

**UNIVERSIDADE DE SANTA CRUZ DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM SISTEMAS E PROCESSOS  
INDUSTRIAIS**

**Carlos Eduardo Lopes Magarinos de Souza Leão**

**AVALIAÇÃO E ANÁLISE DA APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS E DO  
ALGORITMO DO ENXAME DE PARTÍCULAS NA MODELAGEM E  
OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE POLIMERIZAÇÃO**

**Santa Cruz do Sul  
2008**

**Carlos Eduardo Lopes Magarinos de Souza Leão**

**AVALIAÇÃO E ANÁLISE DA APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS E DO  
ALGORITMO DO ENXAME DE PARTÍCULAS NA MODELAGEM E  
OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE POLIMERIZAÇÃO**

**Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação  
Sistemas e Processos Industriais da Universidade de  
Santa Cruz do Sul, como requisito parcial para a obtenção  
do título de Mestre em Concentração em Monitoramento,  
Simulação e Otimização de Sistemas e Processos.**

**Orientador: Dr. João Carlos Furtado**

**Co-orientador: Dr. Geraldo Lopes Crossetti**

**Santa Cruz do Sul**

**2008**

**TRABALHO APRESENTADO EM BANCA E APROVADO POR:**

---

João Carlos Furtado – Dr. em Computação Aplicada  
Universidade de Santa Cruz do Sul

---

Geraldo Lopes Crossetti – Dr. em Química Industrial  
Universidade de Santa Cruz do Sul

---

Marcos Flores Ferrão – Dr. em Química  
Universidade de Santa Cruz do Sul

---

Eugênio Simonetto – Dr. em Administração  
Universidade do Estado de Santa Catarina

Conceito final:

Santa Cruz do Sul, 04 de julho de 2008.

Orientador(es):

João Carlos Furtado – Dr. em Computação Aplicada

Geraldo Lopes Crossetti – Dr. em Química Industrial

Aluno:

Carlos Eduardo Lopes Magarinos de Souza Leão

## AGRADECIMENTOS

À Rosângela, minha esposa e companheira de vida, que me escolheu e que continua me ensinando e surpreendendo a cada dia. Sem ti eu não teria a força necessária para concluir esse mestrado. Te amo!

À Carolina e à Natália, minhas filhas, que também souberam suportar a distância e a ausência do primeiro ano, e que depois compreenderam que a única maneira de se conquistar um objetivo é por meio de dedicação e de esforço. Obrigado, gurias.

À toda a minha família, pais, irmã, cunhados, cunhadas, sobrinhas, tios e primos, que sempre me incentivaram e apoiaram no que foi uma idéia e hoje é realidade, o mestrado.

Um especial agradecimento aos professores do Programa de Pós-Graduação em Sistemas e Processos Industriais da Universidade de Santa Cruz do Sul, pela forma competente e carinhosa pela qual agiram, e às funcionárias do mesmo Programa, que foram grandes facilitadoras, encurtando distâncias. Pelos livros da biblioteca enviados por SEDEX: "Obrigado, Janaína!".

Ao Fernando Kirst pelo apoio no desenvolvimento da rede neural.

Aos colegas do mestrado, pelo espírito de companheirismo, pelo alto astral, pelo apoio nas dificuldades, espero reencontrá-los em breve.

Não sei qual a palavra mais intensa do que "especial", mas creio que deveria ser ela a que melhor expressasse meus agradecimentos aos orientadores Dr. João Carlos Furtado e Dr. Geraldo Lopes Crossetti, pelo respeito e compreensão que tiveram por minha limitada disponibilidade de tempo e pela maneira profissional e competente pela qual conduziram este trabalho. Vocês foram "Nota 10", muito obrigado!

E como último agradecimento, mas talvez o mais importante de todos a Deus, o Grande Arquiteto do Universo.

*Oh! Quão bom e quão suave é que os irmãos vivam em união!*

*É como o óleo precioso sobre a cabeça, que desce sobre a barba, a barba de Arão, e que desce à orla de suas vestes.*

*É como o orvalho de Hermon, que desce sobre os montes de Sião, porque ali o Senhor ordena a bênção e a vida para sempre (SALMO 133).*

## RESUMO

Os polímeros possuem uma grande importância econômica na indústria atual. Para o desenvolvimento de novas tecnologias que os empreguem, é necessário que o estudo dos polímeros, bem como o de seus processos de produção, sejam mais eficientes e viáveis economicamente, e que também permitam o desenvolvimento de novos polímeros com as características específicas que são demandadas pela indústria. O presente trabalho propõe um modelo para o desenvolvimento de novos polímeros, que possui duas características: baixo custo e flexibilidade. O modelo foi estabelecido através do desenvolvimento de uma rede neural, adequadamente treinada e preparada, utilizando como função-objetivo o algoritmo “exame de partículas”. A partir desta rede neural, foi estabelecido um modelo de simulador cuja utilização permite identificar parâmetros que sejam considerados adequados para a otimização das reações no processo de produção de polímeros.

**Palavras-chave:** Polímeros. Rede neural. Exame de partículas. Modelo. Otimização. Processos.

## ABSTRACT

Polymers possess a great economic importance in current industry. In order to improve the development of news technologies based on new polymer applications, it is necessary to attain more economical and efficient levels on the study of polymers and of their production processes. It is also required to enlarge their capacities for the development of novel polymers, which shall present the specific characteristics demanded by industry. The present work introduces a model for the development of new polymers, at low costs and with a higher flexibility level. This model was developed by means of designing, upgrading and training a neural net, employing the algorithm named "particle swarm" as objective function. A simulator model was established upon this neural net, whose utilization allows to identify the specific parameters which are to be considered as adequate to the optimization of reaction conditions in the process of polymer production.

**Keywords:** Polymers. Neural networks. Particle swarm. Model. Optimization. Processes.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Formação de um radical e seu iniciador .....	21
Figura 2 - Reação de propagação .....	22
Figura 3 - Combinação de duas cadeias.....	23
Figura 4 - Terminação da reação através de desproporcionalidade .....	23
Figura 5 - Rede de Perceptrons.....	27
Figura 6 - Representação esquemática das sinapses.....	29
Figura 7 - Neurônio Artificial de McCulloch.....	30
Figura 8 - Neurônio Artificial .....	30
Figura 9 - Gráfico da Função Sigmóide .....	32
Figura 10 - Gráfico da Função Sigmóide com a tendendo ao infinito .....	33
Figura 11 - Esquema genérico de aprendizado de uma Rede Neural.....	34
Figura 12 - Curva de erro mostrando os mínimos locais e o mínimo global .....	36
Figura 13 - Regra Delta de Aprendizado .....	36
Figura 14 - Nível de atividade $DADNi(NCS)_2$ em laboratório .....	53
Figura 15 - Nível de atividade $DADNi(NCSe)_2$ na rede neural.....	53
Figura 16 - Nível de atividade $DADNi(Br)_2$ em laboratório .....	54
Figura 17 - Nível de atividade $DADNi(Br)_2$ na rede neural .....	54
Figura 18 - Nível de atividade $DADNi(NCSe)_2$ em laboratório.....	55
Figura 19 - Nível de atividade $DADNi(NCSe)_2$ na rede neural.....	55
Figura 20 - Distribuição de Pesos Moleculares Típica de Polímeros.....	58
Figura 21 - Propriedades Mecânicas e Viscosidade em Função do Grau de Polimerização .....	58
Figura 22 - Valor de atividade para cada peso molecular .....	59
Figura 23 - Valor de atividade para cada iteração .....	60
Figura 24 - Valor de atividade para determinadas quantidades de partículas. ....	61
Figura 25 - Valor de atividade para diferentes componentes inerciais iniciais.....	62
Figura 26 - valor de atividade para diferentes componentes inerciais finais.....	63
Figura 27 - Valor da atividade iteração a iteração .....	64
Figura 28 - Valor de Alumínio contido em uma partícula durante a execução do enxame.....	65
Figura 29 - Valor de Níquel contido em uma partícula durante a execução do enxame.....	66
Figura 30 - Valor de Temperatura de uma partícula durante a execução do enxame.....	66
Figura 31 - Valor de Pressão sobre uma partícula durante a execução do enxame.....	67
Figura 32 - Valor de atividade em 20 experimentos para $c_1$ igual a 1, 1,5 e 2.....	68
Figura 33 - Valor de atividade em 20 experimentos para $c_2$ igual a 1,1,5 e 2.....	69
Figura 34 - Valor de atividade em 20 experimentos por combinação de valores de $c_1$ e $c_2$ . ....	70
Figura 35 - Valor de atividade obtido pelo método em 20 execuções .....	71

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Resultados utilizando $\text{DADNi}(\text{NCS})_2$ como catalisador.....	53
Tabela 2 - Resultados utilizando $\text{DADNi}(\text{Br})_2$ como catalisador .....	54
Tabela 3 - Resultados utilizando $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$ como catalisador.....	55

## LISTA DE EQUAÇÕES

Equação 1 - Valor de ativação do neurônio .....	31
Equação 2 - Função Sigmóide.....	32
Equação 3 - Erro da rede neural.....	35
Equação 4 - Regra delta de aprendizado .....	37
Equação 5 - Valor atualizado do peso.....	37
Equação 6 - Valor da rede.....	48
Equação 7 - Função Sigmoidal Unipolar.....	50
Equação 8 - Propagação para camada de saída da rede .....	50
Equação 9 - Erros dos neurônios da camada de saída .....	50
Equação 10 - Erro dos neurônios na camada intermediária .....	51
Equação 11 - Ajuste de pesos entre a camada intermediária e a camada de saída .....	51
Equação 12 - Ajuste de pesos entre a camada de entrada e a camada intermediária.....	51

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

*ADALINE* - *Adaptative Linear Network*

bar - Pressão de etileno no reator, em bar

DADNi(Br)<sub>2</sub>, Dibromodiazadienoníquel

h - Tempo de reação, em horas

KgPE - Massa de polietileno obtido no processo de polimerização (em Kg), deve ser proporcional à coluna M (em gramas)

*MADALINE* - *Many ADALINE*

molNi - Número de mols do catalisador de níquel

DADNi(NCS)<sub>2</sub>, Ditiocianatodiazadienoníquel

DADNi(NCSe)<sub>2</sub>, Disselenocianatodiazadienoníquel

PPGSI - Programa de Pós-Graduação Sistemas e Processos Industriais

PSO - *Particle Swarm Optimization*

XOR - Operador lógico, retorna verdadeiro apenas se os dois operandos forem diferentes (*true/false* ou *false/true*). Se os operandos forem iguais (*true/true* ou *false/false*) o retorno dele é *false*.

## SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO .....	13
2 OBJETIVOS .....	15
2.1 OBJETIVO GERAL.....	15
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS .....	15
3 METODOLOGIA.....	16
4 REVISÃO DE LITERATURA .....	18
4.1 APlicações da Simulação em polímeros .....	18
4.2 POLÍMEROS .....	20
4.2.1 Síntese de polímeros.....	20
4.2.1.1 Polimerização por adição .....	21
4.2.1.2 Polimerização viva .....	23
4.2.1.3 Polimerização de condensação.....	24
4.3 EXEMPLOS DE POLÍMEROS .....	24
5 REDES NEURAIS .....	26
5.1 HISTÓRICO .....	26
5.2 Neurônio.....	28
5.3 NEURÔNIO ARTIFICIAL.....	29
5.3.1 Funções de Ativação.....	32
5.4 PROCESSO DE APRENDIZADO .....	33
5.4.1 Aprendizado supervisionado por correção de erros .....	35
5.4.2 Aprendizado Hebbiano.....	38
5.4.3 Aprendizado competitivo .....	38
5.5 REDES NEURAIS perceptron MULTICAMADAS.....	39
5.6 Algoritmo de Treinamento do Perceptron.....	40
6 O ALGORITMO DO “ENXAME DE PARTÍCULAS” .....	42
6.1 O ALGORITMO DO “ENXAME DE PARTÍCULAS” .....	43
6.2 O PSEUDOCÓDIGO DO ALGORITMO PSO.....	44
6.3 DETALHAMENTO DO ALGORITMO .....	45
7 A REDE NEURAL ARTIFICIAL DESENVOLVIDA .....	48
7.1 Algoritmo usado no treinamento da rede.....	49
7.2 COMPROVAÇÃO DA EFICÁCIA DA REDE UTILIZADA .....	52
7.2.1 Resultados utilizando DADNi(NCS) <sub>2</sub> como catalisador .....	53
7.2.2 Resultados utilizando DADNi(Br) <sub>2</sub> como catalisador .....	54
7.2.3 Resultados utilizando DADNi(NCS <sub>e</sub> ) <sub>2</sub> como catalisador.....	55
8 Experimentos e Resultados Obtidos .....	57

8.1	Análise estatística de Polímeros .....	57
8.2	Variação do Peso Molecular.....	59
8.3	Valor da atividade x Número de Iterações.....	60
8.4	Valor da atividade x Número de Partículas .....	60
8.5	Valor da atividade x Variação do Componente Inercial .....	61
8.5.1	Valor da atividade x Variação do Componente Inercial Inicial.....	62
8.5.2	Valor da atividade x Variação do Componente Inercial Final .....	62
8.6	Valor da atividade Iteração a Iteração .....	63
8.7	Valores das condições reacionais, iteração a iteração.....	64
8.7.1	Valor de Alumínio nas partículas.....	64
8.7.2	Valor do níquel nas partículas .....	65
8.7.3	Valor da temperatura nas partículas .....	66
8.7.4	Valor da Pressão sobre as partículas.....	67
8.8	Análise dos parâmetros de confiança.....	67
8.8.1	Análise dos parâmetros de confiança $c_1$ .....	67
8.8.2	Análise dos parâmetros de confiança $c_2$ .....	68
8.8.3	Análise dos parâmetros de confiança $c_1$ e $c_2$ .....	69
8.9	Análise dos melhores parâmetros identificados .....	70
10	Conclusões.....	72
	Referências .....	74

## 1 INTRODUÇÃO

A demanda por novos materiais, em especial novos polímeros, está obrigando o mercado a criar um novo paradigma tecnológico. Os custos envolvidos com o desenvolvimento destes novos polímeros estão na base da capacidade de cada indústria para tornar-se mais competitiva. A tecnologia necessária para este desenvolvimento acaba influenciando todo o processo produtivo.

Os novos polímeros têm penetração em diversos segmentos da indústria, sendo responsáveis pelo desenvolvimento de novos setores, de novas atividades e também de processos de produção inovadores.

Estes novos polímeros que procuram reduzir os custos gerais de produção, seja pela redução do consumo de energia, seja pela evolução do processo produtivo – os ditos poupadores de energia, de matérias-primas e de mão-de-obra – são importantes neste novo paradigma, bem como servem de insumo para setores industriais que sejam considerados como estratégicos.

A pesquisa científica e tecnológica vem assumindo novas formas no sentido de uma concepção sistêmica e integrada. O desenvolvimento de novos polímeros assume uma característica multidisciplinar, pois exige conhecimento de diversas áreas, entre elas, processos industriais, ciência da computação, engenharia de produção e claro, química industrial. Como consequência disto, a própria pesquisa é uma forma de aprendizado que, durante sua execução, transfere conhecimentos para toda a equipe. A assimilação dos conhecimentos necessários à introdução de novas tecnologias, no processo produtivo, se torna rápida e direta.

O desenvolvimento de novas resinas de polímeros é uma das grandes preocupações da indústria petroquímica. É exigido um grande esforço da indústria para atender às demandas dos clientes. Em primeiro lugar, é necessário conhecer as propriedades do polímero que o cliente deseja. Segundo, é necessário estudar quais as propriedades físico-químicas que determinarão que os polímeros tenham as características desejadas. E finalmente, é necessário estudar como estabelecer as condições operacionais de reação para produzir um determinado polímero.

Grande parte das indústrias de polímeros produz apenas determinados tipos de resinas, cada um deles com diferentes propriedades físico-químicas, e que são satisfatórios somente para algumas aplicações. Um problema a ser analisado está em que estas resinas provavelmente não serão satisfatórias para diversas outras aplicações, incluindo as relacionadas a algum novo produto já desenvolvido ou a ser desenvolvido.

E o que deveria ser feito em tais casos? A indústria petroquímica deveria desenvolver um polímero novo a cada nova demanda, ou a indústria de plásticos deveria ficar satisfeita com os polímeros já oferecidos e que tenham propriedades próximas às requeridas para o seu produto?

Com o atual nível de competição na indústria petroquímica, uma resposta possivelmente satisfatória para estas questões pode ser a de se desenvolver um polímero adequado à necessidade de cada cliente.

O elevado número de reações paralelas à reação de formação do polímero desejado torna este processo extremamente complexo. O uso de modelos matemáticos e de simuladores tem permitido uma melhor compreensão destes processos, bem como direcionar os experimentos e as estimativas de parâmetros e de sensibilidade do processo.

Neste trabalho, desenvolvido um sistema computacional baseado no uso de uma rede neural treinada com o algoritmo do “enxame de partículas”. Esta rede foi ajustada e após comprovada sua eficiência foram desenvolvidos diversos experimentos variando tanto condições de influência como condições de execução. Os resultados foram analisados e conseguiu-se determinar as condições consideradas ideais para os processos de polimerização dos experimentos.

## 2 OBJETIVOS

### 2.1 OBJETIVO GERAL

Implementar e avaliar o emprego de redes neurais e do algoritmo do enxame de partículas na otimização das condições de reação e de suas conseqüências sobre as propriedades destes polímeros.

### 2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Avaliar o desempenho de uma rede neural no processo de otimização de condições de determinada reação química, empregada na produção de polímeros;
- Avaliar o desempenho do método do enxame de partículas no processo de otimização de condições de determinada reação química, empregada na produção de polímeros;
- Implementar um modelo para a simulação de um processo de polimerização;
- Analisar os resultados das simulações, identificando as melhores condições relativas às propriedades dos polímeros.

### 3 METODOLOGIA

O presente trabalho foi iniciado por uma revisão bibliográfica sobre polímeros, suas características, quais os fatores e as condições que influenciam sua produção e suas propriedades. Foram identificados os tipos de reação química que ocorrem durante a produção dos polímeros.

Foi necessária a realização de uma revisão bibliográfica sobre redes neurais e sobre o algoritmo do enxame de partículas. Foi importante avaliar a evolução das pesquisas e identificar como foram tratadas as questões que comprometiam os resultados, chegando às soluções adotadas pelos atuais pesquisadores que deram robustez e confiabilidade à aplicação dessas heurísticas.

A escolha da linguagem de programação para o desenvolvimento da rede neural também foi precedida de uma análise das características necessárias à proposta do trabalho que estava sendo desenvolvida. Pela relativa facilidade de manutenção, pelo requisito de uma menor capacidade de processamento e pela própria indicação da literatura disponível, optou-se pela Linguagem C.

A rede neural foi definida com a seguinte topologia:

- Camada de entrada: 4 (Alumínio, Níquel, Temperatura, Pressão);
- Camada de saída: 2 (Peso Molecular, Atividade);
- Camadas intermediárias: 2 (com 35 neurônios em cada);
- Função-objetivo – foi empregado o algoritmo do Enxame de Partículas, que é caracterizado pela avaliação da melhor posição que a partícula encontrou no espaço, em seu movimento, (que é indicada pelo valor ótimo da função-objetivo) e pelo conhecimento da melhor posição já encontrada por todo o grupo de partículas;
- O algoritmo de Treinamento utilizado foi o do *Backpropagation*, que retro-propaga os erros da camada de saída, permitindo o treinamento (ajuste) dos pesos das camadas intermediárias.

Com a topologia da rede neural estabelecida, foi iniciado o processo de evolução da rede, que foi balizado pela busca da meta estabelecida, de que os

resultados da rede deveriam ser iguais ou o mais próximo que se conseguisse dos resultados obtidos em laboratório, sob condições idênticas. Partindo desta premissa, a rede foi sendo treinada, executada, e ajustada até que se conseguisse atingir o objetivo pretendido.

Uma vez ajustados os fatores de influência sobre a rede, pôde-se então partir para a fase experimental, onde se buscou identificar, através de ajustes nestes fatores e nas condições reacionais, como se poderia conseguir os melhores resultados e qual o comportamento de cada um destes fatores e condições sobre os experimentos cujos resultados puderam ser considerados como otimizados.

## 4 REVISÃO DE LITERATURA

### 4.1 APLICAÇÕES DA SIMULAÇÃO EM POLÍMEROS

Neste capítulo é apresentado um compêndio de alguns dos trabalhos sobre simulação de polímeros usando métodos computacionais.

Elaine Rose Maia e Maria Aparecida da Silva Prado, em seu trabalho intitulado “Estudo Estrutural de Polímeros – II - Dinâmica do Polietileno de 100 Unidades de Repetição (PE100), a Diferentes Temperaturas”, realizado no Laboratório de Estudos Estruturais Moleculares, no Departamento de Físico-Química do Instituto de Química da Universidade de Brasília, desenvolveram um estudo que procurou, através da simulação computacional, compreender as estruturas e o movimento das cadeias poliméricas. Estas autoras sugeriram que “o fato de ‘ver’ como as moléculas se comportam permitiria uma avaliação muito mais detalhada das propriedades estáticas e dinâmicas do sistema, em comparação com aquelas que poderiam ser fornecidas por medidas experimentais.”

Em sua dissertação de mestrado, intitulada “Estudo Sobre a Viabilidade da Simulação e Predição de Efeitos Difusivos em Rações de Polimerização Através de Modelos Determinísticos e Redes Neurais”, Pauline Santa Rosa Simões, fez a modelagem de uma rede neural para um reator operando em batelada. Esta pesquisadora propôs o estudo de duas redes neurais, a fim de verificar a influência das variáveis de saída da rede sobre os valores reais, ou valores-alvo, por meio da aplicação de um logaritmo no erro das predições da rede.

Entre as diversas conclusões decorrentes do referido estudo, pode ser salientado que uma das mais significativas, sob o ponto de vista do autor do presente trabalho, foi a relativa à propagação do erro no treinamento da rede, o que levou à necessidade de, no trabalho aqui apresentado, estabelecer um método de treinamento que minimizasse o citado problema.

Em outra dissertação de mestrado, intitulada “Simulação e Otimização de Processos de Polimerização, de autoria de Priscila Galbiatti Vespa, foi realizado um detalhado estudo dos parâmetros necessários para estabelecer quais devam ser as

condições operacionais adequadas para o desenvolvimento das características dos polímeros e de seu processo de produção. Baseada na literatura disponível, esta autora estabeleceu componentes de entrada, propriedades físicas, propriedades do reator, condições operacionais e constantes cinéticas, e também analisou como esses parâmetros afetam o processo de polimerização. O estudo acima possibilitou que fosse formulada, pelo presente autor, a hipótese de testar e comprovar a acuidade da rede utilizada, porém antes de desenvolver o detalhamento do estudo aqui apresentado, a fim de auferir confiabilidade tanto à rede neural desenvolvida quanto ao treinamento a ser aplicado a esta rede.

Carlos Alemán e Sebastian Muñoz-Guerra, em seu trabalho "*Aplicaciones de los métodos computacionales al estudio de la estructura y propiedades de polímeros*", desenvolvido no Departamento de Engenharia Química da Universidade Politécnica da Catalunha, na Espanha, revisam as técnicas de simulação molecular mais habituais e propõem a utilização de métodos computacionais para o estudo das propriedades e da estrutura dos polímeros. Estes autores concluem que, no futuro, a simulação computacional será muito superior à atual e será uma ferramenta de grande valia para o estudo de sistemas químicos.

Fabiano A. N. Fernandes, Liliane M. F. Lona, em artigo técnico *Development of Polymer Resins using Neural Networks*, desenvolveram um novo procedimento para ser aplicado na estimativa das condições operacionais do reagente a ser usado para produzir um polímero que deve possuir determinada propriedade específica. As estimativas tiveram bons resultados, em 95% dos casos puderam ser utilizadas para se iniciar a produção do polímero que se esteja pretendendo desenvolver. O mesmo procedimento acima também pode ser usado estimar as condições operacionais necessárias ou adequadas, mas sempre enfatizando a necessidade de treinar a rede neural de acordo com os objetivos estabelecidos.

## 4.2 POLÍMEROS

A principal conquista industrial da química orgânica no século XX foi a fabricação, em grande escala, de polímeros sintéticos. Com eles, foram criados materiais fundamentais para o desenvolvimento tecnológico, tais como os plásticos, as fibras sintéticas e as resinas artificiais.

Um “polímero” é uma macromolécula, natural ou sintética, de alto peso molecular, formada pelo encadeamento de unidades moleculares fundamentais, que são chamadas de “monômeros”. Os polímeros formam muitos dos materiais que compõem os organismos vivos, como as proteínas, a celulose e os ácidos nucleicos. Constituem também a minerais como o diamante, o quartzo e o feldspato, além de materiais criados pelo homem, como concreto, vidro, papel, plástico e borrachas. Alguns polímeros naturais, como algumas proteínas, são compostos de um só tipo de monômero, mas a maioria dos polímeros naturais e sintéticos é formada de dois ou mais tipos de monômeros, e eles são os chamados copolímeros (CANEVAROLO, 2002).

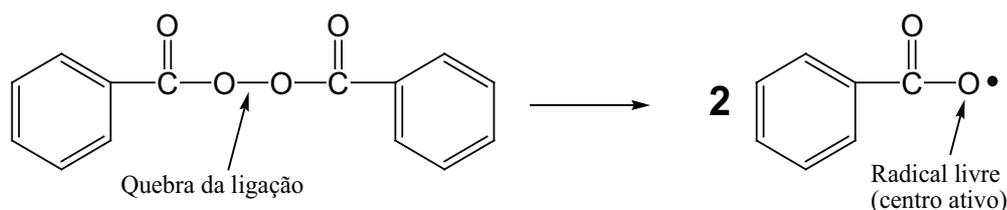
Como normalmente as cadeias poliméricas são formadas pela união de um número aleatório de moléculas de monômeros, os polímeros não são constituídos de moléculas do mesmo tamanho. Conseqüentemente, pode ser definido apenas um valor médio para propriedades físicas tais como as do ponto de fusão e do peso molecular. A elasticidade e a resistência à abrasão das borrachas, a resistência à tração das fibras, e a flexibilidade e transparência dos filmes também são atribuídas ao grande tamanho das cadeias (BILLMEYER, 1975).

### 4.2.1 SÍNTESE DE POLÍMEROS

O estudo dos polímeros começa com o entendimento dos métodos pelos quais estes materiais são sintetizados. A síntese de um polímero é um procedimento complexo e pode acontecer através de vários processos.

#### 4.2.1.1 Polimerização por adição

O tipo mais comum de reação de polimerização de adição é a polimerização via radicais livres. Um radical livre é uma molécula com um elétron livre, ou desemparelhado. A alta reatividade dos radicais livres se deve a tendência de ganhar um elétron adicional para formar um par eletrônico, de forma que esta alta reatividade rompe uma ligação em outra molécula, atraindo desta um elétron. Frequentemente, radicais livres são criados pela divisão de uma molécula (conhecida como a do iniciador da reação) em dois fragmentos ao longo de uma única ligação (MANO, 1985).



**Figura 1 - Formação de um radical e seu iniciador**

A estabilidade de um radical está relacionada à tendência de uma molécula para reagir com outras combinações. Um radical instável pode prontamente combinar-se com muitas moléculas diferentes. Um radical estável não interage facilmente com outras substâncias químicas. A estabilidade de radicais livres varia de acordo com as propriedades da molécula. O seu centro ativo é o local do elétron desemparelhado no radical, e por isto, este é o local onde a reação acontece (CÚNEO, 2006).

Na reação de polimerização por adição, o radical livre ataca um monômero, e o elétron migra para a outra parte da molécula. Este radical recentemente formado ataca outro monômero e o processo continua se repetindo.

Há três reações significantes que acontecem na polimerização: iniciação, propagação e terminação.

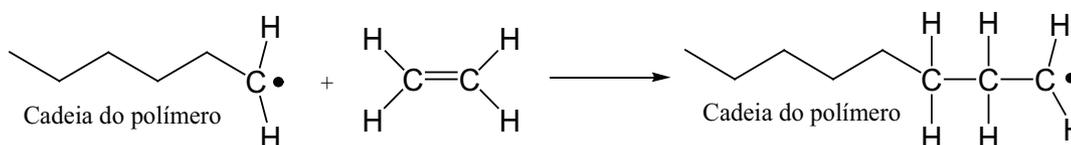
- Reação de iniciação

É o primeiro passo e começa quando um iniciador se decompõe em radicais livres na presença de monômeros. A instabilidade de ligações duplas entre dois átomos de carbono no monômero os torna suscetíveis para esta reação com os elétrons desemparelhados no radical. Nesta reação, o centro ativo do radical "ataca" um dos elétrons do par que compõe a dupla ligação do monômero, deixando desemparelhado o outro elétron desta ligação, convertendo-o em um novo centro ativo, ao término da cadeia recentemente formada. A reação por adição pode acontecer em qualquer terminação do monômero.

Em uma síntese típica, entre 60% e 100% dos radicais livres sofrem uma reação de iniciação com um monômero. Os radicais restantes podem se unir entre si ou com uma impureza, ao invés de com um monômero.

- Reação de propagação

Após o início da reação de síntese, passa a ocorrer a fase da reação de propagação. Esta fase de propagação acontece depois do processo de transferência de um elétron. Uma cadeia de monômeros conectados recorre a um grupo de substituição (um fragmento molecular) específico ao monômero.



**Figura 2 - Reação de propagação**

Na polimerização com radical livre, a reação de propagação inteira acontece normalmente dentro de uma fração de segundo. São acrescentados milhares de monômeros à cadeia dentro deste intervalo de tempo.

- Reação de terminação

Normalmente, o crescimento de uma cadeia de polímero é encerrada pela reação de terminação. A terminação acontece tipicamente de dois modos: combinação e desproporcionalidade.

A combinação acontece quando o crescimento do polímero é interrompido porque os elétrons livres de duas cadeias em crescimento se unem e formam uma única cadeia.

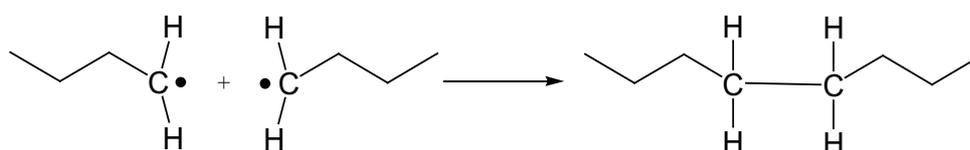


Figura 3 - Combinação de duas cadeias

A desproporcionalidade encerra a reação de propagação quando um radical livre retira um átomo de hidrogênio de uma cadeia ativa.

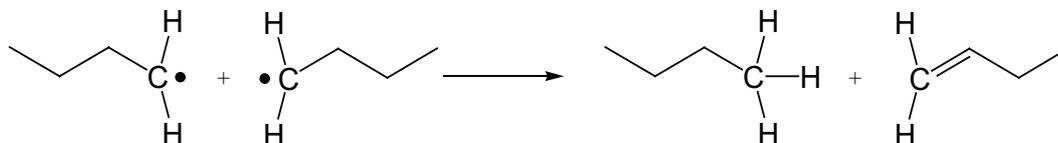


Figura 4 - Terminação da reação através de desproporcionalidade

#### 4.2.1.2 Polimerização viva

Existe um tipo de polimerização de adição que não sofre uma reação de terminação. Esta polimerização denominada “viva” continua até que os monômeros

acabem. Quando isto acontecer, os radicais livres ficam menos ativos devido a iterações com moléculas do solvente. Se mais monômeros forem acrescentados à solução, a polimerização retomará seu curso. Pesos moleculares uniformes são característicos de polimerização viva (LENZI *et al.*, 2004).

#### **4.2.1.3 Polimerização de condensação**

Nas reações de polimerização por condensação, ocorre a união de monômeros iguais ou diferentes, resultando da reação o polímero e uma substância simples como água ou ácido clorídrico (Mano, 1985).

### **4.3 EXEMPLOS DE POLÍMEROS**

As partes sólidas de todas as plantas se compõem de polímeros, que incluem a celulose (polissacarídeo), a lignina (uma complexa rede tridimensional de polímeros) e várias resinas. Outros importantes polímeros são as proteínas (formadas pelo encadeamento de aminoácidos) e os ácidos nucleicos (polímeros de nucleotídeos, formados de bases nitrogenadas, fosfatos e açúcares). O amido, importante fonte de energia vegetal, é um polímero composto de glicose. Nos diamantes, as cadeias de carbono formam uma rede tridimensional que dá ao material a sua dureza.

Os polímeros sintéticos incluem o polietileno, que é obtido a partir do etileno (nome usual para a substância eteno), e é cristalino, translúcido e termoplástico (amolece ao ser aquecido e endurece ao ser resfriado). É usado em revestimentos, embalagens, peças moldáveis e na fabricação de garrafas e outros recipientes. O polipropileno, polímero do propeno, também é cristalino e termoplástico. Suas moléculas podem ser compostas de 50.000 a 200.000 monômeros. É usado na indústria têxtil e para fazer objetos moldáveis.

O polibutadieno, o poliisopreno e o policloropreno são de grande importância na fabricação de borrachas sintéticas. Alguns polímeros são vítreos e transparentes à temperatura ambiente, além de serem termoplásticos. É o caso do poliestireno, que pode ser tingido de qualquer cor e é usado na fabricação de brinquedos e outros objetos de plástico.

## 5 REDES NEURAIIS

Redes Neurais são programas de computador baseados em circuitos que emulam um cérebro humano. Isto significa que as redes neurais são capazes de serem treinadas de acordo com determinado objetivo. As redes neurais apresentam uma estrutura baseada na estrutura neural dos organismos inteligentes e, da mesma forma que estes organismos, aprendem com os acertos e com os erros; são capazes de aprender com a experiência (TABIANA; KAETSU, 2005).

As redes apresentam determinadas características neurobiológicas:

- O conhecimento é adquirido pela rede, a partir de seu ambiente, através de um processo de aprendizagem;
- Forças de conexões entre neurônios, conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

Os pesos sinápticos são modificados por processos algorítmicos, de forma a poderem representar o conhecimento adquirido. Estas alterações caracterizam o processo de aprendizagem de uma rede neural (ROISENBERG, 2005).

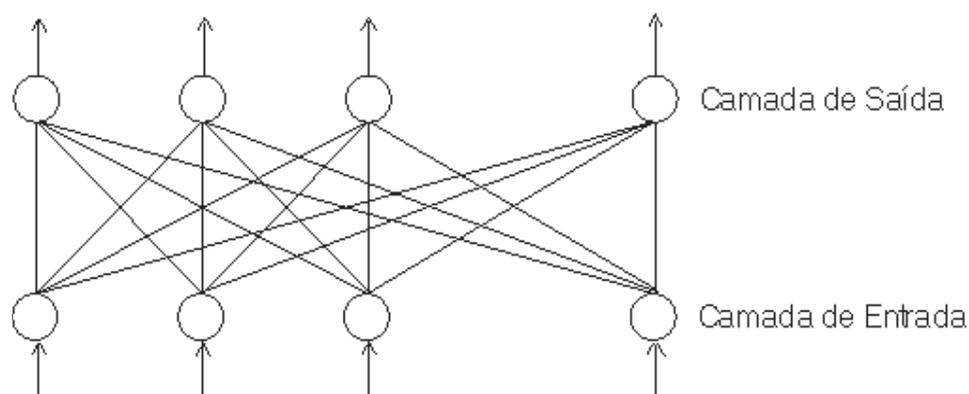
### 5.1 HISTÓRICO

As primeiras informações sobre neurocomputação datam de 1943, em artigos do neurofisiologista McCulloch e do matemático Pitts. Eles propuseram a construção de uma máquina baseada no cérebro humano (MCCULLOCH; PITTS, 1943).

Em 1949, o psicólogo Donald Hebb, em seu livro a Organização do Comportamento (*The Organization of Behavior*), estudou a aprendizagem em redes neurais, e concluiu que esta capacidade vem da alteração da eficiência cinética, isto é, a conexão somente é reforçada se tanto as células pré-sinápticas quanto as pós-sinápticas estiverem excitadas.

Em 1956, no *Darhmouth College*, foram criados os dois paradigmas da Inteligência Artificial, o simbólico e o conexionista. A Inteligência Artificial Simbólica se propõe a simular o comportamento inteligente humano, desconsiderando os mecanismos responsáveis por tal comportamento. Já a Inteligência Artificial Conexionista propõe a construção de um sistema que simule a estrutura do cérebro. Este sistema apresentará inteligência e será capaz de errar e de aprender com os seus erros.

Em 1958, Roseblatt mostrou, em seu livro (*Principles of Neurodynamics*), o modelo dos "Perceptrons". Nele, os neurônios eram organizados em camadas de entrada e de saída, e os pesos das conexões eram adaptados a fim de se atingir a eficiência sináptica, anteriormente estudada por Hebb, conforme representado na Figura 5.



**Figura 5 - Rede de Perceptrons**  
Fonte: Adaptado de Roseblatt (1958).

Em 1960, foi criada a rede *ADALINE* (*Adaptive Linear Network*) e o *MADALINE* (*Many ADALINE*) perceptron, proposto por Widrow e Hoff. O *ADALINE* / *MADALINE* utilizou saídas analógicas, dispostas em uma arquitetura de três camadas.

Nas décadas de 1960 e 1970, não houve pesquisa nesta área, sendo que elas somente foram reiniciadas em 1982, pelo biólogo Hopfield, que propôs a utilização de redes simétricas para a otimização de processos, através de um algoritmo de aprendizagem que realimentava a rede (AZEVEDO *et al.*, 2000).

Logo após a publicação dos trabalhos do físico e biólogo Hopfield, em 1982, relatando a utilização de redes simétricas para otimização, através de um algoritmo de aprendizagem que estabilizava uma rede binária simétrica com realimentação, Rumelhart, Hinton e Williams introduziram o método *Backpropagation* (RUMELHART *et al.*, 1986).

Em 1987, em São Francisco, aconteceu a primeira conferência de redes neurais em tempos modernos, a *International Conference on Neural Networks (IEEE)*.

## 5.2 NEURÔNIO

O cérebro humano é o mais fascinante processador baseado em carbono. Possui aproximadamente 10 bilhões de neurônios, e todas as funções do organismo estão relacionadas ao funcionamento destas células. Os neurônios estão conectados uns aos outros através de sinapses, e, juntos, formam uma grande rede, chamada de “rede neural”. De maneira simples pode-se considerar que as sinapses transmitem estímulos através de variações nos seus gradientes de  $\text{Na}^+$  (íons de Sódio) e de  $\text{K}^+$  (íons de Potássio). Esta rede neural possui uma grande capacidade de processamento e armazenamento de informações (TOLOSA, 2001).

O sistema nervoso é formado por um conjunto de neurônios. A comunicação entre os neurônios é realizada através de impulsos elétricos e químicos. Os neurônios têm uma função importantíssima no comportamento, funcionamento e raciocínio do ser humano (ZUBEN, 2003).

Ao contrário das redes neurais artificiais, as redes neurais naturais não transmitem sinais negativos. Sua ativação é percebida através da frequência sempre contínua e positiva com que emite pulsos. As redes naturais não são uniformes e seus pulsos não se classificam como são síncronos ou assíncronos, pelo fato de não serem constantes (CAETANO, 2005).

Os principais componentes dos neurônios são: os dendritos, que tem por função receber os estímulos transmitidos pelos outros neurônios com os quais fazem sinapses; o corpo celular do neurônio, também chamado de soma, que é responsável por coletar e combinar informações vindas de outros neurônios; e o axônio, que é uma fibra tubular que pode alcançar alguns metros, e que é responsável por transmitir os estímulos para outras células (Mattos, 2005).

Na Figura 6, há uma representação esquemática das sinapses, as conexões que ocorrem no cérebro.

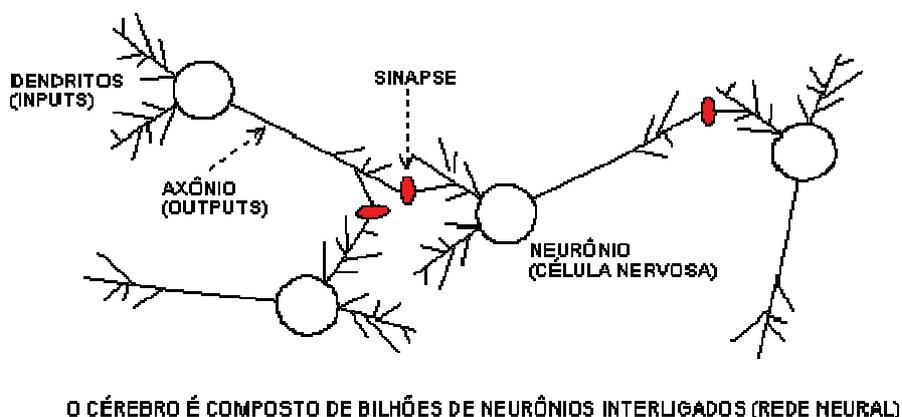
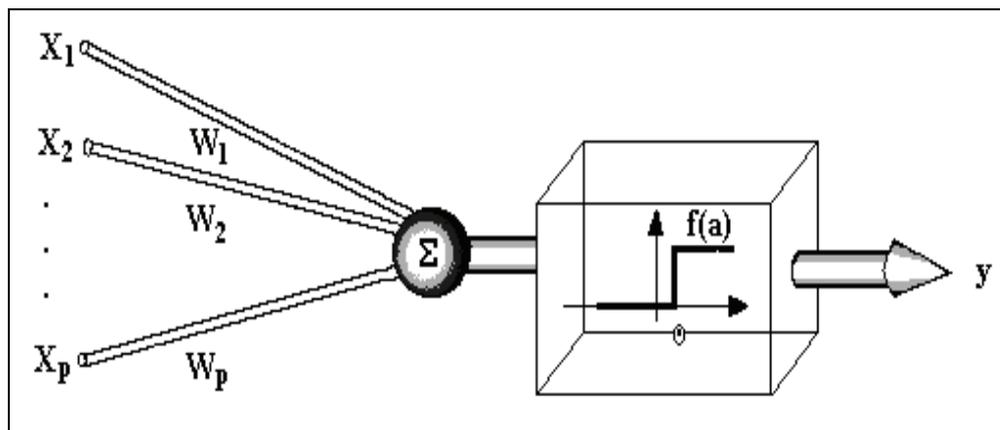


Figura 6 - Representação esquemática das sinapses<sup>1</sup>

### 5.3 NEURÔNIO ARTIFICIAL

O primeiro neurônio artificial foi proposto por MacCulloch (1943), que interpretou o funcionamento do neurônio biológico como sendo um circuito de entradas binárias combinadas por uma soma ponderada, que resultava numa entrada única. A Figura 7 apresenta este modelo.

<sup>1</sup> Disponível em: <http://dm.usway.com.br/acm/Redes/~RN-INDEX.htm>.

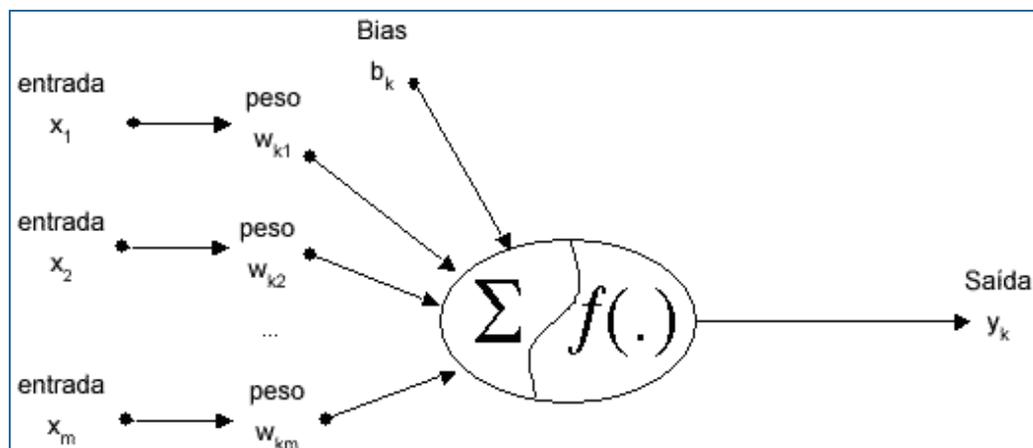


**Figura 7 - Neurônio Artificial de McCulloch**

Fonte: Adaptado de Karrer et al. (2005).

O neurônio artificial utilizado atualmente é chamado de elemento de processamento. Uma rede neural artificial é composta por um grande número de neurônios artificiais.

Modelo de um neurônio artificial segundo Russel e Norvig é mostrado na figura 8..



**Figura 8 - Neurônio Artificial**

Fonte: Adaptado de Russel e Norvig (2004).

Onde:

**Estímulos de entrada (X):** as componentes são representadas pelo vetor X;

**Ligações sinápticas (W):** as componentes são representadas pelo vetor W;

**Saída (Y):** as componentes são representadas pelo vetor  $Y$ , produzida segundo o valor de ativação alcançado pelo neurônio.

Os sinais são apresentados nas entradas, e cada sinal possui um número e um peso que lhe são atribuídos, fazendo-se a soma ponderada destes sinais. Este resultado é chamado de nível de atividade. É estabelecido um limite (*threshold*) e caso o nível de atividade ultrapasse esse limite, há uma resposta de saída específica (FROZZA, 2004).

De forma geral, nos neurônios artificiais estão envolvidos os seguintes elementos:

**Conjunto de sinapses (W):** Ligações entre neurônios. Cada ligação possui um valor (peso), que representa a sua força: os estímulos de entrada são multiplicados pelos respectivos pesos de cada ligação, podendo gerar tanto um sinal positivo (excitatório) quanto um negativo (inibitório).

**Combinador Linear( $\Sigma$ ):** Executa o somatório dos sinais produzidos pelo produto entre os pesos sinápticos e as entradas fornecidas ao neurônio. Em outras palavras, é o integrador dos sinais que chegam ao neurônio.

A saída do neurônio é definida pelo seu valor de ativação, que é calculado da seguinte forma:

$$V_j = \sum_{i=1}^m W_{ji} X_i + b$$

**Equação 1 - Valor de ativação do neurônio**

Onde:

$v$  é o valor de ativação do neurônio  $k$ ;

$w$  são os pesos das conexões do neurônio  $k$ ;

$x$  é o valor de cada um dos  $m$  estímulos que chegam ao neurônio  $k$ ;

$b$  é o valor do *bias* que será somado ao valor do combinador linear para compor o valor de ativação;

$i$  e  $j$  variam de 1 a  $m$ .

Função de Ativação: Fornece o valor da saída de um neurônio.

### 5.3.1 Funções de Ativação

Aqui será abordada a função sigmóide. Esta função pode assumir todos os valores de 0 e 1. A representação mais utilizada para esta função é a função logística, definida por:

$$f(v) = 1 / (1 + e)^{(-av)}$$

Equação 2 - Função Sigmóide

Onde  $a$  é o parâmetro de inclinação da função sigmóide e  $v$  é o valor de ativação do neurônio e  $e$  o valor do erro. A Figura 9 representa a função sigmóide.

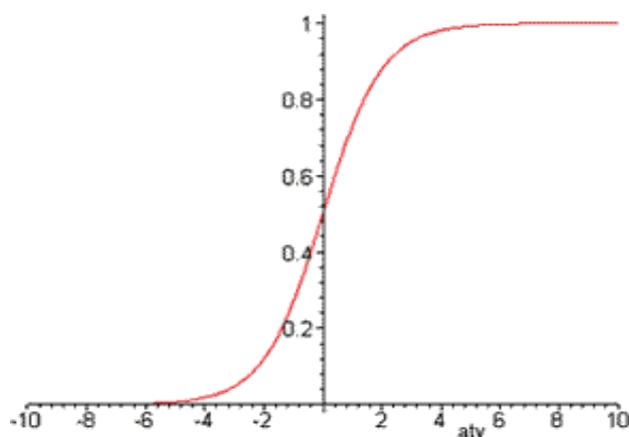
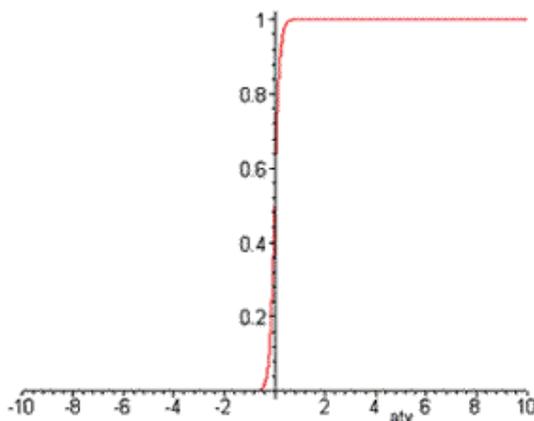


Figura 9 - Gráfico da Função Sigmóide

Conforme é aumentado o valor do parâmetro  $a$ , tendendo-o ao infinito, esta função comporta-se como uma função de limiar, tal como pode ser observado na Figura 10.



**Figura 10 - Gráfico da Função Sigmóide com  $a$  tendendo ao infinito**

Porém, pode ser necessário que a função de ativação assuma valores entre 1 e -1. Esta característica traz benefícios analíticos (Braga,1999).

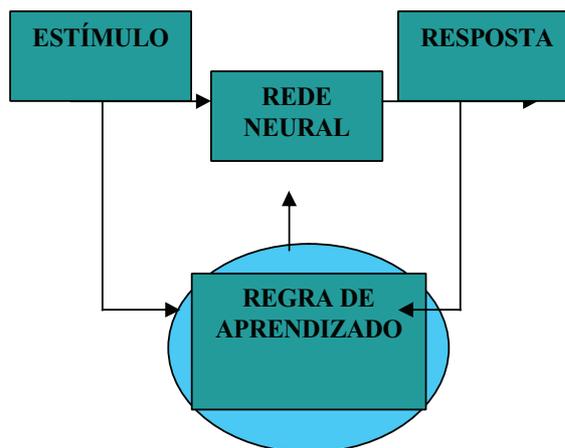
#### 5.4 PROCESSO DE APRENDIZADO

A propriedade mais importante das redes neurais é a capacidade de aprender e agregar este aprendizado, melhorando sua qualidade. Este aprendizado é baseado em um processo de iteração e ajuste, entre a ação tomada e a informação processada, sendo que cada processo tem seu peso. Este processo de aprendizado chama-se treinamento (ALECRIM,2004).

O conjunto de regras e parâmetros utilizados neste processo de aprendizagem chama-se algoritmo de aprendizagem. Considera-se que uma rede neural aprendeu quando ela atinge, por si só, uma solução genérica para determinado tipo de problema. Existem diversos tipos de algoritmos de

aprendizagem, mas eles divergem entre si apenas pelo modo como os pesos relativos às regras são modificados (ALECRIM, 2004).

A Figura 11, apresenta um esquema do processo de aprendizado da rede neural.



**Figura 11 - Esquema genérico de aprendizado de uma Rede Neural**

A fase de aprendizado é crucial para o sucesso de uma rede neural. O conhecimento, em uma rede neural, está armazenado nas sinapses, ou seja, nos pesos atribuídos às conexões entre os neurônios. Um volume significativo de dados deve ser utilizado no treinamento da rede neural. Estes dados devem ser colhidos aleatoriamente, para se certificar de que a rede está aprendendo e não memorizando resultados (CARVALHO, 2004).

Há vários processos de aprendizado. No aprendizado supervisionado, é fornecida uma referência do objetivo a ser alcançado. O aprendizado por correção de erros é supervisionado. No aprendizado não-supervisionado, não é fornecida qualquer referência externa. Os processos de aprendizado competitivo e de aprendizado hebbiano são não-supervisionados (McCollum, 2005).

### 5.4.1 Aprendizado supervisionado por correção de erros

Neste tipo de aprendizado, o erro de uma Rede Neural pode ser calculado como a diferença entre a saída real gerada pela rede e a saída desejada, fornecida em um ensino supervisionado. Por exemplo:

$$e_k = d_k - y_k$$

Equação 3 - Erro da rede neural

Onde, para um estímulo  $k$ ,

$e$  - sinal de erro;

$d$  - saída desejada apresentada durante o treinamento;

$y$  - saída real da rede após a apresentação do estímulo de entrada.

Durante o processo de aprendizado supervisionado, os erros vão sendo calculados sucessivamente, até que cheguem a um valor considerado como satisfatoriamente baixo, o que é definido como um dos requisitos para o sucesso do processo. Por isso, é possível representar este aprendizado por uma curva de erros que seja relacionada à natureza do modelo de neurônio utilizado(Matthews, 2006).

Se a rede é formada por unidades lineares, como no modelo de McCulloch e Pitts, será encontrado um único valor mínimo na superfície de erro.

Entretanto, se a rede possuir unidades não-lineares, serão encontrados diferentes valores mínimos nesta superfície de erro, chamados de mínimos locais. A rede irá identificar o menor mínimo local que será definido como o mínimo global, que é o menor de todos.

O processo de aprendizado por correção de erros é baseado em algoritmos para percorrer a curva de erros, com o objetivo de alcançar o menor valor de erro possível, o mínimo global. Muitas vezes, determinado algoritmo não consegue alcançar o mínimo global, conseguindo apenas um mínimo local. Nestes casos, é necessário recomeçar o processo de aprendizado ou otimizar o algoritmo. A Figura 12 representa os ciclos de treinamento no processo de aprendizado.

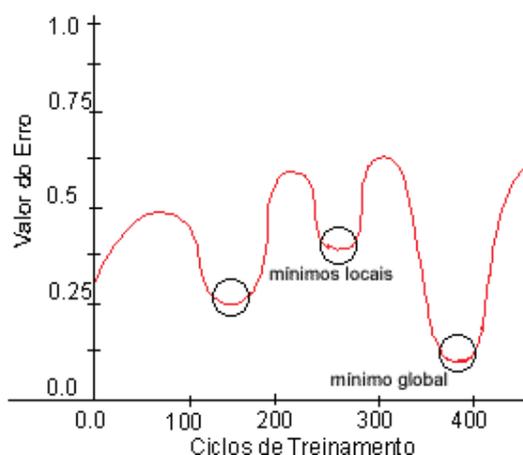


Figura 12 - Curva de erro mostrando os mínimos locais e o mínimo global

A correção do erro consiste em ajustar os pesos da rede neural, de maneira que a saída real se aproxime da desejada.

O ajuste da rede obedece à Regra Delta de Aprendizado, que, após medir a diferença entre a resposta atual e a desejada, realiza os ajustes apropriados nos pesos, de modo a reduzir esta distância, conforme está representado na Figura 13.

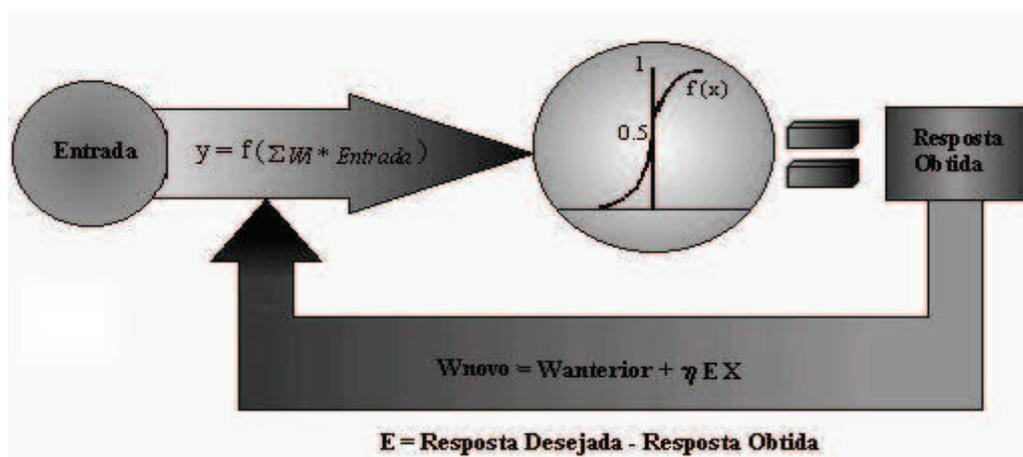


Figura 13 - Regra Delta de Aprendizado

A Regra Delta dependerá do erro calculado, do valor do estímulo de entrada que é "transmitido" pelo peso a ser ajustado, e também da taxa de aprendizado, que está relacionada à cautela com que a curva de erros é percorrida. Assim, para um dado estímulo  $k$ , no passo de treinamento  $n$ :

$$\Delta w_{ij} = \eta e_k(n) x_j(n)$$

**Equação 4 - Regra delta de aprendizado**

$\Delta w(n)$  - valor de ajuste a ser acrescentado ao peso  $w_{ij}$ ;

$\eta$  - taxa de aprendizado;

$e(n)$  - valor do erro;

$x_j(n)$  - valor do estímulo;

$n$  - número da iteração do treinamento.

O valor atualizado do peso será:

$$w(n+1) = w(n) + \Delta w_{kj}(n)$$

**Equação 5 - Valor atualizado do peso**

Portanto, podemos utilizar a Regra Delta para corrigir os valores dos pesos, minimizando a função de erro  $e(n)$ , também conhecida como "função de custo":

$$\varepsilon(n) = \frac{1}{2} e^2(n)$$

Onde:

$e(n)$  - erro da rede no passo  $n$  do treinamento;

$\varepsilon(n)$  - valor da função de custo no passo  $n$  do treinamento.

Este processo de aprendizado é utilizado nos modelos Perceptron e Multicamadas.

### 5.4.2 Aprendizado Hebbiano

O Aprendizado Hebbiano baseia-se nos seguintes postulados:

- 1 - Se a ativação de um neurônio tiver grande influência sobre a ativação de outro neurônio, a ligação entre estes dois neurônios deve ser reforçada;
- 2 - Se a ativação de um neurônio não influencia a ativação de um segundo neurônio, a ligação entre estes dois neurônios deve ser enfraquecida ou até mesmo removida.

Isto demonstra a natureza local do aprendizado hebbiano, e sua relação com o instante em que ocorrem as ligações sinápticas entre dois neurônios.

### 5.4.3 Aprendizado competitivo

No Aprendizado Competitivo, os neurônios competem entre si, para responder a um determinado estímulo. Este processo de aprendizado é constituído por:

- 1 - Um conjunto de neurônios diferenciados por seus pesos, que respondem de forma desigual a um mesmo estímulo;
- 2 - Um limite imposto sobre a força de cada neurônio;
- 3 - Um mecanismo que permita a competição entre os neurônios, onde apenas um, dentre um grupo de neurônios, possa responder a uma classe de estímulos de entrada.

## 5.5 REDES NEURAIS PERCEPTON MULTICAMADAS

*Multilayer perceptron* é a denominação dada à forma de se arranjar os *perceptrons* em camadas, e foi concebida para resolver problemas mais complexos, pois neurônios básicos isolados não teriam condições de resolver este tipo de problema. Um único perceptron ou uma combinação das saídas de alguns perceptrons podem realizar uma operação XOR (operação lógica de comparação que tem duas entradas e apenas uma saída), porém não poderia aprendê-la (SCHREIBER, 2004).

O aprendizado demanda mais conexões, que são passíveis de serem obtidas com uma rede de perceptrons dispostas em camadas. Uma rede é composta por várias unidades de processamento, interligadas por canais de comunicação que estão associados a determinado peso. As unidades só fazem operações sobre os dados recebidos pelas conexões, *i.e.*, sobre os dados de entrada (CAETANO, 2005).

O comportamento inteligente de uma Rede Neural é desenvolvido a partir das diversas iterações entre suas unidades de processamento. A maioria dos modelos de redes neurais exige uma regra de treinamento, onde os pesos atribuídos às conexões vão se ajustando de acordo com os padrões que são apresentados. As redes aprendem através da experiência do exemplo (FROZZA, 2004).

A rede neural necessariamente passa por uma fase de aprendizado a partir de casos reais já conhecidos, adquirindo então a capacidade de tratar adequadamente os dados que recebe. Diferentemente da computação programada,

que necessita de regras fixas, rígidas e de algoritmos, a rede neural é capaz de extrair regras básicas a partir de dados reais (SILVA, 2004).

## 5.6 ALGORITMO DE TREINAMENTO DO PERCEPTRON

Durante o processo de treinamento do Perceptron, busca-se encontrar um conjunto de pesos que defina uma reta que separe as diferentes classes, de forma que a rede classifique corretamente as entradas apresentadas. Para que tal conjunto de pesos seja alcançado, os ajustes a serem feitos são calculados segundo o algoritmo descrito a seguir:

Variáveis e Parâmetros:

$X(n)$  = vetor de entrada;

$W(n)$  = vetor de pesos sinápticos;

$b(n)$  = *bias*;

$y(n)$  = resposta real;

$d(n)$  = resposta desejada;

$e(n)$  = erro na saída da unidade;

$m$  = taxa de aprendizagem, que é uma constante com valores de 0 a 1 inclusive;

$n$  = contador dos passos do algoritmo.

### **1 - Inicialização:**

Inicializar os valores do vetor  $w$  e da taxa de aprendizado.

### **2 - Repetir:**

2.1 - Apresentar o vetor de entrada  $X(n)$  e a saída desejada  $d(n)$ , de cada par do conjunto de treinamento  $T = \{(x, d)\}$

2.2 - Calcular a resposta real do Perceptron, da seguinte forma:

$$y(n) = f(W(n)X(n)+b(n)),$$

Onde  $f(.)$  é a Função de Limiar utilizada como função de ativação.

2.3- Calcular o erro da saída da unidade da seguinte forma:

$$e(n) = d(n) - y(n);$$

2.4- Atualizar o vetor de pesos para cada uma das unidades da rede segundo a regra delta de aprendizagem:

$$W(n+1) = W(n) + \Delta e(n)X(n);$$

### 3 - Incremento:

3.1 - Incrementar o passo de tempo ( $n$ ), e, a seguir, voltar ao passo 2.1. Repetir o processo até obter um valor nulo para  $e(n)$ , para todos os elementos do conjunto de treinamento e em todas as unidades da rede.

Rosenblatt provou, através do *Teorema da Convergência do Perceptron*, que este algoritmo consegue encontrar um conjunto de pesos ideais para que a rede classifique corretamente as entradas, desde que o algoritmo seja aplicado a classes linearmente separáveis (ROSENBLATT,1962).

## 6 O ALGORITMO DO “ENXAME DE PARTÍCULAS”

É um algoritmo de otimização heurística, que foi desenvolvido tendo como base o comportamento gregário do movimento dos animais que se locomovem em grupo (peixes, pássaros, insetos).

Foi criado por Eberhart e Kennedy (1995), e consiste na definição de uma função objetiva através da troca de informações entre as partículas (elementos do grupo), que resulta em um algoritmo de otimização que não é determinístico, ou seja, no qual não há certeza de que determinado estímulo traga sempre a mesma reação.

O *Particle Swarm Optimization* (PSO) analisa o movimento de cada partícula em cada iteração, considerando três termos distintos;

- termo relativo à inércia da partícula, que traduz o modo como a partícula vem se movendo;
- termo relativo à atração da partícula ao melhor ponto que esta já encontrou;
- termo relativo à atração da partícula ao melhor ponto que todo o grupo ou parte do grupo já encontrou.

Uma característica do PSO é que ele realiza uma busca global nas iterações iniciais do procedimento de otimização e, neste estágio, ocorre a prospecção de várias regiões do espaço de busca, viabilizando a identificação e localização de ótimos globais. Com a seqüência das iterações, a busca passa a ser uma busca local em torno do melhor valor ou do valor mais promissor. Esta busca deve chegar muito próximo do ponto ótimo. A seleção dos parâmetros é fundamental para um bom desempenho do algoritmo (BISCAIA JR., 2004).

Em 1998, Eberhart e Shi, propuseram o conceito dos parâmetros de confiança, que indicam quanto uma partícula “confia” em si própria ( $c_1$ ) e no enxame ( $c_2$ ). Esta evolução no algoritmo permitiu que as buscas por solução se qualificassem pois aumentando o  $c_1$ , a partícula é menos influenciada pelo resultado global e mais pelo seu próprio, permitindo esgotar o universo de buscas.

Em 1998, Kennedy constatou que, utilizando 0,5 para  $c_1$  e  $c_2$ , os resultados são melhores.

## 6.1 O ALGORITMO DO “ENXAME DE PARTÍCULAS”

Para um melhor entendimento do algoritmo, apresenta-se aqui um cenário, utilizado pelos criadores do algoritmo *PSO*, James Eberhart e Russell Kennedy, na Conferência Internacional de Redes Neurais, em outubro de 2004, na cidade de Perth, Austrália.

Os autores propõem: “Imagine um grupo de pássaros procurando alimento em determinada região, e imagine também que nesta região há alimento para apenas um pássaro, e suponha ainda que nenhum pássaro saiba exatamente onde está esse alimento. Imagine também que cada pássaro saiba calcular a distância entre ele e o local onde ele imagina que está o alimento, e que após cada tentativa de capturar o alimento (iteração), todos saibam qual pássaro chegou mais próximo do alimento. Qual seria a melhor estratégia para achar este alimento? Certamente é a de seguir o pássaro que chegou mais perto do alimento.”.

O *PSO* aprende com o cenário e usa esse conhecimento para resolver problemas de otimização. No *PSO*, cada solução é como um dos pássaros na área de busca do alimento, no exemplo acima. Cada pássaro é chamado “partícula”, e cada partícula assume um valor relacionado à sua capacidade de adaptação, à sua aptidão em otimizar-se, e em seguir as partículas que têm um resultado melhor.

Para se iniciar um *PSO*, devem ser estabelecidos valores aleatórios para cada partícula, e então iniciar a busca pela otimização de novas gerações já otimizadas. Após cada iteração, cada partícula é atualizada com os dois melhores valores disponíveis. O primeiro destes é a melhor solução já alcançada pela partícula; é o chamado valor “*pbest*”. E o segundo é chamado “*gbest*”, e é o melhor valor alcançado entre todas as partículas. Se topologicamente a população for dividida em vizinhanças, em cada uma delas existe o melhor valor local “*lbest*”, que substitui o *gbest*.

Depois de encontrados os dois melhores valores, a atualização da velocidade e da posição das partículas segue as equações (a) e (b), abaixo:

$$a) v() = v() + c_1 * rand() * (pbest() - present()) + c_2 * rand() * gbest() - present());$$

b)  $present() = present() + v()$ , onde  $v()$  é a velocidade da particular,  $present()$  é a solução já conseguida pela partícula,  $pbest()$  e  $gbest()$  já foram definidos,  $rand()$  é um número randômico entre (0,1) e  $c_1, c_2$  são fatores de aprendizado, normalmente  $c_1 = c_2 = 2$ .

## 6.2 O PSEUDOCÓDIGO DO ALGORITMO PSO

A presente seção mostrar o funcionamento do algoritmo *PSO*.

Para cada particulado enxame:

Iniciar;

Armazenar a melhor posição obtida pelo indivíduo

Identificar a partícula que exerce a maior influência social

Armazenar a melhor posição obtida por esta partícula

Determinar o ponto médio entre as posições armazenadas

Deslocar a partícula em direção ao ponto médio.

Avaliar a nova posição

Armazenar a nova posição caso esta seja melhor que a anterior

Calcular valor da otimização;

Se valor da otimização for melhor do que o *pbest* atual, então o valor da otimização passa a ser o novo *pbest*;

Fim;

Escolher a partícula do enxame que tiver o valor da otimização como *gbest*;

Repetir enquanto o número máximo de iterações ou critério de erro não for alcançado.

### 6.3 DETALHAMENTO DO ALGORITMO

1. Inserir o valor de  $n$  (o número de partículas do enxame), de  $m$  (o número de iterações), especificar os valores para  $\omega_{final}$ ,  $\omega_{inicial}$ ,  $c_1$ ,  $c_2$  e os valores mínimos e máximos para  $x$  e para  $y$ .

2. Para  $k = 1, \dots, n$ , calcular

$$x_{k_{melhor}} \leftarrow x_k \leftarrow x_{\min} + rand \times (x_{\max} - x_{\min})$$

$$y_{k_{melhor}} \leftarrow y_k \leftarrow y_{\min} + rand \times (y_{\max} - y_{\min});$$

$$V_{x,k} \leftarrow V_{y,k} \leftarrow 0;$$

$$f_{k_{melhor}} \leftarrow f(x_k, y_k);$$

Se  $k = 1$ , então fazer

$$x_{global} \leftarrow x_k; y_{global} \leftarrow y_k; f_{global} \leftarrow f_{k_{melhor}};$$

Senão se  $f_k(\text{melhor}) > f_{global}$ , então fazer

$$x_{global} \leftarrow x_k; y_{global} \leftarrow y_k; f_{global} \leftarrow f_{k_{melhor}};$$

Voltar ao início da etapa 2;

3. Para  $i = 1, \dots, m$ , fazer

$$\omega \leftarrow \omega_{inicial} + (\omega_{final} - \omega_{inicial}) \times \frac{i - 1}{m - 1}$$

3.1. Para  $k = 1, \dots, n$ , fazer

$$V_{x,k} \leftarrow \omega \times V_{x,k} + c1 \times rand \times (x_{k_{melhor}} - x_k) + c2 \times rand \times (x_{global} - x_k);$$

$$V_{y,k} \leftarrow \omega \times V_{y,k} + c1 \times rand \times (y_{k_{melhor}} - y_k) + c2 \times rand \times (y_{global} - y_k);$$

$$x_k \leftarrow x_k + V_{x,k}; y_k \leftarrow y_k + V_{y,k};$$

Se  $x_k > x_{max}$ , fazer

$$x_k \leftarrow x_{max}; V_{x,k} \leftarrow 0;$$

Se  $x_k < x_{min}$ , fazer

$$x_k \leftarrow x_{min}; V_{x,k} \leftarrow 0;$$

Se  $y_k > y_{max}$ , fazer

$$y_k \leftarrow y_{max}; V_{y,k} \leftarrow 0;$$

Se  $y_k < y_{min}$ , fazer

$$y_k \leftarrow y_{min}; V_{y,k} \leftarrow 0;$$

$$f_{atual} \leftarrow f(x_k, y_k);$$

Se  $f_{atual} > f_{k_{melhor}}$ , fazer

$$f_{k_{melhor}} \leftarrow f_{atual};$$

$$x_{k\text{melhor}} \leftarrow x_k;$$

$$y_{k\text{melhor}} \leftarrow y_k;$$

Se  $f_{\text{atual}} > f_{\text{global}}$ , então fazer

$$f_{\text{global}} \leftarrow f_{\text{atual}};$$

$$x_{\text{global}} \leftarrow x_k;$$

$$y_{\text{global}} \leftarrow y_k;$$

Se  $k \leq n$ , voltar para a etapa 3.1, se  $k > n$ , voltar para a etapa 3;

4. Depois de feitas todas as iterações, os melhores valores de  $x$  e  $y$  são:  $x_{\text{global}}$  e  $y_{\text{global}}$ . Neste ponto, o valor da função é:  $f_{\text{global}}$ .

## 7 A REDE NEURAL ARTIFICIAL DESENVOLVIDA

Para a implementação da rede neural, foi usada a Linguagem C, criada por Dennis Ritchie, em 1972, no centro de Pesquisas da *Bell Laboratories*. (Ritchie D, 1982)

A função de ativação utilizada foi a sigmoideal, que assume valores entre 0 e 1 inclusive. A utilização desta função obrigava que os padrões de treinamento se apresentassem desta forma: os padrões deveriam ser codificados de forma que ficassem dentro desse intervalo. Para solucionar esta questão, foi utilizada a seguinte forma de conversão dos valores:

$$\text{Valor Rede} = \frac{\text{Valor Real} - \text{Mínimo}}{\text{Máximo} - \text{Mínimo}}$$

**Equação 6 - Valor da rede**

Onde:

Valor Rede – é um valor entre 0 e 1, inclusive que é apresentado à rede;

Valor Real– é um valor entre Mínimo e Máximo que representa o valor real;

Mínimo – é o valor mínimo que Valor Real pode ter;

Máximo – é o valor máximo que Valor Real pode ter.

O mesmo problema ocorre quando a rede fornece uma saída. O valor fornecido como saída estará sempre entre 0 e 1, não tendo qualquer significado. Pensando neste problema, a equação anterior foi modificada para:

$$\text{Valor Real} = \text{Valor Rede} (\text{Máximo} - \text{Mínimo}) + \text{Mínimo}$$

Após este passo, o algoritmo foi implementado, porém, com algumas adaptações. As redes neurais implementadas são constituídas de 3 camadas, onde a camada intermediária apresenta 35 neurônios, e as camadas de entrada e saída variam de acordo com o problema.

A fase de treinamento ocorre até ser atingido certo nível de erro. Após isto, os pesos são gravados em um arquivo e não são mais modificados. Estes pesos somente serão lidos quando se desejar obter uma saída em função de uma entrada pela rede neural.

A rede neural foi treinada com o algoritmo do enxame de partículas sendo empregado como função-objetivo, com 4 entradas (Alumínio, Níquel, Temperatura e Pressão) e 2 saídas (Peso Molecular e Atividade), a fim de se obter a maior Atividade para determinado Peso Molecular.

## 7.1 ALGORITMO USADO NO TREINAMENTO DA REDE

1. são representados: por A, o número de neurônios da camada de entrada, conforme determinado pelo comprimento dos vetores de entrada de treinamento; por C, o número de neurônios da camada de saída; e por B, o número de neurônios da camada intermediária;
2. são atribuídos os valores iniciais dos pesos da rede. Cada peso deve ser inicializado aleatoriamente;
3. deve ser escolhido um par “entrada-saída”. Se deve supor que o vetor de entrada seja  $u_1$ , e que o vetor de saída seja  $y_1$ . Devem ser atribuídos níveis de ativação aos neurônios da camada de entrada;
4. deve ser feita a propagação da ativação dos neurônios da camada de entrada para a camada intermediária, usando-se a função sigmoideal unipolar seguinte:

$$h_k = \frac{1}{1 + e^{-a}}, \forall k = 1, \dots, B$$

**Equação 7 - Função Sigmoidal Unipolar**

Onde:

$$a = \sum_{l=0}^A w_{1lk} u_l$$

5. Deve ser feita a propagação da ativação dos neurônios da camada intermediária para os da camada de saída segundo a equação 8.

$$y_j = \frac{1}{1 + e^{-a}}, \forall k = 1, \dots, B$$

**Equação 8 - Propagação para camada de saída da rede**

Onde:

$$a = \sum W_{2lk} h_l$$

6. Devem ser computados os erros dos neurônios da camada de saída, que é denotada pela equação 9.

$$\delta_{2k} = y_k(1 - y_k)(t_k - y_k), \forall k = 1, \dots, C$$

**Equação 9 - Erros dos neurônios da camada de saída**

7. Devem ser computados os erros dos neurônios da camada intermediária, que é denotada pela equação 9.

$$\delta_{1k} = h_k (1 - h_k) \sum_{l=1}^C \delta_{2l} w_{2lk}, \forall k = 1, \dots, B$$

**Equação 10 - Erro dos neurônios na camada intermediária**

8. Devem ser ajustados os pesos, entre a camada intermediária e a da saída.

$$\Delta w_{2lk} = n \delta_{2kj} h_l, \forall l = 1, \dots, B; \forall k = 1, \dots, C$$

**Equação 11 - Ajuste de pesos entre a camada intermediária e a camada de saída**

9. Devem ser ajustados os pesos entre a camada de entrada e a intermediária.

$$\Delta w_{1lk} = n \delta_{1k} u_l, \forall l = 1, \dots, A; \forall k = 1, \dots, B$$

**Equação 12 - Ajuste de pesos entre a camada de entrada e a camada intermediária**

10. O procedimento deve retornar para a etapa 3 e repeti-la. Quando todos os pares de “entrada-saída” já tiverem sido apresentados à rede, uma iteração terá sido completada. Devem ser repetidas as etapas de 3 a 9, para tantas iterações quantas forem desejadas.

O enxame de partículas vai procurar chegar o mais próximo possível deste peso molecular. A cada iteração do algoritmo, é testado o nível de atividade atingido, e se a atividade encontrada for maior do que a anterior, o algoritmo é novamente iniciado. Se, ao final de um ciclo de 10 iterações, não for encontrada uma atividade maior do que a da anterior, o programa será encerrado.

O algoritmo do enxame de partículas não possui um conjunto perfeito de parâmetros, por isto, ele foi exaustivamente executado, com variações dos parâmetros, buscando identificar os que apresentassem um melhor resultado.

Este procedimento gerou uma grande quantia de dados, que foram analisados para treinar a rede neural usada na implementação do método apresentado neste estudo.

Esses dados podem ser obtidos por trabalho experimental ou por meio de modelos matemáticos. A menos que uma grande quantidade de dados experimentais esteja facilmente disponível, deve ser considerada a utilização de dados simulados, para o treinamento da rede neural.

Dados para as características produzidas por cada condição operacional podem ser obtidos recorrendo a modelos matemáticos rigorosos bem definidos para o reator de polimerização. As Tabelas 1, 2 e 3 apresentam os resultados obtidos através de experiências realizadas em laboratório. Estes resultados foram usados como padrões para o treinamento das redes neurais.

## 7.2 COMPROVAÇÃO DA EFICÁCIA DA REDE UTILIZADA

Para auferir a confiabilidade da rede neural desenvolvida e do treinamento aplicado à rede, os resultados obtidos com a rede neural foram comparados com os resultados obtidos em laboratório, nas mesmas condições reacionais iniciais.

Na seqüência são apresentados os valores dos experimentos executados em laboratório para cada um dos catalisadores utilizados e os valores obtidos com a rede neural.

A seqüência de apresentação é por catalisador utilizado, primeiro a tabela com os dados de laboratório e o gráfico com o nível de atividade alcançado, depois a tabela com os dados da rede neural e o gráfico com o nível de atividade alcançado.

### 7.2.1 Resultados utilizando $\text{DADNi}(\text{NCS})_2$ , como catalisador

Tabela 1 - Resultados utilizando  $\text{DADNi}(\text{NCS})_2$  como catalisador

Exp.	Al	Ni	T	P	Reações	Massa (g)	MW-laboratório	MW-RNA
1	1,4	5	0	1	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	2,7668	13,13	13,13
2	2,3	11	0	1	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	8,0028	12,34	12,34
3	2,3	5	0	3	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	2,5936	14,04	14,04
4	1,4	11	0	3	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	4,624	8,87	8,87
5	2,3	5	50	1	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	5,7295	6,84	6,84
6	1,4	11	50	1	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	4,6812	2,80	2,80
7	1,4	5	50	3	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	9,58	7,03	7,03
8	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	6,7212	8,00	8,00
9	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	5,8112	8,33	8,33
10	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	5,6404	10,22	10,22
11	2,3	11	50	3	$\text{DADNi}(\text{NCS})_2$	9,5612	7,02	7,02

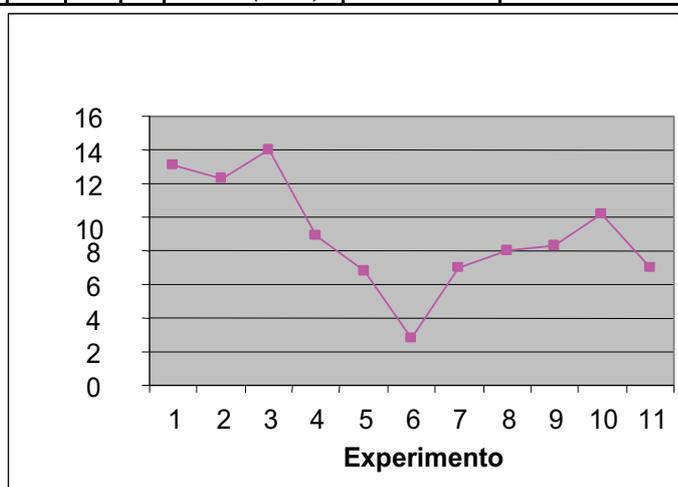


Figura 14 - Nível de atividade  $\text{DADNi}(\text{NCS})_2$  em laboratório

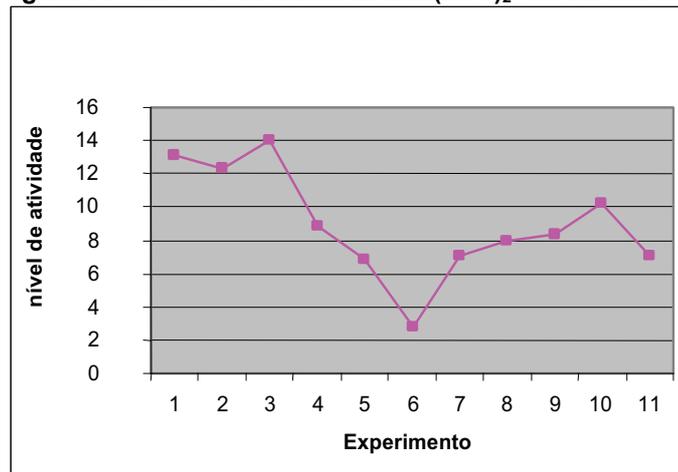


Figura 15 - Nível de atividade  $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$  na rede neural

## 7.2.2 Resultados utilizando DADNi(Br)<sub>2</sub> como catalisador

Tabela 2 - Resultados utilizando DADNi(Br)<sub>2</sub> como catalisador

Exp.	Al	Ni	T	P	Reações	Massa (g)	MW-laboratório	MW-RNA
1	1,4	5	0	1	DADNi(Br) <sub>2</sub>	0,6338	15	15
2	2,3	11	0	1	DADNi(Br) <sub>2</sub>	1,7741	12,1	12,1
3	2,3	5	0	3	DADNi(Br) <sub>2</sub>	0,595	13,46	13,46
4	1,4	11	0	3	DADNi(Br) <sub>2</sub>	2,0542	15	15
5	2,3	5	50	1	DADNi(Br) <sub>2</sub>	2,8354	7,94	7,94
6	1,4	11	50	1	DADNi(Br) <sub>2</sub>	4,9812	6,96	6,96
7	1,4	5	50	3	DADNi(Br) <sub>2</sub>	5,8332	8,77	8,77
8	1,8	8	25	2	DADNi(Br) <sub>2</sub>	3,6562	9,39	9,39
9	1,8	8	25	2	DADNi(Br) <sub>2</sub>	3,8873	9,97	9,97
10	1,8	8	25	2	DADNi(Br) <sub>2</sub>	3,5658	9,29	9,29
11	2,3	11	50	3	DADNi(Br) <sub>2</sub>	5,165	8,16	8,16

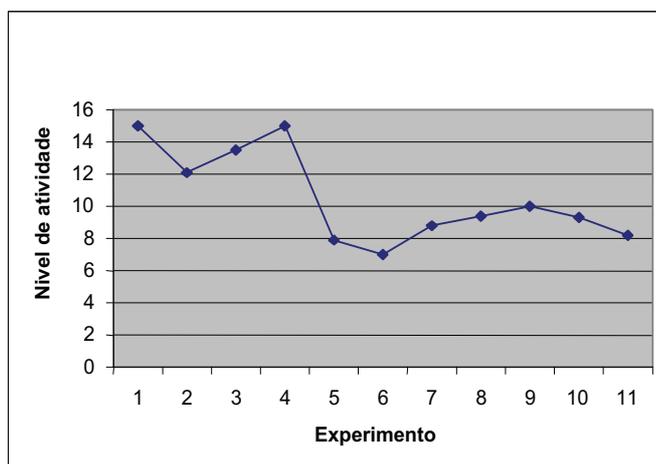


Figura 16 - Nível de atividade DADNi(Br)<sub>2</sub> em laboratório

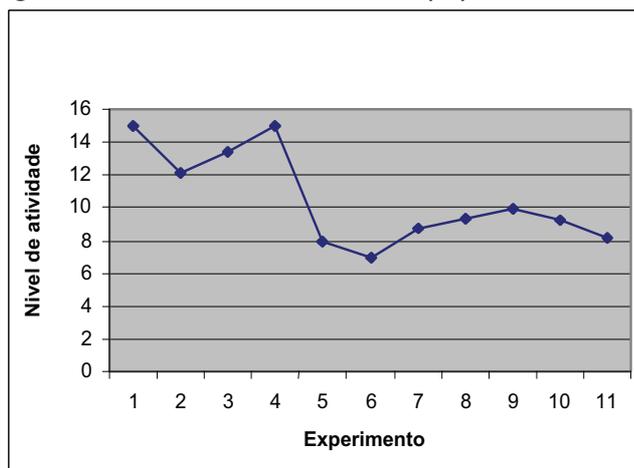


Figura 17 - Nível de atividade DADNi(Br)<sub>2</sub> na rede neural

### 7.2.3 Resultados utilizando $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$ como catalisador

Tabela 3 - Resultados utilizando  $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$  como catalisador

Exp	Al	Ni	T	P	Reações	Massa (g)	MW-laboratório	MW-RNA
1	1,4	5	0	1	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	0,784	15	15
2	2,3	11	0	1	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	1,394	9,82	9,82
3	2,3	5	0	3	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	0,1811	11,73	11,73
4	1,4	11	0	3	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	4,0031	15	15
5	2,3	5	50	1	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	0,2256	7,17	7,17
6	1,4	11	50	1	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	1,2268	7,14	7,14
7	1,4	5	50	3	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	1,8244	9,84	9,84
8	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	1,9872	11,55	11,55
9	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	2,0017	12,06	12,06
10	1,8	8	25	2	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	2,0067	10,93	10,93
11	2,3	11	50	3	$\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$	4,6174	8,06	8,06

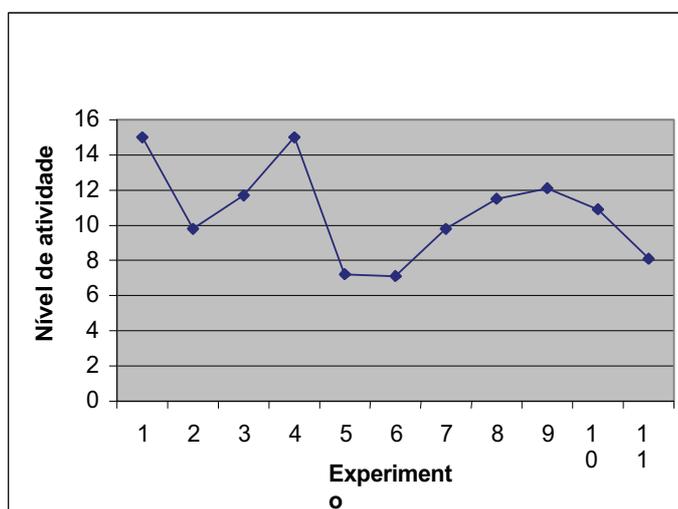


Figura 18 – Nível de atividade  $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$  em laboratório

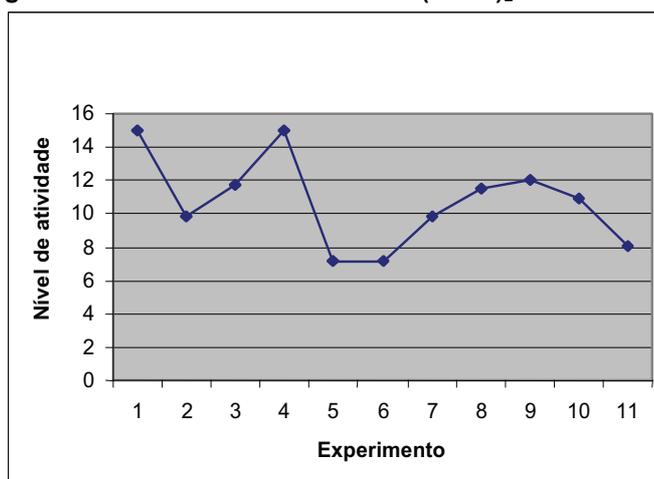


Figura 19 - Nível de atividade  $\text{DADNi}(\text{NCSe})_2$  na rede neural

Os resultados obtidos pela rede neural são próximos ou exatamente iguais aos resultados obtidos em laboratório, nas mesmas condições reacionais iniciais. Estes resultados são a comprovação de que a rede neural foi adequadamente treinada, indicam que as redes neurais são um ótimo método de otimização para resolução do problema, e a rede desenvolvida para este trabalho está treinada e em condições de realizar as experimentações, gerando resultados confiáveis e passíveis de análises e inferências.

## 8 EXPERIMENTOS E RESULTADOS OBTIDOS

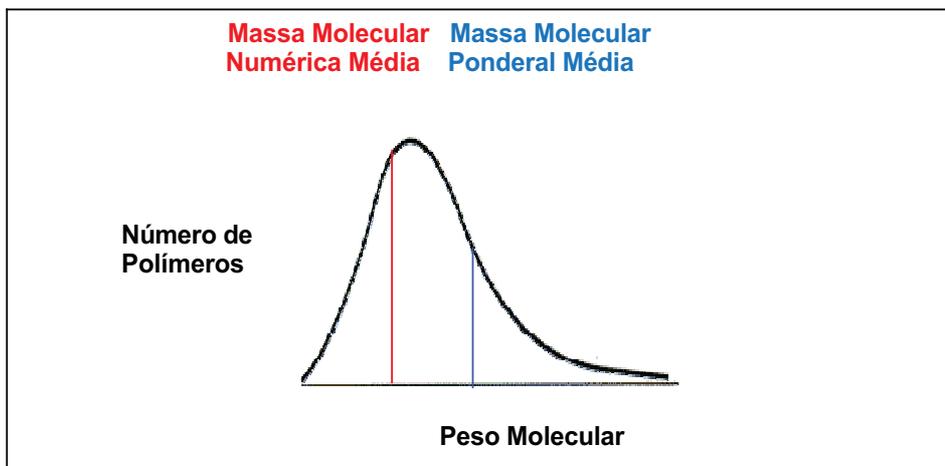
### 8.1 ANÁLISE ESTATÍSTICA DE POLÍMEROS

Antes de serem apresentados e analisados os resultados dos experimentos, é importante que seja feita uma ressalva, referente à análise estatística de polímeros.

Por possuir milhões de moléculas em uma gotinha minúscula, devem ser empregados métodos estatísticos para fazer generalizações sobre as características do polímero.

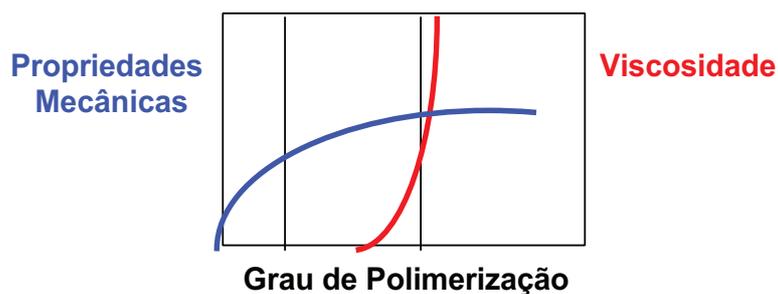
Desta forma, o tamanho do polímero é caracterizado por uma ampla distribuição de pesos moleculares e de comprimentos de cadeia. O grau de polimerização se refere ao número de unidades repetidas na cadeia, e fornece uma medida ou informação sobre o peso molecular, conforme analisado a seguir. Muitas das propriedades importantes do produto final são determinadas principalmente pela distribuição de comprimentos e pelo grau de polimerização.

Para caracterizar a distribuição dos comprimentos de cadeia de um polímero, em uma amostra, são definidos dois parâmetros: número médio de peso e peso molecular comum. O número médio de peso é representado pelo quociente entre a soma de pesos moleculares individuais e pelo número de cadeias de polímero analisadas. A média de peso é proporcional ao quadrado do peso molecular. Desta forma, a média de peso sempre será maior do que o número médio. A Figura 20 mostra uma distribuição dos pesos moleculares típica de polímeros, inclusive com os valores médios para o número e para os pesos moleculares comuns.



**Figura 20 – Distribuição de Pesos Moleculares Típica de Polímeros**

O peso molecular de um polímero é que determina a viscosidade e pode ser representado pelo peso molecular de média de viscosidade. Esta forma de representação do peso molecular é determinada como uma função da viscosidade do polímero em solução. O grau de polimerização tem um efeito dramático sobre as propriedades mecânicas de um polímero. Esta é a característica ilustrada pela curva azul na Figura 21.



**Figura 21 – Propriedades Mecânicas e Viscosidade em Função do Grau de Polimerização**

Porém, em fundições de polímero, por exemplo, a viscosidade de fluxo, a uma determinada temperatura, eleva rapidamente, em função do aumento no grau de polimerização, como mostrado pela curva vermelha na Figura 21.

## 8.2 VARIAÇÃO DO PESO MOLECULAR

Neste experimento, foram analisados polímeros com peso molecular, de 7 até 15 inclusive, para verificar o valor de atividade obtido para cada peso molecular. A Figura 6 representa os resultados obtidos com o experimento descrito. Foram feitas 20 replicações do experimento para cada peso molecular.

Na Figura 22 pode ser observado que, nas 20 replicações realizadas nos experimentos, o nível de atividade variou de 559KgPE a 3180KgPE. A maior atividade foi atingida na replicação 16 com o peso molecular 8. Para o peso molecular 15 há indícios que o processo utilizado não está aderente.

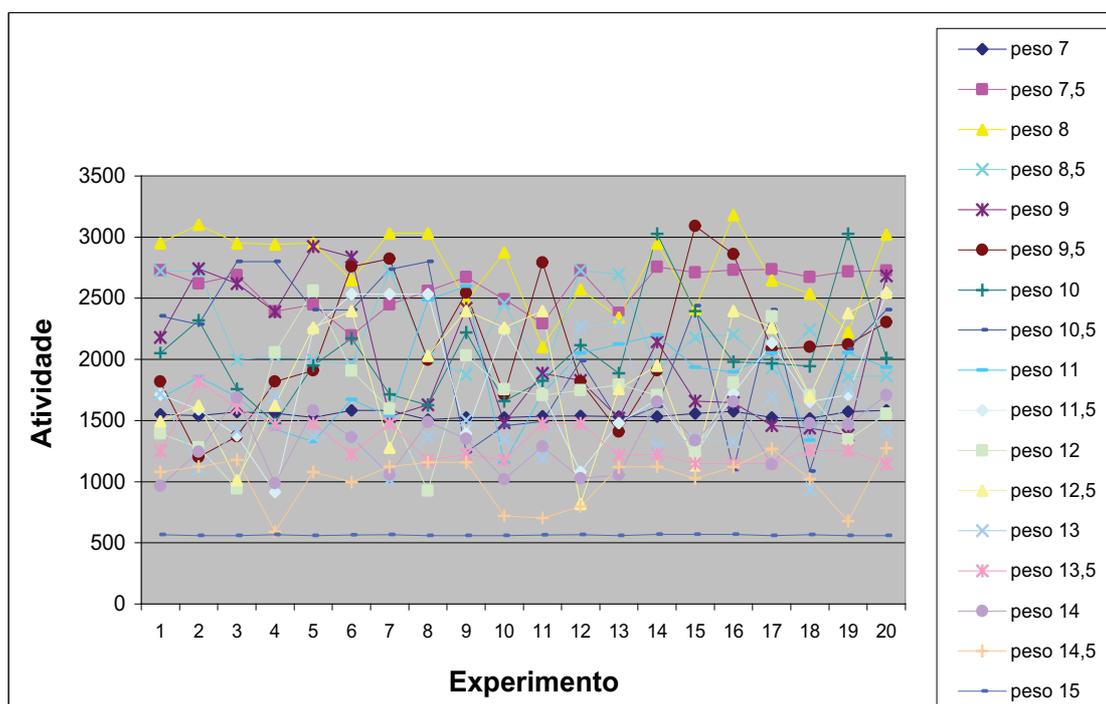


Figura 22 - Valor de atividade para cada peso molecular

### 8.3 VALOR DA ATIVIDADE X NÚMERO DE ITERAÇÕES

Este experimento teve o objetivo de estabelecer o melhor número de iterações por execução da rede. Conforme os dados indicam, a rede fica mais homogênea com 100 iterações porque identificam-se menos variações nos níveis de atividade.

A Figura 23 mostra o resultado de 20 experimentos, onde a atividade varia de 1295KgPE a 2754KgPE, e o número de iterações de 50 a 200. O menor e o maior valor de atividade foram atingidos, respectivamente, nos experimentos de números 2 e 17, ambos com 50 iterações.

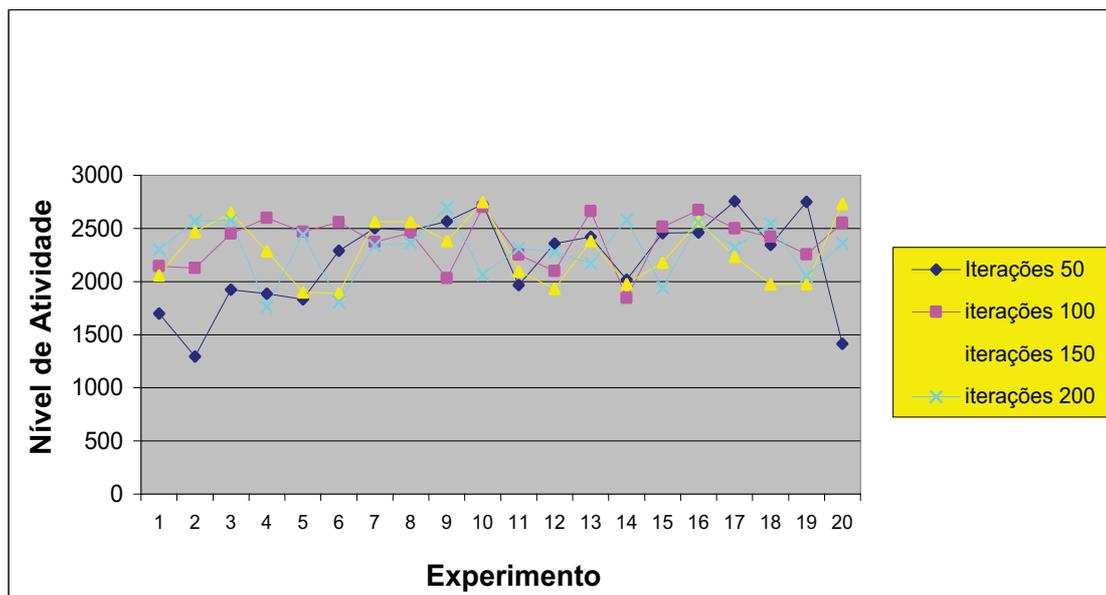


Figura 23 - Valor de atividade para cada iteração

### 8.4 VALOR DA ATIVIDADE X NÚMERO DE PARTÍCULAS

Neste experimento, foi feita a tentativa de identificar a quantidade de partículas que conseguiram os melhores níveis de atividade.

Na Figura 24, pode-se verificar que o nível de atividade variou de 1296KgPE a 2750KgPE, e o número de partículas, de 250 a 750. Com 250 partículas, os níveis de atividade foram mais irregulares nos 20 experimentos realizados, apresentando valores entre 1296KgPE e 2754KgPE. Com 500 partículas, os valores foram entre 2098KgPE e 2701KgPE. E, com 750 partículas, variaram de 1921KgPE a 2754KgPE. Portanto, o melhor nível de atividade foi com 750 partículas, e o mais homogêneo, com 500. Pode-se concluir que com maior número de partículas a busca é mais eficiente.

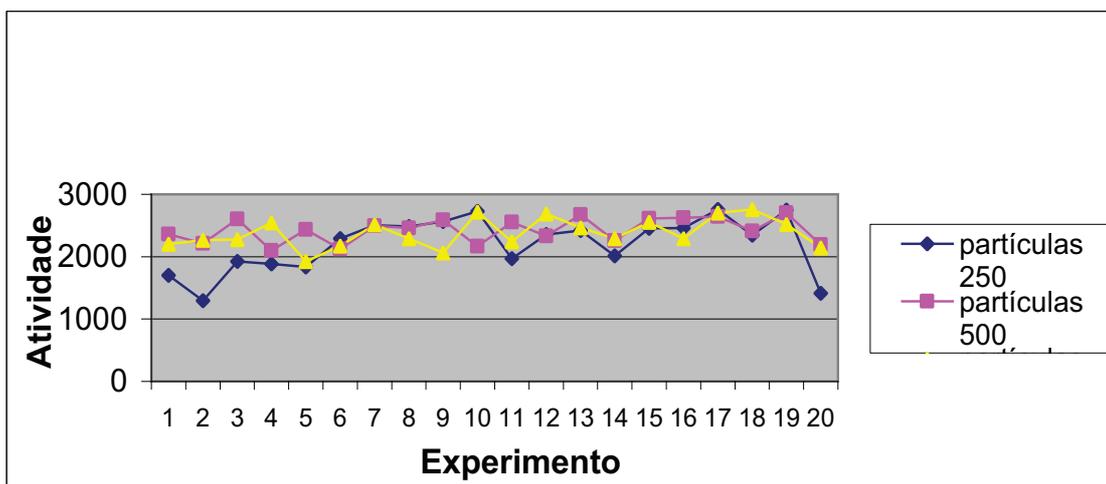


Figura 24 - Valor de atividade para determinadas quantidades de partículas.

## 8.5 VALOR DA ATIVIDADE X VARIAÇÃO DO COMPONENTE INERCIAL

Considerando que um dos maiores problemas na implementação do algoritmo enxame de partículas está no final da sua execução, i.e., na hora em que as partículas devem ser estabilizadas, foram feitos diversos experimentos, variando o fator de inércia inicial e o fator de inércia final, para identificar a influência dos valores de inércia inicial e final sobre os níveis de atividade.

### 8.5.1 Valor da atividade x Variação do Componente Inercial Inicial

Na Figura 25 pode ser observado que, nos 20 experimentos realizados, com componente inercial inicial variando de 0,7 a 1,2, a maior atividade foi de 2738KgPE, atingida em vários experimentos. Percebe-se que o método teve o seu melhor desempenho com o parâmetro estipulado em 1,2, para o qual, em 13 dos 20 experimentos realizados, a atividade ficou acima de 2700KgPE.

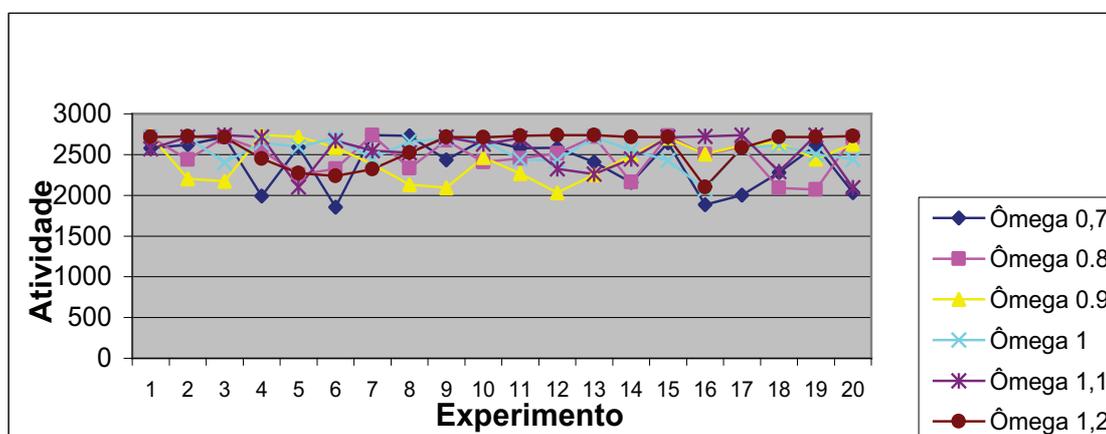
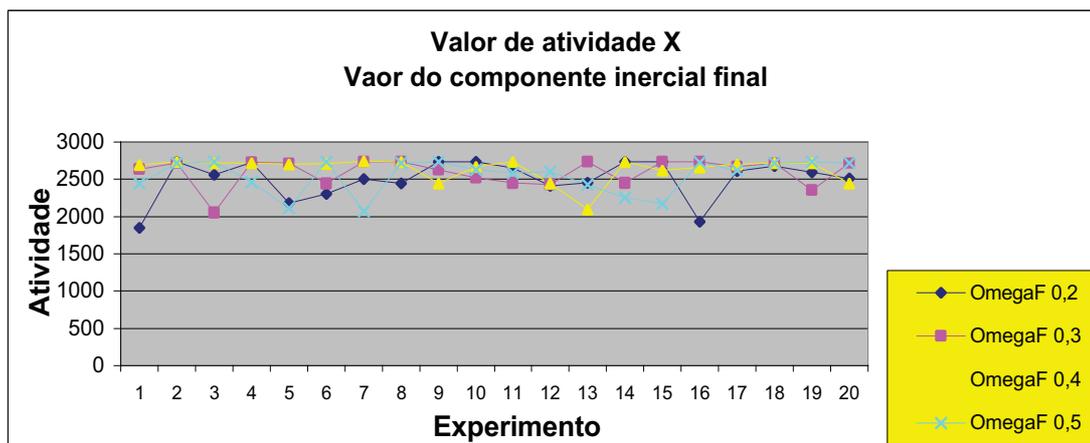


Figura 25 - Valor de atividade para diferentes componentes inerciais iniciais

### 8.5.2 Valor da atividade x Variação do Componente Inercial Final



**Figura 26 - valor de atividade para diferentes componentes inerciais finais**

Na Figura 26 pode ser observado que, nos 20 experimentos realizados, variando o componente inercial final entre 0,2 e 0,5, a maior atividade foi de 2738KgPE, atingida em vários experimentos. Percebe-se que o método teve o seu melhor desempenho com o parâmetro estipulado em 0,4, para o qual, em 9 dos 20 experimentos realizados, a atividade ficou acima de 2700KgPE.

## 8.6 VALOR DA ATIVIDADE ITERAÇÃO A ITERAÇÃO

Na Figura 27, é apresentado o resultado do melhor nível de atividade durante a execução do algoritmo do enxame de partículas. Foram registradas 1000 iterações. A cada 100 iterações, foram eliminadas as partículas e foi iniciado um novo processo. O nível de atividade apresentou incremento substancial com 100, 300 e 900 iterações. Os incrementos ocorreram quando o processo foi reiniciado, isso significa que o máximo global está com mais influência que o máximo local.

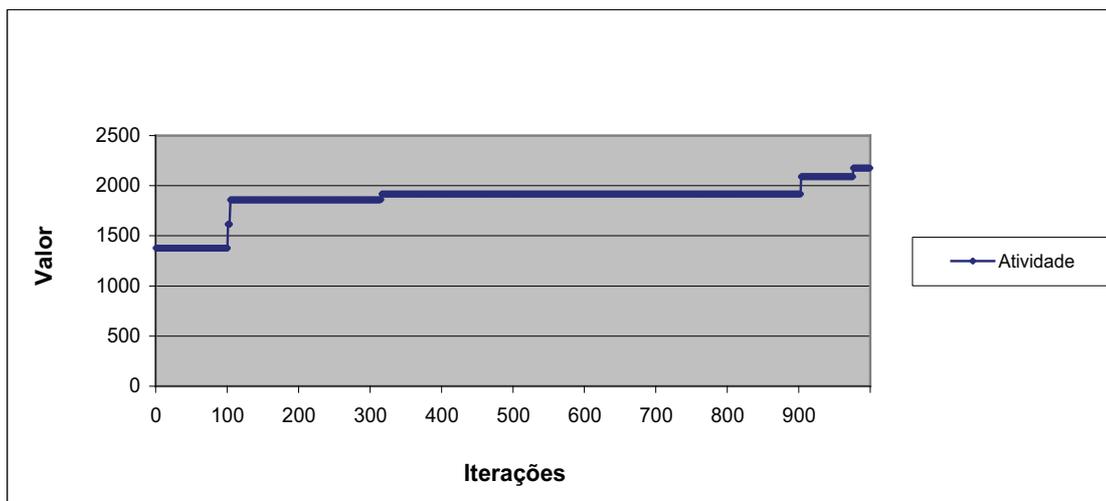


Figura 27 - Valor da atividade iteração a iteração

## 8.7 VALORES DAS CONDIÇÕES REACIONAIS, ITERAÇÃO A ITERAÇÃO

Os valores das condições reacionais (Alumínio, Níquel, Temperatura, Pressão) contidos em uma das partículas, na mesma execução apresentada na Seção 8.7, também foram analisados e são apresentadas na seqüência deste estudo, nas Figuras 28, 29, 30, 31.

### 8.7.1 Valor de Alumínio nas partículas

A Figura 28 mostra o valor de Alumínio contido em uma das partículas, onde este valor variou de 1,4 a 2,3, durante as 1000 iterações. O valor de alumínio está ligado à produtividade do catalisador. Os valores maiores ou menores apresentam

melhores resultados. A alternância indica que se encontrou melhores valores de atividade com muito e com pouco alumínio nas partículas.

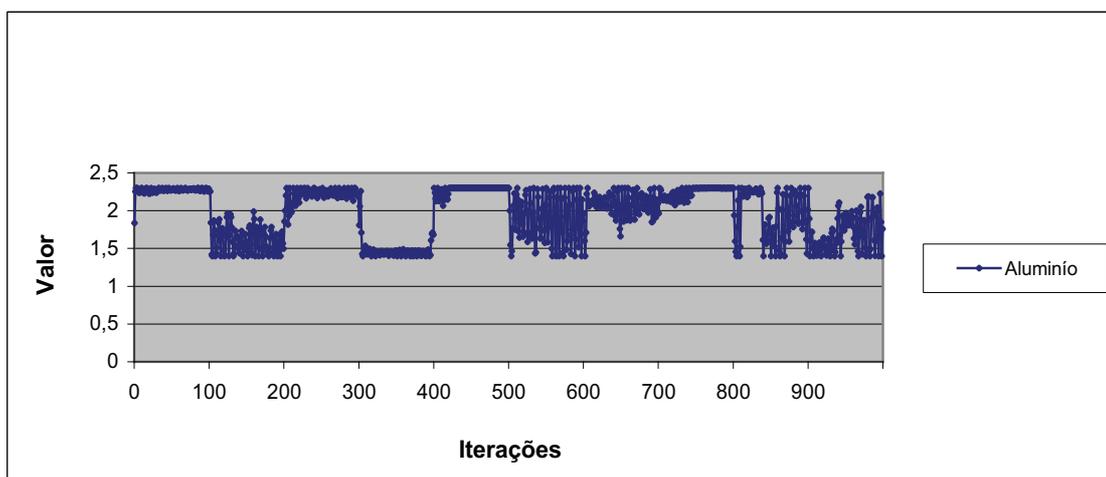


Figura 28 - Valor de Alumínio contido em uma partícula durante a execução do enxame

### 8.7.2 Valor do níquel nas partículas

A Figura 29 mostra o valor de Níquel contido em uma das partículas, onde este valor variou de 5 a 11 durante as 1000 iterações. O níquel é um catalisador que tem grande influência sobre o peso molecular. Quanto mais níquel mais nível de atividade.

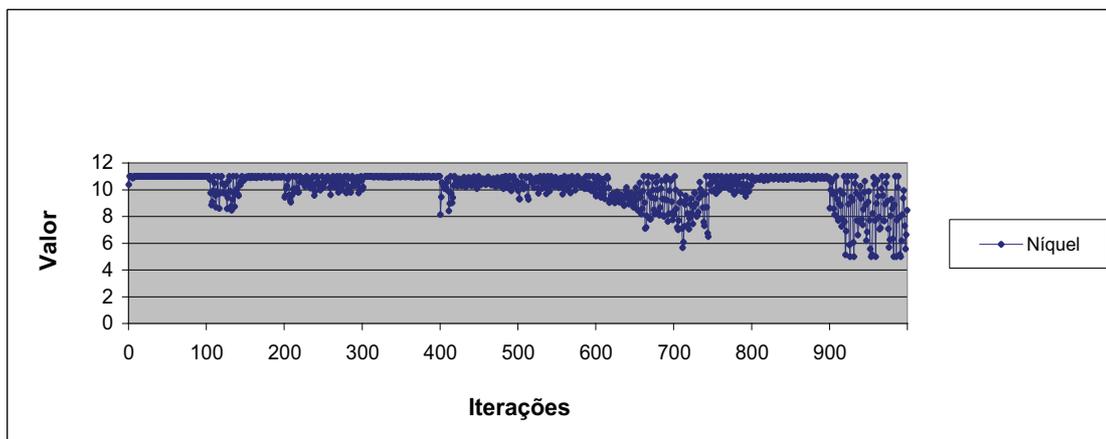


Figura 29 - Valor de Níquel contido em uma partícula durante a execução do enxame

### 8.7.3 Valor da temperatura nas partículas

A temperatura tem uma grande influência sobre as características físicas do estado do polímero.

Na Figura 30, pode ser observado que o valor de temperatura variou de 20 a 50 graus durante as 1000 iterações e também pode ser percebido que a temperatura fica próxima dos 50 graus, a parte superior, sem picos, o mesmo não ocorrendo na parte inferior. Em relação a esta variável das condições de reação, conclui-se claramente que sua variação está relacionada a ciclos, variando numa iteração e ficando constante em outra.

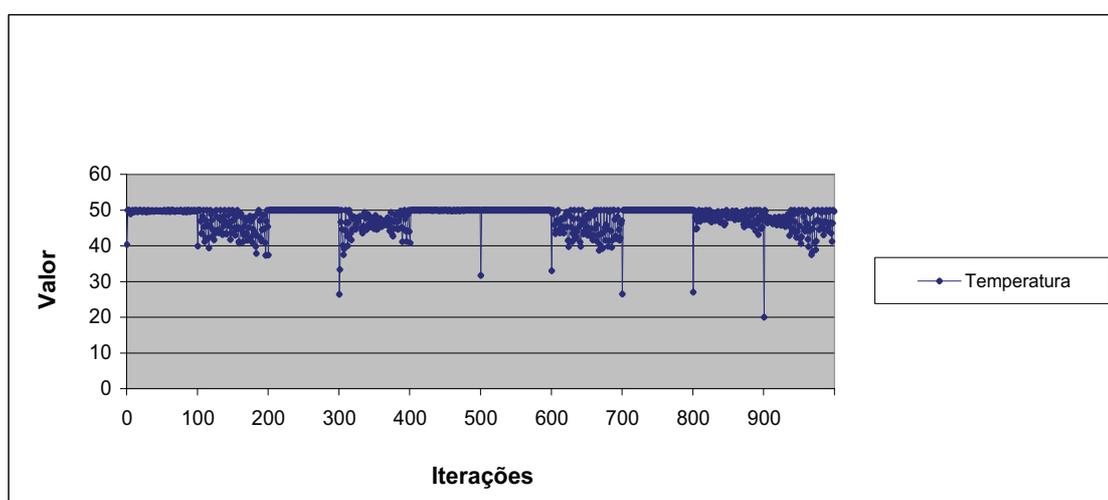


Figura 30 - Valor de Temperatura de uma partícula durante a execução do enxame

#### 8.7.4 Valor da Pressão sobre as partículas

A Figura 31 mostra o valor de Pressão sobre uma das partículas, onde este valor variou de 1 a 3 atmosferas durante as 1000 iterações. Registre-se que o valor da pressão isoladamente tem pouca influencia no resultado final.

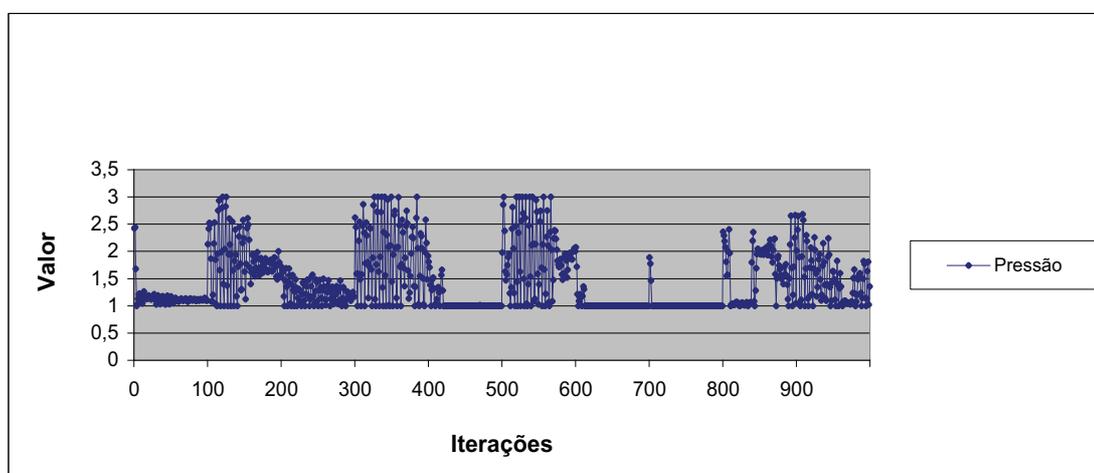


Figura 31 - Valor de Pressão sobre uma partícula durante a execução do enxame

### 8.8 ANÁLISE DOS PARÂMETROS DE CONFIANÇA

#### 8.8.1 Análise dos parâmetros de confiança $c_1$

O parâmetro  $c_1$  indica o índice de confiança da partícula em si mesma, e representa o peso da influência que a posição atual possui em relação à posição global.

Na Figura 32, pode ser observado que, nos 20 experimentos realizados, a constante  $c_1$  recebeu os valores 1, 1,5 e 2. Com a constante  $c_1$  igual a 1, a média das atividades foi de 2584 e, em 8 dos experimentos, a atividade ficou acima de 2700KgPE. Com a constante  $c_1$  igual a 1,5, a média de atividade foi de 2425KgPE, e em apenas 1 destes experimentos a atividade ficou acima de 2700KgPE. Com a constante  $c_1$  igual a 2, a média de atividade foi de 2420KgPE, e em 2 dos experimentos a atividade ficou acima de 2700KgPE. Sob tais condições, o melhor nível de atividade foi alcançado com  $c_1$  igual a 1.

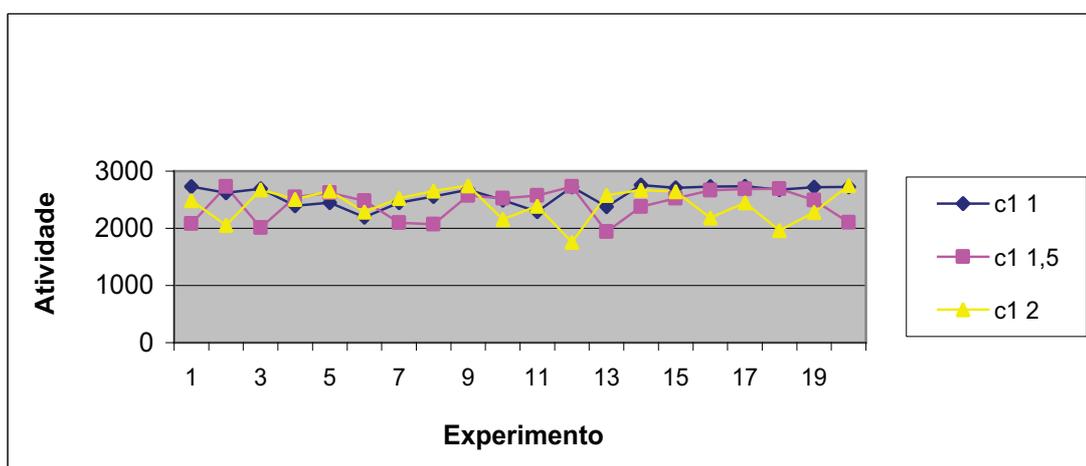


Figura 32 - Valor de atividade em 20 experimentos para  $c_1$  igual a 1, 1,5 e 2

### 8.8.2 Análise dos parâmetros de confiança $c_2$

O parâmetro  $c_2$  indica o índice de confiança da partícula na posição da melhor partícula do enxame, ou seja, representa o peso da influência que a posição global possui em relação à posição atual.

Nos experimentos representados na Figura 33, observa-se que  $c_2$  recebeu os valores 1, 1,5 e 2. Com a constante  $c_2$  igual a 1, a média das atividades atingida foi de 2439KgPE, e em 3 destes experimentos a atividade ficou acima de 2700KgPE. Com a constante  $c_2$  igual a 1,5, a média foi de 2575KgPE, e em 11 dos experimentos realizados com este valor para a constante, a atividade ficou acima de 2700KgPE. Com a constante  $c_2$  igual a 2, a média de atividade foi de 2611KgPE, e em 12 destes experimentos, a atividade ficou acima de 2700KgPE. Em tais circunstâncias, o melhor nível de atividade foi alcançado com  $c_2$  igual a 2.

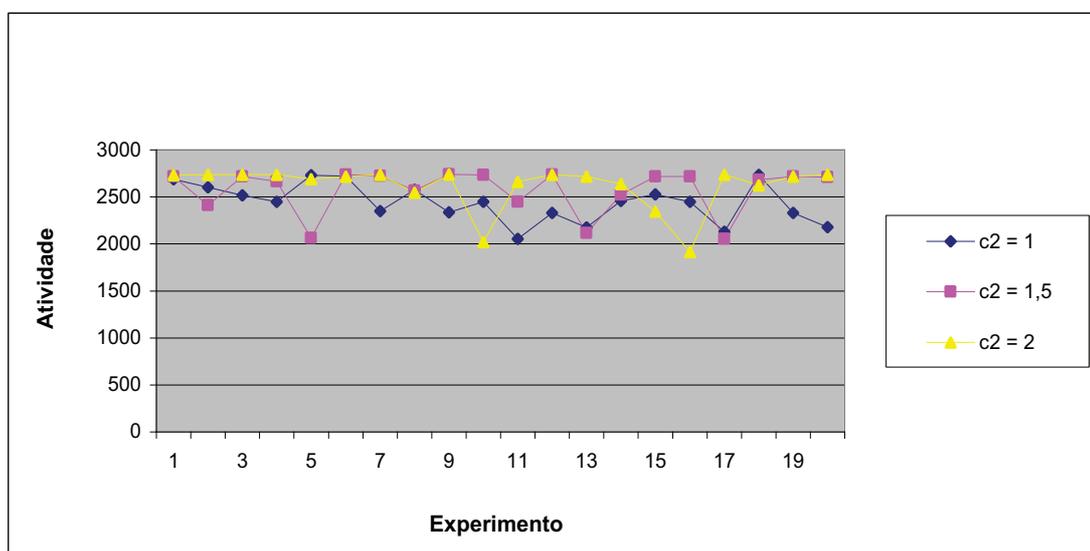


Figura 33 - Valor de atividade em 20 experimentos para  $c_2$  igual a 1,1,5 e 2

### 8.8.3 Análise dos parâmetros de confiança $c_1$ e $c_2$

Neste experimento, combinou-se a variação dos valores dos parâmetros de confiança  $c_1$  e  $c_2$  de três maneiras distintas: na primeira configuração, estas constantes receberam os valores de  $c_1 = 1$  e  $c_2 = 1$ ; na segunda,  $c_1 = 1,5$  e  $c_2 = 2$ ; e na terceira,  $c_1 = 2$  e  $c_2 = 2$ .

Na Figura 34, com os valores  $c_1$  e  $c_2$  igual a 1, em 4 dos experimentos a atividade ficou acima de 2700KgPE, e a média de atividade obtida foi de 2481KgPE. Com os valores de  $c_1$  e  $c_2$  igual a 1,5 em 10 dos experimentos a atividade ficou acima de 2700KgPE e a média de atividade foi de 2618KgPE. Com  $c_1$  e  $c_2$  igual a 2, em 18 dos experimentos realizados a atividade ficou acima de 2700KgPE e a média de atividade obtida foi de 2695KgPE. Com estes valores para os parâmetros analisados, o melhor nível de atividade foi alcançado com  $c_1$  e  $c_2$  igual a 2.

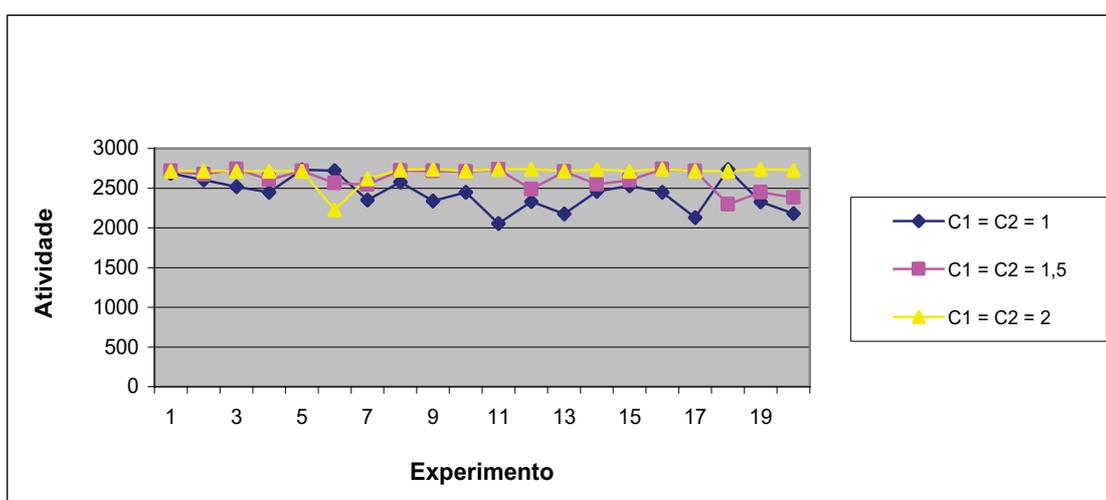


Figura 34 - Valor de atividade em 20 experimentos por combinação de valores de  $c_1$  e  $c_2$ .

## 8.9 ANÁLISE DOS MELHORES PARÂMETROS IDENTIFICADOS

Na Figura 35, estão indicados os resultados referentes à aplicação dos valores dos parâmetros que apresentaram melhor nível de atividade, segundo a análise feita em cada um dos experimentos. O conjunto de parâmetros utilizado foi:

- - Iterações: 100

- - Partículas: 500
- -  $c_1$ : 2,0
- -  $c_2$ : 2,0
- -  $\theta$  Inicial: 1,2
- -  $\theta$  Final: 0,4
- - Peso Molecular: 7,5

Pode ser verificado, na Figura 35, que em 17 dos 20 experimentos realizados a atividade ficou acima dos 2700KgPE, e que, neles, a média de atividade foi de 2701KgPE. O melhor valor de atividade foi 2738KgPE, obtido no experimento n°. 20.

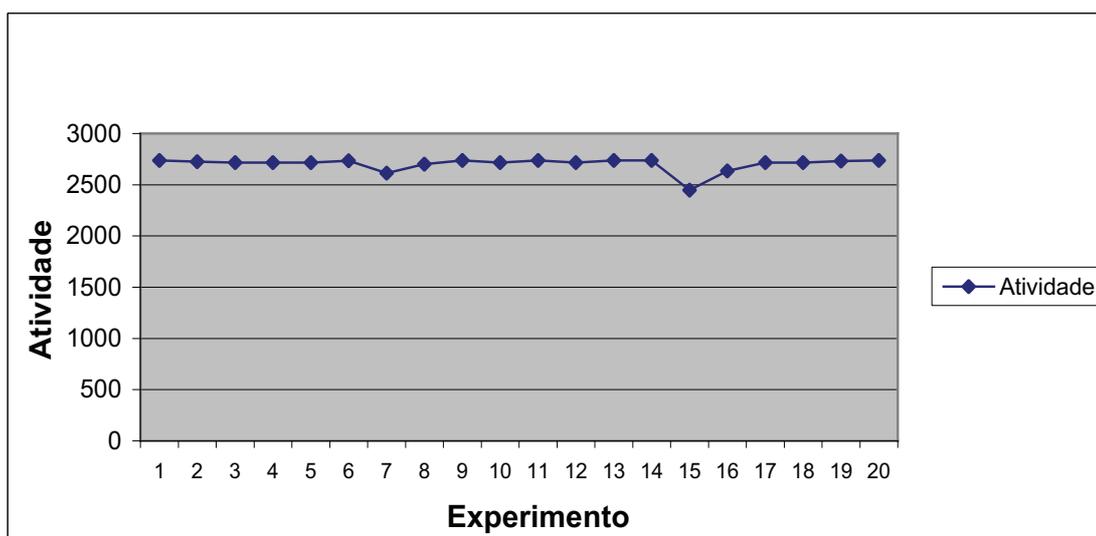


Figura 35 - Valor de atividade obtido pelo método em 20 execuções

## 10 CONCLUSÕES

O método proposto para simular as condições da reação de polimerização, de forma a obter os polímeros com as características desejadas, merece ter seu estudo aprofundado, pois conseguiu obter soluções adequadas, possui flexibilidade e exige pequeno esforço matemático.

A simulação de processos de polimerização utilizando redes neurais com o algoritmo do enxame de partículas como função-objetivo, mostrou, através dos resultados apresentados, que pode contribuir para o aperfeiçoamento das propriedades do material polimérico.

Através da rede neural e o do algoritmo enxame de partículas conseguiu-se desenvolver um modelo de simulador capaz de permitir a simulação de diversos experimentos, buscando as melhores condições reacionais e maior nível de atividade.

Mesmo não tendo sido estudado especificamente as relações tempo e custo de desenvolvimento de um polímero, a capacidade de simular adquirida com o simulador desenvolvido, permitiu considerar que tanto o tempo como os custos para desenvolvimento de um polímero com determinada característica tendem a uma redução.

O estudo identificou claramente os melhores parâmetros para a aplicação do método e apresentou uma análise dos parâmetros utilizados na rede neural e no algoritmo do enxame de partículas, conforme evidenciou-se no capítulo 9.

Permitiu identificar situações e condições que possui melhor ou pior desempenho o que permite identificar a situações com melhor aplicabilidade do método desenvolvido.

O método proposto pode ser considerado adequado, pois os resultados dos experimentos foram idênticos ou muito similares aos resultados obtidos em laboratório.

Esta semelhança entre resultados confere, ao método escolhido, confiabilidade para a exploração de novos experimentos com foco na simulação bem

como determinar as condições reacionais ideais para atingir um maior nível de atividade, para um determinado peso molecular.

## REFERÊNCIAS

ALECRIM, E. Redes neurais. Disponível em: <<http://www.infowester.com/redesneurais.php>>. Acesso em: 12 dez. 2005.

ALEMÁN, Carlos; MUÑOZ-GUERRA, Sebastián. Aplicaciones de los métodos computacionales al estudio de la estructura y propiedades de polímeros. Polímeros, São Carlos, v. 13, n. 4, p. 250-264, Oct./Dec. 2003.

AZEVEDO, Fernando Mendes de; BRASIL, Lourdes Mattos; OLIVEIRA, Roberto Celio Limão de. Redes neurais: com aplicações em controle e em sistemas especialistas. Florianópolis: Visual Books, 2000

BILLMEYER JR., Fred W. **Ciência de los polímeros**. Barcelona: Reverte, 1975.

BISCAIA JR., E. C.; SCHWAAB, M.; PINTO, J. C. Um novo enfoque do método do enxame de partículas. Disponível em: <[http://www.ica.ele.puc-rio.br/nanobio2004/trabalhos/biscaia\\_nanobio2004.pdf](http://www.ica.ele.puc-rio.br/nanobio2004/trabalhos/biscaia_nanobio2004.pdf)>. Acesso em: 20 nov. 2005.

**BRAGA, Antônio de P.; CARVALHO, André P. de L.; LUDERMIR, Teresa B. Fundamentos de redes neurais artificiais. Rio de Janeiro: DCC/IM, COOPE/Sistemas, NCE/UFRJ, 1999.**

CAETANO D.; MARZAGÃO, D. S. L. Redes neurais artificiais. Disponível em: <<http://www.caetano.eng.br/pef411/intro1.htm>>. Acesso em: 10 nov. 2005.

CANEVAROLO JR., S. V. **Ciência dos polímeros**: um texto básico para tecnólogos e engenheiros. São Paulo: Artliber, 2002.

CARVALHO, A. P. de L. Redes neurais artificiais: um tutorial introdutório sobre Redes Neurais Artificiais, em especial sobre as Redes Multi-Layer Perceptron treinadas com BackPropagation. Disponível em: <<http://www.icmsc.sc.usp.br/~andre/neural1.html>>. Acesso em: 5 nov. 2005.

CÚNEO, R. G. Bula de química. Disponível em: <<http://www.algosobre.com.br/ler.asp?conteudo=339&Titulo=Pol%C3%ADmeros>>. Acesso em: 10 jan. 2006.

Dennis Ritchie, Brian Kernighan. **C - A Linguagem de Programação** - Ed. Campus, 1986.

FERNANDES, Fabiano A. N.; LONA, Liliâne M. F. Development of polymer resins using neural networks. *Polímeros*, São Carlos, v. 12, n. 3, p. 164-170, 2002.

FROZA, R. Apostila Inteligência Artificial e Redes Neurais. Universidade de Santa Cruz do Sul, Departamento de Informática, Santa Cruz do sul, 2004.

KARRER, D. et al. Redes neurais arti\_ciais: conceitos e aplicações. In: PROFUNDAO - ENCONTRO DE ENGENHARIA DE PRODUCAO DA UFRJ, 9., 2005, Rio de Janeiro. Anais... Rio de Janeiro: UFRJ, 2005. 1 CD-ROM.

KENNEDY, J. ; EBERHART, R. Particle swarm optimization. Disponível em: <<http://www.engr.iupui.edu/~shi/Coference/psopap4.html>>. Acesso em: 7 dez. 2005.

KENNEDY, J.; EBERHART, R. Swarm intelligence. San Francisco: Morgan Kaufmann, 2001.

LENZI, M. K. ; LIMA, Enrique Luis ; PINTO, José Carlos . Modelagem da polimerização simultânea de estireno em suspensão e emulsão. *Polímeros*, São Carlos/SP, v. XIV, p. 112-121, 2004.

MANO, E. B. Introdução a polímeros. Editora Edgard Blücher Ltda., São Paulo, 1985.

MATTHEWS, James. Back-propagation for the uninitiated. Disponível em: <<http://www.generation5.org/bp.shtml>>. Acesso em: 12 jan. 2006.

MATTOS, A. C. M. Redes neurais artificiais: o que são - para que servem - como são usadas. Disponível em: <<http://dm.usway.com.br/acm/Redes/~RN-INDEX.htm>>. Acesso em: 11 nov. 2005.

McCOLLUM, Pete. **An introduction to back-propagation neural networks**. Disponível em: <<http://www.seattlerobotics.org/encoder/nov98/neural.html>>. Acesso em: 10 nov. 2005.

McCULLOCH, W. S.; PITTS, W. **A logical calculus of the ideas immanent in nervus activity**. *Bulletin of Mathematical Biophysics*, New York, v. 5, p. 115-133, 1943.

ROISENBERG, M. Curso de redes neurais. Disponível em: <<http://www.inf.ufsc.br/~mauro/ine6103/slide/cursoredesneurais>>. Acesso em: 22 nov. 2005.

ROSA, Simone P. S. Estudo sobre a viabilidade e predição de efeitos difusivos em reações de polimerização através de modelos determinísticos e redes neurais. Campinas: [s.n.], 2001.

ROSENBLATT, Frank. Principles of neurodynamics: perceptrons and the theory of brain mechanisms. Rochelle Park: Spartan Books, 1962.

**RUMELHART, D. E., HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning internal representations by error propagation. In: RUMELHART, D. E.; MCCLELLAND, J. L. (Eds.). The PDP research group, parallel distributed processing. Cambridge: MIT Press, 1986. Cap. 8. v. 1.**

**RUMELHART, D. E.; HINTON, G. E.; WILLIAMS, R. J. Learning representations of back-propagation error. Nature, France, v. 323, p. 533-536, 1986.**

RUMELHART, D. E.; WIDROW, B.; LEHR, M. A. The basic ideas in neural networks. Communications of ACM, New York, v. 37, n. 3, p. 87-92, Mar. 1994.

RUMELHART, D.; MCCLELLAND, J. The PDP research group, parallel distributed processing. Cambridge: MIT Press, 1986. v. 1.

RUSSEL, S.; NORVIG, P. Inteligência artificial. St. Louis: Elsevier, 2004.

SCHREIBER, Jaques. Apostila Redes neurais princípios e arquiteturas. Universidade de Santa Cruz do Sul, Departamento de Informática, Santa Cruz do Sul, 2004.

SILVA, A. E. A. - *Busca Heurística* - Disponível em: [http://www.unimep.br/~aeasilva/topico10\\_iai.pdf](http://www.unimep.br/~aeasilva/topico10_iai.pdf). Acessado em 20 jan 2005.

SHI, Y. and EBERHART, R. C. Parameter selection in particle swarm optimization. Evolutionary Programming VII: Proceedings of the Seventh Annual Conference on Evolutionary Programming, New York. pp. 591-600, 1998.

**TABIANA, C. Y.; KAETSU, D. Y.** Redes neurais. Disponível em: <http://www.din.uem.br/~ia/neurais,2005http>>. Acesso em: 20 nov. 2005.

TOLOSA, T. A. G. de. Introdução às redes neurais artificiais. Disponível em: <http://www.mauajr.com/alunos/listas/Neurais.doc>>. Acesso em: 10 dez. 2005.

WIDROW, B.; RUMELHART, D. E.; LEHR, M. A. Neural networks: applications in industry, business and science. Communications of ACM, New York, v. 37, n. 3, p. 93-105, Mar. 1994.

ZUBEN, F. J. Von. Learning and nonlinear models. Sociedade Brasileira de Redes Neurais, Rio de Janeiro, v. 1, n. 2, p. 1-4, 2003