

UM ESQUEMA DE METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO POR MODELAGEM MATEMÁTICA
DE UM DIGESTOR CONTÍNUO KAMYR¹

por

Marco Aurélio L. Martins, UFV²
Celso Edmundo B. Foelkel,
RIOCELL - Rio Grande Companhia de Celulose do Sul.



Sínope

Este trabalho objetiva apresentar uma técnica simples de otimização por modelagem matemática de um digestor contínuo Kamyr. As principais variáveis que devem ser pesquisadas para compor no programa estatístico estão relacionadas. Os modelos matemáticos baseiam-se no uso de análise de regressão e correlação, pelas técnicas de regressão linear simples e múltipla. Um exemplo prático é apresentado. A técnica é suficientemente simples para ser desenvolvida mesmo sem o auxílio de computadores.

Summary

(AN EXAMPLE OF OPTIMIZATION PROCEDURE BY MATHEMATICAL
MODELING FOR A CONTINUOUS KAMYR DIGESTER)

This paper is intended to show a very simple technique for optimization of the operation of a Kamyr continuous digester by mathematical modeling. The most important variables to be analysed are related. Statistical models are based on the simple linear and multiple linear regression analysis. A practical example is shown. The technique is simple enough to be used without the help of the computer.

Redigido aos 02.08.1981

¹Trabalho realizado através do convênio Riocell/UFV

²Bolsista da Riocell na Universidade Federal de Viçosa - Curso de Mestrado em Tecnologia de Celulose e Papel

1- INTRODUÇÃO:-

A partir do início dos anos 60, com o desenvolvimento da ciência da computação, as técnicas de otimização matemática por modelagem passaram a ganhar aceitação cada vez maior. Com a possibilidade de se usar do computador para os cálculos matemáticos e estatísticos, o uso de equações de regressão múltipla foi se tornando cada vez mais comum para explicação de fenômenos físico-químicos e biológicos. Essa situação tem-se verificado em todos os campos da ciência, como, por exemplo, na agricultura, nas ciências ambientais, na micro-biologia, na físico-química e na tecnologia química, dentre outros. Todos conhecem bem os exemplos de modelagem matemática desenvolvidos para avaliar a concentração, no ambiente, de poluentes emitidos por uma fonte, quando os poluentes sofrem uma dispersão no ar ou em um curso d'água. São também conhecidos os exemplos de modelos matemáticos desenvolvidos para controle automático de equipamentos tecnológicos. Dentro do setor celulósico-papeleiro diversas empresas surgiram, desenvolvendo tecnologia de controle por computação, específicas para as diversas fases do processo. Assim, hoje é possível a instalação de controle computadorizado para máquinas de papel, para sistemas de branqueamento, para digestores contínuos, para caldeiras de recuperação, etc. Com um controle mais sensível e mais rápido, é possível ao técnico obter melhores resultados na operação desses equipamentos. Tornou-se também mais fácil se atingir situações operacionais de ótimo. Entretanto, é possível ocorrer também uma situação negativa de aceitação, pelo homem que opera, de que o computador é o responsável por tudo. Mesmo que o computador fosse uma máquina infalível, o homem não o é, e poderia, em suas interferências, causar problemas. É também viável ocorrer um desinteresse do operador em acompanhar o funcionamento do sistema, passando-se a ter técnicos de painéis e pouca ação na área. Esses aspectos negativos precisam ser levados em conta e se adotar, nesses particular, uma filosofia mista para o uso do computador e do homem no controle.

Por outro lado, não são todas as unidades industriais que dispõem de recursos para computadorizar seus sistemas. Em nosso país, onde a oferta de mão-de-obra ainda é grande, trocar o homem pela máquina, em muitas situações não é conveniente nem recomendável.

É por isso que os autores desse trabalho resolveram descrever uma metodologia simples para otimização matemática de um setor industrial de fabricação de celulose. Essa metodologia, baseada em estatística elementar, implica no conhecimento do setor que se deseja otimizar e em técnicas de análise de regressão e correlação. Para utilização dessa metodologia, pode-se valer ou não de um computador. É claro que o uso do computador para obtenção das equações entre as variáveis do processo simplificaria o processamento. Porém, a técnica é simples o suficiente para ser utilizada dispondo-se tão somente de uma calculadora de mão, como p.e., a HP-33E. Dessa forma, ela se torna acessível a todos, possuidores ou não de sistemas de controle por computador.

Decidiu-se a título de exemplo da metodologia, buscar a otimização de um digestor contínuo Kamyrr para produção de celulose. A partir desse exemplo, os interessados podem desenvolver modelos aplicáveis a outras fases do processo.

2- DESENVOLVIMENTO DA METODOLOGIA

2.1. - Suporte Bibliográfico

Nas fases de elaboração dessa metodologia utilizaram-se de algumas obras que julgou-se interessante relacionar para servir de base aos leitores para avaliação das necessidades literárias:

FOYN, T. - Kamyr Pulp Equipment. Kamyr A.B., Suécia, 61 p., 1972.

HOFFMAN, R. & VIEIRA, S. - Análise de Regressão. Husitec-Edusp, São Paulo, 339 p. 1977.

MARTINS, M.A.L. - Balanço Material do Digestor. Relatório de estágio, Guaíba, 149 p. 1980.

PERRY, R.H. & CHILTON, C.H. - Chemical Engineers' Handbook. McGraw-Hill, 5a. edição, 1973.

SMITH, B.D. - Design of Equilibrium Stage Processes.

WILLIAMS, T.J. & HOLM, R.A. - Modeling and Control of Kraft Production Systems for Pulp Production, Chemical Recovery and Energy Conservation. Instrument Society of America, 284 p., 1975

2.2. - Obtenção de Dados

Os dados necessários poderão ser obtidos laboratorialmente (análises diversas), pela instrumentação do equipamento (painel) e por balanços mássicos e térmicos de fase do processo.

Os dados devem ser obtidos de uma maneira seqüencial e pontual, ou seja, deve-se evitar trabalhar com médias diárias, por exemplo. Quando o sistema estiver funcionando homogeneamente, inicia-se a coleta de amostras de cavacos e vai-se acompanhando, com base nos tempos de retenção nas diversas etapas do processo, o caminhamento desses cavacos e sua transformação em celulose. Devem-se elaborar planilhas para coleta de resultados e montar um esquema para realização das análises e cálculos necessários. Estimamos que uma otimização como a aqui proposta implicaria na necessidade de um engenheiro, três laboratoristas e o apoio do setor operacional, durante um período de dez meses, apenas para a coleta dos dados. Um período variável de dois a quatro meses seria necessário para a realização da parte estatística, utilizando um engenheiro e dois calculistas. Em resumo, em doze meses e com poucos recursos humanos, o que significa, com baixos custos, pode-se obter a modelagem matemática de uma importante fase do processo produtivo.

2.3. - O Equipamento a ser Otimizado e as Variáveis do Programa de Otimização.

O digestor Kamyr que serviu de base para o desenvolvimento da metodologia é um digestor desenhado para produzir tanto polpa Kraft como polpa pré-hidrólise/Kraft de madeira de eucalipto. Esse digestor está em operação há cerca de quase uma década na Riocell, obtendo-se do mesmo um desempenho bastante aceitável.

Para fins de desenvolvimento do modelo matemático, considerou-se que o digestor estivesse em operação para produção de celulose Kraft. Uma vez que sua particular configuração o permite, considerou-se que a injeção do álcali ao sistema era fracionada entre a adição ao topo e adição na primeira zona de peneiras, quando a zona de cozimento

propriamente dita se inicia.

Vamos dividir o sistema em zonas distintas e analisar as principais variáveis que merecem ser analisadas e pesquisadas.

1a. etapa: ALIMENTAÇÃO DE CAVACOS

Nessa fase, as variáveis mais importantes a analisar são as características da madeira alimentada ao digestor e o total de madeira e água que ingressam no sistema.

A figura 1 mostra esquematicamente o sistema de alimentação de cavacos que consiste em um silo de cavacos, um medidor de cavacos e um alimentador de baixa pressão.

As análises que julgamos importantes serem obtidas a cada conjunto de observações são as seguintes:

Cavacos:

a)- Análises químicas rápidas

- número Kappa da serragem: realizado sobre serragem de granulometria inferior a 100 mesh;
- solubilidade da madeira (serragem) em solução de soda cáustica' 8% a 20°C, em porcentagem;
- teor de extrativos em álcool-benzeno, em porcentagem;
- consumo de soda pela madeira: relatado como o consumo de NaOH ' em gramas por 100 g de madeira a.s., após reação de 1g a.s. de serragem com 100 ml de NaOH 0,1 N por 1 hora a 100°C.

b)- Análises físicas rápidas

- classificação granulométrica utilizando-se jogo de peneiras classificatórias, em porcentagem retida nas diversas peneiras;
- densidade básica da madeira, em g/cm³;
- densidade a granel dos cavacos, em t.a.s./m³ de cavacos;
- índice de qualidade dos cavacos: trata-se de um índice arbitrário, baseado em um sistema de notas, onde os cavacos obtêm notas de 1 a 10, baseadas nos resultados da classificação granulométrica, na limpeza e no grau de deterioração dos mesmos;
- umidade, em % base peso bruto.

c)- Alimentação dos cavacos

- número de rotações por minuto do alimentador/medidor de cavacos;
- número de rotações por hora do alimentador de cavacos;
- volume de cavacos alimentado por hora, obtido pelo produto do número de rotações por hora do alimentador pelo volume de cavacos admitidos por rotação, em m³;
- peso seco de cavacos alimentado por hora, obtido pelo produto do volume de cavacos alimentado por hora (m³) pela densidade a granel dos cavacos (t/m³), em t.a.s.;
- peso de água junto à madeira alimentado por hora, em toneladas, calculado a partir da umidade dos cavacos e do peso seco alimentado por hora:

$$\text{P\u00e1gua} = \frac{\text{Peso seco} \times \% \text{ umidade}}{\% \text{ seco madeira}}$$

Rejeitos

Durante as campanhas de polpa de papel, promove-se a reciclagem '

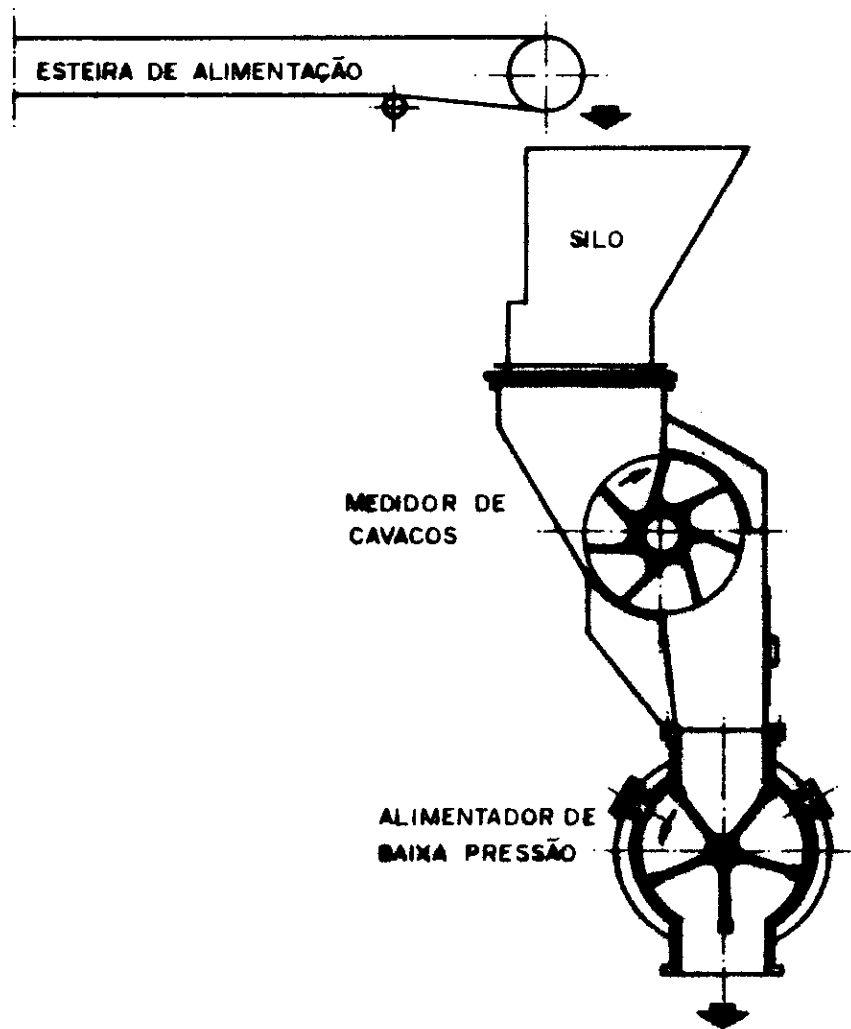


FIGURA 1: SILO DE CAVACOS, MEDIDOR DE CAVACOS E ALIMENTADOR DE BAIXA PRESSÃO.

de rejeitos do cozimento (nós mal cozidos). É importante se considerar:

- fluxo de rejeitos a.s., t/hora,
- umidade dos rejeitos, %

Planilha do setor alimentação de cavacos

Para facilitar a listagem dos dados referentes a esse setor, deve-se compor uma planilha de dados e uma planilha de cálculos. O tipo¹ de planilha de dados sugeridos está apresentado no Quadro 1.

2a. etapa: VASO DE IMPREGNAÇÃO

O sistema Kamyrr vale-se de um vaso para pré-vaporização dos cavacos com o intuito de remoção de ar e impregnação dos cavacos. A vaporização é direta e feita com vapor vivo saturado e de 4 ata e com vapor reciclado do flasheamento do licor preto extraído. Esquematicamente apresentou-se na Figura 2 o sistema de pré-impregnação dos cavacos.

Nessa etapa, as variáveis de interesse para compor no programa de otimização são:

a) - Vapor vivo

- fluxo de vapor saturado de 4 ata, t/hora;
- pressão do vapor, ata;
- temperatura T_1 , °C;
- quantidade de¹ calor por peso de madeira, kcal/kg a.s. madeira.

b) - Vapor reciclado

- fluxo de vapor reciclado, t/hora: obtido por balanço térmico / mássico;
- pressão do vapor reciclado, ata;
- temperatura T_2 do vapor reciclado, °C;
- quantidade de² calor por peso de madeira, kcal/kg a.s. madeira.

c) - Dados gerais

- tempo de retenção dos cavacos no vaso de impregnação, minutos;
- quantidade de calor total fornecida pelo vapor vivo e vapor reciclado, em kcal/kg a.s. madeira alimentada;
- pH;
- temperatura T_3 no vaso de impregnação, °C;
- matéria orgânica dissolvida, obtida em laboratório pela análise do condensado, ou através de balanço mássico;
- rendimento R_1 da etapa, em %;
- relação kg de madeira dissolvida por kcal fornecida, kg/kcal.

Planilha do setor vaso de impregnação

A planilha dos dados setorial deve obedecer ao sugerido no Quadro 2.

3a. etapa: CIRCULAÇÃO DE TOPO E ALIMENTAÇÃO DE ÂLCALI AO TOPO

Essa é a etapa que fez do sistema Kamyrr dos mais conhecidos para' cozimento contínuo de madeira. Baseia-se numa recirculação de licor

Quadro 1: Planilha de dados para o setor alimentação de cavacos

A L I M E N T A Ç Ã O D E C A V A C O S						
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	O B S E R V A Ç Õ E S			
			01	02	03	04
			\bar{X}	\bar{X}	\bar{X}	C.V.
C A V A C O S	- Classificação granulométrica	1				
	- > 45 mm ϕ	2				
	- > 8 mm espessura	3				
	- > 4 mm espessura	4				
	- < 5 mm ϕ	5				
	- < 5 mm ϕ					
	- Análises químicas	6				
	- Número kappa	7				
	- S%, %	8				
	- Extrativos álcool/benzeno, %	9				
	- Consumo NaOH					
	- Densidade	10				
	- Básica, g/cm ³	11				
	- A granel, t/m ³					
	- Índice de qualidade	12				
	- Umidade, %	13				
	- Alimentador, rpm	14				
	- Nº rotações/hora	15				
	- Volume alimentado por hora, m ³	16				
	- Peso seco/hora, t.a.s.	17				
- Peso de água na madeira, t/hora	18					
- Fluxo de rejeitos a.s., t/hora	19					
- Umidade, %	20					
Observações:						

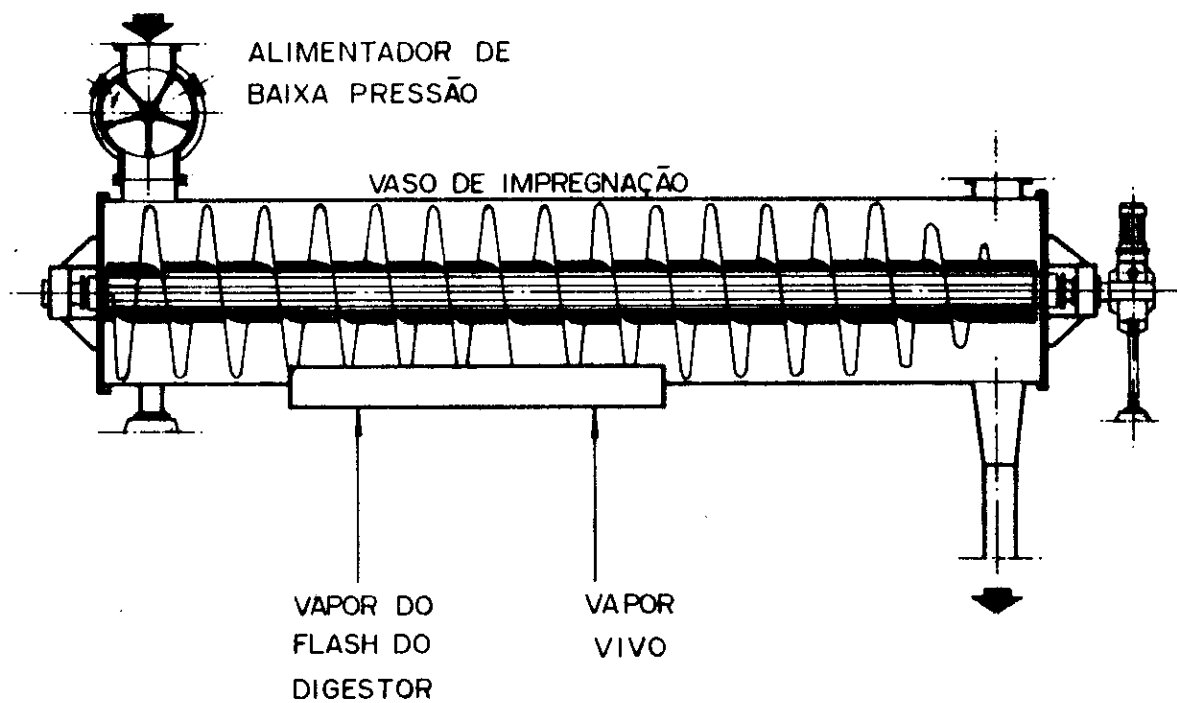


FIGURA 2 : VASO DE IMPREGNAÇÃO

Quadro 2: Planilha de dados para o setor vaso de impregnação

VASO DE IMPREGNAÇÃO										
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	OBSERVAÇÕES				C.V.			
			01	02	03	04				
VAPOR VIVO	- Fluxo, t/hora	21	a	b	c	...	+	\bar{X}_{21}	...	+
	- Pressão, ata	22	a'	b'	c'	...	+	\bar{X}_{22}	...	+
	- Temperatura T ₁ , °C	23
	- kcal/kg a.s. madeira	24
VAPOR RECICLADO	- Fluxo, t/hora	25								
	- Pressão, ata	26								
	- Temperatura T ₂ , °C	27								
	- kcal/kg a.s. madeira	28								
DADOS GERAIS	- Tempo, min.	29								
	- kcal totais/kg a.s. madeira	30								
	- pH	31								
	- Temperatura vaso T ₃ , °C	32								
	- Matéria orgânica dissolvida, t/hora	33								
	- Rendimento R ₁ , %	34								
- kg madeira dissolvida/kcal	35									
Observações:							Data			
							Hora			

para transportar os cavacos (circulação de topo), num alimentador de alta pressão especial, e num separador de topo para separar os cavacos do licor de transporte. A alimentação do licor de cozimento ao topo é feita por bombeamento e alta pressão de uma mistura de licor branco, licor de lavagem (oriundo do setor de lavagem da polpa) e de águas de fugas (condensados, água de selagem, etc). Em geral, na Riocell, o cozimento é feito com injeção fracionada de álcali, sendo parte adicionada no topo e parte na primeira zona de peneiras. Importante consideração é que durante a tomada de dados, o nível no tanque de nível de licor deve ser mantido constante.

A Figura 3 mostra esquematicamente o alimentador de alta pressão, a circulação de topo, a circulação do funil, a alimentação de álcali ao topo e o separador de topo.

Nessa etapa, as variáveis de interesse para compor no programa de otimização são as seguintes:

a) - Licor de cozimento

- fluxo, em $m^3/hora$;
- concentração em álcali ativo, em gramas NaOH/l;
- concentração em álcali total, em gramas NaOH/l;
- sulfididade do licor de cozimento, em %;
- álcali ativo que ingressa no digestor, em t/hora;
- álcali total que ingressa no digestor, em t/hora.

b) - Licor da circulação de topo

- fluxo, em $m^3/hora$;
- teor de orgânicos, em %
- teor de inorgânicos, em %;
- matéria orgânica dissolvida, obtida por um balanço de massa, em t/hora;
- concentração em álcali ativo, em gramas NaOH/l;
- concentração em álcali total, em gramas NaOH/l.

c) - Dados gerais

- rendimento R_2 na etapa, em % obtido por um balanço mássico;
- peso seco de madeira ingressando no digestor, obtido pelo produto da variável 17 e rendimentos R_1 e R_2 , em t.a.s./hora;
- carga de álcali ativo ao topo, expressa em % NaOH ativo base madeira a.s.;
- matéria orgânica dissolvida na etapa por kg de álcali ativo consumido na etapa, obtida por balanço material, expressa em $\frac{T}{kg \text{ a.s./kg NaOH consumido}}$;
- fator de diluição na entrada do digestor, em litros de licor/kg de madeira a.s., obtido por balanço mássico;

- temperatura T_4 da circulação de topo, em $^{\circ}C$;
- temperatura T_5 do licor de cozimento, em $^{\circ}C$.

Planilha do setor circulação de topo e alimentação de álcali ao topo.

A planilha dos dados desse setor deve obedecer ao sugerido no Quadro 3.

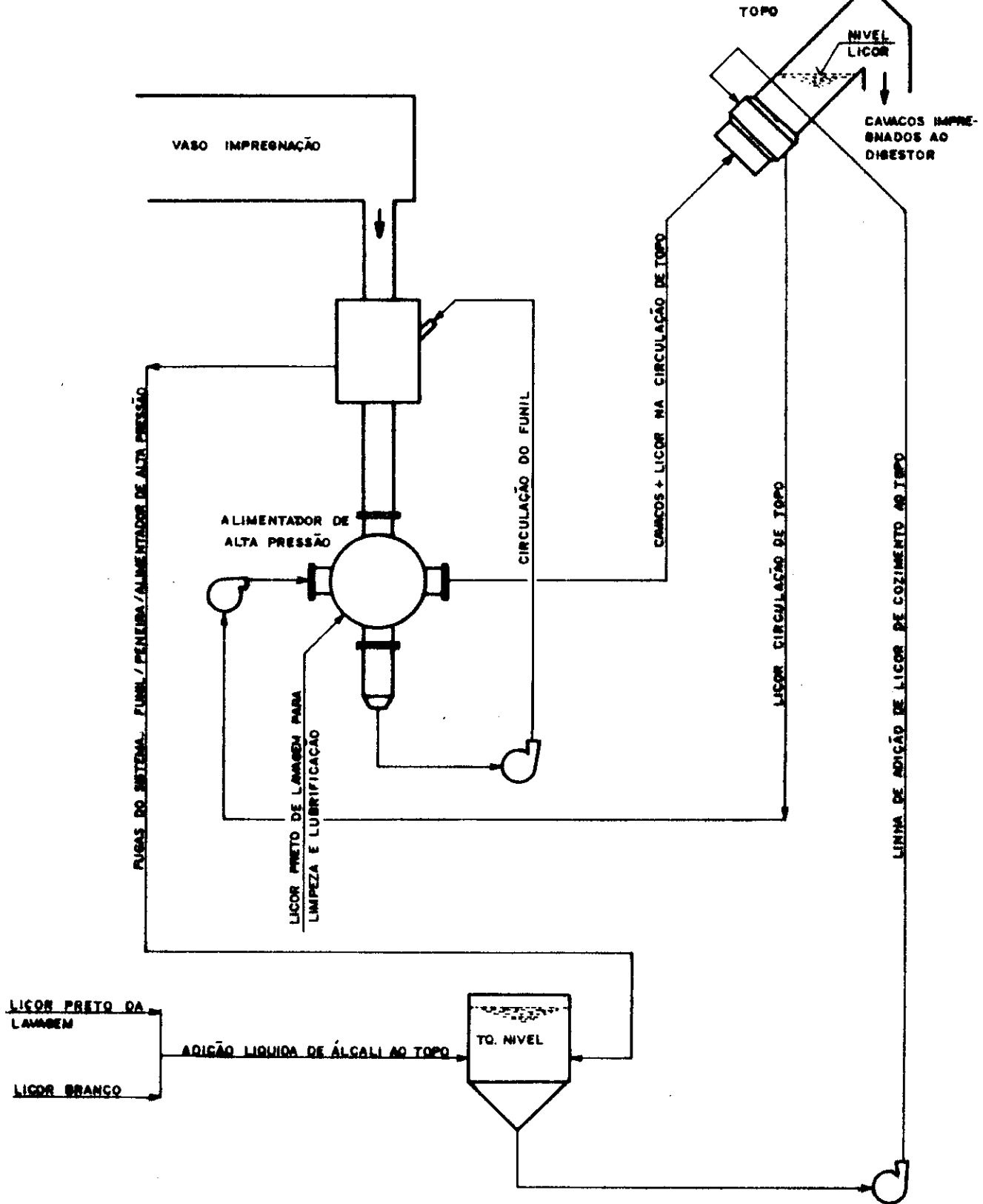


FIGURA 3 : SISTEMA KAMYR PARA ALIMENTAÇÃO DE CAVACOS E LICOR AO CORPO DO DIGESTOR

Quadro 3: Planilha de dados para o setor circulação de topo e alimentação de álcali ao topo

CIRCULAÇÃO DE TOPO E ALIMENTAÇÃO DE ÁLCALI AO TOPO							
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	OBSERVAÇÕES				
			01	02	03	04	C.V.
LICOR COZIMENTO	- Fluxo, m ³ /h	36	a	b	c	...	→
	- Álcali ativo, g/l	37	a'	b'	c'	...	→
	- Álcali total, g/l	38	→
	- Sulfididade, %	39	→
	- Álcali ativo ao digestor, t/hora	40	→
	- Álcali total ao digestor, t/hora	41	→
LICOR CIRCULAÇÃO DE TOPO	- Fluxo, m ³ /hora	42					
	- Orgânicos, %	43					
	- Inorgânicos, %	44					
	- Matéria orgânica dissolvida, t/hora	45					
	- Álcali ativo, g/l	46					
	- Álcali total, g/l	47					
DADOS GERAIS	- Rendimento R ₂ , %	48					
	- Peso seco madeira ao digestor, t/hora	49					
	- Carga alcalina ativa ao topo, % NaOH	50					
	- kg matéria orgânica/kg NaOH consumido	51					
	- Fator de diluição, l/kg	52					
	- Temperatura T ₁ da circulação de topo, °C	53					
- Temperatura T ₂ do licor de cozimento, °C	54						
Observações:		Data					
		Hora					

4a. etapa: DESCRIÇÃO DO SISTEMA DE COZIMENTO E LAVAGEM INTERNAMENTE NO DIGESTOR.

O digestor Kamyrr em análise possui três zonas distintas em seu corpo: zona de homogeneização, zona de cozimento e extração e zona de lavagem e descarga. Cada uma delas é responsável por uma importante etapa do processo de deslignificação.

Na zona de homogeneização os cavacos já estão em contato com o licor de cozimento e com temperatura suficiente para se iniciarem as reações de remoção de lignina. A temperatura é elevada por injeção de vapor no topo do digestor e é uniformizada por reciclo do licor, removendo-o pela primeira zona de peneiras, passando-o através de um trocador de calor TC-1 e injetando-o de volta ao digestor logo acima desta zona de peneiras.

Nessa região ocorre a completa impregnação dos cavacos pelo licor e se iniciam as reações de solubilização de lignina, carboidratos facilmente degradáveis e extrativos. Como seu próprio nome indica, essa zona tem por função homogeneizar os cavacos quanto a temperatura e impregnação, para que adentrem uniformemente na zona de cozimento.

Na zona de cozimento as reações de deslignificação são completadas ao nível desejado. Parte do álcali ativo total requerido é adicionado pouco antes dessa zona, fazendo-se a adição junto ao licor de reciclo da zona de homogeneização, antes do trocador de calor TC-1. Ao final da zona de cozimento, o licor residual é extraído na segunda zona de peneiras. Nessa fase, os cavacos já se transformaram em polpa e devem continuar seu percurso no digestor, passando pela zona de lavagem em contra-corrente.

O licor de extração, residual do cozimento, rico em matéria-orgânica e compostos de sódio, é enviado para um sistema de dois ciclos para flasheamento. O vapor de flash é recuperado, indo parte ao vaso de impregnação do digestor e parte para trocadores de calor.

Da mesma forma que para a zona de homogeneização, há no final da zona de cozimento uma uniformização da temperatura, pouco antes da segunda zona de peneiras. Parte do licor residual de cozimento é extraído junto ao licor residual da lavagem em contra-corrente, na última peneira extratora da segunda zona de peneiras. Esse licor de recirculação da segunda zona de peneiras passa por um trocador de calor TC-2 e é realimentado internamente no digestor pouco antes da segunda zona de peneiras.

Na zona de lavagem a polpa é lavada em contra-corrente com licor preto fraco proveniente de lavagens subsequentes, como por exemplo, do lavador difusor. Esse licor é injetado ao fundo do digestor e sobe em sentido contrário ao fluxo da polpa, sendo extraído na segunda zona de peneiras. Para uniformizar a temperatura do licor de lavagem existe a terceira zona de peneiras que extrai parte do licor de recirculação da lavagem em trânsito. Esse licor de recirculação da lavagem passa por um trocador de calor TC-3, sendo realimentado pouco acima da própria terceira zona de peneiras.

Na base do digestor existe um raspador que se move lentamente, o raspador de fundo, com a função de facilitar o fluxo da polpa e a descarga. A polpa lavada pelo sistema Hi-Heat é removida de dentro

do digestor por uma unidade de descarga. Essa polpa ainda possui álcali residual a acompanhá-la, pois a lavagem interna não é completa. Dessa forma ela deve ser encaminhada a sistemas de depuração e lavagem.

Para fins de facilitar o entendimento, foi construído um gráfico ilustrativo do corpo do digestor com as principais linhas de fluxo (Figura 4).

5a. etapa: ZONA DE HOMOGENEIZAÇÃO DO DIGESTOR

Nessa etapa, as variáveis de interesse para compor no programa de otimização são:

- temperatura T_6 (cavacos + licor) no nível do licor dentro do digestor, °C;
- temperatura T_7 (cavacos + licor) na zona de homogeneização, °C;
- temperatura T_8 do licor de reciclo da homogeneização + licor branco, antes do trocador de calor TC-1, °C;
- temperatura T_9 do licor de reciclo da homogeneização + licor branco, após o trocador de calor TC-1, °C;
- consumo de vapor no trocador de calor TC-1, t/hora;
- quantidade de calor suprida no trocador de calor TC-1, em kcal/hora;
- fluxo de licor branco ao trocador de calor TC-1, em m^3 /hora;
- concentração em álcali ativo do licor branco, em gramas NaOH/l;
- concentração em álcali total do licor branco, em gramas NaOH/l;
- sulfidade do licor branco, em porcentagem;
- carga alcalina aplicada base madeira na injeção de licor branco na primeira zona de peneiras, em % NaOH base madeira a.s.;
- carga alcalina total aplicada base madeira, em % NaOH total base madeira a.s.;
- fluxo do licor de reciclo (circulação de homogeneização), em m^3 /hora;
- matéria orgânica no licor de reciclo, em t/hora;
- relação matéria orgânica/cavacos a.s. ao digestor em kg a.s./kg a.s.;
- relação licor/madeira na zona de homogeneização, em l/kg, obtida por balanço de material;
- consumo de vapor ao topo, t/hora;
- pressão do vapor ao topo, em ata;
- temperatura T_{10} do vapor ao topo, °C;
- quantidade de calor base madeira relativa ao vapor ao topo, kcal/kg a.s.;
- fator H_1 , referente à zona de homogeneização;
- tempo de retenção na zona de homogeneização, em horas: calculado pela equação:

$$\text{tempo} = \frac{V \times c}{v \times \text{rpm}}$$

onde:-

V = volume da zona de homogeneização do digestor;

c = constante da zona de homogeneização;

v = volume de uma rotação do medidor de cavacos;

rpm = número de rotações do medidor de cavacos em uma hora.

Planilha do setor zona de homogeneização do digestor

A planilha de dados desse setor está sugerida no Quadro 4.

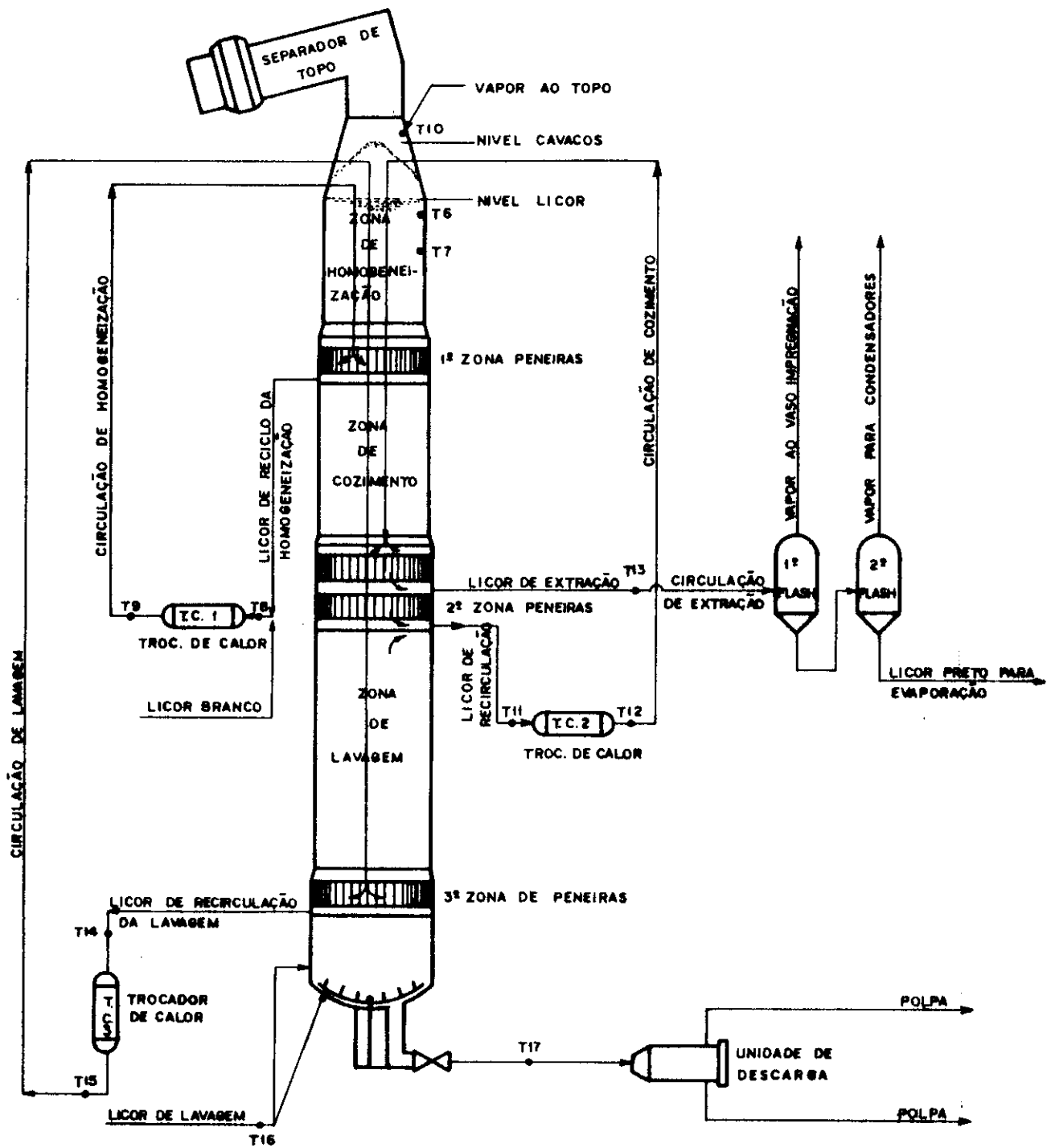


FIGURA 4 : DIGESTOR CONTINUO KAMYR

Quadro 4: Planilha de dados para o setor zona de homogeneização do digestor.

ZONA DE HOMOGENEIZAÇÃO DO DIGESTOR							
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	OBSERVAÇÕES				
			01	02	03	04	C.V.
TEMPERATURAS	- T ₆ , °C	55	a	b	c	...	→
	- T ₇ , °C	56	a'	b'	c'	...	→
	- T ₈ , °C	57	:	:	:	...	→
	- T ₉ , °C	58	:	:	:	...	→
TC-1	- Consumo vapor, t/hora	59					
	- kcal/hora	60					
ALCALI À 1ª ZONA PENEIRAS	- Fluxo, m ³ /hora	61					
	- Alcali ativo, g/l	62					
	- Alcali total, g/l	63					
	- Sulfididade, %	64					
	- Carga alcalina parcial	65					
	- Carga alcalina total	66					
CIRCUL. HOMOGE-NEIZAÇÃO	- Fluxo, m ³ /hora	67					
	- Matéria-orgânica, t/hora	68					
	- kg m.o./kg madeira	69					
VAPOR AO TOPO	- Pressão, ata	70					
	- T ₁₀ , °C	71					
	- Consumo, t/hora	72					
	- kcal/kg madeira	73					
DADOS GERAIS	- Relação licor/madeira, l/kg	74					
	- Fator H ₁	75					
	- Tempo de retenção, horas	76					
Observações:							
		Data					
		Hora					

6a. etapa: ZONA DE COZIMENTO E EXTRAÇÃO DO DIGESTOR

Nessa etapa, as variáveis para compor no programa de otimização são as seguintes:

- temperatura T_{11} do licor de recirculação do cozimento, antes do trocador de calor TC-2, °C;
- temperatura T_{12} do licor de recirculação do cozimento, após o trocador de calor TC-2, °C;
- temperatura T_{13} do licor de extração, °C;
- consumo de vapor no trocador de calor TC-2, em t/hora;
- quantidade de calor suprida no trocador de calor TC-2 em kcal / hora;
- concentração em álcali ativo do licor de extração, em gramas NaOH por litro;
- concentração em álcali total do licor de extração, em gramas NaOH por litro;
- densidade do licor de extração, $\rho_{Bé}$;
- fluxo do licor de extração, $m^3/hora$;
- álcali ativo total extraído, t/hora;
- álcali total extraído, t/hora;
- consumo de álcali ativo no cozimento, em t/hora, obtido por balanço de massa;
- relação álcali ativo residual no licor de extração/álcali ativo inicial total, em porcentagem;
- consumo de álcali total no cozimento, em t/hora, obtido por balanço de massa;
- relação álcali total residual no licor de extração/álcali total inicial, em porcentagem;
- relação álcali ativo residual/madeira, em porcentagem de NaOH base madeira a.s.;
- relação álcali total residual/madeira, em porcentagem de NaOH base madeira a.s.;
- concentração em álcali ativo do licor entrando junto com a polpa na zona de lavagem, em gramas NaOH/litro;
- concentração em álcali total do licor entrando junto com a polpa na zona de lavagem, em gramas NaOH/litro;
- relação álcali ativo ingressando com a polpa na zona de lavagem /madeira a.s. ao digestor, em porcentagem de NaOH base madeira;
- relação licor/madeira na zona de cozimento, em litros/kg a.s., obtida através balanço de massa;
- relação licor/madeira após a 2a. zona de peneiras, em litros / kg a.s., obtida através balanço de massa;
- perda alcalina total na polpa após 2a. zona de peneiras, em kg NaOH/t.a.s de polpa;
- matéria-orgânica no licor de extração, em t/hora;
- relação matéria-orgânica/madeira ao digestor, em kg/kg a.s.;
- fator H_2 , referente à zona de cozimento;
- tempo de retenção na zona de cozimento, em horas, calculado por equação similar à apresentada na 5a. etapa desse trabalho.

Planilhas do setor zona de cozimento e extração

Frente ao número maior de variáveis que precisam ser levadas em conta nessa zona do digestor, foram necessárias duas planilhas de dados. As sugestões para essas planilhas constam dos Quadros 5 e 6.

7a. etapa: ZONA DE LAVAGEM E DESCARGA

Nessa etapa, as variáveis operacionais escolhidas para compor no

Quadro 5: Planilha de dados nº 1 referente ao setor zona de cozimento e extração do digestor

ZONA DE COZIMENTO E EXTRAÇÃO DO DIGESTOR - PLANILHA 1								
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	OBSERVAÇÕES					
			01	02	03	04	C.V.	
TEMPERATURAS	- T ₁₁ , °C	77	a	b	c	...	→	\bar{X}_{77} ... →
	- T ₁₂ , °C	78	a'	b'	c	...	→	\bar{X}_{78} ... →
	- T ₁₃ , °C	79	→	...
TC-2	- Consumo vapor, t/hora	80						
	- kcal/hora	81						
LÍQUOR DE EXTRAÇÃO	- Alcali ativo, g/l	82						
	- Alcali total, g/l	83						
	- Fluxo, m ³ /h	84						
	- Alcali ativo extraído, t/hora	85						
	- Alcali total extraído, t/hora	86						
	- Matéria orgânica, t/hora	87						
CONSUMO ALCALI NO COZIMENTO	- Relação m.o./madeira	88						
	- Densidade, °Bé	89						
	- Alcali ativo, t/hora	90						
	- A.A. residual/A.A. inicial	91						
	- Alcali total, t/hora	92						
	- A.T. residual/A.T. inicial	93						
	- A.A. residual/madeira	94						
	- A.T. residual/madeira	95						
<u>Observações:</u>		Data						
		Hora						

programa de otimização foram as seguintes:

- temperatura T_{14} do licor de recirculação da lavagem, antes do trocador de calor TC-3, °C;
- temperatura T_{15} do licor de recirculação da lavagem, após o trocador de calor TC-3, °C;
- temperatura T_{16} do licor de lavagem ao fundo do digestor, °C;
- temperatura T_{17} da polpa à unidade de descarga, °C;
- consumo de vapor no trocador de calor TC-3, em t/hora;
- quantidade de calor suprida no trocador de calor TC-3 em kcal/hora;
- concentração em álcali ativo do licor de lavagem proveniente do lavador difusor, em gramas NaOH/litro;
- concentração em álcali total do licor de lavagem proveniente do lavador difusor, em gramas NaOH/litro;
- matéria orgânica no licor de lavagem, em t/hora;
- fluxo total de licor de lavagem, m^3 /hora;
- fluxo útil de licor para lavagem, m^3 /hora, obtido levando-se em conta a diluição da polpa e a consistência da polpa na descarga;
- fator de diluição na zona de lavagem, litros licor/kg a.s. polpa;
- carga alcalina ativa ingressando no fundo do digestor como licor de lavagem, em t/hora;
- carga alcalina total ingressando no fundo do digestor como licor de lavagem, em t/hora;
- consistência da polpa na descarga, %;
- peso a.s. de polpa na descarga (produção), t/hora;
- peso de licor residual junto à polpa na descarga, t/hora;
- perda alcalina na descarga, kg NaOH/t.a.s. polpa;
- matéria orgânica no licor residual que acompanha a polpa em t/hora;
- fluxo do licor da circulação de lavagem, m^3 /hora;
- concentração em álcali ativo do licor da circulação de lavagem, em gramas NaOH/litro;
- concentração em álcali total do licor da circulação de lavagem, em gramas NaOH/litro.

Planilha do setor zona de lavagem e descarga.

A sugestão para a planilha de dados para essa zona do digestor está mostrada no Quadro 7.

8a. etapa: ANÁLISE DA POLPA PRODUZIDA E INSUMOS TOTAIS

As seguintes variáveis podem ser medidas e entrarem no programa de otimização:

- rendimento bruto em celulose, R_3 , expresso em porcentagem, relacionando toneladas a.s. de polpa bruta produzida e toneladas a.s. de madeira consumida;
- rendimento depurado em celulose - R_4 , expresso em porcentagem, relacionando toneladas a.s. de polpa depurada produzida e toneladas a.s. de madeira consumida;
- teor de rejeitos, expresso em porcentagem;
- consumo específico de madeira, expresso em m^3 cavacos/toneladas a.s. de polpa depurada produzida;
- quantidade de calor total utilizada por peso a.s. de madeira, em kcal/kg a.s.;
- quantidade de calor total utilizada por peso a.s. de polpa produzida, em kcal/kg a.s.;

Quadro 7: Planilha de dados para o setor zona de lavagem interna e descarga do digestor

ZONA DE LAVAGEM INTERNA E DESCARGA DO DIGESTOR						
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	O B S E R V A Ç Õ E S			
			01	02	03	04
TEMPERATURAS	- T ₁₄ , °C	104	a	b	c	\bar{X}_{104} ... +
	- T ₁₅ , °C	105	a'	b'	c'	\bar{X}_{105} ... +
	- T ₁₆ , °C	106	:	:	:	...
	- T ₁₇ , °C	107	+	+	+	...
TC-3	- Consumo vapor, t/hora	108				
	- kcal/hora	109				
LICOR DE LAVAGEM	- Alkali ativo, g/l	110				
	- Alkali total, g/l	111				
	- Matéria orgânica, t/hora	112				
	- Fluxo, m ³ /hora	113				
	- Fluxo útil, m ³ /hora	114				
	- Fator de diluição, l/kg	115				
	- Carga alcalina ativa, t/hora	116				
- Carga alcalina total, t/hora	117					
CIRCUL. LAVAGEM	- Fluxo, m ³ /hora	118				
	- Alkali ativo, g/l	119				
	- Alkali total, g/l	120				
DESCARGA	- Consistência, %	121				
	- Produção a.á., t/hora	122				
	- Licor residual, t/hora	123				
	- Perda alcalina, kg/t	124				
	- Matéria orgânica, t/hora	125				
Observações:		Data				
		Hora				

- carga alcalina ativa total aplicada por peso a.s. de madeira , em kg NaOH/100 kg madeira a.s.;
- carga alcalina ativa total aplicada por peso a.s. de polpa produzida, em kg NaOH/t polpa a.s.;
- número Kappa da polpa;
- solubilidade em NaOH 5% (s₅) da polpa; em %;
- viscosidade intrínseca da polpa, em cm³/g;
- alvura, em %GE;
- tempo de moagem da polpa para se atingir, p.e. 35%SR, em minutos;
- comprimento de auto-ruptura a 35%SR, em Km;
- fator de estouro a 35%SR;
- fator de rasgo a 35%SR;
- dobras duplas a 35%SR;
- alongação a 35%SR; em %;
- densidade aparente a 35%SR, em g/cm³;
- porosidade a 35%SR, em s/100 cm³;
- índice de qualidade da polpa não branqueada.

Planilha de dados para a caracterização da polpa produzida e insumos totais

A sugestão para essa planilha de dados consta no Quadro 8.

2.4. - Aplicação da técnica de otimização

No ítem anterior, procurou-se descrever, de maneira geral, o esquema de digestão contínua a ser otimizado e quais as variáveis que poderiam ser incluídas no processo de otimização.

Definidos os parâmetros que necessitam ser medidos e calculados , pode-se iniciar a coleta de dados. Conforme já mencionado anteriormente, a coleta das amostras deve ser feita de tal forma a acompanhar o processamento de um mesmo material. Para isso é fundamental o conhecimento dos tempos de retenção nas diversas fases do sistema. O sucesso da amostragem dependerá da presteza e do cuidado da equipe em atividade. As amostras/dados devem ser colhidas/obtidos com o sistema funcionando de maneira contínua e uniforme. Recomenda-se coletar amostras referentes a dois níveis usuais de produção, p.e., com o medidor de cavacos funcionando a 17 e 19 rpm. O número ideal de observações a colher é de 40 por nível de produção, ou seja, 80 conjuntos de observações totais. A coleta de um conjunto global de amostras e dados deve tomar um dia útil. Reservando-se mais dois dias para cálculos e análises, significa que apenas dois conjuntos de observações podem ser tomados por semana. Para oitenta conjuntos de observações serão necessárias quarenta semanas, ou seja cerca de dez meses.

Nas etapas anteriores deste trabalho, mostrou-se que 146 variáveis poderiam ser medidas e calculadas para a sistemática de otimização . Caso se procedam 80 amostragens, disporemos de um total de 11680 dados, sendo 5840 referentes ao nível de 17 rpm do medidor de cavacos e 5840 para o nível 19 rpm.

Sugere-se realizar a otimização matemática a cada um dos níveis de alimentação, ou seja, a modelagem matemática seria executada para níveis fixos de alimentação de cavacos. Com isso, evita-se a interferência das diferentes alimentação/"produção" nos resultados. Por outro lado, será possível se comparar os modelos obtidos aos dois níveis de alimentação/"produção" e chegar-se a conclusões sobre o efei

Quadro 8: Planilha de dados para a caracterização da polpa produzida e insumos totais

CARACTERIZAÇÃO DA POLPA E INSUMOS TOTAIS							
SETOR	Variável do programa	Variável Nº	OBSERVAÇÕES				
			01	02	03	04	C.V.
RENDIMENTOS	- Rendimento bruto R ₃ , %	126	a	b	c	...	→
	- Rendimento depurado R ₄ , %	127	a'	b'	c'	...	→
	- Teor de rejeitos, %	128	:	:	:	...	→
CONSUMOS	- Madeira, m ³ /t.a.s. polpa	129					
	- Calor, kcal/kg a.s. madeira	130					
	- Calor, kcal/kg a.s. polpa	131					
	- Carga alcalina ativa total, kg NaOH/100 kg madeira	132					
	- Carga alcalina ativa total, kg NaOH/t.a.s. polpa	133					
POLPA	- Número kappa	134					
	- S ₅	135					
	- Viscosidade intrínseca, cm ³ /g	136					
	- Alvura, %GE	137					
	- Tempo de moagem, min.	138					
	- Auto-ruptura, km	139					
	- Fator de estouro	140					
	- Fator de rasgo	141					
	- Dobras duplas	142					
	- Elongação, %	143					
	- Densidade aparente, g/cm ³	144					
	- Porosidade, δ/100 cm ³	145					
- Índice de qualidade	146						
Observações:							

to do aumento/diminuição de "produção" sobre o comportamento e inter-relação das demais variáveis.

Colhidos todos os dados e preenchidas as planilhas, pode-se iniciar a segunda fase da pesquisa, que é a busca de correlação simples entre cada par de variáveis.

Através de análise de regressão linear simples, deve-se procurar verificar a inter-dependência, a um mesmo nível de alimentação/"produção", entre cada par de variáveis, p.e., entre as variáveis 1 e 2, 1 e 3, 1 e 4 1 e 146; 2 e 3, 2 e 4, 2 e 5 ... 2 e 146, etc.

Seja., p.e., a obtenção da equação linear relacionando as variáveis 1 e 2:

$$\hat{Y}_2 = \hat{a} + b X_1$$

(variável 2)
dependente

(variável 1)
independente

O grau de precisão com que a reta apresenta a variação de Y_2 em função de X_1 é dado pelo coeficiente de correlação simples $r_{1,2}$. O valor de r pode variar de -1 a +1, sendo que os valores absolutos próximos de um indicam alta correlação e os próximos de zero, ausência de correlação. Deve-se adotar um nível de significação da ordem de 0,1% ou de 0,05%, para eliminar da análise as variáveis que guardam baixa correlação entre si.

Os cálculos a serem realizados para obtenção dos coeficientes \hat{a} e \hat{b} e para obtenção de r são os seguintes, para cada par de variáveis:

$$b = \frac{\sum XY - \frac{(\sum X)(\sum Y)}{N}}{\sum X^2 - \frac{(\sum X)^2}{N}}$$

$\hat{a} = \bar{Y} - b \bar{X}$; onde \bar{Y} = média dos Y
 \bar{X} = média dos X

$$r = \frac{\sum XY - \frac{(\sum X)(\sum Y)}{N}}{\sqrt{\left[\sum X^2 - \frac{(\sum X)^2}{N} \right] \cdot \left[\sum Y^2 - \frac{(\sum Y)^2}{N} \right]}}$$

Obtidos os coeficientes de correlação simples entre todos os pares variáveis, pode-se contruir uma matriz de coeficientes de correlação, conforme o exemplo a seguir:

Variável	1	2	3	4	146
1	-	$r_{1,2}$	$r_{1,3}$	$r_{1,4}$	$r_{1,146}$
2		-	$r_{2,3}$	$r_{2,4}$	$r_{2,146}$
3			-	$r_{3,4}$	$r_{3,146}$
4				-		
⋮						
⋮						
146					etc.	

A matriz é simétrica, ou seja, o coeficiente de correlação é o mesmo entre as variáveis 1 e 2 ou 2 e 1, independente de qual seja a variável dependente ou independente. Entretanto, os parâmetros \hat{a} e \hat{b} são diferentes, conforme 1 ou 2 sejam as variáveis dependentes. Muita atenção precisa ser colocada nesse particular.

Nessa fase do sistema de otimização já será possível saber, aos dois níveis de alimentação/"produção" do digestor, quais as variáveis que guardam interdependência e, de que forma é essa interdependência, p.e.:

- 1) - Variável 126 (rendimento R_3) vs Variável 134 (número Kappa)

$$\hat{Y}_{126} = \hat{a} + \hat{b} X_{134} (r_{126,134})$$

- 2) Variável 129 (consumo específico de madeira) vs Variável 10 (densidade básica da madeira)

$$\hat{Y}_{129} = \hat{a}' + \hat{b}' X_{10} (r_{10,129})$$

- 3) Variável 122 (produção) vs Variável 11 (densidade a granel dos cavacos)

$$\hat{Y}_{122} = \hat{a}'' + \hat{b}'' X_{11} (r_{11,122})$$

Na fase a seguir, serão buscadas equações ligeiramente mais complexas, pela adoção da técnica da regressão linear múltipla. O modelo matemático que sugerimos ser adotado é o seguinte:

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b} X_i + \hat{c} X_j + \hat{d} X_k$$

A modelagem matemática será então baseada em uma regressão linear múltipla com uma variável dependente e três variáveis independentes.

A estimativa dos parâmetros \hat{a} , \hat{b} , \hat{c} e \hat{d} é feita com base em dois tipos de cálculos: matricial e algébrico.

1º esquema: Regressão linear múltipla por cálculo matricial

Seja o modelo:

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b} X_i + \hat{c} X_j + \hat{d} X_k$$

Construimos as matrizes:

$$X'X = \begin{vmatrix} n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \Sigma X_i^2 & \Sigma X_i X_j & \Sigma X_i X_k \\ 0 & \Sigma X_i X_j & \Sigma X_j^2 & \Sigma X_j X_k \\ 0 & \Sigma X_i X_k & \Sigma X_j X_k & \Sigma X_k^2 \end{vmatrix}$$

$$X'Y = \begin{vmatrix} \Sigma Y \\ \Sigma X_i Y \\ \Sigma X_j Y \\ \Sigma X_k Y \end{vmatrix}$$

A seguir obtemos

$$(X'X)^{-1}$$

e depois

$$(X'X)^{-1} \cdot (X'Y) = \begin{vmatrix} \bar{y} \\ \hat{b} \\ \hat{c} \\ \hat{d} \end{vmatrix}$$

O valor de \hat{a} é tirado de

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \bar{X}_i - \hat{c} \bar{X}_j - \hat{d} \bar{X}_k$$

O coeficiente de correlação linear múltipla é dado por:

$$R^2 = \frac{SQ_{\text{regressão}}}{SQ_{\text{total}}}$$

onde

$$SQ_{\text{regressão}} = \hat{a} \Sigma Y + \hat{b} (\Sigma X_i Y) + \hat{c} (\Sigma X_j Y) + \hat{d} (\Sigma X_k Y) - n \bar{y}^2$$

$$SQ_{\text{total}} = \Sigma y^2 - \frac{(\Sigma Y)^2}{n}$$

2º esquema: Regressão linear múltipla por cálculo algébrico

Para o cálculo da equação de regressão múltipla se fazem necessários diversos cálculos simples, possíveis de serem realizados com uma calculadora de apenas uma memória.

São necessários os seguintes termos para compor as equações parciais que nos permitirão obter os coeficientes \hat{a} , \hat{b} , \hat{c} e \hat{d} :

Médias gerais:

$$\bar{y} = \frac{\Sigma Y}{n}$$

$$\bar{x}_j = \frac{\Sigma X_j}{n}$$

$$\bar{x}_i = \frac{\Sigma X_i}{n}$$

$$\bar{x}_k = \frac{\Sigma X_k}{n}$$

Termos:

$$A = \Sigma y^2 - n \bar{y}^2$$

$$B = \Sigma X_i^2 - n \bar{X}_i^2$$

$$C = \Sigma X_j^2 - n \bar{X}_j^2$$

$$D = \Sigma X_k^2 - n \bar{X}_k^2$$

$$E = \Sigma X_i y - n \bar{X}_i \bar{y}$$

$$F = \Sigma X_j y - n \bar{X}_j \bar{y}$$

$$G = \Sigma X_k y - n \bar{X}_k \bar{y}$$

$$H = \Sigma X_i X_j - n \bar{X}_i \bar{X}_j$$

$$I = \Sigma X_i X_k - n \bar{X}_i \bar{X}_k$$

$$K = \Sigma X_j X_k - n \bar{X}_j \bar{X}_k$$

Deve-se a seguir compor três equações normais com os termos calculados anteriormente e como incógnitas possuindo os coeficientes \hat{b} , \hat{c} e \hat{d} .

$$E = B \hat{b} + H \hat{c} + I \hat{d} \quad (1)$$

$$F = H \hat{b} + C \hat{c} + K \hat{d} \quad (2)$$

$$G = I \hat{b} + K \hat{c} + D \hat{d} \quad (3)$$

A resolução do sistema de três equações com três incógnitas permite obter os valores de \hat{b} , \hat{c} e \hat{d} .

O valor de \hat{a} é tirado da equação.

$$\hat{a} = \bar{y} - \hat{b} \bar{X}_i - \hat{c} \bar{X}_j - \hat{d} \bar{X}_k$$

A equação de regressão múltipla será

$$\hat{y} = \hat{a} + \hat{b} X_i + \hat{c} X_j + \hat{d} X_k$$

O valor do coeficiente de regressão múltipla é calculado diretamente pela fórmula

$$R^2 = \frac{\hat{a} \Sigma y + \hat{b} \Sigma X_i y + \hat{c} \Sigma X_j y + \hat{d} \Sigma X_k y - n \bar{y}^2}{\Sigma \bar{y}^2 - n \bar{y}^2}$$

Com base na teoria exposta, é possível se obter equações que expressem a variação de cada uma das 146 variáveis em função de outras três pré-selecionadas através da análise da matriz de correlação simples.

Exemplo:

$$\hat{y}_{134} = \hat{a} + \hat{b} X_{71} + \hat{c} X_{10} + \hat{d} X_{133}$$

variável 134 = número kappa

variável 71 = temperatura T_{10}

variável 10 = densidade básica da madeira

variável 133 = carga alcalina ativa total

e muitas outras equações.

O estudo de cada equação permitirá alcançar situações de ótimo, para melhor utilização dos insumos e para melhor qualidade do produto final.

2.5. Um exemplo numérico Simplificado

Admitamos uma planilha simplificada (Quadro 9), onde dispomos de 4 variáveis, sendo a variável 1 a variável dependente e as variáveis 2, 3 e 4 independentes. Admitamos que o nº de observações fosse 8.

Quadro 9: Amostra de 8 observações para 4 variáveis

Variável	Definição da variável	OBSERVAÇÕES									
		01	02	03	04	05	06	07	08	\bar{x}	s
V_1	Consumo específico de madeira, m^3 cavacos/ $t.a.s.$	12,5	12,3	13,0	12,0	14,0	11,5	12,5	12,8	12,58	0,74
X_2	Densidade a granel dos cavacos, t/m^3	160	165	158	161	155	165	161	156	160,13	3,72
X_3	S_8 da madeira, %	7,0	6,4	7,2	7,1	8,0	6,0	6,5	6,6	6,85	0,61
X_4	Número kappa da madeira	137	136	144	138	155	132	139	143	140,50	6,98

A matriz de correlação linear simples está apresentada no Quadro 10.

Quadro 10: Matriz de correlação linear simples

Variável	1	2	3	4
1	-	-0,84	0,83	0,96
2	-	-	-0,75	-0,87
3	-	-	-	0,86
4	-	-	-	-

As equações lineares relacionando a variável dependente com cada uma das independentes são as seguintes:

$$\hat{Y}_1 = 39,476 - 0,168 \cdot X_2 \quad (r_{1,2} = -0,84)$$

$$\hat{Y}_1 = 5,725 + X_3 \quad (r_{1,3} = 0,83)$$

$$\hat{Y}_1 = -1,763 + 0,102 \cdot X_4 \quad (r_{1,4} = 0,96)$$

1º esquema: Regressão linear múltipla por cálculo matricial

Para a equação de regressão múltipla obtida através de cálculo matricial, os valores básicos a serem calculados são:

ΣY_1	=	100,6	ΣX_2^2	=	205217
\bar{Y}_1	=	12,575	ΣX_3^2	=	378,02
$\Sigma X_2 Y_1$	=	16092,3	ΣX_4^2	=	158264
$\Sigma X_3 Y_1$	=	691,75	$\Sigma X_2 X_3$	=	8762,8
$\Sigma X_4 Y_1$	=	14169,2	$\Sigma X_2 X_4$	=	179822
ΣY_1^2	=	1268,88	$\Sigma X_3 X_4$	=	7725,3

Tendo em vista o modelo:

$$\hat{y}_1 = \hat{a} + \hat{b} X_2 + \hat{c} X_3 + \hat{d} X_4$$

construimos as matrizes

$$X'X = \begin{vmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 205217 & 8762,8 & 179822 \\ 0 & 8762,8 & 378,02 & 7725,3 \\ 0 & 179822 & 7725,3 & 158264 \end{vmatrix}$$

$$X'Y = \begin{vmatrix} 100,6 \\ 16092,3 \\ 691,75 \\ 14169,2 \end{vmatrix}$$

A seguir obtemos:

$$(X'X)^{-1} = \begin{vmatrix} 0,125 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0,00150604 & 0,02405518 & -0,0288538 \\ 0 & 0,02405518 & 1,46306902 & -0,09874828 \\ 0 & -0,00288538 & -0,09874828 & 0,00810491 \end{vmatrix}$$

$$(X'X)^{-1} (X'Y) = \begin{vmatrix} 12,575 \\ -0,00778204 \\ -0,00295164 \\ 0,09851504 \end{vmatrix} \equiv \begin{vmatrix} \bar{y} \\ \hat{b} \\ \hat{c} \\ \hat{d} \end{vmatrix}$$

O valor de \hat{a} é obtido de:

$$\hat{a} = 12,575 - (-0,00778204) (160,125) - (-0,00295164) (6,85) - (0,09851504) (140,5)$$

$$\hat{a} = -0,00004533$$

A equação estimada é:

$$\hat{Y}_1 = -0,00004533 - 0,00778204 X_2 - 0,00295164 X_3 + 0,09851504 X_4$$

Temos:

$$\begin{aligned} SQ_{\text{total}} &= \sum y^2 - \frac{(\sum Y)^2}{n} \\ &= 1268,88 - \frac{(100,6)^2}{8} \\ &= 3,83500 \end{aligned}$$

$$SQ_{\text{regressão}} = (-0,00004533) (100,6) + (-0,00778204) (16092,3) + (-0,00295164) (691,75) + (0,09851504) (14169,2) - 1265,645$$

$$SQ_{\text{regressão}} = 3,55699$$

Logo:

$$R^2 = \frac{SQ_{\text{regressão}}}{SQ_{\text{total}}} = \frac{3,55699}{3,835} = 0,9275$$

$$R = 0,9631$$

2ª esquema: Regressão linear múltipla por cálculo algébrico

Para a equação de regressão múltipla obtida através de cálculo algébrico, os valores básicos a serem calculados são:

$$A = 3,835$$

$$B = 96,875$$

$$C = 2,640$$

$$D = 342$$

$$E = -16,275$$

$$F = 2,640$$

$$G = 34,90$$

$$H = -12,050$$

$$I = -158,50$$

$$K = 25,90$$

$$\bar{Y}_1 = 12,575$$

$$\bar{X}_2 = 160,125$$

$$\bar{X}_3 = 6,85$$

$$\bar{X}_4 = 140,5$$

São montadas três equações cujas incógnitas são \hat{b} , \hat{c} e \hat{d} :

$$-16,275 = 96,875 \hat{b} - 12,050 \hat{c} - 158,50 \hat{d}$$

$$2,640 = -12,050 \hat{b} + 2,640 \hat{c} + 25,90 \hat{d}$$

$$34,90 = -158,50 \hat{b} + 25,90 \hat{c} + 342 \hat{d}$$

cuja resolução fornece

$$\hat{b} = -0,00363$$

$$\hat{c} = -0,007$$

$$\hat{d} = 0,101$$

O valor de \hat{a} é obtido de:

$$\hat{a} = 12,575 - (-0,00363) 160,125 - (-0,007) 6,85 - 0,101 (140,5)$$

$$\hat{a} = -0,9863$$

A equação de regressão linear múltipla assume a seguinte configuração:

$$\hat{Y}_1 = -0,9863 - 0,00363 X_2 - 0,007 X_3 + 0,101 X_4$$

Os valores de R^2 e R são dados por:

$$R^2 = \frac{(-0,9863) 100,6 + (-0,00363) 16092,3 + (-0,007) 691,75 + 0,101 (14169,2) - 1265,045}{3,835}$$

$$R^2 = 0,92951$$

$$R = 0,964$$

Observação: As pequenas diferenças observadas para os parâmetros da equação e para o valor de R , obtidos pelos dois esquemas, devem-se a aproximações.

Agradecimentos

Os autores agradecem, pela cooperação, aos senhores Luis Antonio de Oliveira Coimbra, Romeu Antonio Zanchin, Moacir Rosa, Cymar B. Teixeira e Waldir de Oliveira, do Departamento de Fabricação, aos senhores Ney Cabeda e Alexandre Basso do Nascimento do Departamento de Engenharia, ao senhor João Batista Vesz, do Departamento de Testes Físicos e à Srta. Maria Eliane Ramos da Silva, da secretaria da Divisão de Controle de Qualidade, Pesquisa e Desenvolvimento, todos da Riocell - Rio Grande Cia. de Celulose do Sul.