

MAURO REIS NASCIMENTO

**REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE
ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-FORMAS
DE EMBALAGENS PLÁSTICAS**

**MANAUS – AM
2021**

MAURO REIS NASCIMENTO

**REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE
ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-FORMAS
DE EMBALAGENS PLÁSTICAS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental - PPG.EGPSA, do Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia- ITEGAM, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

Orientador: Dr. David Barbosa de Alencar

**MANAUS - AM
2021**

MAURO REIS NASCIMENTO

**REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE
ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-
FORMAS DE EMBALAGENS PLÁSTICAS**

Esta dissertação foi julgada e aprovada para a obtenção do título de Mestre do Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental do Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia – ITEGAM.

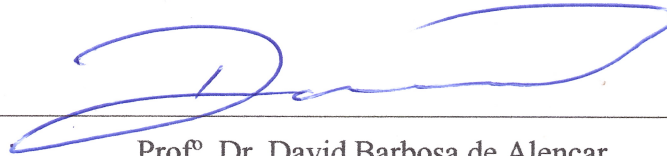
Manaus-AM, 29 de setembro de 2021.



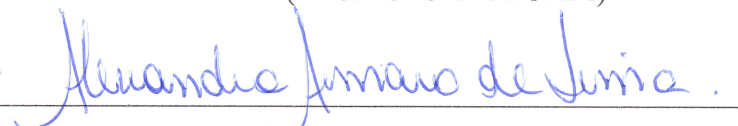
Prof. Dr. Jandecy Cabral Leite

Coordenador do PPG.EGPSA - ITEGAM

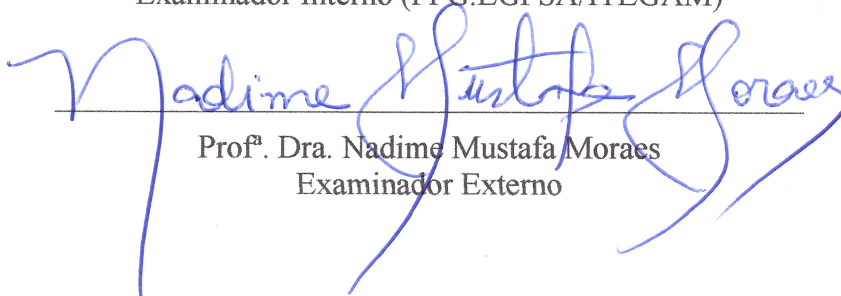
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. David Barbosa de Alencar
Orientador (PPG.EGPSA/ITEGAM)



Prof. Dra. Alexandra Amaro de Lima
Examinador Interno (PPG.EGPSA/ITEGAM)



Prof. Dra. Nadime Mustafa Moraes
Examinador Externo

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Biblioteca do ITEGAM**

Nascimento, Mauro Reis, 2021 - REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-FORMAS DE EMBALAGENS PLÁSTICAS / Mauro Reis Nascimento - 2021. 70 f., il: Colorido

Orientador: Dr. David Barbosa de Alencar

Dissertação: Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia, Programa de Pós Graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental (PPG-EGPSA), Manaus - AM, 2021.

1. Temperatura de Secagem 2. Redes Neurais Artificiais 3. Inteligência Computacional 4. PET 5. Acetaldeído

CDD - 1001.ed.2021.4

AGRADECIMENTOS

Primeiramente a **DEUS**, por ter me concedido esta dádiva divina que é a vida e da mesma forma permitiu manter-me vivo para o enfrentamento e combate dessa “Pandemia do COVID-19”, que ceifou a vida de alguns de meus familiares, amigos e colegas de trabalho, assim como no Brasil 568 mil e no Mundo 4,35 milhões (14/08/2021), vidas perdidas.

A minha majestosa mãe **Lucinda Forasteiro Reis**, a qual teve um papel supra importante em orientar-me para essa jornada, mostrando entre diversos conselhos que “O homem é fruto de suas escolhas (Jean-Paul Sartre)”, o sucesso profissional será sempre alcançado através da qualificação técnica.

Ao meu saudoso irmão **Sebastião Reis Costa**, obrigado mano pelos mais diversos tipos de entretenimento e lazer no qual vivemos (dominó, sinuca, baralho, vídeo game, tênis de mesa, futebol, pescaria, piadas e etc.). Um dia a gente vai se encontrar e começar tudo de novo!

Ao meu filho **Hamilton de Almeida Nascimento** (Mestrando em Matemática/UFAM), por estar sempre presente nos momentos difíceis.

Aos meus maravilhosos **pais, irmãos, filhos, sobrinhos, cunhados** que a cada instante me proporcionaram momentos familiares únicos e inesquecíveis de realizações pessoais e profissionais. Mais que também mostraram exemplos: de união, afeto e força para lutar e seguir adiante em todas as dificuldades e/ou perdas a qual tivemos neste percurso.

Em especial ao agora meu único e inseparável irmão e também grande parceiro de longos anos de estudos (Pré-alfabetização, Alfabetização, Aula de Reforço, Ensino Fundamental, Ensino Médio, Graduação, Mestrado, Cursos de Inglês e Informática), **Prof. Dr. Manoel Henrique Reis Nascimento**, que me apoiou e incentivou diuturnamente a ingressar neste Programa de Especialização Stricto Sensu. A quem também tive a oportunidade de conviver uma grande parte da minha vida pessoal na: Infância, Adolescência e Fase Adulta. Tenho plena certeza! Certeza absoluta! Que você é um dos meus “Anjos Guardiães”.

A todos os **Profissionais da Área da Saúde**, que foram guardiães e escudos de proteção de nossas sagradas famílias na luta contra a pandemia da COVID-19.

Ao meu Orientador: **Prof. Dr. David Barbosa de Alencar**, que conduziu as orientações com maestria e placidez.

Ao **Corpo Docente e Técnico** do Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia/ITEGAM, pelos conhecimentos adquiridos no decorrer do curso.

A todos os **Membros Professores Doutores**, que compõem essa Banca Examinadora, na qual tenho a honra e o privilégio de ser avaliado e por fazerem parte dessa história que está apenas começando.

Epígrafe

“Seja um parâmetro de qualidade. Algumas pessoas não estão acostumadas a um ambiente onde a excelência é esperada”.

Steve Jobs

Dedicatória

Dedico este trabalho a todos aqueles que acreditaram e contribuíram direta ou indiretamente para a realização desta obra.

RESUMO

NASCIMENTO, Mauro Reis. **REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-FORMAS DE EMBALAGENS PLÁSTICAS**. 2021. p. 70. Dissertação do programa de pós-graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental (EGPSA), Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia (ITEGAM), Manaus, 2021.

A produção industrial de pré-formas destinadas a fabricação de garrafas PET's, durante o processo de injeção plástica, torna-se indispensável a regulagem da temperatura do Silo de secagem da resina PET, para controle da geração de Acetaldeído (ACH), que em altas concentrações, altera o sabor das bebidas gaseificadas ou não gaseificadas, dando um sabor cítrico a bebida e colocando em dúvida a qualidade dos produtos embalados. Neste trabalho é simulado diversas configurações de Redes Neurais Artificiais (RNA's) para o tipo *Feedforward* na especificação de um modelo de RNA para predição da formação de Acetaldeído a partir da avaliação dos parâmetros do processo de fabricação da pré-forma de embalagens PET, gerando informações para apoio a tomada de decisão no controle da temperatura ideal do Silo na secagem da resina PET, permitindo aos especialistas tomarem as decisões de regulagem necessárias para a diminuição dos níveis de ACH. Os materiais e os métodos foram aplicados mediante as características do fabricante sobre a umidade no grão da resina de PET que pode conter entre 50 ppm e 100 ppm de ACH e para a análise dos métodos foram coletados os dados, conforme as temperaturas e os tempos de residência usados no processo de injeção por sopro na fabricação da pré-forma da garrafa, a geração de ACH da garrafa PET após etapa de pós-condensação sólida atingiram níveis de ACH residual menores que (3-4) ppm, conforme a especificação desejada, podendo chegar a níveis menores que 1 ppm. Os resultados encontrados por meio das simulações de técnicas de Inteligência Computacional (IC) aplicada pelas RNA's, onde estas possibilitaram a predição dos níveis de ACH gerados no processo de injeção plástica da pré-forma de embalagens de garrafas, permitindo um gerenciamento eficaz dos parâmetros de produção, auxiliando na tomada de decisão estratégica no que se refere à utilização do controle da temperatura durante o processo de secagem da resina PET.

Palavras-Chaves: Temperatura de Secagem, Redes Neurais Artificiais, Inteligência Computacional, PET, Acetaldeído.

ABSTRACT

NASCIMENTO, Mauro Reis. **REDES NEURAIAS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DA GERAÇÃO DE ACETALDEÍDO NA RESINA PET NO PROCESSO DE INJEÇÃO DE PRÉ-FORMAS DE EMBALAGENS PLÁSTICAS**. 2021. p. 70. Dissertação do programa de pós-graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental (EGPSA), Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia (ITEGAM), Manaus, 2021.

The industrial production of preforms for the manufacture of PET bottles, during the plastic injection process, is essential to regulate the temperature of the PET resin drying Silo, to control the generation of Acetaldehyde (ACH), which in high concentrations alters the flavor of carbonated or non-carbonated beverages, giving a citrus flavor to the beverage and casting doubt on the quality of packaged products. In this work, several configurations of Artificial Neural Networks (ANN's) for the Feedforward type are simulated in the specification of an ANN model to predict the formation of Acetaldehyde from the evaluation of the parameters of the PET packaging preform manufacturing process, generating information to support decision-making on optimal silo temperature control in PET resin drying, enabling specialists to make the necessary regulation decisions to lower ACH levels. The materials and methods were applied according to the manufacturer's characteristics on the moisture in the grain of the PET resin, which may contain between 50 ppm and 100 ppm of ACH, and for the analysis of the methods, data were collected, according to the temperatures and times of residence used in the blow injection process in the manufacture of the bottle preform, the generation of ACH from the PET bottle after the solid post-condensation step reached residual ACH levels lower than (3-4) ppm, as per the desired specification, reaching levels below 1 ppm. The results were found through simulations of Computational Intelligence (CI) techniques applied by ANNs, where they enabled the prediction of ACH levels generated in the plastic injection process of the preform of bottle packaging, allowing an effective management of the production parameters, helping in strategic decision making regarding the use of temperature control during the drying process of PET resin.

Keywords: Drying Temperature, Artificial Neural Networks, Computational Intelligence, PET, Acetaldehyde.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Canhão Plastificador simples de Máquinas Injetoras	24
Figura 2.2 - Canhão Plastificador duplo de Máquinas Injetoras	24
Figura 2.3 - Reação de Degradação Hidrolítica (hidrólise) das Resinas PET	25
Figura 2.4 - Fórmula Estrutural do Acetaldeído.....	25
Figura 2.5 - Polimerização do PET: Reação de obtenção do Monômero (BHET)	28
Figura 2.6 - Polimerização do BHET para obtenção da Resina PET.....	28
Figura 2.7 - A Arquitetura de um Perceptron Típico	31
Figura 2.8 - Perceptron Multicamadas Típico	32
Figura 2.9 - Modelo de Rede de Retropropagação.....	33
Figura 2.10 - Aprendizado Supervisionado.....	35
Figura 2.11 - Aprendizado não-supervisionado	37
Figura 2.12 - Aprendizado por Reforço	38
Figura 2.13 - Função de Transferência Logsig.....	39
Figura 2.14 - Função de Transferência Tansig.....	39
Figura 2.15 - Função de Transferência linear Purelin	40
Figura 3.1 - Fluxograma de Resumo dos Procedimento Metodológicos	46
Figura 4.1 - RNA Especificada para o Problema	50
Figura 4.2 - Gráfico do MSE.....	52
Figura 4.3 - Gráfico do RMSE	53
Figura 4.4 - Gráfico do MAE	54
Figura 4.5 - Gráfico do NRMSE	55
Figura 4.6 - Gráfico do MAPE.....	56
Figura 4.7 - Gráfico do Erro Residual	57
Figura 4.8 - Teste de Regressão do Treinamento da Rede	58
Figura 4.9 - Teste de Regressão da Validação da Rede	58
Figura 4.10 - Regressão do Teste da Rede	59
Figura 4.11 - Regressão dos Aspectos em Conjunto da Rede.....	59
Figura 4.12 - Melhor Valor de Validação da Performance	60

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Funções de Treinamento da RNA	42
Tabela 3.2 - Funções de Transferência da RNA.....	42
Tabela 4.1 - Valores Numéricos das Variáveis da RNA	48
Tabela 4.2 - Análise Descritiva das Variáveis Numéricas da RNA	49
Tabela 4.3 - Valores de Saída (output) das simulações executadas das RNA's.....	50
Tabela 4.4 - Valores do MSE das simulações das RNA's.....	51
Tabela 4.5 - Valores do RMSE das simulações das RNA's.....	52
Tabela 4.6 - Valores do MAE das simulações das RNA's.....	53
Tabela 4.7 - Valores do NRMSE das simulações das RNA's	54
Tabela 4.8 - Valores do MAPE das simulações das RNA's.....	55
Tabela 4.9 - Valores do Erro Residual das simulações das RNA's.....	56

LISTA DE EQUAÇÕES

Equação 2.1 - Modelo Matemático de Transmissão entre Camadas da RNA.....	34
Equação 2.2 - Exemplo de Função de Transferência Sigmoidal.....	34
Equação 2.3 - Modelo de Transmissão para n Neurônios com K camadas.....	34
Equação 2.4 - Modelo Matemático RLN da Função de Ativação.....	38
Equação 2.5 - Modelo Matemático da Função Logística Sigmoidal (logsig)	39
Equação 2.6 - Modelo Matemático da Função Tangente Hiperbólica (tansig).....	40
Equação 2.7 - Modelo Matemático da Função Linear (purelin)	40
Equação 3.1 - Coeficiente de Correlação de Pearson.....	43
Equação 3.2 - Erro Quadrático Médio (MSE).....	43
Equação 3.3 - Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio (RMSE)	44
Equação 3.4 - Erro Médio Absoluto (MAE)	44
Equação 3.5 - Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio Normalizado (NRMSE)	45
Equação 3.6 - Erro Percentual Médio Absoluto (MAPE)	45
Equação 3.7 - Dispersão dos Erros (resíduos).....	46

LISTA DE SIGLAS

ACH	Acetaldeído
ANN	<i>Artificial Neural Networks</i>
BHET	Bis-2-hidroxietil-tereftalato
CO₂	Dióxido de Carbono ou Gás Carbônico
CSD	<i>Carbonated soft drinks</i>
DMT	Dimetil tereftalato
IA	Inteligência Artificial
IC	Inteligência Computacional
ISBM	<i>Injection Stretch Blow Molding</i>
MAE	<i>Mean Absolute Error</i>
MAPE	<i>Mean Absolute Percentage Error</i>
MATLAB	<i>Matrix Laboratory</i>
MEG	Monoetileno glicol
MLP	<i>Multilayer perceptron</i>
MSE	<i>Mean Square Error</i>
N₂	Representação tridimensional de uma molécula de nitrogênio
NNTool	<i>Neural Network Toolbox</i>
NRMSE	<i>Normalized Root Mean Square Error</i>
°C	grau Celsius
P.O	Ponto de Orvalho
p/p	Por parte
PET	Tereftalato de Polietileno
PIM	Pólo Industrial de Manaus
ppm	Partes por milhão
PTA	Ácido Tereftálico Purificado
Qt.Rs.	Quantidade de Resina
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i>
RNA	Rede Neural Artificial
T.R	Tempo de Resistência
T.S.	Temperatura no Silo
Ta.Gr.	Tamanho do Grão

Te.Gr.	Temperatura do Grão
TIMELINE	Linha do Tempo
Toobox	Interface gráfico
U.I	Umidade Inicial

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1	17
1 INTRODUÇÃO	17
1.1 JUSTIFICATIVA DA DISSERTAÇÃO	20
1.2 OBJETIVOS	21
1.2.1 Geral	21
1.2.2 Específicos	21
1.3 ESCOPO DO TRABALHO.....	21
CAPÍTULO 2	22
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1 A MODELAGEM POR INJEÇÃO	22
2.2 PRODUÇÃO DE EMBALAGENS DE PET	23
2.3 MÁQUINAS DE MOLDAGENS	23
2.4 ACETALDEÍDO	25
2.4.1 Geração do Acetaldeído na Fabricação da Resina	26
2.4.2 Geração do Acetaldeído no Processo de Moldagem	26
2.5 REDE NEURAL ARTIFICIAL.....	30
2.5.1 Perceptron	30
2.5.2 Multilayer Perceptron (Feedforward)	31
2.5.3 Back Propagation Structure for Network	32
2.5.4 Métodos de Aprendizado das RNA's	35
2.5.5 Funções de Transferências (Ativação) das RNA's	38
CAPÍTULO 3	41
3 MATERIAIS E MÉTODOS	41
3.1 MATERIAIS	41
3.2 MEDOTOLOGIA APLICADA COM RNA	42
3.2.1 Simulação da RNA	42

3.2.2	Treinamento da RNA	42
3.2.3	Avaliação das Estimativas Geradas pelas RNA's.....	43
CAPÍTULO 4.....		47
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES	47
CAPÍTULO 5.....		61
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	61
5.1	CONCLUSÕES	61
5.2	SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	61
REFERÊNCIAS		62

CAPÍTULO 1

1 INTRODUÇÃO

O aumento populacional e os avanços tecnológicos, vêm proporcionando uma melhoria na qualidade de vida e na comodidade para a população. Possibilitando pesquisas e desenvolvimento de novas tecnologias e matérias-primas para a geração de novos produtos.

O Tereftalato de polietileno (comumente abreviado como PET, PETE ou pela identificação de resina) (código de reciclagem #1) é um dos polímeros termoplásticos mais difusos disponíveis no mercado (NISTICÒ, 2020).

As vantagens do PET em relação ao vidro são diversas, como por exemplo: o peso e a praticidade, tem tornado a utilização de PETs em produtos cada vez maior. Uma garrafa PET, por exemplo, é bem mais leve e resistente que uma de vidro, isso a torna um recipiente atraente, fácil de transportar e seguro.

Neste contexto, processos que aumentam a eficiência da manufatura de produtos plásticos têm apresentado um aumento considerável (PIRA, 2017).

O PET, poliéster termoplástico, é amplamente utilizado em aplicações industriais como embalagens, garrafas de bebidas, ferramentas elétricas, artigos esportivos e fibras têxteis. Tem boa propriedade mecânica, física, e de barreira química e a gás (AKSHAYA *et al.*, 2020). Apresenta vantagens e propriedades, tais como: Custo Barato, Embalagens Leves, Elevada Resistência Mecânica e Química, Versatilidade em formatos e cores, Altas Barreiras a Gases, excelente transparência e brilho (ÖZLEM, 2008).

O PET é quimicamente classificado como um polímero de poliéster termoplástico com estrutura parcialmente alifática e aromática, semicristalina, e é um dos mais importantes dos poliésteres (GALO *et al.*, 2019). Termoplástico ideal para muitas aplicações, principalmente no segmento de embalagens, e em especial em garrafas para bebidas carbonadas.

A escolha do material de embalagem é fundamental para preservar as características dos alimentos: em particular, a adoção de tereftalato de polietileno para bebidas ajuda a buscar a qualidade e segurança dos alimentos devido a suas próprias características, como barreira a gases e aromas, transparência e fácil processamento (CARRIERI *et al.*, 2012).

O polímero é usado principalmente para a produção de garrafas / recipientes para bebidas, como água (ca. 26%), refrigerantes com gás (refrigerantes, cerca de 26%) ou outras bebidas / sucos (cerca de 18%), na forma de folhas / filmes (ca. 14%), na indústria de alimentos

(ca. 9%), bem como em usos não alimentares (por exemplo, cosméticos, ca. 6%) (NISTICÒ, 2020).

Antes de tudo, o PET é um polímero termoplástico, o que significa que pode ser facilmente processado novamente em alta temperatura. Além disso, o PET pode ser facilmente reciclado, pois quase toda a produção de garrafas A indústria de bebidas (isto é, água e refrigerantes) usa extensivamente esse polímero específico (como anteriormente discutido). Em particular, a indústria de reciclagem de PET é muito eficiente e o processamento de PET permite obter diferentes cenários (NISTICÒ, 2020).

Na produção mundial de recipientes plásticos e contêineres tem a maior aplicação (36%) entre as indústrias aplicações da produção mundial de plásticos (aproximadamente 400 milhões por ano), seguidos pelos materiais de construção (16%) e têxtil (14%). A produção global de plásticos deverá aumentar continuamente de 300 milhões de toneladas em 2015 a 1800 milhões de toneladas em 2050 (JANG *et al.*, 2020).

Em 2016 a produção de embalagens foi da ordem de 17,5 milhões de toneladas, atingindo um aumento de 4,8%. Esse crescimento se deu devido ao desenvolvimento de novos produtos para aplicação em diversas áreas da indústria de conservas, sucos e outras bebidas funcionais, previsão na queda nos preços da resina de PET irão estimular o mercado consumidor (PIRA, 2017).

Os recipientes plásticos para bebidas são principalmente formados pelo processo de Injeção por Estiramento por Sopro (Injection Stretch Blow Molding - ISBM). ISBM é a escolha comum por fabricantes de recipientes de plástico para a fabricação de embalagens de bebidas (LONTOS; GREGORIOU, 2019).

O material mais amplamente aceito para a fabricação de moldes plásticos é o PET (tereftalato de polietileno) devido à sua propriedade mecânica e de resistência. No processo de moldagem por sopro por injeção, o parison (ou pré-molde) é moldado por injeção em uma haste de aço. Então a pré-forma moldada é transferido para a próxima estação onde a aplicação do alongamento através de uma haste elástica e aplicação de uma pressão faz com que a pré-forma se expanda dentro do molde (LONTOS; GREGORIOU, 2019).

Durante o processo de moldagem por injeção, que consiste essencialmente no aquecimento e amolecimento dos grãos do material num cilindro aquecido e sua consequente injeção em alta pressão para o interior do molde, onde esfria e toma forma final (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

O processo de injeção completo para a obtenção de peças injetadas está dividido em cinco etapas: secagem (silo), alimentação, plastificação, injeção e extração das peças (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009) (KOSCHEVIC; BITTENCOURT, 2016).

O polietileno tereftalato é um material higroscópico, absorve água do meio ambiente, durante seu armazenamento (estocagem), é indispensável uma secagem rigorosa e controlada nas resinas de PET antes da sua transformação. Para obter níveis requeridos de secagem, são necessários periféricos como silo (armazenador), secadores com dessecantes, normalmente com peneiras moleculares onde o ar utilizado para secagem da resina é previamente desumidificado, os polímeros e o PET não fogem à regra, onde o intervalo de temperatura na secagem recomendada, devendo ser entre 4 (quatro) à 6 (seis) horas caso contrário, ocorre temperaturas excessivas podendo danificar a matéria-prima, a temperatura do ar seco usado para secagem deve estar entre 160 °C – 180 °C (medido na saída do secador) quando a temperatura do ar seco não deve exceder a 190 °C (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

Um problema que surgiu é a formação do Acetaldeído (ACH), durante a polimerização da resina de PET (ANJOS, 2007).

A elevada temperatura de tratamento térmico durante a síntese do PET resulta na formação de grupos finais carboxílicos e ésteres vinílicos. A combinação entre esses grupos gera como subproduto álcoois vinílicos, que podem existir na sua forma tautomérica, ou seja, como acetaldeído. O limite de detecção organoléptica para o acetaldeído é muito baixo, variando de 4 a 65 µg.kg (ROMÃO *et al.*, 2009).

A formação de Acetaldeído é agravada quando o polímero PET é exposto a altas temperaturas, normalmente usada durante o processo de injeção plástica. Quando o polímero é aquecido acima da temperatura de fusão, pode gerar níveis elevados de ACH que podem alterar o sabor da bebida gaseificada e não gaseificado (BACH *et al.*, 2012).

Controlando as etapas críticas do processo de injeção na produção das garrafas PET's é possível manter em níveis baixos a formação do acetaldeído.

Para se obter uma garrafa com baixo teor de ACH dentro das especificações exigidas pelo controle de qualidade, durante a transformação da resina PET são elas: baixa temperatura da resina fundida, baixa taxa de cisalhamento e baixo tempo de residência (ÖZLEM, 2008).

As técnicas de Inteligência Artificial (IA), aplicadas ao campo do processo de injeção de plástico visam auxiliar no processo de decisão de seleção de valores para os parâmetros do processo deduzidos de uma inspeção qualitativa de defeitos de injeção. O objetivo de tais

sistemas é otimizar as condições do processo para obter uma peça com a qualidade especificada (CHAVES *et al.*, 2018).

A IA em máquinas injetoras pode exercer importante contribuição na produção de peças plásticas de qualidade, devido à ação dos sensores que monitoram variações na temperatura dos grãos submetida a fatores que possam a vir a desqualificar os resultados obtidos na injeção (LABATI *et al.*, 2016).

Sistemas baseados em Inteligência Artificial (IA) estão sendo aplicados nas mais diversas áreas da indústria. A implementação de sistemas para operações no processo de moldagem por injeção sugere ótimas condições para o gerenciamento de parâmetros baseados em IA, que representam um ótimo nível de confiabilidade nas condições do processo. Neste trabalho tem-se como principal objetivo a especificação de uma Rede Neural Artificial (RNA) para controle e previsão da formação de Acetaldeído no processo de injeção plástica da pré-forma para produção de embalagens PET.

1.1 JUSTIFICATIVA DA DISSERTAÇÃO

Nas máquinas de envasamento de bebidas de embalagens plásticas (PET), é possível constatar um grau elevado de Acetaldeído, de acordo com os índices de tempo x temperatura no silo. Logo faz-se indispensável monitoração das variáveis supracitadas no processo de forma “*full time*”.

É possível elaborar um sistema de automação para o gerenciamento das variáveis em tempo real, a fim de reduzir ou mitigar os impactos negativos causados.

O lapso temporal (intervalo), existente pela ausência de monitoramento automatizado no controle de tais variantes no processo de envasamento de embalagens PET, é a razão que conduz a concepção de implantar um sistema automático para a gestão dessas informações a fim de subsidiar nas tomadas de decisões no processo produtivo.

A proposta finalística presente nesta pesquisa tem como foco disseminar conhecimentos teóricos e práticos para a comunidade científica (acadêmica), indústrias do segmento, bem como a sociedade em geral, nos seguintes aspectos a saber:

- Melhoria do processo;
- Redução do ACH;
- Aumento da competitividade e qualidade.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Geral

Desenvolver uma Rede Neural Artificial (RNA) para controle e previsão da formação de Acetaldeído no processo de injeção plástica da pré-forma para produção de embalagens PET.

1.2.2 Específicos

- Analisar o processo de produção por injeção de pré-formas de polímero PET;
- Especificar um modelo de RNA, para previsão de formação de ACH na fabricação de embalagens PET;
- Avaliar o modelo de RNA proposto;
- Gerar informações para o gerenciamento do processo de produção de pré-formas de embalagens PET.

1.3 ESCOPO DO TRABALHO

A metodologia aplicada no presente estudo foi disposta em 05 (cinco) capítulos, como seguem:

Capítulo 1 – Apresenta-se uma abordagem introdutória acerca das Redes Neurais Artificiais para Predição da Geração de Acetaldeído na Resina PET no processo de injeção de pré-formas de embalagens plásticas, tal como, contextualizações iniciais, identificação e justificativa da dissertação (problemática da pesquisa), o objetivo geral e específicos e o escopo do trabalho.

Capítulo 2 – Discorre-se sobre a revisão bibliográfica do supradito tema, considerando: a modelagem por injeção, a produção de embalagens de PET, as máquinas de moldagens, a geração de acetaldeído na fabricação da resina e no processo de moldagem, a rede neural artificial.

Capítulo 3 – Contempla-se os materiais e métodos aplicados com RNA (simulação, treinamento, avaliação das estimativas geradas), para a redução dos níveis de ACH no processo fabril de embalagens de bebidas em PET.

Capítulo 4 – Expõem-se os resultados e discussões obtidas.

Capítulo 5 – Apresenta-se as conclusões e concede sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 A MODELAGEM POR INJEÇÃO

Processos simultâneos de moldagem por injeção, também classificados como processos de injeção com mais de um componente, demonstram um grande potencial no acabamento de peças injetadas, justamente por permitirem que a aplicação do acabamento seja realizada durante o processo de injeção, bem como pela maior flexibilidade nas possíveis variações dos acabamentos que podem ser empregados (PEIXOTO *et al.*, 2011).

Esses processos tem sido amplamente utilizado em diversos segmentos da indústria, desde componentes simples, como brinquedos e potes, até estruturas complexas que serão submetidas a altos níveis de vibração e carga (PAGANIN; BARBOSA, 2020).

Moldagem por injeção é um dos métodos mais utilizados na fabricação de produtos poliméricos, devido à sua flexibilidade, alto grau de manufaturabilidade. Neste processo, o polímero derretido é injetado em uma cavidade de molde com uma desejada forma e, em seguida, resfriado sob alta pressão (XU *et al.*, 2015).

Nessa fase de resfriamento, quando a peça fica suficientemente rígida para ser extraída do molde, o cuidado é redobrado, devido essa fase afetar diretamente e principalmente a produtividade e a qualidade de moldagem. (X. CHENA, 2000).

O processo de moldagem por injeção plástica é um processo que pode ser controlado por parâmetros pré-definidos. O molde de injeção pode ser fabricado com cavidade única ou em n cavidades semelhantes ou dissimilares, as cavidades são interligadas através de canais de fluxo ou corredores que direcionam o fluxo do material plástico fundido para as cavidades.

O ciclo de moldagem por injeção plástica consiste em quatro fases: plastificação, injeção, embalagem e resfriamento. Portanto, vários parâmetros de processo, que incluem a temperatura de fusão, temperatura do molde, pressão de injeção, velocidade de injeção, tempo de injeção, pressão de embalagem, tempo de embalagem, temperatura de resfriamento e tempo de resfriamento, todos influenciam potencialmente a qualidade dos produtos plásticos moldados por injeção (SUN *et al.*, 2010).

As características de qualidade dos produtos moldados por injeção de plástico podem ser categorizadas de acordo com as propriedades dimensionais, propriedades de superfície e propriedades mecânicas. Configurações inadequadas dos parâmetros do processo podem causar muitos defeitos no produto, que são classificados como propriedades de superfície e

defeitos de propriedades mecânicas. Assim, as configurações adequadas das condições de produção podem encurtar o ciclo de produção e melhorar a qualidade dos produtos moldados por injeção de plástico (SUN *et al.*, 2010).

O ciclo de injeção da pré-forma é realizado da seguinte maneira: Fechamento do molde; Avanço da unidade de injeção; Injeção; Recalque; Recuo (canhão da máquina); Dosagem; Abertura do molde e extração da peça.

2.2 PRODUÇÃO DE EMBALAGENS DE PET

Para a fabricação de um polímero de peso molecular mais alto, resinas destinadas à produção de garrafas, os grãos amorfos são submetidos a uma etapa adicional de polimerização em estado sólido até atingir um grau de polimerização igual a 160 °C e peso molecular médio de 60.000. O peso molecular médio do polímero aumenta conforme o etilenoglicol é liberado e removido e os níveis de acetaldeído reduzidos para concentrações inferiores a 3 mg/kg (NASSER *et al.*, 2009).

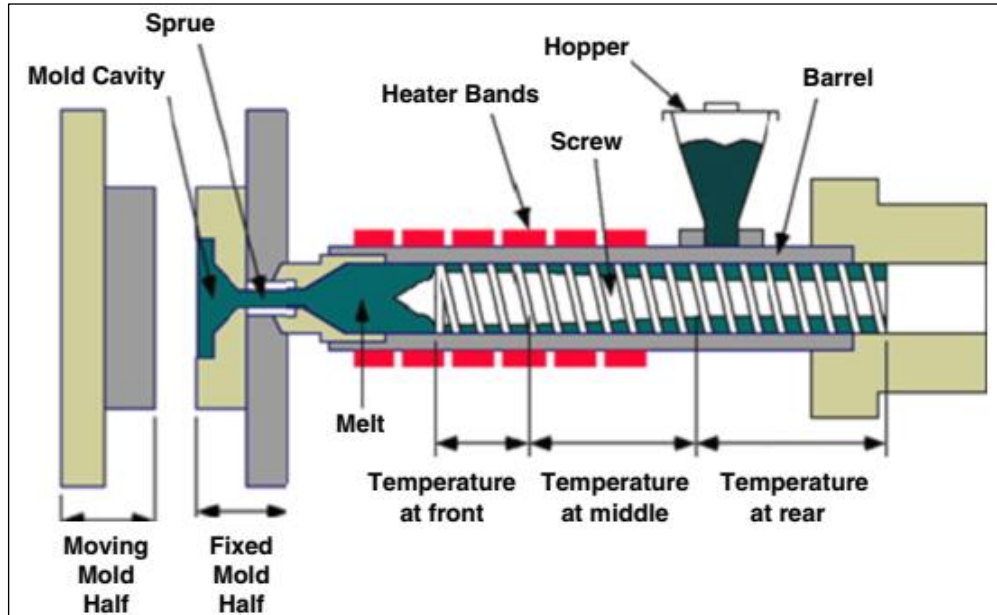
A resina está pronta para ser utilizada na produção de pré-formas, que posteriormente serão transformadas em garrafas PET. Para a injeção da pré-forma a resina é aquecida a temperaturas da ordem de 270 °C, injetada nas cavidades do molde e resfriada muito rapidamente de forma a manter a estrutura molecular predominantemente na forma amorfa, evitando assim, a recristalização. A pré-forma é aquecida entre 90-100 °C e em seguida soprada para a produção da garrafa (NASSER *et al.*, 2009).

2.3 MÁQUINAS DE MOLDAGENS

As máquinas de moldagem por injeção plástica atendem a diferentes especificações qualitativas para produzir peças específicas tais como ciclo seco, taxa de injeção e pressão de injeção (ROSATO, 2004). Os tipos de máquinas de moldagem por injeção podem ser caracterizados por seus três métodos mais comuns de operação que são: hidráulico, elétrico e híbrido.

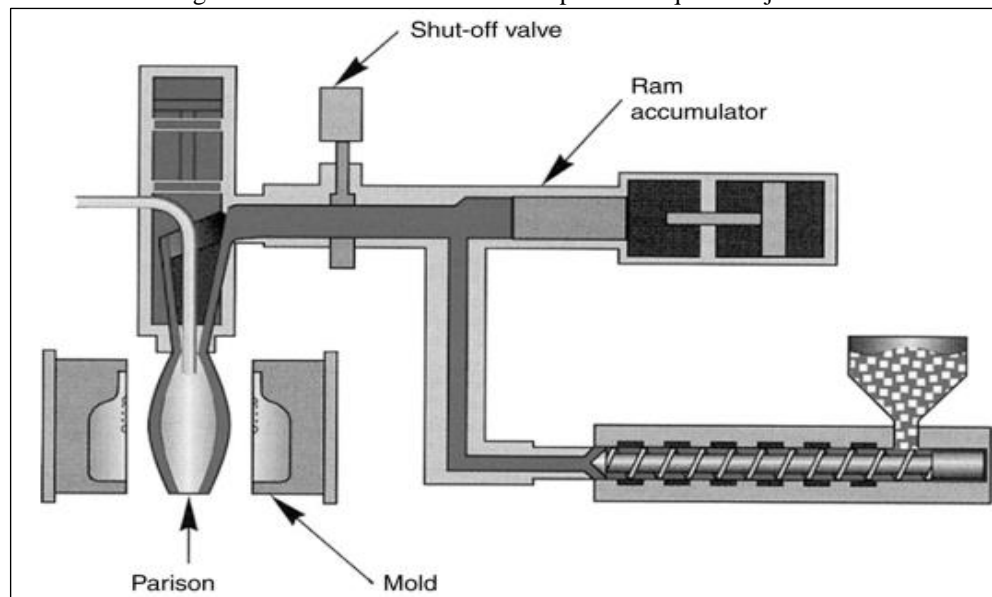
Observa-se dois sistemas de plastificação básicos, o primeiro é o sistema de moldagem de um estágio simples (Figura 2.1) e o segundo de dois estágios (Figura 2.2). Há também unidades de moldagem de três estágios, e etc. O estágio simples é conhecido como parafuso alternativo da máquina de moldagem por injeção. O estágio duplo é o piggyback, que pode parcialmente ser relacionado mais a uma extrusora contínua (ROSATO, 2004).

Figura 2.1 - Canhão Plastificador simples de Máquinas Injetoras.



Fonte: ELSHEIKHI e BENYOUNIS (2016).

Figura 2.2 - Canhão Plastificador duplo de Máquinas Injetoras.



Fonte: BELCHER (2017).

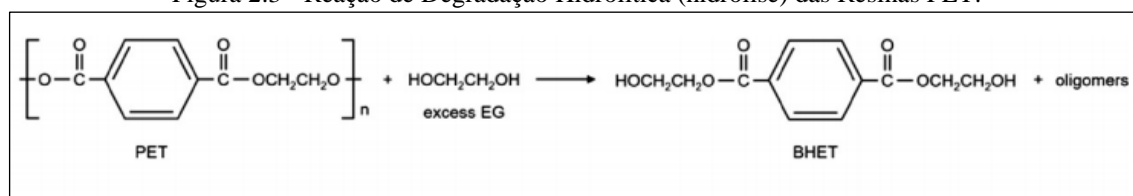
A secagem do polímero PET é um dos processos mais importante dessa etapa. No estado sólido o polímero PET por ser higroscópico, absorve umidade até o valor de equilíbrio com a umidade relativa do ambiente local e em ambientes de elevadas umidades relativas pode atingir até 0,6% por parte (p/p) em peso, se estiver exposto sem nenhuma proteção e por longo período às intempéries. Na prática se o polímero estiver estocado em locais fechados, devidamente embaladas e por curtos períodos de tempo, o valor da umidade é menor podendo ser inferior a 0,1% (p/p) do peso, antes do polímero entrar em fusão, devido a hidrolisação,

reduzindo o peso molecular e, conseqüentemente as propriedades físicas, químicas e físico-química (BACH *et al.*, 2012).

Submeter a resina à fusão com esses níveis de umidade, resultará em uma rápida degradação (hidrólise), reduzindo o seu peso molecular (Figura 2.3), o que é refletido na perda da viscosidade intrínseca e conseqüente perda de suas propriedades físicas. Para manter o máximo desempenho dos polímeros PET, deve-se reduzir o seu teor de umidade para níveis inferiores a 0,003% (30 ppm). (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

A secagem cuidadosa e controlada das resinas PET é uma operação essencial antes de sua transformação.

Figura 2.3 - Reação de Degradação Hidrolítica (hidrólise) das Resinas PET.



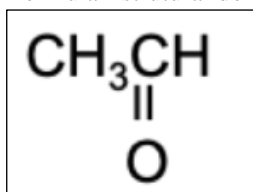
Fonte: HAN (2019).

2.4 ACETALDEÍDO

O acetaldeído (ACH) é um líquido claro que queima facilmente. Possui um odor forte e frutado que pode dificultar a respiração em altas concentrações. O acetaldeído também é conhecido como etanol e se forma naturalmente no corpo e nas plantas (SERINÇAY; FELLAH, 2020). Na indústria de alimentos, muitos compostos odoríferos são produzidos durante o processo de fermentação da levedura e em processos sem sistemas de controle, uma grande quantidade de compostos odoríferos é liberada na atmosfera. Na fermentação de alimentos, a maioria dos compostos orgânicos voláteis, como etanol e acetaldeído, são liberados e causam problemas de odor (SERINÇAY; FELLAH, 2020).

O ACH é miscível em água e em diversos solventes, sendo que em concentrações diluídas apresenta aroma de fruta cítrica. Os sinônimos mais comuns do Acetaldeído são o etanol, aldeído acético, acetilaldeído, etilaldeído, dietilacetal e 1,1 – dietioxiétano, cuja estrutura molecular é visualizada na Figura 2.4, (Ben Nijssen, 1996).

Figura 2.4 - Fórmula Estrutural do Acetaldeído.



Fonte: SERIO e GUDAS (2020).

2.4.1 Geração do Acetaldeído na Fabricação da Resina

Durante a síntese/processamento de PET em temperaturas acima do ponto de fusão (ca. 260 °C), é possível formar cisão de cadeia envolvendo extremidades terminais com a consequente liberação de acetaldeído indesejado (NISTICÒ, 2020).

O ACH é formado durante a fase de polimerização, na fabricação da resina PET. O grão amorfo obtido nesse ponto pode conter entre 50 ppm e 100 ppm de ACH, conforme as temperaturas e os tempos de residência usados no processo. A resina é pós-condensada em estado sólido, até atingir o peso molecular ideal para a fabricação de garrafas. Durante essa etapa, o ACH difunde-se para fora do grão juntamente com o glicol, sendo arrastados pelo Nitrogênio (N₂) do processo. Assim, o ACH do PET na garrafa que sai da etapa de pós-condensação sólida atinge níveis de ACH residual menores que (3 ou 4) ppm, de acordo com as especificações exigidas pelos fabricantes de bebidas, podendo chegar a níveis inferiores a 1 ppm (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

Em particular, a alta sensibilidade das ligações de ésteres de PET contra moléculas de água, bem como todos os seus possíveis produtos de degradação (um sobretudo a liberação de acetaldeído) ainda permanecem questões críticas que merecem atenção dos especialistas, especialmente considerando o alto uso deste polímero na indústria de embalagens para contato com alimentos (NISTICÒ, 2020).

2.4.2 Geração do Acetaldeído no Processo de Moldagem

No processo de moldagem da resina (PET) a temperatura de fusão é uma variável chave de controle da geração da formação do acetaldeído (ACH), é nesse processo que consiste essencialmente o amolecimento do material num cilindro aquecido (ROSATO, 2004).

É possível obter baixos níveis residuais de ACH, na produção da resina PET para embalagens, esse residual é gerado durante a fusão do polímero na fase de moldagem por injeção da pré-forma. Tornando-se importante o controle do processo de injeção na qual o polímero é exposto a elevadas temperaturas de fusão por tempo prolongado (EWENDER; FRANK, 2008).

Além do tempo prolongado na temperatura de fusão, deve ser considerados outros fatores relevantes e que são responsáveis pelos níveis de acetaldeído encontrados em embalagens de PET, como tipo e formulação da resina, tipo de equipamento, desenho do perfil da rosca do canhão da máquina injetora e condições de transformação (ANJOS, 2007).

A fabricação das garrafas PET obtidas pelo processo de injeção e sopro, possibilitam a obtenção das seguintes características, ideias para o segmento de refrigerantes carbonatados (Carbonated Soft Drinks - CSD). (NISTICÒ, 2020):

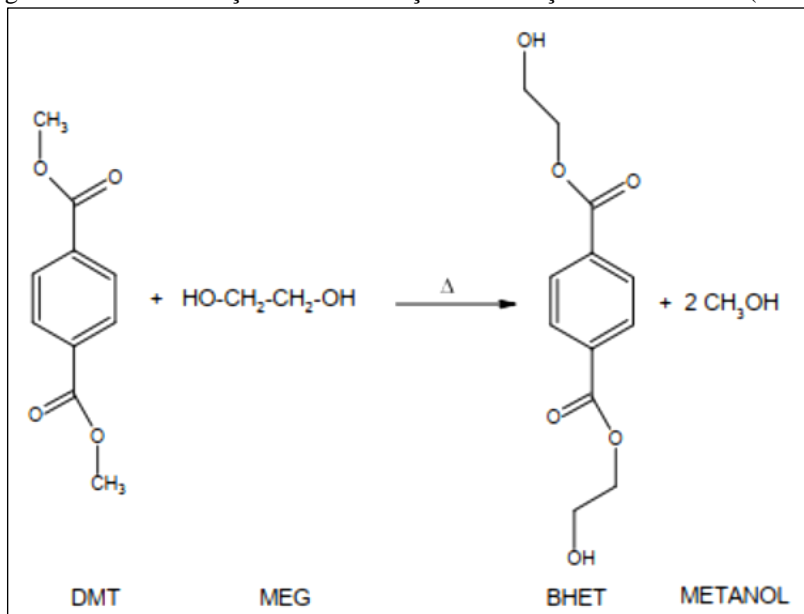
- PET é incolor e pode ser transparente (se amorfo) ou translúcido (se semicristalino). Esta é uma característica muito importante, pois permite que os consumidores vejam o conteúdo das garrafas.
- PET é leve. O peso de uma garrafa PET de 1L projetada para conter água é de ca. 25 g. Para efeito de comparação, uma garrafa de vinho de 750 ml feita em vidro tem ca. 360 g de peso e uma lata de alumínio de 500 ml normalmente usada para CSD tem ca. Peso de 18 g.
- PET é termoplástico, robusto, semirrígido a rígido, mecanicamente resistente ao impacto e extensível durante o processamento.
- PET mostra propriedades de barreira a gases contra umidade e CO₂ (Dióxido de Carbono ou Gás Carbônico), isso é importante para CSD.
- O PET é extremamente inerte em relação aos outros plásticos, e livre de plastificantes (ao contrário, no caso do PVC o uso de plastificantes é fundamental).

Os sabores e aromas de bebidas em geral podem ser alterados pela presença de (ACH), podendo ser proveniente do ambiente, do próprio produto e/ou do material de embalagem utilizado (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

A preocupação com a presença de Acetaldeído nas embalagens PET se deve ao fato da possibilidade de alteração do gosto ao produto final embalado. Refrigerantes e água mineral, são produtos nos quais o sabor é afetado diretamente pela presença do ACH. As águas minerais sem gás são mais sensíveis, resultando em um baixo limite de percepção ao gosto, na faixa de 20 ppm a 40 ppm de ACH, dependendo da composição da água (EWENDER; FRANK, 2008).

O PET é um poliéster pertencente ao grupo dos polímeros de condensação. A polimerização se processa em dois estágios. No primeiro estágio, ocorre a esterificação do diácido ou do diéster com o etilenoglicol produzindo o diéster monomérico, o bis (2-hidroxiethyl) tereftalato (BHET), conforme apresentado na Figura 2.5, (NASSER *et al.*, 2009).

Figura 2.5 - Polimerização do PET: Reação de obtenção do Monômero (BHET).

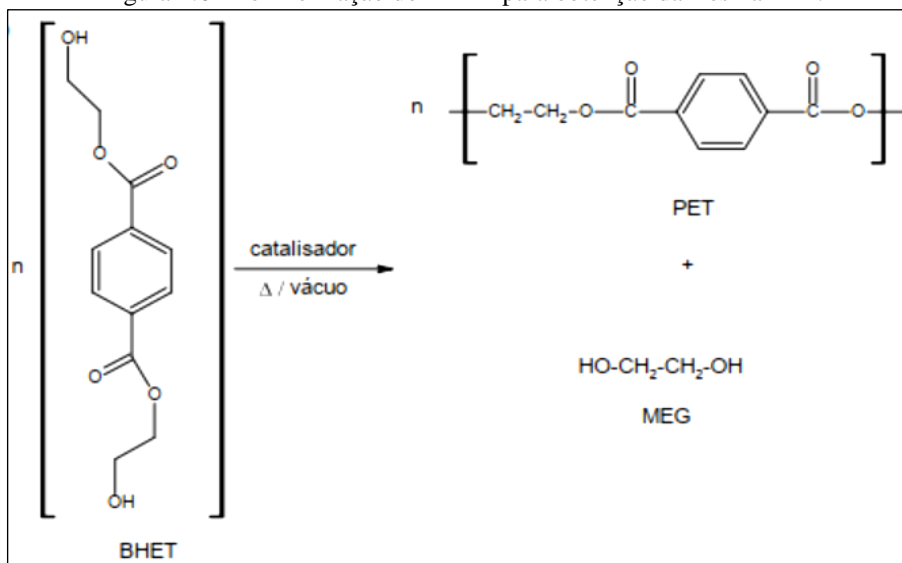


Fonte: Adaptado de NASSER *et al.* (2009).

Quando a substância de partida utilizada é o ácido tereftálico (PTA) a reação é conhecida como reação de esterificação direta e quando dimetil tereftalato (DMT) é utilizado a reação é conhecida como reação de transesterificação (NASSER *et al.*, 2009).

No segundo estágio, o BHET continua a se condensar (reação de policondensação) aumentando o peso molecular até a formação do polímero (Figura 2.6). Durante este processo, moléculas de etileno glicol (MEG) são liberadas e recicladas para reutilização. O PET no seu estado fundido é submetido à extrusão, sendo então formados os pellets (NASSER *et al.*, 2009).

Figura 2.6 - Polimerização do BHET para obtenção da Resina PET.



Fonte: Adaptado de NASSER *et al.* (2009).

O PET é sensível à degradação térmica, especialmente na presença de água e/ou oxigênio. Um produto comum da degradação térmica do PET é o ACH (NASSER *et al.*, 2009).

Medidas de ACH feitas nas várias fases do processo de injeção-sopro, em pré-formas das garrafas, confirmam que a principal fonte de geração de ACH no processo de transformação da resina PET ocorre durante a injeção da pré-forma, devido à refusão da resina (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

O ACH gerado durante a injeção-sopro do PET fica retido na parede da garrafa entre as moléculas do polímero, difundindo-se lentamente para o conteúdo desta. (EWENDER; FRANK, 2008).

Controle da geração de ACH na fabricação de garrafas, o ACH formado na garrafa depende de (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009):

- Formulação da Resina;
- Condições de Transformação.

Em temperaturas elevadas, é gerado níveis significativos de ACH. Dessa forma, o controle do processo de injeção é fundamental para controlar a geração do ACH na produção de garrafas. Por outro lado, a etapa de sopro não tem praticamente nenhum efeito na formação do ACH, uma vez que trabalha a temperaturas mais amenas.

Assim, para reduzir a geração de ACH da resina durante a injeção da pré-forma, aconselha-se manter o polímero fundido na mais baixa temperatura possível durante o mínimo tempo, com um mínimo de cisalhamento.

A concentração de ACH na pré-forma aumenta na mesma proporção que a temperatura de secagem, do canhão e a do molde. Mas somente ajustar as temperaturas do canhão e dos canais do molde não garante que a temperatura do poliéster fundido vá permanecer adequada. O polímero fundido viscoso é também aquecido pelo atrito com o canhão, a rosca e os canais de distribuição. Esse atrito é tanto função da viscosidade da resina fundida como do tipo e da rotação da rosca. Além do calor gerado pelo atrito, o cisalhamento quebra mecanicamente as moléculas do polímero, formando assim mais grupos terminais bis (2-hidroxi-), que, por sua vez, formam mais ACH (Figura 2.5). (MANUAL TÉCNICO RESINA PET, 2009).

Os parâmetros a serem controlados para minimizar a exposição ao calor são:

- a) Temperatura do canhão (diminuir);
- b) Temperaturas do hot runner, manifold e bicos (diminuir);
- c) Tempo de residência no canhão, manifold e hot runner (manter o menor possível);

d) Tempo de residência do polímero fundido no processo.

Um parâmetro de quase igual importância à temperatura do polímero fundido, para minimizar a formação de ACH na pré-forma, é o tempo de residência deste. Simplificadamente nota-se que o ACH gerado é quase diretamente proporcional ao tempo de residência do polímero fundido no processo. Assim, é boa norma minimizar o tempo de ciclo para diminuir a geração de ACH.

Parâmetros que dependem da máquina utilizada:

- Dimensões dos Canais de Injeção;
- Perfil da Rosca.

Uma vez que baixas concentrações de ACH já afetam as propriedades organolépticas das águas minerais e refrigerante tipo cola, a fabricação de garrafas com baixo ACH é fundamental para a indústria de embalagens rígidas. Portanto, é preponderante a análise de ACH no controle de qualidade de resinas e garrafas (EWENDER; FRANK, 2008).

2.5 REDE NEURAL ARTIFICIAL

A Rede Neural Artificial (RNA) é inspirada no sistema neural humano e é utilizada em diferentes áreas como reconhecimento de padrões, otimização, controle e etc. A rede neural é composta por várias unidades de processamento (nós) e links direcionados entre elas. Essas conexões são ponderadas representando a relação entre os neurônios de entrada e saída (HADDADI *et al.*, 2010).

Uma Artificial Neural Networks (ANN) é um conjunto de neurônios artificialmente estruturados que são treinados a partir de uma sequência específica de passos (algoritmo) para obter a saída desejada. A concepção principal de RNAs é adaptada da estrutura fundamental de um neurônio biológico que reside em nossos cérebros (YADAV *et al.*, 2021).

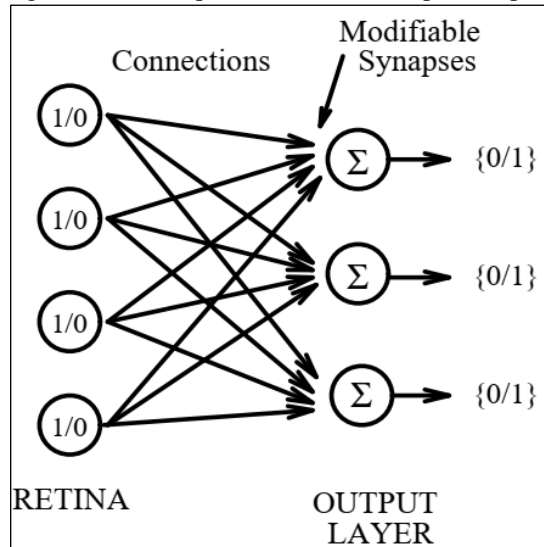
2.5.1 Perceptron

Um perceptron matemático de um neurônio biológico foi proposto quase 65 anos atrás por McCulloch e Pitts em 1943 para replicar o funcionamento de um neurônio biológico (YADAV *et al.*, 2021).

Embora a pesquisa em modelagem neural tenha começado por volta de 1940 (ou seja, McCulloch & Pitts em 1943), havia pouco desenvolvimento ativo do campo antes do final dos

anos 50 e início dos anos 60, quando Rosenblatt introduziu o perceptron em 1958, na figura 2.7 a estrutura básica do um perceptron (ABDI, 1994).

Figura 2.7 - A Arquitetura de um Perceptron Típico.



Fonte: ABDI (1994).

A composição inicial do perceptron são duas camadas de células conectadas por sinapses que podem ser modificadas por meio do aprendizado. A camada de entrada é chamada de retina. As células só podem assumir valores binários (por exemplo, 0 ou 1) (ABDI, 1994).

Um modelo próximo do perceptron foi o adalino desenvolvido por Widrow em 1960. Essas arquiteturas iniciais já possuem a maioria dos recursos essenciais das redes neurais mais modernas.

Eles são compostos de unidades básicas simples vagamente comparáveis aos neurônios. Os perceptrons têm essencialmente duas camadas de células: uma camada de entrada, que foi chamada de retina (artificial) do perceptron, e uma camada de saída. O aprendizado nessas redes ocorre nas junções sinápticas entre os neurônios da camada de entrada e os neurônios da camada de saída (no artigo original, a camada de saída era chamada de "camada de associação"). A princípio, o desempenho dessas primeiras redes atraiu bastante atenção, porém suas limitações logo ficaram claras (ABDI, 1994).

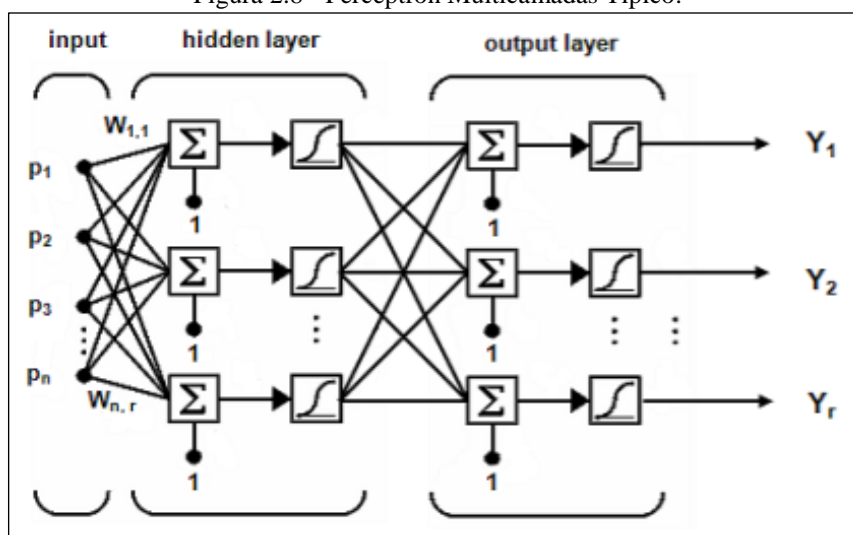
2.5.2 Multilayer Perceptron (Feedforward)

Um perceptron multicamadas (MLP) conhecido como rede neural feedforward, é a principal arquitetura de aprendizado profundo. Seu objetivo é aproximar uma função f^* (FLORENCIO *et al.*, 2018).

Um MLP tem 3 (três) tipos de camadas: camada de entrada, camada intermediária / oculta e camada de saída e pode haver mais de uma camada oculta. Uma propriedade fundamental do MLP é o fato de estar totalmente conectado, o que significa que todo neurônio da camada de entrada tem uma conexão com todos os neurônios da camada oculta (FLORENCIO *et al.*, 2018).

O MLP possui vários neurônios estruturados em camadas, tais como camada de entrada, camadas ocultas e camadas de saída (Figura 2.8). A camada de saída com um ou vários neurônios fornece saída para uma ou várias entradas. Em um exemplo de neurônio, a tarefa do processo de treinamento é encontrar pesos adequados para conexões de neurônios que, em combinação com entradas, alcançam a saída desejada.

Figura 2.8 - Perceptron Multicamadas Típico.



Fonte: Adaptado de HADDADI *et al.* (2010).

As redes feedforward podem ser usadas para qualquer tipo de mapeamento de entrada para saída. Uma rede feedforward com uma camada oculta e neurônios suficientes nas camadas ocultas pode atender a qualquer problema de mapeamento de entrada-saída finito.

2.5.3 Back Propagation Structure for Network

A estrutura de propagação de retorno propaga o erro da camada de saída para as camadas ocultas e altera os pesos recursivamente através da rede da camada de saída para a camada de entrada.

O principal objetivo do algoritmo é minimizar o erro de saída alterando os pesos. O algoritmo de propagação de volta é baseado na descida gradiente. Em cada etapa, o gradiente da meta é calculado em que direção do gradiente negativo representa o direção onde a

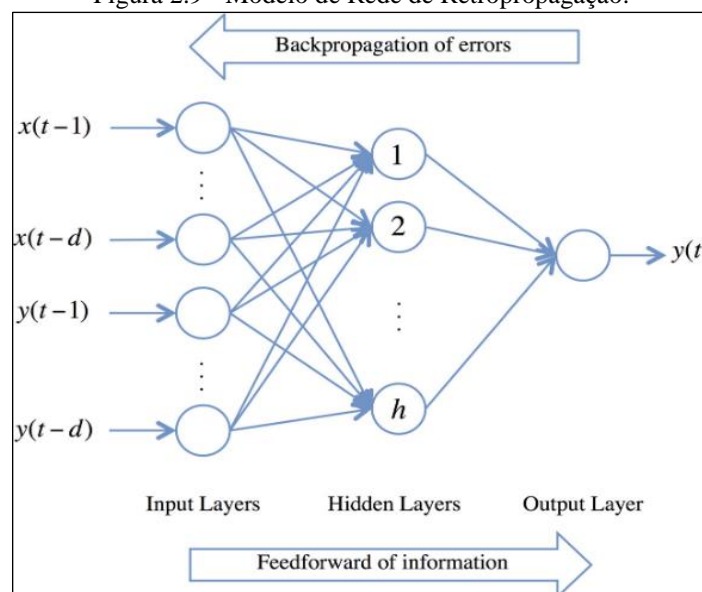
superfície diminui mais rapidamente e quantidade de gradiente mostra a distância através da qual o direção é válida (HADDADI *et al.*, 2010).

A propagação reversa também conhecida como rede neural feed-forward em cascata (CFNN) é uma variante da rede feedforward que tem conexões de entrada adicionais para cada camada e cada camada para todas as camadas subsequentes (SAHA TCHINDA *et al.*, 2021).

O método de propagação reversa, também conhecido como algoritmo de propagação reversa de erros, é baseado na regra de aprendizado de correção de erros. Consiste em duas passagens pelas diferentes camadas da rede: uma passagem para a frente e uma passagem para trás. Na passagem para a frente, um padrão de atividade é aplicado aos nós de entrada da rede e seu efeito se propaga através da rede, camada por camada. Finalmente, um conjunto de saídas é produzido como a resposta real da rede (Ramesh, Vanathi, & Gunavathi, 2008).

Uma rede de retropropagação usa uma arquitetura hierárquica em camadas de neurônios simples (nós), empregando um alto grau de conectividade entre as camadas. Apenas conexões entre camadas (sinapses) são permitidas nas redes não recursivas "simples" descritas aqui; nenhuma conexão dentro da camada pode ser usada. Um diagrama esquemático de uma rede feed-forward de duas camadas empregando conectividade total entre as camadas adjacentes é mostrado na figura 2.9. É frequentemente esquecido que o algoritmo de retropropagação não requer conexão completa de camadas adjacentes - esquemas de conectividade restrita podem ser empregados. Também são permitidas sinapses que ‘pulam’ uma ou mais camadas. A única restrição real é que a ativação só pode fluir para a frente na rede, não para trás, lateralmente ou recursivamente (WYTHOFF, 1993).

Figura 2.9 - Modelo de Rede de Retropropagação.



Fonte: CHAN e MEHRALIZADEH (2016).

Cada nó na rede recebe uma ou mais entradas do mundo externo ou de camadas anteriores e produz um único valor de saída que é transmitido para outras entradas de nó nas camadas seguintes. As equações a seguir são expressas do ponto de vista de um único nó e devem ser entendidas como executadas em toda a rede. A primeira etapa no cálculo da saída de um determinado nó é determinar a entrada líquida, que é apenas o produto escalar do vetor de peso do nó com seu vetor de entrada, dado pela Eq. (2.1) (WYTHOFF, 1993).

$$a = \sum_{i=1}^n w_i x_i + \theta \quad (2.1)$$

Equação 2.1 - Modelo Matemático de Transmissão entre Camadas da RNA

Em que:

x_i representa as entradas ao nó;

w_i representa os pesos aplicados a essas entradas;

θ é o termo de compensação ou polarização para o nó e;

n é o número de sinapses para o nó.

Em seguida, vem a determinação da saída do nó, que é realizada passando a entrada líquida do nó por meio de sua função de transferência. Existem várias formas de equações que podem ser usadas para implementar uma função de transferência sigmoideal, incluindo a tangente hiperbólica, mas a forma mais usada é mostrada pela Eq. (2.2) (WYTHOFF, 1993).

$$o = \frac{1.0}{1.0 + e^{-a}} \quad (2.2)$$

Equação 2.2 - Exemplo de Função de Transferência Sigmoideal

onde O é a saída do nó e a é a entrada líquida, da Eq. (2.2).

Para um MLP com n neurônios na camada de entrada, k neurônio em uma camada oculta e 1 na camada de saída, sua equação matemática pode ser escrita como na Eq. (2.3) (SAHA TCHINDA *et al.*, 2021).

$$y = f^0 \left(b_0 + \sum_{j=1}^k w_j^0 f_j^h \left(b_j + \sum_{i=1}^n w_{ij}^h x_i \right) \right) \quad (2.3)$$

Equação 2.3 - Modelo de Transmissão para n Neurônios com K camadas

Em que:

f^0 é a função de ativação da camada de saída;

f_j^h é a ativação da camada oculta j ;

x_i representa a entrada;

b_0 é o viés na saída;

b_j é o viés na camada oculta j e;

y é a saída.

A cascade feed-forward neural network é um dos modelos mais utilizados em aplicações de redes neurais artificiais.

2.5.4 Métodos de Aprendizado das RNA's

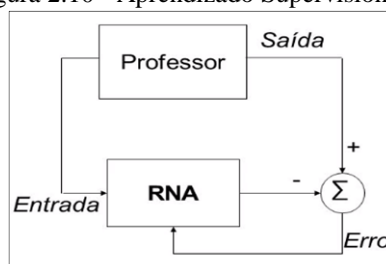
Redes Neurais Artificiais possuem a capacidade de aprender por exemplos e fazer interpolações e extrapolações do que aprenderam. No aprendizado conexionista, não se procura obter regras como na abordagem simbólica da Inteligência Artificial (IA), mas sim determinar a intensidade de conexões entre neurônios. A utilização de uma RNA na solução de uma tarefa passa inicialmente por uma fase de aprendizagem, quando a rede extrai informações relevantes de padrões de informação apresentados para ela, criando assim uma representação própria para o problema (BRAGA *et al.*, 2000).

Aprendizado Supervisionado

Este método de aprendizado é o mais comum no treinamento das RNAs, tanto de neurônios com pesos como de neurônios sem pesos. É chamado de aprendizado supervisionado porque a entrada e saída desejadas para a rede são fornecidas por um supervisor (professor) externo. O objetivo é ajustar os parâmetros da rede, de forma a encontrar uma ligação entre os pares de entrada e saída fornecidos (BRAGA *et al.*, 2000).

Na figura 2.10, é ilustrado o mecanismo de aprendizado supervisionado.

Figura 2.10 - Aprendizado Supervisionado.



Fonte: BRAGA *et al.* (2000).

O professor indica explicitamente um comportamento bom ou ruim para a rede, visando a direcionar o processo de treinamento. A rede tem sua saída corrente (calculada) comparada com a saída desejada, recebendo informações do supervisor sobre a diferença em relação a resposta atual (erro). Para todo padrão de entrada submetido à rede compara-se a resposta desejada (que representa uma ação ótima para ser realizada pela rede) com a resposta calculada, ajustando-se os pesos das conexões para minimizar o erro.

A falha do mecanismo de aprendizado supervisionado é que, na carência do professor, a rede é impossibilitada de aprender novas estratégias para situações não contempladas pelos exemplos do treinamento da rede.

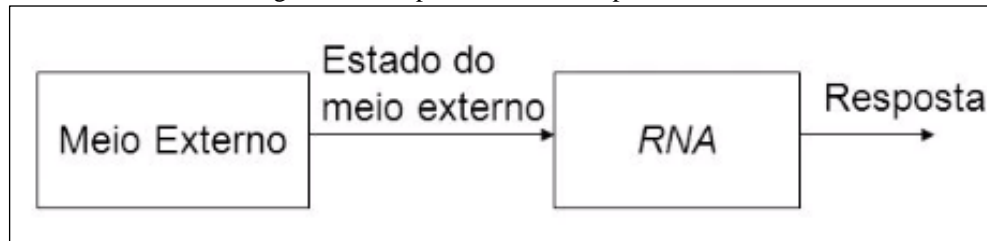
No aprendizado supervisionado, um agente externo (professor) apresenta à rede neural alguns conjuntos de padrões de entrada e seus correspondentes padrões de saída. Portanto, é necessário ter um conhecimento prévio do comportamento que se deseja ou se espera da rede. Para cada entrada, o professor indica explicitamente se a resposta calculada é boa ou ruim. A resposta fornecida pela rede neural é comparada à resposta esperada. O erro verificado é informado à rede para que sejam feitos ajustes a fim de melhorar suas futuras respostas (FERNEDA, 2006).

Aprendizado não-supervisionado

No aprendizado não-supervisionado, como o próprio nome sugere, não há um professor ou supervisor para acompanhar o processo de aprendizado. Apesar da semelhança entre o aprendizado supervisionado e o aprendizado dos seres humanos, muitos dos sistemas biológicos ocorrem através de aprendizado não-supervisionado, como por exemplo os estágios iniciais dos sistemas de visão e audição. Para estes algoritmos, somente os padrões de entrada estão disponíveis para a rede, ao contrário do aprendizado supervisionado, cujo conjunto de treinamento possui pares de entrada e saída. A partir do momento em que a rede estabelece uma harmonia com as regularidades estatísticas da entrada de dados, desenvolve-se nela uma habilidade de formar representações internas para codificar características da entrada e criar novas classes ou grupos automaticamente. Este tipo de aprendizado só se torna possível quando existe redundância nos dados de entrada. Sem redundância seria impossível encontrar quaisquer padrões ou características dos dados de entrada (BRAGA *et al.*, 2000).

Na figura 2.11, é ilustrado o mecanismo de aprendizado não supervisionado.

Figura 2.11 - Aprendizado não-supervisionado.



Fonte: BRAGA *et al.* (2000).

A estrutura do sistema de aprendizado não-supervisionado pode adquirir uma variedade de formas diferentes. Ela pode, por exemplo, consistir em uma camada de entrada, uma camada de saída, conexões feedforward da entrada para a saída e conexões laterais entre os neurônios da camada de saída. Um outro exemplo é uma rede feedforward com múltiplas camadas, em que a livre organização procede na base de camada por camada. Nestes dois exemplos, o processo de aprendizado consiste em modificar repetidamente o peso sináptico de todas as conexões do sistema em resposta às entradas (BRAGA *et al.*, 2000).

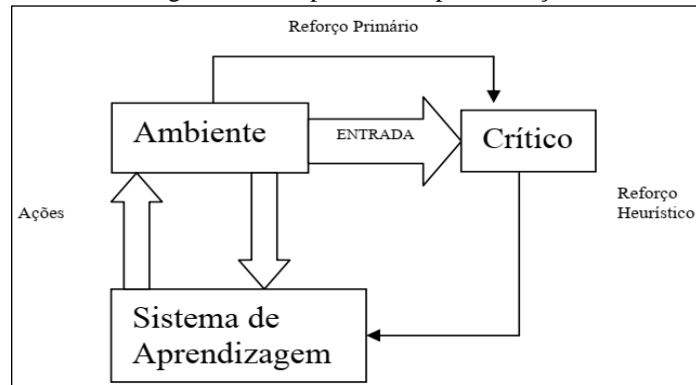
Na aprendizagem não supervisionada, ou aprendizado auto-supervisionado, não existe um agente externo para acompanhar o processo de aprendizado. Neste tipo de aprendizagem, somente os padrões de entrada estão disponíveis para a rede neural. A rede processa as entradas e, detectando suas regularidades, tenta progressivamente estabelecer representações internas para codificar características e classificá-las automaticamente. Este tipo de aprendizado só é possível quando existe redundância nos dados de entrada, para que se consiga encontrar padrões em tais dados (FERNEDA, 2006).

Aprendizado por Reforço

O aprendizado por reforço pode ser visto como um caso particular de aprendizado supervisionado. A principal diferença entre o aprendizado supervisionado clássico e o aprendizado por reforço é a medida de desempenho usada em cada um dos sistemas. No aprendizado supervisionado, a medida de desempenho é baseada no conjunto de respostas desejadas usando um critério de erro conhecido, enquanto no aprendizado por reforço o desempenho é baseado em qualquer medida que possa ser fornecida ao sistema. No aprendizado por reforço, a única informação de realimentação fornecida à rede é se uma determinada saída está correta ou não. isto é, não é fornecida à rede a resposta correta para o padrão de entrada (BRAGA *et al.*, 2000).

Na figura 2.12, é ilustrado o mecanismo de aprendizado por reforço.

Figura 2.12 - Aprendizado por Reforço.



Fonte: HOREWICZ e NASCIMENTO JR (2006).

O aprendizado por reforço é uma forma de aprendizado on-line obtido por um mapeamento de entrada-saída através de um processo de triagem e erro desenvolvido para maximizar o índice de desempenho escalar chamado sinal de reforço (BRAGA *et al.*, 2000).

Aprendizagem por reforço (AR) é um formalismo da Inteligência Artificial que permite a um indivíduo aprender a partir da sua interação com o ambiente no qual ele está inserido (HOREWICZ; NASCIMENTO JR, 2006).

2.5.5 Funções de Transferências (Ativação) das RNA's

Um neurônio biológico dispara quando a soma dos impulsos que ele recebe ultrapassa o seu limiar de excitação (threshold). O corpo do neurônio, por sua vez, é emulado por um mecanismo simples que faz a soma dos valores $x_i w_i$ recebidos pelo neurônio (soma ponderada) e decide se o neurônio deve ou não disparar (saída igual a 1 ou a 0) comparando a soma obtida ao limiar ou threshold do neurônio. No modelo de Redes Lógicas de Nós (RLN), proposto por McCulloch & Pitts em 1943, a ativação do neurônio é obtida através da aplicação de uma “função de ativação”, que ativa ou não a saída, dependendo do valor da soma ponderada das suas entradas. Na descrição original do modelo RLN, a função de ativação é dada pela função de limiar descrita na Eq. (2.4) (BRAGA *et al.*, 2000).

$$\sum_{i=1}^n x_i w_i \geq \theta \quad (2.4)$$

Equação 2.4 - Modelo Matemático RLN da Função de Ativação

Em que:

n é o número de entradas do neurônio;

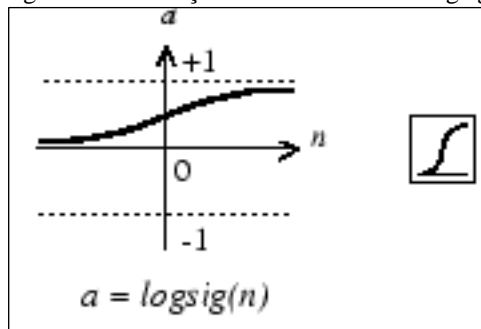
w_i é o peso associado à entrada;

x_i e θ é o limiar (threshold) do neurônio.

Vários outros modelos, após o trabalho de McCulloch e Pitts, foram derivados permitindo saídas, não necessariamente iguais a 0 ou 1 e com diferentes funções de ativação (GONÇALVES *et al.*, 2010).

Na figura 2.13, é ilustrado a função de transferência logística sigmoide (logsig).

Figura 2.13 - Função de Transferência Logsig.



Fonte: Adaptado de GONÇALVES *et al.* (2010).

A função logística sigmoide, Eq. (2.5), pode assumir valores entre 0 e 1 (GONÇALVES *et al.*, 2010).

$$f(v) = \frac{1}{1 + e^{(-av)}} \quad (2.5)$$

Equação 2.5 - Modelo Matemático da Função Logística Sigmoide (logsig)

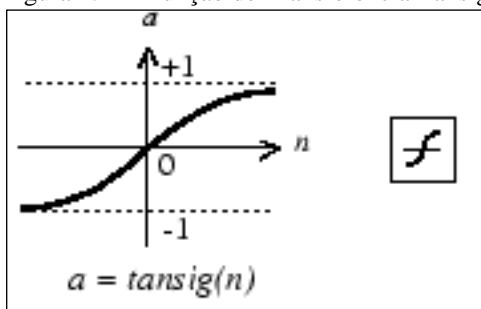
Em que:

a é o parâmetro de inclinação da função;

v é o valor de ativação do neurônio.

Na figura 2.14, é ilustrado a função de transferência tangente hiperbólica (tansig).

Figura 2.14 - Função de Transferência Tansig.



Fonte: Adaptado de GONÇALVES *et al.* (2010).

A Eq. 2.6, representa a função tangente hiperbólica (tansig) assumindo valores entre 1 e -1 (GONÇALVES *et al.*, 2010).

$$f(v) = a \frac{e^{(bv)} - e^{(-bv)}}{e^{(bv)} + e^{(bv)}} \quad (2.6)$$

Equação 2.6 - Modelo Matemático da Função Tangente Hiperbólica (tansig)

Em que:

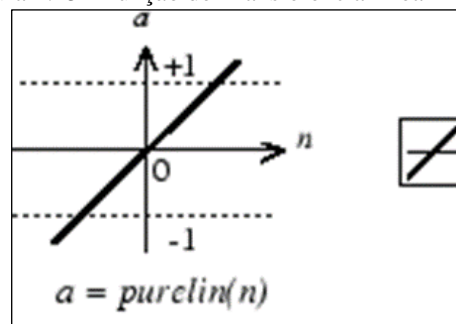
a é o parâmetro de inclinação da curva;

b são os limites inferiores e superiores e;

v é o valor de ativação.

Na figura 2.15, é ilustrado a função de transferência linear (purelin).

Figura 2.15 - Função de Transferência linear Purelin.



Fonte: GONÇALVES *et al.* (2010).

A função de ativação linear é definida pela Eq. (2.7).

$$f(x) = ax \quad (2.7)$$

Equação 2.7 - Modelo Matemático da Função Linear (purelin)

Em que:

a é um número real que define a saída linear para os valores de entrada;

$f(x)$ é a saída e;

x é a entrada.

CAPÍTULO 3

3 MATERIAIS E MÉTODOS

3.1 MATERIAIS

A base de dados que é utilizada neste estudo corresponde a uma “*METODOLOGIA EXPERIMENTAL*”, onde as informações coletadas provêm de uma Indústria do segmento de plástico do Pólo Industrial de Manaus (PIM), durante a produção por injeção de pré-formas de polímero PET para a fabricação de embalagens de bebidas gaseificadas ou não, nesse processo a pré-forma é armazenada e depois entregue ao fabricante de bebidas, onde serão produzidas através do processo de moldagem por sopro da embalagem final para o envase da bebida.

Os dados foram coletados no setor de Controle de Qualidade nas pré-formas de lotes de embalagem de 500 peças.

Identificação das variáveis mais significativas do processo de injeção plástica da pré-forma para a entrada da RNA.

Análise descritiva das variáveis numéricas da RNA.

Análise dos requisitos para os parâmetros de configuração da RNA proposta. Para ajuste da RNA, serão simulados diversos parâmetros de configuração da Rede Neural Artificial para o desenvolvimento do sistema inteligente de previsão de formação do acetaldeído no processo de moldagem por injeção, que é um processo complexo com um alto número de parâmetros e variáveis que participam do processo.

A referência para definir os parâmetros da rede irá se basear em dados históricos das peças produzidas.

O Software definido para desenvolver este Sistema Inteligente foi o MATLAB R2016a® (Matrix Laboratory), por implementar vários tipos de RNA's em sua interface gráfica (Toolbox) Neural Network Toolbox (NNTool).

O Hardware utilizado foi um Microcomputador com processador Intel Core I5 7ª Geração, Memória Ram 8 Gigabyte DDR4, Placa de Vídeo NVIDIA GeForce 940 MX 2 Gigabyte Dedicated VRAM e 1 Terabyte de Hard Disk Drive (HDD).

3.2 METODOLOGIA APLICADA COM RNA

3.2.1 Simulação da RNA

Simulação de vários modelos de RNA's, do tipo Feedforward por apresentar melhor adaptação ao tipo de problema, para configuração da estrutura da rede.

3.2.2 Treinamento da RNA

Para o treinamento da RNA é utilizado um algoritmo de aprendizagem, para ajustes de seus pesos que extrai características dos dados fornecidos para melhor ajuste da solução (objetivo a ser alcançado).

Serão treinadas diversas RNA's com diferentes funções de treinamento para seleção da rede com a melhor performance.

Na tabela 3.1, as funções de treinamento usadas na simulação das RNA's para o sistema inteligente de predição da temperatura.

Tabela 3.1 - Funções de Treinamento da RNA.

Nº	Função	Algoritmo
1	'trainlm'	Levenberg-Marquardt
2	'trainbr'	Regularização Bayesiana
3	'trainbfg'	BFGS Quasi-Newton
4	'trainrp'	Retropropagação resiliente
5	'trainscg'	Gradiente de Conjugado Escalado
6	'traincgb'	Gradiente Conjugado com reinicialização de Powell / Beale
7	'traincgf'	Fletcher-Powell Conjugado Gradiente
8	'traincgp'	Polak-Ribière Conjugado Gradiente
9	'trainoss'	Secante de Um Passo
10	'traingdx'	Gradiente Descendente de taxa de aprendizagem variável
11	'traingdm'	Gradiente Descent with Momentum
12	'traingd'	Gradiente Descendente

Fonte: AUTOR (2021).

Cada função de treinamento é simulada com as funções de transferência da RNA (**Tabela 3.2**), totalizando **36 RNA's** com parâmetros de treinamento e transferência diferentes.

Tabela 3.2 - Funções de Transferência da RNA.

Nº	Função
1	'purelin'
2	'tansig'
3	'logsig'

Fonte: AUTOR (2021).

3.2.3 Avaliação das Estimativas Geradas pelas RNA's

A avaliação das estimativas geradas pelas RNA's, é realizada empregando estatística e análise gráfica de resíduos. As estatísticas empregadas foram o **Coefficiente de Correlação de Pearson** entre os valores observados do processo de injeção e os valores estimados pelas RNA's, Eq. (3.1) (GALARÇA *et al.*, 2010).

$$Cp = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2} \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}} \quad (3.1)$$

Equação 3.1 - Coeficiente de Correlação de Pearson

Em que:

x_1, x_2, \dots, x_n e y_1, y_2, \dots, y_n são os valores medidos de ambas as variáveis.

E as Eq. (3.1.1) e (3.1.2).

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i \quad (3.1.1)$$

e

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n y_i \quad (3.1.2)$$

São as médias aritméticas de ambas as variáveis.

A correlação de Pearson, mede o grau de relação linear entre duas variáveis. O coeficiente de correlação admite um valor entre -1 e +1. Se uma variável tende a aumentar à medida que as outras diminuem, o coeficiente é negativo (-1). Por outro lado, se as duas variáveis tendem a aumentar em conjunto, o coeficiente de correlação é positivo (+).

O **Erro Quadrático Médio (MSE - Mean Square Error)** obtidos pela Eq. (3.2) (PAIVA *et al.*, 2010) (WANG *et al.*, 2021).

$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 \quad (3.2)$$

Equação 3.2 - Erro Quadrático Médio (MSE)

Em que:

n número de pontos;

Y_i é a saída observada no processo de injeção;

\hat{Y}_i é a saída estimada pela RNA.

O **MSE**, mede o quão bem sucedido é o ajuste para explicar a variação dos dados.

A **Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio (RMSE - Root Mean Square Error)** também denominada de erro padrão de previsão (SEP), Eq. (3.3) (ĆALASAN *et al.*, 2020).

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2} \quad (3.3)$$

Equação 3.3 - Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio (RMSE)

Em que:

n número de pontos;

Y_i é a saída observada no processo de injeção;

\hat{Y}_i é a saída estimada pela RNA.

O **RMSE**, é uma estimativa do desvio padrão da componente aleatória nos dados, avalia a diferença quadrática média entre os valores observados e os valores estimados.

O **Erro Médio Absoluto (MAE - Mean Absolute Error)** é definido pela Eq. (3.4) (FRÍAS-PAREDES *et al.*, 2017) (MISHRA *et al.*, 2020).

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |Y_i - \hat{Y}_i|}{n} \quad (3.4)$$

Equação 3.4 - Erro Médio Absoluto (MAE)

Em que:

n número de pontos;

Y_i é a saída observada no processo de injeção;

\hat{Y}_i é a saída estimada pela RNA.

O **MAE** é geralmente usado para medir a dissimilaridade entre duas séries.

A **Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio Normalizado (NRMSE - Normalized Root Mean Square Error)** expressa pela Eq. (3.5) (ISHAQUE *et al.*, 2020) (HAGHNAZARI *et al.*, 2020).

$$NRMSE = \frac{RMSE}{M} \times 100 \quad (3.5)$$

Equação 3.5 - Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio Normalizado (NRMSE)

Em que:

M é a média dos valores medidos.

O **NRMSE** dá uma medida percentual da diferença relativa entre os valores simulados e medidos.

O **Erro Percentual Médio Absoluto (MAPE - Mean Absolute Percentage Error)**, Eq.(3.6) (MISHRA *et al.*, 2020).

$$MAPE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{Y_i - \hat{Y}_i}{Y_i} \right| \quad (3.6)$$

Equação 3.6 - Erro Percentual Médio Absoluto (MAPE)

Em que:

n número de pontos;

Y_i é a saída observada no processo de injeção;

\hat{Y}_i é a saída estimada pela RNA.

O MAPE é usado para medir o desvio da previsão dos valores observados e os valores estimados pela RNA.

Para a **Análise Gráfica** será considerada a inspeção estatística da dispersão dos erros (resíduos) percentuais em relação aos valores observados e estimados da rede Eq. (3.7) (BINOTI *et al.*, 2015).

$$erro(\%) = \frac{(\hat{Y}_i - Y_i)}{Y_i} \times 100 \quad (3.7)$$

Equação 3.7 - Dispersão dos Erros (resíduos)

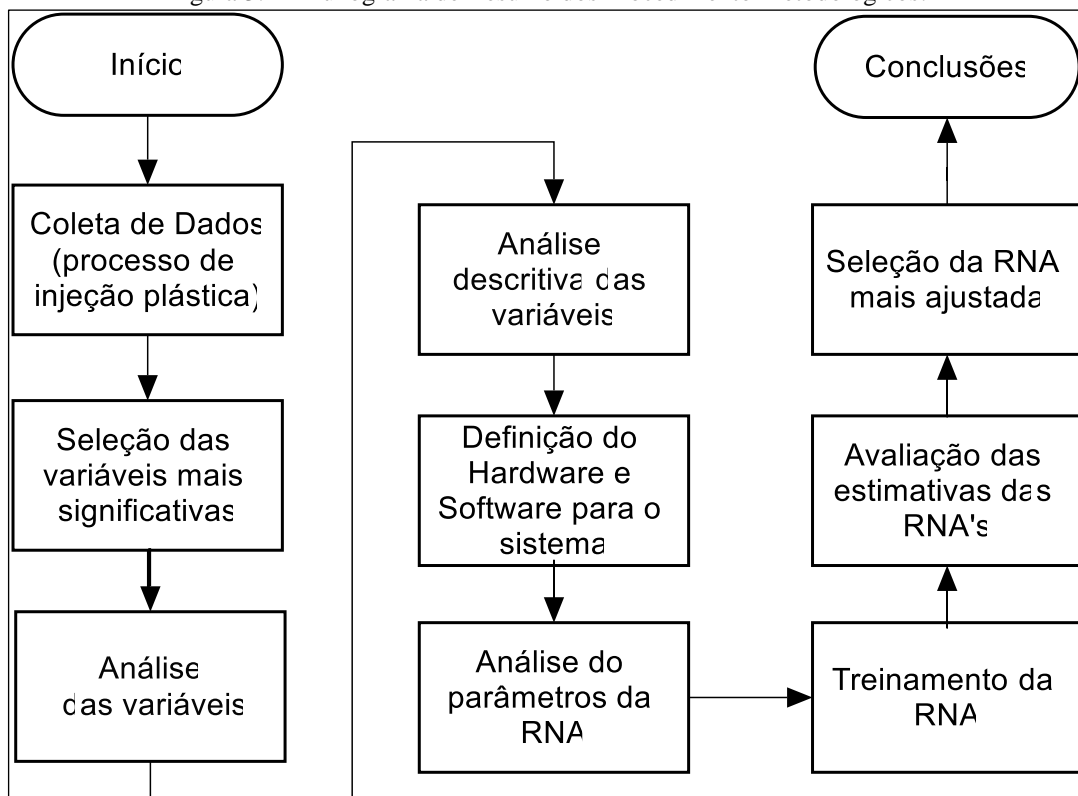
Em que:

\hat{Y}_i é a saída estimada pela RNA;

Y_i é a saída observada no processo de injeção.

Na figura 3.1, o fluxograma de resumo dos procedimentos metodológicos.

Figura 3.1 - Fluxograma de Resumo dos Procedimento Metodológicos.



Fonte: AUTOR (2021).

CAPÍTULO 4

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Todos os lotes produzidos têm uma amostra inspecionada, os lotes cujos os níveis de Acetaldeído forem superiores a 4 ppm são reprovados e descartados, conforme especificado em norma pelo fabricante de bebidas, gerando desperdício de recursos. Essas informações são repassadas aos técnicos responsáveis, que a partir daí alteram a regulagem da temperatura do silo de secagem do polímero.

Para análise do processo de injeção plástica da pré-forma, foram identificadas as seguintes variáveis mais significativas de entrada e saída para RNA:

Variáveis de Entrada:

1 Ponto de orvalho do grão (P.O):

- Quanto mais baixo o ponto de orvalho do ar, maior a velocidade de secagem, onde a capacidade de absorção do ar de secagem é maior.
- Ranger [10:50] °C.

2 Tempo de residência da matéria prima no silo (T.R):

- O tempo de residência da matéria prima no silo é, o tempo que a resina de PET fica dentro do silo secador. Para o PET, deve ser de 4 (quatro) a 6 (seis) horas.
- Ranger [0: 10] horas.

3 A umidade inicial dos grãos (U.I):

- Não deve ser superior a 3.000 ppm (0,3%) antes da sua fusão. Absorção de água pela resina PET ocorre até uma concentração de equilíbrio que depende de vários fatores, tais como tempo e temperatura de armazenagem, portanto, recomenda-se uma armazenagem cuidadosa em ambientes frescos e cobertos.
- Ranger [1000: 6000] ppm.

4 Tamanho do grão (Ta.Gr.):

- Quanto menor é o tamanho do grão, maior é a umidade de equilíbrio na resina. Esse efeito é atribuído à maior área superficial à adsorção (para uma mesma quantidade de amostra, quanto menor é o grão, maior é a área superficial

total), essa hipótese é suportada pelos resultados de umidade de equilíbrio obtidos pela resina PET.

- Ranger [0: 10] mm.

5 *Temperatura do grão (Te.Gr.):*

- Resina na absorção de água, deve-se manter a armazenagem da resina em temperaturas ambientes de 25 °C, com temperaturas controladas nas áreas fabris.
- Ranger [0: 30] °C.

6 *A quantidade de resina no silo Qt.Rs.:*

- A quantidade de resina de PET no silo secador não deve superar o consumo que a máquina produz em 1 (uma) hora continuamente.
- Ranger [450:550] kg/h.

Variável de Saída

1 *Controle da temperatura no silo (T.S.):*

- Corresponde a temperatura efetiva dos grãos entre 160 °C – 180 °C (medida na saída do secador), corrigir se houver alteração no índice de Acetaldeído.
- Ranger [155: 190] °C.

Na Tabela 4.1, é apresentado os valores numéricos das variáveis de entrada e saída da rede.

Tabela 4.1 - Valores Numéricos das Variáveis da RNA.

P.O. (°C)	T.R. (h)	U.I. (ppm)	Ta.Gr. (mm)	Te.Gr. (°C)	Qt.Rs. (kg/h)	T.S. (°C)
10	3	1000	1	9.5	450	161
45	9	4500	9.0	40	545	161
50	10	5000	10.0	45	550	161
15	4.5	1500	2,5	10	470	162
40	8	4000	8.5	35	540	167
20	4.0	1700	3	15	490	168
35	6	2500	6	25	520	172
25	5.5	2000	4	20	510	173
30	5	3500	5	22.5	500	173
35.5	7	3000	7.5	30	530	173

Fonte: AUTOR (2021).

Na tabela 4.2, tem-se a análise descritiva das variáveis numéricas da RNA para o sistema proposto.

Tabela 4.2 - Análise Descritiva das Variáveis Numéricas da RNA.

	Mínimo	Máximo	Média	Desvio Padrão	Coefficiente de Pearson	%
Ponto de orvalho do grão (P.O):	10,00	50,00	30,00	13,69	0,003837428	0,3%
Tempo de residência da matéria (T.R):	3,00	10,00	6,86	2,41	-	-
A umidade inicial dos grãos (U.I):	1000,00	5000,00	2870,00	1354,87	0,123035264	12,3%
Tamanho do grão (Ta.Gr.):	1,00	6,00	3,58	1,80	-	-
Temperatura do grão (Te.Gr.):	10,00	45,00	27,50	12,25	-0,11211309	-4,1%
A quantidade de resina no silo Qt.Rs.:	450,00	550,00	510,50	33,20	0,122590851	11,2%
Controle da temperatura no silo (T.S.):	161,00	173,00	167,10	5,45		

Fonte: AUTOR (2021).

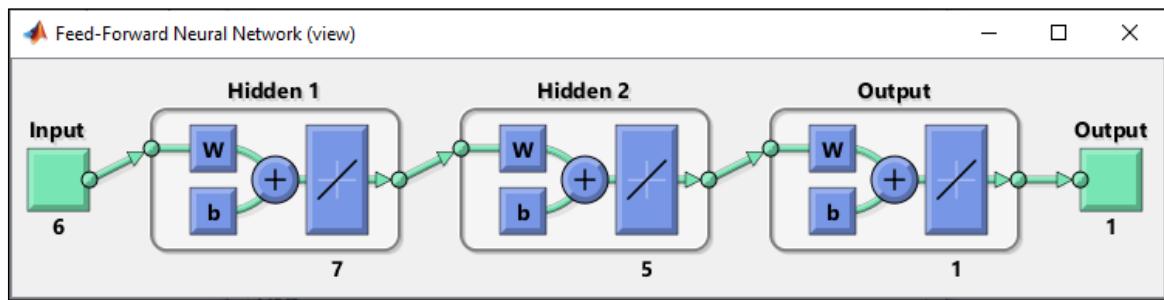
A partir dos dados apresentados na tabela 4.2, pode-se verificar quais os valores máximos e mínimos encontrados dos dados coletados, bem como suas médias, desvio padrão e o coeficiente de Pearson que mostra a correlação de cada variável de entrada com a variável de saída (T.S), sendo valores positivos para uma relação direta e valores negativos para uma relação inversamente proporcional.

Os parâmetros de configuração geral para a simulação das RNA's foram:

- Função para da Rede do tipo **feedforwardnet** ([7,5]), com duas camadas ocultas a primeira com 7 neurônios e a segunda com 5 neurônios;
- net.trainParam.epochs = 1000, número máximo de evoluções;
- net.trainParam.lr = 0.001, taxa de aprendizagem;
- net.trainParam.time = inf, tempo máximo de treinamento.

Após as simulações dos parâmetros estruturais da RNA para o tipo *Feedforward* a Figura 4.1, demonstraram a estrutura geral que melhor se adequou ao problema.

Figura 4.1 - RNA Especificada para o Problema.



Fonte: AUTOR (2021).

Na Figura 4.1, pode-se verificar a estrutura geral da rede *Feedforward* com seis valores de entrada, duas camadas ocultas (a primeira com 7 neurônios e segunda com 5 neurônios), uma camada de saída e a saída com 1 (um) número real simulado.

A Tabela 4.3, apresenta os valores de saída estimados pelas RNA's para cada combinação das funções de Treinamento (FTrain) com as funções de Transferência (FTrans) após as simulações. Gerando 36 RNA's com parâmetros de treinamento e transferência diferentes.

Tabela 4.3 - Valores de Saída (output) das simulações executadas das RNA's.

Nº	Função de Treinamento	Função de Transferência	Saída da RNA (output)									
1	'trainlm'	purelin'	162,26	173,93	175,74	159,43	171,02	166,38	171,24	166,27	173,60	168,55
2	'trainlm'	tansig'	161,43	166,86	165,72	162,40	168,98	166,77	172,30	169,47	173,88	171,13
3	'trainlm'	logsig'	165,75	167,70	167,38	167,00	168,51	168,81	170,85	169,98	170,37	170,03
4	'trainbr'	purelin'	164,00	164,64	164,40	164,25	164,95	164,98	165,50	165,20	164,31	165,35
5	'trainbr'	tansig'	167,10	167,05	167,04	167,09	167,05	167,09	167,07	167,08	167,07	167,06
6	'trainbr'	logsig'	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94	166,94
7	'trainbfg'	purelin'	169,60	166,33	165,82	169,10	166,81	168,96	167,91	168,47	167,89	167,45
8	'trainbfg'	tansig'	168,05	167,37	167,37	168,05	167,37	168,05	167,89	168,04	167,88	167,49
9	'trainbfg'	logsig'	170,53	163,69	163,52	170,47	164,25	170,44	168,86	170,13	168,79	166,60
10	'trainrp'	purelin'	165,19	169,52	170,23	165,83	168,84	165,93	167,29	166,54	167,48	167,93
11	'trainrp'	tansig'	167,19	168,18	168,18	167,19	168,18	167,19	167,50	167,22	167,65	168,00
12	'trainrp'	logsig'	168,68	167,99	167,96	168,65	168,05	168,64	168,41	168,57	168,37	168,24
13	'trainscg'	purelin'	180,23	161,20	158,03	177,42	164,20	177,02	171,04	174,29	170,29	168,20
14	'trainscg'	tansig'	167,69	164,65	164,57	168,02	165,31	168,12	173,29	169,61	174,47	171,05
15	'trainscg'	logsig'	167,61	166,99	166,93	167,65	167,12	167,66	167,64	167,69	167,65	167,44
16	'traincgb'	purelin'	170,32	172,71	173,07	170,69	172,36	170,79	171,48	171,05	171,84	171,78
17	'traincgb'	tansig'	164,92	162,25	162,10	165,80	163,35	166,14	175,18	169,86	175,56	172,00
18	'traincgb'	logsig'	166,11	160,50	158,52	167,60	164,56	169,04	173,20	172,06	171,77	171,07
19	'traincgf'	purelin'	165,18	164,59	162,62	165,33	166,32	169,90	170,91	170,74	165,18	168,92
20	'traincgf'	tansig'	163,85	161,48	160,57	163,85	168,17	164,10	171,82	167,76	170,89	173,06
21	'traincgf'	logsig'	168,52	169,14	168,68	168,56	169,86	168,81	170,72	169,66	169,79	170,72
22	'traincgp'	purelin'	169,24	164,95	162,21	169,44	167,47	173,63	173,60	174,19	166,96	171,09
23	'traincgp'	tansig'	161,99	160,57	160,21	162,02	163,48	162,40	173,87	167,85	172,11	174,34
24	'traincgp'	logsig'	161,00	162,21	159,71	163,32	166,43	166,91	173,03	171,79	171,17	171,55
25	'trainoss'	purelin'	163,68	164,17	161,33	163,15	167,41	170,72	172,12	170,01	167,52	170,24
26	'trainoss'	tansig'	161,46	163,34	161,18	161,49	167,67	162,73	173,19	169,33	172,98	172,02
27	'trainoss'	logsig'	167,20	167,22	167,33	167,20	167,08	167,20	167,19	167,20	167,19	167,13
28	'traingdx'	purelin'	167,63	194,72	203,39	173,10	186,31	161,35	167,26	166,62	174,93	176,32
29	'traingdx'	tansig'	172,92	160,41	160,41	172,92	160,44	172,92	172,20	172,92	172,12	168,11
30	'traingdx'	logsig'	167,05	166,84	166,86	167,05	166,88	167,05	167,03	167,04	167,03	166,99
31	'traingdm'	purelin'	128,64	457,73	556,11	-33,35	362,30	-31,62	152,50	64,56	158,32	241,27
32	'traingdm'	tansig'	173,31	160,81	160,81	173,31	160,84	173,31	172,60	173,31	172,52	168,53
33	'traingdm'	logsig'	167,05	166,84	166,86	167,05	166,88	167,05	167,03	167,04	167,03	166,99
34	'traingd'	purelin'	128,64	457,73	556,11	-33,35	362,30	-31,62	152,50	64,56	158,32	241,27
35	'traingd'	tansig'	173,31	160,81	160,81	173,31	160,84	173,31	172,60	173,31	172,52	168,53
36	'traingd'	logsig'	167,05	166,84	166,86	167,05	166,88	167,05	167,03	167,04	167,03	166,99

Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar na Tabela 4.3, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor resultado, ou seja, mais próximo dos valores reais.

As simulações realizadas pela rede *Feedforward*, com os valores de parâmetros de entradas reais, fornecem aos técnicos especialistas resultados preditivos da temperatura no silo (Tabela 4.3) dando suporte para o controle da temperatura ideal do silo, durante o processo de fabricação da pré-forma, antes da fabricação do lote de garrafas PET's reduzindo o desperdício de recursos, tempo e retrabalho.

Pode-se observar nos resultados apresentados na Tabela 4.3, que os valores de saída, estão dentro das margens de tolerância da temperatura do silo para não geração do Acetaldeído, permitindo avaliar os valores adequados das variáveis de entrada que resultam no processo de secagem da resina PET. Permitindo a melhor regulagem da temperatura.

Ao se variar os valores de entrada é possível avaliar as saídas pelo sistema proposto, obtendo um valor que permite apoio na tomada de decisão no que tange a regulagem de temperatura do silo.

Na Tabela 4.4, apresenta os valores calculados do MSE de cada combinação das funções de Treinamento (FTrain) com as funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

Tabela 4.4 - Valores do MSE das simulações das RNA's.

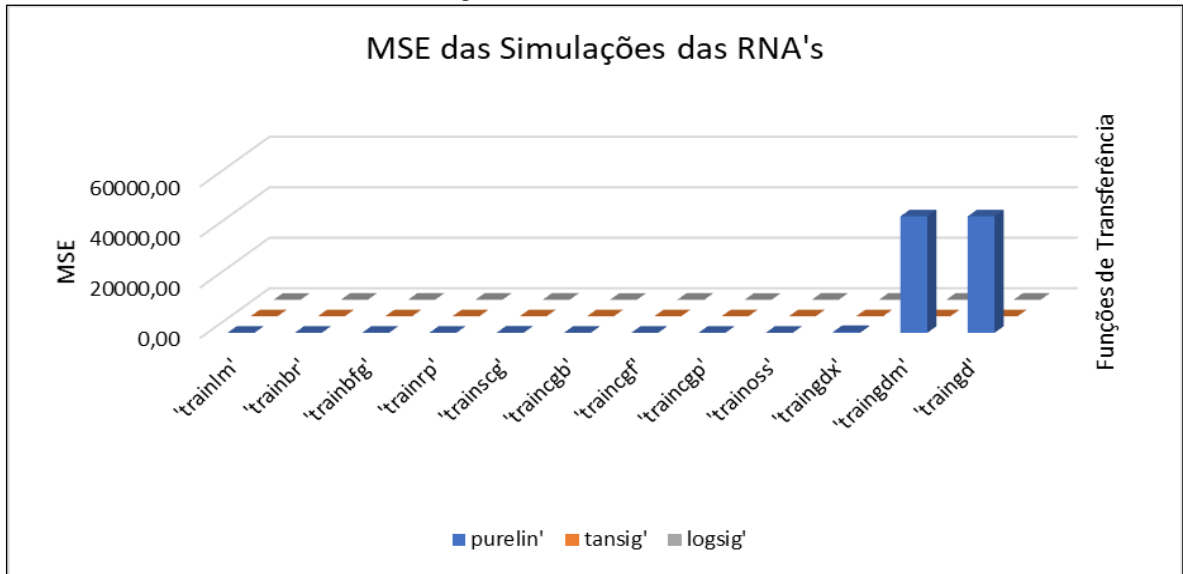
FTrans FTrain	purelin	tansig	Logsig
trainlm	47,75	7,92	16,23
trainbr	28,95	26,67	26,72
trainbfg	27,11	26,57	26,64
trainrp	31,78	27,77	27,84
trainscg	73,85	12,90	25,35
traincgb	48,86	7,69	7,84
traincgf	13,23	6,05	26,19
traincgp	21,63	7,82	1,44
trainoss	7,28	5,01	26,99
traingdx	359,61	35,39	26,35
traingdm	46122,38	36,64	26,35
traingd	46122,38	36,64	26,35

Fonte: AUTOR (2021).

Observa-se na Tabela 4.4, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor

resultado, apresentando o menor MSE. O gráfico da Figura 4.2, visualiza os valores do MSE calculados.

Figura 4.2 - Gráfico do MSE.



Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar no gráfico da Figura 4.2, a evolução dos valores de MSE das simulações executadas. A Tabela 4.5, apresenta os valores calculados da Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio (RMSE) de cada combinação das funções de Treinamento (FTrain) com as funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

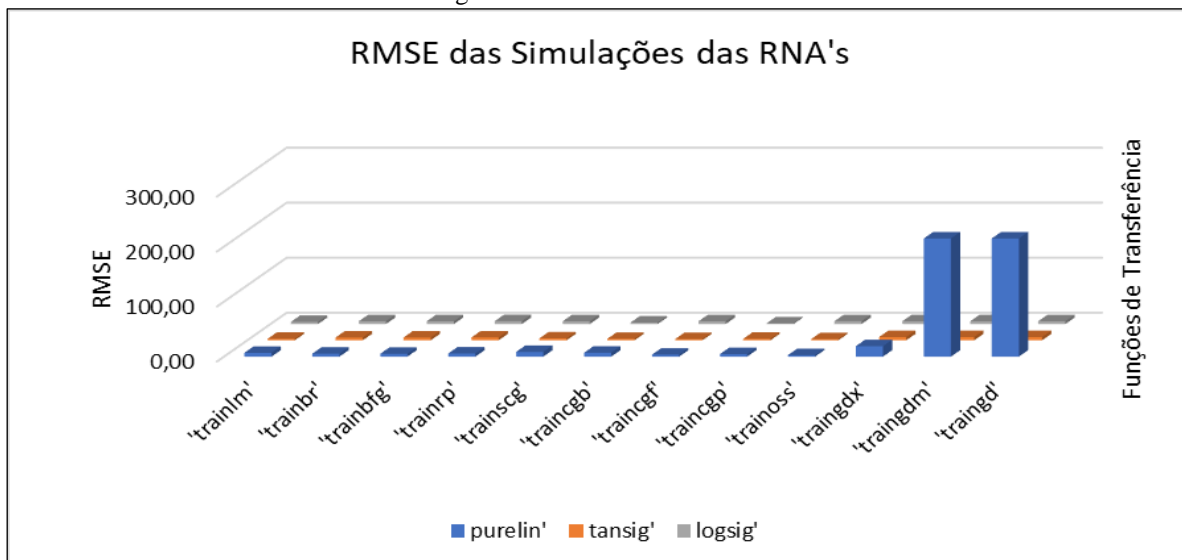
Tabela 4.5 - Valores do RMSE das simulações das RNA's.

FTrain \ FTrans	purelin	tansig	Logsig
trainlm	6,91	2,81	4,03
trainbr	5,38	5,16	5,17
trainbfg	5,21	5,15	5,16
trainrp	5,64	5,27	5,28
trainscg	8,59	3,59	5,03
traingcb	6,99	2,77	2,80
traingcf	3,64	2,46	5,12
traingcp	4,65	2,80	1,20
trainoss	2,70	2,24	5,20
traingdx	18,96	5,95	5,13
traingdm	214,76	6,05	5,13
traingd	214,76	6,05	5,13

Fonte: AUTOR (2021).

Verifica-se na Tabela 4.5, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor resultado, obtendo o menor valor da RMSE. O gráfico da Figura 4.3, visualiza os valores da RMSE calculados.

Figura 4.3 - Gráfico do RMSE.



Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar no gráfico da Figura 4.3, a evolução dos valores de RMSE das simulações executadas com a melhor combinação de função de treinamento com função de transferência para traincgp/logsig. Na Tabela 4.6, é apresentado os valores calculados do Erro Médio Absoluto (MAE) de cada combinação de funções de Treinamento (FTrain) com funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

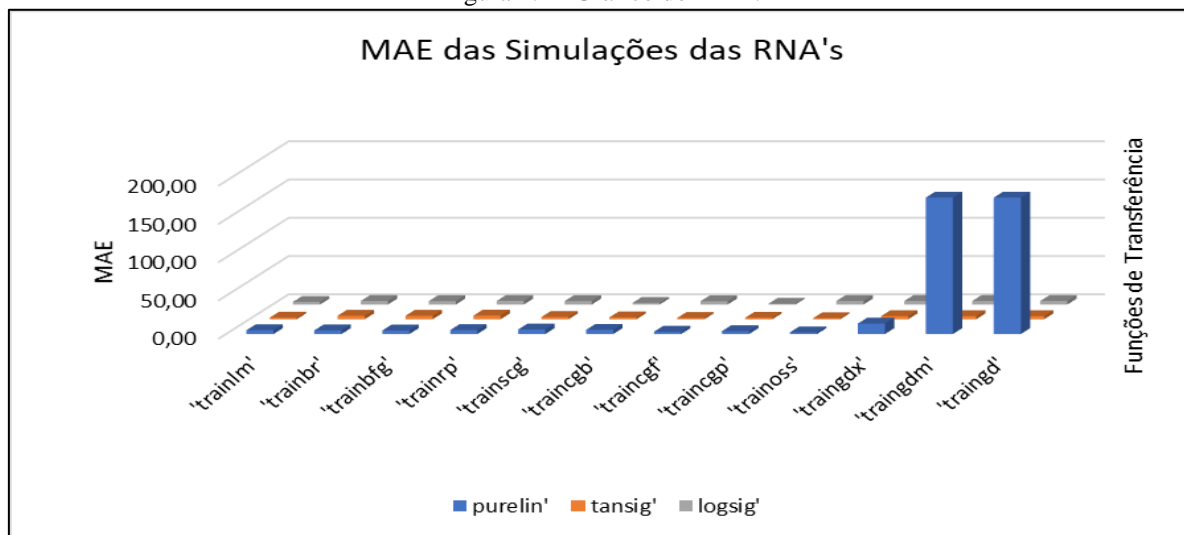
Tabela 4.6 - Valores do MAE das simulações das RNA's.

FTrain \ FTrans	purelin	tansig	logsig
trainlm	4,97	2,12	3,49
trainbr	4,80	4,70	4,71
trainbfg	4,63	4,60	4,50
trainrp	5,14	4,84	4,74
trainscg	5,94	2,98	4,52
traincgb	5,48	2,55	2,25
traincgf	3,06	1,83	4,37
traincgp	3,77	2,06	1,10
trainoss	2,18	1,53	4,71
traingdx	13,62	4,15	4,68
traingdm	178,26	4,13	4,68
traingd	178,26	4,13	4,68

Fonte: AUTOR (2021).

Nota-se na Tabela 4.6, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor resultado com o menor MAE. Medindo a dissimilaridade entre os valores observados e os valores estimados pela RNA. O gráfico da Figura 4.4, visualiza os valores do MAE calculados.

Figura 4.4 - Gráfico do MAE.



Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar no gráfico da Figura 4.4, a evolução dos valores de MAE das simulações executadas com a melhor combinação de função de treinamento com função de transferência para traincgp/logsig. A Tabela 4.7, apresenta os valores calculados da Raiz Quadrada do Erro Quadrático Médio Normalizado (NRMSE) de cada combinação de funções de Treinamento (FTrain) com funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

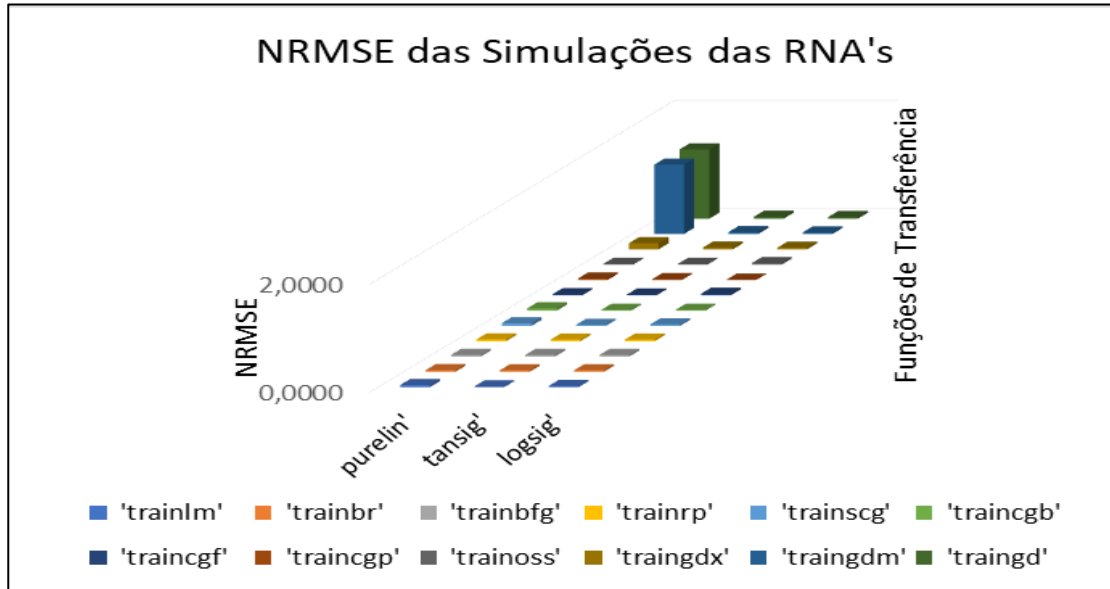
Tabela 4.7 - Valores do NRMSE das simulações das RNA's.

FTrain \ FTrans	purelin	tansig	logsig
trainlm	0,0414	0,0168	0,0241
trainbr	0,0322	0,0309	0,0309
trainbfg	0,0312	0,0308	0,0309
trainrp	0,0337	0,0315	0,0316
trainscg	0,0514	0,0215	0,0301
traincgb	0,0418	0,0166	0,0168
traincgp	0,0218	0,0147	0,0306
trainoss	0,0161	0,0134	0,0311
traingdx	0,1135	0,0356	0,0307
traingdm	1,2852	0,0362	0,0307
traingd	1,2852	0,0362	0,0307

Fonte: AUTOR (2021).

Demonstrasse na Tabela 4.7, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor resultado para o NRMSE. O gráfico da figura 4.5, visualiza os valores do NRMSE calculados.

Figura 4.5 - Gráfico do NRMSE.



Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar no gráfico da Figura 4.5, a evolução dos valores de NRMSE das simulações executadas com a melhor combinação de função de treinamento com função de transferência para traincgp/logsig. Na tabela 4,8, apresenta os valores calculados do Erro Percentual Médio Absoluto (MAPE) de cada combinação de Funções de Treinamento (FTrain) com Funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

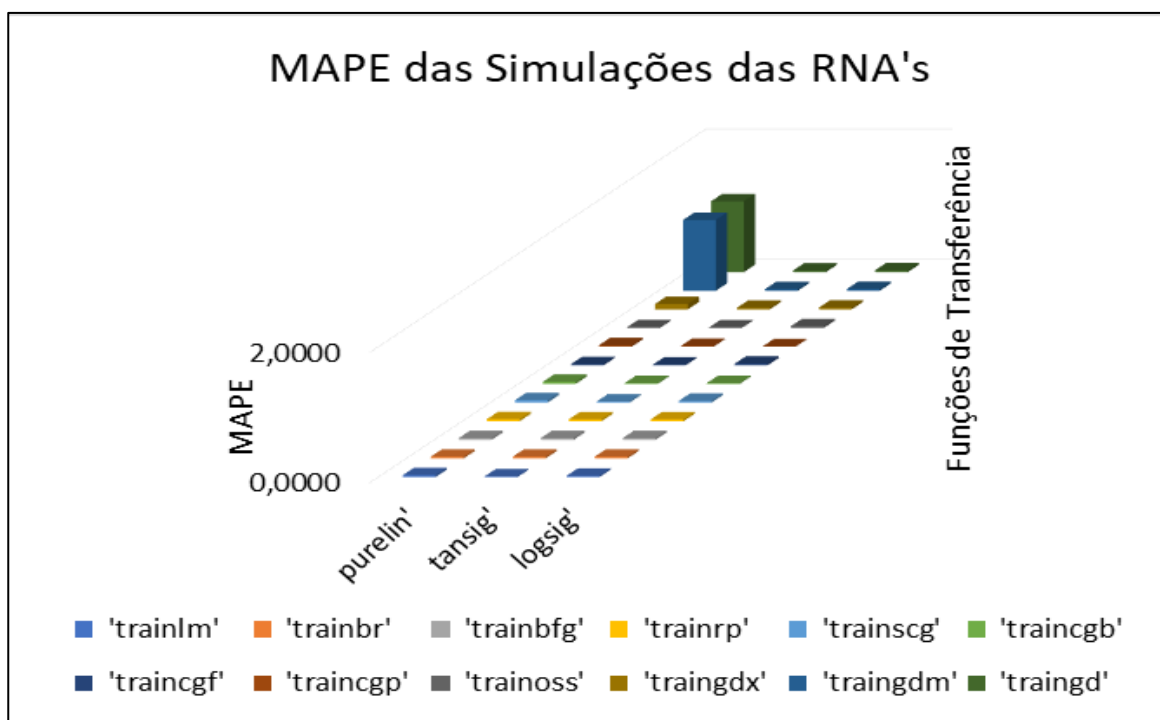
Tabela 4.8 - Valores do MAPE das simulações das RNA's.

FTrain \ FTrans	purelin	tansig	logsig
trainlm	0,0302	0,0128	0,0212
trainbr	0,0284	0,0282	0,0282
trainbfg	0,0279	0,0277	0,0271
trainrp	0,0309	0,0291	0,0286
trainscg	0,0361	0,0181	0,0272
traincgb	0,0336	0,0153	0,0136
traincgf	0,0183	0,0109	0,0266
traincgp	0,0228	0,0122	0,0066
trainoss	0,0130	0,0091	0,0283
traingdx	0,0832	0,0252	0,0280
traingdm	1,0879	0,0251	0,0280
traingd	1,0879	0,0251	0,0280

Fonte: AUTOR (2021).

Exibisse na Tabela 4.8, que a combinação da função de treinamento (traincgp - Polak-Ribière Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a de melhor resultado para o MAPE. O gráfico da Figura 4.6, visualiza os valores do MAPE calculados.

Figura 4.6 - Gráfico do MAPE



Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar no gráfico da Figura 4.6, a evolução dos valores de MAPE das simulações executadas com a melhor combinação de função de treinamento com função de transferência para traincgp/logsig.

A Tabela 4.9, apresenta os valores calculados das estatísticas de dispersão dos erros residuais de cada combinação de funções de Treinamento (FTrain) com funções de Transferência (FTrans) após as simulações.

Tabela 4.9 - Valores do Erro Residual das simulações das RNA's.

n°	Funções		Erro residual da RNA									
			7,8E-01	8,0E+00	9,2E+00	1,6E+00	2,4E+00	9,6E-01	4,4E-01	3,9E+00	3,5E-01	2,6E+00
1	'trainlm'	purelin'	7,8E-01	8,0E+00	9,2E+00	1,6E+00	2,4E+00	9,6E-01	4,4E-01	3,9E+00	3,5E-01	2,6E+00
2	'trainlm'	tansig'	0,27	3,64	2,93	0,25	1,19	0,73	0,17	2,04	0,51	1,08
3	'trainlm'	logsig'	2,95	4,16	3,97	3,09	0,90	0,48	0,67	1,74	1,52	1,72
4	'trainbr'	purelin'	1,86	2,26	2,11	1,39	1,23	1,80	3,78	4,51	5,03	4,42
5	'trainbr'	tansig'	3,79	3,76	3,75	3,14	0,03	0,54	2,87	3,42	3,43	3,43
6	'trainbr'	logsig'	3,69	3,69	3,69	3,05	0,04	0,63	2,94	3,50	3,50	3,50
7	'trainbfg'	purelin'	5,34	3,31	3,00	4,38	0,12	0,57	2,38	2,62	2,95	3,21
8	'trainbfg'	tansig'	4,38	3,95	3,95	3,74	0,22	0,03	2,39	2,86	2,96	3,18
9	'trainbfg'	logsig'	5,92	1,67	1,57	5,23	1,65	1,45	1,83	1,66	2,44	3,70
10	'trainrp'	purelin'	2,60	5,29	5,73	2,36	1,10	1,23	2,74	3,73	3,19	2,93

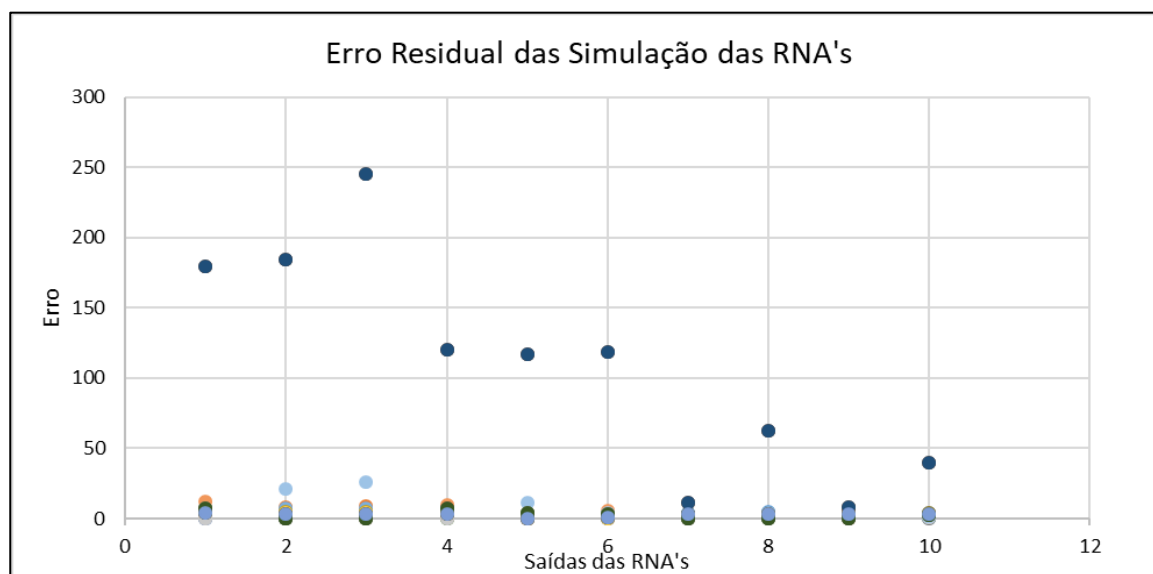
n°	Funções		Erro residual da RNA									
11	'trainrp'	tansig'	3,84	4,46	4,46	3,20	0,71	0,48	2,62	3,34	3,09	2,89
12	'trainrp'	logsig'	4,77	4,34	4,32	4,10	0,63	0,38	2,08	2,56	2,68	2,75
13	'trainscg'	purelin'	11,94	0,13	1,84	9,52	1,68	5,37	0,56	0,74	1,57	2,77
14	'trainscg'	tansig'	4,16	2,27	2,22	3,71	1,01	0,07	0,75	1,96	0,85	1,12
15	'trainscg'	logsig'	4,10	3,72	3,68	3,49	0,07	0,20	2,53	3,07	3,09	3,21
16	'traincgb'	purelin'	5,79	7,27	7,50	5,36	3,21	1,66	0,30	1,12	0,67	0,71
17	'traincgb'	tansig'	2,44	0,77	0,68	2,34	2,18	1,11	1,85	1,81	1,48	0,58
18	'traincgb'	logsig'	3,17	0,31	1,54	3,46	1,46	0,62	0,70	0,54	0,71	1,11
19	'traingcf'	purelin'	2,60	2,23	1,00	2,06	0,41	1,13	0,64	1,31	4,52	2,36
20	'traingcf'	tansig'	1,77	0,30	0,27	1,14	0,70	2,32	0,11	3,03	1,22	0,04
21	'traingcf'	logsig'	4,67	5,06	4,77	4,05	1,71	0,48	0,74	1,93	1,85	1,32
22	'traingcp'	purelin'	5,12	2,45	0,75	4,59	0,28	3,35	0,93	0,69	3,49	1,10
23	'traingcp'	tansig'	0,62	0,27	0,49	0,01	2,11	3,33	1,09	2,98	0,52	0,78
24	'traingcp'	logsig'	0,00	0,75	0,80	0,81	0,34	0,65	0,60	0,70	1,06	0,84
25	'trainoss'	purelin'	1,66	1,97	0,21	0,71	0,25	1,62	0,07	1,73	3,17	1,59
26	'trainoss'	tansig'	0,29	1,46	0,11	0,31	0,40	3,14	0,69	2,12	0,01	0,56
27	'trainoss'	logsig'	3,85	3,86	3,93	3,21	0,05	0,48	2,80	3,35	3,36	3,39
28	'traingdx'	purelin'	4,12	20,94	26,33	6,85	11,56	3,96	2,76	3,69	1,12	1,92
29	'traingdx'	tansig'	7,40	0,37	0,37	6,74	3,93	2,93	0,12	0,05	0,51	2,82
30	'traingdx'	logsig'	3,76	3,63	3,64	3,11	0,07	0,57	2,89	3,44	3,45	3,48
31	'traingdm'	purelin'	179,90	184,30	245,41	120,59	116,95	118,82	11,34	62,68	8,49	39,46
32	'traingdm'	tansig'	7,65	0,12	0,12	6,98	3,69	3,16	0,35	0,18	0,28	2,58
33	'traingdm'	logsig'	3,76	3,63	3,64	3,11	0,07	0,57	2,89	3,44	3,45	3,48
34	'traingd'	purelin'	179,90	184,30	245,41	120,59	116,95	118,82	11,34	62,68	8,49	39,46
35	'traingd'	tansig'	7,65	0,12	0,12	6,98	3,69	3,16	0,35	0,18	0,28	2,58
36	'traingd'	logsig'	3,76	3,63	3,64	3,11	0,07	0,57	2,89	3,44	3,45	3,48

Fonte: AUTOR (2021).

Pode-se observar na Tabela 4.9, que a combinação da função de treinamento (traingcp - Polak-Ribiére Conjugado Gradiente) com a função de transferência logsig foi a que obteve o melhor resultado para o Erro Residual.

O gráfico da Figura 4.7, visualiza os valores do Erro Residual calculados.

Figura 4.7 - Gráfico do Erro Residual.

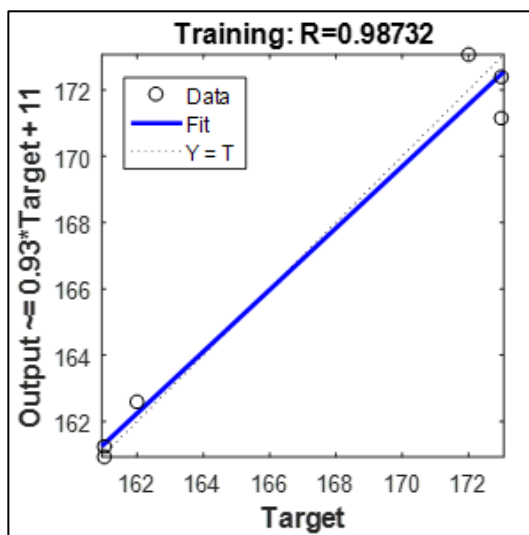


Fonte: AUTOR (2021).

Revelasse no gráfico da Figura 4.7, que a maioria dos erros residuais das simulações executadas, estão entre **0 e 20** com a melhor combinação de função de treinamento com função de transferência para `traincgp/logsig`, com valores se aproximando de **0**.

No gráfico da Figura 4.8, é visualizado o gráfico do teste de regressão para o treinamento da rede utilizada.

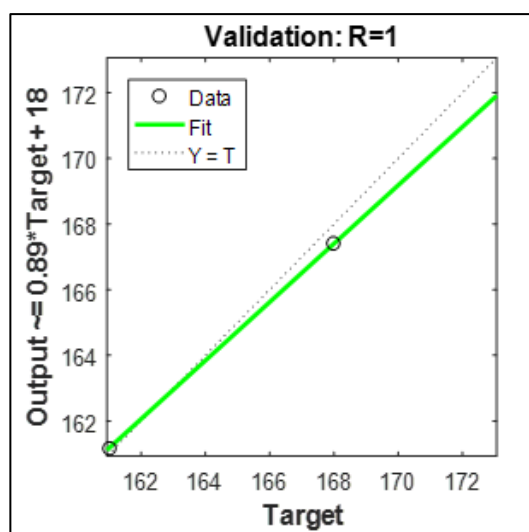
Figura 4.8 - Teste de Regressão do Treinamento da Rede.



Fonte: AUTOR (2021).

A validação da qualidade do treinamento da rede pode ser analisada pela regressão dos aspectos do treinamento da rede, em que quanto mais próximo de **1**, melhor é o treinamento, comparando a saída desejada com a obtida. No gráfico da Figura 4.9, é visualizado o gráfico do teste de regressão da validação da rede.

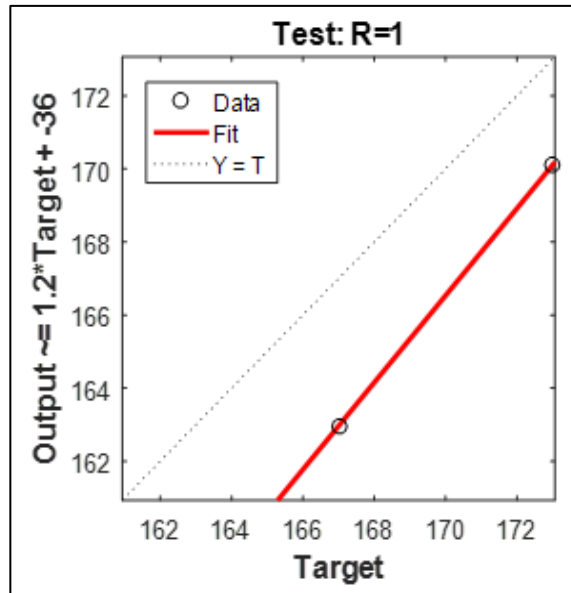
Figura 4.9 - Teste de Regressão da Validação da Rede.



Fonte: AUTOR (2021).

Para a análise da regressão dos aspectos de validação da rede, também pode-se considerar que quanto mais próximo de **1** melhor é a validação. No gráfico da Figura 4.10, é visualizado o gráfico de regressão para o teste da Rede.

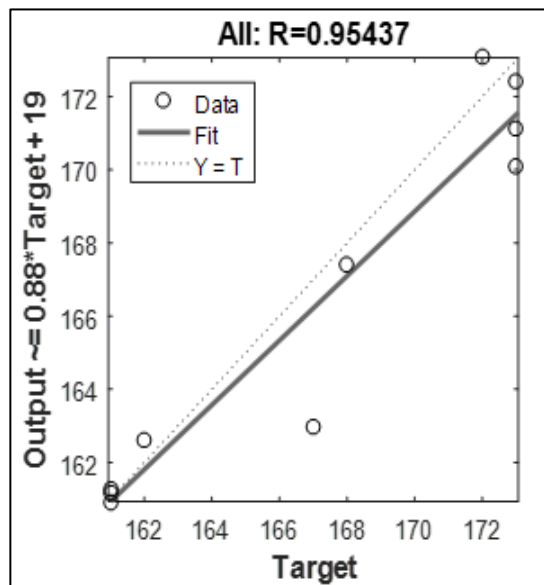
Figura 4.10 - Regressão do Teste da Rede.



Fonte: AUTOR (2021).

A análise da regressão do aspecto de teste da rede, também pode-se considerar que quanto mais próximo de **1**, melhor é o teste. No gráfico da Figura 4.11, é visualizado o gráfico de regressão para os três aspectos em conjuntos da rede.

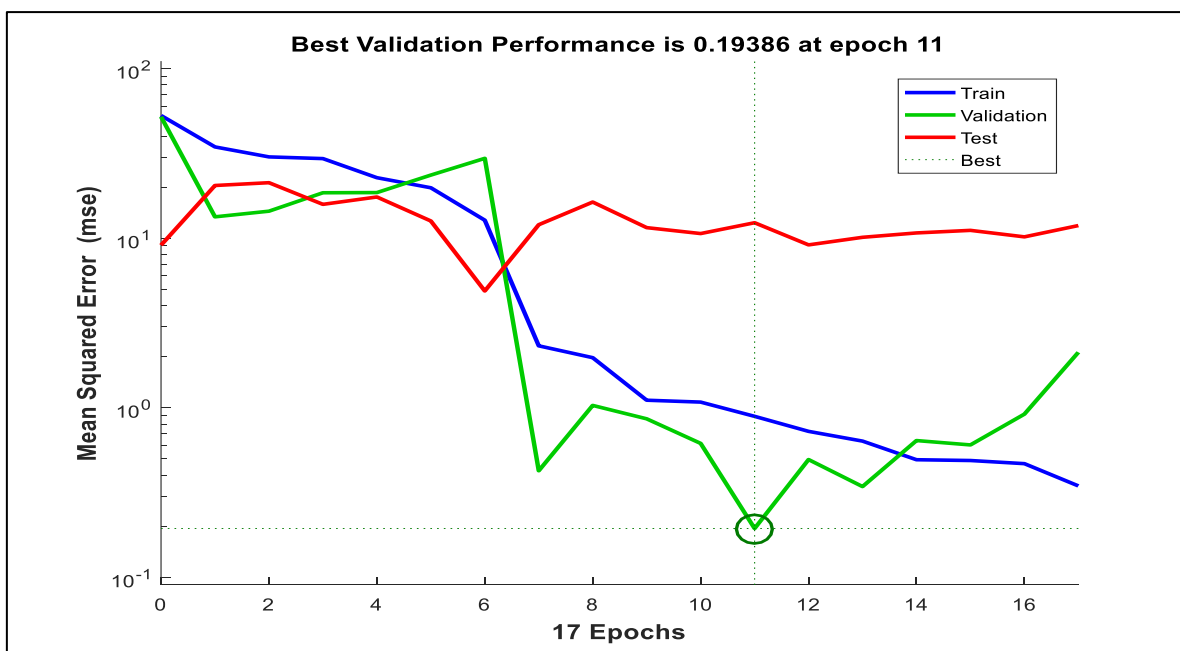
Figura 4.11 - Regressão dos Aspectos em Conjunto da Rede.



Fonte: AUTOR (2021).

Outra forma de validação da qualidade da rede é a análise do gráfico que apresenta o melhor desempenho de validação, em que consiste no comparativo do melhor resultado comparado com o comportamento do treinamento, da validação e do teste na fase de treinamento (Gráfico da Figura 4.12).

Figura 4.12 - Melhor Valor de Validação da Performance.



Fonte: AUTOR (2021).

Na Figura 4.12, pode-se visualizar a melhor performance da validação, do treinamento e dos testes alcançados com 41 evoluções (*Epochs*). Observa-se que após algumas tentativas para treinar a rede que a validação ficou próximo de **0**, ou seja, **0,19386** um resultado esperado dado ao tamanho do conjunto de valores de entrada para o treinamento e teste da rede.

As simulações e as análises estatísticas da rede, apresentam um grau significativo de confiabilidade na especificação do modelo de Rede Neural Artificial implementado para a avaliação da geração do acetaldeído na fabricação da pré-forma de embalagens PET, podendo ser utilizada como uma ferramenta para o auxílio da tomada de decisão sobre os parâmetros do processo de fabricação.

CAPÍTULO 5

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

5.1 CONCLUSÕES

Neste estudo foi apresentada a implementação de uma das Redes Neurais Artificiais para prevenção da geração de Acetaldeído pelo controle da temperatura do silo de secagem da máquina injetora do polímero PET. A análise do processo de produção da pré-forma de polímero PET, mostrou-se essencial para definição dos parâmetros (variáveis do modelo) que influenciam o aumento da temperatura do Silo e conseqüentemente a geração de Acetaldeído, a especificação de um modelo de RNA para predição da formação de Acetaldeído durante o processo de produção mostrou-se como uma ferramenta eficaz para auxílio na tomada de decisão no gerenciamento do processo. A partir, da avaliação do modelo de RNA proposto, pode-se concluir que as informações geradas pela simulação do processo pela rede proposta, é essencial para a prevenção da geração de Acetaldeído e redução do desperdício de matéria prima, custos operacionais e retrabalho para o fabricante.

As redes neurais do tipo *Feedforward* mostraram resultados que, de modo geral, a partir das informações iniciais do processo, que podem determinar qual temperatura final do silo, garantindo que a produção de pré-formas esteja com os níveis de acetaldeído dentro dos limites desejado para os padrões de qualidade especificados pelos fabricantes de bebidas, ou seja, com teor de Acetaldeído abaixo de **4 ppm**. Com base nesses resultados, pode-se dizer que a RNA do tipo *Feedforward* proposta, pode ser considerada como uma importante ferramenta no controle da temperatura do silo na produção de garrafas PET's.

5.2 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Para trabalhos futuros, sugere-se a busca de uma interligação do sistema Neuro Fuzzy com os controles da máquina injetora, para que se realize um controle automático sincronizado com os sensores de controle de temperatura, tornando um sistema totalmente automatizado. Além da aplicação de outras técnicas de Inteligência Artificial tais como:

- Algoritmos Genéticos;
- Otimização com algoritmo do Lobo Cinzento;
- NSGA II e outras metaheurísticas.

REFERÊNCIAS

- ABDI, H. A neural network primer. **Journal of Biological Systems**, 2, n. 03, p. 247-281, 1994.
- AKSHAYA, E. M.; PALANIAPPAN, R.; SOWMYA, C. F.; RASANA, N. *et al.* Properties of Blends from Polypropylene and Recycled Polyethylene Terephthalate using a Compatibilizer. **Materials Today: Proceedings**, 24, p. 359-368, 2020/01/01/ 2020.
- ANJOS, C. A. R. INFLUENCE OF THE PROCESS IN THE GENERATION OF ACETALDEHYDE AND RESIDUAL LEVELS IN POLY (ETHYLENE TEREPHTHALATE) (PET) PACKAGING AND DRINKS. **Revista Brasileira de engenharia de Biosistemas**, 3, p. 277 - 290, 2007.
- BACH, C.; DAUCHY, X.; CHAGNON, M.-C.; ETIENNE, S. Chemical compounds and toxicological assessments of drinking water stored in polyethylene terephthalate (PET) bottles: A source of controversy reviewed. **Water Research**, 46, n. 3, p. 571-583, 2012/03/01/ 2012.
- BELCHER, S. L. 13 - Blow Molding. *In*: KUTZ, M. (Ed.). **Applied Plastics Engineering Handbook (Second Edition)**: William Andrew Publishing, 2017. p. 265-289.
- BINOTI, M. L. M. d. S.; LEITE, H. G.; BINOTI, D. H. B.; GLERIANI, J. M. Prognose em nível de povoamento de clones de eucalipto empregando redes neurais artificiais. **Cerne**, 21, n. 1, p. 97-105, 2015.
- BRAGA, A. d. P.; CARVALHO, A. P. d. L. E. d.; LUDERMIR, T. B. Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações. **LTC - LIVROS TÉCNICOS E CIENTÍFICOS EDITORA S.A.**, 1, n. 1, p. 237, 2000.
- ĆALASAN, M.; ABDEL ALEEM, S. H. E.; ZOBAA, A. F. On the root mean square error (RMSE) calculation for parameter estimation of photovoltaic models: A novel exact analytical solution based on Lambert W function. **Energy Conversion and Management**, 210, p. 112716, 2020/04/15/ 2020.

CARRIERI, G.; DE BONIS, M. V.; RUOCCO, G. Modeling and experimental validation of mass transfer from carbonated beverages in polyethylene terephthalate bottles. **Journal of Food Engineering**, 108, n. 4, p. 570-578, 2012/02/01/ 2012.

CHAN, P. M. n. J.; MEHRALIZADEH, M. Forecasting East Asian Indices Futures via a Novel Hybrid of Wavelet-PCA Denoising and Artificial Neural Network Models. **PLoS ONE**, 11, n. 6, p. e0156338, 2016.

CHAVES, M. L.; MÁRQUEZ, J. J.; PÉREZ, H.; SÁNCHEZ, L. *et al.* Intelligent Decision System Based on Fuzzy Logic Expert System to Improve Plastic Injection Molding Process. *In: PÉREZ GARCÍA, H.; ALFONSO-CENDÓN, J., et al (Ed.). International Joint Conference SOCO'17-CISIS'17-ICEUTE'17 León, Spain, September 6–8, 2017, Proceeding.* Cham: Springer International Publishing, 2018. p. 57-67.

ELSHEIKHI, S. A.; BENYOUNIS, K. Y. Review of Recent Developments in Injection Molding Process for Polymeric Materials. *In: Reference Module in Materials Science and Materials Engineering*: Elsevier, 2016.

EWENDER, J.; FRANK, W. Determination of the Migration of Acetaldehyde from PET Bottles into Noncarbonated and Carbonated Mineral Water. **Fraunhofer Institute for Process Engineering and Packaging (IVV), Giggenhauser Straße 35, 85354 Freising, Germany,, 2008.**

FERNEDA, E. Redes neurais e sua aplicação em sistemas de recuperação de informação. **Ciência da Informação**, 35, n. 1, p. 25-30, 2006.

FLORENCIO, F. d. A.; MORENO, E. D.; MACEDO, H. T.; SALGUEIRO, R. J. P. d. B. *et al.*, 2018, **Intrusion Detection via MLP Neural Network Using an Arduino Embedded System.** 190-195.

FRÍAS-PAREDES, L.; MALLOR, F.; GASTÓN-ROMEO, M.; LEÓN, T. Assessing energy forecasting inaccuracy by simultaneously considering temporal and absolute errors. **Energy Conversion and Management**, 142, p. 533-546, 2017/06/15/ 2017.

GALARÇA, S. P.; LIMA, C. S. M.; SILVEIRA, G. d.; RUFATO, A. D. R. Correlação de Pearson e análise de trilha identificando variáveis para caracterizar porta-enxerto de *Pyrus communis* L. **Ciência e Agrotecnologia**, 34, n. 4, p. 860-869, 2010.

GALO, G. S.; VALENTE, M. L. d. C.; BACHMANN, L.; DOS REIS, A. C. Use of polyethylene terephthalate as a prosthetic component in the prosthesis on an overdenture implant. **Materials Science and Engineering: C**, 99, p. 1341-1349, 2019/06/01/ 2019.

GONÇALVES, R. M.; COELHO, L. d. S.; KRUEGER, C. P.; HECK, B. Modelagem preditiva de linha de costa utilizando redes neurais artificiais. **Boletim de Ciências Geodésicas**, 16, n. 3, p. 420-444, 2010.

HADDADI, F.; KHANCHI, S.; SHETABI, M.; DERHAMI, V., 2010, **Intrusion Detection and Attack Classification Using Feed-Forward Neural Network**. 262-266.

HAGHNAZARI, F.; KARANDISH, F.; DARZI-NAFTCHALI, A.; ŠIMŮNEK, J. Dynamic assessment of the impacts of global warming on nitrate losses from a subsurface-drained rainfed-canola field. **Agricultural Water Management**, 242, p. 106420, 2020/12/01/ 2020.

HAN, M. 5 - Depolymerization of PET Bottle via Methanolysis and Hydrolysis. *In*: THOMAS, S.; RANE, A., *et al* (Ed.). **Recycling of Polyethylene Terephthalate Bottles**: William Andrew Publishing, 2019. p. 85-108.

HOREWICZ, M. C.; NASCIMENTO JR, C. L. Utilização de Aprendizado por Reforço para Aprender a Estratégia do Jogo da Velha. **Xii Encita: 12º Encontro de Iniciação Científica e Pós-Graduação do ITA. São José dos Campos**, p. 1-8, 2006.

ISHAQUE, W.; SHELIA, V.; ANOTHAI, J.; ZAMAN, M. *et al*. Determining optimum nitrogen management as a function of planting date for spring wheat (*Triticum aestivum* L.) under semi-arid conditions using a modeling approach. **Journal of Arid Environments**, 182, p. 104256, 2020/11/01/ 2020.

JANG, Y.-C.; LEE, G.; KWON, Y.; LIM, J.-h. *et al*. Recycling and management practices of plastic packaging waste towards a circular economy in South Korea. **Resources, Conservation and Recycling**, 158, p. 104798, 2020/07/01/ 2020.

KOSCHEVIC, M. T.; BITTENCOURT, P. R. S. Meio ambiente e materiais poliméricos: Breves considerações com ênfase ao Politereftalato de Etileno (PET) e processos de degradação. **Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia**, 2, n. 14, p. 21, 2016.

LABATI, R. D.; GENOVESE, A.; MUNOZ, E.; PIURI, V. *et al.* Computational Intelligence for Industrial and Environmental Applications. **IEEE 8th International Conference on Intelligent Systems**, 2016.

LONTOS, A.; GREGORIOU, A. The effect of the deformation rate on the wall thickness of 1.5LT PET bottle during ISBM (Injection Stretch Blow Molding) process. **Procedia CIRP**, 81, p. 1307-1312, 2019/01/01/ 2019.

MANUAL TÉCNICO RESINA PET, M. G. M&G. Manual Técnico Resina PET. **M&G Polímeros Brasil S.A.**, 2009.

MISHRA, M.; BYOMAKESHA DASH, P.; NAYAK, J.; NAIK, B. *et al.* Deep learning and wavelet transform integrated approach for short-term solar PV power prediction. **Measurement**, 166, p. 108250, 2020/12/15/ 2020.

NASSER, A. L. M.; LOPES, L. M. X.; MONTEIRO, M. Oligômeros em embalagem de PET para água mineral e suco de fruta. uma revisão. **Alimentos e Nutrição Araraquara**, 16, n. 2, p. 183-194, 2009.

NISTICÒ, R. Polyethylene terephthalate (PET) in the packaging industry. **Polymer Testing**, 90, p. 106707, 2020/10/01/ 2020.

ÖZLEM, K. E. Acetaldehyde migration from polyethylene terephthalate bottles into carbonated beverages in Türkiye. **International Journal of Food Science & Technology**, 43, n. 2, p. 333-338, 2008.

PAGANIN, L. C.; BARBOSA, G. F. A comparative experimental study of additive manufacturing feasibility faced to injection molding process for polymeric parts. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, 109, n. 9, p. 2663-2677, 2020/08/01 2020.

PAIVA, E. J. d.; RODRIGUES, L. d. O.; COSTA, S. C. d.; PAIVA, A. P. d. *et al.* Otimização do processo de soldagem FCAW usando o Erro Quadrático Médio Multivariado. **Soldagem & Inspeção**, 15, n. 1, p. 31-40, 2010.

PEIXOTO, F. L.; AHRENS, C. H.; SALMORIA, G. V. APLICAÇÃO DO PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO SOBRE INSERTOS DE TERMOPLÁSTICO (SOBREINJEÇÃO) EM MOLDES DE FABRICAÇÃO RÁPIDA. 2011.

PIRA, S. Sustainability and lightweighting are key areas in the developing PET packaging market. <https://www.smitherspira.com/resources/2017/april/key-areas-in-pet-packaging>, 2017.

ROMÃO, W.; SPINACÉ, M. A.; PAOLI, M.-A. D. Poly (ethylene terephthalate), PET: a review on the synthesis processes, degradation mechanisms and its recycling. **Polímeros**, 19, n. 2, p. 121-132, 2009.

ROSATO, D. V. D. V., Matthew V. . Plastic Product Material and Process Selection Handbook. Ed. **Elsievier Science & Tecnology Books**, 2004.

SAHA TCHINDA, B.; TCHIOTSOP, D.; NOUBOM, M.; LOUIS-DORR, V. *et al.* Retinal blood vessels segmentation using classical edge detection filters and the neural network. **Informatics in Medicine Unlocked**, 23, p. 100521, 2021/01/01/ 2021.

SERINÇAY, N.; FELLAH, M. F. Acetaldehyde adsorption and detection: A density functional theory study on Al-doped graphene. **Vacuum**, 175, p. 109279, 2020/05/01/ 2020.

SERIO, R. N.; GUDAS, L. J. Modification of stem cell states by alcohol and acetaldehyde. **Chemico-Biological Interactions**, 316, p. 108919, 2020/01/25/ 2020.

SUN, C.-H.; CHEN, J.-H.; SHEU, L.-J. Quality control of the injection molding process using an EWMA predictor and minimum–variance controller. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, 48, n. 1, p. 63-70, 2010/04/01 2010.

WANG, J.; CHEN, P.; ZHENG, N.; CHEN, B. *et al.* Associations between MSE and SSIM as cost functions in linear decomposition with application to bit allocation for sparse coding. **Neurocomputing**, 422, p. 139-149, 2021/01/21/ 2021.

WYTHOFF, B. J. Backpropagation neural networks: a tutorial. **Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems**, 18, n. 2, p. 115-155, 1993.

X. CHENA, Y. C. L., D.Q. Lib. Analysis of thermal residual stress in plastic injection molding. **Journal of Materials Processing Technology**, 2000.

XU, Y.; ZHANG, Q.; ZHANG, W.; ZHANG, P. Optimization of injection molding process parameters to improve the mechanical performance of polymer product against impact. **The International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, 76, n. 9, p. 2199-2208, 2015/02/01 2015.

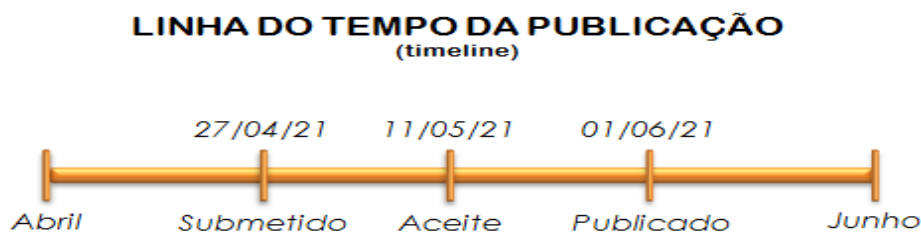
YADAV, A.; YADAV, K.; ANIRBID, S. Feedforward Neural Network for Joint Inversion of Geophysical data to Identify Geothermal Sweet Spots in Gandhar, Gujarat, India. **Energy Geoscience**, 2021/01/20/ 2021.

APÊNDICES

APÊNDICE A - ARTIGO PUBLICADO

Artigo publicado “*Artificial Neural Networks for Predicting the Generation of Acetaldehyde in Pet Resin in the Process of Injection of Plastic Packages*”, na Revista Internacional de Inovação, Educação e Pesquisa (*International Journal for Innovation Education and Research* – ISSN: 2411-2933 / Qualis: A2). DOI: <https://doi.org/10.31686/ijier.vol9.iss6.3150>, vol. 9, nº. 6, de 01 de junho 2021.

Cronologia da publicação – linha do tempo (timeline): Artigo submetido em 27/04/2021, aceito em 11/05/2021 e publicado em: 01/06/2021.



APÊNDICE B - TERMO DE AUTENTICIDADE



Termo de Declaração de Autenticidade de Autoria

Declaro, sob as penas da lei e para os devidos fins, junto ao *Instituto de Tecnologia e Educação Galileo da Amazônia-ITEGAM*, que meu Trabalho de Dissertação apresentado ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Gestão de Processos, Sistemas e Ambiental - PPG.EGPSA, para obtenção do título de *Mestre* é original, de minha única e exclusiva autoria. E não se trata de cópia integral ou parcial de textos e trabalhos de autoria de outrem, seja em formato de papel, eletrônico, digital, fotográfico, audiovisual ou qualquer outro meio.

Declaro ainda ter total conhecimento e compreensão do que é considerado plágio, não apenas a cópia integral do trabalho, mas também de parte dele, inclusive de artigos e/ou parágrafos, sem citação do autor ou de sua fonte.

Declaro, por fim, ter total conhecimento e compreensão das penalidades previstas decorrentes das ações da prática de plágio, através das sanções civis previstas na lei do direito autoral¹ e criminais previstas no Código Penal², combinadas com as cominações administrativas e acadêmicas que poderão resultar em reprovação no Trabalho de Conclusão de Curso.

Manaus, 24 de agosto de 2021.

Mauro Reis Nascimento

NOME DO MESTRANDO

2070

MATRÍCULA

ASSINATURA

441.263.102-82

CPF

¹ **LEI Nº 9.610, DE 19 DE FEVEREIRO DE 1998.** Altera, atualiza e consolida a legislação sobre direitos autorais e dá outras providências.

² **Art. 184.** Violar direitos de autor e os que lhe são conexos: Pena – detenção, de 3 (três) meses a 1 (um) ano, ou multa.