tanto na caustificação (falta de licor para cozimento) quanto na caldeira (excesso de sólidos para queima), forçando a redução do digestor.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALENCAR, G.S.B. Estudo da qualidade da Madeira para produção de celulose relacionada à precocidade na seleção de híbrido E. grandis X E. urophylla. Piracicaba, 2002. 145. Dissertação (Mestrado) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo.

ALMEIDA, S. F. INFLUÊNICIA DA CARGA ALCALINA NO PROCESSO DE POLPAÇÃO Lo-Solids PARA MADEIRAS DE EUCALIPTO. Piracicaba-SP. Dissertação de mestrado. 2003. 115p.

BARNA, J.; SALVADOR, E.; SALLES, D. V. C.; COLODETTE, J. L. Efeito da adição de H2O2 na deslignificação com oxigênio em duplo estágio. In: CONGRESSO ANUAL DE CELULOSE E PAPEL – ABTCP, 29, 1996, São Paulo. Anais... São Paulo: 1996. p.107-122.

COLODETTE, J.L.; GOMIDE, J. L.; BATISTA, J. C. Efeito de aditivos na deslignificação com oxigênio de polpa kraft de eucalipto. 22º Congresso Anual de Celulose e Papel - ABTCP Anais... São Paulo, Brasil. p. 217-236, 1989.

CONCEIÇÃO GMS, SALDIVA PHN, SINGER JM. Modelos GLM e GAM: uma tradução para leigos e aplicação a um estudo de mortalidade e poluição atmosférica na cidade de São Paulo. Rev Bras Epidemiol., 2001; 4:206-19.

DAVID, A. F. A importância da lavagem nos estágios de branqueamento. 2004. 76p. Dissertação (Pós graduação Lato Sensu em Tecnologia de Celulose e Papel) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2008.

EK, M.; GUSTAVISSON, C.; KADIRIC, J.; TEDER, A. Formation and dissolution/degradation of hexenuronic acids during kraft pulping of Eucalyptus globules. In: BRASILIAN SYMPOSIUM ON THE CHEMISTRY OF LIGNIN AND OTHER WOOD COMPONENTS. 7., Belo Horizonte, 2001. Proceedings. Belo Horizonte: UFV, 2001. P.99-106.

FERREIRA,C.R.; FANTINI JUNIOR,M.; COLODETTE, J.L.; GOMIDE,J.L.; CARVALHO, A.M.M.L. – Avaliação tecnológica de clones de eucalipto: parte 1 – Qualidade da madeira para produção de celulose Kraft – Scientia Florestalis nº 70, p. 161-170, abril 2006

FOELKEL, C. E. B. Processo kraft. In: Química dos processos de produção de celulose. Belo Oriente: CENIBRA/UFV, 1977. 73 p.

GANQIANG, H.; ZHANG, B. et al. Modifield kraft pulping of eucalyptus wood. South Chine University of Technology, n.1, p.195-202, 1998.

GOMIDE, J.L.; COLODETTE, J.L.; OLIVEIRA, R.C.; SILVA, C,M, - Caracterização tecnológica, para produção de celulose, da nova geração de clones de Eucalypus do Brasil – Revista Árvore, vol 29, nº 1, viçosa Jan/Feb 2005

HASTIE, T. AND TIBSHIRANI, R. (1990). Generalized Additive Models, Chapman and Hall, London.

HASTIE, T. e TIBSHIRANI, R. Generalized additive models. Statistical Science. 1986, Vol. 1, N. 3, p297-318.

LANN, A. E. et AL. Maximizing pulp yield potential of Cenibra's Wood supply. In: Brazilian SYMPOSIUM ON THE CHEMISTRY OF LIGNINS AND OTHER WOOD COMPONENTS. 7., 2001, Belo Horizonte. Proceedings… Belo Horizonte: 2001. P159-167.

MARTINS LC, LATORRE MRD DE O, BRAGA ALF, SALDIVA PHN. Relação entre poluição atmosférica e atendimentos por infecção de vias aéreas superioresno Município e São Paulo: avaliação do rodízio de veículos. Rev Bras Epidemiol., 2001; 4:220-9.

MIGLIORINI, A.J. - Variação da densidade básica da madeira de Eucalyptus grandis Hill Ex. Maiden em função de diferentes níveis de produtividade da

floresta – Dissertação de mestrado apresentada à Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”/USP – Piracicaba – 1986

MOKFIENSKI, A. et al. Importância da densidade e do teor de carboidratos totais da Madeira de eucalipto no desempenho da linha de fibras. In: COLÓQUIO INTERNACIONAL SOBRE CELULOSE KRAFT DE EUCALIPTO. 2003, Viçosa. Colóquio. Viçosa: 2003. P15-38

QUEIROZ S.C.S.; GOMIDE J.L.;COLODETTE, J.L. e OLIVEIRA R.C. – Influência da densidade básica da madeira na qualidade da polpa Kraft de clones híbridos de Eucalyptus grandis W. Hill ex Maiden x Eucalyptus urophylla S.T. Blake clones – Revista Árvore, vol. 28, nº 6, Viçosa Nov/Dez. 2004

R DEVELOPMENT CORE TEAM (2010). R: A language and environment for statistical computing. R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. ISBN 3-900051-07-0, URL http://www.R-project.org.

SANTOS, S.R. – Influência da qualidade da madeira de híbridos de Eucalyptus grandis x Eucalypitus urophylla e do processo Kraft de polpação na qualidade da polpa branqueada – Dissertação de mestrado apresentada à Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”/USP – Piracicaba – julho 2005

SCHWARTZ J, SPIX C, TOULOUMI G, BACHÁROVÁ L, BARUMAMDZADEH T, LE TERTRE A, PIEKARKSI T, PONCE DE LEON A, PÖNKÄ A, ROSSI G, SAEZ M, SCHOUTEN JP (1996). Methodological issues in studies of air pollution and daily counts of deaths or hospital admissions. J. Epidemiol. Community Health p. 50.

SHIMOYAMA, V.R.de S. e BARRICHELO, L.E.G. – Densidade básica da madeira, melhoramento e manejo florestal – IPEF – Série Técnica – Vol. 6; Nº 20; pag. 1-22 – 1990

TRINDADE, H. de S., A importância da lavagem da polpa nos estágios de branqueamento. 2003. 62p. Dissertação (Pós graduação Lato Sensu em Tecnologia de Celulose e Papel) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2003.

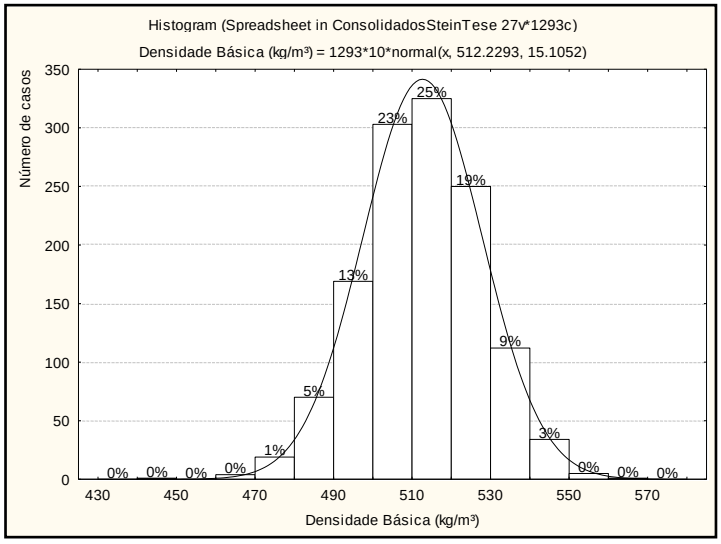
TRUGILHO, P. P.; et al . Classificação de clones de Eucalyptus sp visando à produção de polpa celulósica. Rev. Árvore, Viçosa, v. 28, n. 6, Dec. 2004.

WOOD, S.N. (2006) Generalized Additive Models: An Introduction with R. Chapman and Hall/CRC.

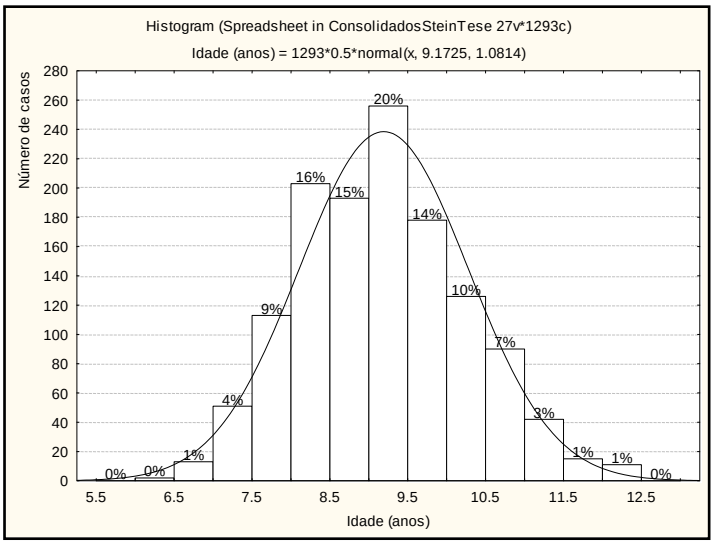
APÊNDICES

APÊNDICE 1 - ***Apresentação dos histogramas das variáveis estudadas.***

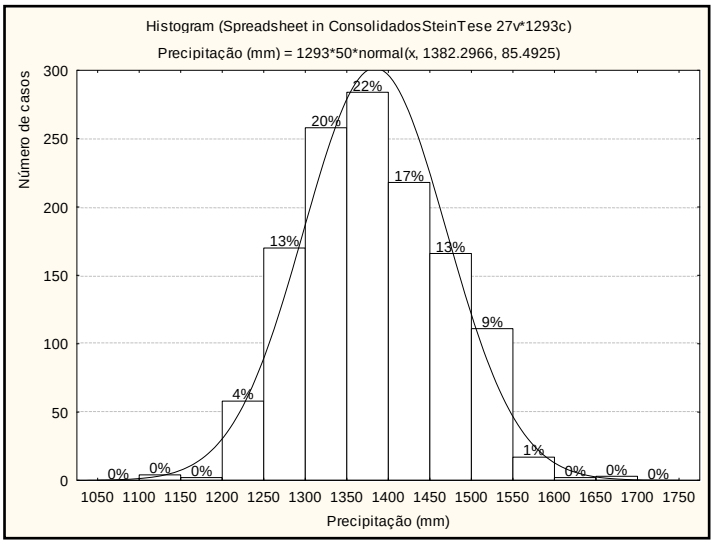
A densidade básica da madeira apresenta uma distribuição normal, tendo a faixa de 490 a 530 kg/m³sc a concentração das ocorrências para o período de apuração dos dados. Neste período o abastecimento de madeira da fábrica era bastante estável e sendo oriundo de duas regiões bastante distintas quanto a densidade, sendo a região central com densidades mais altas (> 490 kg/m³sc) e a região sul com densidades mais baixas (< 490 kg/m³sc).



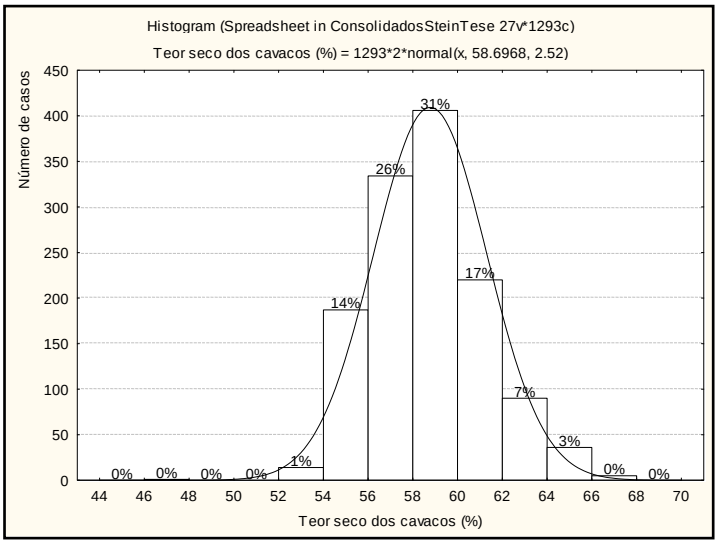
As florestas estavam concentradas na faixa de idade de 8 a 10 anos devido ao excedente de madeira que a empresa possuía no momento.



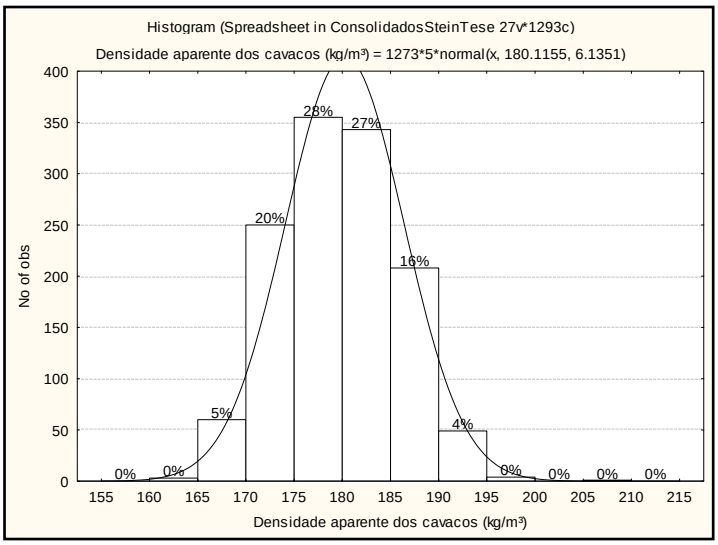
Na região de atuação da Veracel, a quantidade e distribuição anual das precipitações diminuem do litoral para o interior, ou seja, no sentido Leste/Oeste. A concentração na faixa de 1.300 a 1.450 mm/ano se deve a concentração da colheita na região central e sul, tendo a região central os maiores índices de precipitação.



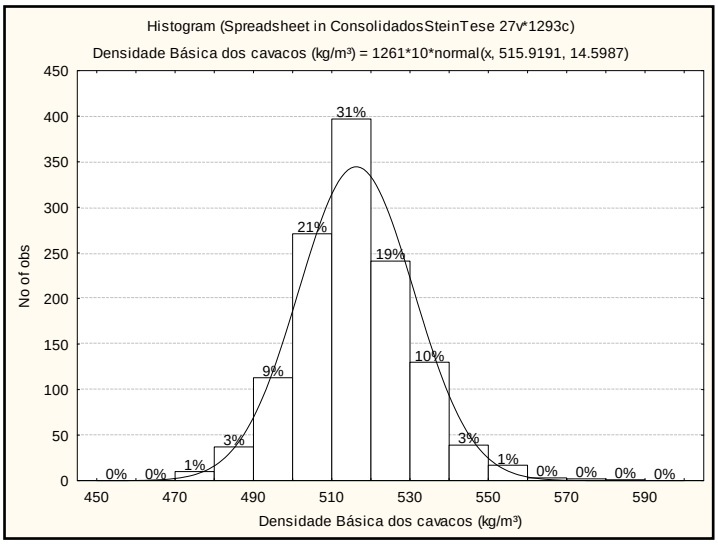
O teor seco dos cavacos está relacionado ao tempo para que a madeira colhida, oriunda dos plantios, seja transformada em cavacos na fábrica e consumida no processo de polpação. Esta concentração de 56 a 60% é reflexo dos altos níveis de estoques que a empresa trabalhava.



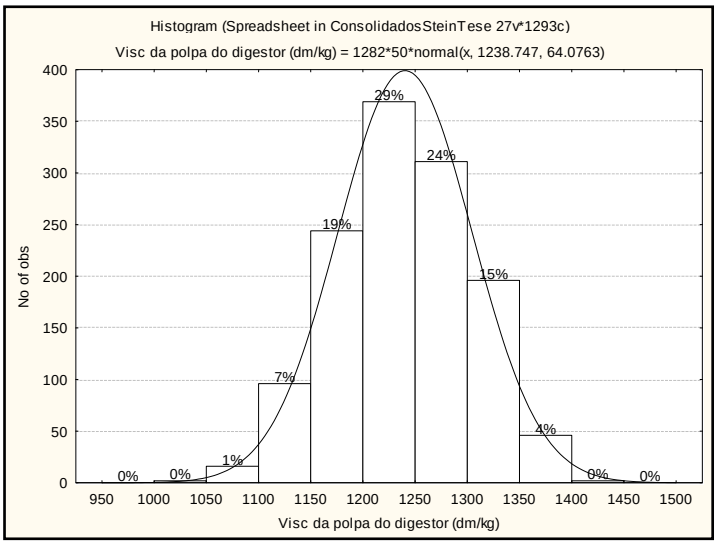
A densidade aparente dos cavacos ficou concentrada na faixa 175 a 185 kg/m³sc.



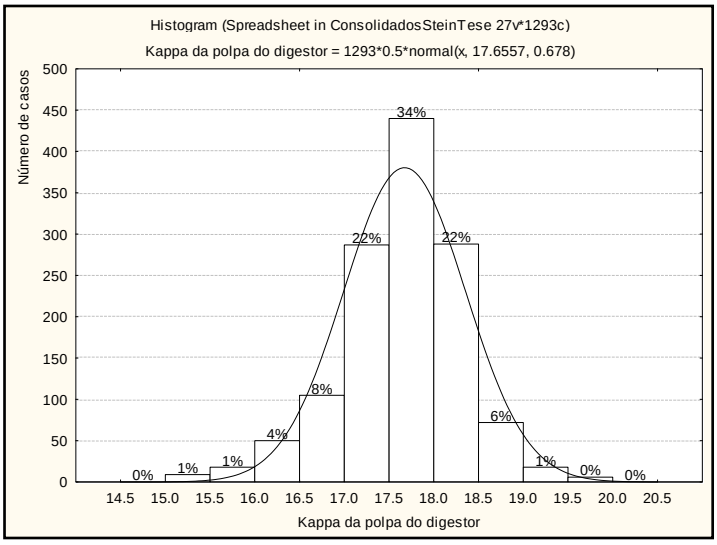
Já densidade básica dos cavacos ficou concentrada na faixa 500 a 530 kg/m³sc.



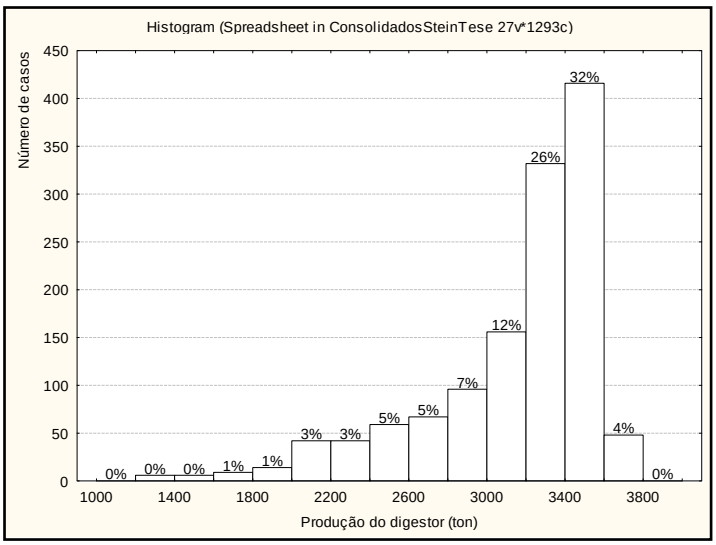
A viscosidade da polpa do digestor ficou concentrada na faixa 1.150 a 1.300 dm/kg.



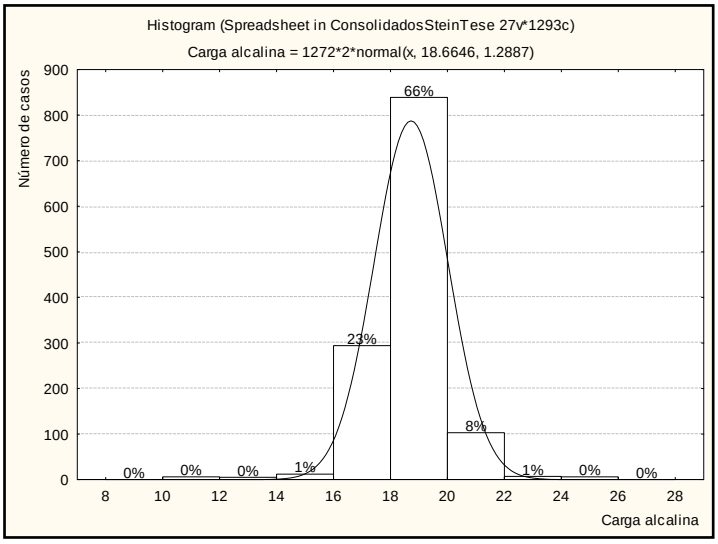
O número kappa da polpa do digestor ficou concentrado na faixa de 17 a 18,5.



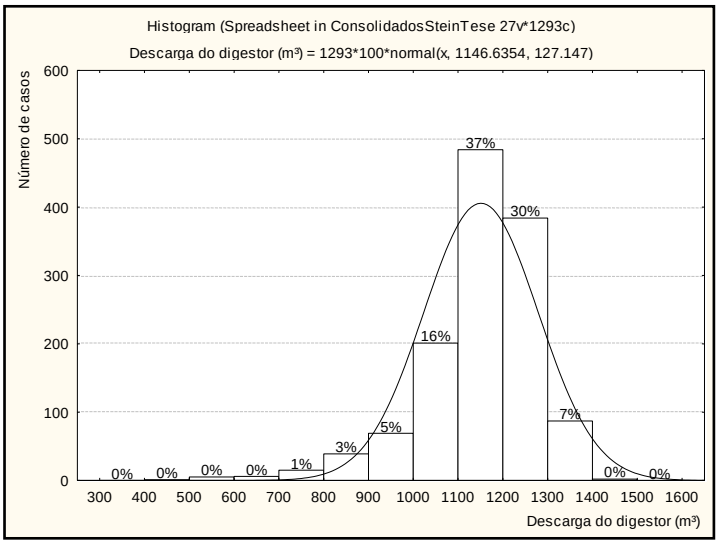
A produção do digestor ficou concentrada entre 3.200 a 3.600 ton/dia. Esta concentração nas faixas mais altas ocorre por ser um processo controlado, onde se visa atingir a meta de produção.



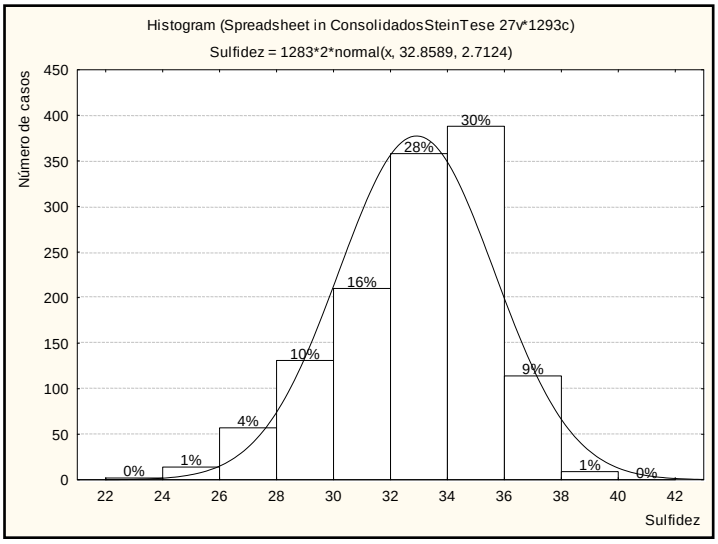
A carga alcalina está concentrada na faixa de 18 a 20%.



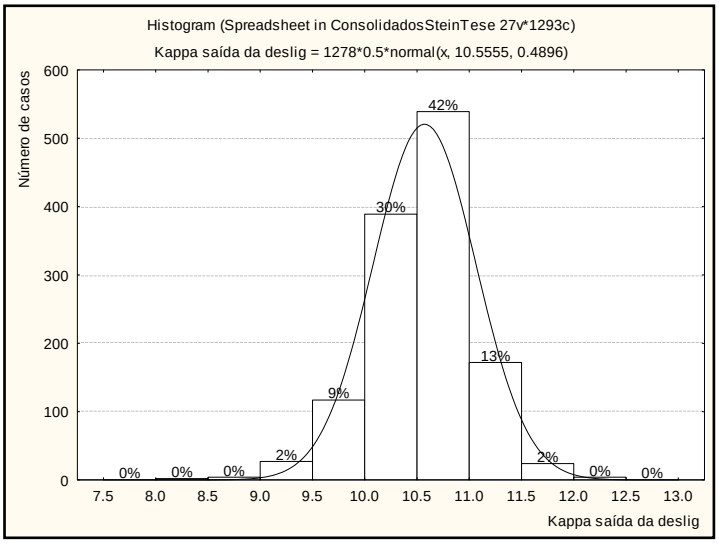
A descarga do digestor ficou concentrada entre 1.100 a 1.300 m³.



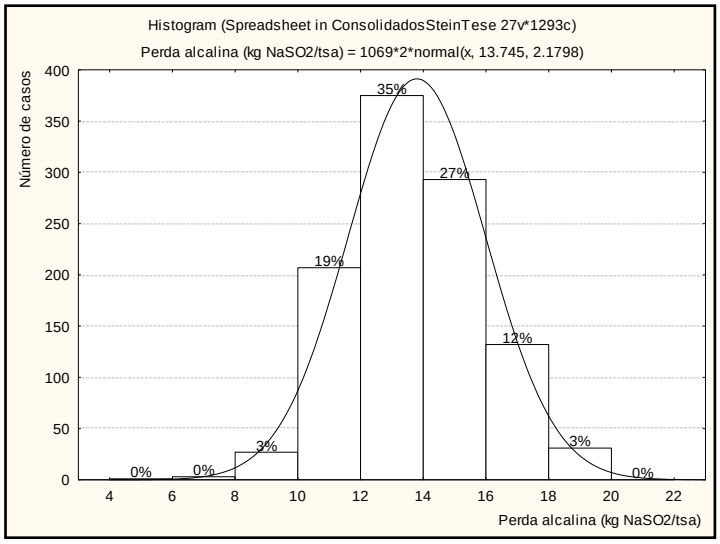
A sulfidez ficou concentrada entre 32 e 36%.



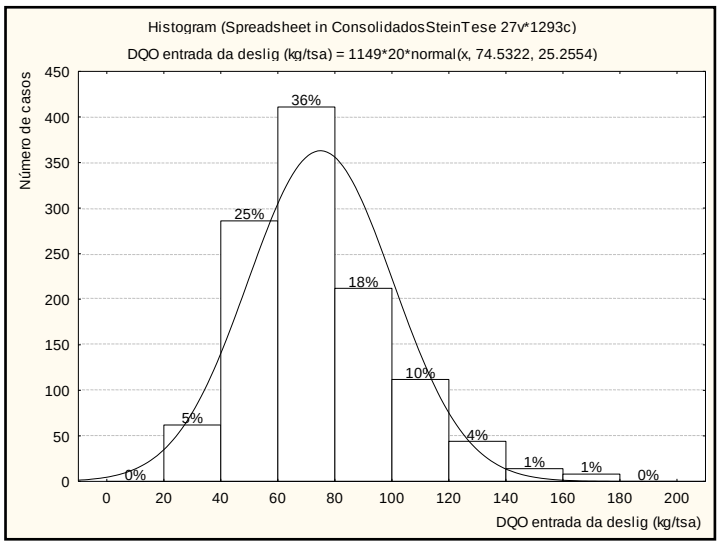
O número kappa na saída da deslignificação ficou entre 10 e 11.



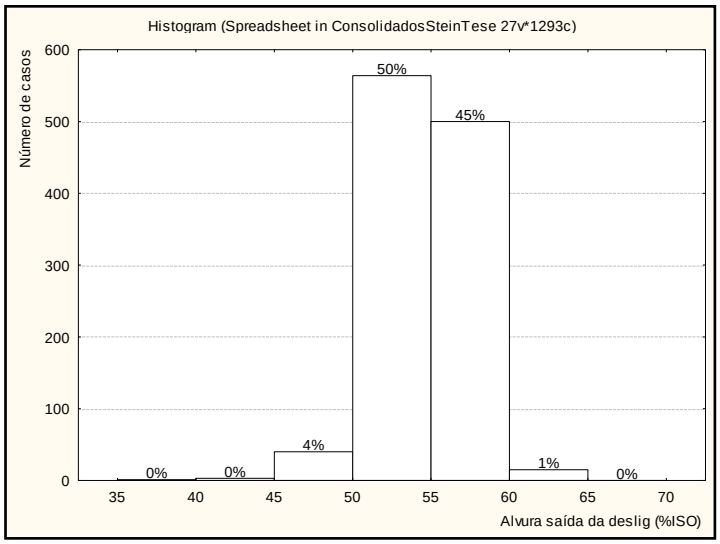
A perda alcalina variando de 10 a 16 kg $NaSO_2$/tSA.



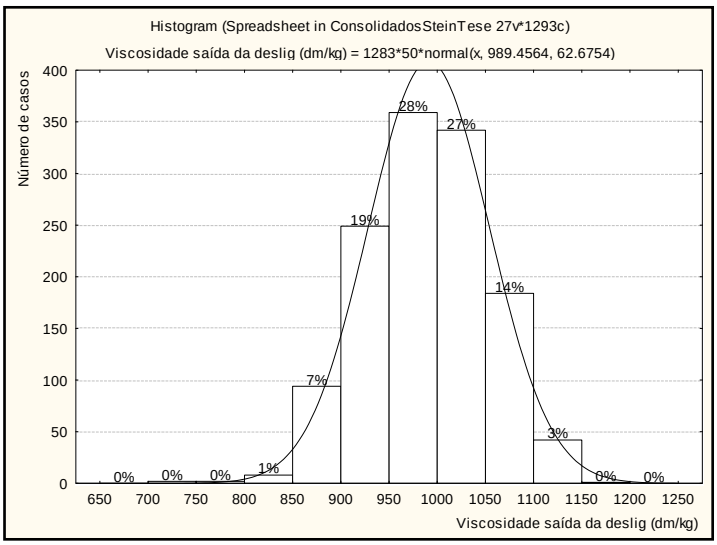
A Demanda Química de Oxigênio (DQO) na entrada da deslignificação ficou entre 40 e 80 kg/tSA).



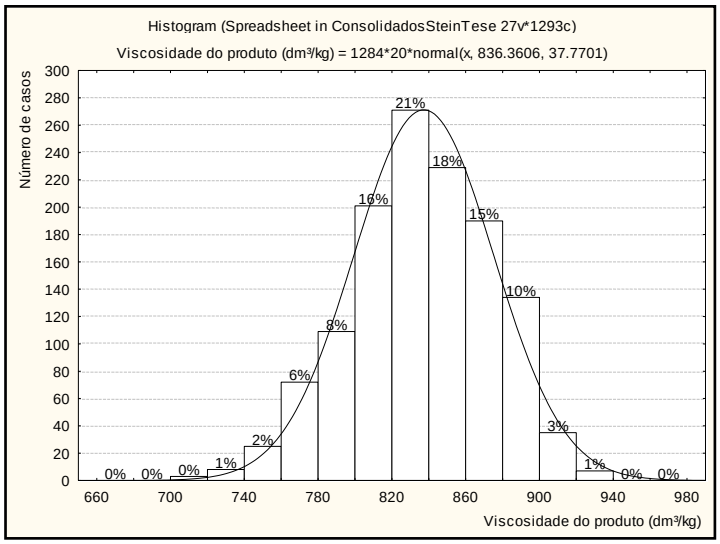
A alvura na saída da deslignificação ficou entre 50 e 60 % ISO.



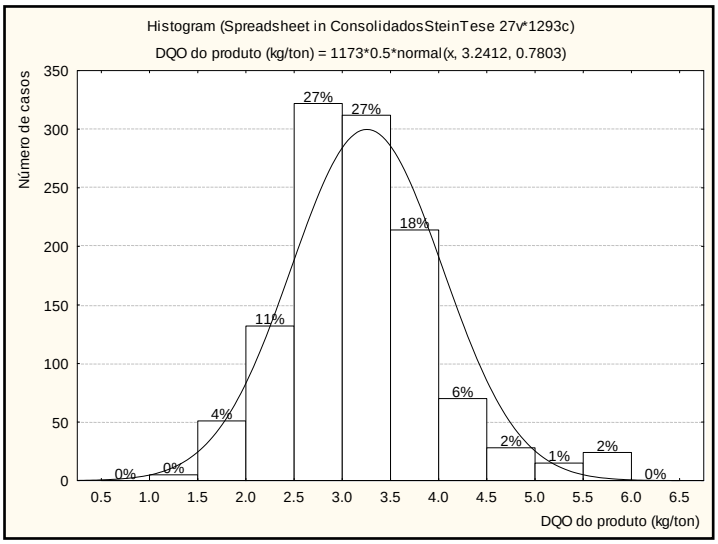
A viscosidade na saída da deslignificação ficou entre 900 e 1.100 dm/kg.



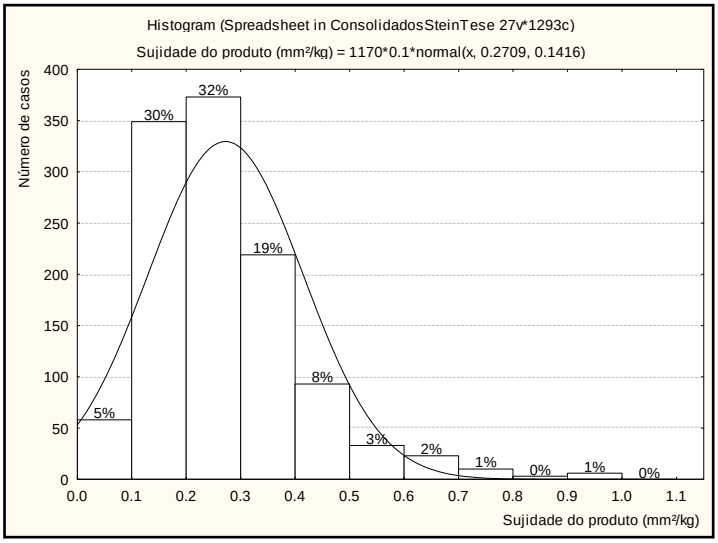
A viscosidade do produto ficou entre 800 e 880 dm^3/kg.



A Demanda Química de Oxigênio (DQO) do produto ficou entre 2,5 e 4 kg/ton).

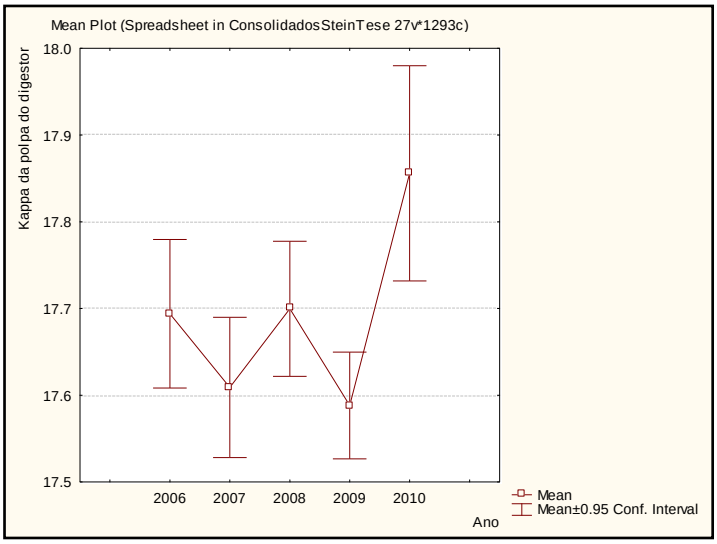


A sujidade do produto ficou entre 0,1 e 0,4 mm²/kg.

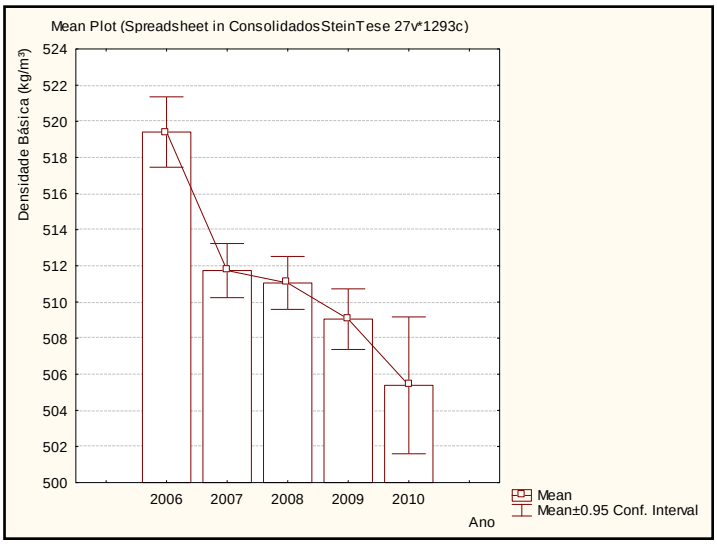


Os gráficos a seguir, apresentam os valores médios e os intervalos de confiança para o período de 2006 a 2010.

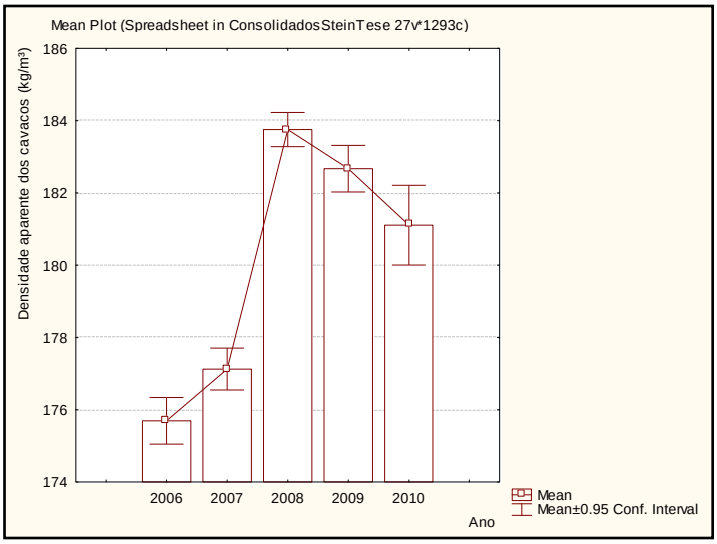
Kappa da polpa do Digestor



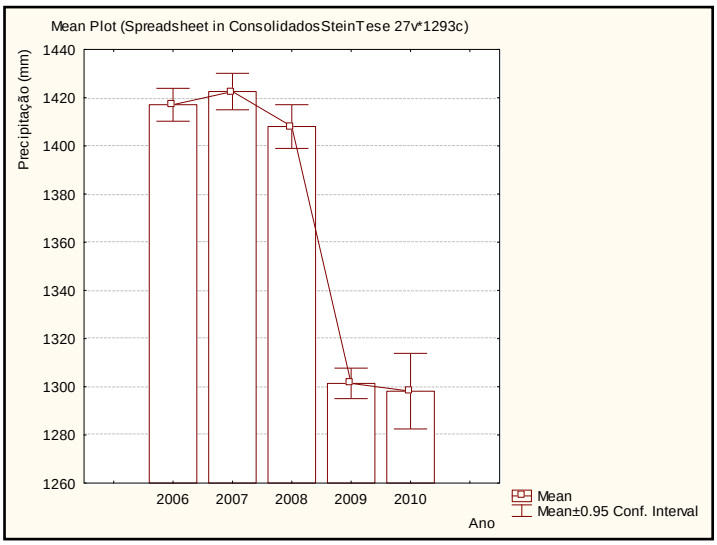
Densidade Básica da Madeira (kg/m³sc)



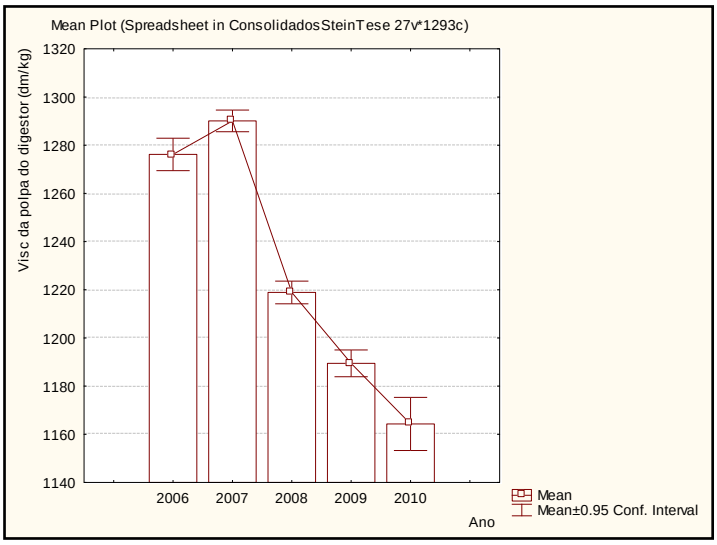
Densidade Aparente dos Cavacos (kg/m³)



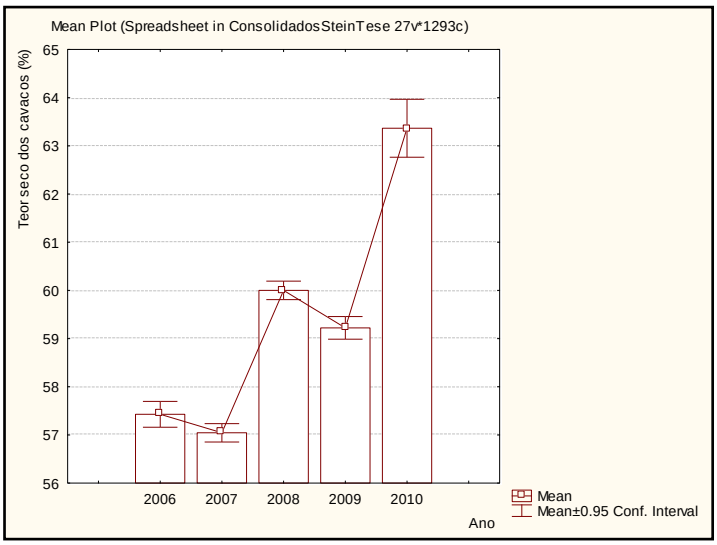
Precipitação (mm)



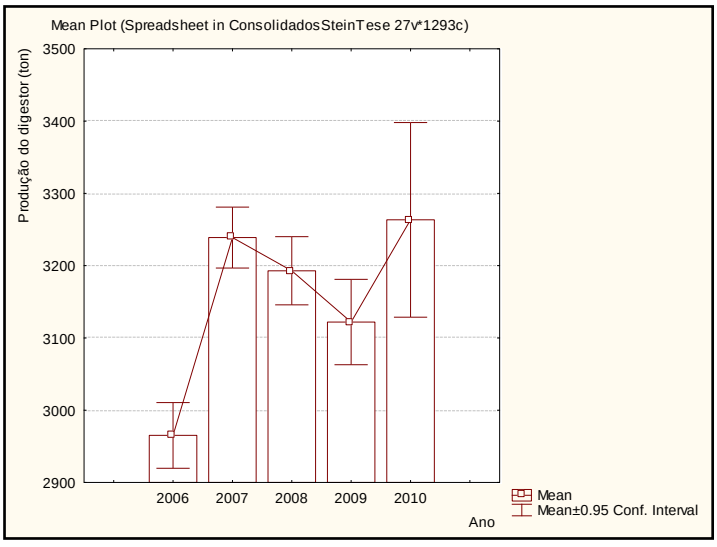
Viscosidade da polpa do Digestor (dm³/kg)



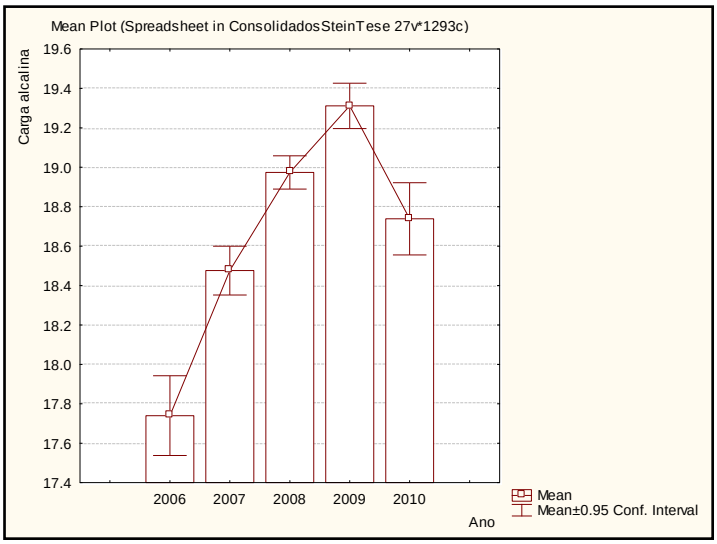
Teor Seco dos Cavacos (%)



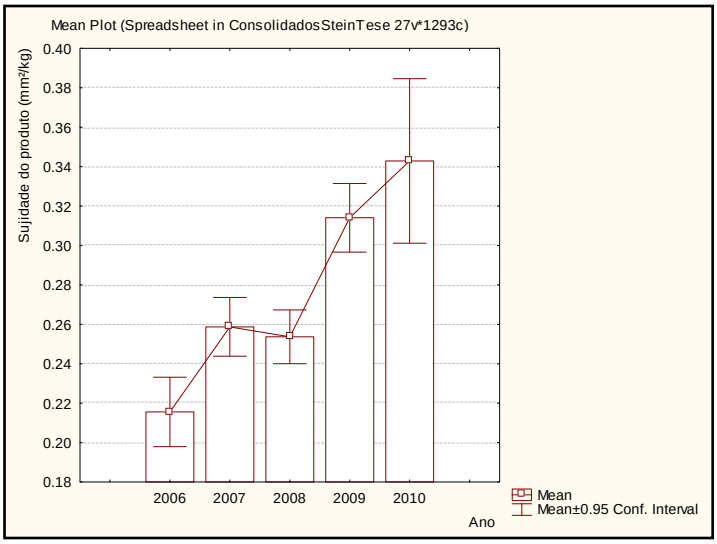
Produção do Digestor (%)



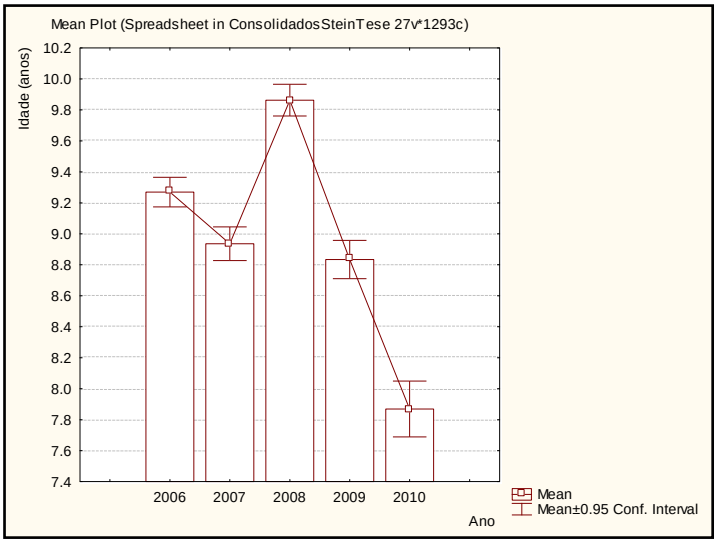
Carga Alcalina



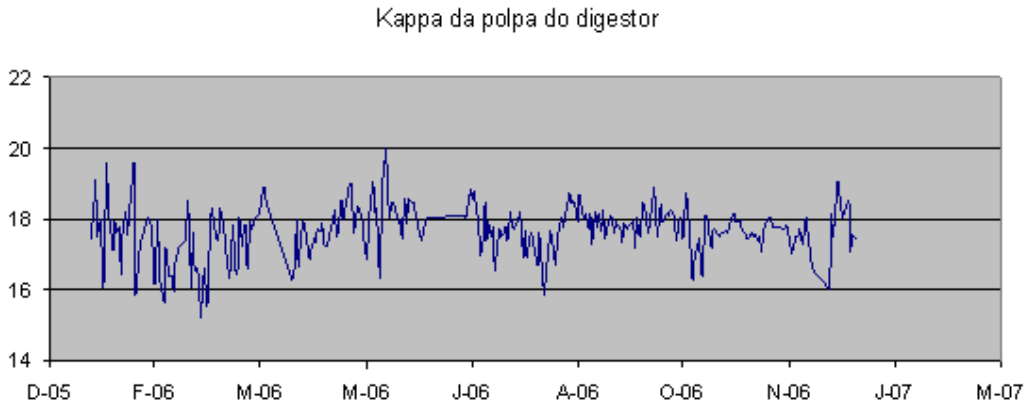
Sujidade do Produto (mm²/kg)

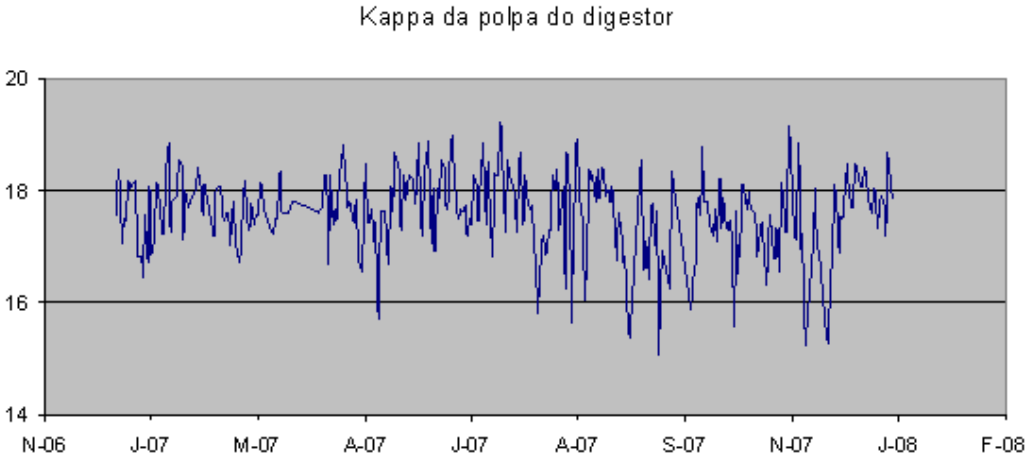


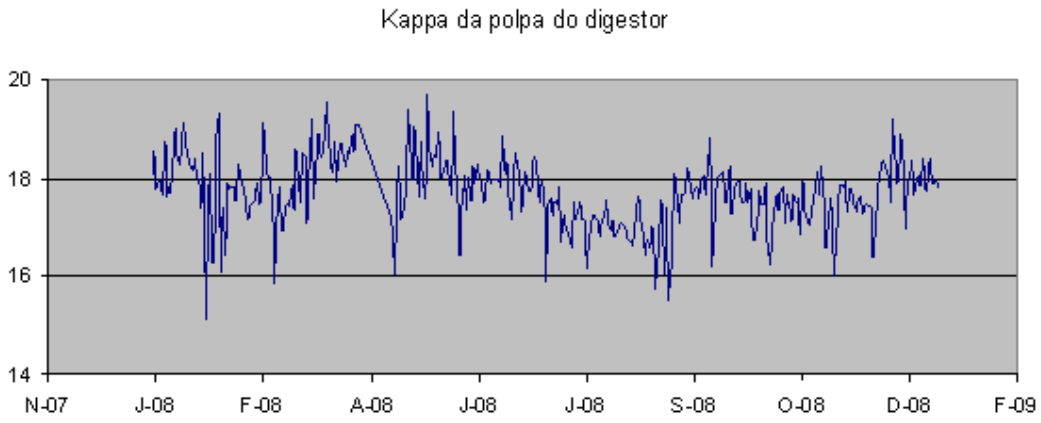
Idade (anos)

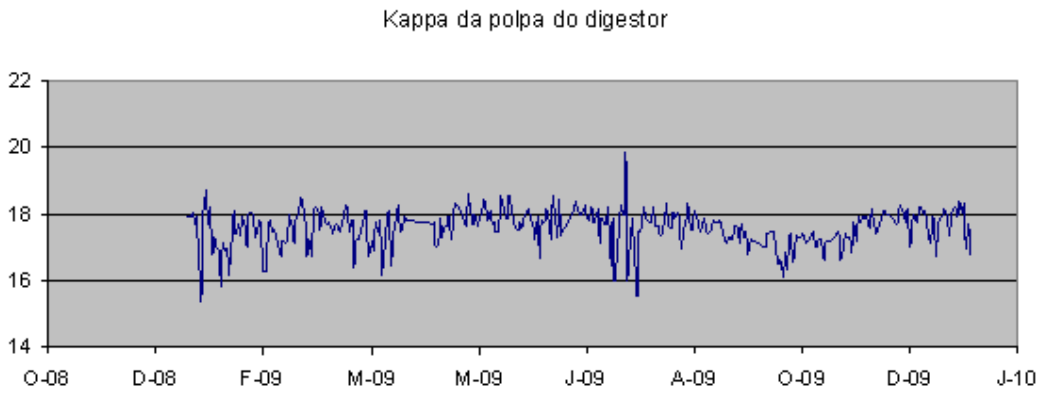

Mean Plot (Spreadsheet in ConsolidadosSteinTese 27v*1293c)
Idade (anos)
10.2
10.0
9.8
9.6
9.4
9.2
9.0
8.8
8.6
8.4
8.2
8.0
7.8
7.6
7.4
2006
2007
2008
2009
2010
Ano
Mean
Mean±0.95 Conf. Interval

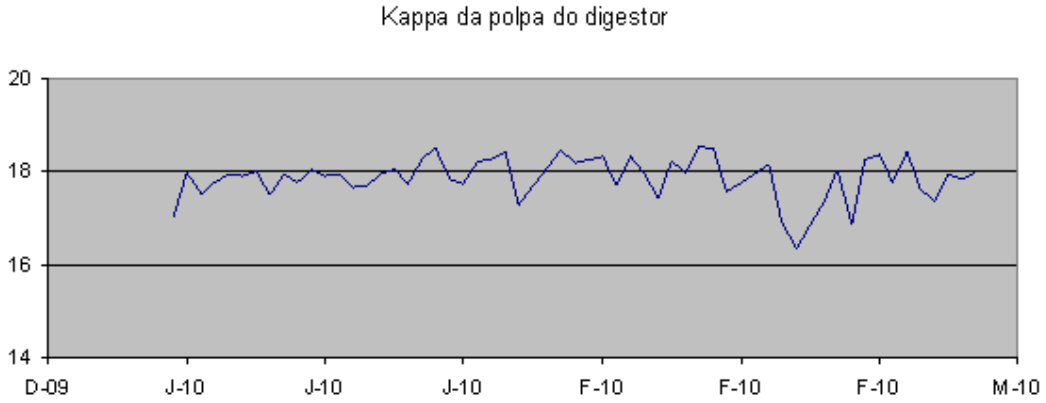
Representação mensal dos dados referente ao Kappa da polpa do digestor



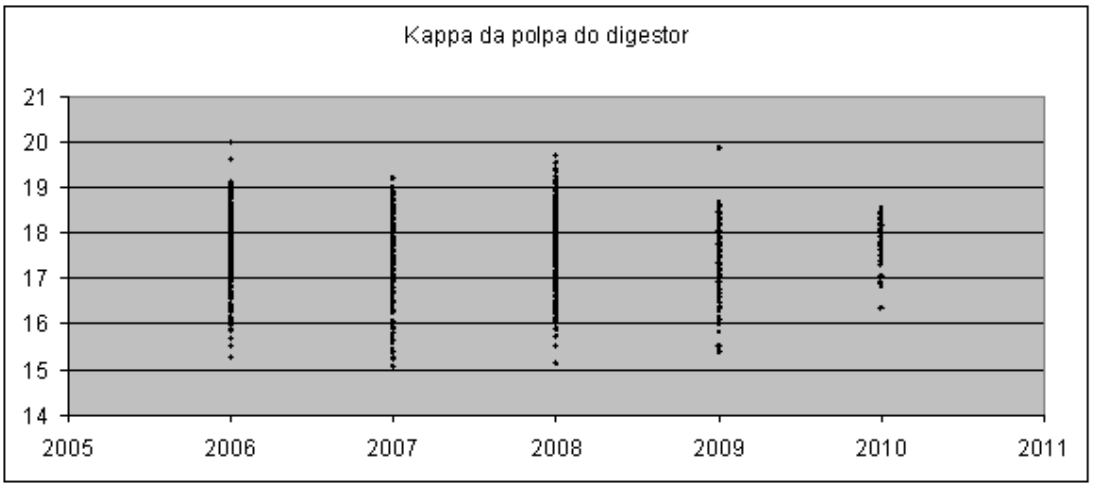


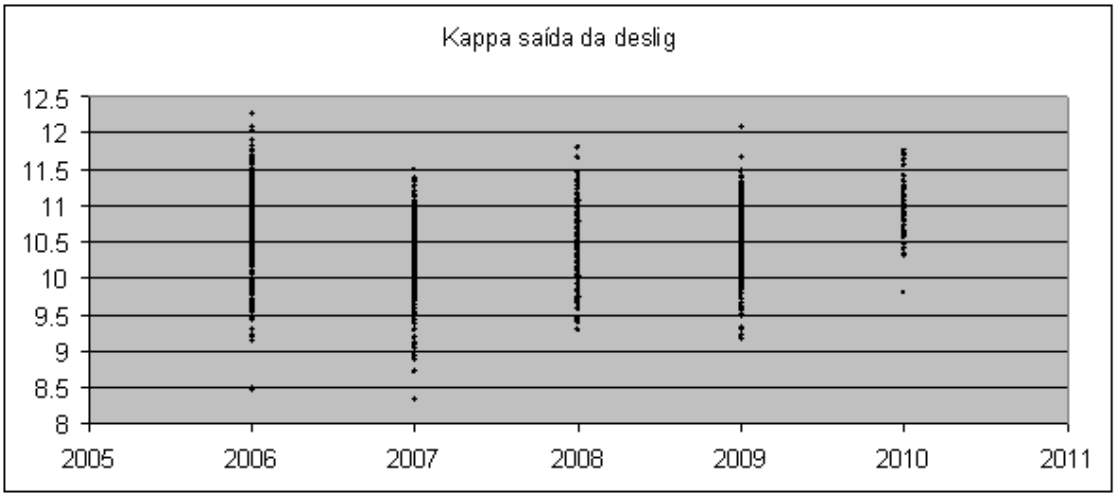

Kappa da polpa do digestor
20
18
16
14
N-07
J-08
F-08
A-08
J-08
J-08
S-08
O-08
D-08
F-09

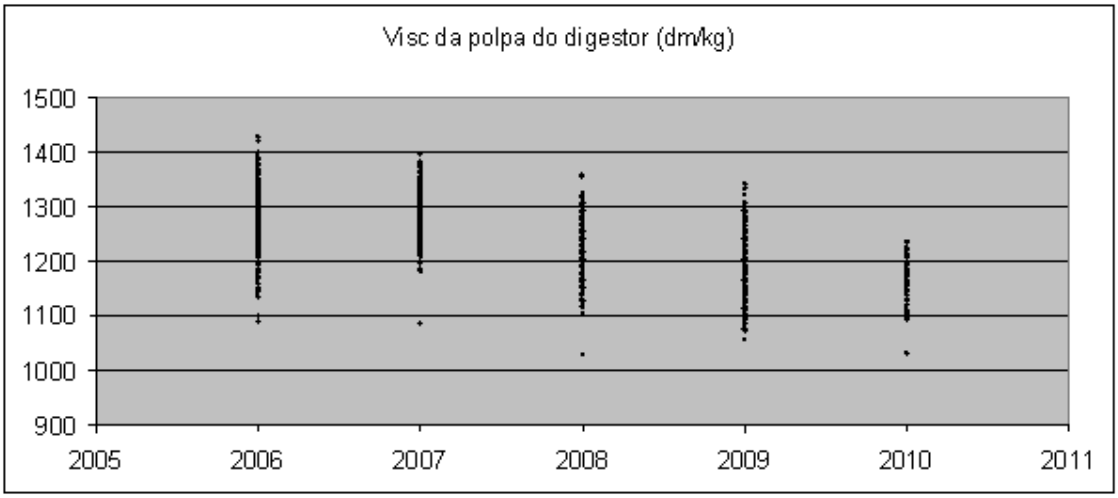

Kappa da polpa do digestor
22
20
18
16
14
O-08
D-08
F-09
M-09
M-09
J-09
A-09
O-09
D-09
J-10

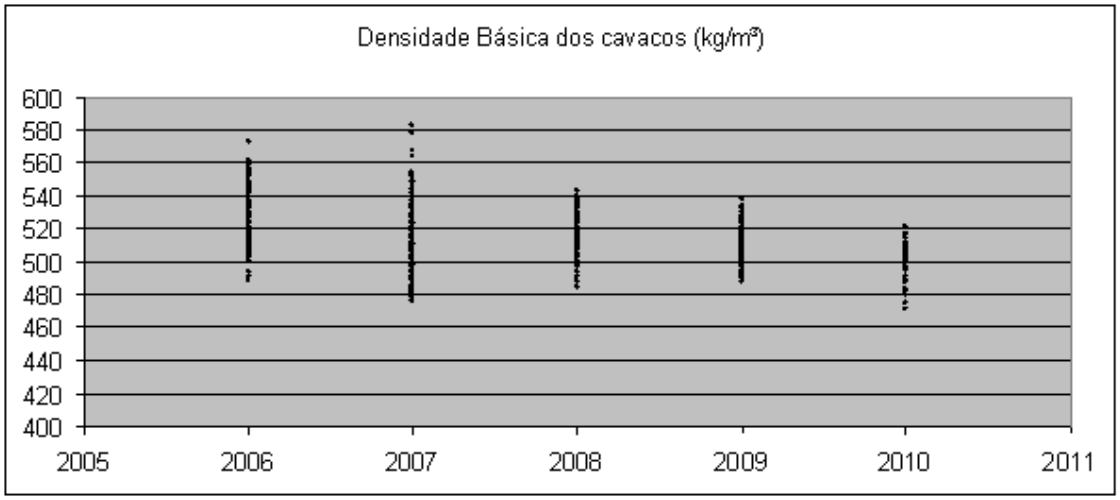

Kappa da polpa do digestor
20
18
16
14
D-09
J-10
J-10
J-10
F-10
F-10
F-10
M-10

Dispersão dos dados de algumas das variáveis estudas por ano.








Densidade Básica dos cavacos (kg/m³)
600
580
560
540
520
500
480
460
440
420
400
2005
2006
2007
2008
2009
2010
2011

Modelagem de dados de indústria de celulose Kraft empregando modelos aditivos generalizados e redes neurais artificiais.

Fabiano da Rocha Stein

CONTEÚDO

- ✓ Introdução
- ✓ Referencial Teórico
- ✓ Material e Metodologia
- ✓ Resultados
- ✓ Conclusão

INTRODUÇÃO

✓ Brasil: entre os grandes produtores de celulose do mundo

- Investimentos em pesquisa e desenvolvimento
- Disponibilidade de áreas para plantio
- Condições edafoclimáticas favoráveis

País	Produção de Celulose (ton)
EUA	51.479
China	21.477
Canadá	20.299
Brasil	**12.697**
Suécia	12.071
Finlândia	11.720
Japão	10.670
Rússia	7.430
Indonésia	6.435
Chile	4.985
Índia	3.662
Alemanha	2.902

Fonte: RISI

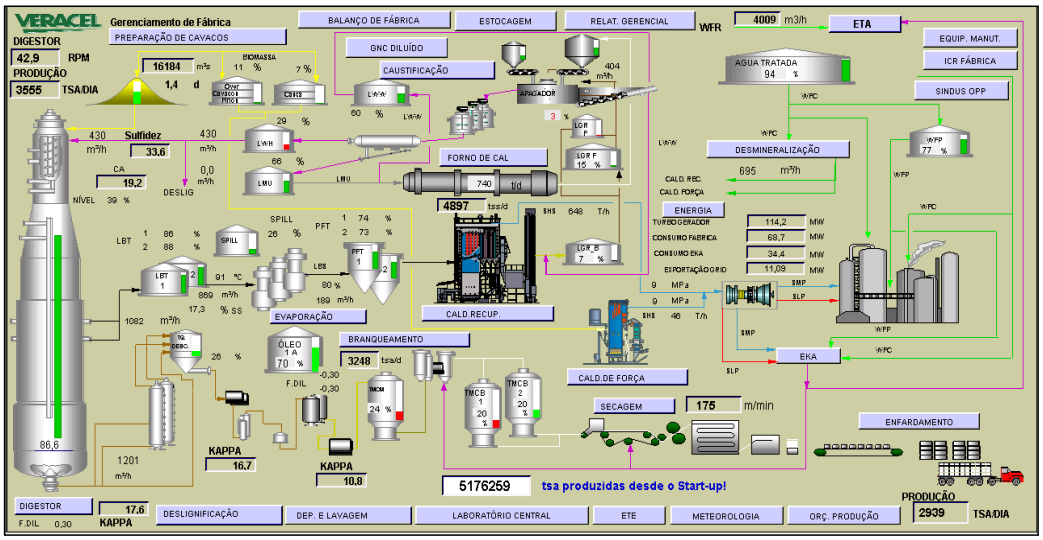
INTRODUÇÃO

✓ Processo Kraft

- Cavacos + reagentes químicos

Custo de Produção de Celulose	
Custo Variável	**63%**
Madeira	30%
Químicos	18%
Demais	15%
Custo Fixo	**37%**
Custo Caixa de Produção	**100%**

INTRODUÇÃO



OBJETIVO

- ✓ Modelagem
  - Modelos Aditivos Generalizados (MAG)
  - Redes Neurais Artificiais (RNA)

Avaliar a influência de algumas variáveis, da madeira e do processo, sobre a produção do digestor e carga alcalina.

REFERENCIAL TEÓRICO

✓ Variáveis de Processo

- Associadas com a madeira
  - Densidade Básica
  - Idade da Madeira

- Associadas ao processo de polpação
  - Carga Alcalina
  - Número Kappa
  - Viscosidade

REFERENCIAL TEÓRICO

✓ Modelagem

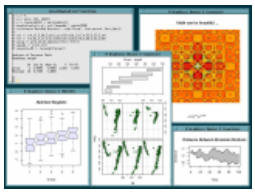
- Modelos Aditivos Generalizados
  - Destaque de uso na área médica

- Redes Neurais Artificiais
  - Várias aplicações na indústria de celulose

MATERIAL E MÉTODO

✓ Base de dados em escala industrial
- Janeiro/2006 à Março/2010
- Mais de 1.500 observações

✓ Modelos Aditivos Generalizados (MAG)
- Software R

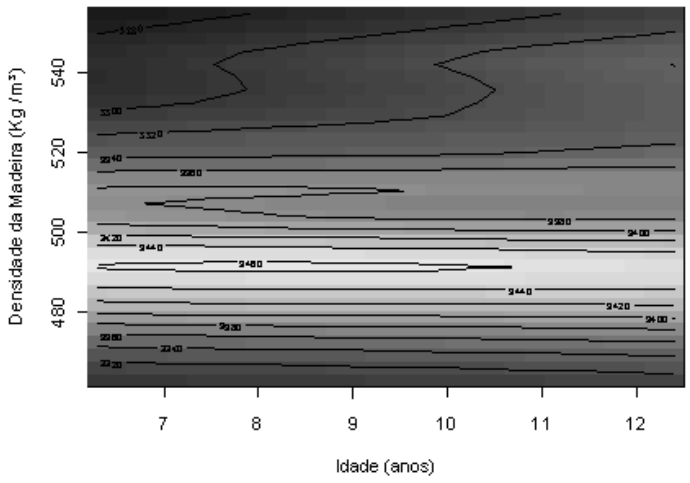


✓ Redes Neurais Artificiais (RNA)
- Software Statistica

✓ Resultados
- Teste de significância
- Gráficos de linha e superfície

RESULTADOS

✓ Produção do Digestor vs Densidade Básica e Idade

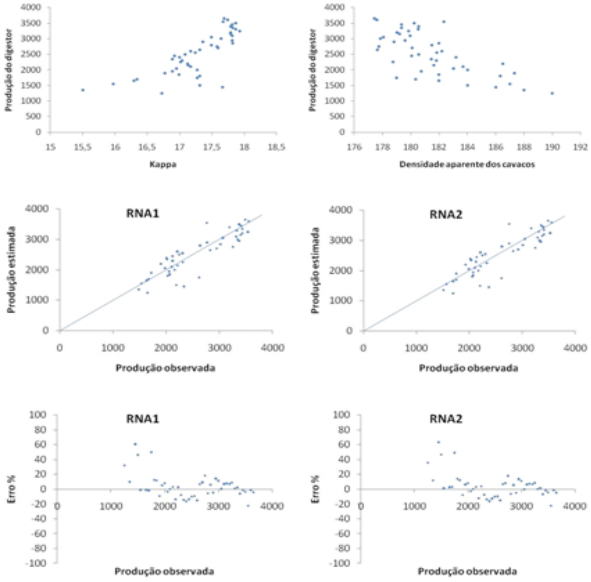


RESULTADOS

✓ Produção do Digestor

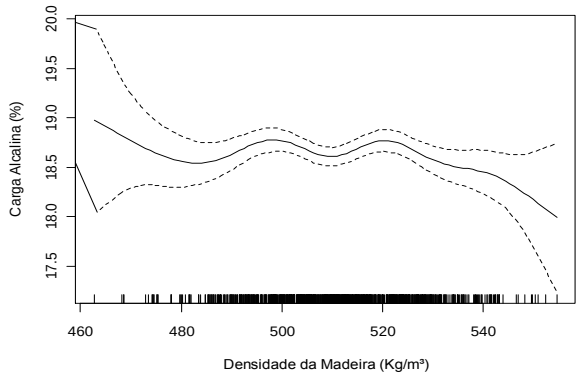
Correlações

- Densidade da madeira: -0,07
- Idade: -0,26
- Precipitação: 0,31
- Teor seco dos cavacos: -0,08
- **Densidade aparente dos cavacos: -0,70**
- Densidade básica dos cavacos: -0,05
- Viscosidade da polpa: 0,20
- **Kappa: 0,70**



RESULTADOS

✓ Carga Alcalina vs Densidade Básica



Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	6,7
F	1,93
p-valor	0,053[ns]

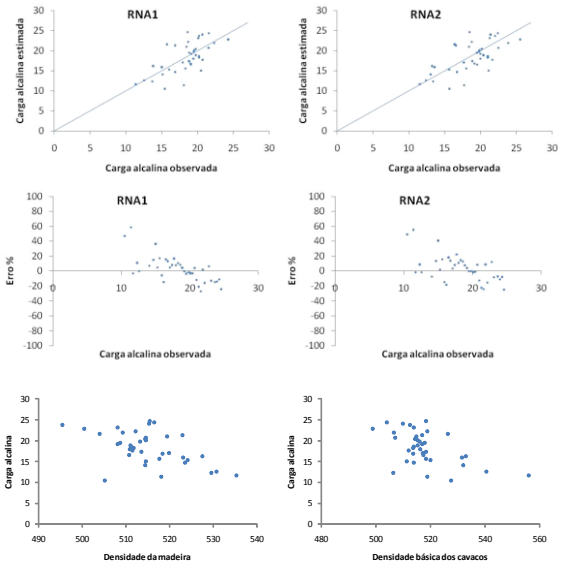
[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.
[ns]Não-Significativo (P > 0,05).

RESULTADOS

✓ Carga Alcalina

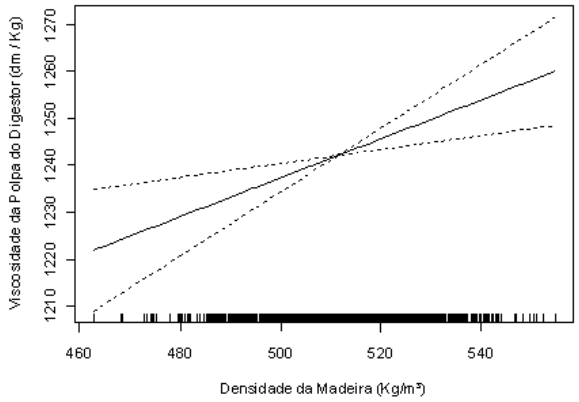
Correlações

- **Densidade da madeira: -0,52**
- Idade: -0,20
- Precipitação: -0,36
- Teor seco dos cavacos: 0,17
- Densidade aparente dos cavacos: 0,25
- **Densidade básica dos cavacos: -0,54**
- Viscosidade da polpa: 0,05
- Kappa: 0,23



RESULTADOS

✓ Viscosidade vs Densidade da Madeira

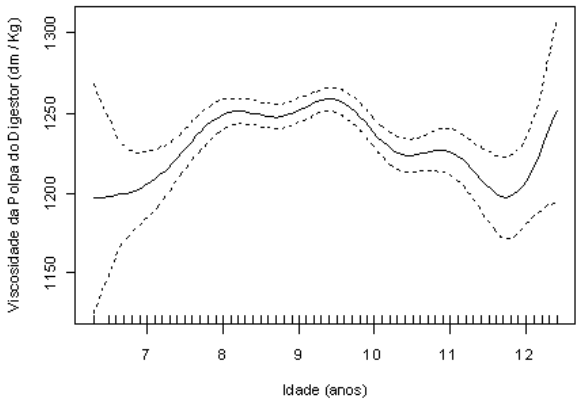


Significância do termo alisado	
G.l. s (Densidade da Madeira)[#]	1
F	9,72
p-valor	0,0019[**]

[#]Graus de liberdade correspondente ao termo alisado.
[**]Significativo (P < 0,01).

RESULTADOS

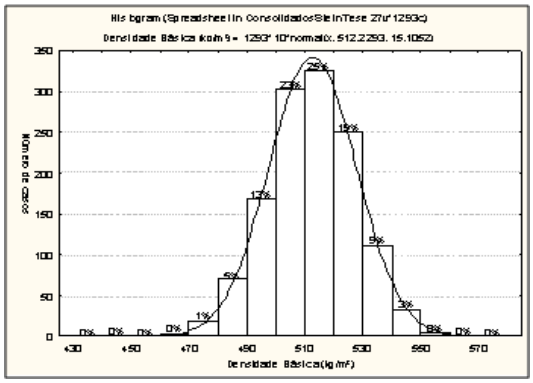
✓ Viscosidade vs Idade

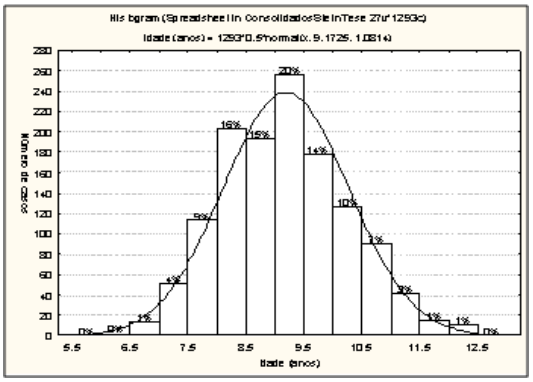


- Elevação da idade
- Aumenta teor de lignina e de extrativos
- Cozimento mais drástico

RESULTADOS

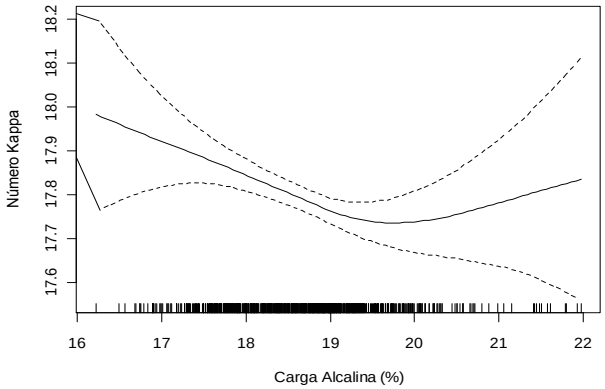
✓ Distribuição da Densidade e da Idade



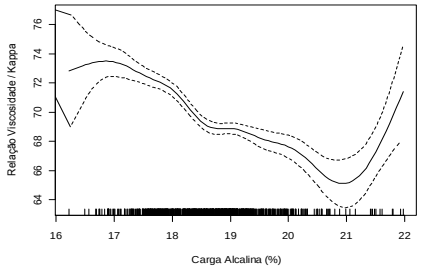


RESULTADOS

✓Kappa vs Carga Alcalina

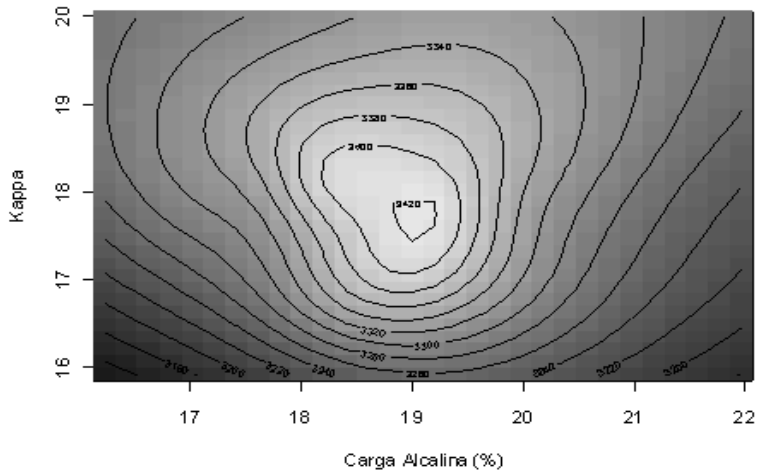


- Elevadas cargas de álcali
- Reduz a seletividade



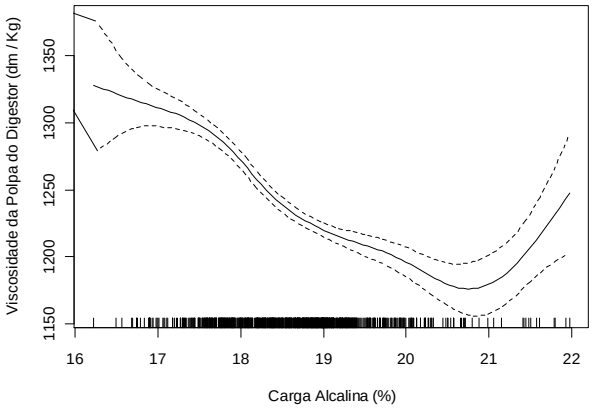
RESULTADOS

✓ Produção do Digestor vs Kappa e Carga Alcalina

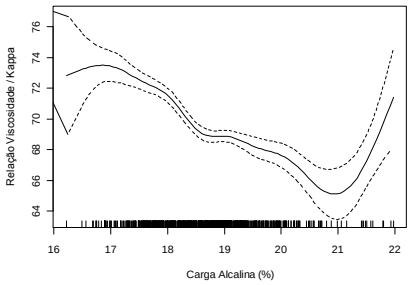


RESULTADOS

✓Viscosidade da Polpa do Digestor vs Carga Alcalina

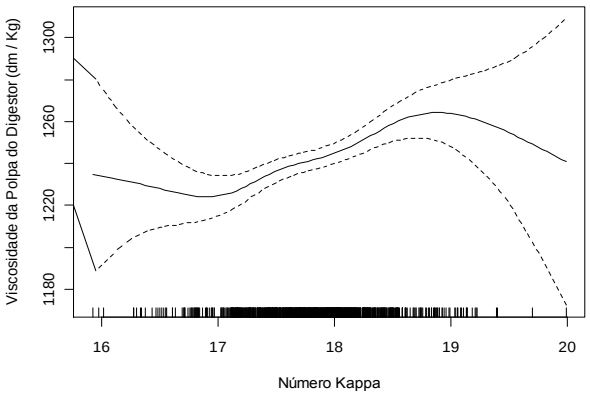


- Elevadas cargas de álcali
- Reduz a seletividade



RESULTADOS

✓Viscosidade da Polpa do Digestor vs Kappa



- Maior Kappa = Redução nível deslignificação
- Menor degradação de fibras no processo

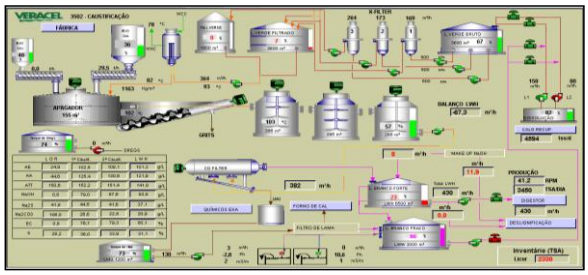
CONCLUSÕES

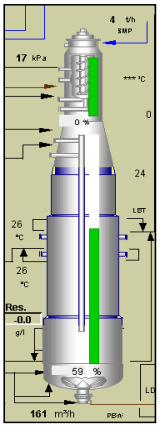
⇧ Carga Alcalina

〓 Kappa

⇩ Viscosidade

⇩ Rendimento





CONCLUSÕES

⇧ Kappa
Até 20

⇧ Viscosidade

Rendimento

Resistência polpa

Kappa
> 20

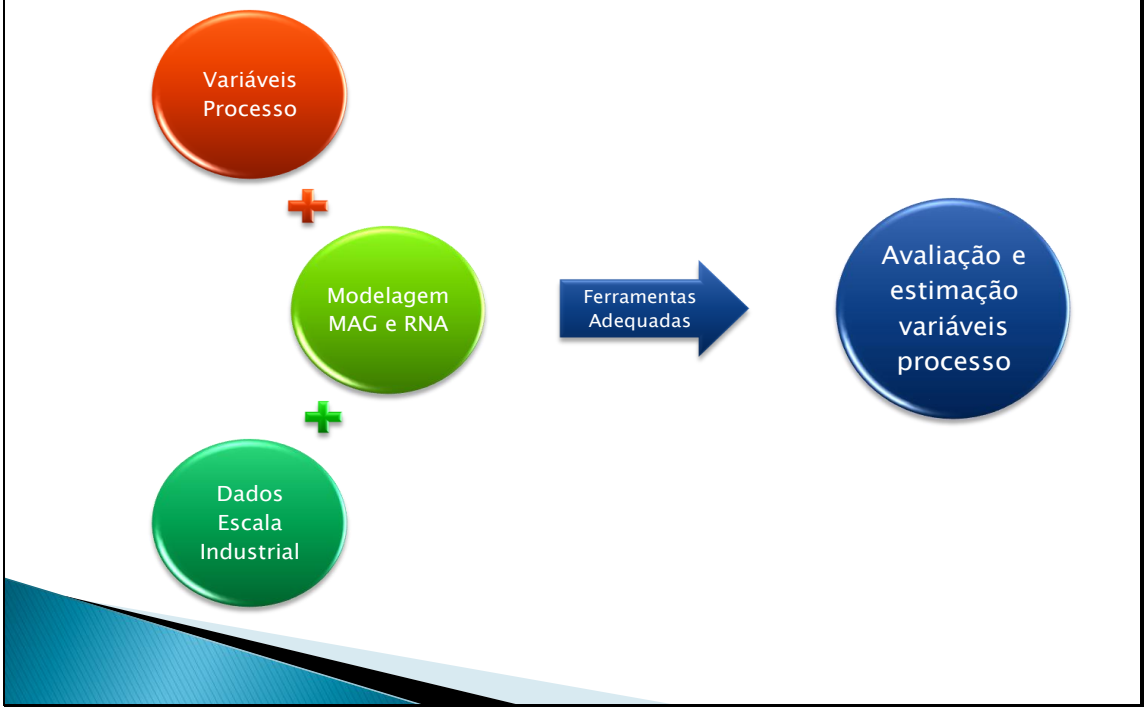
⇧ Rejeito

Reagentes Branqueamento

Dióxido Cloro ⇧ Custo Produção

Toxicidade

CONCLUSÕES


Variáveis Processo
Modelagem MAG e RNA
Dados Escala Industrial
Ferramentas Adequadas
Avaliação e estimação variáveis processo