

MODELO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DO TEOR DE ENXOFRE NO FERRO GUSA DE ALTOS FORNOS¹

Sayd Farage David²
 Mariana Bertonceli Silva³
 Ramiro Conceição Nascimento⁴
 Marcelo Lucas Pereira Machado⁴

Resumo

O presente estudo objetiva comparar a capacidade preditiva de modelos baseados em Redes Neurais Artificiais e na Capacidade de Sulfeto para determinar o teor de enxofre no ferro gusa. Os resultados de cada modelo foram comparados com os valores reais obtidos durante a operação de um alto-forno. Os modelos de capacidade de sulfeto são baseados no equilíbrio termodinâmico, logo, divergem dos valores reais quando a operação de redução se distânciada das condições de equilíbrio. As redes neurais artificiais possuem melhor capacidade de predição, pois podem ser construídas a partir variáveis operacionais que possuem característica cinética.

Palavras-chave: Alto-forno; Enxofre; Redes neurais artificiais; Capacidade de sulfeto.

ARTIFICIAL NEURAL NETWORKS MODEL TO PREDICT THE SULFUR PERCENTAGE AT THE HOT METAL IN THE BLAST FURNACE

Abstract

The review objective to compare the predictive capacity of the models based in Artificial Neural Networks and Sulphide Capacities to determine the sulfur percentage at the hot metal in the blast-furnace. The models results were compare with the real values obtained during the operation of blast-furnace. The Sulphide Capacities models are based in the thermodynamic equilibrium, thus, is different of the real values when the reduction operation has a distance of the equilibrium situations. The Artificial Neural Networks have the best capacity, because they can be built from operational variables with kinetic characteristic.

Key words: Blast furnace; Sulfur; Neural networks; Sulfide capacity.

¹ Contribuição técnica ao 68º Congresso Anual da ABM - Internacional, 30 de julho a 2 de agosto de 2013, Belo Horizonte, MG, Brasil.

² Engenheiro Metalúrgico, Professor, Depto. de Eletromecânica; e Mestrando do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Metalúrgica, Instituto Federal do Espírito Santo (IFES), Vitória, ES, Brasil.

³ Graduando em Engenharia Metalúrgica. Bolsista de Iniciação Científica. IFES, ES, Brasil.

⁴ Engenheiro Metalúrgico. Prof. Dr., cursos de graduação e pós-graduação em Engenharia Metalúrgica e de Materiais, IFES, ES, Brasil.

1 INTRODUÇÃO

O uso de modelos matemáticos tem sido usado para determinar o efeito das mudanças operacionais sobre os fenômenos químicos e físicos que ocorrem no alto-forno. Esses modelos foram construídos a partir dos experimentos de dissecação dos altos-fornos, e contribuíram com um melhor conhecimento e estabilidade do processo de redução. Entretanto, o processo de redução em alto-forno é extremamente complexo e medições a partir de seu interior são escassos devido às suas condições hostis. Existem muitos exemplos de modelos matemáticos aplicados à indústria do aço em geral e para o alto-forno, em particular.^(1,2)

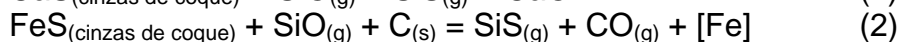
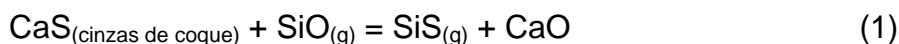
Uma alternativa possível e especialmente útil em sistemas complexos é empregar o chamado modelo paramétrico. Em tal abordagem o objetivo é obter uma função que, por meio da estimativa de alguns parâmetros selecionados será capaz de aproximar as relações entre as entradas do sistema e as saídas. Modelos baseados em Redes Neurais Artificiais (RNA) pertencem a este tipo de modelo. Elas têm sido usadas extensivamente nos últimos anos devido às suas múltiplas vantagens: são fáceis de programar, apresentam uma boa adaptação para sistemas não lineares, seus parâmetros podem ser calculados on-line, são robustas contra o ruído e são fáceis de reprogramar para se adaptar as alterações das condições do sistema.^(3,4)

Diante da complexidade dos mecanismos envolvidos no processo de redução, as redes neurais foram usadas como ferramenta para prever o teor de enxofre. Com isso será possível comparar a capacidade preditiva de modelos baseados em Redes Neurais Artificiais e na Capacidade de Sulfeto para determinar o teor de enxofre no ferro gusa.

1.1 Reações do Enxofre

A maior parte do enxofre (cerca de 80%) é carregado no alto forno através do coque na forma de FeS e CaS presente nas cinzas do coque e como enxofre orgânico. O restante vem através dos outros materiais da carga. Para qualquer alto forno, cerca de 90 a 80% do enxofre saem na forma de escória, 10% a 15% saem junto com o gás de topo, enquanto que 2% a 5% se dissolve no ferro gusa.⁽⁵⁾

Recentes investigações têm demonstrado que o principal mecanismo envolvido nas reações de enxofre é muito semelhante à do silício. O enxofre nas cinzas de coque sofre as seguintes reações no *raceway*:^(5,6)

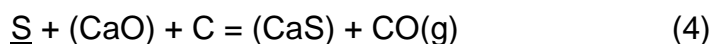


Nas regiões do Bosh e Belly o SiS se decompõe:

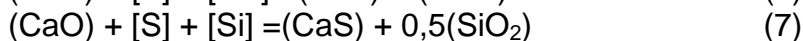
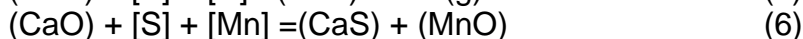
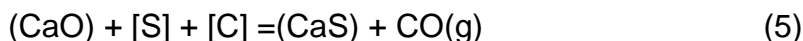


Pequenas quantidades de enxofre são também absorvidas pela escória no bosh. Também deve ser mencionado que o enxofre forma outros compostos voláteis como o COS, CS, que também são transportados pelo fluxo de gás e sofrem reações. No entanto, é preciso enfatizar que dentre os gases sulfurosos o SiS é a espécie dominante.^(5,6)

A reação pela qual o enxofre é removido do gusa na interface metal/escória é frequentemente representada pela reação 4:^(6,7)



Deve-se mencionar que o CaO tem um potencial dessulfurante muito maior do que o MgO, cerca de 100 vezes mais forte. É também de notar que, para uma dessulfuração adequada, o teor em oxigênio do metal deve ser muito baixo. Isto é conseguido no hearth do alto forno por meio da reação do oxigênio dissolvido no ferro gusa com formadores de óxido fortes: C, Si, Mn dissolvido no metal líquido. Dessa forma, considerando os elementos formadores de óxidos, podemos escrever as seguintes reações:⁽⁵⁾



Através da Equação 5 podemos notar que:

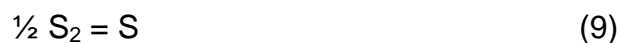
- o aumento da basicidade da escória tende a aumentar a atividade da cal favorecendo a dessulfuração;
- o aumento do potencial de oxigênio desfavorece a reação de dessulfuração, pois ele possui grande influência na partição de enxofre, pequenas concentrações de FeO na escória reduzem a partição de enxofre;
- o teor de carbono e silício dissolvidos no ferro gusa favorece a dessulfuração, pois aumentam a atividade termodinâmica do enxofre.

1.2 Capacidade de Sulfeto e Partição de Enxofre

A dificuldade de calcular o teor de enxofre de equilíbrio entre o metal e a escória através da Equação 5 é o fato de determinar as atividades do CaO, CaS. No entanto, para contornar essa dificuldade, vários autores determinaram a eficiência de uma escória em reter enxofre através do conceito de capacidade de sulfeto (C_s), Equação 8.⁽⁸⁻¹⁰⁾

$$C_s = (S) \cdot \sqrt{\frac{pO_2}{pS_2}} \quad (8)$$

Sendo pO_2 e pS_2 a pressão dos gases O_2 e S_2 da zona de gotejamento e esses valores são determinados através do equilíbrio termodinâmico, segundo as reações 9 e 10:



A pressão de oxigênio da zona de gotejamento é governada pela reação de Boudouard, reação 10.⁽¹¹⁾

O modelo usado para determinar a capacidade de sulfeto é o de Taniguchi et al. (2009), que faz uso do conceito de Basicidade Ótica (Equação 11).

$$\log C_s = 7,350 + 94,89 \cdot \log \Lambda - \frac{10051 + \Lambda[-338 \cdot (\%MgO) + 287 \cdot (\%MnO)]}{T} + 0,2284 \cdot (\%SiO_2) + 0,1397 \cdot (\%Al_2O_3) - 0,0587 \cdot (\%MgO) + 0,0841 \cdot (\%MnO) \quad (11)$$

Sendo Λ a basicidade ótica da escória, T a temperatura em Kelvin e $(\%M_xO_y)$ a porcentagem em massa dos óxidos na escória.

O teor de enxofre foi calculado através do modelo de partição. Há várias expressões para o cálculo da partição de enxofre (L_s) baseadas na análise do gusa, na

composição da escória, temperatura, basicidade da escória, composição do gás do *hearth*.⁽¹¹⁾

$$L_s = \frac{(\%S)}{[\%S]} = \exp \left\{ 0,263 \times [\%C] + 0,145 \times [Si] - 0,060 \times [\%Mn] + \frac{\left(3,45 \times \frac{(CaO)}{(SiO_2)} + 2,39 \times \frac{(MgO)}{(SiO_2)} \right)}{\left(1 + 0,197 \times \frac{Al_2 O_3}{(SiO_2)} \right)} - \frac{20033}{\theta_{HM} + 10,30} \right\} / P_{CO} \quad (12)$$

1.3 Redes Neurais Artificiais

As Redes Neurais Artificiais (RNAs) são uma maneira de desenvolver modelos matemáticos, com capacidade de processar informações, inspirados em uma estrutura física natural: o cérebro humano. Esta inspiração é baseada em fatores conhecidos sobre o seu funcionamento, ou seja, apresenta a capacidade de aprender, de tomar decisões, de se adaptar mesmo em presença de sinais ruidosos. A capacidade de aprender através de exemplos e generalizar a informação aprendida são um dos principais atrativos para a sua utilização na construção de modelos. A generalização é uma demonstração de que a capacidade da RNA está além do que simplesmente mapear relação de entrada e saída. Esta ferramenta é capaz de extrair informações não apresentadas de forma explícita através de exemplos. Outra característica importante é a capacidade de auto-organização e de processamento temporal, que aliada a capacidade de generalização, torna a RNA uma ferramenta computacional poderosa e atrativa para solução de problemas complexos.⁽¹²⁾

2 MATERIAL E MÉTODOS

O desenvolvimento do modelo matemático para prever o teor de enxofre será exposto nos seguintes subtítulos: 2.1 Desenvolvimento das redes neurais e 2.2 Cálculo do teor de enxofre de equilíbrio.

2.1 Desenvolvimento das Redes Neurais

A escolha das variáveis de entrada da rede neural foi baseada em sua influência no mecanismo de incorporação de enxofre de acordo com a literatura, o modelo de capacidade de sulfeto. A Tabela 1 apresenta as médias e os desvios das variáveis de entrada usada nessa rede neural.

Tabela 1. Variáveis específicas da rede neural

RNA	Variáveis	Média	Mínimo	Máximo	Desvio
RNA-S	Pressão de Sopro (Kg/cm ²)	3,95	0,86	4,15	0,388
	Temperatura do Gusa (°C)	1506,33	1422,11	1529,67	10,973
	Produção (t gusa/min)	7,22	1,25	7,73	0,849
	S-total (kg/ t gusa)	3,05	2,51	4,14	0,238
	CaO (%)	42,71	32,71	43,80	0,863
	MnO (%)	0,95	0,53	1,38	0,155

A rede utilizada foi do tipo Perceptron de Multicamadas. O modelo é composto por uma rede, e a Tabela 2 apresenta a sua configuração. Para a sua construção e treinamento foi utilizado o *software* Statistica 8.0. A rede neural (RNA-S) possui 6 variáveis de entrada, uma camada escondida com 9 neurônios e um neurônio na camada de saída que prediz o teor de enxofre no ferro gusa.

Tabela 2. Configuração das redes neurais

RNA-S	
Função / Variável de saída	Teor de enxofre.
Tipo de rede	Perceptron Multicamadas
Algoritmo de Treinamento	BFGS
Variáveis de entrada	6
Camada escondida	9

Na RNA-S, a função de transferência usada na camada escondida foi a exponencial e na camada de saída foi a tangente hiperbólica.

A estratégia usada para validar a rede foi a divisão do banco de dados em dois grupos: 70% para o treinamento da rede e 30% para o teste. Foi utilizado dado de produção diária, um conjunto de 37 variáveis em 360 dias de produção.

2.2 Cálculo do Teor de Enxofre de Equilíbrio

Através das análises da escória é possível determinar o teor de enxofre de equilíbrio pelo modelo de partição, de acordo com a equação 13.

$$[S_{eq}] = \frac{100 \cdot Stotal}{L_S \cdot SR + 1000} \quad (13)$$

Em que:

- $[S_{eq}]$ = teor de enxofre no ferro gusa (%);
- $Stotal$ = Quantidade de enxofre carregada (kg/t gusa);
- L_S = Partição de Enxofre (-); e
- SR = Slag Rate (kg/t gusa).

A Equação 13 consiste em um balanço de massa que usa o conceito de Partição de Enxofre.

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Na Figura 1 pode-se observar que a correlação entre o teor de enxofre calculado através da RNA e o teor de enxofre real, é muito superior à correlação entre o teor de enxofre calculado através da capacidade de sulfeto e o teor real de enxofre mostrado na Figura 2.

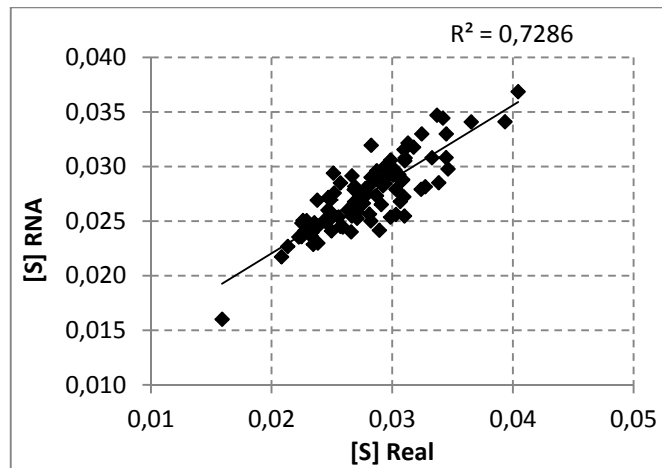


Figura 1. Correlação entre o teor de enxofre calculado pela RNA-S e o teor real de enxofre.

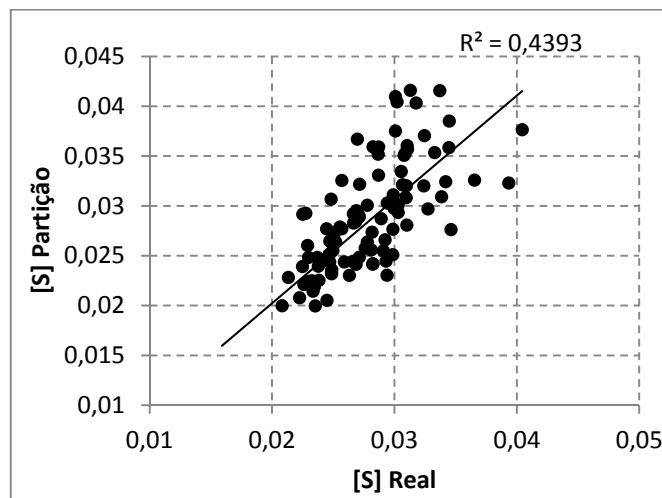


Figura 2. Correlação entre o teor de enxofre calculado através da partição de enxofre e o teor real de enxofre.

A justificativa do modelo baseado na partição de enxofre possuir menor correlação consiste em seu caráter essencialmente termodinamico. Por isso, possui desvantagens em relação às Redes Neurais, pois elas, durante a sua construção, podem considerar variáveis de caráter cinético como a pressão de sopro e a produtividade.

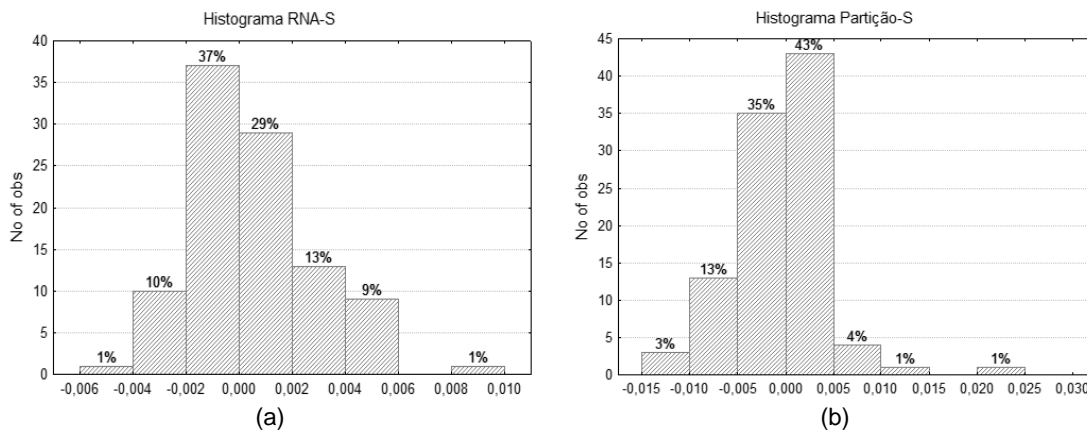


Figura 3. Diferença entre o valor real e o estimado pela (a) RNA-S e (b) Partição de Enxofre.

A Figura 3 mostra uma medida do erro durante a fase simulação de cada modelo, o baseado nas Redes Neurais e na Partição de Enxofre. Esse erro é calculado pela diferença entre o valor real e o determinado pelos Modelos. Cada histograma apresenta a porcentagem das observações em cada categoria. Analisando a Figura 3, tem-se que o modelo baseado em Redes Neurais possui melhor ajuste, pois ela possui uma maior fração das observações próximas ao valor mínimo.

4 CONCLUSÃO

As Redes Neurais apresentaram uma melhor concordância com os dados reais do processo de redução em altos-fornos, pois foram capazes de prever com maior precisão o teor enxofre no ferro gusa em relação ao modelo de Capacidade de Sulfeto. A escolha das variáveis foi significativa para determinar o teor de enxofre, pois apresentaram uma boa correlação entre o teor real e o calculado.

O modelo baseado na partição de enxofre possui um caráter essencialmente termodinamico. Por isso possui desvantagens em relação às Redes Neurais, pois elas, durante a sua construção, podem considerar variáveis de caráter cinético como a pressão de sopro e a produtividade.

A variação do teor de enxofre é influenciada pela pressão de sopro, quantidade de enxofre carregado, temperatura do gusa, composição da escória em CaO e MnO e sua produtividade e pressão de sopro. O fator cinético que influencia no teor de enxofre é a pressão de sopro e a velocidade de produção.

Agradecimentos

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia do Espírito Santo – IFES, pelo apoio na execução deste trabalho.

REFERÊNCIAS

- 1 H. Jin, S. Choi, J.-i. Yagi e J. Chung, "Dripping Liquid Metal Flow in the Lower Part of a Blast Furnace," *ISIJ International*, vol. 50, pp. 1023-1031, Julho 2010.
- 2 H. SUN, S. J. CHEW, C. KONG e L. KAMEL, "Modelling Coke Reactions in Lower Zones of a Blast Furnace," Pullenvale, 2008.
- 3 N. Kaneko, S. Matsuzaki, M. Ito, H. Oogai e K. Uchida, "Application of Improved Local Models of Large Scale Database-based Online Modeling to Prediction of Molten Iron Temperature of Blast Furnace," *ISIJ International*, vol. 50, pp. 939-945, Julho 2010.
- 4 H. Saxén e F. Pettersson, "Nonlinear Prediction of the Hot Metal Silicon Content in the Blast Furnace," *ISIJ International*, vol. 47, pp. 1732-1737, Dezembro 2007.
- 5 A. Ghosh e A. Chatterjee, *Ironmaking and Steelmaking: Theory and Practice*, New Delhi: PHI Learning, 2010.
- 6 J. A. Ricketts, *Blast Furnace Ironmaking*, Hamilton: McMaster University, 1999.
- 7 E. T. Turkdogan e R. J. Fruehan, *Fundamentals of Iron and Steelmaking*. In *Fundamentals of Iron and Steelmaking*, Pittsburgh: AISE Steel Foundation, 1999.
- 8 M. M. Nzotta, D. U. Sichen e S. Seetharaman, "Sulphide Capacities of "FeO"-SiO₂, CaO-"FeO", and "FeO"-MnO Slags," *ISIJ International*, vol. 39, pp. 657-663, Maio 1999.
- 9 Y. Taniguchi, N. Sano e S. Seetharaman, "Sulphide Capacities of CaO–Al₂O₃–SiO₂–MgO–MnO Slags in the Temperature Range 1673–1773K," *ISIJ International*, vol. 49, p. 156–163, 2009.
- 10 C.-b. Shi, X.-m. Yang, J.-s. Jiao, C. Li e H.-j. Guo, "A Sulphide Capacity Prediction Model of CaO–SiO₂–MgO–Al₂O₃ Ironmaking Slags Based on the Ion and Molecule Coexistence Theory," *ISIJ International*, vol. 50, pp. 1362-1372, Abril 2010.

- 11 K. TAMURA, K. ONO e N. NISHIDA, "Effects of Operating Factors of Blast Furnaces on the Contents of Silicon and Sulphur in Pig Iron," *Tetsu-to-Hagané*, vol. 67, pp. 2635-2644, 1981.
- 12 A. D. P. BRAGA, A. P. L. F. Carvalho e T. B. LUDERMIR, *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*, 2^o ed., LTC, 2007.