

CÁLCULO DOS PARÂMETROS SEPARATIVOS DE CENTRÍFUGA A GÁS ATRAVÉS DE MODELOS DE REDES NEURAS HÍBRIDAS

Maria Ursulina de L. Crus¹, Cláudio A. O. Nascimento² e Sylvana C.P. Migliavacca³

¹ Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo.- CTMSP
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242
CEP: 05508-970 São Paulo, SP
lirusbr@yahoo.com.br

² Escola Politécnica de Engenharia da Universidade de São Paulo
Departamento de Engenharia Química
Rua Prof. Luciano Gualberto, 380 Trav.3
CEP: 05424-970, São Paulo, SP
oller@usp.br

³ Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN
Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo - CTMSP
Travessa R, 400 - CEP: 05508-900, São Paulo, SP
scavedon@net.ipen.br

RESUMO

Neste trabalho é desenvolvida a utilização de redes neurais associadas à resolução da equação fundamental de difusão-convecção, que representa o escoamento interno de uma ultracentrífuga a contracorrente, com o objetivo de se obter os parâmetros internos de fluxo utilizados no cálculo do poder de separação δU . Assim, os parâmetros de escoamento interno da ultracentrífuga são resultados da modelagem feita em função das variáveis experimentalmente controladas, das características físicas de um equipamento e dos dados experimentais, obtidos na investigação do processo de separação isotópica de urânio por ultracentrifugação. As variáveis de controle com influência significativa nos valores de δU são: o fluxo de alimentação F , o corte θ e a pressão na linha de produto P_p . As características físicas consideradas são o raio do coletor de rejeito r_w , o diâmetro do disco girante D_s e o ponto de alimentação Z_E do gás na ultracentrífuga. Após o treinamento da rede neural híbrida, procedeu-se à análise dos valores de δU obtidos em relação aos valores reais, validando assim o modelo obtido. A metodologia desenvolvida pode ser empregada a outros processos, adaptando-se a parte fenomenológica do modelo.

1. INTRODUÇÃO

A teoria da separação dos isótopos do urânio [1], mostra que o desempenho separativo de uma ultracentrífuga, δU , depende: (a) do tipo da ultracentrífuga, definido pela velocidade de rotação, comprimento e diâmetro do rotor; (b) das condições de operação dadas pelos fluxos de alimentação e retiradas do gás de processo e pela quantidade de material no interior da ultracentrífuga (c) pela posição axial da alimentação no rotor e; (d) pelo perfil e intensidade do fluxo em contracorrente. Assim, a estimativa numérica do desempenho separativo de uma ultracentrífuga passa pelo cálculo do escoamento interno, cuja solução só é viável através de simplificações [2]. A aplicação de redes neurais [3],[4] na análise de processos altamente não-lineares tem se mostrado uma poderosa ferramenta, particularmente no processo de enriquecimento de urânio por ultracentrifugação, visando estabelecer a correlação entre os

parâmetros utilizados neles com as reais características físicas e mecânicas das ultracentrífugas e do processo. Neste trabalho, desenvolve-se uma estratégia de modelagem que combina algum conhecimento básico do processo [5], na forma de um modelo fenomenológico baseado na solução das equações de balanço que descrevem o processo, com redes neurais que atuam como estimadores dos parâmetros importantes do processo.

2. MODELAGEM HÍBRIDA DE UMA ULTRACENTRÍFUGA

2.1. Centrifugação a gás

O enriquecimento isotópico do urânio é feito com a finalidade de aumentar o teor do isótopo ^{235}U do urânio, porque este é o seu único isótopo físsil natural [1]. Qualquer que seja o processo de separação empregado, o efeito elementar de separação ocorre no elemento de separação, onde o material introduzido se separa em duas frações: uma enriquecida e outra empobrecida no isótopo desejado. Sendo F, P e W as correntes de alimentação, de produto e de rejeito no elemento de separação com z, y e x como suas respectivas composições, o poder de separação do elemento de separação é dado pela seguinte expressão:

$$\delta U = P*(2y-1)*\ln y/(1-y) + W*(2x-1)*\ln x/(1-x) - F*(2z-1)*\ln z/(1-z) \quad (1)$$

Uma centrífuga a gás, destinada ao enriquecimento isotópico do urânio, é necessariamente formada dos seguintes componentes: o sistema rotor constituído do rotor e dos mancais; o sistema de acionamento do rotor; o sistema de manuseio do gás de processo (árvore e distribuidor de gás) e o sistema de contenção do rotor (carcaça). O gás é considerado uma mistura isotópica binária contendo $^{235}\text{UF}_6$ e $^{238}\text{UF}_6$, que é introduzida no interior desse cilindro, submetendo-se à ação de uma aceleração centrífuga milhares de vezes maior que a aceleração da gravidade. Assim se estabelece uma distribuição de pressões, manifestada na forma de um gradiente radial de pressão, crescente no sentido do eixo para a parede do rotor. Em virtude do campo centrífugo criado ao longo do raio do rotor, estabelece-se um gradiente radial de pressão, que depende da massa M do gás, obtendo-se o aumento relativo da concentração do isótopo leve (^{235}U), nas proximidades do eixo de rotação e ao mesmo tempo, o aumento da concentração do outro isótopo (^{238}U) na parede interna do rotor. Ao se induzir um fluxo em contracorrente vertical obtém-se uma multiplicação do efeito elementar da separação radial. Assim a diferença entre a composição do gás no topo e no fundo do rotor da ultracentrífuga se torna maior que a diferença no sentido radial para uma dada posição axial. Essa separação axial é agora determinada preponderantemente pelo perfil e pela intensidade da contracorrente vertical.

A contracorrente interna, indicada pelas setas verticais na figura 1, de acordo com Benedict et al [1] e Soubbaramayer in Villani [6], pode ser gerada por meios mecânicos, mediante a interação do gás em rotação com obstáculos estacionários, presentes no interior do rotor, e por meios térmicos, através do controle das temperaturas das tampas do rotor ou da temperatura ao longo da parede do rotor. Nesse sentido, existem quatro mecanismos elementares para a geração da contracorrente que são os seguintes: 1) acionamento pelo coletor ou placa defletora fixa, 2) acionamento térmico na parede do rotor, 3) acionamento térmico das tampas do rotor e 4) acionamento pela alimentação. Numa ultracentrífuga, geralmente a contracorrente é produzida por mais de um desses mecanismos.

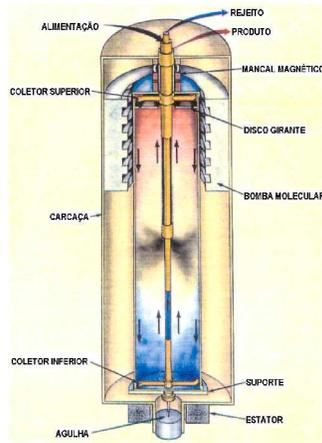


Figura 1. Esquema de uma ultracentrífuga a contracorrente

O cálculo do escoamento do gás no interior do rotor [6] é realizado através da solução da equação de Navier-Stokes, da equação da conservação de energia e da equação de estado do gás. A distribuição das composições é dada pela equação de difusão-convecção [6]. Uma solução bastante simplificada, sugerida por Olander [7], é empregada no presente trabalho, para o cálculo teórico dos parâmetros de uma centrífuga [2].

2.2. Modelagem por redes neurais híbridas

As redes de múltiplas camadas alimentadas adiante, uma das mais importantes classes de redes neurais, consistem de um conjunto de nós de entrada que definem a camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas de nós computacionais (neurônios) e uma camada de saída. Elas são conhecidas por perceptrons de múltiplas camadas. Este tipo de rede é aplicado com sucesso para resolver problemas complexos, através do seu treinamento de forma supervisionada com um algoritmo muito popular denominado de algoritmo de retropropagação do erro. O algoritmo de retropropagação, descrito por Haykin [8], foi utilizado neste trabalho.

A proposta deste trabalho é fornecer um modelo de rede neural híbrida, como está esquematizado na figura 2, com uma estrutura interna, onde cada parte do modelo final desempenha uma tarefa diferente. As partes claramente identificáveis do modelo são o estimador de parâmetros de processo (rede neural) e o modelo fenomenológico parcial.

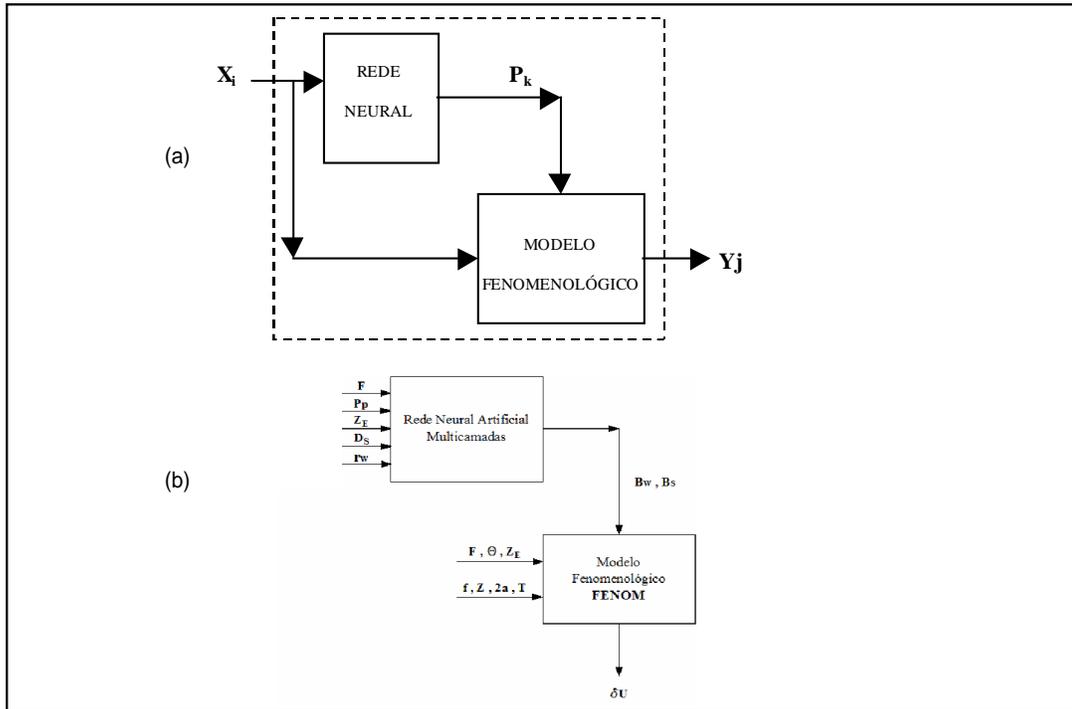


Figura 2. (a) Diagrama de blocos do modelo de rede neural híbrida e (b) Diagrama esquemático da rede neural híbrida para representação da separação efetuada pela ultracentrífuga

A adaptação do programa em Fortran para o treinamento de redes neurais Neuro14 (Nascimento, [9]) centra-se no algoritmo de retropropagação de erro. Esse esquema, representado pela figura 3, tem a parte fenomenológica comportando-se como uma função dos parâmetros P_k fornecidos pela rede neural de múltiplas camadas e de parte das variáveis de entrada X_i

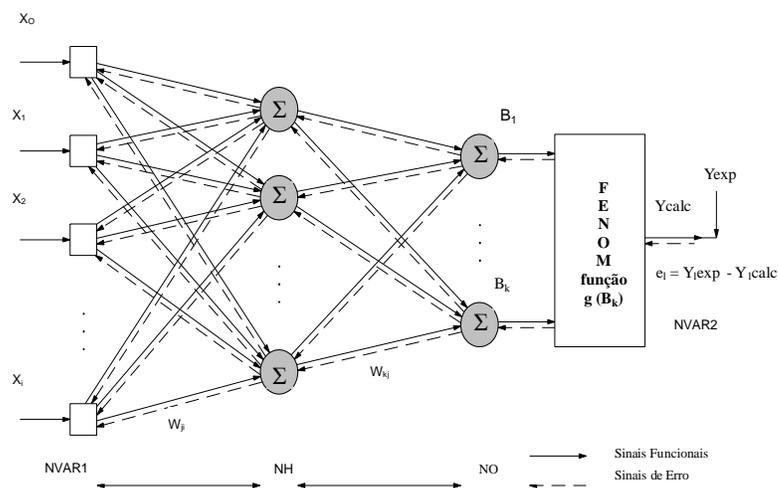


Figura 3. Esquema do modelo de redes neurais híbridas

A partir da regra delta para o ajuste de pesos em uma rede neural de múltiplas camadas, obteve-se a expressão do ajuste dos pesos sinápticos da camada de saída:

$$\Delta w_{kj} = \eta * \left(\left(\sum_{l=1}^{NVAR} e_l \right)^2 * \varphi_k'(\mathbf{v}_k) * g'(B_k) \right) * y_j \quad (2)$$

onde a derivada da função g é dada pela somatória das derivadas parciais de y_1 , que são as NVAR2 variáveis de saída do modelo de redes neurais híbridas, em função dos B_k 's. Portanto:

$$g' = \sum_{l=1}^{NVAR2} \left(\frac{\partial y_l}{\partial B_k} \right) \quad (3)$$

Para a expressão do ajuste de pesos sinápticos da camada oculta, similarmente tem-se:

$$\Delta w_{ji} = \eta * \left[\varphi_j'(\mathbf{v}_j) * \sum_{k=1}^{NO} \left[\left(\sum_{l=1}^{NVAR2} e_l \right) * \varphi_k'(\mathbf{v}_k) * g'(B_k) * w_{kj} \right] \right] * y_i \quad (4)$$

No presente caso para a modelagem dos parâmetros de uma ultracentrífuga, as variáveis de entrada Xi são: F como fluxo de alimentação, Pp é a pressão na saída de produto, Z_E é o ponto axial de alimentação de gás no rotor, Ds é o diâmetro do orifício central do disco rotativo, r_w o raio do coletor do rejeito, f a frequência de rotação, Z o comprimento útil do rotor, 2a o diâmetro do rotor e T a temperatura do gás processo. Os parâmetros internos Pk são os parâmetros Bw e Bs definidos por Olander [7], que indicam a intensidade do escoamento em contracorrente resultante dos mecanismos térmicos e mecânicos respectivamente. A resposta do modelo Yj é o poder de separação δU da ultracentrífuga.

Um conjunto de dados experimentais é apresentado à rede neural do tipo supervisionada com algoritmo de retropropagação do erro, visando gerar sinais de saída que possam ser utilizados como parâmetros Pk, neste caso referem-se aos parâmetros de fluxo interno Bw e Bs, da ultracentrífuga, que são de difícil obtenção tanto na literatura, como de maneira empírica, necessários à resolução do modelo fenomenológico. A parte fenomenológica do modelo emprega a solução sugerida por Olander [7] descrita acima, através de uma subrotina adaptada do programa desenvolvido por Migliavacca [2].

2.3. Resultados e discussão

Os valores experimentais usados são resultado de inúmeros experimentos realizados no desenvolvimento e otimização das ultracentrífugas desenvolvidas pelo Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo, em parceria com o Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares. Devido ao sigilo requerido deste processo, os dados estão apresentados, neste trabalho, em unidades arbitrárias (u.a.) para cada grandeza. Eles estão divididos em dois grupos: o de treinamento e o de teste. O primeiro grupo é utilizado no processo iterativo de definição dos pesos pelo algoritmo de retropropagação do erro, enquanto que com o segundo grupo se realiza uma verificação contínua do processo de treinamento. Os dados experimentais são apresentados ao modelo de redes neurais híbridas com diversas arquiteturas, em termos de número de neurônios da camada oculta (NH). No presente caso foi suposta uma forte contribuição da geração de contracorrente mecânica através da definição do intervalo de Bs entre 10000 e 50000, e se presume uma menor contribuição do efeito térmico na geração da contracorrente, variável com as condições de montagem e com as condições de processo,

com um intervalo para Bw entre 5000 e 20000. Verificou-se que a convergência do processo de treinamento da rede é fortemente afetada pelos intervalos definidos para os parâmetros intermediários Bw e Bs.

Tabela 1. Valores mínimos dos erros quadráticos médios para o conjunto de treinamento (RMST) e para o conjunto de teste (RMSTT), com os respectivos números de apresentações.

NH	RMST	NÚM. APRES.	RMSTT	NÚM. APRES.
6	0.50186	1000	1.44900	1200
7	0.33446	10600	1.01570	10800
8	0.24391	74400	0.76079	74400
9	0.18334	182400	0.62453	158200
10	0.19055	28400	0.61662	26000
11	0.22325	86800	0.68647	200000
12	0.16529	25200	0.59149	12220
15	0.17103	27200	0.59841	88200
19	0.14529	81200	0.52875	81000
20	0.14562	158200	0.55924	132800

De acordo com os resultados apresentados na tabela 1, foi escolhida a rede neural híbrida com 12 neurônios na camada oculta, pois foi a rede que apresentou, para um número relativamente baixo de apresentações, o menor erro quadrático médio para o conjunto de teste (RMSTT). A evolução dos erros globais ao longo do treinamento é mostrada na figura 4a.

A comparação entre os valores do poder de separação δU experimentais apresentados à rede, e os valores calculados pelo modelo é representada pela figura 4b e 4c, onde se verifica uma concordância muito boa dos resultados.

Os gráficos (d) e (e) da figura 4 representam a função distância para os erros calculados de δU , onde a simetria esperada apresenta um leve deslocamento porém aceitável. Os valores de δU , previstos pelo modelo de rede neural híbrida, estão bem ajustados e permitiram a generalização do processo. Com o modelo validado é possível realizar uma extensa análise dos parâmetros Bw e Bs, ou seja, estudar a variação da intensidade da contracorrente interna com os parâmetros geométricos da centrífuga com as condições de operação.

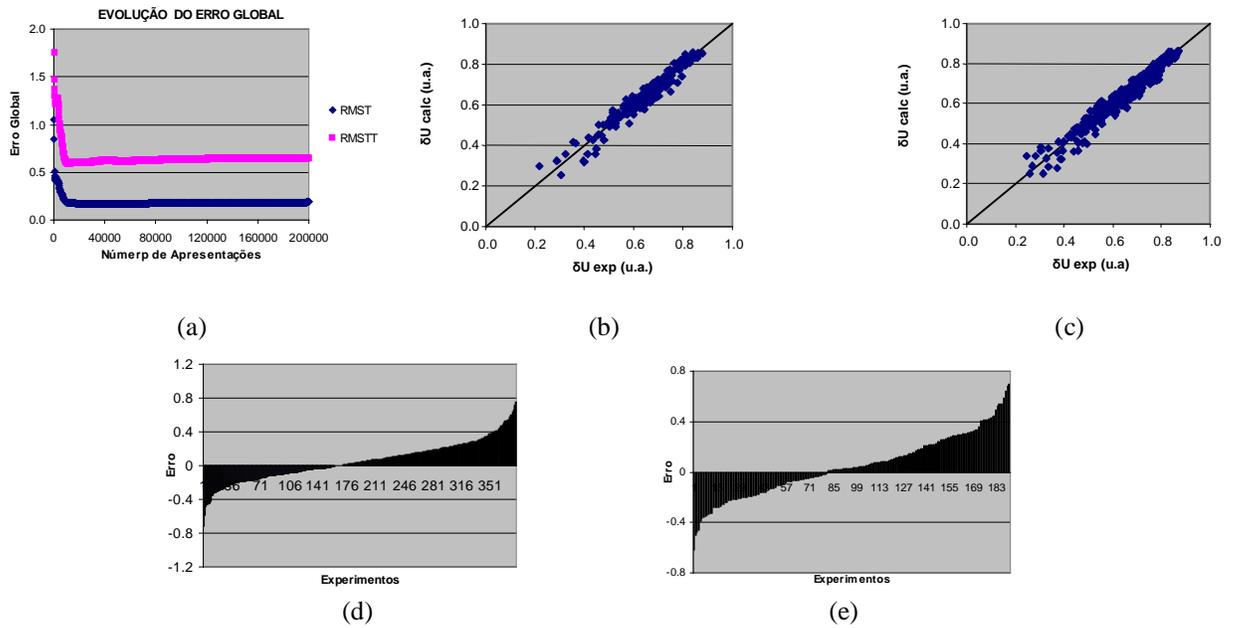


Figura 4. (a) Evolução do erro global do conjunto treinamento RMST e do conjunto de teste RMSTT, com NH=12, (b) e (c) Comparação dos valores de δU experimentais e δU calculados para o conjunto de teste e para o conjunto de treinamento; (d) e (e) Função distância para os erros calculados de δU para os conjuntos de treinamento e de teste respectivamente.

3. CONCLUSÃO

O modelo de rede neural híbrida, desenvolvido neste trabalho, mostrou-se viável na tarefa de prever e generalizar a análise de processos de engenharia, para definição de parâmetros normalmente de difícil obtenção. O modelo desenvolvido e analisado permitiu validar o procedimento de treinamento da rede neural híbrida. Através desse caso, verificou-se que a definição das variáveis a serem utilizadas deve estar bem fundamentada no modelo fenomenológico a ser empregado. O treinamento da rede neural híbrida se mostrou sensível ao intervalo de validade dos parâmetros intermediários (B_s e B_w), utilizado pelo programa para a normalização dos dados. Quanto ao resultado final do modelo de rede neural híbrida, em termos da variável de saída δU , pode-se afirmar que ele apresentou ótima capacidade de aprendizado, fornecendo valores de δU calculados muito próximos aos de δU experimentais. A decisão referente à arquitetura da rede neural, ao modelo fenomenológico a ser empregado e aos intervalos numéricos para os parâmetros intermediários, deve sempre considerar a experiência do pesquisador/engenheiro projetista e o embasamento teórico do processo.

O prosseguimento deste estudo possibilita análises mais específicas do processo, em termos de parâmetros intermediários em função das diversas variáveis de montagem e condições de operação, gerando mais subsídios ao desenvolvimento de novos projetos de ultracentrífugas. O esquema de modelagem de redes neurais híbridas desenvolvido permite a utilização de

outros modelos fenomenológicos [10], que representam diferentes análises de gás dinâmica, com diferentes hipóteses simplificadoras.

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Centro de Tecnologia da Marinha em São Paulo pela autorização da publicação deste artigo.

REFERÊNCIAS

1. M.BENEDICT, T.PIGFORD, H.W.LEVI, *Nuclear Chemical Engineering*, end. Ed. McGraw-Hill, New York, (1981).
2. S.C.P.MIGLIAVACCA, *Cálculo dos parâmetros de separação de uma centrífuga a contracorrente com variação axial do fluxo interno*. São Paulo, SP (1991) Dissertação (Mestrado) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
3. S.C.P.MIGLIAVACCA, C.A.O.NASCIMENTO, C.RODRIGUES, “Use of neural network for the simulation of a gas centrifuge.” *J. Nucl. Sci. Technol.*, **V.36**, n.4, pp.364-370, (1999).
4. W.M.CHAN, C.AO.NASCIMENTO, “Use of neural networks for modeling of olefin polymerization in high pressure tubular reactors.” *J. Appl. Polymer Sci.*, **V.53**, pp.1277-1289, (1994)
5. D.C.PSICHOGIOS, L.H.UNGAR, “A Hybrid Neural Network-First Principles Approach to Process Modeling”, *AIChE Journal*, **V.38**, n.10,pp.1499-1511(1992)
6. SOUBBARAMAYER Centrifugation. In: VILLANI,S., (ed.) *Uranium Enrichment*. Berlin: Springer Verlag, pp.183 - 243(1979)
7. D.R.OLANDER, “The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge.” *Prog. Nucl. Energy*, **V.8**, pp.1-33 (1981)
8. S.HAYKIN, *Neural Networks: a comprehensive foundation*, Prentice Hall, New Jersey(1994).
9. C.A.O.NASCIMENTO, NEURO14: Neural networks modeling training program for multilayer feedforward networks using backpropagation algorithm; momentum algorithm or; backpropagation with dynamic dumping factor algorithm. Author: Claudio A. Oller do Nascimento. LSCP-DEQ/EPUSP (VERSION 14 on 29.9.1996 (Roberto Guardani))
10. D.A.ANDRADE, J.L.F.BASTOS, J.R.MAIORINO, “Thermal analysis of a gas centrifuge”. In: V Workshop on Separation Phenomena in Liquid and Gases, Sept. 22-26,1996. Foz do Iguaçu. Proceedings... Foz do Iguaçu (1996), pp.66-80.