



UNIVERSIDADE FEDERAL DE ALAGOAS
CENTRO DE TECNOLOGIA – CTEC
ENGENHARIA QUÍMICA



Dhandara Lucymilla Conceição da Silva

**DESENVOLVIMENTO DE ESTRATÉGIAS PARA PREDIÇÃO DE INCRUSTAÇÃO EM
TROCADORES DE CALOR BASEADAS EM TÉCNICAS DE APRENDIZADO DE
MÁQUINA**

MACEIÓ

2022

DHANDARA LUCYMILLA CONCEIÇÃO DA SILVA

**DESENVOLVIMENTO DE ESTRATÉGIAS PARA PREDIÇÃO DE INCRUSTAÇÃO EM
TROCADORES DE CALOR BASEADAS EM TÉCNICAS DE APRENDIZADO DE
MÁQUINA**

Trabalho de conclusão de curso apresentado ao curso de Engenharia Química da Universidade Federal de Alagoas, como requisito para obtenção do título de Bacharel em Engenharia Química.

Orientador: Prof. Dr. Rodolfo Junqueira Brandão.
Coorientador: Prof. Dr. Frede de Oliveira Carvalho.

MACEIÓ

2022

Catálogo na fonte
Universidade Federal de Alagoas
Biblioteca Central
Divisão de Tratamento Técnico
Bibliotecária: Taciana Sousa dos Santos – CRB-4 – 2062

S586d Silva, Dhandara Lucymilla Conceição da.
Desenvolvimento de estratégias para predição de incrustação em trocadores de calor baseadas em técnicas de aprendizado de máquina / Dhandara Lucymilla Conceição da Silva. – 2022.
55 f. : il. color.

Orientador: Rodolfo Junqueira Brandão.
Coorientador: Frede de Oliveira Carvalho.
Monografia (Trabalho de Conclusão de Curso em Engenharia Química)
– Universidade Federal de Alagoas. Centro de Tecnologia. Maceió, 2022.

Bibliografia: f. 51-55.

1. Trocadores de calor. 2. Incrustação. 3. Sensores virtuais. 4. Aprendizado de máquina. I. Título.

CDU: 66.0: 004.8

RESUMO

Um dos principais equipamentos utilizados para aquecer, resfriar ou condensar correntes de fluidos é o trocador de calor. Todavia a formação de incrustação nesses equipamentos é um dos problemas mais críticos na indústria, fazendo com que haja diminuição da eficiência de troca e a obstrução da passagem do fluido. Dessa maneira, a incrustação leva a gastos excessivos, paradas indesejadas e a perda total do material, fazendo-se necessário a parada do processo para a remoção do material incrustado a fim de uma boa eficiência térmica do equipamento. Uma alternativa para determinar o grau de incrustação num trocador de calor é na forma de sensores virtuais, os quais são modelos preditivos que podem descrever um parâmetro ou variável em função de outros de fácil medição, possibilitando a capacidade de monitoramento, análise de possibilidades, previsões, podendo ser construído utilizando modelagem fenomenológica, estatística ou baseada em sistemas inteligentes, mais especificamente com aplicação de técnicas de aprendizado de máquina (ML) como RNA e SVM. Nesse sentido, o objetivo desse trabalho foi desenvolver estratégias para a predição de incrustação em trocadores de calor, a fim de permitir um melhor planejamento das paradas de manutenção e, portanto, melhorar a eficiência do processo. Com isso, o processo foi modelado e simulado a partir de suas características físicas e químicas com auxílio do *software* Aspen para a obtenção e análise dos dados e assim, aplicar técnicas de ML em forma ferramentas computacionais em linguagem *Python* para auxiliar no planejamento das manutenções, fornecendo informações prévias dos níveis de incrustação no trocador em operação. Dessa forma, a partir das estratégias definidas aplicadas com RNA e SVM, os resultados apresentaram um ótimo desempenho com $R^2 > 0,99$ para o modelo estudado, no qual o comportamento se repetiu em ambas as técnicas, independente da sua estrutura, sendo capaz de prever as variáveis envolvidas no trocador de calor com excelente precisão.

Palavras-Chave: Trocadores de calor. Incrustação. Aprendizado de Máquina.

ABSTRACT

One of the main equipments used to heat, cool or condense fluid streams is the heat exchanger and the fouling formation in these equipments is one of the most critical problems in the industry, causing a decrease in the exchange efficiency and obstruction of the fluid passage. Thus, fouling leads to excessive costs, undesired shutdowns, and total loss of material, making it necessary to stop the process to remove the fouled material in order to achieve good thermal efficiency of the equipment. An alternative to determine the degree of fouling in a heat exchanger is in the form of virtual sensors, which are predictive models that can describe a parameter or variable as a function of other easily measured ones, enabling the ability to monitor, analyze possibilities, predictions, and can be built using phenomenological modeling, statistics or based on intelligent systems, more specifically with the application of machine learning (ML) techniques such as ANN and SVM. In this sense, the objective of this work was to develop strategies for the prediction of fouling in heat exchangers, in order to allow better planning of maintenance stops and, therefore, improve process efficiency. Thus, the process was modeled and simulated from its physical and chemical characteristics in Aspen software to obtain and analyze data and thus apply ML techniques in the form of computational tools in Python language to assist in maintenance planning, providing previous information on fouling levels in the exchanger in operation. Thus, based on the defined strategies applied with ANN and SVM, the results showed a great performance with $R^2 > 0.99$ for the model studied, in which the behavior was repeated in both techniques, regardless of their structure, being able to predict the variables involved in the heat exchanger with excellent accuracy.

Keywords: Heat exchangers. encrustation. Machine Learning.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1- Composição de um trocador de calor do tipo casco e tubos.....	14
Figura 2 - Esquemático de resistências presentes no processo.....	15
Figura 3 - Gráfico da Percentagem de aumento na área devido a incrustação.....	17
Figura 4 - Gráfico da resistência total devido a incrustação.....	18
Figura 5 - Curvas típicas de resistência associada à incrustação.....	20
Figura 6 - Algoritmo para a predição da incrustação.	24
Figura 7 - Fluxograma geral de uma modelagem no Aspen Plus.....	25
Figura 8 - Esquema de um neurônio artificial.	29
Figura 9 - Esquema de um <i>Multilayer Perceptron</i>	30
Figura 10 - Arquitetura do SVM utilizada.....	32
Figura 11 - Fluxograma da metodologia desenvolvida no trabalho.	34
Figura 12 - Trocador de calor simulado em contracorrente no software Aspen plus.....	35
Figura 13 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 1.	39
Figura 14 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 2.	40
Figura 15 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 3.	40
Figura 16 - Gráfico do decaimento do coeficiente de transferência de calor no tempo.	42
Figura 17 - Gráfico do decaimento da temperatura de saída do fluido quente no tempo.....	42
Figura 18 - Gráfico do decaimento da temperatura de saída do fluido frio no tempo.....	43
Figura 19 - Gráfico do decaimento da vazão de saída do fluido frio no tempo.	43
Figura 20 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 1 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.	45
Figura 21 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 2 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.	45
Figura 22 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 3 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.	45
Figura 23 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 1 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.....	47
Figura 24 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 2 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.....	47
Figura 25 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 3 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.....	47

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Funções de ativação para RNA.	30
Tabela 2 - Funções kernel para SVM.	32
Tabela 3 - Parâmetros no bloco do trocador de calor especificados no Aspen Plus.	35
Tabela 4 - Parâmetros de entrada do trocador de calor especificados no Aspen Plus.	36
Tabela 5 - Hiperparâmetros utilizados na RNA para a construção da rede.	37
Tabela 6 - Hiperparâmetros utilizados no SVM para a construção da rede.	38
Tabela 7 - Bibliotecas utilizada na implementação das técnicas de aprendizado de máquina.	38
Tabela 8 - Resultados das variáveis de saída do trocador de calor em estado estacionário.	41
Tabela 9 - Métricas quantitativas para a implementação com RNA.	44
Tabela 10 - Métricas quantitativas para a implementação com SVM.	46

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	8
2	OBJETIVOS.....	10
2.1	Objetivo Geral.....	10
2.2	Objetivos Específicos	10
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	11
3.1	Fator de incrustação na indústria	11
3.2	Trocadores de calor tipo casco e tubo.....	14
3.2.1	Coeficiente global de transferência de calor e a incrustação.....	15
3.2.2	Modelos de incrustação para a predição.....	19
3.3	Software Aspen Plus	24
3.4	Aspen Plus Dynamics	26
3.5	Aprendizagem de Máquina.....	27
3.5.1	Redes Neurais Artificiais (RNA).....	28
3.5.2	Máquinas de Suporte de Vetores (SVM).....	31
3.6	Linguagem <i>Python</i>	33
4	METODOLOGIA	34
4.1	Obtenção dos dados	35
4.2	Desenvolvimento das estratégias de predição	37
4.2.1	Estratégia 1	39
4.2.2	Estratégia 2	39
4.2.3	Estratégia 3	40
5	RESULTADOS E DISCUSSÕES	41
5.1	Análise dos dados obtidos.....	41
5.2	Implementação com RNA	44
5.3	Implementação com SVM	46
6	CONCLUSÃO	49
	REFERÊNCIAS	51

1 INTRODUÇÃO

Na maioria dos processos industriais, há a necessidade de se realizar troca térmica entre fluidos. Um dos principais equipamentos é o trocador de calor, que pode ser utilizado para aquecer, resfriar, condensar ou evaporar correntes de fluidos.

Por serem essenciais em muitos processos, os trocadores de calor precisam ser monitorados e controlados para garantir a eficiência energética da planta e um dos principais fatores que fazem com que os trocadores diminuam essa eficiência e, portanto, o coeficiente global de transferência de calor é a incrustação, definido como a formação de depósitos indesejáveis na superfície do equipamento de processo (VALLE, 2012).

Os danos causados pela incrustação nos permutadores são grandes. No trabalho de Silva (2013), pesquisas indicam uma perda de até 0,3% da produção de um país. Eles apontam para a importância de um agendamento adequado das paradas para limpeza. Que pode ser planejada a partir da predição, monitoramento e contramedidas. O trabalho realizado fez contribuições para as duas primeiras.

Uma das formas de controlar esse fenômeno para evitar danos posteriores é saber quando é necessário fazer a limpeza do trocador. Diversos estudos foram realizados para determinar o tempo certo das paradas de manutenção.

Uma ferramenta importante para um resultado mais rápido e eficiente é a simulação computacional. Sua utilização pode ocorrer de diferentes formas de acordo com a demanda específica: otimização, dimensionamento e/ou validação de variáveis de fluidos através de diferentes pacotes termodinâmicos (YANG *et al.*, 2014). Um dos *softwares* mais utilizados para a simulação de plantas industriais é o Aspen.

O monitoramento físico apresenta dificuldades quanto a instalação e custo, o que abre espaço para a alternativa na forma de sensores virtuais, os quais são modelos preditivos que podem descrever um parâmetro ou variável em função de outros, possibilitando a capacidade de monitoramento, análise de possibilidades, previsões, podendo ser construído utilizando modelagem fenomenológica, estatística ou baseada em sistemas inteligentes, mais especificamente com a aplicação de máquinas de aprendizado como RNA e SVM (KADLEC *et al.*, 2009).

A RNA (Rede Neural Artificial) é uma técnica de diagnóstico baseado em sistemas inteligentes é uma poderosa ferramenta para a análise multivariada não-linear que oferece uma alternativa aos métodos estatísticos tradicionais para acompanhamento ideal e determinação do sistema dinâmico e tem atraído atenção considerável. As RNA's são máquinas de aprendizado

baseadas em comportamento de um sistema físico complexo (o cérebro), onde mapeia um conjunto de dados de entrada-saída sem possuir nenhum outro conhecimento prévio do processo, apenas se baseando no histórico dos dados (HAYKIN, 2007).

A SVM (Máquina de Vetores de Suporte) é uma máquina de aprendizado estatístico que se trata de um método computacional de aprendizado de dados baseado na teoria estatística do aprendizado. Esta usa o princípio estrutural da minimização de risco com uma boa habilidade de generalização. Ela pode solucionar o problema dos métodos de prognóstico baseados nas RNA's, pobre generalização de rede e baixa precisão junto com a RNA que se apresenta bem adequado para construção de sensores virtuais (VAPNIK, 1999).

Também, dentre as várias linguagens de programação utilizadas para cálculos de engenharia, destaca-se atualmente o *Python*, por ser gratuita e de código aberto. Além disso, esta linguagem possui um vasto acervo de bibliotecas para solução de diversos tipos de problemas, como cálculos vetoriais, otimização, geração de gráficos, técnicas de aprendizado de máquina e inteligência artificial (SILVA, 2021).

Sendo assim, esse trabalho teve como objetivo aplicar técnicas de Aprendizado de Máquina na forma de rotinas computacionais em linguagem *Python* para a predição de incrustação em trocadores de calor industriais do tipo casco e tubo baseadas em Redes Neurais Artificiais e Máquina de Vetores de Suporte e a partir de dados obtidos por meio de uma simulação dinâmica realizada no *software* Aspen com base nas variações de incrustação ao longo do tempo. E com isso definir estratégias de análise preditiva eficientes para o processo.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Desenvolver estratégias computacionais em linguagem *Python* para a predição de incrustação em trocadores de calor industriais do tipo casco e tubo baseadas em redes neurais artificiais, como também analisar a ocorrência de incrustação a fim de permitir um melhor planejamento das paradas de manutenção e, portanto, melhorar a eficiência do processo.

2.2 Objetivos Específicos

- Estudar o processo de incrustação em trocadores de calor industriais do tipo casco e tubo, bem como a modelagem do processo;
- Estudar e realizar a simulação de trocadores de calor por meio do pacote do *software* Aspen;
- Avaliar os dados obtidos a partir da simulação do trocador de calor;
- Desenvolver estratégias para a construção de um sensor virtual em linguagem de programação *Python* capaz de prever o nível de incrustação em trocadores de calor utilizando técnicas de Aprendizado de Máquina;
- Avaliar a viabilidade do uso técnicas de Aprendizado de Máquina na predição da incrustação em trocadores de calor casco e tubo;
- Avaliar os resultados obtidos em termos de valores numéricos, tempo de execução, dificuldade de implementação e viabilidade.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

De acordo com os objetivos apresentados neste trabalho, foi realizada uma revisão bibliográfica abordando, inicialmente, a modelagem de trocadores de calor e o processo de troca térmica, levando em consideração o estudo do comportamento da formação da incrustação e como esta influencia as variáveis do processo. Em seguida, foram abordados conceitos referentes ao estudo do pacote Aspen para a simulação do problema estudado e, também apresentadas um estudo sobre técnicas de *Machine Learning* aplicado em linguagem *Python*, como alternativa para solução do problema.

3.1 Fator de incrustação na indústria

Para garantir a eficiência energética da planta, os trocadores de calor precisam ser monitorados e controlados e um dos principais fatores que fazem com que os trocadores de calor reduzam essa eficiência e, conseqüentemente, a transferência de calor é a incrustação, definido como a formação de depósitos indesejados na superfície do equipamento de processo, responsável por aumentar a resistência à transferência de calor e queda de pressão, resultando em menor desempenho termo-hidráulico do equipamento (VALLE, 2012).

Durante o processo, materiais, sujeira e produtos químicos presentes no fluido podem se depositar nos equipamentos e tubulações e causar problemas de incrustação. Esses problemas são caros porque aumentam os custos de combustível, causam interrupções operacionais, perda de produção e custos de manutenção. Esses depósitos aumentam a resistência à transferência de energia e reduzem a eficiência da troca de calor, de modo que a temperatura de saída do fluido será menor que a esperada, reduzindo a eficiência de todo o processo. Além disso, o depósito pode obstruir o fluxo de fluido, aumentando sua queda de pressão e perda de carga (SILVA, 2013).

Um método usado na prática para entender o nível de depósitos em um trocador de calor em operação é monitorar a temperatura e a pressão final do trocador de calor ao longo do tempo de uso. À medida que o depósito aumenta, a eficiência da troca de calor diminui, o que pode ser observado em toda a faixa de temperatura e a diferença de pressão aumenta (SONG, 1997). Por definição, a eficiência ou efetividade de um trocador pode ser calculada pela Equação 18:

$$\varepsilon = \frac{T_{C2} - T_{C1}}{T_{h1} - T_{C2}} \left(\frac{C_C}{C_{min}} \right) \quad (18)$$

em que T_{C1} e T_{C2} são as temperaturas de entrada e de saída do fluido frio, respectivamente, T_{h1} é a temperatura de entrada do fluido quente, C , é a capacitância térmica do fluido frio e C_{min} é

a menor capacitância térmica dentre os fluidos. Considerando que o fluido frio tem menor capacidade térmica, a Equação 1 se simplifica para a Equação 19:

$$\varepsilon = \frac{T_{C2} - T_{C1}}{T_{h1} - T_{C2}} \quad (19)$$

Jerônimo *et al.* (1997) definem um índice de incrustação como sendo a Equação 20:

$$\varepsilon = \frac{\varepsilon_{limpo} - \varepsilon_{medido}}{\varepsilon_{limpo} - \varepsilon_{sujo}} \quad (20)$$

em que ε_{limpo} é a eficiência do trocador limpo, ε_{medido} é a eficiência do trocador num instante de tempo qualquer (real), e ε_{sujo} é a eficiência na condição de extrema incrustação (teórico). Assim, o cálculo desses índices é o método mais simples para se monitorar a incrustação em um trocador de calor.

O processo de formação da deposição é em geral complexo e a ocorrência de incrustação pode ser classificada segundo sua natureza físico-química em seis diferentes mecanismos (SADOUK, 2009; LANEZ; KHADER, 2015).

- Biológica: consiste na fixação e crescimento de microrganismos na superfície de troca de calor. Predominantemente presente quando um dos fluidos de troca de calor é água;
- Corrosão: envolve reações químicas ou eletroquímicas entre a superfície de troca de calor e o líquido circulante que levam à corrosão do material, levando a alterações em suas propriedades térmicas e, além disso, favorecendo a formação de incrustações;
- Cristalização ou precipitação: consiste na dissolução de cristais em fluidos saturados devido a variações na solubilidade e posterior precipitação na superfície. Esse processo geralmente ocorre quando um dos fluidos de troca de calor é água ou outro fluido que contém sais naturalmente dissolvidos;
- Particulada: consiste na deposição sobre uma superfície de partículas suspensas no líquido. Este tipo de deposição é fortemente influenciado por fatores como concentração de partículas, velocidade de escoamento e temperatura do líquido;
- Químico: a deposição está ligada a reações químicas entre os vários componentes que compõem o fluido circulante, neste caso a superfície não participar como reagente. No entanto, a superfície de troca de calor pode servir como um catalisador, como ocorre nas reações de craqueamento, polimerização e autoxidação. Este tipo de separação está

presente em muitas indústrias, como na indústria petroquímica para resfriamento de gases e óleos;

- Solidificação: é o congelamento de um líquido puro ou do componente de maior ponto de solidificação. A separação de ceras de correntes quentes, quando em contato com superfícies frias consiste em um exemplo típico deste tipo de deposição. Tal mecanismo ocorre em processos com operação de temperaturas baixas ou próximas à temperatura ambiente.

Esses mecanismos podem ocorrer de forma dependente ou independente. A taxa de deposição é afetada pelas condições do processo do trocador, como a natureza do fluido, vazão, temperaturas dos fluidos, temperatura da parede, material de construção do equipamento, grau de acabamento da superfície, como rugosidade ou tipo de revestimento interno. Em baixas temperaturas, os depósitos são mais expressivos em tubos de fluido frio. Isso ocorre porque a solubilidade da maioria das substâncias aumenta em proporção direta à temperatura (SILVA, 2013).

Para facilitar a quantificação do efeito da deposição, costuma-se usar um parâmetro definido como fator de incrustação ou fator de sujeira (*fouling factor*). Por dimensão, é o inverso do coeficiente de transporte de energia por convecção. Portanto, quanto maior a incrustação, mais depósitos e maior a resistência à troca de calor. O fator de incrustação deve ser considerado num projeto de trocador de calor, pois a área de troca térmica calculada deve ser suficiente para as necessidades do processo quando o trocador está novo (limpo) e quando está em operação há algum tempo (havendo formação de incrustação). Como o valor desse fator é difícil de ser previsto, essa deficiência constituirá uma das causas principais da imprecisão no projeto de um trocador de calor (SONG, 1997).

Quando a incrustação atinge um nível crítico, é necessário retirar o trocador de operação para a realização de atividades de manutenção. o trocador de calor deve ser retirado de serviço para realizar a manutenção. Eles podem ser limpos com jatos de água sob pressão, ácidos de limpeza, jateamento de areia, dentre outros métodos de limpeza. Para evitar as perdas devido às paradas para manutenção, é importante investigar métodos para inibir ou mitigar os efeitos de depósitos e incrustações e o que pode ser alterado na malha de controle para compensar esses efeitos, garantindo uma maior produtividade a fim de reduzir a frequência das paradas (SILVA, 2013).

Em geral, uma indústria possui um número limitado de opções de controle das incrustações, sendo elas: a modificação das condições de operação; a modificação do equipamento; a limpeza

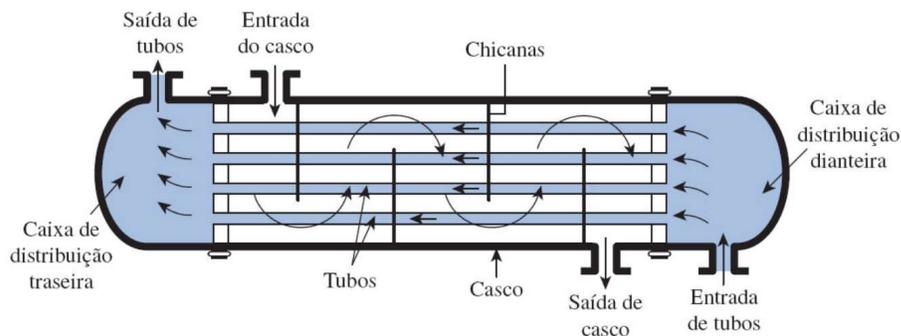
com maior frequência dos trocadores de calor; o aumento da quantidade de aditivos químicos. Embora essas opções possam ser usadas para controlar o problema de incrustação, é importante poder monitorar de maneira fácil e barata os efeitos da incrustação nesses trocadores de calor. (TONIN; NEGRÃO, 2003).

3.2 Trocadores de calor tipo casco e tubo

De acordo com Çengel (2009 *apud*. NETO, 2014), os trocadores de calor do tipo casco e tubo são comumente usados para diferentes condições de operação e capacidade, como: altas pressões e temperaturas, atmosferas altamente corrosivas, líquidos altamente viscosos, misturas multicomponentes etc. Este equipamento é fabricado em uma ampla variedade de materiais e tamanhos e, devido ao seu tamanho e peso relativamente grandes são vastamente utilizados em processos industriais.

São equipamentos configurados basicamente por um feixe de tubos envolvidos por um casco, com os eixos paralelos entre si. A troca térmica ocorre com um dos fluidos passando dentro dos tubos e o outro entre o casco e o feixe. Os principais componentes dos trocadores de calor casco e tubo são: o cabeçote de entrada ou caixa de distribuição dianteira, a casco ou camisa, os tubos ou feixe tubular e o cabeçote de retorno ou caixa de distribuição traseira (NETO, 2014), conforme Figura 1.

Figura 1- Composição de um trocador de calor do tipo casco e tubos.



Fonte: Adaptado de Çengel (2009).

Esses trocadores de calor são classificados de acordo com sua configuração específica, incluindo o número de passagens de casco e tubo. Por exemplo, em sua forma mais simples, os tubos passam entre o casco apenas uma vez, são chamados trocadores de calor de um único passe nos tubos e no casco. Em dispositivos onde os tubos fazem meia volta dentro do casco, eles são chamados de trocadores de calor de um único passe no casco e dois passes nos tubos.

Da mesma forma, um dispositivo que inclui dois passes no casco e quatro nos tubos é chamado de trocador de calor de dois passes no casco e quatro passes nos tubos (NETO, 2014).

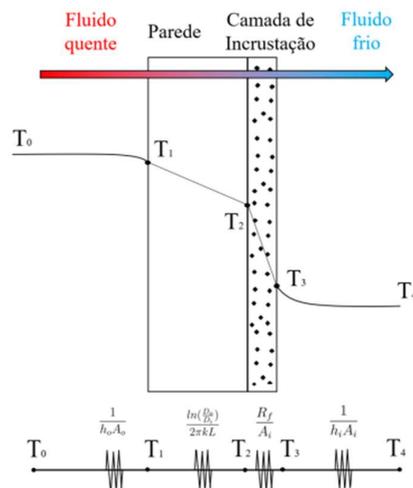
Para trocadores de calor, é conveniente trabalhar com um coeficiente de transferência total U , que é definido como a resistência térmica total do sistema. Assim, este coeficiente fornece uma medida da capacidade geral de uma série de barreiras condutivas e convectivas para transferir calor que se refere-se a quão bem o calor é conduzido através de uma série de meios resistentes. é influenciado pela espessura e condutividade térmica dos meios através dos quais o calor é transferido. Quanto maior o coeficiente, mais facilmente o calor é transferido de sua fonte para o produto sendo aquecido (RUBBO, 2014).

3.2.1 Coeficiente global de transferência de calor e a incrustação

Os trocadores de calor, quando estão em serviço, estão sujeitos a diversas reações entre o fluido e o material constituinte da parede, como à deposição de impurezas dos fluidos e formação de ferrugem. Com isso, torna-se necessário considerar uma resistência térmica adicional, chamado de fator incrustação ou deposição (R_f) cujo seu valor depende da temperatura de operação, velocidade do fluido e tempo de operação do trocador de calor (INCROPERA *et al.*,2008).

Segundo Çengel (2009), associam-se todas as resistências térmicas no caminho do fluxo de calor, assumindo que o fluido quente está dentro do tubo. Pode-se observar na Figura 2 um esquemático das resistências térmicas presentes neste caso. Além disso, a incrustação aumenta em função do aumento de temperatura e diminuição da velocidade do escoamento.

Figura 2 - Esquemático de resistências presentes no processo.



Fonte: Meloni e Sousa, 2019.

Considerando a adição da resistência do fator de incrustação, associada à Equação 1, a resistência térmica total fica:

$$R_{total} = \frac{1}{h_i A_i} + \frac{R''_{f,i}}{A_i} + \frac{\ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2\pi k L} + \frac{1}{h_e A_e} + \frac{R''_{f,e}}{A_e} \quad (1)$$

Onde R''_f é o fator de deposição ou incrustação, definida como qualquer tipo de material indesejável em superfícies em trocador de calor, a incrustação é responsável pelo aumento da resistência à transmissão de calor e da queda de pressão, provocando um menor desempenho do equipamento.

Agora, considerando dois trocadores de calor postos em operação para executar um determinado processo:

- a) Trocador de calor limpo ("*clean*"), conforme a Equação 2:

$$\dot{Q}_c = U_c A_c \Delta T_{m,c} \quad (2)$$

- b) Trocador de calor com incrustação ("*fouled*"), conforme a Equação 3:

$$\dot{Q}_f = U_f A_f \Delta T_{m,f} \quad (3)$$

Como requisitos de projeto, tem-se que:

$$\dot{Q}_c = \dot{Q}_f \quad (4)$$

$$\Delta T_{m,c} = \Delta T_{m,f} \quad (5)$$

Desta forma, substituindo, obtém-se a Equação 6:

$$\frac{1}{U_f A_f} = \frac{1}{U_c A_c} \quad (6)$$

Admitindo que as eficiências das superfícies são unitárias e substituindo na Equação 1, tem-se as Equações 7 e 8:

$$\frac{1}{U_f A_f} = \frac{1}{h_i A_i} + \frac{R''_{f,i}}{A_i} + R_w + \frac{1}{h_e A_e} + \frac{R''_{f,e}}{A_e} \quad (7)$$

$$\frac{1}{U_c A_c} = \frac{1}{h_i A_i} + R_w + \frac{1}{h_e A_e} \quad (8)$$

Definindo a área externa como referência para os trocadores "limpo" e "sujo", e tomando como exemplo trocadores tubulares, pois é uma hipótese implícita de que a incrustação altera muito mais o comprimento do que o perímetro, tem-se as Equações 9 e 10:

$$A_f = \pi D_e L_f \quad (9)$$

$$A_c = \pi D_e L_c \quad (10)$$

Substituindo com as Equações 9 e 10, obtêm-se as Equações 11 e 12:

$$\frac{1}{U_f} = \frac{D_e}{h_i D_i} + \frac{R''_{f,i} D_e}{D_i} + \frac{D_e \ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2k_w} + \frac{1}{h_e} + R''_{f,e} \quad (11)$$

$$\frac{1}{U_c} = \frac{D_e}{h_i D_i} + \frac{D_e \ln\left(\frac{D_e}{D_i}\right)}{2k_w} + \frac{1}{h_e} \quad (12)$$

Assim, usando as duas Equações 11 e 12 acima, pode-se definir o fator de incrustação total, conforme a Equação 13:

$$\frac{1}{U_f} = \frac{1}{U_c} + R''_{f,TOTAL} \quad (13)$$

Onde:

$$R''_{f,TOTAL} = \frac{R''_{f,i} D_e}{D_i} + R''_{f,e} = \frac{R''_{f,i} A_e}{A_i} + R''_{f,e} \quad (14)$$

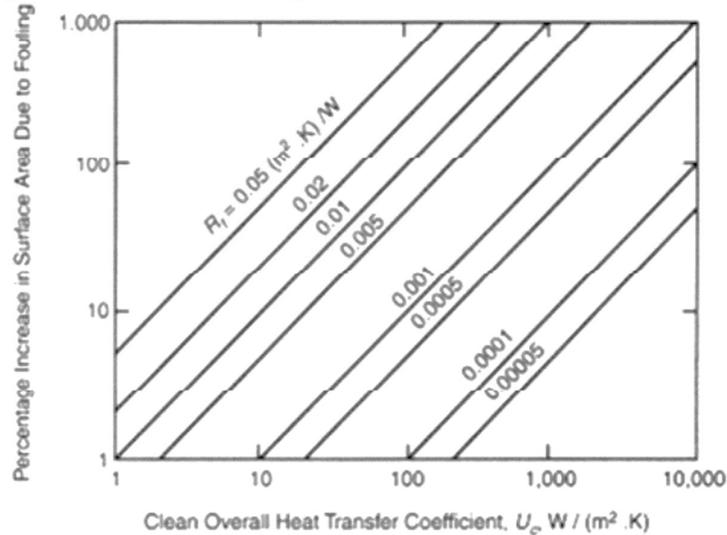
Substituindo na Equação 6, obtêm-se a Equação 15:

$$\frac{A_f}{A_c} = 1 + U_c R''_{f,TOTAL} \quad (15)$$

Sendo $U_c R''_{f,TOTAL}$ a área adicional em consequência da incrustação.

No gráfico da Figura 3, percebe-se um aumento percentual da área de um trocador devido à incrustação.

Figura 3 - Gráfico da Percentagem de aumento na área devido a incrustação.



Fonte: Incopera *et al.*, 2008.

Para U_c baixos, entre 1 e 10 W/m²K e mesmo com uma $R''_{f,TOTAL}$ alta de 0,005 m²K/W, não ocasiona um aumento significativo na área. Para U_c altos entre 1000 e 10000 W/m²K e uma $R''_{f,TOTAL}$ baixa de 0,0005 m²K/W, pode causar um aumento na área de 100% ou mais.

Além da resistência de incrustação total, o fator de incrustação pode ser calculado a partir do fator de limpeza (“*cleanliness factor*”) que é bastante usado em projeto, de acordo com a Equação 16 abaixo:

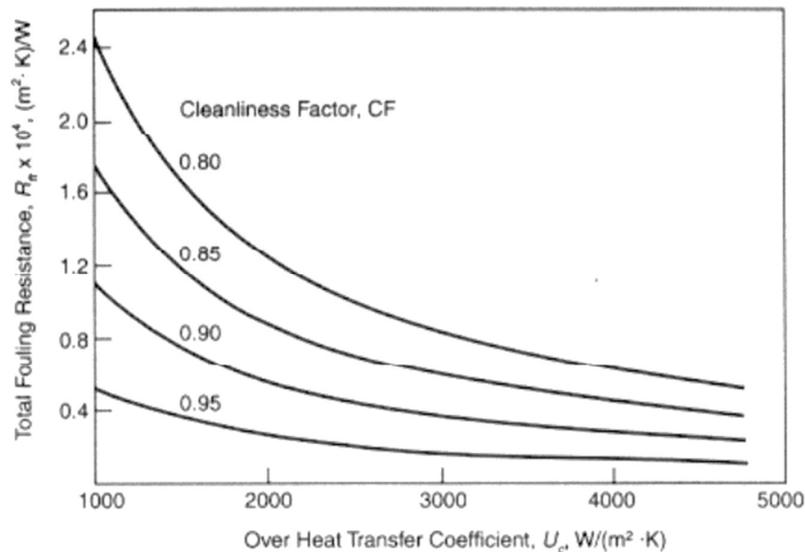
$$CF \equiv \frac{U_f}{U_c} \quad (16)$$

Combinando a Equação 13 com a Equação 16, obtém-se a Equação 17:

$$R''_{f,TOTAL} = \frac{1-CF}{U_c CF} \quad (17)$$

A partir da Equação 17, obtém-se o seguinte gráfico da Figura 4:

Figura 4 - Gráfico da resistência total devido a incrustação.



Fonte: Incopera *et al.*, 2008.

Se U_c é baixo, um dado CF acomoda um $R''_{f,TOTAL}$ maior e se U_c é alto, um dado CF não tolera $R''_{f,TOTAL}$ elevado.

Esse fator é comum em projeto, a especificação, a priori, de um valor para o fator de limpeza, assim, para um dado valor de CF e de $R''_{f,TOTAL}$, conhece-se o valor de projeto que o valor de projeto que U_c deve possuir.

Nesse sentido, foi considerada essa modelagem matemática para entender como a incrustação influencia graficamente no desempenho do trocador de calor em operação.

3.2.2 Modelos de incrustação para a predição

A manutenção planejada nos trocadores de calor é a solução mais comum para combater a incrustação nas indústrias, além do monitoramento da qualidade da água de resfriamento em alguns casos, e, pensando-se no projeto do equipamento levar em conta as geometrias, materiais da superfície, entre outras condições. Porém, a melhor solução do problema está na determinação prévia do momento certo de limpar o trocador, ou seja, como identificar mais rapidamente a incrustação e agir antes que ela evolua. Para isso, são realizados estudos que envolvem simulações computacionais para que se preveja o fenômeno da incrustação antes que ele aconteça (GODKE; PARISE, 2018).

Além do uso das técnicas de *Machine Learning*, existem outros métodos para prever incrustações em trocadores de calor. Os estudos sobre os valores da taxa de incrustação foram inicialmente baseados em modelos empíricos e relações matemáticas, que foram aprimoradas por estudos posteriores. Geralmente são necessários dados para os cálculos como: Propriedades dos fluidos em estudo e o dimensionamento do trocador de calor utilizado no processo (FIORENTIN *et al.*, 2004).

O desenvolvimento das equações que descrevem o fenômeno de incrustação passou por várias abordagens. Inicialmente, caracterizou-se por equações ligando a evolução da sujeira ao longo do tempo através de constantes empíricas, e então, através dos chamados modelos empíricos, sendo sua formulação mais completa a proposta por Epstein (1983).

McCabe e Robinson (1924) foram pioneiros no estudo da caracterização e previsão de fenômenos de incrustação e na análise de taxas de deposição em evaporadores de fluxo de calor constante. Os autores propuseram a seguinte Equação 21:

$$R_f = \frac{\left[\left(1 + a_1 \frac{1}{U_o^2} t \right)^{\frac{1}{2}} - 1 \right]}{U_o} \quad (21)$$

Nessa equação, a_1 é a constante empírica a ser determinada de acordo com o problema; U_o , o coeficiente global de transferência de calor para o trocador limpo; R_f , o fator de resistência associada ao fenômeno de incrustação; e t , o tempo.

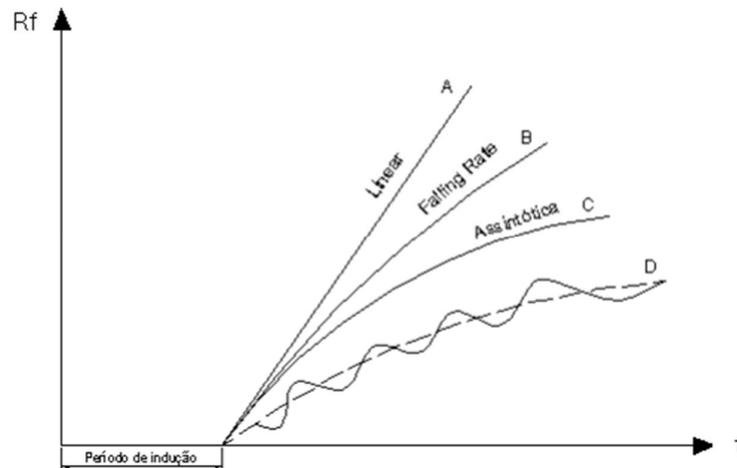
O início da década de 1950 foi marcado pela publicação de inúmeros estudos que tentavam correlacionar o fenômeno de incrustação com a redução na troca de calor, estes foram publicados no “*Standards of The Tubular Exchangers Manufacturers Association*” ou TEMA, que foram posteriormente revisados por Müller-Steinhagen (2011).

A Figura 5 é uma idealização para mostrar a evolução da incrustação ao longo do tempo. A forma da curva está relacionada aos mecanismos envolvidos durante a formação da incrustação. Se a taxa de deposição for constante e a taxa de remoção for insignificante, ou se a diferença entre a taxa de deposição e a taxa de remoção for constante, a curva que representa a evolução da incrustação assume a forma da curva A. Esse tipo de incrustação geralmente representa depósitos difíceis de remover.

A incrustação assintótica, representada pela curva C, ocorre quando a taxa de deposição é constante e a taxa de remoção é proporcional à espessura da camada incrustante. Isso indica que a força de cisalhamento na superfície da camada está aumentando ou que outros mecanismos que afetam a estabilidade da camada estão ocorrendo.

A incrustação do tipo “*falling rate*”, mostrado na curva B fica entre as curvas de incrustação linear e assintótica. Tal comportamento ocorre quando a taxa de deposição é inversamente proporcional à espessura da camada incrustante. Uma mudança periódica nas condições de operação, comum em refinarias de petróleo, resulta na configuração “dente de serra” mostrada na curva D.

Figura 5 - Curvas típicas de resistência associada à incrustação.



Fonte: Muller-Steinhagen, 2011.

As equações que representam os modelos de incrustação geralmente se ajustam de conforme as curvas mostradas na Figura 5. Kern e Seaton (1966) aprimoraram o modelo de caracterização de incrustações propondo que este fenômeno é composto por, além do termo de deposição, um termo de remoção conforme mostrado na Equação 22 a seguir. Essa nova consideração reformulou a forma da equação de caracterização de incrustação e incluiu como o limite para incrustação.

$$R_f = R_f^*[1 - e^{(-a_2 t)}] \quad (22)$$

Em que, a_2 corresponde à constante empírica, a ser determinada de acordo com o problema e R_f^* , o valor limítrofe da incrustação.

Embora o modelo de Kern-Seaton e o estudo dos mecanismos de incrustação representem um importante avanço na compreensão do processo físico de deposição e remoção de partículas em superfícies de troca de calor, Taborek *et al.* (1972) mapeou a relação entre diferentes mecanismos de incrustação e diferentes condições de operação (MÜLLER-STEINHAGEN, 2011). Taborek *et al.* (1972 *apud.* RMIEWS, 1977) utilizou o conceito de deposição e remoção proposto por Kern-Seaton para postular um modelo abrangendo as propriedades químicas da água e seu impacto na resistência à incrustação.

De acordo com os estudos de Taborek *et al.* (1972 *apud.* RMIEWS, 1977) uma nova abordagem de caracterização de escalas foi utilizada pelos pesquisadores. Nessa concepção, os modelos propostos foram chamados de "modelos mecanicistas". Com base em quatro mecanismos básicos, o fenômeno de incrustação desde então foi dividido em reação química, transporte de massa, deposição e evaporação, que podem ocorrer simultaneamente, em combinações ou individualmente (BOMBARDELLI *et al.*, 2005).

Como parte dessa nova metodologia, Fernández-Baujin e Solomon (1976) propuseram um modelo simplificado, aplicado apenas a superfícies planas, no qual são considerados os mecanismos de transferência de massa e reação química. O modelo proposto tem a forma na seguinte Equação 23:

$$\frac{dR_f}{dt} = \frac{\alpha}{\rho_{di}\lambda_{di}} \left(\frac{C_b}{\frac{1}{k_{diff}} + \frac{1}{k_r}} \right) \quad (23)$$

Este modelo é composto por dois termos: um diz respeito à difusão; a outra por reação química, sendo a taxa de incrustação determinada pela etapa mais lenta. Onde α é o coeficiente estequiométrico; C_b , a concentração do precursor de incrustação; λ_{di} e ρ_{di} , a condutividade térmica e a densidade do material depositado, respectivamente; e k_{diff} e k_r são as constantes de difusão e reação química, respectivamente, ambas de primeira ordem.

Reduzindo a contribuição da difusão para um parâmetro de probabilidade "¶", dada a sua complexidade de determinação, uma vez que as reações químicas são dependentes da temperatura e podem ser relacionadas pelo termo de Arrhenius, obtém a Equação 24 sugerida por Paterson e Fryer (1988):

$$\frac{dR_f}{dt} = \frac{\alpha}{\rho_{di}\lambda_{di}} \forall V k_r C_b \exp\left(\frac{-E_a}{RT}\right) \quad (24)$$

Onde, T corresponde à temperatura da superfície de troca térmica; R , à constante dos gases ideais; V , ao volume de reação; e E_a , à energia de ativação da reação que leva à formação de material sobre a superfície.

Crittenden e Kolaczowski (1979) propuseram uma melhoria introduzindo um termo referente ao mecanismo de remoção de contaminantes; A equação que descreve o modelo de incrustação é dada pela Equação 25, em que o fator C_i corresponde à concentração de agente incrustante e k_{diff2} é o fator de difusão associado ao fenômeno de remoção.

$$\frac{dR_f}{dt} = \frac{\alpha}{\rho_{di}\lambda_{di}} \left(\frac{C_b}{\frac{1}{k_{diff}} + \frac{1}{k_r}} \right) - k_{diff2} C_i \quad (25)$$

Epstein (1983) consolidou as diferentes fases da incrustação e seus diferentes mecanismos de deposição. A partir de então, foi modelada como um processo de quatro etapas: transporte, reação, fixação e remoção. Este modelo permitiu uma abordagem mais sistemática para estudar e mitigar a incrustação em trocadores de calor (MÜLLER-STEINHAGEN, 2011).

Em 1995, Ebert e Panchal (1995) propuseram o denominado “*threshold model*”, o modelo “limítrofe” dada pela Equação 26:

$$\frac{dR_f}{dt} = \alpha_1 Re^\beta \exp\left(\frac{-E_a}{RT_\varepsilon}\right) - \alpha_2 \frac{f}{2} \rho u^2 \quad (26)$$

Na Equação 26, α_1 e α_2 são constantes empíricas da equação; β , a relação entre o coeficiente de transferência de calor entre o lado do casco e o dos tubos; Re , o número de Reynolds.

Após a consolidação realizada por Epstein (1983) e o modelo proposto por Ebert e Panchal (1995), diversos estudos foram publicados com base nos modelos desenvolvidos por esses autores. Saleh *et al.* (2003) propuseram um modelo para a resistência da incrustação mostrada na Equação 27:

$$\frac{dR_f}{dt} = \alpha_4 P^y u^c \exp\left(\frac{-E_a}{RT_s}\right) \quad (27)$$

Em que, α_4 , y e c correspondem às constantes empíricas determinadas de acordo com o problema, e P , à pressão do sistema.

Por fim, Nasr e Givi (2006) propuseram um modelo baseado no de Ebert-Panchal (1995), dado pela equação a seguir. Em que α_5 e α_6 são constantes empíricas do modelo, e T_f , a temperatura do fluido, conforme a Equação 28 abaixo:

$$\frac{dR_f}{dt} = \alpha_5 Re^{-0,8} \exp\left(\frac{-E_a}{RT_s}\right) - \alpha_6 Re^{0,4} \quad (28)$$

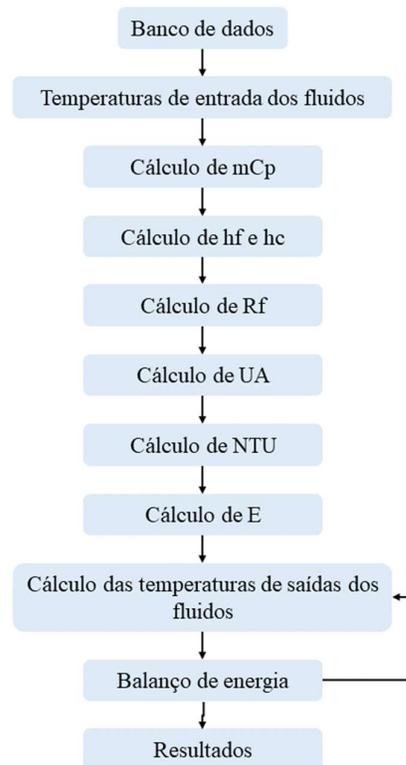
Apesar das melhorias e que foram feitas no campo científico ao longo dos anos, esses modelos ainda contam com constantes empíricas, tornando cada estudo de caso único e específico. A definição da equação de caracterização de incrustações consiste em uma etapa fundamental e crítica, pois deve prever seu comportamento de forma satisfatória e deve abranger todos os mecanismos e etapas presentes como da necessidade de uma determinação de fatores empíricos, se necessário.

Entre os vários estudos sobre a caracterização de incrustações na literatura, observa-se que a aproximação do fator de incrustação na equação do modelo pode ser feita de diferentes formas, sendo a formulação mais completa a descrita por Equação 29 abaixo. Esta equação é comumente usada para dimensionar trocadores de calor. É importante observar que os fatores de incrustação para o interior e o exterior do trocador de calor já estão incluídos (MÜLLER-STEINHAGEN, 2011).

$$\frac{1}{UA} = \left(\frac{1}{h_i} + R_{fi}\right) \frac{1}{A_i} + R_{parede} + \left(\frac{1}{h_o} + R_{fo}\right) \frac{1}{A_o} \quad (29)$$

Outra forma explorada que abrange melhor as possibilidades de diferentes condições de velocidade do fluido é a utilização de um método iterativo que considera como valores de entrada: parâmetros geométricos do trocador de calor, propriedades termofísicas dos fluidos e suas temperaturas de entrada e saída. Usando essas informações, a sequência de cálculos é realizada conforme mostrado na Figura 6 (MADI *et al.*, 2004).

Figura 6 - Algoritmo para a predição da incrustação.



Fonte: Adaptado de Godke e Parise, 2018.

Embora possa ser adaptado a outras situações de processo, este método requer muitas variáveis para os cálculos de previsão. A ideia da modelagem utilizando-se técnicas de Aprendizado de Máquina é poder prever a degradação do desempenho a partir de uma única medição para vários tipos de processos e este tipo de abordagem tem sido bastante difundida devido à possibilidade de determinação de variáveis de difícil medição.

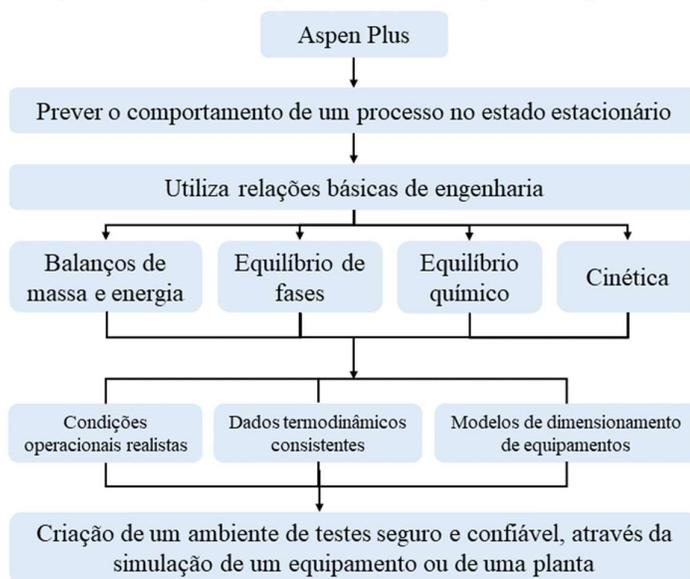
3.3 Software Aspen Plus

A AspenTech foi fundada em 1981 e surgiu de um projeto de pesquisa conjunto entre o Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) e o Departamento de Energia dos EUA, um projeto de Sistema Avançado para Engenharia de Processos (Aspen). O objetivo do projeto de pesquisa foi utilizar o software para maximizar os lucros das fábricas, utilizando como solução a simulação de plantas que aliam precisão e colaboração técnica para melhorar a competitividade e rentabilidade, como também aumentar o desempenho e a produtividade, assim, reduzindo os custos operacionais e economizando tempo (AspenTech, 2018).

O Aspen faz parte de uma série de simuladores para modelagem matemática de processos químicos, desde operações unitárias até plantas químicas e processamento completo, amplamente utilizados na indústria e na ciência, capazes de realizar diversos cálculos importantes para a engenharia química, incluindo cálculos relacionados a desempenho, balanço de massa e energia, equilíbrio líquido-vapor, transferência de calor, transferência de massa, cinética química, fracionamento e queda de pressão (MORAN, 2019).

Para a simulação de processos em regime estacionário sob investigação e em desenvolvimento, o software mais indicado é o Aspen Plus HYSYS, sendo capaz de prever propriedades com um vasto banco de dados capaz de lidar com processos sólidos, líquidos, gasosos e eletrólitos avançados, realizar extrapolação de escalas (*scale-up*) usando menos dados experimentais laboratoriais ou piloto, avaliar os custos, otimizar condições operacionais, dimensionar equipamentos e avaliar rendimentos em diferentes condições de operação, a partir da determinação de uma configuração do diagrama de operações envolvendo: a especificação dos componentes químicos que participam do processo, a escolha do modelo termodinâmico apropriado de acordo com as propriedades dos componentes e das condições operacionais, a definição das operações unitárias do processo, bem como sua sequência e a especificação das correntes que fluem entre essas operações (VASCONCELOS, 2019), conforme mostra o diagrama da Figura 7.

Figura 7 - Fluxograma geral de uma modelagem no Aspen Plus.



Fonte: Adaptado de Vasconcelos, 2019.

O modo padrão do Aspen Plus é o tipo modular sequencial, isto é, cada bloco é resolvido a cada vez, e a quantidade de informação necessária para resolver depende de seus graus de liberdade. A saída de um bloco será a entrada de outro bloco, e no caso de fluxogramas contendo fluxos de reciclo, a dificuldade de convergência aumenta e a precisão do *software* depende da quantidade e qualidade das informações fornecidas pelo usuário (BRITO, 2014).

O Aspen Plus é capaz de simular e modelar o processo de transferência de calor que ocorre no interior do trocador de calor, resolvendo o problema de determinar a vazão de fluxo quente e frio que passa pelo trocador de calor em diferentes condições de fluxo (JANAUN *et al.*, 2016).

3.4 Aspen Plus Dynamics

O Aspen Dynamics suporta a importação de modelagem de processo de estado estacionário para dinâmico (mudanças ao longo do tempo), permitindo análise de cenário de emergência, avaliação de processo de inicialização e desligamento, teste de estrutura de controle e ajuste, como também parâmetros do controlador implantados e design do processo em batelada. Assim, permitindo simulações dinâmicas poderosas para validar melhor o comportamento e a segurança das instalações, se aproximando de um cenário industrial real (AspenTech, 2018).

Antes de iniciar o processo de simulação, o procedimento dinâmico no *software* Aspen Dynamics, deve ser realizada uma simulação de estado estacionário previamente localizada no *software* Aspen Plus. Após a conclusão da simulação de estado estacionário que ocorre no Aspen Plus, todos os resultados essenciais podem ser extraídos e tabulados nos gráficos, nos quais demonstrará o comportamento que corresponde a entradas específicas. Os dados resultantes são então transferidos para o Aspen Dynamics que, particularmente, quando a entrada do procedimento está mudando, a forma como a variável de saída pode replicar ao longo do tempo. Em muitos casos, a dinâmica do processo lida com uma categorização metódica do tempo de reação da variável impactada a uma transformação na variável causal (JAYASINGHE, 2018).

O *software* também permite criar *task's* que estabelecem uma sequência de instruções que definem uma série de ações durante a simulação dinâmica, ou seja, criar rotinas usando a linguagem *Aspen Custom Modeler*. Além disso, o comportamento das principais variáveis do

processo pode ser monitorado ao longo do tempo e as variáveis manipuladas podem ser alteradas para avaliar o impacto dos distúrbios nas variáveis controladas (NUNES *et al.*, 2016).

No Aspen Dynamics, as equações para a descrição de todas as unidades (propriedades físicas, termodinâmica, balanços de massa e energia, conectividade de corrente etc.) são combinadas em um sistema homogêneo de Equações Algébricas Diferenciais (EAD's) ou Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's). Na maioria dos casos, este é um grande conjunto de equações, onde uma pequena fração de variáveis é incluída em qualquer equação única (esparça). Este sistema é resolvido simultaneamente por um método de integração adequado. Normalmente, os algoritmos de Newton ou quasi-Newton são usados. Isso resulta em cálculo iterativo de matrizes Jacobianas e solução de grandes sistemas de equações não lineares (HINDMARSH *et al.*, 2005).

Utilizando o Aspen Dynamics, foi possível realizar perturbações e obter o comportamento das temperaturas e vazões de saída dos fluidos no trocador de calor por meio da aplicação da função matemática do sistema que descreve o comportamento da incrustação ao longo do tempo.

3.5 Aprendizagem de Máquina

O Aprendizado de Máquina é um ramo da inteligência artificial, também conhecido pelo termo em inglês *Machine Learning* (ML), que descreve um algoritmo computacional capaz de realizar uma tarefa específica sem necessariamente programar uma rotina de computação para produzir os resultados específicos. Esses algoritmos se adaptam automaticamente por meio de iterações até que se ajustem e se adaptem de maneira ideal para realizar a tarefa especificada. Para que essa autoadaptação ocorra, existe a fase de aprendizado conhecida como fase de treinamento (EL-NAQA; MURPHY, 2015; ALLENDE-CID, 2019).

Com o cenário tecnológico atual, o ML recebe muita atenção de diferentes áreas da ciência, juntamente com linguagens de programação poderosas e de fácil acesso como por exemplo, *Python* ou R. Além disso, a engenharia química, inserida no contexto da Indústria 4.0, está passando por uma grande mudança rumo à digitalização e automação completa da indústria e da pesquisa. Isso leva à necessidade de uma tomada de decisão simplificada e automatizada com base em dados. Nesse sentido, as técnicas de ML se destacam mais uma vez e estão ganhando espaço em relação às técnicas de modelagem clássicas (SCHWEIDTMANN *et al.*, 2021).

Para o algoritmo de ML, a fase de treinamento é fundamental e pode ser dividida em algumas classificações dependendo da metodologia utilizada, pode-se citar o aprendizado supervisionado e o aprendizado não supervisionado. No supervisionado, um supervisor externo, também chamado de professor, fornece saídas correlacionadas além dos dados de entrada e são ainda classificados como algoritmos de classificação ou regressão. Por outro lado, algoritmos de aprendizado não supervisionado precisam apenas de um conjunto de entrada, reconhecer os padrões neste conjunto, ou seja. eles não têm um observador externo, eles se prestam a métodos de classificação baseados em padrões óbvios no conjunto de dados (ALLOGHANI *et al.*, 2020; BRAGA; LUDERMIR; CARVALHO, 2000).

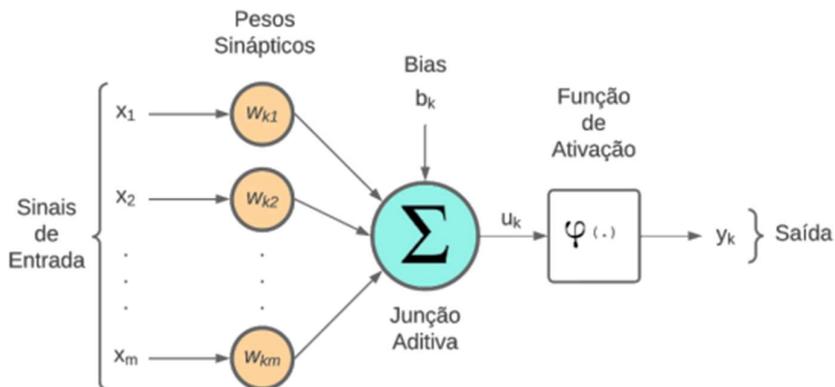
3.5.1 Redes Neurais Artificiais (RNA)

As Redes Neurais Artificiais (RNA) possuem alguns aspectos e propriedades muito especiais, uma vez que Haykin (2007) a definiu como um processador constituído por unidades simples de processamento distribuído em paralelo visto que cada célula computacional usada nas RNA's é chamada de "neurônios".

As RNA's são semelhantes ao cérebro humano e adquirem conhecimento por meio de um processo de aprendizado no qual os pesos são usados sinapticamente para adquirir conhecimento. A rede neural pode produzir saídas que se adaptam às entradas que não estavam presentes no treinamento e por essas e outras razões, as RNA's são muito atraentes para resolver problemas complexos (HAYKIN, 2007; BRAGA; LUDERMIR; CARVALHO, 2000).

Semelhante ao neurônio biológico, temos o neurônio artificial que é a unidade de processamento para executar uma rede de RNA, ele também é composto por três elementos básicos, um conjunto de sinapses, um somador e uma função de ativação (HAYKIN, 2007), como mostrado na Figura 8.

Figura 8 - Esquema de um neurônio artificial.



Fonte: Silva, 2022.

O conjunto de sinapses conta com peso próprio, sendo caracterizado por um sinal x_j na entrada da sinapse j que é conectada ao neurônio k e é multiplicado pelo peso sináptico w_{kj} . A junção aditiva, também chamado de somador tem a função de somar os sinais de entrada de forma ponderada, com base nas sinapses do neurônio, sua saída u_k é a saída do combinador linear (HAYKIN, 2007).

A função de ativação é responsável por limitar a amplitude da saída de um neurônio, razão pela qual também é conhecida como função restritiva. Há também o termo bias aplicado externamente sendo é responsável por aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação. Então, usar as bias b_k tem o efeito de aplicar uma transformação afim à saída u_k , então temos campo local induzido pelo conceito ou potencial de ativação v_k (HAYKIN, 2007).

Matematicamente, pode ser escrito da seguinte maneira, conforme as Equações 30, 31 e 32:

$$u_k = \sum_{j=1}^m w_{kj} x_j \quad (30)$$

$$v_k = u_k + b_k \quad (31)$$

$$y_k = \varphi(v_k) \quad (32)$$

A função de ativação como já apresentada, define a saída do neurônio em termos do campo local induzindo v_k (HAYKIN, 2007). Dentre as funções de ativação, as mais comuns, estão apresentadas na Tabela 1.

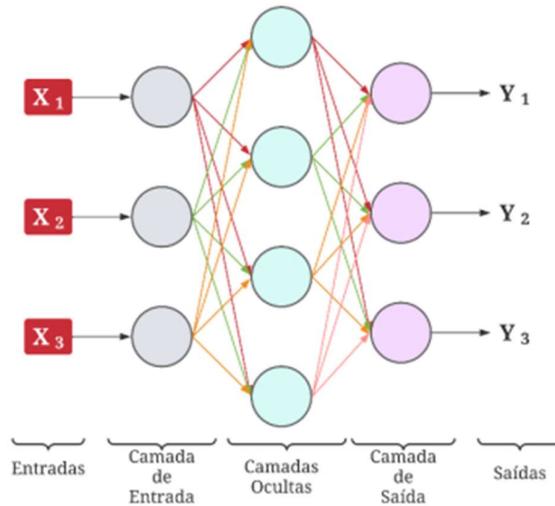
Tabela 1 - Funções de ativação para RNA.

Funções de ativação	
Linear (Identidade)	$f_l(x) = x$
Sigmoidal	$f_s(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}}$
Tangente hiperbólica	$f_t(x) = \tanh(x) = \frac{1 - e^{-x}}{1 + e^{-x}}$
Linear por partes (ReLU)	$f_R(x) = \max(0, x)$

Fonte: Rebouças, 2011.

Entre os diferentes tipos de RNA, o *Multilayer Perceptron* (MLP) é um dos mais comuns e completos. Ele possui várias camadas chamadas camadas de entrada, camadas ocultas e camadas de saída, conforme a Figura 9. A MLP é a forma generalizada de um *perceptron* de camada única (HAYKIN, 2001), capaz de resolver problemas não linearmente separáveis por meio do uso de uma ou mais camadas intermediárias, também chamadas de ocultas. Sendo uma ótima opção devido à sua simplicidade e capacidade de aplicação em uma ampla variedade de campos. Além disso, a configuração MLP torna esse tipo de rede conhecido como *feedforward*, pois as informações no fluxo são sempre orientadas da camada de entrada para a camada de saída, sem *feedback* (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016).

Figura 9 - Esquema de um *Multilayer Perceptron*.



Fonte: Silva, 2022.

A MLP possui treinamento supervisionado, pois o ajuste dos pesos e do limiar de cada neurônio é realizado utilizando os dados de entrada e saída desejada, esse processo de treinamento ocorre utilizando algoritmo de *backpropagation*, também conhecido como

algoritmo de retro-propagação do erro, sendo esse algoritmo um dos responsáveis pela popularidade da MLP (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016).

Segundo Haykin (2007), o MLP tem como principais vantagens, sobre outros algoritmos de aprendizado, o seguinte:

- Grande eficácia para problemas de grande dimensão;
- Lida bem com relações de não linearidade entre variáveis entrada-saída;
- Conjuntos de classificação não limitantes e funções complexas entrada-saída;
- Se os hiperparâmetros forem adequadamente escolhidos, minimiza o risco de *overfitting*.

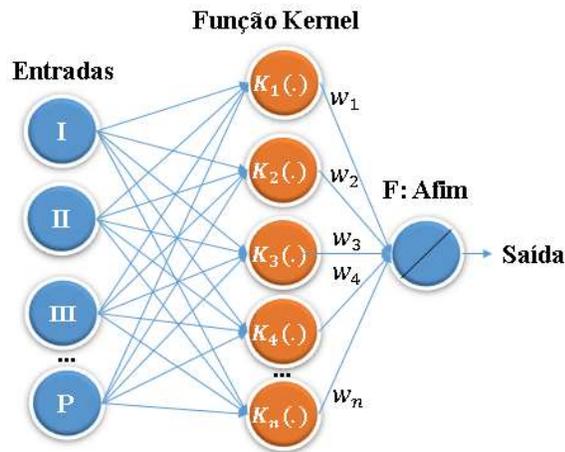
3.5.2 Máquinas de Suporte de Vetores (SVM)

Support Vector Machine, desenvolvido por Vapnik (1999), é um método de aprendizado de máquina estatístico eficaz que é baseado na Teoria de Aprendizagem Estatística e treinado com um algoritmo de Otimização Matemática para minimização de risco estruturada usando métodos de kernel. Além disso, é muito robusto a dados ambíguos e mostra grande eficiência na derivação de relações não lineares que outros métodos estatísticos ou matemáticos muitas vezes não podem derivar. Essa técnica pode ser aplicada para extração de característica, reconhecimento de padrões e Regressão (TOMAR; AGARWAL, 2015).

Outra característica importante do SVM está relacionada ao seu treinamento, que é feito por meio da minimização de uma função quadrática convexa, no qual o problema está relacionado à otimização matemática e poucos parâmetros livres podem ser configurados pelo usuário e não há dependência explícita do tamanho da área de entrada, o que pode ser útil em caso de problemas com muitas entradas.

Dada a complexidade associada à técnica SVM, uma explicação básica do algoritmo de aprendizado mostrado na Figura 10 foi desenvolvida para compreender o estudo de leitura. Para uma compreensão mais profunda do SVM e das teorias que o cercam, sugerido às introduções apresentado nas literaturas (WANG, 2005; BEGG; PALANISWAMI, 2006).

Figura 10 - Arquitetura do SVM utilizada.



Fonte: Adaptado de Liu e Lu, 2014.

Onde P representa o número de entradas e n o número de vetores de suporte.

O conceito básico da regressão SVM é mapear, de forma não linear, os dados originais em um espaço de características dimensional maior e resolver um problema de regressão linear neste espaço.

O RBF (*Radial Basis Function*) é bastante utilizado para resolução de problemas de aprendizado de máquina. O RBF se diferencia do kernel linear, pois nele é possível resolver problemas que originalmente não são linearmente separáveis, através do mapeamento para um espaço de alta dimensão (VIDHYA, 2013).

Funções de kernel são funções do SVM que são muito úteis para fazer uma ponte simples entre algoritmos lineares e não lineares. A função kernel é um dispositivo matemático que permite ao SVM executar uma classificação bidimensional em um banco de dados originalmente unidimensional. O SVM usa funções do kernel para mapear linearmente classes não separáveis do espaço de origem para o espaço do kernel. No SVM, as funções kernel que são comumente utilizadas estão apresentadas na Tabela 2 (VIDHYA, 2013).

Tabela 2 - Funções kernel para SVM.

Funções kernel	
Base radial (RBF)	$K(x_i, x) = \exp\left(-\frac{\ x_i - x\ }{2\sigma^2}\right)$
Base polinomial	$K(x_i, x) = ((x_i x) + b)^d (\geq 0, d \text{ número natural})$
Sigmoide	$K(x_i, x) = \text{tgnh}(k(x_i x) + q) (k > 0, q < 0)$

Fonte: Vidhya, 2013.

Como apenas uma variável precisa ser estimada no RBF, a otimização torna-se menos complexa em relação à função de base polinomial ou sigmoide, pois duas variáveis precisam ser estimadas. Por outro lado, o desempenho do SVM estruturado com a função polinomial ou sigmoide de base é mais preciso que o RBF (HUANG; WANG, 2006; LIU; LU, 2014).

As principais vantagens do algoritmo de SVM sobre outros modelos são:

- Maior precisão do que as redes neurais clássicas e altamente insensível ao *overfitting*;
- Limita o efeito de *outliers* por utilizar pontos de dados relevantes para a construção dos vetores de suporte;
- Grande eficácia quando o número de recursos dimensionais é maior do que as amostras de treinamento;
- Eficiente em espaços dimensionais superiores e conjuntos de dados limitados não-lineares (OTCHERE *et al.*, 2021).

3.6 Linguagem *Python*

O *Python* é uma linguagem de programação interpretada e de alto nível, criada por Guido van Rossum em 1991, sendo uma das principais linguagens utilizadas atualmente para computação científica e cálculos de engenharia, principalmente por ser gratuita e de código aberto (HEYS, 2017).

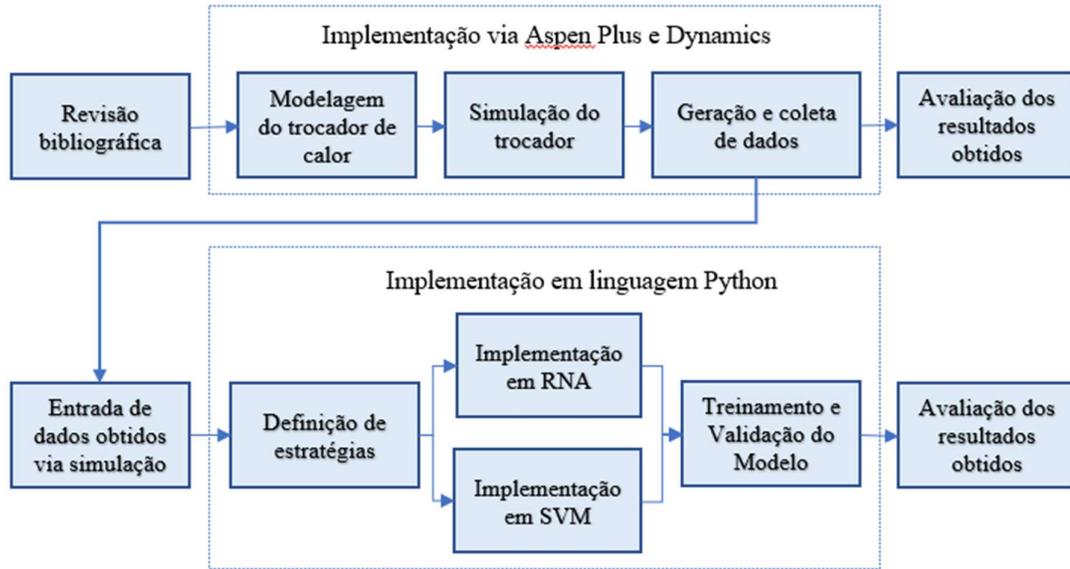
Apesar de ser uma linguagem interpretada, o *Python* apresenta como vantagem uma maior legibilidade de código. A filosofia de códigos limpos e organizados do *Python* é sugerida ao programador, resultando numa maior facilidade na implementação de códigos e posterior facilidade de leitura e entendimento (PINE, 2019).

Separadamente encontra-se bibliotecas específicas para *Machine Learning* em *Python* como o *Scikit-learn* e o *TensorFlow*, já que um dos objetivos do trabalho também é a criação do modelo com *Machine Learning*. Há ainda outras bibliotecas que fornecem todo o suporte para a implementação computacional, é o caso do *Matplotlib*, que permite plotar gráficos, *Numpy*, que permite contém rotinas voltadas para o cálculo numérico, *Scipy* e *Sympy*, que por sua vez conta com rotinas para o cálculo simbólico e *Pandas*, para manipulação de dados (SILVA, 2021). Dessa forma, a linguagem de programação *Python* apresenta gratuitamente bibliotecas para a implementação de algoritmos de aprendizado de máquina.

4 METODOLOGIA

O fluxograma da Figura 11 mostra de forma resumida as principais etapas que foram realizadas na metodologia a para preparação e desenvolvimento deste estudo.

Figura 11 - Fluxograma da metodologia desenvolvida no trabalho.



Fonte: Autora, 2022.

Inicialmente foi realizada revisão bibliográfica acerca do processo de troca térmica a partir da utilização em trocadores de calor, como também sua modelagem. Para a obtenção de dados, o Aspen Plus e Dynamics foi utilizado para a simulação do processo e o estudo de técnicas de *Machine Learning* aplicado em linguagem *Python*. Para melhor entendimento, a execução desse trabalho foi subdividida em duas etapas.

A primeira etapa foi a obtenção dos dados utilizando os simuladores Aspen Plus, no qual o processo foi simulado em estado estacionário com a inserção de dados de operação do trocador. Para obtenção dos dados ao longo do tempo em estado dinâmico com base nas variações de incrustação foi utilizado o Aspen Dynamics com o uso das *task's* em linguagem *Aspen Custom Modeler*, possibilitando assim, o estudo do comportamento do fator de incrustação no trocador de calor a partir dados obtidos.

A segunda etapa se concentrou no desenvolvimento de estratégias utilizando RNA e SVM, a partir do banco de dados gerados da simulação, na qual, foram estabelecidos os critérios de análise e comparação das técnicas utilizadas, utilizando análises quantitativas baseadas em métricas de desempenho disponíveis nas ferramentas disponíveis em *Python*.

Uma abordagem mais detalhada de cada uma das etapas pode ser vista nos tópicos a seguir.

4.1 Obtenção dos dados

Como estudo de caso, realizou-se a simulação de um trocador de calor contracorrente utilizando o componente benzeno (C_6H_6) na corrente de fluido quente e água (H_2O) no fluido frio, ambas as correntes na fase líquida (JÚNIOR, 2019). A simulação foi modelada no pacote AspenTech (Aspen Plus Dynamics) utilizando o modelo termodinâmico NRTL-RK.

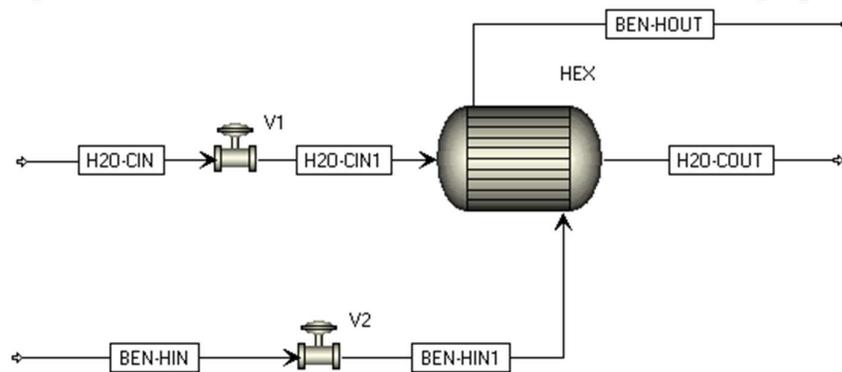
Primeiro, a simulação foi realizada no Aspen Plus em estado estacionário e os parâmetros utilizados no trocador estão dispostos na Tabela 3. O *flowsheet* da simulação pode ser observado na Figura 12.

Tabela 3 - Parâmetros no bloco do trocador de calor especificados no Aspen Plus.

Especificações	
Model Fidelity	Shortcut
Direção das correntes	Contracorrente
Modo de cálculo	Projeto
Especificação do trocador	Temperatura do fluxo quente ($50^{\circ}C$)
Queda de pressão	Saída do lado frio ($-0,1$ bar)

Fonte: Adaptado de Júnior, 2019.

Figura 12 - Trocador de calor simulado em contracorrente no software Aspen plus.



Fonte: Autora, 2022.

A seguir, na Tabela 4, são mostradas as variáveis adotadas na simulação para as correntes de entrada do trocador.

Tabela 4 - Parâmetros de entrada do trocador de calor especificados no Aspen Plus.

Parâmetros	Lado do casco	Lado dos tubos
Fluido em circulação	H ₂ O	C ₆ H ₆
Vazão molar	1000 kmol/h	1000 kmol/h
Temperatura	25° C	75° C
Pressão	1,0 bar	1,0 bar

Fonte: Autora, 2022.

A partir da simulação em estado estacionário, o mesmo foi exportado e simulado em estado dinâmico no Aspen Dynamics para assim ser gerados os dados ao longo do tempo.

O processo de incrustação foi avaliado a partir da inclusão da Equação 33 no modelo, sendo U é o coeficiente global de transferência de calor e U_f é o coeficiente global de transferência de calor após a ocorrência da incrustação, e R_f é a resistência térmica devido à incrustação. Na literatura encontram-se dispostos uma vasta gama de possibilidades para modelagem matemática da resistência térmica no interior de trocadores de calor (JÚNIOR, 2019 *apud*. SANAYE; NIROOMAND, 2007). Neste trabalho foi utilizado um modelo no qual a resistência é linear, como mostrado na Equação 35.

A constante C foi determinada considerando um ano de operação no trocador de calor (8000h), tempo este considerado como necessário para reduzir U para 20% do valor inicial (0,85), conforme as equações a seguir.

$$\frac{1}{U_f(t)} = \frac{1}{U_{Limpo}} + R_f(t) \quad (33)$$

$$\frac{1}{U_f(t)} = \frac{1}{0,85} + R_f(t) \quad (34)$$

$$R_f(t) = Ct \quad (35)$$

Substituindo a Equação 35 na Equação 34, obtém-se:

$$\frac{1}{U_f(t)} = \frac{1}{0,85} + Ct \quad (36)$$

Sendo, $U_f(8000h) = 0,17$, obtém-se:

$$\frac{1}{0,17} = \frac{1}{0,85} + C8000 \quad (37)$$

Portanto, tem-se que $C = 5,8823 \cdot 10^{-4}$, substituindo na Equação 36, tem-se:

$$U_f(t) = \left(\frac{1}{0,85} + 5,8823 \cdot 10^{-4}t \right)^{-1} \quad (38)$$

A Equação 38 apresenta a formulação obtida, a qual foi incorporada para substituir o valor fixo de U (0,85) e descrever como U_f diminui com o tempo (JÚNIOR, 2019).

Com o objetivo de avaliar o impacto na predição das técnicas de aprendizagem de máquina e fazer com que os dados se assemelhem ao cenário industrial, foram estabelecidos limites em torno do *set point* determinado para as temperaturas de entrada do fluido quente e frio, no qual foram gerados valores aleatórios para a temperatura de entrada do fluido quente na faixa de 73 a 77 °C e a temperatura de entrada do fluido frio na faixa de 23 a 27 °C. As vazões de entrada foram mantidas constantes, 95,26 m³/h para o benzeno e 18,12 m³/h para a água.

Segundo Godke e Parise (2018), com o aumento da incrustação, o diâmetro dos tubos do trocador de calor diminui o que causa a queda da vazão ao longo do tempo e conseqüentemente a vazão de saída diminui.

Por fim, foram gerados 442 linhas de dados e armazenados em planilha *Excel* para cada uma das 4 variáveis, correspondentes às temperaturas de entrada e saída e a vazão de saída. Estes, equivalente a 1 ano de 2 meses de um trocador em funcionamento.

4.2 Desenvolvimento das estratégias de predição

Para o desenvolvimento de estratégias utilizando RNA e SVM, a partir do banco de dados gerados da simulação, foram utilizadas as seguintes variáveis:

- Temperatura de entrada do fluido quente (T_{qe});
- Temperatura de entrada do fluido frio (T_{fe});
- Vazão de saída (V_s);
- Tempo (t).

O *soft sensor* teve o objetivo de prever a vazão de saída do trocador a partir das temperaturas de entrada, vazão volumétrica de saída e tempo, variando de acordo com a estratégia definida. Os hiperparâmetros utilizados de cada técnica de aprendizado de máquina estão descritos nas Tabelas 5 e 6 abaixo.

Tabela 5 - Hiperparâmetros utilizados na RNA para a construção da rede.

Hiperparâmetro	Valores
Número de neurônios	[6]
Tamanho das camadas ocultas	[2]
Função de Ativação	[tanh]
Taxa de Aprendizado	[adaptativo]

Fonte: Autora, 2022.

Tabela 6 - Hiperparâmetros utilizados no SVM para a construção da rede.

Hiperparâmetro	Valores
Kernel	[RBF]
Grau	[1]
Gamma	[scale]

Fonte: Autora, 2022.

Na implementação, os dados foram divididos em dois subconjuntos 70% foram apresentados como treinamento, 30% foram apresentados como teste para validar a rede (SILVA, 2020). E, as funções que correlacionam as entradas com a saída do modelo foram registradas.

Como métricas para quantificar a qualidade do ajuste, foram utilizados o Coeficiente de Correlação (R^2), Erro Quadrático Médio (MSE) e Erro Absoluto Médio (MAE) as equações 39, 40 e 41, respectivamente, estão descritas a seguir.

$$R^2 = \frac{\sum(Y_C - \bar{Y})^2}{\sum(Y_i - \bar{Y})^2} \quad (39)$$

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - Y_C)^2 \quad (40)$$

$$MAE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |Y_i - Y_C| \quad (41)$$

Onde, Y_C é o evento estimado, Y_i é o evento observado e \bar{Y} é a média dos valores e n é o número de dados.

Os códigos foram desenvolvidos com as rotinas computacionais específicas, implementado em linguagem *Python*. E, as bibliotecas que foram utilizadas nessa etapa estão descritas na Tabela 7.

Tabela 7 - Bibliotecas utilizada na implementação das técnicas de aprendizado de máquina.

Biblioteca	Descrição
NumPy	Cálculos com vetores, matrizes e suas operações
Matplotlib	Construção de gráficos 2D, 3D e outros.
Scikit-Learn	Algoritmos de <i>Machine Learning</i>
Pandas	Manipulação de dados

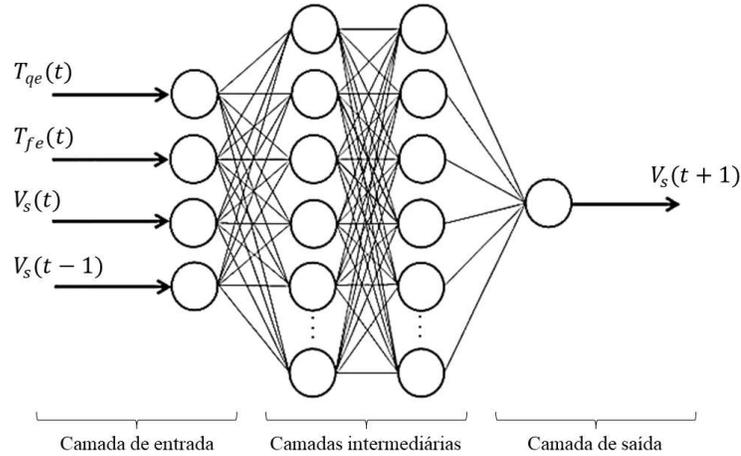
Fonte: StxNEXT. Disponível em: <https://stxnext.com/blogmost-popular-python-scientific-libraries/>. Acesso em: 03 de setembro de 2022.

Foram definidas 3 estratégias de acordo com o treinamento da rede, que são apresentadas detalhadamente a seguir. Também, as estratégias 1 e 2 foram definidas com bases no trabalho de Godke e Parise (2018).

4.2.1 Estratégia 1

Nessa estratégia foram utilizadas como variáveis de entrada da rede as temperaturas de entrada do fluido quente e frio no tempo (t), a vazão de saída predita com base nos dados atrasados no tempo (t-1) e a variável que a rede retorna, ou seja, para a saída foi utilizada a vazão de saída baseados nos dados adiantados no tempo (t+1). A Figura 13 apresenta o esquema que exemplifica a rede utilizada nessa estratégia.

Figura 13 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 1.

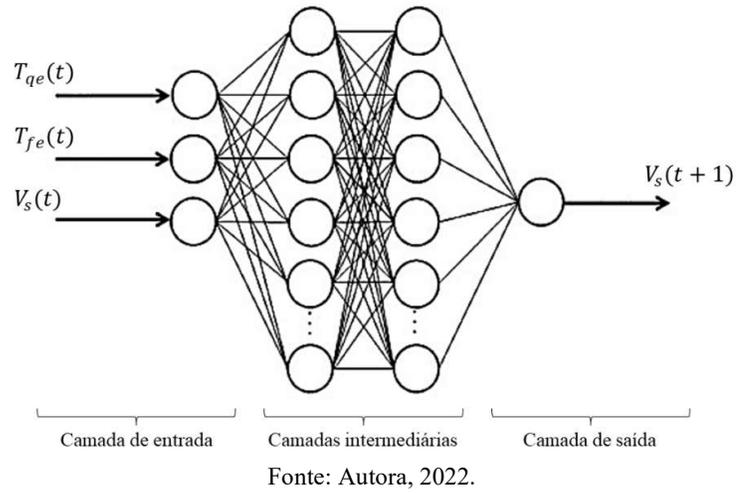


Fonte: Autora, 2022.

4.2.2 Estratégia 2

Para a estratégia 2 foram utilizadas como variáveis de entrada da rede as temperaturas de entrada do fluido quente e frio e a vazão de saída no tempo (t) e a variável que a rede retorna, ou seja, para a saída foi utilizada a vazão de saída baseados nos dados adiantados no tempo (t+1). A Figura 13 apresenta o esquema que exemplifica a rede abordada nessa estratégia.

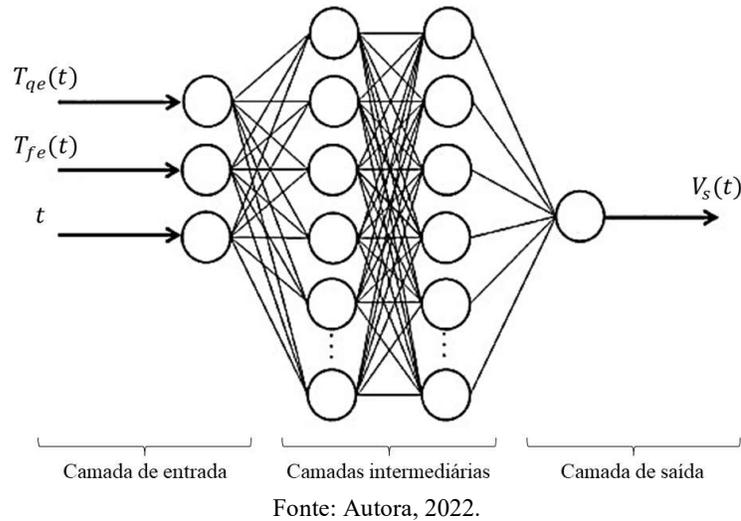
Figura 14 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 2.



4.2.3 Estratégia 3

Diferentemente das estratégias anteriores, além de utilizar como variáveis de entrada da rede as temperaturas de entrada do fluido quente e frio e a vazão de saída no tempo (t), também foi adicionada, o tempo e como variável de saída foi utilizada a vazão de saída no tempo (t). A Figura 15 mostra a configuração da rede para tal estratégia aplicada.

Figura 15 - Esquema das entradas e saída definidas para a estratégia 3.



Por fim, os resultados obtidos foram comparados e avaliados de acordo com as métricas para quantificar a qualidade do ajuste.

5 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados obtidos foram apresentados e discutidos simultaneamente e estão organizados conforme a ordem metodológica de execução desse trabalho, sendo divididos na análise dos dados simulados via Aspen Plus e Aspen Dynamics e na aplicação das técnicas de aprendizado de máquina.

5.1 Análise dos dados obtidos

Nessa primeira etapa do trabalho, o trocador de calor foi simulado no Aspen Plus em estado estacionário. Os resultados das correntes de saída são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8 - Resultados das variáveis de saída do trocador de calor em estado estacionário.

Parâmetros	Lado do casco	Lado dos tubos
Fluido em circulação	H ₂ O	C ₆ H ₆
Vazão volumétrica	19.003,5 L/h	92.405,7 L/h
Temperatura	71,39 ° C	51,25° C
Pressão	0,9 bar	1,0 bar

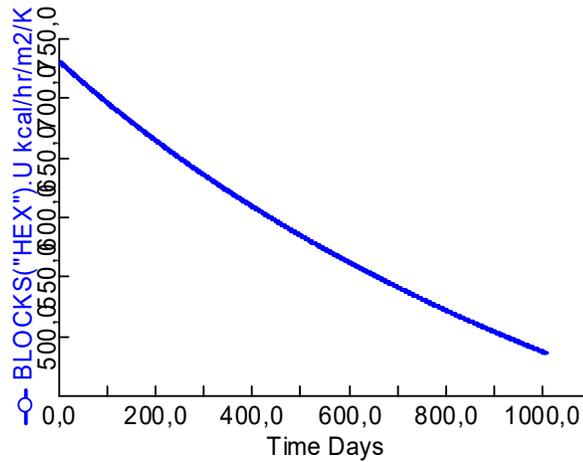
Fonte: Autora, 2022.

Nesse caso, o trocador de calor pode ser considerado “limpo”, sem a presença incrustação, visto que o mesmo apresentou um coeficiente de transferência de calor $U_c = 0,85$ kW/m²K na simulação. Comparando o resultado obtido de acordo com Júnior (2019), pode-se concluir que foram resultados dentro do esperado.

Como o objetivo desse trabalho foi avaliar o nível de incrustação no trocador de calor ao longo do tempo, o processo foi simulado em estado dinâmico no Aspen *Dynamics* com a inserção da Equação 38, fazendo com que os dados se assemelhassem ao cenário industrial. Em vista disso, foi obtido o gráfico da Figura 16 que apresenta o decaimento do coeficiente de transferência de calor do trocador à medida que a incrustação é formada no decorrer tempo, quando em operação.

Pode-se observar que à medida que aumenta a camada de incrustação nos tubos do trocador, o coeficiente de transferência de calor do trocador diminui e assim afetando as demais variáveis de saída do processo, assim validando o modelo matemático utilizado na simulação.

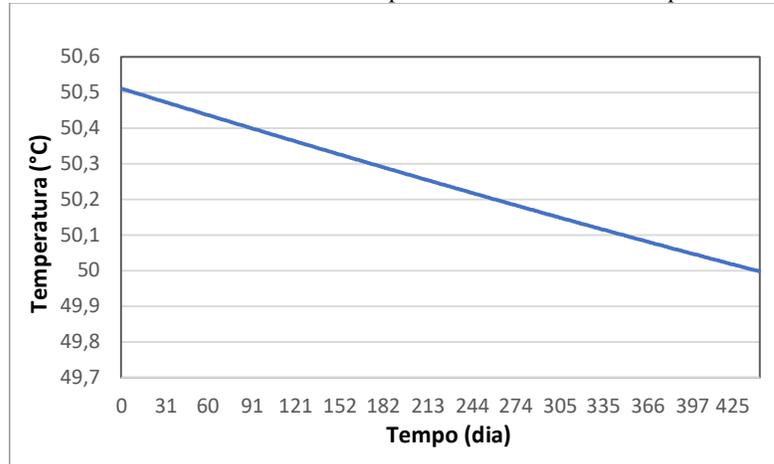
Figura 16 - Gráfico do decaimento do coeficiente de transferência de calor no tempo.



Fonte: Autora, 2022.

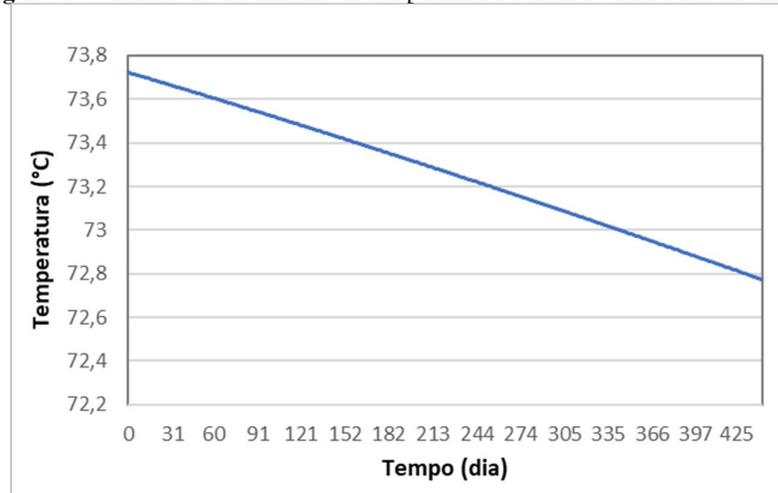
Com a simulação em execução no Aspen Dynamics, foi possível gerar os dados das variáveis de saída no decorrer do tempo e o comportamento da temperatura de saída do fluido quente, temperatura de saída do fluido frio e a vazão de saída do fluido quente são mostrados nos gráficos das Figuras 17, 18 e 19, respectivamente.

Figura 17 - Gráfico do decaimento da temperatura de saída do fluido quente no tempo.



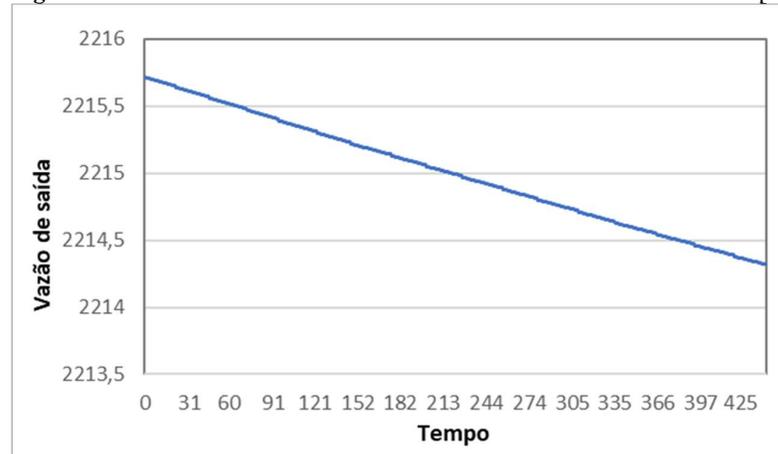
Fonte: Autora, 2022.

Figura 18 - Gráfico do decaimento da temperatura de saída do fluido frio no tempo.



Fonte: Autora, 2022.

Figura 19 - Gráfico do decaimento da vazão de saída do fluido frio no tempo.



Fonte: Autora, 2022.

É possível observar que houve um decaimento das temperaturas e da vazão saída do trocador simulado, isso ocorreu pela influência da inserção da Equação 38 que representa o fator de incrustação no processo em funcionamento, que tem como consequência a diminuição da área de troca térmica e o aumento da resistência à transferência de calor e, com o aumento da incrustação, o diâmetro dos tubos do trocador de calor diminui o que causa a queda da vazão e das temperaturas ao longo do tempo, o que já era esperado devido ao tempo de operação do trocador representado pelo tempo de execução inserido no simulador.

Comparando os dados de saída da simulação com os dados do trabalho de Silva (2013), que utilizou dados experimentais de um trocador em funcionamento em uma indústria, no qual

foi realizado o tratamento de erros e redução de ruídos, as curvas obtidas se mostraram bastante coerentes com o comportamento real, após o realizado o tratamento de erro e redução de ruídos.

Nesse sentido, o *software* Aspen se mostrou como uma alternativa viável para a obtenção de dados, tendo em vista a dificuldade de se realizar ensaios em uma planta real.

5.2 Implementação com RNA

Para essa etapa da implementação com RNA, todas as estratégias adotadas nos algoritmos em relação as métricas quantitativas abordadas tiveram um ótimo desempenho, como mostrado na Tabela 9.

Tabela 9 - Métricas quantitativas para a implementação com RNA.

Métricas	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
R ²	0,9985	0,9996	0,9970
MSE	0,0352	0,0198	0,0552
MAE	0,0293	0,0157	0,0431

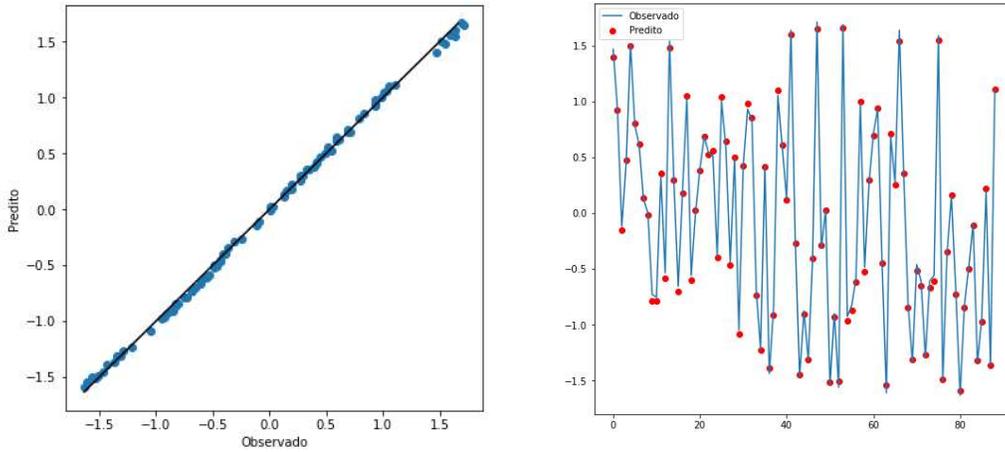
Fonte: Autora, 2022.

Os ajustes com os dados de teste são apresentados nos gráficos das Figuras 20(a), 21(a) e 22(a) das estratégias 1, 2 e 3, respectivamente, observam-se ótimos valores para as métricas, apresentando valores de R² próximos de 1,00. Contudo, é percebido que o desempenho é significativamente melhor na predição da estratégia 2, isso pode ser observado tanto pelos valores de R² como MAE, como pela presença de alguns pontos fora do ajuste, principalmente na estratégia 3, comprovando então, a viabilidade do uso de quaisquer estratégias definidas, visto que os resultados foram muito próximos nas três estratégias.

Ademais, vale ressaltar que os resultados obtidos da estratégia 3 foram menores quando comparados as estratégias 1 e 2, visto que foi inserido a variável tempo na entrada da rede. Porém, apresentou também um bom desempenho quando se trata em prever em qual seria o período para ser realizada a manutenção do trocador. Dessa maneira, a ferramenta desenvolvida será capaz de prever os períodos de tempo mais adequados para realizar as manutenções necessárias em um trocador e calor em operação.

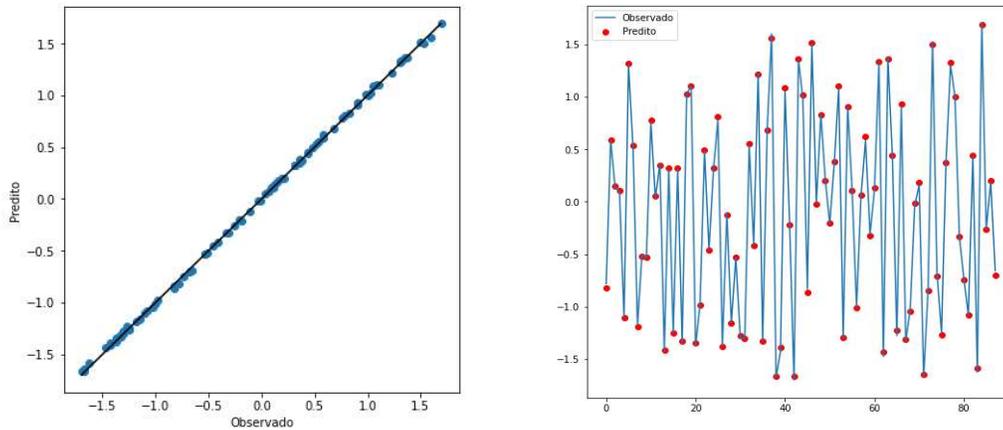
Os gráficos das Figuras 20(b), 21(b) e 22(b) apresentam os valores preditos se ajustaram as correspondentes entradas na RNA de cada estratégia, e percebe-se uma correspondência em todos os gráficos tendo em vista que demonstram visualmente as boas métricas já mencionadas.

Figura 20 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 1 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.



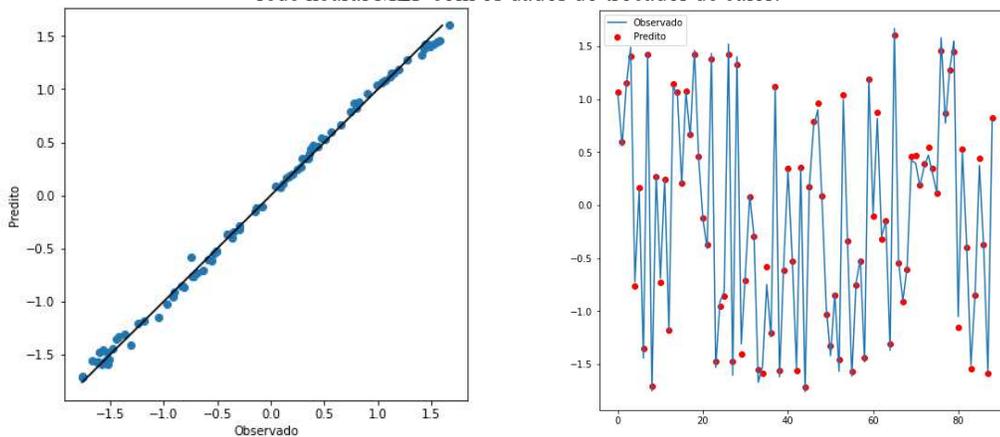
Fonte: Autora, 2022.

Figura 21 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 2 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.



Fonte: Autora, 2022.

Figura 22 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 3 e (b) Resultado do treinamento da rede neural MLP com os dados do trocador de calor.



Fonte: Autora, 2022.

Nesse sentido, os resultados mostram que a RNA, com um bom conjunto de treino e estratégias definidas é uma excelente técnica no desenvolvimento do sensor virtual aplicado é capaz de prever as variáveis envolvidas no trocador de calor com excelente precisão.

5.3 Implementação com SVM

Para essa etapa da implementação com SVM, todas as estratégias adotadas nos algoritmos em relação as métricas quantitativas abordadas tiveram também um ótimo desempenho, como mostrado na Tabela 10.

Tabela 10 - Métricas quantitativas para a implementação com SVM.

Métricas	Estratégia 1	Estratégia 2	Estratégia 3
R²	0,9973	0,9966	0,9917
MSE	0,0027	0,0034	0,0083
MAE	0,0455	0,0466	0,0685

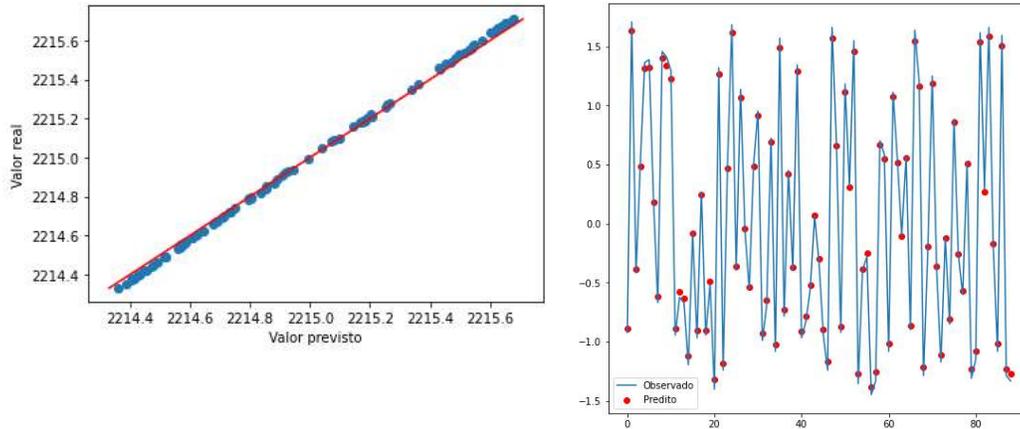
Fonte: Autora, 2022.

Os ajustes com os dados de teste são apresentados nos gráficos da Figura 23(a), 24(a) e 25(a) das estratégias 1, 2 e 3, respectivamente, assim como no caso da utilização das RNA's, os resultados das previsões foram muito próximos nas três estratégias, apresentando valores de R² próximos de 1,00, assim, corroborando a viabilidade do uso do SVM para quaisquer estratégias definidas. Comparando as três estratégias, percebe-se que a estratégia 1 teve um desempenho melhor em relação as outras duas estratégias que pode ser observado tanto pelos valores de R² como MAE, como pela presença de alguns pontos fora do ajuste.

Também, assim como na RNA, vale ressaltar que os resultados obtidos da estratégia 3 foram menores quando comparados as estratégias 1 e 2, uma vez que foi inserido a variável tempo na entrada da rede, no qual apresentou um bom desempenho quando se trata em prever em qual seria o período mais adequado para ser realizada a manutenção do trocador.

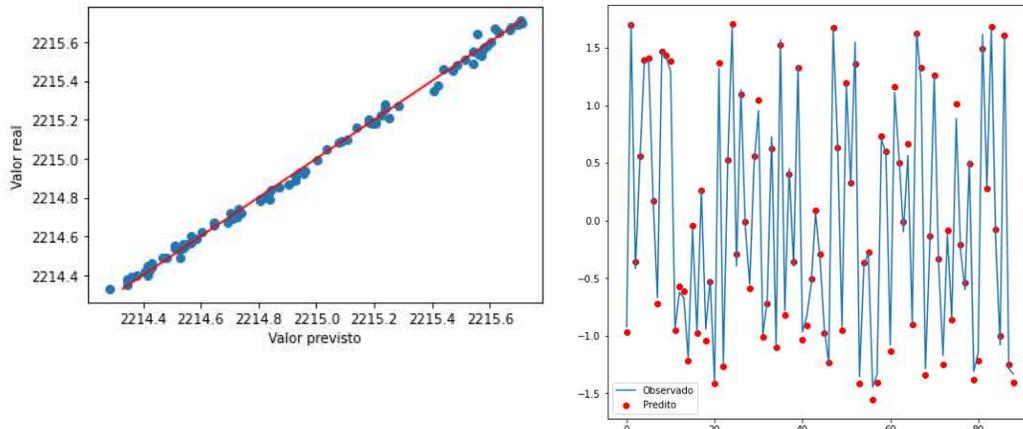
Os gráficos da Figura 23(b), 24(b) e 25(b) apresentam os valores preditos se ajustaram as correspondentes entradas no SVM de cada estratégia, e percebe-se uma correspondência em todos os gráficos tendo em vista que demonstram visualmente as boas métricas já mencionadas.

Figura 23 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 1 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.



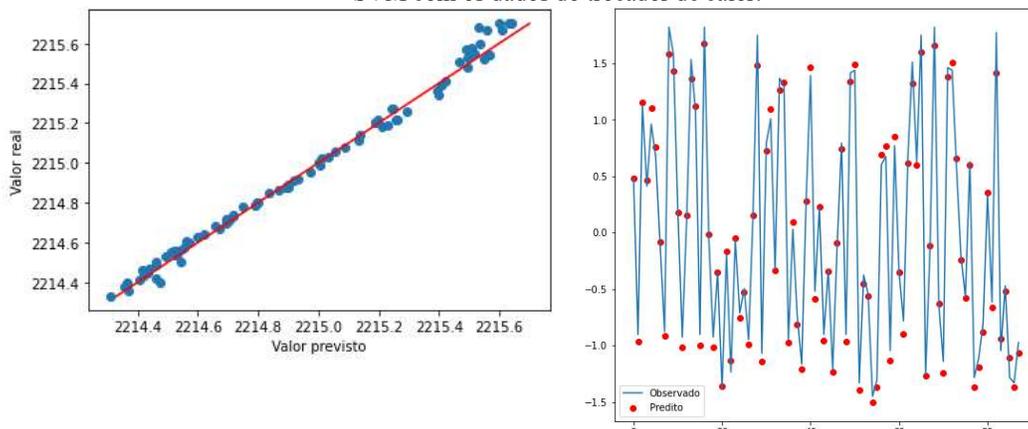
Fonte: Autora, 2022.

Figura 24 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 2 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.



Fonte: Autora, 2022.

Figura 25 - (a) Gráfico de regressão com os resultados obtidos da estratégia 3 e (b) Resultado do treinamento da SVM com os dados do trocador de calor.



Fonte: Autora, 2022.

Em resumo, da mesma maneira que as RNA's, o SVM apresentou métricas adequadas para predições. Desta forma, pode-se concluir que nesse estudo, o comportamento se repete em ambas as técnicas, independente da sua estrutura, sendo capaz de predizer as variáveis envolvidas no trocador de calor com excelente precisão.

Comparando as métricas obtidas em ambas as técnicas, é possível observar que houve um bom nível de representatividade do modelo por ambas as redes na etapa de predição do conjunto de teste, com resultados muito próximos, visto que dados preditos se ajustaram aos dados que foram simulados.

Nesse sentido, os resultados foram satisfatórios, tendo em vista que os dados utilizados neste trabalho são provenientes de simulação de forma a avaliar a aplicação de técnica de Aprendizado de Máquina como uma alternativa para a predição da incrustação em trocadores com dados reais na indústria.

6 CONCLUSÃO

Neste trabalho, a aplicação de técnicas de aprendizado de máquina foi sugerida para prever o comportamento da incrustação de um trocador de calor, no qual foram obtidos 442 linhas de dados a partir da simulação dinâmica. A partir da análise dos dados simulados, foi possível observar que houve um decaimento das temperaturas e da vazão saída do trocador simulado à medida que o fator de incrustação aumentou e esse comportamento foi validado com os dados do trabalho de Silva (2013), que utilizou dados experimentais, dessa forma, o *software* Aspen se mostrou uma ótima alternativa para a obtenção de dados, tendo em vista a dificuldade de se realizar ensaios em uma planta real.

A partir desses dados obtidos, as Redes Neurais Artificiais e as Máquinas de Vetores de Suporte foram utilizadas como ferramentas de modelagem forma aplicadas para gerar modelos entrada-saída capazes de prever com qualidade os objetos de interesse. As estratégias definidas aplicadas em ambas as técnicas apresentaram ótimo desempenho para as previsões com $R^2 > 0,99$, nesse sentido, foi possível observar que houve um bom nível de representatividade do modelo por ambas as redes na etapa de predição do conjunto de teste, com resultados muito próximos, visto que dados preditos se ajustaram aos dados que foram simulados.

Entretanto, vale ressaltar que os resultados foram excelentes, pois os dados foram provenientes de simulação de forma a avaliar a aplicação de técnica de aprendizado de máquina como uma alternativa para a predição da incrustação em trocadores de calor.

No mais, o objetivo do uso de técnicas como a RNA e o SVM estudados nesse trabalho para a predição da incrustação foi atingida nos treinamentos de rede. E para as três estratégias adotadas se faz necessário avaliar individualmente os casos os quais as redes são utilizadas para que se faça uma boa escolha e o ajuste venha a ser satisfatório.

Em vista disso, os dados obtidos e dos estudos comparativos realizados conclui-se que a metodologia apresentada é uma abordagem que amplia os cenários de aplicação prática, pois permite a predição do comportamento dinâmico na indústria, permitindo a avaliação da eficiência dos equipamentos e o planejamento de manutenção preditiva e paradas planejadas para diferentes condições operacionais.

Também, a linguagem *Python* se mostrou uma alternativa consistente em relação a outros *softwares* comerciais voltados para computação científica., capaz de realizar todas as tarefas propostas com facilidade, além de ser gratuita e aberta e o *software* Aspen, que apesar

de ser pago, é uma ferramenta bastante utilizada no cenário industrial, com alto grau de complexidade vem sendo cada vez mais exigida no mercado de trabalho.

Sendo assim, os objetivos propostos nesse trabalho foram atingidos, em que foi possível consolidar os nas áreas de modelagem, simulação de processos, como também, novos conhecimentos relacionados às técnicas de *Machine Learning*, que não são muito estudados durante a graduação e que vêm se consolidando devido aos recentes avanços tecnológicos no âmbito industrial com o desenvolvimento da indústria 4.0 atualmente.

REFERÊNCIAS

ALLENDE-CID, H. Machine learning: **Catalisador da ciência**. *Revista da Sociedade Brasileira de Computação* - Computação Brasil, p. 15-18, 2019.

ALLOGHANI, M. et al. **A Systematic Review on Supervised and Unsupervised Machine Learning Algorithms for Data Science**. In: BERRY, M. W.; MOHAMED, A.; YAP, B. W. *Supervised and Unsupervised Learning for Data Science: Unsupervised and SemiSupervised Learning*. [S.l.]: Springer, 2020.

BICCA, Gerson Balbueno. **Modelagem Hierárquica de Trocadores de calor casco e Tubos**. 2006. 189f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2006.

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

BOMBARDELLI, C., FRANCO, A.T., ABUGDERAH, M. M., **Proposal of a coke fouling mathematical model for the distillation process, in 18th International Congress of Mechanical Engineering**, ABCM, November, Ouro Preto, 2005;

BRITO, K. D.,. **Efeito do teor de solvente sobre o custo anual total, consumo específico de energia e eficiência termodinâmica na obtenção de etanol anidro via destilação extrativa: Configurações convencional e termicamente acoplada**. 2014. 174 f. Tese de Doutorado em Engenharia Química – Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2014.

ÇENGEL, Y. A. **Transferência de calor e massa: uma abordagem prática**. 3ª ed. São Paulo: McGraw-hill, 902p. 2009.

CRITTENDEN, B. D., KOLACZKOWSKI, S. T., **Mass transfer and chemical kinetics in hydrocarbon fouling**, Proc. Conference Fouling: Science or Art?, University of Surrey, UK, mars, 1979.

EBERT, W., PANCHAL, C. **Analisis of Exxon Crude-Oil-Slip Stream Coking**, in: Proceeding of Mitigatjion of Industrial Heat Exchangers. 1995.

EL-NAQA, I.; MURPHY, M. J. **What Is Machine Learning?** In: NAQA, I. E.; LI, R.; MURPHY, M. J. *Machine Learning in Radiation Oncology: Theory and Applications*. [S.l.]: Springer International Publishing, 2015. p. 3-11.

EPSTEIN, N. **Thinking About Heat Transfer Fouling—A 5 × 5 Matrix**. In: *Heat Transfer Engineering*. [s.l: s.n.]. p. 43–56, Vol. 1, 1983.

FERNANDEZ-BAUJIN J. M., SOLOMON, S. M. **Industrial and laboratory pyrolysis**. *AICHe Symposium*, v. Ser. 32, p. 345–372, 1976.

FIorentin, L. D.; BOMBARDELLI, C.; FRANCO, A.; NEGRÃO, C. **Estudo de modelos matemáticos para previsão da incrustação por coque em tubulações: Paper CIT04-0558**, Rio de Janeiro 2004.

GODKE, Larissa Mota; PARISE, Barbara de França. **Desenvolvimento de um sensor virtual neural para predição de incrustação em trocadores de calor**. 2018. 72 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Instituto de Ciências Ambientais, Químicas e Farmacêuticas, Universidade Federal de São Paulo, Diadema, 2018.

HASSON, D.; ZAHAVI, J. **Mechanism of Calcium Sulfate Scale Deposition on Heat-Transfer Surfaces**. v. 9, n. 1, p. 1–10, 1970.

HAYKIN, Simon. **Redes neurais: princípios e prática**. Bookman Editora, 2007.

HEYS, J. J. **Chemical and Biomedical Engineering Calculations with Python**. 1ª Ed. Hoboken: JohnWiley & Sons, 2017.

HINDMARSH, Alan C. et al. **SUNDIALS: Suite of nonlinear and differential/algebraic equation solvers**. ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS), v. 31, n. 3, p. 363-396, 2005.

INCROPERA, F. P. et al. **Fundamentos de transferência de calor e de massa**. 6ª ed. Rio de Janeiro: LTC, 643p. 2008.

JAFARI NASR, M. R.; MAJIDI GIVI, M. **Modeling of crude oil fouling in preheat exchangers of refinery distillation units**. Applied Thermal Engineering, v. 26, n. 14–15, p. 1572–1577, 2006.

JANAUN, Jidon. et al. **Design and simulation of heat exchangers using Aspen HYSYS, and Aspen exchanger design and rating for paddy drying application**. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, 2016.

JAYASINGHE, Ashen Sheranga. **Implementation, and Simulation of Control Systems for Extractive and Recovery Distillation Columns using Aspen Plus and Aspen Dynamics**. 2018. 81 f. Engineering Honours Thesis. School of Engineering and Energy. University Murdoch University, 2018.

JERÓNIMO, M. A. S., MELO, L. F., BRAGA, A. S., FERREIRA, P. J. B. F., MARTINS, C. (1997). **Monitoring the thermal efficiency of fouled heat exchanger - a simplified method**. Experimental Thermal and Fluid Science, vol. 14, pp. 455-463.

JÚNIOR, Gladson Euler Lima. **Metamodelagem kriging dinâmica aplicada em trocadores de calor**. 2019. 94 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.; em Engenharia Química.; Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2019.

KADLEC, Petr; GABRYS, Bogdan; STRANDTB, Sibylle. **Data-driven Soft Sensors in the process industry**. Computers & Chemical Engineering, v. 33, p. 795-814, 2009.

KERN, D. Q; SEATON, R. E. **Heat exchanger design for fouling service**. Chemical Engineering, v. 62, p. 51-56, 1966.

LANEZ, H.; KHADER, D. **Optimisation du bilan thermique d'un circuit de refroidissement du solvant lourd en présence du phénomène d'encrassement.** [s.l.] Université echahid hamma lakhdar el oued, 2015.

LIU, M., LU, J. **Support vector machine—an alternative to artificial neuron network for water quality forecasting in an agricultural nonpoint source polluted river?** Environ Sci Pollut Res 21:11036–11053, DOI 10.1007/s11356-014-3046-x, 2014.

MADI, M.; NEGRÃO, C. O.; MASSOQUETI, R. **Análise do crescimento da resistência térmica da incrustação em trocadores de calor.** Congresso Nacional de Engenharia Mecânica, Belém-PA, Brasil, 2004.

MCCABE, W. L.; ROBINSON, C. S. **Evaporator Scale Formation.** v. 16, n. Evaporator Scale Formation', p. 1–2, 1924.

MELONI, B. D. B.; SOUSA, L. G. L.. **Proposta de metodologia preditiva para otimização da limpeza de trocadores de calor resfriado a água.** 2019. 101 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Tecnologia Departamento de Engenharia Mecânica. Universidade de Brasília. Brasília, 2019.

MORAN, Sean. **An applied guide to process and plant design.** Elsevier, 2019.

MÜLLER-STEINHAGEN, H. **Heat Transfer Fouling: 50 Years After the Kern and Seaton Model.** Heat Transfer Engineering, v. 32, n. 1, p. 1–13, 2011.

NUNES, I. C., NETO, A. P. A., DE FIGUEIREDO, M. F., & BRITO, R. P. **O uso da plataforma aspen dynamics como ferramenta computacional no processo de partida de colunas extrativas.** Revista Interdisciplinar De Pesquisa Em Engenharia, 2017. <https://doi.org/10.26512/ripe.v2i27.14446>

NETO, Arthur Viana dos Santos. **Modelagem matemática de trocadores de calor tipo casco e tubos.** 2014. 66 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Mecânica). Faculdade de Engenharia Mecânica. Universidade de Rio Verde. Goiás, 2014.

OTCHERE, D. A. et al. **Application of supervised machine learning paradigms in the prediction of petroleum reservoir properties: Comparative analysis of ANN and SVM models.** Journal of Petroleum Science and Engineering, v. 200, p. 108182, 2021.

PATERSON, W. R.; FRYER, P. J. **A reaction engineering approach to the analysis of fouling.** Chemical Engineering Science, v. 43, n. 7, p. 1714–1717, 1988.

PDF **Aspen Family**, 2018. Disponível em: < <https://www.aspentech.com>>. Acesso em: 21 abr. 2022.

PINE, D. J. **Introduction to Python for Science and Engineering.** 1ª Ed. Boca Raton: CRC Press, 2019.

REBOUÇAS, Diogo Leite. **Utilização de redes neurais artificiais para detecção e diagnóstico de falhas.** 2011. 93 f. Dissertação (Mestrado em Automação e Sistemas;

Engenharia de Computação; Telecomunicações) - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2011.

RMIEWS, P. **The History and Status of Research In Fouling of Heat Exchangers in Cooling Water Service.** v. 5, p. 374–380, 1977.

RUBBO, Patrick Nikson. **Determinação do coeficiente global de transferência de calor de um condensador do tipo casco e tubo de um chiller por adsorção de amônia em NaBr.** 2014. 37 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia de Energia). Faculdade de Engenharia de Energia. Universidade Federal de Santa Catarina. Araranguá, 2014.

SADOUK, H. C. **Modélisation de l'encrassement en régime turbulent dans un échangeur de chaleur à plaques avec un revêtement fibreux sur les parois Modélisation de l'encrassement en régime turbulent dans un échangeur de chaleur à plaques avec un revêtement.** [s.l.] Université Paris-Est, 2009.

SALEH, Z. S.; SHEIKOLESLAMI, R.; WATKINSON, A. P. **Fouling Characteristics of a Light Australian Crude Oil.** 2003.

SANAYE, S.; NIROOMAND, B.; **Simulation of Heat Exchanger Network (HEN) and Planning the Optimum Cleaning Schedule.** Energy Conversion and Management. v. 48; p. 1450-1461, 2007.

SCHOLKOPF, B., SMOLA, A. J. **Learning with Kernels Support Vector Machines, Regularization, Optimization, and Beyond.** ISBN 0-262-19475-9, 2002.

SCHWEIDTMANN, A. M. et al. **Machine Learning in Chemical Engineering: A Perspective.** Chemie Ingenieur Technik, v. 93, n. 12, p. 2029–2039, 22 dez. 2021.

SILVA, Geovane Domingos da. **Machine learning no controle preditivo de processos.** 2021. 48 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2021.

SILVA, I. N. D.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. **Redes Neurais Artificiais: Para engenharia e ciências aplicadas.** 2ª. ed. São Paulo: Artiber, 2016.

SILVA, José Diego da. **Aprendizagem de máquina aplicada ao desenvolvimento de sensores virtuais e na detecção e diagnóstico de falhas para processos químicos reativos em linguagem Python.** 2022. 98 f. Trabalho de Conclusão de Curso (Bacharelado em Engenharia Química) - Centro de Tecnologia, Universidade Federal de Alagoas, Maceió, 2022.

SILVA, J. P. et al. **Simulação de Trocadores de Calor com mudança de fase.** In: CONGRESSO BRASILEIRO DE P&D EM PETROLEO E GAS, 3, 2005, Salvador. Anais... Salvador: Copyright 2004/ Instituto Brasileiro de Petróleo e Gás – IBP. p. 1-6, 2005,

SILVA, Victor Leonardo Cavalcante Melo da. **Predição da incrustação em um trocador de calor baseada em redes neurais artificiais.** 2013. 70 f. Dissertação de Mestrado em Automação e Sistemas; Engenharia de Computação; Telecomunicações - Universidade Federal do Rio Grande do Norte, Natal, 2013.

SONG, T. W. (1997). **Condições de processo num trocador de calor**. Revista de Graduação da Engenharia Química, São Paulo, vol. 1, n. 1, pp. 29-42.

TABOREK, J; AOKI, T; RITTER, R. B; PALEN, J. W; KNUDSEN, J. G. **Predictive methods for fouling behavior**. Chemical Engineering Progress, v. 68, p. 69-78, 1972.

TOMAR, D.; AGARWAL, S. **Twin Support Vector Machine: A review from 2007 to 2014**. Egyptian Informatics Journal, v. 16, n. 1, p. 55–69, 2015.

TONIN, P. C., NEGRÃO, C. O. R. (2003). **Monitoramento da Performance Térmica de Trocadores de Calor e Redes de Trocadores de Calor**. 2º Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo & Gás, Rio de Janeiro. Anais do 2o Congresso Brasileiro de P&D em Petróleo & Gás, 2003. vol. 1. pp. 1-10.

TUBULAR EXCHANGER MANUFACTURERS ASSOCIATION 7th Ed. (s.d.). STANDARD OF TEMA . 1982.

VALLE, R. O. **Determinação da taxa de incrustação em trocadores de calor com o auxílio de métodos de otimização**. 2012. 116 f. Dissertação (Mestrado) – Coordenação dos Programas de Pós-Graduação em Engenharia (COPPE), Programa de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2012.

VAPNIK, V. N. **The Nature of Statistical Learning Theory**. Springer Verlag, New York, 2nd edition, 1999.

VASCONCELOS, SUÊNIA FERNANDES DE. **Processo industrial semi-batelada de produção de nitrilas: Validação e simulação dinâmica**. 2019. 91 f. Dissertação de Mestrado em Engenharia Química.; em Engenharia Química.; Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, 2019.

VIDHYA, M. **Efficient classification of portscan attacks using support vector machine**. In: Green High Performance Computing (ICGHPC), 2013 IEEE International Conference on. [S.l.: s.n.], 2013. p. 1–5.

YANG, Jie; FAN, Aiwu; LIU, Wei; JACOBI, Anthony M. **Optimization of shell-and-tube heat exchangers conforming to TEMA standards with designs motivated by constructal theory**. Energy Conversion And Management, v. 78, p.468-476, fev. 2014. Elsevier BV. <http://dx.doi.org/10.1016/j.enconman.2013.11.008>. 2014.

YEAP, B. L. *et al.* **Mitigation of Crude Oil Refinery Heat Exchanger Fouling Through Retrofits Based on Thermo-Hydraulic Fouling Models**. Chemical Engineering Research and Design, v. 82, n. 1, p. 53–71, 2004.

WANG, L. **Support Vector Machines: Theory and Applications**. ISSN print edition: 1434-9922, 2005