



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

**MODELAGEM DOS PARÂMETROS SEPARATIVOS DE  
ULTRACENTRÍFUGAS PARA ENRIQUECIMENTO DE URÂNIO  
ATRAVÉS DE MODELOS DE REDES NEURAIIS HÍBRIDAS**

**MARIA URSULINA DE LIMA CRUS**

Dissertação apresentada como parte  
dos requisitos para obtenção do Grau  
de Mestre em Ciências na Área de  
Tecnologia Nuclear - Materiais.

Orientadora:  
Dra. Sylvana C. P. Migliavacca

**São Paulo  
2005**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

**MODELAGEM DOS PARÂMETROS SEPARATIVOS DE  
ULTRACENTRÍFUGAS PARA ENRIQUECIMENTO DE URÂNIO  
ATRAVÉS DE MODELOS DE REDES NEURAIIS HÍBRIDAS**

MARIA URSULINA DE LIMA CRUS



Dissertação apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Mestre em Ciências na Área de Tecnologia Nuclear-Materiais

Orientadora: Dra. Sylvana C. P. Migliavacca

**SÃO PAULO**

**2005**

## **AGRADECIMENTOS**

Agradeço a minha orientadora Dra. Sylvana C. P. Migliavacca, pela correção e orientação deste trabalho; pelo incentivo e confiança durante esse período.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN) e ao Centro Tecnológico da Marinha em São Paulo (CTMSP), por possibilitarem a realização e desenvolvimento deste trabalho.

Agradeço ao Dr. Cláudio A. Oller do Nascimento por permitir o uso do programa NEURO 14 e colaborar com valiosas recomendações.

Aos meus colegas do CTMSP-II que, direta ou indiretamente, colaboraram com este trabalho, de modo especial ao amigo E.R.F.Silva pelo incentivo e companheirismo. E aos amigos E.Migliavacca e J.P.Gigi por toda a ajuda e críticas sempre tão oportunas.

Agradeço e dedico este trabalho aos meus pais que sempre me incentivaram com muito carinho.

# MODELAGEM DOS PARÂMETROS SEPARATIVOS DE ULTRACENTRÍFUGAS PARA ENRIQUECIMENTO DE URÂNIO ATRAVÉS DE MODELOS DE REDES NEURAS HÍBRIDAS

Maria Ursulina de Lima Crus

## RESUMO

Neste trabalho é desenvolvida uma metodologia de utilização de redes neurais associadas à resolução da equação fundamental de difusão-convecção, que representa o escoamento interno de uma ultracentrífuga a contracorrente com o objetivo de se obter os parâmetros internos de fluxo utilizados no cálculo do poder de separação  $\delta U$ . Assim, os parâmetros de escoamento interno da ultracentrífuga são resultados da modelagem feita em função das variáveis experimentalmente controladas, das características físicas de um equipamento e dos dados experimentais que perfazem um conjunto de 573 experimentos, obtidos na investigação do processo de separação isotópica de urânio por ultracentrifugação. As variáveis de controle com influência significativa nos valores de  $\delta U$  são: o fluxo de alimentação  $F$ , o corte  $\theta$  e a pressão na linha de produto  $P_p$ . As características físicas consideradas são o raio do coletor de rejeito  $r_w$ , o diâmetro do disco girante  $D_S$  e o ponto de alimentação  $Z_E$  de material na ultracentrífuga. Após o treinamento da rede neural híbrida, procedeu-se à análise dos valores de  $\delta U$  obtidos em relação aos valores reais, validando assim o modelo obtido. A metodologia desenvolvida pode ser empregada a outros processos, adaptando-se a parte fenomenológica do modelo.

# **GAS ULTRACENTRIFUGE SEPARATIVE PARAMETERS MODELING USING HYBRID NEURAL NETWORKS**

**Maria Ursulina de Lima Crus**

## **ABSTRACT**

A hybrid neural network is developed for the calculation of the separative performance of an ultracentrifuge. A feedforward neural network is trained to estimate the internal flow parameters of a gas ultracentrifuge, and then these parameters are applied in the diffusion equation. For this study, a 573 experimental data set is used to establish the relation between the separative performance and the controlled variables. The process control variables considered are: the feed flow rate  $F$ , the cut  $\theta$  and the product pressure  $P_P$ . The mechanical arrangements consider the radial waste scoop dimension, the rotating baffle size  $D_S$  and the axial feed location  $Z_E$ . The methodology was validated through the comparison of the calculated separative performance with experimental values. This methodology may be applied to other processes, just by adapting the phenomenological procedures.

## SUMÁRIO

	<b>Página</b>
<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO..... 1</b>
<b>2</b>	<b>OBJETIVOS..... 3</b>
<b>3</b>	<b>TEORIA DO PROCESSO DE ULTRACENTRIFUGAÇÃO..... 4</b>
3.1	Conceitos fundamentais da separação isotópica..... 5
3.2	Fatores de separação da unidade de separação de isótopos..... 8
3.3	Corte da unidade de separação..... 9
3.4	Poder de separação da unidade de separação..... 10
3.5	Descrição do processo de ultracentrifugação..... 12
<b>4</b>	<b>METODOLOGIA..... 16</b>
4.1	Obtenção dos dados experimentais..... 16
4.2	Redes neurais..... 18
4.2.1	Modelo de neurônio..... 19
4.2.2	Arquitetura de rede..... 21
4.2.3	Redes neurais de múltiplas camadas com algoritmo de retropropagação..... 24
4.2.4	Algoritmo de retropropagação..... 27

4.2.5	Considerações práticas para o uso de redes neurais artificiais.....	36
4.3	Aplicações de redes neurais artificiais.....	37
4.4	Redes neurais híbridas.....	39
4.4.1	Alteração do algoritmo de retropropagação para a rede neural híbrida..	44
4.5	Validação do modelo de redes neurais híbridas.....	45
4.6	Parte fenomenológica: FENOM.....	47
4.7	Método adotado de utilização de rede neural para substituir o FENOM (SIMSEP).....	47
<b>5</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO.....</b>	<b>49</b>
5.1	Histórico dos dados experimentais.....	49
5.2	Validação do modelo de redes neurais híbridas.....	49
5.3	Análise do modelo de rede neural híbrida. ....	54
5.3.1	Análise do modelo de rede neural híbrida para Bw constante.....	54
5.3.2	Análise do modelo de rede neural híbrida para Bw e Bs variáveis.....	60
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES.....</b>	<b>65</b>
<b>7</b>	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....</b>	<b>66</b>

<b>8</b>	<b>APÊNDICES.....</b>	<b>69</b>
8.1	Apêndice A – Descrição do cálculo dos parâmetros separativos pelo modelo fenomenológico (equação de difusão convecção para ultracentrífuga a contracorrente que representa a parte fenomenológica).....	69
8.2	Apêndice B – Valores normalizados das medidas das variáveis experimentais.....	72
8.3	Apêndice C – Descrição da rede neural alternativa para o cálculo dos parâmetros separativos pelo modelo fenomenológico (substituição do modelo fenomenológico).....	80



## LISTA DE FIGURAS

		<b>Página</b>
<b>Figura 3.1</b>	Esquema de um elemento de separação simples.....	8
<b>Figura 3.2</b>	Esquema de uma ultracentrífuga a contracorrente.....	12
<b>Figura 3.3</b>	Distribuição das pressões parciais no rotor da ultracentrífuga cujo diâmetro é 2.a. ....	13
<b>Figura 4.1</b>	Esquema genérico de uma estação de ensaio instrumentada...	16
<b>Figura 4.2.</b>	Esquema de um modelo de neurônio.....	20
<b>Figura 4.3</b>	Esquema de uma rede alimentada adiante do tipo camada única.....	22
<b>Figura 4.4</b>	Esquema de uma rede alimentada adiante, tipo múltiplas camadas, com apenas uma camada oculta.....	23
<b>Figura 4.5</b>	Arquitetura de rede de múltiplas camadas com duas ocultas....	26
<b>Figura 4.6</b>	Esquema de sinais funcionais de propagação e sinais de erro da retropropagação.....	27
<b>Figura 4.7.</b>	Representação do fluxo de informações dentro de uma MLP....	28
<b>Figura 4.8</b>	Diagrama de blocos do modelo de rede neural híbrida proposto para a modelagem dos parâmetros separativos de ultracentrífugas.....	40

<b>Figura 4.9</b>	Diagrama esquemático da rede neural híbrida para representação da separação efetuada por uma ultracentrífuga a contracorrente.....	41
<b>Figura 4.10</b>	Esquema do modelo de redes neurais híbridas.....	42
<b>Figura 4.11.</b>	Disposição dos dados para alimentação no programa NEURO HÍBRIDO.....	43
<b>Figura 4.12</b>	Esquema do modelo de redes neurais híbridas para adaptação do algoritmo de retropropagação.....	44
<b>Figura 4.13</b>	Esquema de rede neural híbrida para validação do modelo.....	46
<b>Figura 5.1</b>	Evolução de erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) da rede com 9 neurônios, ao longo de seu treinamento até 60000 apresentações.....	50
<b>Figura 5.2</b>	Dispersão dos valores obtidos para $\delta U$ experimentais e $\delta U$ calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 9 neurônios, e treinamento até 60000 apresentações.....	51
<b>Figura 5.3</b>	Dispersão dos valores obtidos para $R', R''$ experimentais e $R', R''$ calculados, gerados pela rede no modelo de rede neural híbrida, para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 9 neurônios, e treinamento até 60000 apresentações.....	52

- Figura 5.4** Distribuição dos valores de erros ( $\delta U$  experimental -  $\delta U$  calculado) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 9 neurônios.....53
- Figura 5.5** Esquema de rede neural híbrida para análise do modelo considerando  $B_w$  constante e  $B_s$  ajustado pela rede neural híbrida.....55
- Figura 5.6** Evolução do erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) para a rede com 12 neurônios, ao longo de seu treinamento até 50000 apresentações.....57
- Figura 5.7** Dispersão dos valores obtidos para  $\delta U$  experimentais e  $\delta U$  calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 50000 apresentações.....58
- Figura 5.8** Distribuição dos valores de erros ( $\delta U$  experimental -  $\delta U$  calculado) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 50000 apresentações..... 59
- Figura 5.9** Esquema de rede neural híbrida para análise do modelo considerando  $B_w$  e  $B_s$  variáveis e sendo ajustados pela rede neural híbrida.....60

- Figura 5.10** Evolução do erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) para a rede com 12 neurônios, ao longo de seu treinamento até 200000 apresentações .....62
- Figura 5.11** Dispersão dos valores obtidos para  $\delta U$  experimentais e  $\delta U$  calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 200000 apresentações.....62
- Figura 5.12** Distribuição dos valores de erros (  $\delta U$  experimental -  $\delta U$  calculado) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 200000 apresentações.....63
- Figura 8.1** Evolução de erro global ao longo do treinamento da rede neural com NH=15 para substituir o modelo fenomenológico.....81
- Figura 8.2** Dispersão dos valores calculados pelo modelo fenomenológico apresentados à rede ( $\delta U$  experimental) e os valores calculados pela rede treinada com NH=15 neurônios.....81
- Figura 8.3** Função distância referente ao treinamento da rede neural para substituir o modelo fenomenológico.....82

**LISTA DE TABELAS****Página**

<b>TABELA 3.1</b> Notação adotada para descrever as correntes da unidade de separação.....	7
<b>TABELA 3.2</b> Relações de pressões e fatores de separação para várias velocidades periféricas.....	14
<b>TABELA 4.1</b> Notação utilizada para redes de múltiplas camadas.....	29
<b>TABELA 5.1</b> Valores mínimos dos erros do conjunto de aprendizagem (RMST) e do conjunto de teste (RMSTT) com seus respectivos números de apresentações à rede neural, para diferentes números de neurônios na camada oculta (NH), adotando número máximo de apresentações igual a 60000.....	50
<b>TABELA 5.2</b> Valores dos erros mínimos para o conjunto de aprendizagem (RMST) e para o conjunto de teste (RMSTT) com os respectivos números de apresentações, para várias redes com diferentes números de neurônios na camada oculta (NH) e diferentes valores escolhidos para BW, sendo o número máximo de apresentações igual a 50000.....	56
<b>TABELA 5.3</b> Valores dos erros mínimos do conjunto de treinamento (RMST) e do conjunto de teste (RMSTT) e os respectivos números de apresentações, para várias redes com diferentes números de neurônios na camada oculta (NH), sendo o número máximo de apresentações igual a 200000.....	61

<b>TABELA B.1</b> Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias ( <b>u.a.</b> )) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos.....	72
--	----

## 1 INTRODUÇÃO

Este trabalho relaciona-se com o desenvolvimento do processo de enriquecimento de urânio por separação isotópica através de ultracentrifugação. Dentro deste contexto de necessidade de se obter o isótopo de urânio físsil, empregado na geração de energia por fissão nuclear, e dominar a tecnologia de produção deste material, verifica-se um grande empenho em se obter métodos de modelagem para o processo, que possam descrever, avaliar e direcionar sua otimização.

A teoria da separação dos isótopos do urânio, descrita em detalhes nas obras de Cohen (1951), Benedict et al. (1981) e Jordan (1966), mostra que o desempenho separativo de uma ultracentrífuga,  $\delta U$ , (Avery e Davis, 1973; Benedict et al., 1981) depende: (a) do tipo da ultracentrífuga, definido pela velocidade de rotação, comprimento e diâmetro do rotor; (b) das condições de operação dadas pelos fluxos de alimentação e retiradas do gás de processo e pela quantidade de material no interior da ultracentrífuga (ou pela pressão de operação); (c) pela posição axial onde a alimentação é introduzida no rotor e; (d) pelo perfil e intensidade do fluxo em contracorrente. Assim, a estimativa numérica do desempenho separativo de uma ultracentrífuga passa pelo cálculo do escoamento interno, cuja solução só é viável através de simplificações (Kai, 1989; Migliavacca, 1991; Olander, 1972 e 1981; Soubbaramayer, 1979).

A modelagem dos parâmetros separativos para avaliação e otimização de ultracentrífugas a contracorrente, usadas no enriquecimento de urânio, é uma tarefa bastante complexa e extensa. Os modelos fenomenológicos apresentam dificuldade em estabelecer a correlação entre os parâmetros utilizados neles com as reais características físicas e mecânicas das ultracentrífugas e do processo.

A aplicação de redes neurais na análise de processos altamente não-lineares tem se mostrado uma poderosa ferramenta (Hoskins e Himmelblau, 1988, Bhat et al., 1990, Chan e Nascimento, 1994 e Nascimento et al., 1994). Assim, essa técnica foi inicialmente aplicada à análise do desempenho separativo de ultracentrífugas como uma “caixa preta” (Migliavacca, 1999a e 1999b), quando

se mostrou capaz de prever o desempenho separativo de um determinado modelo de ultracentrífuga.

Psichogios e Ungar (1992) apresentaram uma abordagem diferente com o objetivo de impor uma estrutura interna ao Modelo de Redes Neurais, utilizando algum conhecimento prévio do processo (balanço de massa e energia, equações que descrevam o processo), lançando mão da Rede Neural como estimador de parâmetros importantes deste processo.

A proposta desse trabalho é seguir uma variação dessa abordagem e desenvolver uma estratégia de modelagem que combine algum conhecimento básico do processo, na forma de um modelo fenomenológico baseado na solução das equações de balanço que descrevem o processo, com redes neurais que atuem como estimadores dos parâmetros importantes do processo. A metodologia desenvolvida pode ser empregada a outros processos, adaptando-se a parte fenomenológica do modelo.



## 2 OBJETIVOS

O processo de desenvolvimento de ultracentrífugas visa à otimização dessas máquinas, segundo Migliavacca (1999a, 1999b), que descreve o processo de separação isotópica por ultracentrifugação.

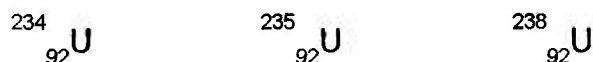
Modelos fenomenológicos são uma valiosa ferramenta nessa análise. No entanto, a correspondência entre os parâmetros utilizados nos modelos fenomenológicos e as reais características físicas e mecânicas das máquinas e do processo nem sempre é claramente estabelecida (Kai, 1989). Por esta razão, a aplicação de redes neurais na análise do desempenho separativo de ultracentrífugas mostra-se como uma ferramenta muito poderosa (Migliavacca, 1999a e 1999b), sendo capaz de prever o desempenho separativo de um determinado modelo de ultracentrífuga.

Este estudo tem como objetivo definir uma estrutura interna ao modelo de rede neural, utilizando algum conhecimento prévio do processo. Portanto, além da modelagem para obtenção dos parâmetros de fluxo interno das ultracentrífugas, este trabalho também propõe uma metodologia que utilize o modelo de rede neural híbrida adaptável a qualquer problema de engenharia, relativo a processos não-lineares, para obtenção de seus parâmetros, cujas estimativas normalmente são obtidas em estudos de otimização de processos de engenharia, e nem sempre facilmente equacionáveis.

### 3 TEORIA DO PROCESSO DE ULTRACENTRIFUGAÇÃO

Isótopos são elementos químicos com propriedades químicas idênticas, mas com massas atômicas diferentes. Como esses elementos ocupam a mesma posição na Tabela Periódica dos Elementos, possuem o mesmo número atômico com massas atômicas diferentes. Assim, um elemento qualquer X, de número de massa A e de número atômico Z, é representado por  ${}^A_ZX$ . Então, caso esse elemento possua dois isótopos, de respectivos números de massa A' e A'', a representação desses isótopos é feita segundo  ${}^{A'}_ZX$  e  ${}^{A''}_ZX$ . Considerando agora a estrutura básica do átomo formada de um núcleo central de prótons e nêutrons e dos elétrons periféricos (de massa desprezível), a diferença entre as massas atômicas é devida à diferença entre os números de nêutrons N presentes no núcleo do átomo, uma vez que o número de massa é constituído pela soma dos prótons e dos nêutrons presentes no núcleo.

No caso do elemento urânio, de número atômico Z=92, existem na natureza três isótopos estáveis (isótopos de períodos de meia-vida longos) de números de massa A'=234, A''=235 e A'''=238, representados, respectivamente, por.



cujos núcleos contêm 92 prótons e os seguintes números de nêutrons respectivamente:

$$N' = 234 - 92 = 142, \quad N'' = 235 - 92 = 143 \text{ e } N''' = 238 - 92 = 146.$$

O enriquecimento isotópico do urânio é feito com a finalidade de aumentar o teor do isótopo  ${}^{235}\text{U}$  do urânio, porque este é o seu único isótopo físsil natural (Benedict et al, 1981), isto é, o isótopo no qual se dá a fissão do seu núcleo quando bombardeado por nêutrons lentos ou térmicos, para a geração de energia. Nesta fissão, ocorre a divisão do núcleo em dois ou mais fragmentos, com emissão simultânea de raios  $\gamma$  e a liberação de uma enorme quantidade de energia, que vem acompanhada da produção, em média, de dois novos nêutrons. A sucessiva interação desses nêutrons com novos átomos de  ${}^{235}\text{U}$  conduz a uma reação em cadeia, com fissões consecutivas que se mantêm enquanto existir quantidade suficiente desse isótopo físsil. Essa reação em cadeia, acompanhada

da transformação de massa em energia, fornece então, uma considerável quantidade de energia na forma de calor, que é libertada de maneira controlada, sendo aproveitada, por exemplo, nas centrais nucleares para a geração de energia elétrica ou para propulsão naval.

O urânio é encontrado na natureza com uma concentração de 0,71% do isótopo físsil  $^{235}\text{U}$ , de 99,28% do outro isótopo  $^{238}\text{U}$ , e uma quantidade bem menor de  $^{234}\text{U}$ , cerca de 0,006%. Os processos de enriquecimento tratam de elevar essa concentração do  $^{235}\text{U}$  a níveis específicos para as diversas aplicações, segundo a AIEA. O urânio, com teores de  $^{235}\text{U}$  abaixo de 20% é denominado por urânio levemente enriquecido (*“low enriched uranium”*, LEU) e constitui o combustível nuclear dos reatores comerciais de água leve (PWR e BWR) e dos reatores heterogêneos de grafite-água fervente (RBMK). O urânio altamente enriquecido (*“high enriched uranium”*, HEU) com teores acima de 20% em  $^{235}\text{U}$ , é usado em reatores de pesquisa e em reatores de potência compactos, como na propulsão naval, sendo ainda utilizado na fabricação de artefatos nucleares.

### 3.1 Conceitos fundamentais da separação isotópica

Qualquer que seja o processo de separação empregado, o efeito elementar de separação ocorre no elemento de separação, onde o material introduzido se separa em duas frações: uma enriquecida e outra empobrecida no isótopo desejado. Um grupo de unidades de separação ligadas em paralelo define um estágio de separação. No estágio, todas as unidades de separação são alimentadas com material de mesma composição isotópica e produzem individualmente frações enriquecidas, ou produtos, e frações empobrecidas, ou rejeitos, com composições próximas entre si. Como a extensão da separação obtida, em uma só etapa, é muito pequena, a aplicação prática desses processos, para alcançar os níveis de enriquecimento desejados, requer sua associação em série, em uma cascata de separação de isótopos. A ligação em série de um grupo de estágios forma, então, uma cascata de separação isotópica, de modo que a corrente enriquecida em um estágio alimenta um estágio seguinte (superior), a fim de obter-se desse modo a repetição do processo de separação elementar.

As grandezas fundamentais da unidade de separação, que medem a magnitude do trabalho de separação, são as grandezas que definem a extensão da separação feita e as grandezas associadas ao fluxo de massa ou quantidade de material processado na unidade de separação.

Os processos de separação isotópica do urânio realizados em fase gasosa utilizam como gás de processo o **hexafluoreto de urânio** ( $UF_6$ ), escolhido por ser o único composto volátil do urânio nas condições de pressão e temperatura em que esses processos são realizados. Esse composto de urânio, devido ao flúor, é muito corrosivo e reativo, mas apresenta a vantagem do flúor conter apenas um isótopo, o que não afeta a separação isotópica do urânio. Isto possibilita que a separação isotópica seja considerada como a de uma mistura binária de  $^{235}UF_6 / ^{238}UF_6$ .

As grandezas de fluxo e de composição, que são medidas experimentalmente na separação isotópica do urânio, são as seguintes:

- Fluxos de massa ou simplesmente fluxos da mistura isotópica, expressos em kg/s ou mol/s.
- Composição da mistura isotópica expressa em fração mássica de cada componente, a fração molar de cada componente e a fração atômica de cada componente.

A Tabela 3.1 apresenta a notação adotada para descrever uma unidade de separação simples, onde entra a corrente de alimentação e saem as correntes enriquecida e empobrecida no isótopo desejado ( $^{235}U$ ), que são, usualmente chamadas de correntes de produto e corrente de rejeito, respectivamente.

**TABELA 3.1**

Notação adotada para descrever as correntes da unidade de separação

Corrente	Fluxo mássico / molar	Composição do Isótopo $^{235}\text{U}$	
	(kg/s , mol/s)	Fração mássica ou molar	Razão de Abundância
Alimentação (corrente de alimentação)	F	$z = R/(1+R)$	$R = z/(1-z)$
Produto (corrente enriquecida)	P	$y = R'/(1+R')$	$R' = y/(1-y)$
Rejeito (corrente empobrecida)	W	$x = R''/(1+R'')$	$R'' = x/(1-x)$

O elemento de separação simples, representado na Figura 3.1, recebe um fluxo de alimentação  $F$  da mistura isotópica binária de composição  $z$  do isótopo desejado  $^{235}\text{U}$  e fornece duas correntes: uma que é a do produto, parcialmente enriquecida no isótopo desejado com fluxo  $P$  e composição  $y$ , e outra parcialmente empobrecida no isótopo desejado, denominada rejeito, de fluxo  $W$  e composição  $x$ . A razão de abundância é a medida experimental da composição isotópica feita por espectrometria de massa, sendo definida pela relação entre as composições do componente desejado e a do outro componente. Foi denotada por  $R$  para a corrente da alimentação,  $R'$  para a corrente do produto e  $R''$  para a do rejeito.

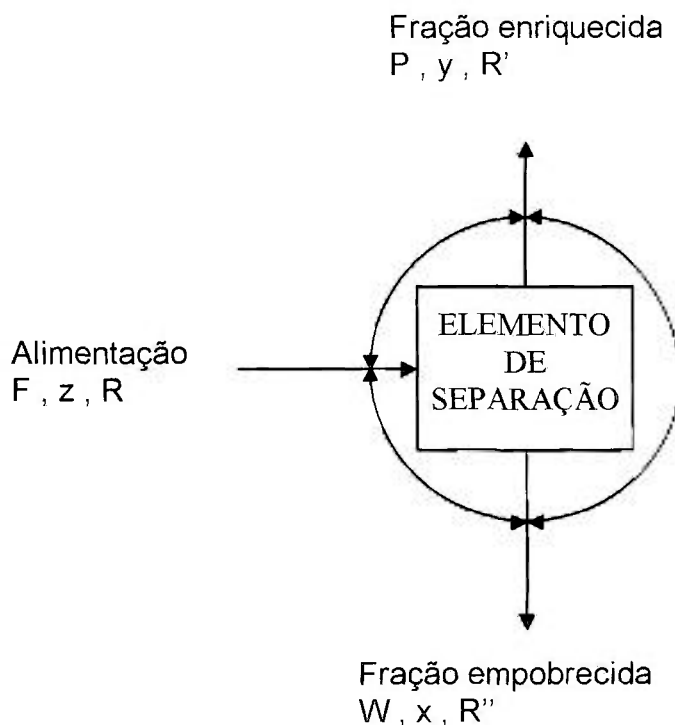


Figura 3.1 – Esquema do elemento de separação simples

Um elemento de separação operando em regime permanente, onde não ocorrem variações ao longo do tempo, deve ter os balanços materiais da mistura e do componente leve, respeitados como no balanço de massa mostrado a seguir:

$$F = P + W \quad (3.1)$$

$$F.z = P.y + W.x \quad (3.2)$$

### 3.2 Fatores de separação da unidade de separação de isótopos

A extensão da separação realizada no elemento de separação da Figura 3.1 é medida pelo fator de separação  $\alpha$ , que relaciona as concentrações  $x$  e  $y$  do isótopo desejado nas correntes que saem do elemento. O fator  $\alpha$  é definido pela relação entre a razão de abundância  $R'$  do isótopo desejado na fração enriquecida pela razão de abundância  $R''$ , do mesmo isótopo, na fração empobrecida:

$$\alpha = \frac{R'}{R''} = \frac{y/(1-y)}{x/(1-x)} \quad (3.3)$$

Outras maneiras de indicar a separação realizada no elemento são o fator de enriquecimento  $\beta$ , definido em termos de  $R'$  e  $R$ , e que, portanto mede o enriquecimento isotópico realizado pelo elemento de separação:

$$\beta = \frac{R'}{R} = \frac{y/(1-y)}{z/(1-z)} \quad R' > R \rightarrow \beta > 1 \quad (3.4)$$

e o fator de empobrecimento  $\gamma$ , definido em termos de  $R''$  e  $R$ , e que portanto mede o empobrecimento da mistura isotópica ao passar pelo elemento de separação:

$$\gamma = \frac{R}{R''} = \frac{z/(1-z)}{x/(1-x)} \quad R > R'' \rightarrow \gamma > 1 \quad (3.5)$$

### 3.3 Corte da unidade de separação

Uma outra propriedade fundamental da unidade de separação de isótopos, que está diretamente relacionada com o fluxo ou quantidade de material em processamento, é o corte  $\theta$  definido pela relação entre o fluxo (ou massa) do produto P e da alimentação F, como segue:

$$\theta = P/F = P/(P+W) \quad 0 \leq \theta \leq 1 \quad (3.6)$$

O corte  $\theta$  da unidade de separação também pode ser calculado através dos valores dados das composições  $x$ ,  $y$  e  $z$ , rearranjando-se as Eq (3.1) e Eq.(3.2) e suprimindo a corrente W, onde  $P(y-x)=F(z-x)$ :

$$\theta = \frac{z-x}{y-x} \quad (3.7)$$

que com as definições de  $\alpha$ ,  $\beta$  e  $\gamma$  fornece a expressão:

$$\theta = \frac{\gamma-1}{\alpha-1} * \frac{\beta.R+1}{R+1} \quad (3.8)$$

Um caso particular que merece destaque é o processo de separação simétrico, onde  $\beta = \gamma = \sqrt{\alpha}$  e o corte, designado por um asterisco (\*), é expresso por:

$$\theta^* = \frac{1}{\sqrt{\alpha + 1}} * \frac{\sqrt{\alpha} \cdot R + 1}{R + 1} \quad (3.9)$$

Para baixos valores de  $\alpha$ , o corte do processo simétrico se aproxima de  $\theta = 0,5$ . Para elementos de separação com valores maiores de  $\alpha$ , o corte que satisfaz a condição de operação em processo simétrico é menor que 0,5.

### 3.4 Poder de separação da unidade de separação

A unidade de separação é descrita pelos parâmetros separativos  $\alpha$  ou  $\beta$  e  $\gamma$  e pelas variáveis de fluxo  $F$  e  $\theta$  (ou  $P$  e  $W$ ). Contudo, nenhuma dessas variáveis representa individualmente o desempenho da unidade de separação. Assim é interessante definir uma propriedade que englobe as grandezas separativas e de fluxo e que ao mesmo tempo esteja relacionada ao trabalho separativo útil produzido pela unidade.

Com o objetivo de exprimir quantitativamente a capacidade de separação da ultracentrífuga, Dirac em 1941, num manuscrito não publicado e, que posteriormente foi citado por Cohen (1951), postulou a existência de uma propriedade da mistura isotópica que engloba as grandezas separativas e de fluxo e que ao mesmo tempo esteja relacionada ao trabalho separativo útil produzido pelo elemento de separação. Esta propriedade foi denominada "poder ou capacidade de separação", sendo apresentada a partir da introdução do conceito de fluxo de valor que considera que o elemento de separação produz uma variação no valor de uma quantidade de material separado. Seja o fluxo de valor uma função  $U$ , tem-se que o valor de uma mistura isotópica é dado pelo produto do fluxo de material por uma função de valor  $V(x)$ . Portanto, no elemento de separação tem-se os fluxos de valor  $U_F = FV(z)$ ,  $U_P = PV(y)$  e  $U_W = WV(x)$ , respectivamente para as correntes de alimentação, produto e rejeito. A variação do valor produzida pelo elemento de separação é o poder de separação  $\delta U$ , calculado pelo balanço dos fluxos de valor, ou seja:

$$\delta U = P \cdot V(y) + W \cdot V(x) - F \cdot V(z) \quad (3.10)$$



A função de valor  $V(x)$  é uma função somente da composição  $x$  do isótopo desejado em cada corrente e é adimensional, sendo definida pela equação:

$$V(x) = (2x - 1) \ln \left( \frac{x}{1-x} \right) \quad (3.11)$$

Esta função é simétrica em  $x=0,5$ , onde ela assume valor zero. É positiva para os demais valores de composição e aumenta tendendo ao infinito quando  $x$  se aproxima de 0 e de 1. A função  $V(x)$  permite que o aumento de valor  $\delta U$  efetuado pela unidade de separação seja independente da concentração isotópica do material processado.

A expressão de  $\delta U$  pode ser representada em função de  $R$ ,  $R'$  e  $R''$  substituindo-se a expressão da função de valor para cada parcela da Eq.(3.10) e também se observando as relações entre composições e razões de abundância apresentadas na Tabela 3.1 vem:

$$\delta U = P^*(2y-1)*\ln y/(1-y) + W^*(2x-1)*\ln x/(1-x) - F^*(2z-1)*\ln z/(1-z) \quad (3.12)$$

Finalmente, tem-se o poder de separação  $\delta U$  a partir dos fluxos de valor:

$$\delta U = P^*(R'-1)/(R'+1) \ln R' + W^*(R''-1)/(R''+1) \ln R'' - F^*(R-1)/(R+1) \ln R \quad (3.13)$$

A forma mais geral de equacionar o poder de separação ( $\delta U$ ) em função dos fluxos materiais e das razões de abundância da alimentação, produto e rejeito é dada pela Eq.(3.13).

Considerando que a função de valor  $V(x)$  é adimensional, segue-se que o trabalho separativo apresenta as dimensões de massa. Por convenção, exprime-se, porém, o poder separativo não em unidades de fluxo de massas, mas em unidades de trabalho separativo por ano, representadas por UTS/a ("*separative work units per year*" SWU/y), onde o ano  $a=(3600)*(24)*(365)=3,1536 \times 10^7$ s, sendo que 1 UTS equivale, por definição, a 1 kg de urânio.

### 3.5 Descrição do processo de ultracentrifugação

A ultracentrífuga a contracorrente, representada na Figura 3.2, consiste de um cilindro oco vertical relativamente longo e de parede fina, denominado **rotor**, girando ao redor de seu eixo em altas velocidades dentro de um recipiente em vácuo.

Uma ultracentrífuga a gás destinada ao enriquecimento isotópico do urânio é necessariamente formada dos seguintes componentes:

- sistema rotor constituído do rotor e dos mancais;
- sistema de acionamento do rotor;
- sistema de manuseio do gás de processo (árvore e distribuidor de gás);
- sistema de contenção do rotor (carcaça)

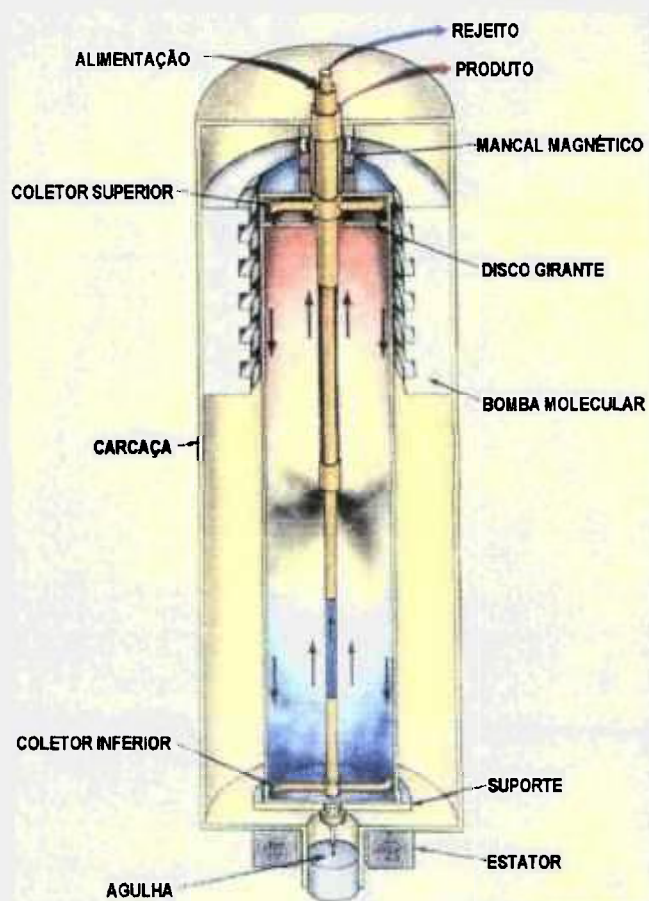
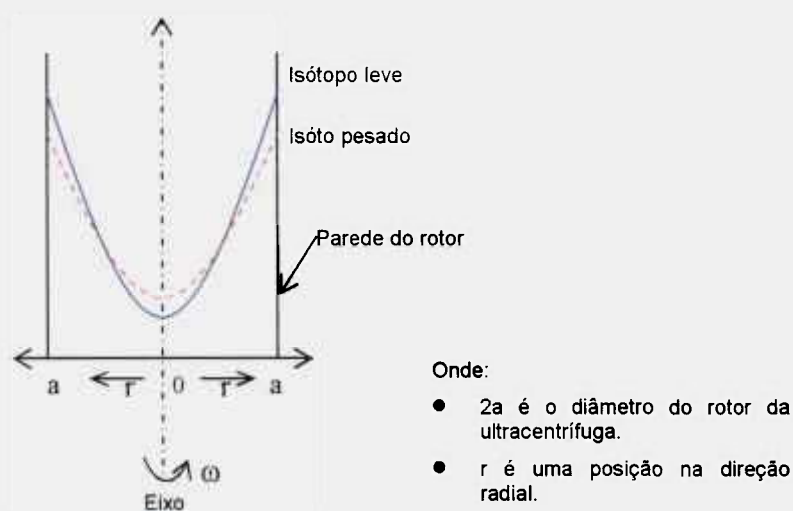


Figura 3.2 - Esquema de uma ultracentrífuga a contracorrente (UNITED STATES, 1994)

O gás, como já foi dito anteriormente, é considerado uma mistura isotópica binária contendo  $^{235}\text{UF}_6$  e  $^{238}\text{UF}_6$ , que é introduzida no interior desse cilindro, submetendo-se à ação de uma aceleração centrífuga milhares de vezes maior que a aceleração da gravidade. Assim se estabelece uma distribuição de pressões, manifestada na forma de um gradiente radial de pressão, crescente no sentido do eixo para a parede do rotor, como pode se observa na Figura 3.3.



**Figura 3.3** - Distribuição das pressões parciais no rotor da ultracentrífuga cujo diâmetro é  $2a$

Em virtude do campo centrífugo criado ao longo do raio do rotor, estabelece-se um gradiente radial de pressão, que depende da massa  $M$  do gás, obtendo-se o aumento relativo da concentração do isótopo leve ( $^{235}\text{U}$ ), nas proximidades do eixo de rotação e ao mesmo tempo, o aumento da concentração do outro isótopo ( $^{238}\text{U}$ ) na parede interna do rotor.

A relação entre as pressões  $p_a$  na parede do rotor e  $p(r)$  no raio  $r$ , situado entre o eixo e a parede, é dada de acordo com Jordan(1980) por:

$$\frac{p_a}{p(r)} = \exp\left[\frac{Mv_a^2(1-r^2/a^2)}{2RT}\right] \quad (3.14)$$

A Tabela 3.2, conforme Benedict et al (1981), traz os valores da relação entre a pressão no eixo do rotor  $p_o$  e a pressão na parede do rotor  $p_a$  e os respectivos fatores de separação radial de equilíbrio  $\alpha_o$  para diferentes valores de

velocidade de rotação  $v_a$  do rotor da ultracentrífuga. No entanto, devido à pequena quantidade de material nas proximidades do eixo do rotor, não é possível conseguir na prática esses valores de  $\alpha_o$ .

TABELA 3.2

Relações de pressões e fatores de separação para várias velocidades periféricas  
Temperatura do gás no rotor  $T = 300$  K

$v_a$ (m/s)	$P_a/p_0$	$\alpha_o$
300	573	1.056
400	$80 \times 10^3$	1.101
500	$46 \times 10^6$	1.162
600	$11 \times 10^{10}$	1.242
700	$10 \times 10^{14}$	1.343
800	$41 \times 10^{18}$	1.469
1000	$23 \times 10^{32}$	1.825

Em velocidades de rotação  $v_a$  mais elevadas, as moléculas do gás de processo são cada vez mais comprimidas contra a parede, dado que a força centrífuga aumenta com o quadrado da velocidade  $v_a$ . Nessas condições, resulta que nas proximidades do eixo do rotor, há uma redução progressiva da pressão, e a fração enriquecida, que existia nessa região, vai se concentrar mais próxima à parede interna do rotor à medida que  $v_a$  cresce. Portanto, deve-se extrair a fração enriquecida do gás de processo num raio  $r$  posicionado próximo à parede do rotor, definindo o raio do coletor do produto e também determinando a pressão de produto  $P_p$ .

Ao se induzir um fluxo em contracorrente vertical obtém-se uma multiplicação do efeito elementar da separação radial. Assim a diferença entre a composição do gás no topo e no fundo do rotor da ultracentrífuga se torna maior que a diferença no sentido radial para uma dada posição axial. Essa separação axial é agora determinada preponderantemente pelo perfil e pela intensidade da contracorrente vertical.

A contracorrente interna, indicada pelas setas verticais na Figura 3.2, de acordo com Benedict et al (1981) e Soubbaramayer in Villani (1979), pode ser gerada por meios mecânicos, mediante a interação do gás em rotação com obstáculos estacionários, presentes no interior do rotor, e por meios térmicos, através do controle das temperaturas das tampas do rotor ou da temperatura ao

longo da parede do rotor. Nesse sentido, existem quatro mecanismos elementares para a geração da contracorrente que são os seguintes:

- **acionamento pelo coletor ou placa defletora fixa**, no qual a criação da contracorrente é provocada pela interação do coletor ou de um disco estacionário com o gás de processo em movimento de rotação. Esse mecanismo, que representa o meio mais comum para gerar a contracorrente interna, na Figura 3.2 é estabelecido pelo coletor inferior. O coletor superior deve ser protegido por um disco que gira solidário ao rotor para não provocar o mesmo efeito em sentido oposto.
- **acionamento térmico na parede do rotor**, que é determinado por uma distribuição de temperatura não uniforme ao longo do comprimento da parede do rotor, ou seja, por um gradiente de temperatura axial. Nesse caso, para manter a circulação axial no mesmo sentido da produzida pelo coletor, é necessário que a temperatura seja decrescente da extremidade inferior para a extremidade superior do rotor.
- **acionamento térmico das tampas do rotor**, que resulta quando há remoção de calor de uma das tampas e introdução de calor na outra tampa. No esquema da Figura 3.2, esse escoamento ocorre no mesmo sentido da circulação interna provocada pelo coletor inferior no caso em que a tampa inferior é aquecida e a superior é resfriada.
- **acionamento pela alimentação**, no qual a circulação do gás no interior do rotor é induzida pela injeção do fluxo da alimentação no rotor. Nesse caso, o escoamento interno provém de uma fonte (o ponto de alimentação do rotor) e de dois sumidouros representados pela remoção do gás em ambas as extremidades do rotor.

Numa ultracentrífuga, geralmente a contracorrente é produzida por mais de um desses mecanismos. Todos os componentes internos de uma ultracentrífuga que apresentam alguma interação com o gás em rotação no interior do rotor influem na contracorrente, tanto no sentido construtivo como no sentido de perturbar esse escoamento. Através de estudos e experiências anteriores, esses componentes podem ser modificados com o intuito de buscar a combinação que forneça os melhores desempenhos separativos possíveis para uma dada ultracentrífuga.

## 4 METODOLOGIA

### 4.1 Obtenção dos dados experimentais

Um ensaio de separação isotópica é executado através da operação de uma ultracentrífuga em condições definidas e, geralmente, variáveis, segundo uma programação preestabelecida. É realizado em uma Estação de Ensaio Instrumentada (EEI), que pode ser genericamente representada pela Figura 4.1. Trata-se de um sistema de tubulações interligadas, com válvulas definindo o caminho a ser percorrido pelo gás de processo; instrumentos para medida de pressões e fluxos, e válvulas de controle para regular os fluxos de material. Além das tubulações de alimentação, produto e rejeito que se ligam diretamente à ultracentrífuga, uma EEI ainda possui tubulações de vácuo, e sistemas para amostragens.

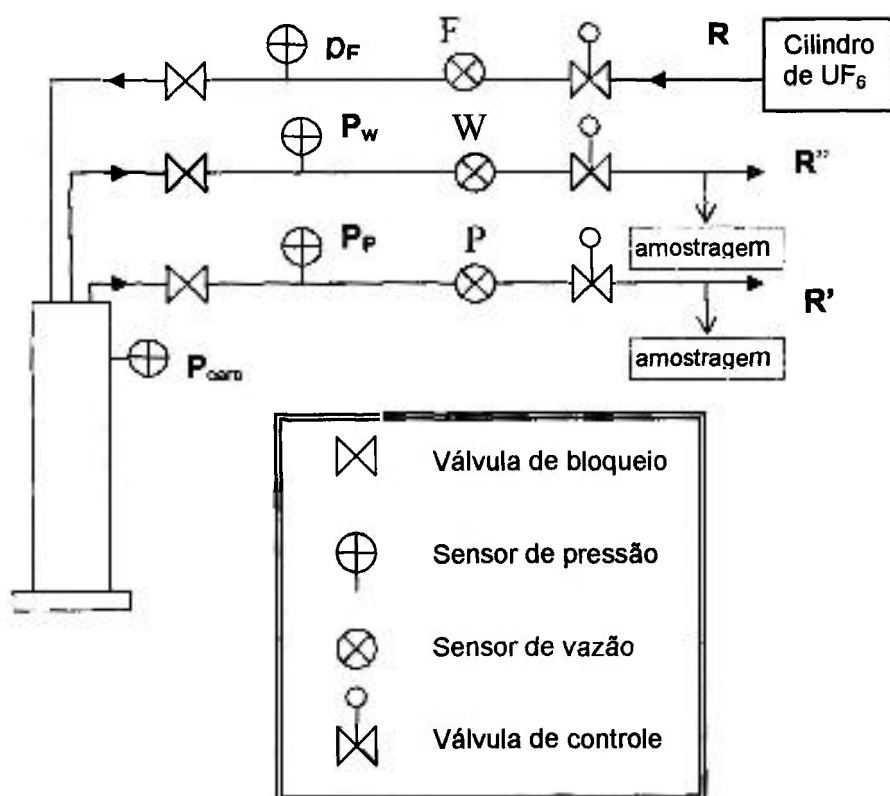


Figura 4.1 – Esquema genérico de uma estação de ensaio instrumentada

O sistema assim esquematizado permite a obtenção das seguintes variáveis:

- $p_F$ : pressão de alimentação da máquina
- $p_P$ : pressão de produto
- $p_W$ : pressão de rejeito
- $P$ : fluxo de produto
- $W$ : fluxo de rejeito
- $F$ : fluxo de alimentação
- $p_{\text{carc}}$ : pressão na câmara superior da carcaça
- $R$ : razão de abundância da alimentação
- $R'$ : razão de abundância do produto
- $R''$ : razão de abundância do rejeito

Além dessas variáveis, é possível instalar outros dispositivos para monitoração da máquina, como por exemplo, medidores de temperatura, monitores de consumo de potência, etc. As medidas de pressões e fluxos são obtidas diretamente das leituras dos respectivos instrumentos. As razões de abundância são obtidas mediante o procedimento de amostragem, através do direcionamento do gás de processo que passa pela ultracentrífuga, para ampolas que coletam o  $UF_6$  por criogenia. Essas ampolas são analisadas em um espectrômetro de massa quadrupolo em um laboratório de espectrometria de massa, que fornece diretamente os valores das razões de abundância de produto e de rejeito. Essas amostragens realizadas numa mesma ultracentrífuga para cada par de valores  $(F, \theta)$ , possibilitam o cálculo do  $\delta U$  segundo a Eq.(3.13), fornecendo uma função de desempenho da ultracentrífuga (Olander,1981) do tipo  $\delta U$  em função do fluxo  $F$ , do corte  $\theta$  e das variáveis internas.

Com essas variáveis é possível calcular diretamente os parâmetros separativos da ultracentrífuga através das Equações 3.3 a 3.6, 3.8, 3.10 e 3.13, considerando-se a composição natural na alimentação. Nota-se que o corte pode ser calculado por dois caminhos: através das medidas de vazões de retirada (Eq. 3.6) e através das medidas das razões de abundância (Eq. 3.8). Com essa redundância podemos comparar os dois valores de corte e realizar assim uma

verificação do sistema, que pode indicar descalibração do(s) sensor(es) de vazão, perturbação na amostragem, problemas na composição, etc.

É importante reforçar o conceito de operação em estado estacionário ou em regime permanente, visando a diminuição das incertezas associadas a transientes.

## 4.2 Redes neurais

Segundo Haykin (1994):

*“As Redes Neurais artificiais representam uma tecnologia que têm raízes em muitas disciplinas: neurociência, matemática, estatística, física, ciência da computação e engenharia. As redes neurais encontram aplicações em campos tão diversos, como modelagem, análise de séries temporais, reconhecimento de padrões, processamento de sinais e controle, em virtude de uma grande propriedade: a habilidade de aprender a partir de dados de entrada com ou sem professor”.*

O desenvolvimento de redes neurais artificiais foi sempre baseado e motivado pelo entendimento e analogias ao cérebro humano no que diz respeito à forma como este processa informações. O cérebro humano é um computador altamente complexo, não-linear e paralelo, sendo capaz de organizar seus constituintes estruturais, os neurônios, de maneira a realizar certos processamentos como percepção, controle motor, entre muitos outros, mais rápido que o mais rápido dos computadores digitais existentes.

De modo geral, uma rede neural é uma “máquina” projetada para modelar a maneira como o cérebro realiza uma tarefa particular sendo usualmente implementada por programação em um computador digital. Através de um processo de aprendizagem, as redes podem chegar a um bom desempenho empregando uma interligação maciça de células computacionais denominadas unidades de processamento, ou mais comumente chamadas por neurônios.

Uma boa definição de rede neural é um processador paralelamente distribuído, formado de unidades de processamento simples, que naturalmente armazenam conhecimento experimental e o torna disponível para o uso. Sua semelhança com o cérebro se destaca sob dois pontos de vista: (1) o conhecimento é adquirido pela rede a partir de seu ambiente através de um processo de aprendizagem, e (2) forças de conexão entre os neurônios,



conhecidas como pesos sinápticos, são utilizadas para armazenar o conhecimento adquirido.

O procedimento seguido para realizar o processo de aprendizagem é chamado de algoritmo de aprendizagem, que tem a função de modificar os pesos sinápticos da rede de modo ordenado a fim de se chegar a um objetivo de projeto desejado.

Uma outra característica importante a ser ressaltada é a capacidade de generalização de uma rede, isto devido ao fato dela ter seu conhecimento distribuído por sua estrutura e também da sua habilidade de aprender. Isto resulta na obtenção de saídas adequadas para entradas que não estavam presentes durante o seu treinamento (aprendizagem).

#### **4.2.1 Modelo de neurônio**

Um neurônio é uma unidade de processamento de informação que é fundamental para a operação de uma rede neural. Na Figura 4.2, pode ser visto o modelo de neurônio onde é possível identificar os três elementos básicos do modelo neuronal que são:

- 1: um conjunto de sinapses ou elos de conexão, cada qual caracterizada por uma força (ou peso) própria. Especificamente, um sinal  $x_j$  na camada de sinapse  $j$  conectada ao neurônio  $k$  é multiplicado pelo peso sináptico  $w_{kj}$ , sendo que o primeiro índice se refere ao neurônio em questão e o segundo se refere ao terminal de entrada da sinapse à qual o peso se refere;
- 2: um somador para totalizar os sinais de entrada, ponderados pelas respectivas sinapses do neurônio;
- 3: uma função de ativação para restringir a amplitude da saída de um neurônio, tornando o sinal de saída um valor finito.

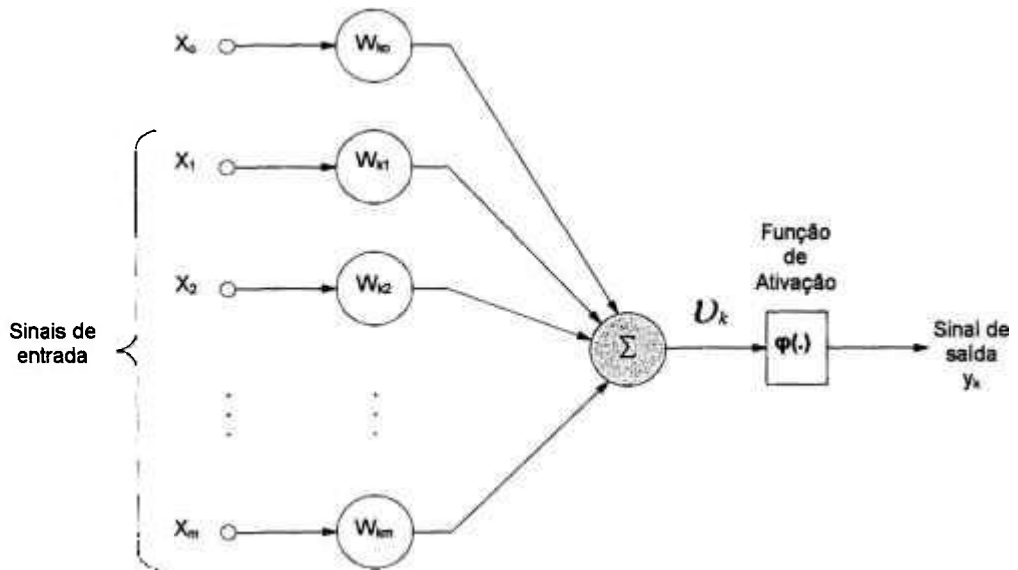


Figura 4.2 - Esquema de um modelo de neurônio

Este modelo inclui um  $bias = W_{k0}$  aplicado externamente, representado por  $b_k$ . O  $bias$ , valor de referência, tem o efeito de aumentar ou diminuir a entrada líquida da função de ativação, dependendo se ele é positivo ou negativo, respectivamente. O  $bias$  serve para aumentar os graus de liberdade, permitindo uma melhor adaptação, por parte da rede neural, ao conhecimento a ela fornecido. Matematicamente descreve-se um neurônio  $k$  pelas seguintes equações:

$$U_k = \sum_{j=0}^m W_{kj} X_j \quad (4.1)$$

e

$$y_k = \varphi(U_k) \quad (4.2)$$

onde  $x_1, x_2, \dots, x_m$  são os sinais de entrada; e os  $w_{k1}, w_{k2}, \dots$  e  $w_{km}$  são os pesos sinápticos do neurônio  $k$ ;  $U_k$  é a saída do combinador linear devido aos sinais de entrada;  $b_k$  é o  $bias$ , um parâmetro externo do neurônio artificial  $k$ ;  $\varphi(\bullet)$  é a função de ativação e  $y_k$  é o sinal de saída do neurônio. Adota-se por motivos matemáticos,  $w_{k0} = b_k$  e uma entrada  $x_0 = +1$ , o que acaba por representar criteriosamente o modelo neuronal.

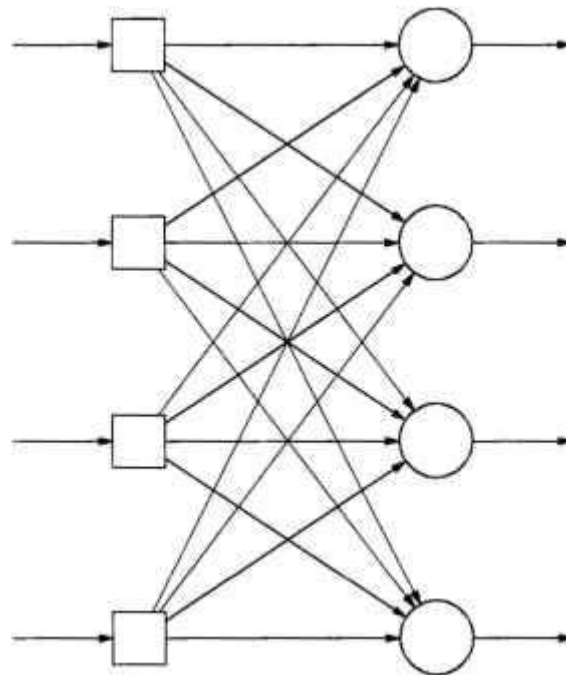
Sobre a função  $\varphi(\bullet)$  de ativação pode-se dizer que ela define a saída do neurônio. Normalmente são usados três tipos básicos de funções: a função limiar (função de Heavside, conhecida na literatura de engenharia), a função linear por partes e finalmente a função “sigmóide”, cujo gráfico tem a forma de um ‘s’, e é uma das funções mais utilizadas na construção de redes neurais artificiais. É uma função estritamente crescente que exhibe um balanceamento adequado entre comportamento linear e não-linear.

#### 4.2.2 Arquitetura de rede

A maneira pela qual os neurônios de uma rede neural estão estruturados está intimamente ligada ao algoritmo de aprendizagem usado para treinar a rede, podendo-se falar de algoritmos como regras de aprendizagem usadas no projeto de redes neurais.

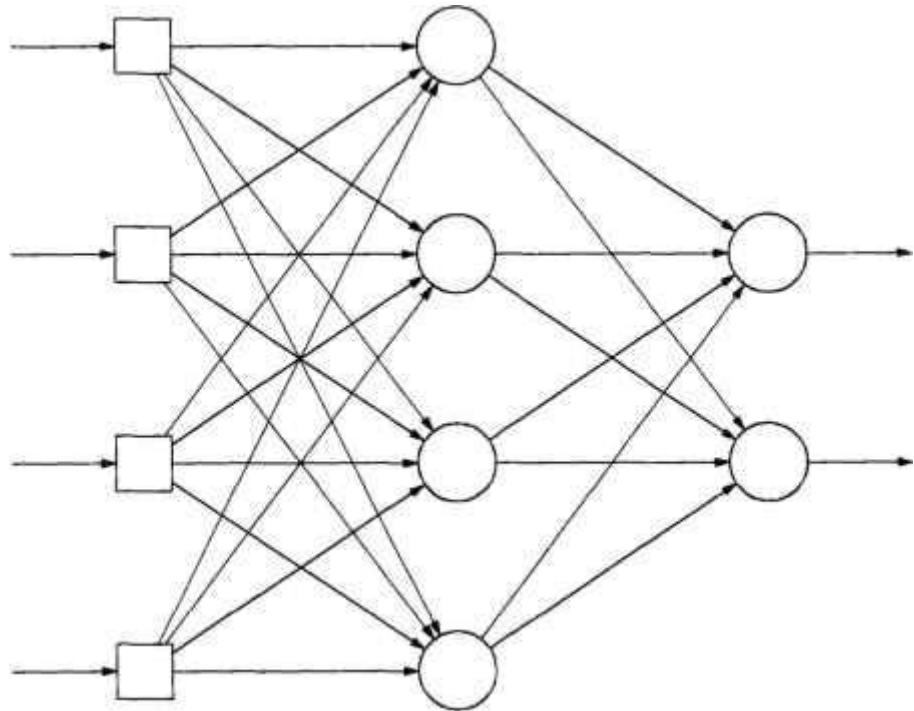
No geral, podem-se identificar três tipos de classes de arquiteturas (estruturas) de redes neurais: (1) Redes Alimentadas Adiante com Camada Única, (2) Redes Alimentadas Diretamente com Múltiplas Camadas e (3) Redes Recorrentes.

Pode-se dizer sobre a primeira classe de redes neurais, mostrada na Figura 4.3, que além de ser a forma mais simples, ela é designada geralmente por “camada única” fazendo-se referência à camada de saída de neurônios, não se contando, portanto, a camada de entrada, porque lá não ocorre qualquer computação, sendo apenas projetada sobre a camada de saída que é única.



**Figura 4.3** - Esquema de rede alimentada adiante do tipo camada única

A segunda classe se diferencia pela presença de uma ou mais camadas ocultas, cujos neurônios são correspondentemente chamados de neurônios ocultos. A função destes neurônios ocultos é intervir entre a camada de entrada externa e a saída da rede de maneira útil. Os nós da camada de entrada da rede fornecem os respectivos sinais de entrada que são aplicados aos neurônios na segunda camada (primeira camada oculta). Os sinais de saída desta segunda camada são usados como sinais de entrada na próxima camada, e assim por diante até o fim da rede. Tipicamente, os neurônios de cada camada da rede têm como entradas apenas os sinais de saída da camada precedente. O conjunto de sinais de saída dos neurônios da camada de saída final da rede constitui a resposta global da rede para o conjunto de sinais alimentados na camada de entrada. A Figura 4.4 representa a rede neural de múltiplas camadas alimentada adiante com apenas uma camada oculta. Diz-se que uma rede é totalmente conectada quando cada um dos nós de uma camada da rede está conectado a todos os nós da camada adjacente seguinte.



**Figura 4.4** - Esquema de uma rede alimentada adiante, tipo múltiplas camadas, com apenas uma camada oculta

Finalmente, a terceira classe de redes denominada *recorrente* se diferencia de uma rede de alimentação adiante por ter pelo menos um laço de realimentação, ou seja, a saída de seus neurônios da camada de saída é enviada às entradas de todos os neurônios.

Um conjunto preestabelecido de regras bem definidas para a solução de um problema de aprendizagem é denominado de algoritmo de aprendizagem. De modo geral, sabe-se que para o projeto de redes neurais não existe um único algoritmo de aprendizagem e sim um conjunto de ferramentas representado por uma variedade de algoritmos com vantagens específicas. Basicamente, um algoritmo difere de outro pela maneira como é formulado o ajuste de um peso sináptico de um dado neurônio. Outro fator importante é a forma pela qual uma rede neural constituída por um conjunto de neurônios interligados se relaciona com o meio externo.

Sob esse último enfoque, observam-se os seguintes tipos de aprendizado: (1) aprendizado supervisionado quando da utilização de um agente

externo que indica à rede a resposta desejada para o padrão de entrada, (2) aprendizado não-supervisionado onde não existe o agente externo indicando a resposta desejada para os padrões de entrada e (3) reforço, quando crítico externo avalia a resposta fornecida pela rede.

#### **4.2.3 Redes neurais de múltiplas camadas com algoritmo de retropropagação**

As redes de múltiplas camadas alimentadas adiante, uma das mais importantes classes de redes neurais, consistem de um conjunto de nós de entrada que definem a camada de entrada, uma ou mais camadas ocultas de nós computacionais (neurônios) e uma camada de saída. Elas são conhecidas por *perceptrons de múltiplas camadas (MLP, multilayer perceptron)*. Estes tipos de redes são aplicados com sucesso para resolver problemas complexos, através do seu treinamento de forma supervisionada com um algoritmo muito popular denominado de *algoritmo de retropropagação do erro (error back-propagation)*. Ele é baseado numa regra de aprendizagem por correção de erro.

A aprendizagem por retropropagação de erro consiste de dois passos através das diferentes camadas da rede: (1) um passo para frente, a *propagação*, e (2) um passo para trás, a *retropropagação*. No passo para frente, um vetor de entrada é aplicado aos nós de entrada na camada de entrada e seu efeito se propaga através da rede, camada por camada. Por fim, um conjunto de saída é gerado como resposta real da rede. Durante o passo de propagação, os pesos sinápticos são todos fixos. Já durante o passo para trás, os pesos sinápticos da rede são todos ajustados de acordo com a regra de correção de erro. De modo específico, a resposta real da rede é comparada com a resposta desejada (alvo) sendo que esta diferença produz um sinal de erro. Este sinal de erro é por sua vez propagado para trás através da rede, contra a direção das conexões sinápticas, explicando portanto, o termo de *retropropagação de erro*. Os pesos sinápticos são ajustados para fazer com que a resposta real da rede se mova para mais perto da resposta desejada. O algoritmo de retropropagação de erro é também conhecido na literatura como algoritmo de retropropagação (*back-propagation*), sendo que o processo de aprendizagem realizado com o algoritmo é denominado de *aprendizagem por retropropagação*.

Uma rede neural de múltiplas camadas (MLP) tem três características distintas: (1) o modelo de cada neurônio da rede inclui uma função de ativação não-linear, com não-linearidade suave, diferenciável em qualquer ponto. A forma normalmente mais utilizada é a função sigmóide, mostrada na Eq.4.3, onde  $v_j$  é a soma ponderada de todas as entradas sinápticas

$$y_j = \varphi(v_j) = \frac{1}{1 + \exp(-a.v_j)} \quad (4.3)$$

acrescidas do *bias* do neurônio  $j$ ,  $a$  é o parâmetro de inclinação da curva “s” da função sigmóide  $\varphi$  e finalmente tem-se  $y_j$  como a saída do neurônio  $j$ ; (2) a rede contém uma ou mais camadas de neurônios ocultos, que não são parte da entrada ou da saída da rede, sendo que eles possibilitam a rede aprender tarefas complexas extraíndo progressivamente as características mais significativas dos vetores de entrada e (3) a rede exprime um alto grau de conectividade, determinado pelas sinapses da rede. Uma alteração dessa conectividade requer uma alteração na população das conexões sinápticas ou de seus pesos.

A combinação dessas características aliada à habilidade de aprender da experiência através de treinamento é a forma pela qual a rede MLP exprime seu poder computacional. Outro fato relevante é o desenvolvimento do algoritmo de retropropagação representando um marco para as redes neurais uma vez que fornece um método computacional eficiente para o treinamento da MLP.

Na Figura 4.5 é mostrada a arquitetura de uma MLP com duas camadas ocultas e uma camada de saída. Essa rede é totalmente conectada, isto é cada neurônio em qualquer camada da rede se apresenta conectado a todos os neurônios/nós da camada anterior. O fluxo de sinal através da rede progride para frente de camada em camada.

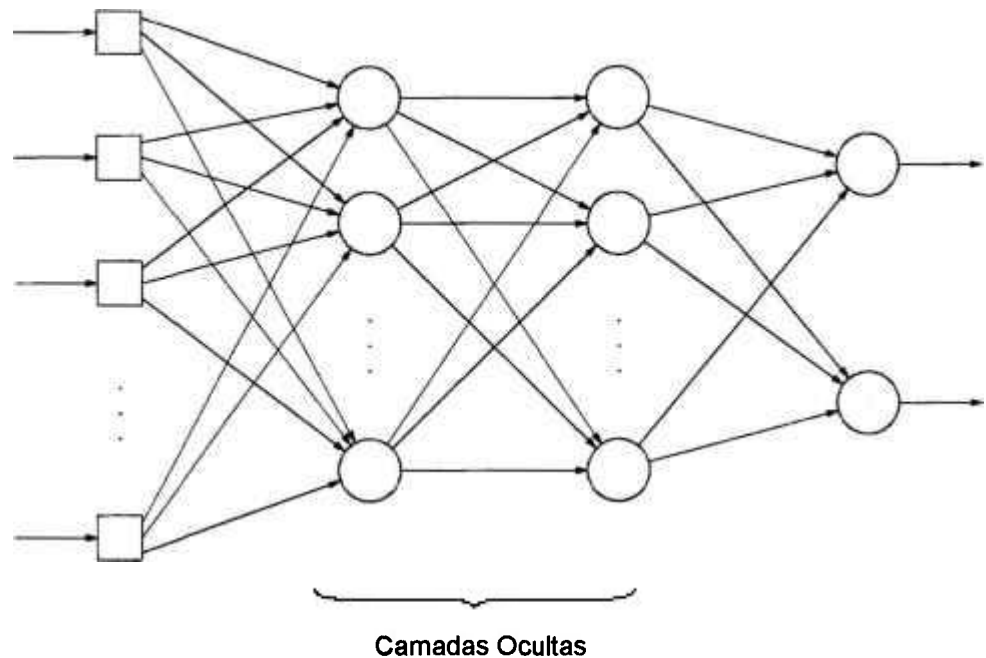
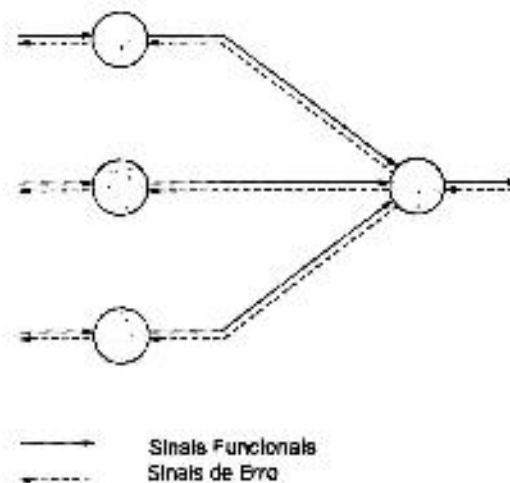


Figura 4.5 - Arquitetura de rede de múltiplas camadas com duas ocultas

Na Figura 4.6 é indicada uma parte da rede de múltiplas camadas, onde se observam dois tipos de sinais: (1) os funcionais, também chamados de sinais de entrada (ou estímulos) que incidem no terminal de entrada da rede, propagando-se para frente (neurônio por neurônio) através da rede, emergindo no terminal de saída da rede como um sinal de saída e (2) os sinais de erro, que se originam em neurônios de saída de rede e se propagam para trás (camada a camada) através da rede toda. Estes últimos recebem este nome, pois sua computação por cada neurônio da rede envolve uma função dependente de erro.



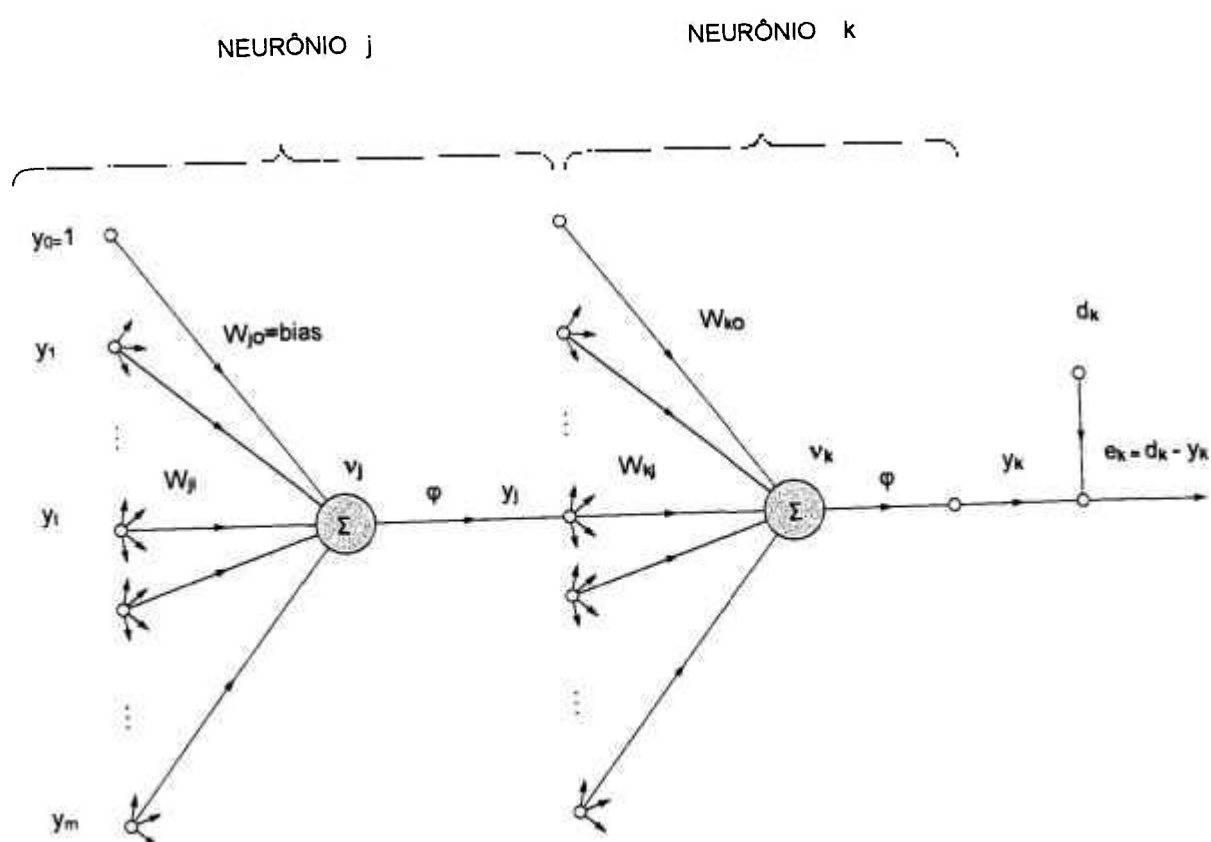


**Figura 4.6** - Esquema de sinais funcionais da propagação e sinais de erro da retropropagação

Os neurônios de saída formam a camada de saída da rede. Os neurônios restantes constituem a (as) camada(s) oculta(s). Cada neurônio oculto ou neurônio de saída de uma MLP é projetado para realizar dois cálculos: (1) o do sinal funcional que aparece na saída de um neurônio, expresso por uma função não-linear do sinal de entrada e dos pesos sinápticos associados aquele neurônio e (2) o cálculo de uma estimativa do vetor gradiente (os gradientes da superfície de erro em relação aos pesos conectados às entradas de um neurônio), que é necessário para a retropropagação.

#### 4.2.4 Algoritmo de retropropagação

O algoritmo de retropropagação descrito em Haykin (1994) será sucintamente apresentado por definir de modo matemático a retropropagação em uma rede MLP, que é o tipo de rede neural adotado neste trabalho, sendo representado esquematicamente pela Figura 4.7. Para isso, será introduzida primeiramente, uma notação de acordo com a Tabela 4.1, que facilitará a sua explicação e posteriormente a sua aplicação adaptada ao Modelo de Redes Neurais Híbridas.



**Figura 4.7** - Representação do fluxo de informações dentro de uma MLP  
( Haykin, 1994)

TABELA 4.1

Notação utilizada para redes de múltiplas camadas

Notação
<ul style="list-style-type: none"> <li>Os índices <math>i</math>, <math>j</math> e <math>k</math> referem-se a neurônios diferentes da rede: o neurônio <math>j</math> se encontra em uma camada à direita do neurônio/nó de entrada <math>i</math> e o neurônio <math>k</math> se encontra à direita do neurônio <math>j</math> quando este é uma unidade oculta.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Na iteração <math>n</math>, o <math>n</math>-ésimo padrão de treinamento (exemplo) apresentado à rede.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>O símbolo <math>E(n)</math> se refere à soma instantânea de erros quadráticos ou energia do erro na iteração <math>n</math>. A média de <math>E(n)</math> sobre todos os valores de <math>n</math> (conjunto inteiro de treinamento) produz a energia média do erro <math>E_{MED}</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>A variável <math>e_k(n)</math> se refere ao sinal de erro na saída do neurônio <math>k</math> para a iteração <math>n</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>A variável <math>d_k(n)</math> se refere à resposta desejada para o neurônio <math>k</math> e será usada para calcular <math>e_k(n)</math></li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>A variável <math>y_i(n)</math> se refere ao sinal de nó de entrada na saída da camada de entrada <math>i</math>, na iteração <math>n</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>A variável <math>y_j(n)</math> se refere ao sinal funcional que aparece na saída do neurônio <math>j</math>, na iteração <math>n</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>A variável <math>y_k(n)</math> se refere ao sinal funcional que aparece na saída do neurônio <math>k</math>, na iteração <math>n</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li>Os símbolos <math>w_{ji}</math> e <math>w_{kj}</math> representam os pesos sinápticos conectando a saída do nó de fonte da entrada <math>i</math> à entrada do neurônio <math>j</math> e conectando a saída do neurônio <math>j</math> à entrada do neurônio <math>k</math> respectivamente. A correção aplicada aos primeiros pesos na iteração <math>n</math> é representada por <math>\Delta w_{ji}</math> e portanto para os seguintes será <math>\Delta w_{kj}</math>.</li> </ul>

TABELA 4.1

Notação utilizada para redes de múltiplas camadas (cont.)

Notação
<ul style="list-style-type: none"> <li>A soma ponderada de todas as entradas sinápticas acrescida do <i>bias</i> no caso do neurônio <math>j</math> na iteração <math>n</math> é representada por <math>U_j(n)</math> que será o sinal para a função de ativação <math>\varphi_j(\bullet)</math> associada ao neurônio <math>j</math>. Respectivamente para a camada <math>k</math> haverá a soma ponderada na iteração sendo representada por <math>U_k(n)</math> que será utilizada na função de ativação <math>\varphi_k(\bullet)</math> associada ao neurônio <math>k</math>.</li> </ul>
<ul style="list-style-type: none"> <li><math>\eta</math> é o parâmetro de taxa de aprendizagem.</li> </ul>

O sinal de erro na saída do neurônio  $k$ , na iteração  $n$ , ou seja a apresentação do  $n$ -ésimo exemplo de treinamento, quando o neurônio  $k$  é um nó de saída, é definido por:

$$e_k(n) = d_k(n) - y_k(n) \quad (4.4)$$

Define-se o valor de erro instantâneo da energia do erro para o neurônio  $k$  como  $\frac{1}{2}e_k^2(n)$ .

Logo, o valor instantâneo da energia do erro total  $E(n)$  é obtido somando-se os termos  $\frac{1}{2}e_k^2(n)$  de todos os neurônios da camada de saída:

$$E(n) = \frac{1}{2} \sum_k e_k^2(n) \quad (4.5)$$

onde  $k$  representa todos os neurônios da camada de saída da rede. Se  $N$  representa o número total de padrões (exemplos) contidos no conjunto de treinamento, a energia média do erro quadrado é obtida somando-se os  $E(n)$  para todos os  $n$  e então normalizando em relação ao tamanho do conjunto  $N$ . Finalmente tem-se:

$$E_{MED} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N E(n) \quad (4.6)$$

A energia instantânea do erro  $E(n)$ , e também a energia média do erro  $E_{MED}$ , é uma função de todos os parâmetros livres ( pesos sinápticos e níveis de bias) da rede. Para um determinado conjunto de treinamento, a energia média do erro representa uma medida do desempenho de aprendizagem. Logo o objetivo do processo de aprendizagem é **ajustar os parâmetros livres da rede para minimizar a energia média do erro.**

Para se atingir esta minimização, considera-se um método simples de treinamento onde os pesos são atualizados de *padrão em padrão* até formar uma *época*, ou seja, uma apresentação completa do conjunto de treinamento inteiro que está sendo processado. Os ajustes dos pesos são realizados de acordo com os respectivos erros calculados para cada padrão apresentado à rede. A média aritmética destas alterações individuais de peso sobre o conjunto de treinamento é portanto uma estimativa da alteração real que resultaria da modificação dos pesos baseada na minimização da função de desempenho de aprendizagem  $E_{MED}$  sobre o conjunto de treinamento inteiro.

O algoritmo de retropropagação aplica uma correção nos pesos sinápticos  $\Delta w_{ji}(n)$  e  $\Delta w_{kj}(n)$  respectivamente da camada de entrada  $i$  para a camada oculta para o neurônio  $j$  e da camada oculta do neurônio  $j$  para a camada de saída para o neurônio  $k$ . Esta correção é usualmente chamada na literatura de "Regra Delta" sendo expressa por:

Correção do peso	Parâmetro da taxa de aprendizagem	Gradiente local	Sinal da camada de entrada
	=	*	*
$\Delta w_{kj}(n)$	$\eta$	$\delta_k(n)$	$y_j(n)$

$$\Delta w_{kj}(n) = -\eta * \partial(E(n)) / \partial w_{kj}(n) \quad (4.7)$$

onde  $\eta$  é o parâmetro de taxa de aprendizagem da rede e o segundo termo é uma derivada parcial da função erro, em relação ao peso sináptico da camada de saída. O uso do sinal negativo se refere ao gradiente descendente no espaço dos pesos. A expressão final para a correção se torna:

$$\Delta w_k(n) = \eta * e_k(n) * \varphi'_k(v_k(n)) * y_j(n) \quad (4.8)$$

O termo abaixo é também conhecido por fator de sensibilidade (gradiente local) e determina a direção de busca no espaço dos pesos:

$$\delta_k(n) = e_k(n) * \varphi'_k(v_k(n)) \quad (4.9)$$

Para a correção dos pesos sinápticos referentes ao neurônio  $j$  pertencente à camada oculta, onde não existe resposta desejada para estes neurônios, deve-se lembrar que o sinal de erro para um neurônio oculto é determinado recursivamente, em termos dos sinais de erro de todos os neurônios aos quais o neurônio oculto  $j$  está conectado. Observando-se a Figura 4.7 pode-se redefinir o fator de sensibilidade para o neurônio  $j$  oculto:

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} * \frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} \quad (4.10)$$

A segunda derivada parcial da Eq.4.10 é a derivada primeira da função de ativação do neurônio  $j$  que se expressa por;

$$\frac{\partial y_j(n)}{\partial v_j(n)} = \varphi'_j(v_j(n)) \quad (4.11)$$

Substituindo Eq.4.11 em 4.10 tem-se:

$$\delta_j(n) = -\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} * \varphi'_j(v_j(n)) \quad (4.12)$$

Procedendo-se à regra da cadeia para o primeiro termo do lado direito da Eq. 4.12 vem:

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = -\sum e_k * \varphi_k'(\nu_k(n)) * w_{kj}(n) \quad (4.13)$$

Da expressão acima observa-se a presença do fator de sensibilidade (gradiente local)  $\delta_k$  já definido na Eq.4.9 e portanto

$$\frac{\partial E(n)}{\partial y_j(n)} = \sum \delta_k(n) * w_{kj}(n) \quad (4.14)$$

Das Eq. 4.14 e Eq. 4.10 tem-se:

$$\delta_j(n) = (\varphi_j'(\nu_j(n))) * \sum (\delta_k(n) * w_{kj}(n)) \quad (4.15)$$

onde finalmente, tem-se a expressão para a correção de pesos sinápticos:

$$\Delta w_{ji}(n) = \eta * [\varphi_j'(\nu_j(n)) * \sum e_k(n) * \varphi_k'(\nu_k(n)) * w_{kj}] * y_i(n) \quad (4.16)$$

Para a aplicação do algoritmo de retropropagação, há dois passos distintos de computação, já citados anteriormente.

No passo para frente, os pesos sinápticos são fixos em toda a rede com os sinais funcionais sendo calculados individualmente, neurônio por neurônio. O sinal funcional que aparece no neurônio  $j$  é:

$$y_j(n) = \varphi \left( \sum_{i=0}^m w_{ji}(n) * y_i(n) \right) \quad (4.17)$$

com  $m$  sendo o número total de entradas da camada  $i$  incluindo o bias,  $w_{ji}(n)$  é o peso sináptico que conecta a entrada  $i$  ao neurônio  $j$  e  $y_i(n)$  é o sinal de entrada da camada de entrada. Este sinal  $y_j(n)$  vai passar para a camada seguinte e última,  $k$ , e terá os valores de suas saídas calculados também por uma função de

ativação  $\varphi$  para cada neurônio até sua representação na saída  $k$  por  $y_k(n)$ . Neste ponto, serão calculados os sinais de erro  $e_k(n)$  pela comparação com os valores desejados  $d_k(n)$  e os gerados pela rede. Dessa forma, a fase da propagação da computação começa na primeira camada oculta com a apresentação do vetor de entrada e termina na camada de saída calculando-se o sinal de erro  $e_k(n)$  de cada neurônio desta camada.

O segundo passo chamado de retropropagação, por sua vez se inicia na camada de saída enviando os sinais de erro no sentido da direita para a esquerda, camada por camada calculando-se o gradiente local (fator de sensibilidade)  $\delta$  de cada neurônio. Este processo recursivo permite que os pesos sinápticos se alterem de acordo com a Regra Delta da Eq. 4.7. No caso de um neurônio localizado na camada de saída, o gradiente local é simplesmente igual ao sinal de erro desse neurônio  $e_k(n)$  multiplicado pela primeira derivada da função de ativação  $\varphi'_k$ . Dessa maneira a Eq. 4.4 é usada para calcular as modificações dos pesos sinápticos  $w_{kj}$  de todas as conexões que alimentam a camada de saída  $k$ . Dados os  $\delta$ 's para a camada  $k$  de saída de neurônios, utiliza-se a Eq. 4.15 para calcular os  $\delta$ 's para todos os neurônios da penúltima camada, nesse caso a camada oculta e conseqüentemente se processam todas as modificações dos pesos sinápticos  $w_{ji}$  de todas as conexões que a alimentam (vindas da camada  $i$  da entrada de padrões). Aqui se observa o fato de a computação recursiva continuar camada por camada, propagando a alteração para todos os pesos da rede.

Para a apresentação de cada exemplo de treinamento, o padrão de entrada é fixo durante todo o ciclo, tanto na propagação como na retropropagação. O algoritmo de retropropagação fornece uma aproximação para a trajetória no espaço de pesos calculado pelo método da descida mais íngreme. Quanto menor for o parâmetro da taxa de aprendizagem  $\eta$ , menores serão as variações dos pesos sinápticos da rede, de uma iteração para a outra, e mais suave será a trajetória no espaço dos pesos. Por outro lado, se esta taxa é muito grande, as



grandes modificações nos pesos sinápticos resultantes podem tornar a rede instável (oscilatória). Um método simples de aumentar  $\eta$  sem se observar instabilidade é alterar a regra delta incluindo o termo momento. Esta inclusão representa uma modificação pequena na atualização dos pesos, no entanto alguns benefícios sobre a aprendizagem costumam aparecer, além do fato dele evitar que o processo de aprendizagem termine em um mínimo local raso na superfície de erro.

Numa aplicação prática do algoritmo de retropropagação, o aprendizado resulta de muitas apresentações de um determinado conjunto de exemplos de treinamento para a rede MLP. Uma apresentação completa do conjunto de treinamento inteiro é denominada uma época (apresentação). O processo de aprendizagem é mantido em uma base de épocas (apresentações) em épocas até os pesos sinápticos e os níveis de bias se estabilizarem e o erro médio quadrado sobre todo o conjunto de treinamento convergir para um valor mínimo.

Este algoritmo tem duas razões práticas e importantes para serem levadas em consideração quanto a sua utilização: (1) é um algoritmo simples de implementar e (2) ele fornece soluções efetivas para problemas grandes e difíceis.

No que diz respeito à parada da aprendizagem, em geral não se pode provar que o algoritmo de retropropagação convergiu e não existem critérios bem definidos para se parar a aprendizagem. Em vez disso, há alguns critérios razoáveis que podem ser usados para se encerrar o ajuste dos pesos, pois sempre será necessário se adotar um. Normalmente, adota-se um certo número máximo de apresentações/ciclos limitando assim o tempo de treinamento.

Para se formular um critério assim é bastante razoável pensar em termos das propriedades únicas de um mínimo local ou global da superfície de erro. Considere o vetor de pesos  $\mathcal{W}$  que represente um mínimo, local ou global. Uma condição necessária para que  $\mathcal{W}$  seja um mínimo é que o vetor gradiente  $g(\mathcal{W})$ , (isto é, a derivada parcial de primeira ordem) da superfície de erro em relação ao vetor  $\mathcal{W}$  seja zero. Daí surge o critério de convergência sensível para a aprendizagem por retropropagação como: considera-se que o algoritmo convergiu quando a norma do vetor  $g(\mathcal{W})$  alcançar um limiar muito pequeno. Os

tempos de convergência para se atingir tais patamares podem, por sua vez, tornarem-se muito longos.

Um outro critério de convergência útil e bem fundamentado é que após cada ciclo de iteração de aprendizagem, a rede é testada pelo seu desempenho de generalização (utilizando-se, por exemplo, um conjunto de validação separado previamente do conjunto total de dados experimentais). O processo de aprendizagem é encerrado quando o desempenho de generalização for adequado, ou quando ficar evidente que este processo de generalização atingiu o máximo.

#### **4.2.5 Considerações práticas para o uso de redes neurais artificiais**

Existem metodologias, ou mesmo recomendações, baseadas na prática do projetista, na condução das tarefas de configuração de uma rede. A definição da configuração de redes neurais é ainda considerada uma arte, que requer grande experiência dos pesquisadores/projetistas.

Uma etapa muito importante é o treinamento da rede. Nesta fase, seguindo o algoritmo de treinamento escolhido, serão ajustados os pesos das conexões, e, portanto devem-se considerar alguns aspectos, tais como a inicialização da rede, o modo de treinamento e o tempo de treinamento. Uma boa escolha dos valores iniciais dos pesos da rede pode diminuir o tempo necessário para o treinamento. Normalmente, os valores iniciais dos pesos da rede são números aleatórios uniformemente distribuídos, em um intervalo definido.

Quanto ao modo de treinamento, na prática, é mais utilizado o modo padrão devido ao menor armazenamento de dados, além de ser menos suscetível ao problema de mínimos locais.

Quanto ao tempo de treinamento, vários fatores podem influenciar a sua duração, porém sempre será necessário utilizar algum critério de parada. O critério de parada do algoritmo de retropropagação não é bem definido, como já dito anteriormente, e geralmente é utilizado um número máximo de apresentações. Mas, devem ser consideradas a taxa de erro médio por ciclo, e a capacidade de generalização da rede. Pode ocorrer que em um determinado instante do treinamento a generalização comece a degenerar, causando o problema de “*over-fitting*”, ou seja, a rede se especializa no conjunto de dados do treinamento e perde a capacidade de generalização.

Concluindo, o treinamento deve ser interrompido quando a rede apresentar uma boa capacidade de generalização e quando a taxa de erro for suficientemente pequena, ou seja, menor que um erro admissível. Assim, deve-se buscar encontrar um ponto ótimo de parada com erro mínimo e capacidade de generalização máxima.

Posterior ao treinamento, vem a fase de teste da rede que ocorre quando o conjunto de teste (ou validação) é utilizado para determinar o desempenho da rede com dados que não foram previamente utilizados. O desempenho da rede, avaliado nesta fase, é uma boa indicação de sua performance real. Avalia-se, aqui também, o valor do erro mínimo obtido para este conjunto de teste.

Um outro teste pode ser considerado como análise do desempenho da rede, como por exemplo, a análise dos pesos atuais da rede, pois se existirem valores muito pequenos, as conexões associadas podem ser consideradas insignificantes e assim serem eliminadas. De modo inverso, valores relativamente maiores que os outros poderiam indicar que houve "*over-fitting*" da rede.

A partir do momento em que a rede está treinada e avaliada, ela pode ser integrada a um sistema do ambiente operacional da aplicação. Para maior eficiência da solução, este sistema deverá conter facilidades de utilização como interface conveniente e facilidades de aquisição de dados através de planilhas eletrônicas, interfaces com unidades de processamento de sinais, ou arquivos padronizados. Uma boa documentação do sistema e o treinamento de usuários são necessários para o sucesso do mesmo. Além disso, o sistema deve periodicamente monitorar sua performance e fazer a manutenção da rede quando for necessário ou indicar aos projetistas a necessidade de retreinamento. O sistema tende a melhorar conforme os usuários vão se familiarizando com ele, de modo a sugerir mudanças para melhor.

### **4.3 Aplicação de redes neurais artificiais**

A aplicação de redes neurais pode ser classificada em áreas distintas: reconhecimento de padrões e classificação; processamento de imagem e visão; identificação de sistema e controle e processamento de sinais. O reconhecimento

ótico de caracteres (OCR) é outro tipo de aplicação, segundo Kovács (1996), que já existe e está crescendo, e em breve será constante o contato com esse tipo de aplicação. Outras aplicações bem sucedidas das técnicas de redes neurais artificiais são: análise de pesquisa de mercado, controle de processos industriais, aplicações climáticas, e identificação de fraude de cartão de crédito, que foi implementado com técnicas de redes neurais. Este sistema da área financeira tem a capacidade de reconhecer o uso fraudulento com base nos padrões criados no passado com uma precisão melhor que em outros sistemas. Outro exemplo da utilização de redes neurais para melhoria na tomada de decisões é no diagnóstico médico. Em seu aprendizado, são submetidos uma série de diagnósticos de pacientes, de várias características, com vários sintomas e os resultados de seus exames. Também serão fornecidos os diagnósticos médicos para cada doença. Então, quando forem apresentados os dados de um novo paciente, com seus sintomas, a rede fornecerá um diagnóstico para os novos casos. Isto essencialmente criará um sistema com o conhecimento de vários médicos, e fornecerá um diagnóstico inicial em tempo real a um médico. Cabe lembrar que com isso o que se pretende é implementar uma ferramenta de auxílio ao médico, e não um programa que o substitua. Mais aplicações são enumeradas ( Braga et al, 2000): reconhecimento de padrões em linhas de montagem; filtros contra ruídos eletrônicos; análise de voz; análise de aroma e odor, um projeto que está em desenvolvimento, buscando a análise de odor via nariz eletrônico; e até a solução de problemas de minimização e otimização, como por exemplo, de percurso de caminhões.

No campo da engenharia, a utilização de redes neurais artificiais na modelagem de processos não-lineares tem recebido uma atenção crescente na literatura técnica especializada. Este interesse se deve a sua relativa facilidade de implementação, sua característica de poder ser aplicada a processos não-lineares e pelo fato de não necessitar de conhecimento dos parâmetros de sistema em estudo. De modo geral, conseguem chegar a resultados superiores àqueles alcançados pelos métodos clássicos de modelagem e simulação de processos.

Apesar destes atrativos citados, somam-se a mínima complexidade matemática e o fácil entendimento; as redes neurais artificiais exigem que um grande número de dados experimentais (centenas ou mesmo milhares) do processo esteja disponível, de modo a representá-lo com precisão.

Quando se fala de simulação, existem várias publicações revelando sucesso no uso de redes neurais artificiais para o controle de processo. Contudo em termos industriais o número de relatos é bem escasso. A explicação para isto é que a obtenção de um vasto conjunto de dados experimentais não é uma tarefa muito fácil, e certamente por motivos de sigilo, por questões ambientais ou mesmo porque a produtividade de uma planta pode ser comprometida.

A decisão pela utilização de redes neurais neste trabalho baseia-se no fato de apesar do cunho sigiloso deste processo, se dispõe de uma quantidade de dados experimentais, resultantes de ensaios de enriquecimento isotópico, formando um considerável banco de dados. Ao mesmo tempo, estudos anteriores (Migliavacca, 1999a, 1999b e 2000) relacionados à área, permitem a associação das redes neurais a um modelo fenomenológico, que descreve o processo de separação isotópica por ultracentrifugação. Este estudo visa à apreciação do desempenho separativo da ultracentrífuga, levando-se em consideração a natureza de parâmetros de fluxo, resultado da interação entre a força centrífuga e as contracorrentes mecânicas e térmicas que atuam sobre o escoamento do gás.

#### **4.4 Redes neurais híbridas**

A proposta deste trabalho é fornecer um modelo de rede neural híbrida, como está esquematizado na Figura 4.8, com uma estrutura interna, onde cada parte do modelo final desempenha uma tarefa diferente. As partes claramente identificáveis do modelo são o estimador de parâmetros de processo (rede neural) e o modelo fenomenológico parcial. O modelo fenomenológico fornece um ponto de partida melhor do que a rede neural definida como uma "caixa preta". Uma vez que as redes neurais podem aproximar, arbitrariamente, funções onde não se conhece, a priori, nenhuma parametrização, elas podem completar de maneira ideal o modelo básico.

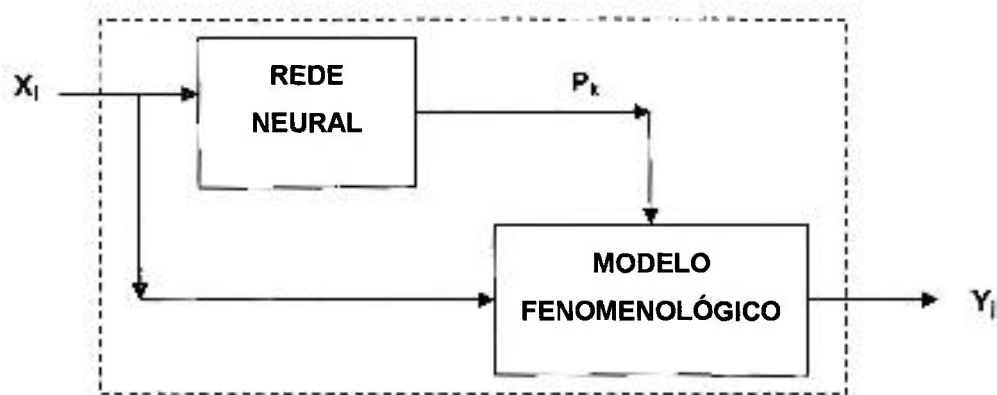


Figura 4.8 - Diagrama de blocos do modelo de rede neural híbrida proposto para a modelagem dos parâmetros separativos de ultracentrífugas

O modelo final resultante pode ser entendido como uma rede neural estruturada que contém alguma restrição baseada no conhecimento do processo, tal como balanços de massa e energia; por outro lado o modelo pode ser entendido como um conjunto de equações que contém  $P_k$  *parâmetros do processo* cuja dependência das variáveis de estado controladas do processo é modelada por uma rede neural.

De acordo com a proposta deste trabalho, esquematizada pelo diagrama de blocos da Figura 4.8, a estrutura do modelo a ser desenvolvido está representada na Figura 4.9, onde são identificadas as variáveis de processo a serem consideradas.

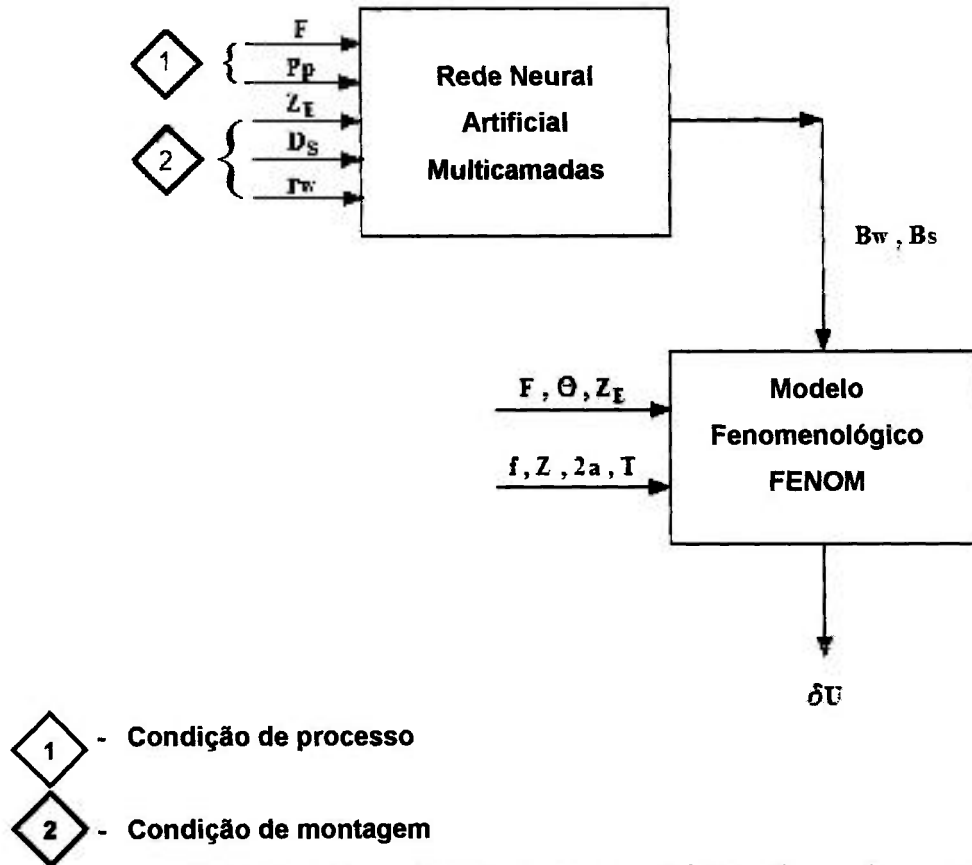


Figura 4.9 - Diagrama esquemático da rede neural híbrida para representação da separação efetuada por uma ultracentrífuga a contracorrente

Onde:

- $F$  é o fluxo de alimentação
- $P_p$  pressão na saída de produto
- $Z_E$  ponto axial de alimentação no rotor
- $D_s$  diâmetro do orifício central do disco rotativo
- $r_w$  raio do coletor do rejeito
- $f$  frequência de rotação
- $Z$  comprimento útil do rotor
- $2a$  diâmetro do rotor
- $T$  temperatura do gás processo (admitida)
- $B_w, B_s$  parâmetros de fluxo do escoamento interno da ultracentrífuga a contracorrente.

A rede neural híbrida acima vai estabelecer a correlação entre as variáveis aplicadas na prática ( $D_S$ ,  $r_W$ ,  $Z_E$ , etc.) com os parâmetros do modelo que descrevem o escoamento interno da ultracentrífuga que são  $B_W$  e  $B_S$ .

O modelo fenomenológico a ser empregado necessita da informação de parâmetros que caracterizam o tipo de ultracentrífuga utilizada nos ensaios, que são: a frequência de rotação  $f$ , o comprimento  $Z$  e o diâmetro  $2a$  do rotor, e das condições de operação que não foram alteradas durante o decorrer dos ensaios, que são o corte  $\theta$  e a temperatura  $T$ .

Um conjunto de dados experimentais que representam o processo de operação de uma unidade de ultracentrífuga é apresentado à rede neural do tipo supervisionada com algoritmo de retropropagação do erro, de acordo com o esquema representado pela Figura 4.10, visando gerar sinais de saída que possam ser utilizados como parâmetros (neste caso em especial referem-se aos parâmetros de fluxo interno  $B_W$  e  $B_S$ , da unidade de ultracentrífuga que são de difícil obtenção tanto na literatura, como de maneira empírica) necessários à resolução do modelo fenomenológico.

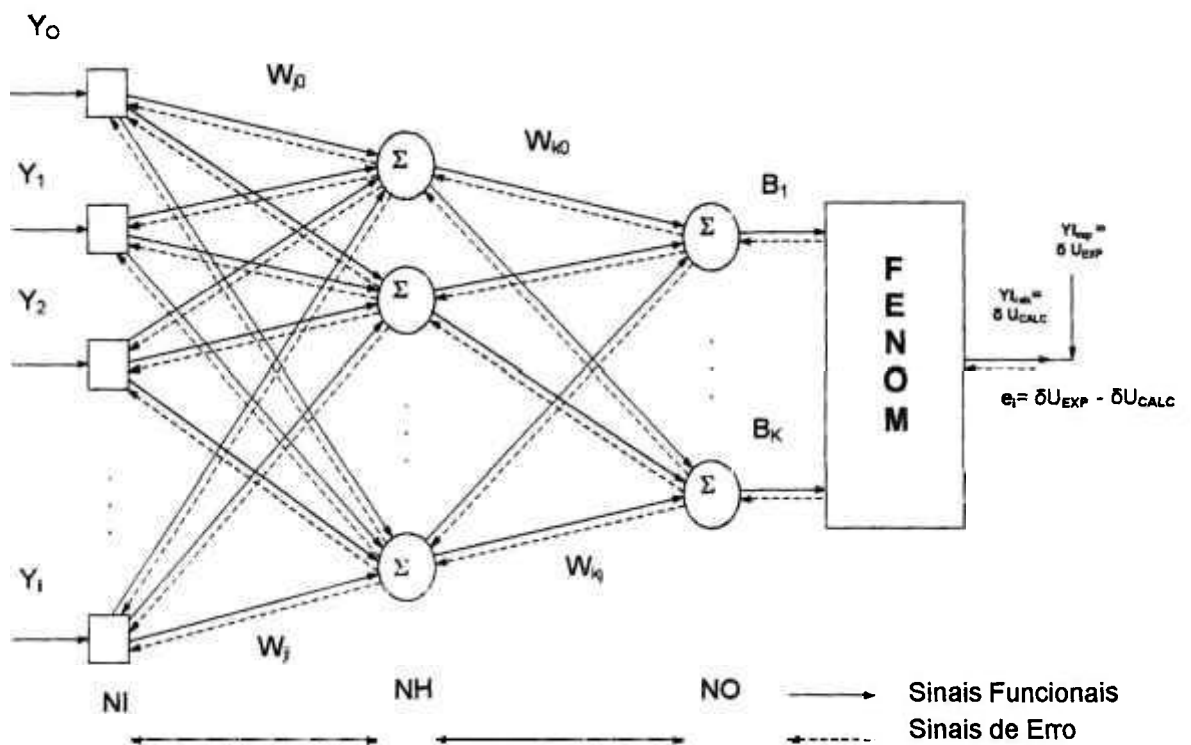


Figura 4.10 - Esquema do modelo de redes neurais híbridas



Onde:

**NVAR1** = NI - nº das  $Y_i$  variáveis de entrada: **F**, **P<sub>P</sub>**, **Z<sub>E</sub>**, **rw** e **Ds**

**NH** – número de neurônios da camada oculta

**NO** - número de saídas da camada de saída da rede neural: **B<sub>s</sub>** e **B<sub>w</sub>**

**NVAR2** - número das  $Y_i$  variáveis da saída do modelo de rede neural híbrida:  $\delta U$

**NEXP** - número de experimentos

**[MATRIZ]** (**NEXP** ;  $Y_{i+Y_1}$ ) :representa o conjunto de dados como no esquema da

Figura 4.11:

NVAR1= 5					NVAR2= 1
F <sub>1</sub>	P <sub>P1</sub>	Z <sub>E1</sub>	Ds <sub>1</sub>	rw <sub>1</sub>	δU <sub>1</sub>
F <sub>2</sub>	P <sub>P2</sub>	Z <sub>E2</sub>	Ds <sub>2</sub>	rw <sub>2</sub>	δU <sub>2</sub>
F <sub>3</sub>	P <sub>P3</sub>	Z <sub>E3</sub>	Ds <sub>3</sub>	rw <sub>3</sub>	δU <sub>3</sub>
...	...	...	...	...	...
F <sub>NEXP</sub>	P <sub>P NEXP</sub>	Z <sub>E NEXP</sub>	Ds <sub>NEXP</sub>	rw <sub>NEXP</sub>	δU <sub>NEXP</sub>

**Figura 4.11** - Disposição dos dados para alimentação no programa NEURO HÍBRIDO

Migliavacca (1991) apresentou uma revisão da teoria de separação isotópica de uma ultracentrífuga a contracorrente, com variação axial de fluxo interno, resolvendo a equação da difusão e convecção de acordo com Cohen (1951) e Furry, Jones e Onsager (1939) para fluxo interno constante ao longo do eixo rotor, sendo adaptado para a variação axial do fluxo da contracorrente. Este modelo permite o cálculo do poder de separação  $\delta U$  através de um programa em FORTRAN, que neste trabalho foi denotado por FENOM (alusão à parte fenomenológica do modelo de rede neural híbrida). A adaptação do modelo fenomenológico a ser usado juntamente no treinamento da rede neural híbrida consiste basicamente em alterar comandos de entrada e saída do programa de modo a estabelecer a comunicação com a rede. Sob este prisma, o programa FENOM receberá valores calculados pela rede que permitirão a definição e ajuste de parâmetros internos do processo em estudo que normalmente são de difícil estimativa.

A adaptação do programa em Fortran de treinamento de redes neurais NEURO14 (Nascimento, 1992) centra-se no tipo de algoritmo de treinamento utilizado pela rede neural que é o algoritmo de retropropagação de erro.

#### 4.4.1 Alteração do algoritmo de retropropagação para a rede neural híbrida

O algoritmo de retropropagação para uma rede MLP, descrito anteriormente no item 4.2.4, sofreu uma adaptação fazendo com que o modelo final passasse a ser denominado Modelo de Redes Neurais Híbridas. Esse modelo já representado pela Figura 4.10 tem a parte fenomenológica, que está descrita no Apêndice A, comportando-se como uma função dos parâmetros  $B_k$  fornecidos pela rede neural MLP e de parte das variáveis de entrada  $Y_i$

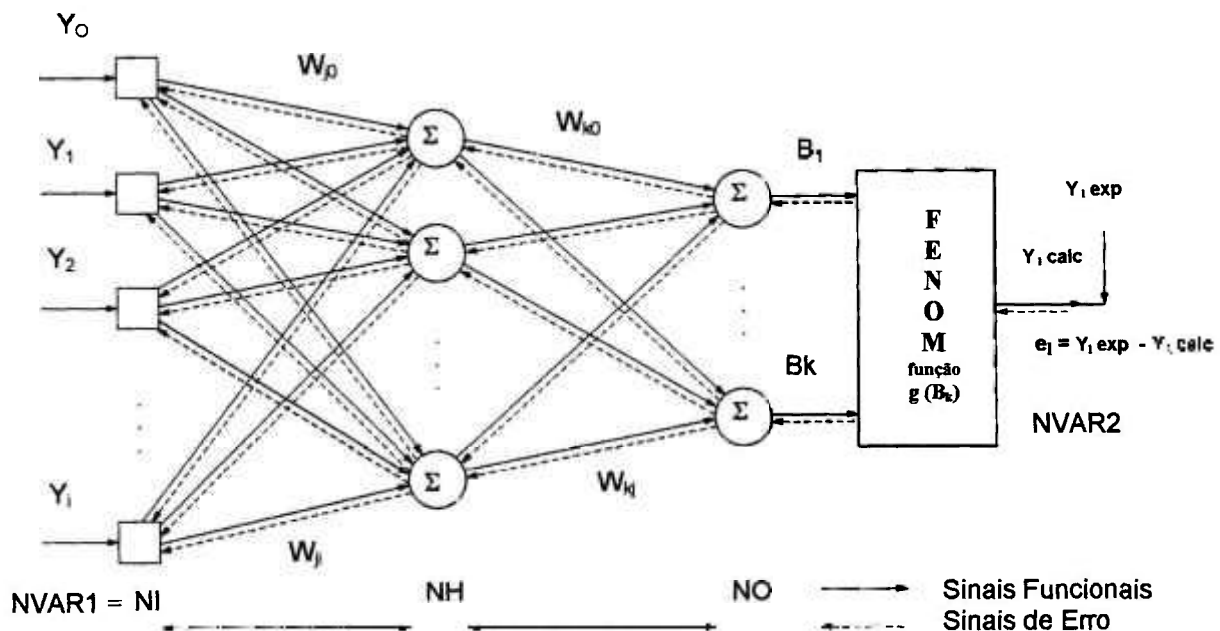


Figura 4.12 - Esquema do modelo de redes neurais híbridas para adaptação do algoritmo de retropropagação

Fazendo-se as seguintes considerações para o modelo proposto e simplificações quanto a  $n$  para maior clareza, os equacionamentos do item 4.2.4 redefinidos, vêm:

$$e_i = y_i^{\text{exp}} - y_i^{\text{calc}} \quad (4.18)$$

$$y_i = g(B_1, B_2, \dots, B_k) \quad (4.19)$$

$$E = \frac{1}{2} \sum_i e_i^2 \quad (4.20)$$

$$B_k = \varphi(u_k) \quad (4.21)$$

$$u_k = \sum w_{kj} * y_j \quad (4.22)$$

Aplicando-se a regra da cadeia para a obtenção da expressão do ajuste dos pesos sinápticos da camada de saída, a equação 4.8 se tornará:

$$\Delta w_{kj} = \eta * \left( \left( \sum_{l=1}^{NVAR2} e_l \right) * \varphi'(u_k) * g'(B_k) \right) * y_j \quad (4.23)$$

onde a derivada da função  $g$  será um Jacobiano, ou seja, a somatória das derivadas parciais de  $y_i$ , que são as NVAR2 variáveis de saída do modelo de redes neurais híbridas, em função dos  $B_k$ 's. Portanto:

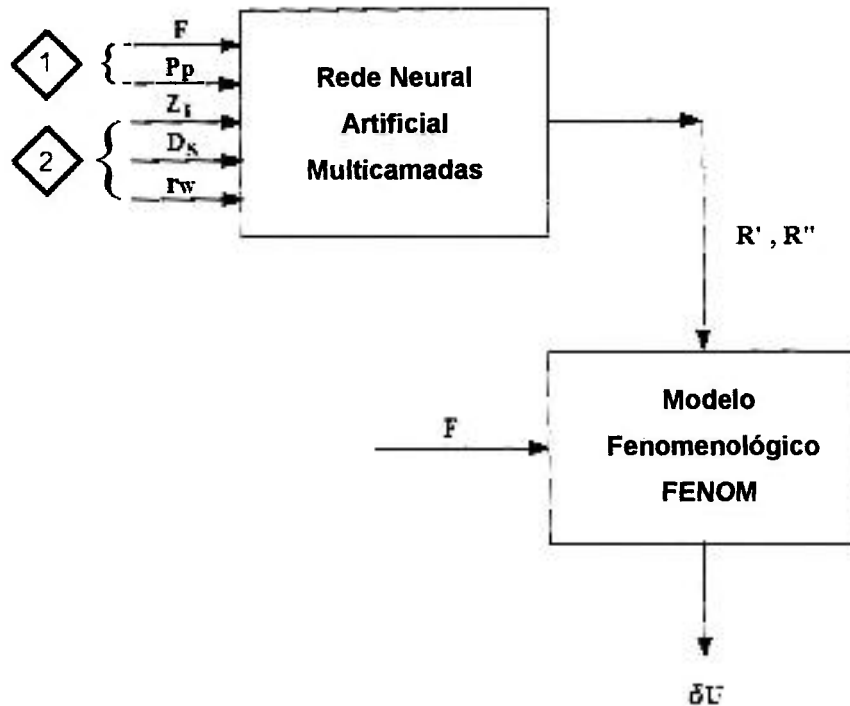
$$g' = \sum_{l=1}^{NVAR2} \left( \frac{\partial y_i}{\partial B_k} \right) \quad (4.24)$$

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

$$\Delta w_{kj} = \eta * \left[ \varphi_j'(u_j) * \sum_{l=1}^{\infty} \left[ \left( \sum_{i=1}^{NVAR2} e_i \right) * \varphi_i'(u_k) * g'(B_k) * w_{kj} \right] \right] * y_j \quad (4.25)$$

#### 4.5 Validação do modelo de redes neurais híbridas

Uma vez que o modelo fenomenológico proposto mostrou-se muito complexo, exigindo um tempo de processamento muito longo para a sua repetitiva execução dentro do processo de treinamento, uma estrutura diferente de variáveis do modelo de rede neural híbrida foi proposta, para verificação e validação do processo de treinamento do modelo de rede neural híbrida. Este modelo mais simples está esquematizado na Figura 4.13, cujos resultados estão apresentados e discutidos no capítulo 5.



- 1 - Condição de processo  
 2 - Condição de montagem

Figura 4.13 - Esquema de rede neural híbrida para validação do modelo

Onde:

- $R'$  é a razão de abundância do produto
- $R''$  é a razão de abundância do rejeito

Para esta etapa de validação do modelo de rede neural híbrida foi utilizado o mesmo banco de dados com 573 experimentos divididos em:

- Conjunto de Treinamento ("*Learning Set*" / LS) NEXP = 382 experimentos
- Conjunto de Teste ("*Testing Set*" / TS) NEXP = 191 experimentos

A parte fenomenológica neste caso é representada pela expressão empírica do poder de separação (Equação 3.13) denotada sob a forma:

$$\delta U = P^*(R'-1)/(R'+1) \ln R' + W^*(R''-1)/(R''+1) \ln R'' - F^*(R-1)/(R+1) \ln R \quad (3.13)$$

com  $\delta U$  em UTS/ano

#### 4.6 Parte fenomenológica: FENOM

O modelo fenomenológico utilizado na rede neural híbrida é o modelo resolvido por Migliavacca (1991) e já citado anteriormente. A rede neural gera os parâmetros  $B_s$  e  $B_w$  que alimentam o modelo fenomenológico que fornece o valor de poder de separação  $\delta U$ . Este valor é comparado com o valor experimental e retorna o sinal de erro pelo programa como descrito no algoritmo de retropropagação. Dentro deste raciocínio, a adaptação do processo de treinamento realizada foi o cálculo das derivadas parciais relativas à passagem dos valores das saídas da rede pelo modelo fenomenológico, ou seja, qual é a variação que os pesos sinápticos sofrem pelo fato destes valores entrarem no cálculo do poder de separação e ainda, durante o procedimento da retropropagação, tem-se as “ derivadas parciais da função” a mais para serem consideradas.

A rede neural híbrida tem a tarefa de estabelecer a correlação entre as variáveis aplicadas na prática ( $D_s$ ,  $r_w$ ,  $Z_E$ ,  $F$ ,  $P_p$ ) com os parâmetros do modelo que descrevem o escoamento interno da ultracentrífuga ( $B_w$  e  $B_s$ ). O conjunto de dados experimentais é apresentado à rede neural que fornece os parâmetros  $B_s$  e  $B_w$  ao programa fenomenológico. Dentro do programa, ocorre a resolução da equação fundamental de difusão e convecção de *Cohen* (1951), apresentada resumidamente no item 8.1 - APÊNDICE A, gerando como saída o valor de  $\delta U$ .

#### 4.7 Método adotado de utilização de rede neural para substituir o FENOM

O procedimento de treinamento de uma rede neural híbrida foi validado de acordo com o item 4.5, cujos resultados são apresentados no capítulo 5.

Diante do tempo despendido na resolução da equação diferencial dentro do FENOM (programa em Fortran chamado de SIMSEP), o treinamento da rede neural híbrida tornou-se muito extenso, fazendo com que para cada apresentação dos dados à rede custasse cerca de quarenta (40) minutos, em um microcomputador Pentium IV, com velocidade de 1.4 GHz e 512 Mb de memória RAM. Para poucas apresentações (2000 a 3000 apresentações) o treinamento levaria cerca de setenta (70) dias para apenas um caso, e ainda, como é sabido, um projetista de redes neurais deve estabelecer muitas configurações na tentativa de obter o menor erro para os conjuntos de treinamento e teste em busca do melhor ajuste.

Em face dessas dificuldades, optou-se por uma outra estratégia, a de recorrer ao treinamento de uma rede neural alternativa que "aprenderia o FENOM". Esta rede alternativa, depois de treinada, funciona como a resolução do modelo fenomenológico que resolve a equação de difusão-convecção para uma ultracentrífuga, e este procedimento está descrito no item 8.3 - APÊNDICE C.

## **5 RESULTADOS E DISCUSSÃO**

### **5.1 Histórico dos dados experimentais**

Os valores dos dados experimentais deste trabalho são o resultado de inúmeros experimentos realizados no estudo de desenvolvimento e otimização de ultracentrífugas utilizadas no processo de separação isotópica de  $UF_6$  gasoso e reportam os ensaios efetuados com uma família de ultracentrífugas, durante um longo período.

Devido ao sigilo requerido deste processo, os dados dos experimentos foram normalizados para apresentação, como é feito em qualquer ou trabalho semelhante. Dessa forma, os dados estão apresentados no item 8.2 na Tabela B1 deste trabalho, utilizando unidades arbitrárias (**u.a.**) para cada grandeza.

### **5.2 Validação do modelo de redes neurais híbridas**

A validação do modelo foi explicada no item 4.2 e, especificamente, pela Figura 4.13, onde se definem as variáveis a serem consideradas. Várias arquiteturas de rede foram testadas variando-se o número de neurônios da camada oculta (NH). O resumo desses treinamentos pode ser observado na Tabela 5.1.

A rede que apresentou o menor erro (RMSTT) para o conjunto de teste possuía 9 neurônios na camada oculta. No entanto, esse valor mínimo de erro foi atingido com um número de apresentações relativamente alto em comparação às redes de 6 e 7 neurônios na camada oculta. Assim, uma análise mais detalhada foi efetuada nos resultados das redes com 8, 9 e 10 neurônios na camada oculta. Essa análise ratificou a escolha da rede com 9 neurônios, cujos resultados são apresentados a seguir.

TABELA 5.1

Valores mínimos dos erros do conjunto de aprendizagem (RMST) e do conjunto de teste (RMSTT) com seus respectivos números de apresentações à rede neural, para diferentes números de neurônios na camada oculta (NH), adotando número máximo de apresentações igual a 60000

NH	RMST	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES	RMSTT	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES
6	0.45200	9200	1.2700	9200
7	0.60039	18000	1.7327	9300
8	0.40183	10800	1.2573	11400
9	0.29609	60000	<b>0.91499</b>	34100
10	0.27130	60000	0.94594	60000

Na Figura 5.1 é apresentada a evolução dos erros observados no conjunto de treinamento (RMST) e de teste (RMSTT) ao longo das apresentações no processo de treinamento.

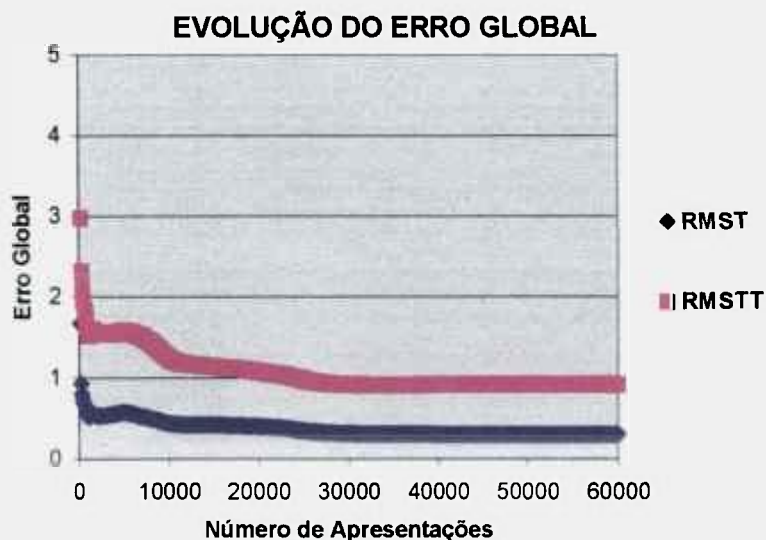
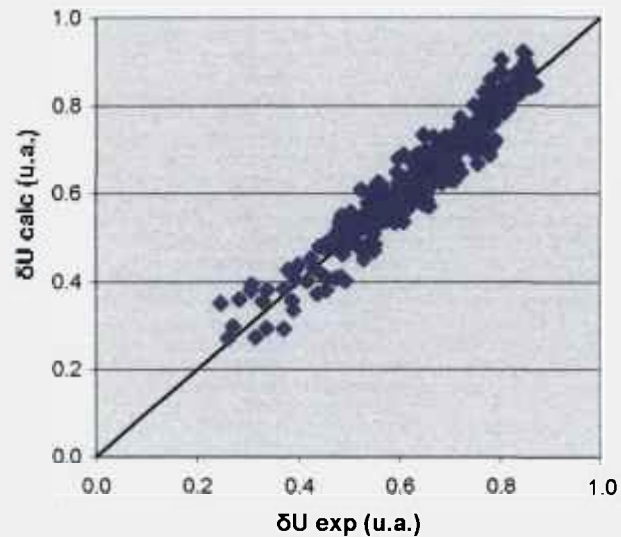


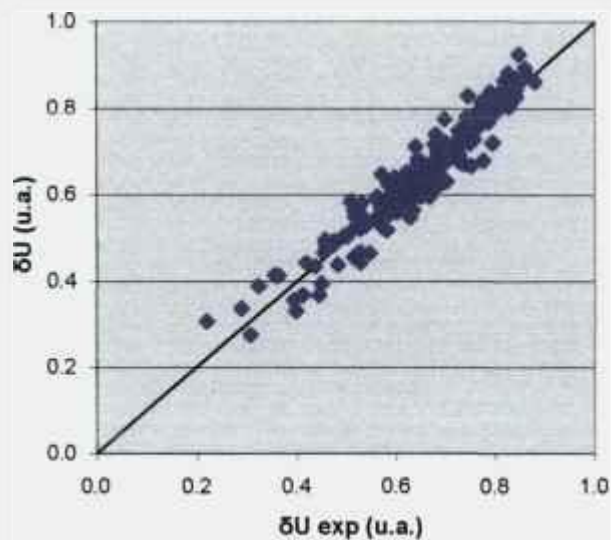
Figura 5.1 - Evolução do erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) da rede com 9 neurônios, ao longo de seu treinamento até 60000 apresentações



A comparação entre os valores do poder de separação experimentais apresentados à rede pelo banco de dados, e os valores calculados pelo modelo está representada pela Figura 5.2, onde se verifica uma ótima concordância dos resultados para ambos os conjuntos de treinamento e de teste.



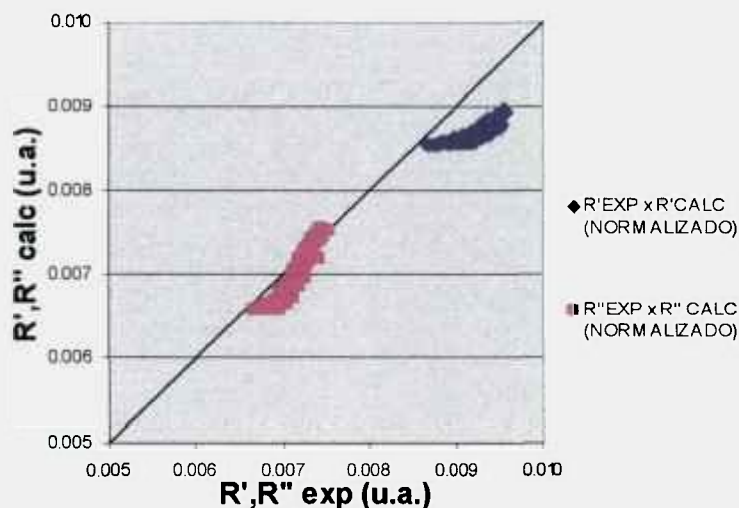
(a)



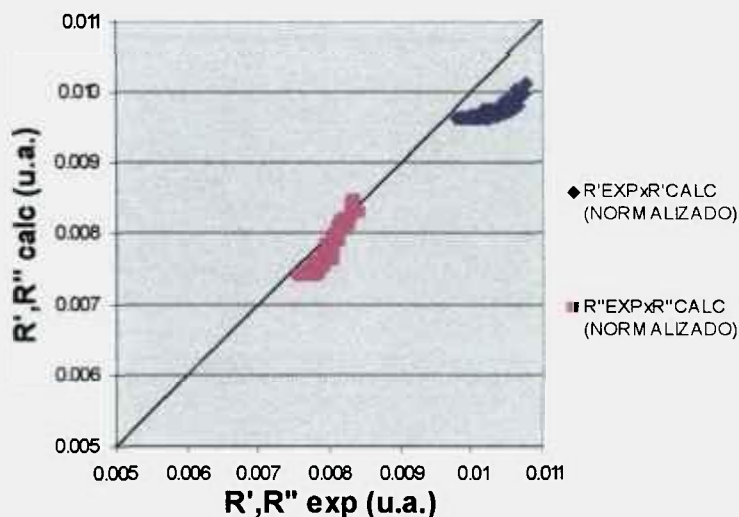
(b)

**Figura 5.2** - Dispersão dos valores obtidos para  $\delta U$  experimentais e  $\delta U$  calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 9 neurônios, e treinamento até 60000 apresentações

Já nas Figuras 5.3.a e 5.3.b têm-se as comparações entre os valores das razões de abundância  $R'$  e  $R''$ , calculados pela rede neural como parâmetros internos do modelo de rede neural híbrida, e os respectivos valores experimentais, conhecidos no presente caso. Essa análise sugere a possibilidade de uma compensação entre os parâmetros calculados, resultando num bom ajuste da variável final ( $\delta U$ ).



(a)

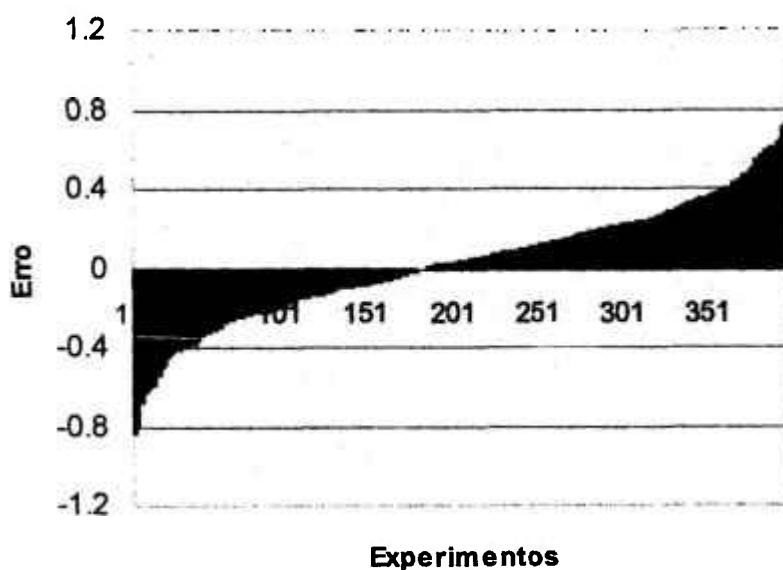


(b)

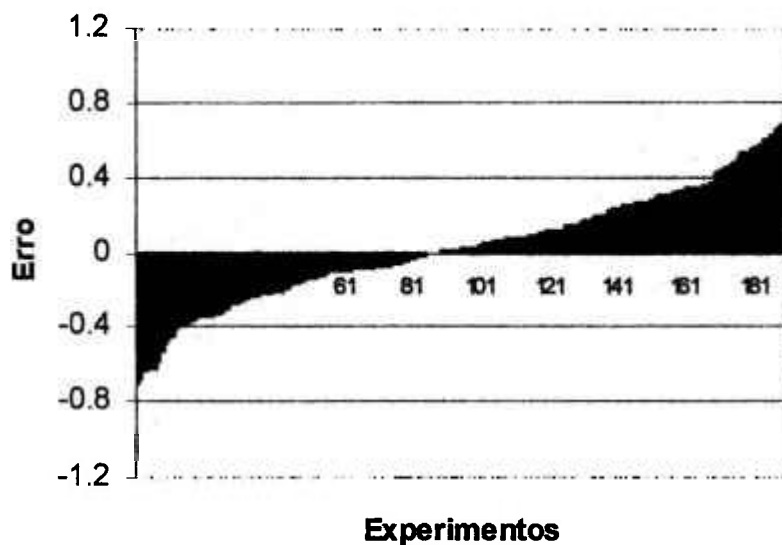
Figura 5.3 - Dispersão dos valores obtidos para  $R'$ ,  $R''$  experimentais e  $R'$ ,  $R''$  calculados, gerados pela rede no modelo de rede neural híbrida, para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 9 neurônios, e treinamento até 60000 apresentações

Assim, o modelo fenomenológico a ser utilizado numa modelagem deve ter um bom embasamento físico e uma estreita relação com as variáveis de entrada utilizadas, para não se correr o risco de fornecer parâmetros intermediários inconsistentes com a realidade do processo.

Em ambas as Figuras 5.4.a e 5.4.b está representada a função distância para os erros calculados de  $\delta U$ , onde se verifica uma simetria comum (considerando-se o rebatimento de uma das metades) a uma distribuição normal com uma média de erros igual ao valor zero. Portanto, os valores resultantes para  $\delta U$ , vindos do modelo de rede neural híbrida, estão bem ajustados, permitindo a generalização do processo.



(a)



(b)

**Figura 5.4** - Distribuição dos valores de erros ( $\delta U$  experimental -  $\delta U$  calculado) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 9 neurônios

### 5.3 Análise do modelo de rede neural híbrida

#### 5.3.1 Análise do modelo de rede neural híbrida para Bw constante

Esta análise é feita a partir do modelo esquematizado na Figura 5.5, e os resultados são apresentados e discutidos em seguida.

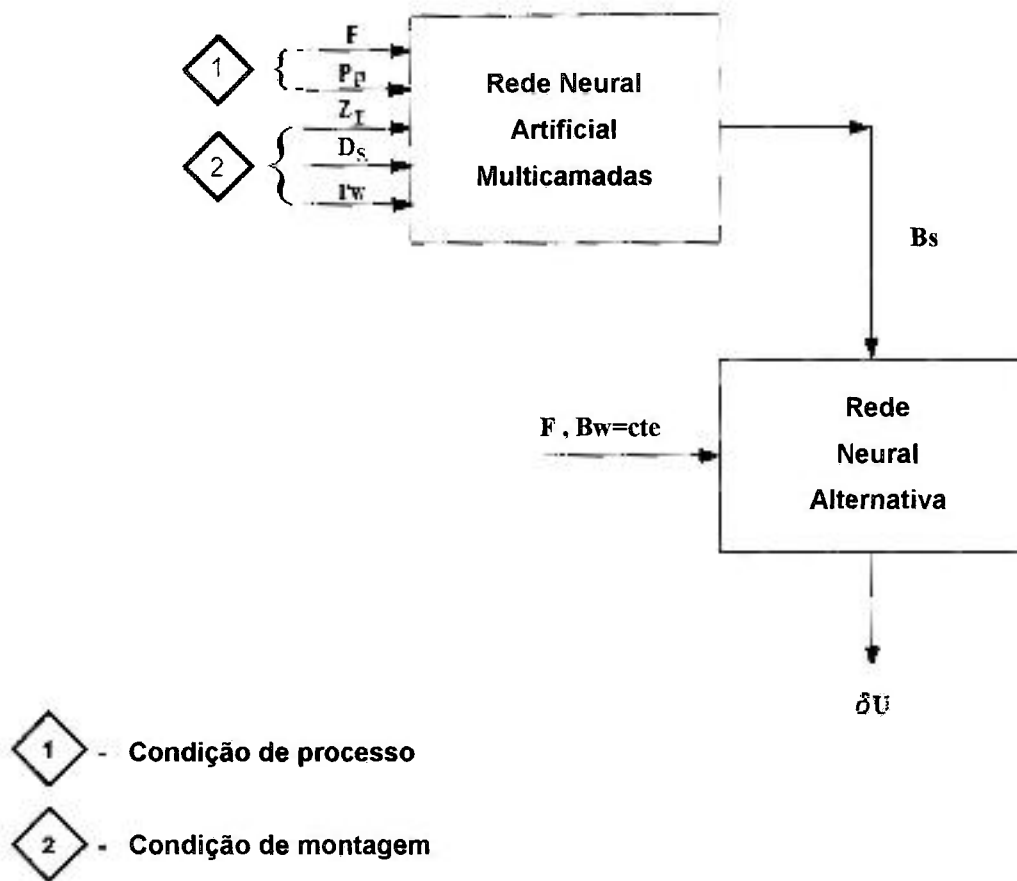


Figura 5.5 - Esquema de rede neural híbrida para análise do modelo considerando  $B_w$  constante e  $B_s$  ajustado pela rede neural híbrida

Nessa análise inicial, considerou-se que a partir dos resultados de  $\delta U$  obtidos dos experimentos realizados pôde-se escolher valores relativamente baixos de  $B_w$ , por entender-se que esses representam uma contribuição do efeito térmico na geração da contracorrente muito pequena, para estas configurações de montagem de ultracentrífugas avaliadas. Assim, foram escolhidos três (3) valores constantes de  $B_w$ , para os quais os resultados obtidos estão apresentados na Tabela 5.2.

**TABELA 5.2**

Valores dos erros mínimos para o conjunto de aprendizagem (RMST) e para o conjunto de teste (RMSTT) com os respectivos números de apresentações, para várias redes com diferentes números de neurônios na camada oculta (NH) e diferentes valores escolhidos para BW, sendo o número máximo de apresentações igual a 50000

<b>Bw = 250 / Bs = intervalo entre 25000 - 50000</b>				
NH	RMST	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES	RMSTT	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES
9	0.64151	50000	1.76400	49800
10	0.63215	50000	1.60840	49900
11	0.62905	37000	1.72540	43200
12	0.57766	49800	<b>1.54590</b>	49700
<b>Bw = 500 / Bs = intervalo entre 25000 - 50000</b>				
NH	RMST	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES	RMSTT	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES
9	0.64300	48500	1.70000	30200
10	0.63351	50000	1.62740	50000
11	0.63030	50000	1.77710	46200
12	0.61520	50000	1.68710	50000
<b>Bw = 1000 / Bs = intervalo entre 25000 - 50000</b>				
NH	RMST	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES	RMSTT	NÚMERO DE APRESENTAÇÕES
9	0.65190	22300	1.74140	49800
10	0.65176	50000	1.68450	50000
11	0.64607	50000	1.79580	40900
12	0.62070	20700	1.71880	24800

Para a discussão final foi adotado  $Bw = 250$ , por ser o caso que apresentou o menor valor de erro global no conjunto de teste (RMSTT) para a configuração de rede com 12 neurônios na camada oculta.

A evolução dos erros observados no conjunto de treinamento (RMST) e de teste (RMSTT) ao longo das apresentações no processo de treinamento está apresentada na Figura 5.6.

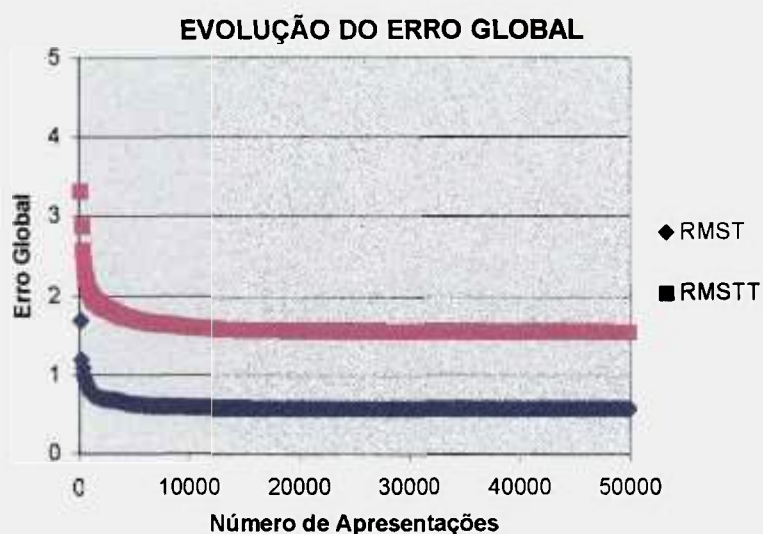
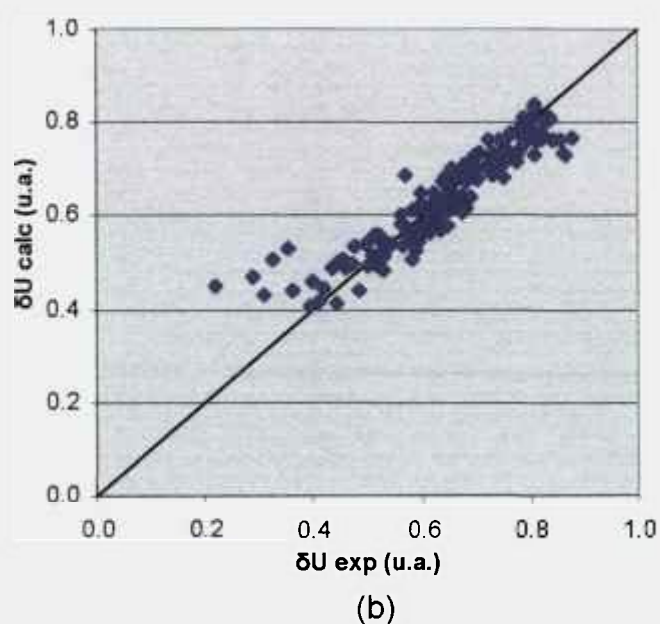
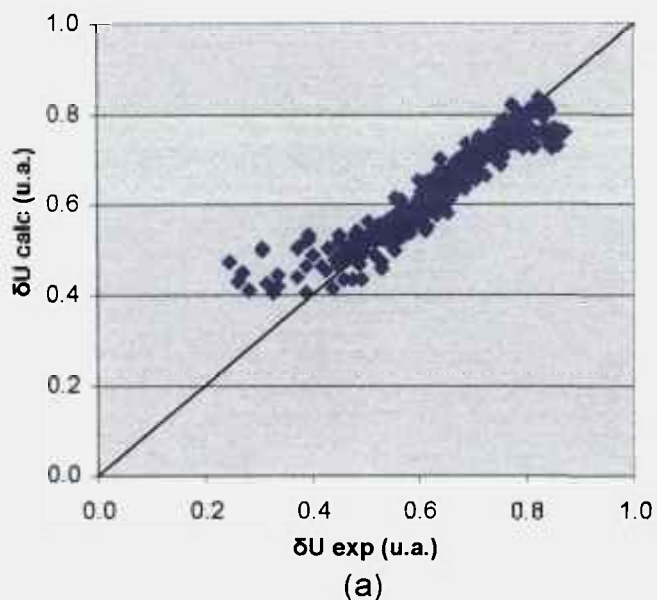


Figura 5.6 - Evolução do erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) para a rede com 12 neurônios, ao longo de seu treinamento até 50000 apresentações

A comparação entre os valores do poder de separação experimentais apresentados à rede pelo banco de dados, e os valores calculados pelo modelo é representada pela Figura 5.7, onde verificamos uma concordância significativa dos resultados.

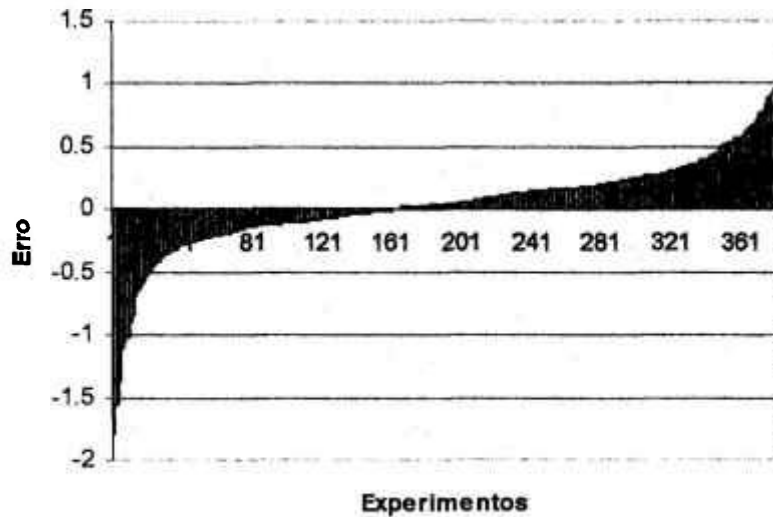


**Figura 5.7** - Dispersão dos valores obtidos para  $\delta U$  experimentais e  $\delta U$  calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de teste (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS), para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 50000 apresentações

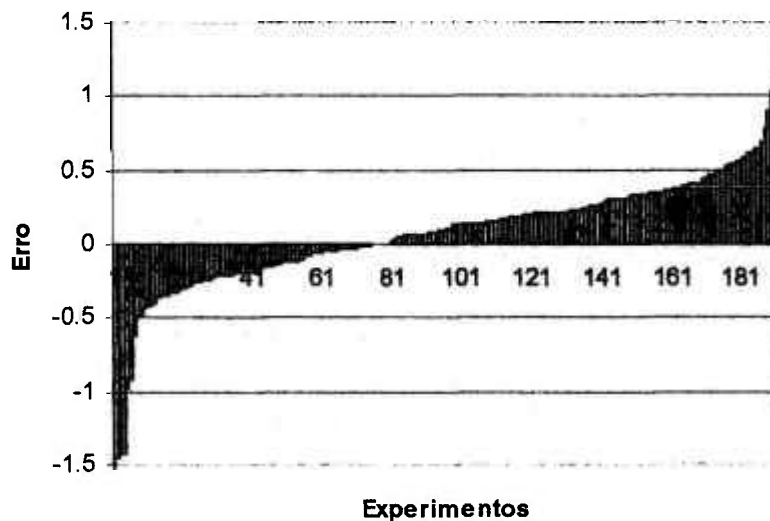
As Figuras 5.8.a e 5.8.b representam a função distância para os erros calculados de  $\delta U$ , onde se verifica uma simetria comum (considerando-se o rebatimento de uma das metades) a uma distribuição normal com uma média de erros igual ao valor zero. Portanto, os valores resultantes para  $\delta U$ , vindos do



modelo de rede neural híbrida, estão bem ajustados e permitiram a generalização do processo.



(a)

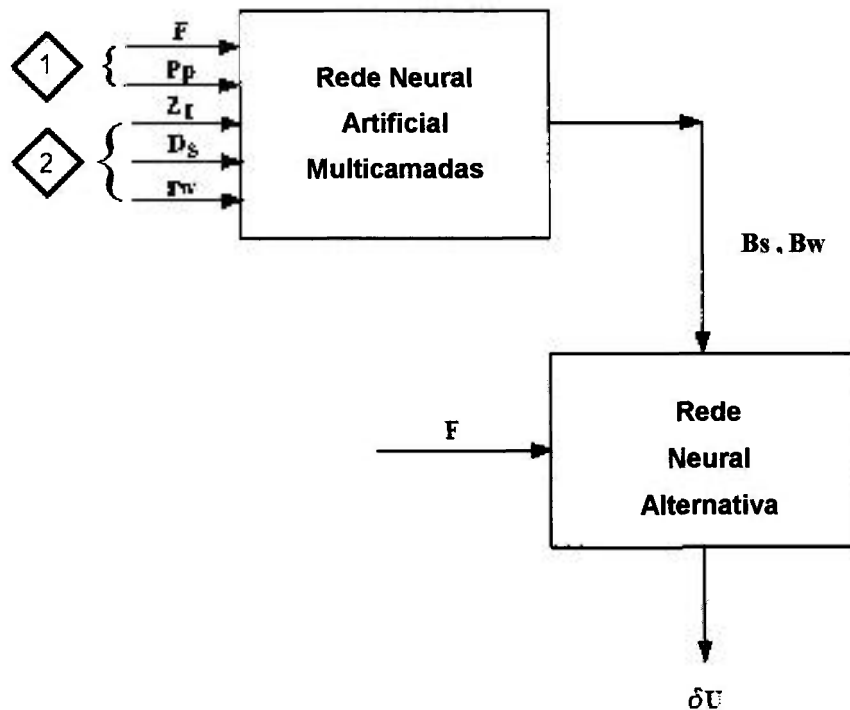


(b)

**Figura 5.8** - Distribuição dos valores de erros ( $\delta U$  experimental -  $\delta U$  calculado) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 50000 apresentações

### 5.3.2 Análise do modelo de rede neural híbrida para Bw e Bs variáveis

No presente caso, presume-se uma possível contribuição do efeito térmico na geração da contracorrente, variável com as condições de montagem e com as condições de processo, nas quais foram obtidos os dados experimentais. Esta análise é feita a partir do modelo esquematizado na Figura 5.9, cujos resultados estão apresentados e discutidos em seguida.



1 - Condição de processo

2 - Condição de montagem

Figura 5.9 - Esquema de rede neural híbrida para análise do modelo considerando Bw e Bs variáveis e sendo ajustados pela rede neural híbrida

Foi verificada que a convergência do processo de treinamento da rede é fortemente afetada pelo intervalo de validade definido para os parâmetros intermediários (Bw e Bs).

**TABELA 5.3**

Valores dos erros mínimos do conjunto de treinamento (RMST) e do conjunto de teste (RMSTT) e os respectivos números de apresentações, para várias redes com diferentes números de neurônios na camada oculta (NH), sendo o número máximo de apresentações igual a 200000

<b>Bw = intervalo entre 5000 e 20000</b>				
<b>Bs = intervalo entre 10000 e 50000</b>				
<b>NH</b>	<b>RMST</b>	<b>NÚMERO DE APRESENTAÇÕES</b>	<b>RMSTT</b>	<b>NÚMERO DE APRESENTAÇÕES</b>
6	0.50186	1000	1.44900	1200
7	0.33446	10600	1.01570	10800
8	0.24391	74400	0.76079	74400
9	0.18334	182400	0.62453	158200
10	0.19055	28400	0.61662	26000
11	0.22325	86800	0.68647	200000
12	0.16529	25200	<b>0.59149</b>	12220
15	0.17103	27200	0.59841	88200
19	0.14529	81200	0.52875	81000
20	0.14562	158200	0.55924	132800

A análise feita conduziu à escolha da rede neural híbrida com 12 neurônios na camada oculta, dentre as possíveis opções que eram 10, 12 e 19 neurônios. Esta foi a rede que apresentou, para um número relativamente baixo de apresentações, o menor erro para o conjunto de teste (RMSTT) e também o melhor ajuste de  $\delta U$  para o conjunto de treinamento (LS) e para o conjunto de teste (TS), com a melhor distribuição dos erros.

A evolução de erro global é mostrada na Figura 5.10 a seguir:

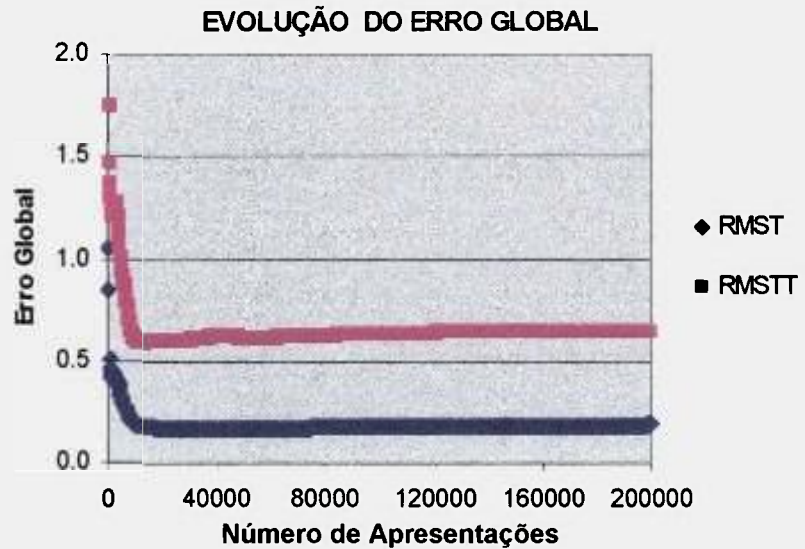
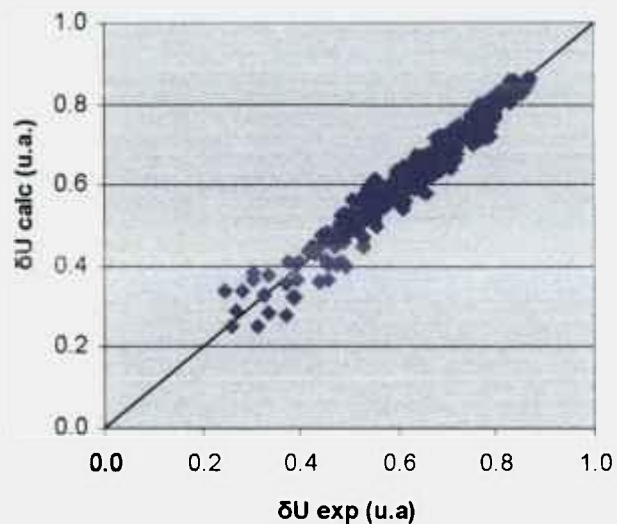
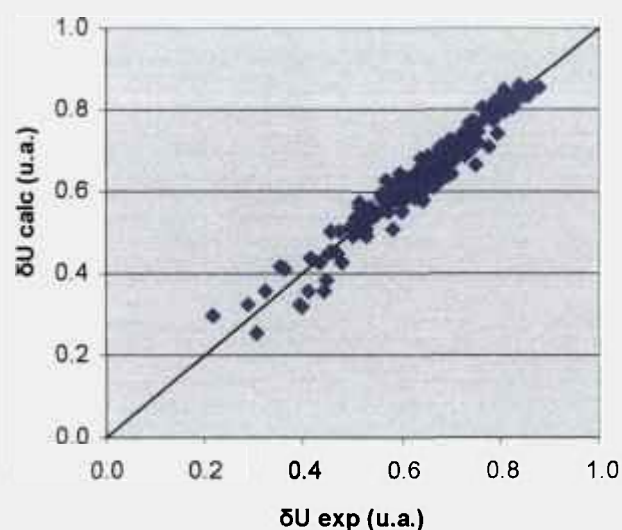


Figura 5.10 – Evolução do erro global RMST do conjunto treinamento (LS) e RMSTT do conjunto de teste (TS) para a rede com 12 neurônios, ao longo de seu treinamento até 200000 apresentações

A comparação entre os valores do poder de separação experimentais apresentados à rede pelo banco de dados, e os valores calculados pelo modelo é representada pela Figura 5.11, onde verificamos uma concordância muito boa dos resultados.



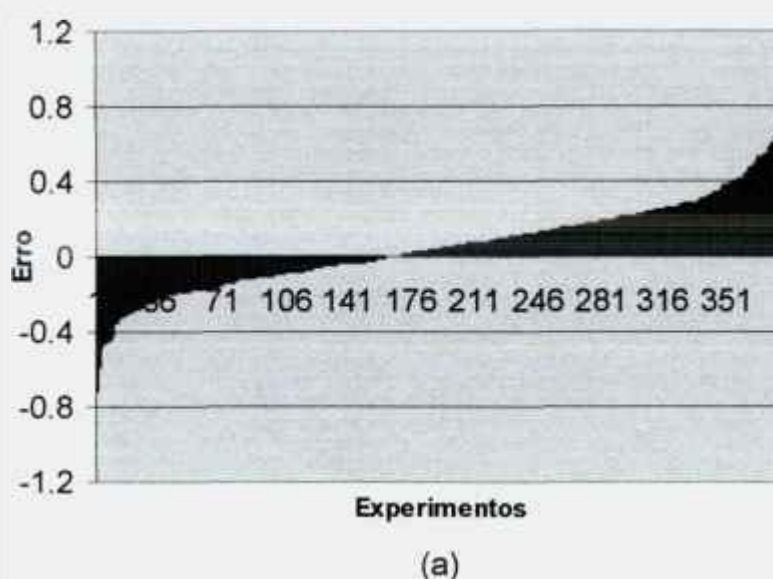
(a)



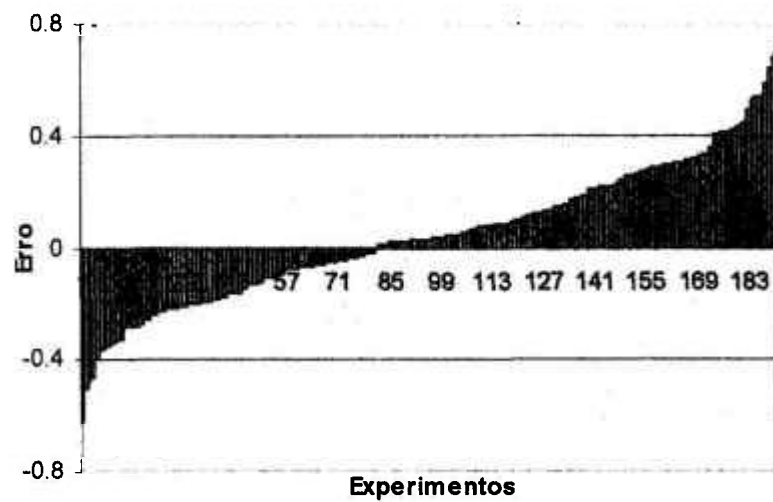
(b)

Figura 5.11 - Dispersão dos valores obtidos para  $\delta U$  experimentais e  $\delta U$  calculados para o conjunto de treinamento (LS) (a) e para o conjunto de treinamento (TS) (b) com os pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 200000 apresentações

As figuras 5.12.a e 5.12.b representam a função distância para os erros calculados de  $\delta U$ , onde a simetria esperada tem um leve deslocamento do centro do número de experimentos, mas foi a que mais se aproximou da distribuição normal com uma média de erros igual ao valor zero. Portanto, os valores resultantes para  $\delta U$ , vindos do modelo de rede neural híbrida, estão bem ajustados e permitiram a generalização do processo.



(a)



(b)

**Figura 5.12** - Distribuição dos valores de erros ( $\delta U$  experimentais -  $\delta U$  calculados) para o conjunto de treinamento (LS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (a) e para o conjunto de teste (TS) baseados nos pesos sinápticos do conjunto de teste (WTS) (b) para a rede com 12 neurônios, com treinamento até 200000 apresentações

## 6 CONCLUSÕES

O modelo de rede neural híbrida, desenvolvido neste trabalho, mostrou-se viável na tarefa de prever e generalizar a análise de processos de engenharia, para definição de parâmetros normalmente de difícil obtenção.

O treinamento da rede neural híbrida proposta com o modelo fenomenológico apresentou um tempo de processamento muito elevado (tempo estimado da ordem de 3 a 6 meses para cada rodada). Este problema foi solucionado com a adoção de uma rede neural alternativa que exerce o papel do modelo fenomenológico. Os tempos de processamento se tornaram exequíveis para a análise proposta.

O modelo desenvolvido e analisado permitiu validar o procedimento de treinamento da rede neural híbrida. Através desse caso, verificou-se que a definição das variáveis a serem utilizadas deve estar bem fundamentada no modelo fenomenológico a ser empregado. Caso contrário, há o risco de se calcular parâmetros intermediários sem coerência física. O treinamento da rede neural híbrida se mostrou sensível ao intervalo de validade dos parâmetros intermediários ( $B_s$  e  $B_w$ ), utilizado pelo programa para a normalização dos dados.

Quanto ao resultado final do modelo de rede neural híbrida, em termos da variável de saída  $\delta U$ , pode-se afirmar que ele apresentou ótima capacidade de aprendizado, fornecendo valores de  $\delta U$  calculados muito próximos aos de  $\delta U$  experimentais.

A decisão referente à arquitetura da rede neural, ao modelo fenomenológico a ser empregado e aos intervalos numéricos para os parâmetros intermediários, deve sempre considerar a experiência do pesquisador/engenheiro projetista.

O prosseguimento deste estudo possibilita análises mais específicas do processo, em termos dos parâmetros intermediários, em função das diversas variáveis de montagem e condições de operação, gerando mais subsídios ao desenvolvimento de novos projetos de ultracentrífugas.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. AVERY, D.G.; DAVIS, E. *Uranium Enrichment by Gas Centrifuges*. London: Mills and Boon, 1973.
2. BHAT, N.V.; MINDERMAN Jr, P.A.; McAVOY, T.; WANG, N.S. Modeling chemical process systems via neural computation. *IEEE Control Systems Magazine*, v.4, p.24-30, 1990.
3. BENEDICT, M.; PIGFORD, T.; LEVI, H.W. *Nuclear Chemical Engineering*, end. Ed. McGraw-Hill, New York, 1981.
4. BRAGA, A.P.; LUDERMIR, T.B.; CARVALHO, A.C.P.L.F. *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*, Editora LTC, 2000.
5. CHAN, W.M.; NASCIMENTO, C.A.O. Use of neural networks for modeling of olefin polymerization in high pressure tubular reactors. *J. Appl. Polymer Sci.*, v.53, p.1277-1289, 1994.
6. COHEN, K. *The Theory of Isotope Separation as Applied to the Large-Scale Production of U-235 - National Nuclear Series, Division III, vol.1B*, McGraw-Hill, New York, 1951.
7. COMPAQ Visual Fortran Professional Edition 6.6.0 [S.l.]: Compaq, 2000.
8. HAYKIN, S. *Neural Networks: a comprehensive foundation*, Prentice Hall, New Jersey, 1994.
9. HOSKINS, J.C.; HIMMELBLAU, D.M. Artificial neural network models of knowledge representation in chemical engineering. *Comput. Chem. Eng.*, v.12, n.9/19, p.881-890, 1988.
10. JORDAN, I. *Separação dos isótopos de urânio pelo processo da centrifugação em fase gasosa*. São Paulo, SP, 1966. Tese (Cátedra) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo.
11. JORDAN, I.; BUCHMANN, J.H. *Teoria de separação isotópica na centrífuga a contracorrente e cálculo dos parâmetros de separação*. São Paulo, SP: Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Jul. 1983. (IPEN-Pub.C-5).



12. KAI, T. Theoretical research on gas-centrifugal separation for uranium enrichment. *J. Nucl. Sci. Technol.*, v.26, n.1, p.157-160, 1989.
13. KOVÁCS, Z.L. *Redes Neurais Artificiais: Fundamentos e Aplicações*, Edição Acadêmica, 1996.
14. MIGLIAVACCA, S.C.P. *Cálculo dos parâmetros de separação de uma centrífuga a contracorrente com variação axial do fluxo interno*. São Paulo, SP, 1991. Dissertação (Mestrado) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
15. MIGLIAVACCA, S.C.P.; NASCIMENTO, C.A.O.; RODRIGUES, C. Use of neural network for the simulation of a gas centrifuge. *J. Nucl. Sci. Technol.*, v.36, n.4, p.364-370, 1999a.
16. MIGLIAVACCA, S.C.P. *Modelagem do comportamento separativo de ultracentrífugas via rede neural*. São Paulo, SP, 1999b. Tese (Doutorado) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
17. MIGLIAVACCA, S.C.P.; NASCIMENTO, C.A.O.; RODRIGUES, C. Analyses and optimization of gas-centrifugal separation of uranium isotopes by neural networks. *Braz. J. Chem. Eng.*, v.19, n.03, p.299-306, 2002.
18. NASCIMENTO, C.A.O. *NEURO14: Neural networks modeling training program for multilayer feedforward networks using: backpropagation algorithm; momentum algorithm or; backpropagation with dynamic dumping factor algorithm*. Author: Claudio A. Oller do Nascimento. LSCP-DEQ/EPUSP (VERSION 14 on 29.9.1996 (Roberto Guardani).
19. OLANDER, D.R. Technical basis of the gas centrifuge. *Adv. Nucl. Sci. Tech.*, v.6, p.105-174, 1972.
20. OLANDER, D.R. The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge. *Prog. Nucl. Energy*, v.8, p.1-33, 1981.
21. PEREIRA, L.M.; PEREZ-GUERRERO, J.S.; BRAZÃO, N.; COTTA, R.M. Compressible flow and heat transfer in ultracentrifuges – Hybrid analysis via integral transform. *Int. J. Heat & Mass Transfer*, in press, 2001.

22. PSICHOGIOS, D.C, UNGAR,L.H.,A Hybrid Neural Network-First Principles Approach to Process Modeling, *AIChE Journal*, vol.38, n.10,p.1499-1511,1992.
23. SOUBBARAMAYER Centrifugation. In: VILLANI,S., (ed.) *Uranium Enrichment*. Berlin: Springer Verlag, 1979. p.183 - 243.
24. UNITED STATES. Department of Energy. National Security Program Office. ***Safeguards Training Course for ABACC Inspectors***, Rio de Janeiro, Outubro, 1994.

## 8 APÊNDICES

### 8.1. APÊNDICE A – Descrição do cálculo dos parâmetros separativos pelo modelo fenomenológico (equação de difusão convecção para ultracentrífuga a contracorrente que representa a parte fenomenológica)

O cálculo dos parâmetros de separação a ser realizado pela subrotina FENOM está descrito em detalhes na dissertação de Migliavacca (1991). A Equação da difusão-convecção simplificada da ultracentrífuga descreve o transporte de material que ocorre com o componente leve (o isótopo desejado) no interior do rotor, sujeito à ação da força centrífuga na direção radial, na presença de um fluxo convectivo de material na direção axial, definido pela contracorrente interna. A solução dessa equação fornece o gradiente de concentração axial do isótopo leve ( $x$ ) ao longo do eixo vertical do rotor ( $z$  ou  $\eta=z/Z$ ). Como ocorre a introdução de um fluxo de alimentação aproximadamente na meia altura do rotor, essa equação é descrita por dois segmentos:

$$\frac{C_5}{Z} \frac{dx}{d\eta} = C_1 x(1-x) - W(x - x_W) \quad (8.1)$$

na seção de recuperação, que vai da base da ultracentrífuga ( $z=\eta=0$ ) até a altura da alimentação ( $z=Z_E$  ou  $\eta=\eta_F$ ) e

$$\frac{C_5}{\eta} \frac{dx}{dz} = C_1 x(1-x) - P(x_P - x) \quad (8.2)$$

na seção de enriquecimento, que vai do ponto de alimentação ( $z=Z_E$  ou  $\eta=\eta_F$ ) até o topo da ultracentrífuga ( $z=Z$  ou  $\eta=1$ ), sendo  $P$  e  $W$  os fluxos do produto e do rejeito da ultracentrífuga, com as respectivas composições  $x_P$  e  $x_W$ . Os parâmetros  $C_1$  e  $C_5$  são dados, nas seções de recuperação e enriquecimento, respectivamente por

$$C_1 = \frac{\Delta M}{M} \int_0^{A^2} [F + W \exp(-\xi)] d\xi \quad (8.3)$$

$$C_5 = \pi \rho D a^2 + \frac{1}{4\pi \rho D A^2} \int_{\eta}^{A^2} \frac{[F + W \exp(-\xi)] [F + W \exp(1 - \xi / A^2)]}{1 - \xi / A^2} d\xi \quad (8.4)$$

e

$$C_1 = \frac{\Delta M}{M} \int_{\eta}^{A^2} [F + P \exp(-\xi)] d\xi \quad (8.5)$$

$$C_s = \pi \rho D a^2 + \frac{1}{4\pi \rho D A^2} \int_0^{A^2} \frac{[F + P \exp(\xi)] \cdot [F - P \exp(1 - \xi/A^2)]}{1 - \xi/A^2} d\xi \quad (8.6)$$

onde:

$F$  = fluxo da alimentação

$\Delta M$  = diferença das massas moleculares dos isótopos = 0,003 kg/mol

$M$  = massa molecular do gás de processo  $UF_6$  = 0,352 kg/mol

$\xi$  = variável radial adimensional

$A^2$  = parâmetro adimensional da celeridade =  $\frac{Mv^2}{2RT}$

$v$  = velocidade periférica do rotor

$R$  = constante dos gases

$T$  = temperatura média do gás

$a$  = raio do rotor

$\rho D$  = produto da densidade e da difusividade mútua do gás de processo  $UF_6$  na temperatura  $T$ :  $\rho D = 1.032 \times 10^{-7} T^{0.937}$  (kg.m<sup>-1</sup>.s<sup>-1</sup>)<sup>1</sup>

$F$  = função de fluxo que descreve o fluxo interno em contracorrente

A função de fluxo  $F$  é obtida a partir a solução das equações de Navier-Stokes, juntamente com as equações de continuidade do gás, de conservação de energia e da equação de estado do gás. A função de fluxo  $F$ , assim como a densidade de fluxo axial  $p_w$ , pode ser representada pela soma das contribuições de cada modo de acionamento da contracorrente. Assim, a função de fluxo adotada é composta por um termo devido ao acionamento térmico na parede do rotor  $F_W$ , um termo devido ao acionamento pelo coletor  $F_S$  e um termo devido ao fluxo gerado pela introdução da alimentação no rotor  $F_F$ :

$$F = F_W + F_S + F_F \quad (8.7)$$

Cada um dos termos da expressão acima pode ser descrito por uma equação semi-empírica, como apresentado por Olander<sup>2</sup>:

$$F_W = B_W \left[ e^{-b_W \xi} - (1 + b_W \xi) \cdot e^{-2b_W \xi} \right] \cdot [4\eta(1 - \eta)]^c \quad (8.8)$$

<sup>1</sup> GALLOWAY em GMELIN – Handbuch der Anorganischen Chemie – U Ergänzungsband CB, Springer, Berlin-Heidelberg, 1980

<sup>2</sup> OLANDER, D.R. – The theory of uranium enrichment by the gas centrifuge. Prog. Nucl. Energy, v.8, p.8-33, 1981.

$$F_S = B_S \left[ e^{-b_S \xi} - (1 + b_S \xi) \cdot e^{-2b_W \xi} \right] \cdot e^{-\eta/\eta_S} \quad (8.9)$$

$$F_F = \begin{cases} P & \text{(na seção de enriquecimento)} \\ -W & \text{(na seção de recuperação)} \end{cases} \cdot B_S \left[ e^{-b_S \xi} - (1 + b_S \xi) \cdot e^{-2b_W \xi} \right] \cdot e^{-\eta/\eta_S} \quad (8.10)$$

Os coeficientes  $B_W$  e  $B_S$  são proporcionais à intensidade dos fluxos gerados pelos acionamentos térmico e mecânico, respectivamente. Os coeficientes  $b_W$  e  $b_S$  ( $b \leq 1$ ) definem o perfil de fluxo relativo a cada um dos acionamentos. Segundo Olander, o perfil de fluxo gerado pelo acionamento térmico na parede é bem representado com  $b_W=1$ . Já o fluxo estabelecido pelo coletor estacionário apresenta um perfil radial mais largo, e portanto pode ser representado por  $b_S=1/2$ . Os parâmetros  $c$  e  $\eta_S$  definem o decaimento axial do fluxo da contracorrente para cada tipo de acionamento, sendo adotado, segundo sugerido por Olander,  $c=2/3$  para a contracorrente térmica e  $\eta_S=0,5$  para a contracorrente gerada pelo coletor.

A solução da equação diferencial é realizada numericamente utilizando o método de Runge-Kutta, partindo da base da ultracentrífuga ( $z=0$ ) com um valor inicial da composição de rejeito  $x_W$ , estimada, até o topo onde se obtém o valor da composição do produto  $x_P$ . Através do balanço de material do isótopo leve dado por

$$F x_F = P x_P + W x_W \quad (8.11)$$

a solução é verificada. Caso não ocorra convergência, um novo valor da composição  $x_W$  é assumido, utilizando um algoritmo baseado em Newton-Raphson. Obtidas as composições  $x_P$  e  $x_W$ , os parâmetros separativos são então diretamente calculados através das equações (3.3) a (3.5) e (3.12).

## 8.2 APÊNDICE B – Valores normalizados das medidas das variáveis experimentais

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos

### Conjunto de Treinamento

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
1.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.88	0.10	0.14	0.73	41.	0.10	0.90	0.10	0.28	0.52	0.48	0.52	0.70
2.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.81	0.21	0.23	0.78	42.	0.10	0.90	0.10	0.28	0.48	0.51	0.62	0.74
3.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.67	0.35	0.41	0.84	43.	0.10	0.90	0.10	0.28	0.42	0.56	0.79	0.76
4.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.60	0.41	0.52	0.85	44.	0.10	0.90	0.10	0.43	0.52	0.48	0.34	0.48
5.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.51	0.52	0.71	0.84	45.	0.10	0.90	0.10	0.43	0.49	0.53	0.53	0.62
6.	0.10	0.10	0.10	0.13	0.43	0.54	0.79	0.80	46.	0.10	0.90	0.10	0.43	0.44	0.56	0.62	0.63
7.	0.10	0.10	0.10	0.27	0.74	0.22	0.23	0.71	47.	0.10	0.90	0.10	0.43	0.38	0.56	0.80	0.73
8.	0.10	0.10	0.10	0.28	0.74	0.32	0.33	0.79	48.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.64	0.39	0.13	0.36
9.	0.10	0.10	0.10	0.28	0.61	0.43	0.53	0.85	49.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.60	0.45	0.34	0.57
10.	0.10	0.10	0.10	0.28	0.52	0.43	0.61	0.86	50.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.54	0.49	0.43	0.59
11.	0.10	0.10	0.10	0.27	0.46	0.54	0.78	0.84	51.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.43	0.52	0.61	0.67
12.	0.10	0.10	0.10	0.43	0.74	0.28	0.12	0.48	52.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.46	0.57	0.72	0.73
13.	0.10	0.10	0.10	0.43	0.65	0.35	0.33	0.68	53.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.36	0.64	0.22	0.18
14.	0.10	0.10	0.10	0.44	0.59	0.37	0.43	0.76	54.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.22	0.77	0.33	0.10
15.	0.10	0.10	0.10	0.43	0.57	0.50	0.62	0.83	55.	0.90	0.10	0.10	0.25	0.77	0.28	0.13	0.50
16.	0.10	0.10	0.10	0.43	0.52	0.53	0.71	0.84	56.	0.90	0.10	0.10	0.25	0.62	0.38	0.22	0.48
17.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.90	0.15	0.13	0.69	57.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.43	0.58	0.41	0.42
18.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.85	0.23	0.23	0.79	58.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.32	0.66	0.52	0.35
19.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.64	0.35	0.44	0.84	59.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.17	0.81	0.70	0.22
20.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.59	0.40	0.54	0.88	60.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.09	0.88	0.79	0.15
21.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.51	0.50	0.70	0.87	61.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.67	0.34	0.22	0.55
22.	0.10	0.10	0.90	0.13	0.46	0.53	0.81	0.86	62.	0.90	0.10	0.10	0.39	0.62	0.45	0.33	0.56
23.	0.10	0.10	0.90	0.29	0.74	0.24	0.23	0.69	63.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.38	0.56	0.51	0.49
24.	0.10	0.10	0.90	0.29	0.65	0.29	0.34	0.76	64.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.31	0.64	0.61	0.43
25.	0.10	0.10	0.90	0.29	0.56	0.38	0.53	0.86	65.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.19	0.75	0.79	0.33
26.	0.10	0.10	0.90	0.29	0.52	0.44	0.62	0.87	66.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.73	0.27	0.13	0.50
27.	0.10	0.10	0.90	0.29	0.45	0.51	0.81	0.89	67.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.62	0.40	0.33	0.63
28.	0.10	0.10	0.90	0.44	0.74	0.28	0.13	0.49	68.	0.90	0.10	0.10	0.56	0.57	0.45	0.42	0.65
29.	0.10	0.10	0.90	0.44	0.59	0.35	0.33	0.65	69.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.38	0.56	0.62	0.58
30.	0.10	0.10	0.90	0.44	0.65	0.41	0.43	0.76	70.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.33	0.64	0.71	0.53
31.	0.10	0.10	0.90	0.44	0.57	0.50	0.61	0.83	71.	0.90	0.10	0.10	0.75	0.66	0.41	0.16	0.40
32.	0.10	0.10	0.90	0.44	0.47	0.50	0.71	0.83	72.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.63	0.38	0.24	0.51
33.	0.10	0.90	0.10	0.10	0.84	0.26	0.13	0.57	73.	0.90	0.10	0.10	0.69	0.57	0.49	0.42	0.61
34.	0.10	0.90	0.10	0.12	0.77	0.32	0.23	0.64	74.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.50	0.54	0.52	0.62
35.	0.10	0.90	0.10	0.13	0.61	0.42	0.43	0.72	75.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.36	0.61	0.71	0.57
36.	0.10	0.90	0.10	0.13	0.55	0.44	0.53	0.78	76.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.28	0.66	0.79	0.51
37.	0.10	0.90	0.10	0.13	0.50	0.54	0.72	0.82	77.	0.90	0.10	0.90	0.14	0.61	0.40	0.24	0.49
38.	0.10	0.90	0.10	0.13	0.44	0.54	0.79	0.83	78.	0.90	0.10	0.90	0.14	0.50	0.51	0.35	0.46
39.	0.10	0.90	0.10	0.26	0.68	0.39	0.24	0.54	79.	0.90	0.10	0.90	0.13	0.29	0.68	0.58	0.35
40.	0.10	0.90	0.10	0.24	0.64	0.43	0.34	0.62	80.	0.90	0.10	0.90	0.13	0.23	0.73	0.66	0.32

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Treinamento

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
81.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.73	0.35	0.24	0.62	121.	0.90	0.90	0.90	0.29	0.58	0.44	0.39	0.63
82.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.65	0.43	0.34	0.63	122.	0.90	0.90	0.90	0.29	0.51	0.51	0.48	0.61
83.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.46	0.54	0.54	0.61	123.	0.90	0.90	0.90	0.29	0.35	0.67	0.70	0.51
84.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.42	0.59	0.65	0.62	124.	0.90	0.90	0.90	0.29	0.27	0.68	0.80	0.48
85.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.31	0.71	0.84	0.51	125.	0.90	0.90	0.90	0.44	0.64	0.32	0.27	0.63
86.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.75	0.25	0.15	0.54	126.	0.90	0.90	0.90	0.44	0.61	0.41	0.39	0.69
87.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.63	0.39	0.36	0.68	127.	0.90	0.90	0.90	0.44	0.43	0.52	0.61	0.67
88.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.58	0.46	0.45	0.69	128.	0.90	0.90	0.90	0.44	0.44	0.59	0.70	0.68
89.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.42	0.53	0.66	0.68	129.	0.90	0.90	0.90	0.44	0.31	0.69	0.90	0.58
90.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.41	0.61	0.75	0.67	130.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.71	0.35	0.17	0.50
91.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.66	0.33	0.15	0.44	131.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.56	0.40	0.39	0.65
92.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.63	0.37	0.24	0.53	132.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.52	0.47	0.49	0.68
93.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.57	0.47	0.45	0.67	133.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.44	0.57	0.70	0.70
94.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.53	0.52	0.55	0.70	134.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.38	0.62	0.81	0.67
95.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.41	0.60	0.75	0.68	135.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.62	0.38	0.17	0.41
96.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.37	0.63	0.84	0.67	136.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.57	0.44	0.27	0.48
97.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.54	0.42	0.26	0.46	137.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.52	0.50	0.49	0.63
98.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.58	0.47	0.35	0.55	138.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.46	0.54	0.60	0.67
99.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.46	0.53	0.56	0.63	139.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.40	0.63	0.80	0.67
100.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.47	0.57	0.66	0.69	140.	0.90	0.90	0.90	0.75	0.37	0.65	0.88	0.68
101.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.38	0.63	0.84	0.67	141.	0.10	0.50	0.68	0.13	0.87	0.28	0.22	0.75
102.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.75	0.18	0.13	0.57	142.	0.10	0.50	0.68	0.13	0.73	0.33	0.33	0.76
103.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.63	0.45	0.33	0.58	143.	0.10	0.50	0.68	0.13	0.62	0.44	0.52	0.82
104.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.50	0.47	0.42	0.58	144.	0.10	0.50	0.68	0.13	0.55	0.47	0.62	0.85
105.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.41	0.61	0.62	0.56	145.	0.10	0.50	0.68	0.13	0.44	0.52	0.79	0.86
106.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.39	0.65	0.70	0.55	146.	0.10	0.50	0.68	0.28	0.78	0.25	0.13	0.53
107.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.78	0.26	0.13	0.53	147.	0.10	0.50	0.68	0.28	0.64	0.33	0.33	0.71
108.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.69	0.31	0.23	0.60	148.	0.10	0.50	0.68	0.28	0.85	0.42	0.42	0.76
109.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.54	0.42	0.42	0.66	149.	0.10	0.50	0.68	0.28	0.53	0.47	0.62	0.82
110.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.48	0.48	0.52	0.66	150.	0.10	0.50	0.68	0.28	0.51	0.52	0.71	0.84
111.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.40	0.57	0.71	0.66	151.	0.10	0.50	0.68	0.43	0.69	0.39	0.13	0.40
112.	0.90	0.90	0.10	0.44	0.73	0.34	0.13	0.44	152.	0.90	0.50	0.68	0.13	0.67	0.33	0.17	0.48
113.	0.90	0.90	0.10	0.44	0.59	0.42	0.33	0.58	153.	0.90	0.50	0.68	0.13	0.50	0.52	0.38	0.49
114.	0.90	0.90	0.10	0.44	0.58	0.47	0.42	0.64	154.	0.90	0.50	0.68	0.13	0.43	0.56	0.49	0.51
115.	0.90	0.90	0.10	0.44	0.48	0.54	0.62	0.69	155.	0.90	0.50	0.68	0.13	0.26	0.69	0.70	0.40
116.	0.90	0.90	0.10	0.44	0.46	0.59	0.71	0.70	156.	0.90	0.50	0.68	0.13	0.26	0.74	0.79	0.41
117.	0.90	0.90	0.90	0.13	0.69	0.37	0.18	0.46	157.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.72	0.26	0.16	0.56
118.	0.90	0.90	0.90	0.13	0.56	0.47	0.28	0.45	158.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.72	0.31	0.27	0.68
119.	0.90	0.90	0.90	0.13	0.38	0.62	0.49	0.41	159.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.53	0.47	0.49	0.67
120.	0.90	0.90	0.90	0.29	0.72	0.23	0.17	0.59	160.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.47	0.56	0.59	0.64

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Treinamento

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
161.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.34	0.66	0.79	0.56	201.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.54	0.46	0.45	0.65
162.	0.90	0.50	0.68	0.29	0.31	0.67	0.88	0.59	202.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.52	0.50	0.56	0.71
163.	0.90	0.50	0.68	0.44	0.72	0.36	0.27	0.65	203.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.46	0.56	0.75	0.78
164.	0.90	0.50	0.68	0.44	0.63	0.40	0.38	0.69	204.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.44	0.59	0.84	0.80
165.	0.90	0.50	0.68	0.44	0.48	0.48	0.60	0.74	205.	0.37	0.50	0.10	0.13	0.79	0.24	0.23	0.74
166.	0.90	0.50	0.68	0.44	0.44	0.55	0.70	0.72	206.	0.37	0.50	0.10	0.13	0.72	0.30	0.33	0.80
167.	0.90	0.50	0.68	0.44	0.35	0.62	0.89	0.70	207.	0.37	0.50	0.10	0.13	0.81	0.43	0.50	0.82
168.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.60	0.36	0.17	0.42	208.	0.37	0.50	0.10	0.13	0.55	0.49	0.61	0.82
169.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.57	0.42	0.39	0.65	209.	0.37	0.50	0.10	0.13	0.44	0.57	0.79	0.79
170.	0.90	0.50	0.68	0.60	0.55	0.47	0.49	0.71	210.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.73	0.18	0.10	0.50
171.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.46	0.55	0.70	0.74	211.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.74	0.27	0.23	0.67
172.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.42	0.57	0.79	0.76	212.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.65	0.32	0.34	0.74
173.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.54	0.42	0.20	0.38	213.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.60	0.41	0.52	0.84
174.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.61	0.44	0.27	0.50	214.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.57	0.47	0.62	0.87
175.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.52	0.49	0.48	0.64	215.	0.37	0.50	0.10	0.29	0.46	0.54	0.80	0.85
176.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.40	0.55	0.61	0.60	216.	0.37	0.50	0.10	0.44	0.73	0.36	0.13	0.43
177.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.42	0.58	0.79	0.75	217.	0.37	0.50	0.10	0.44	0.62	0.39	0.33	0.63
178.	0.90	0.50	0.68	0.75	0.36	0.61	0.88	0.72	218.	0.37	0.50	0.10	0.44	0.56	0.41	0.43	0.69
179.	0.37	0.10	0.68	0.13	0.84	0.24	0.24	0.79	219.	0.37	0.50	0.10	0.44	0.52	0.50	0.62	0.79
180.	0.37	0.10	0.68	0.13	0.69	0.30	0.35	0.81	220.	0.37	0.50	0.10	0.44	0.49	0.51	0.71	0.85
181.	0.37	0.10	0.68	0.13	0.55	0.43	0.55	0.81	221.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.80	0.29	0.14	0.55
182.	0.37	0.10	0.68	0.13	0.46	0.47	0.65	0.79	222.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.67	0.30	0.24	0.61
183.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.90	0.18	0.15	0.70	223.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.60	0.43	0.46	0.74
184.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.79	0.21	0.25	0.80	224.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.59	0.49	0.55	0.77
185.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.63	0.35	0.46	0.87	225.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.45	0.54	0.75	0.80
186.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.59	0.43	0.56	0.87	226.	0.37	0.50	0.90	0.13	0.44	0.58	0.84	0.81
187.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.49	0.52	0.75	0.87	227.	0.37	0.50	0.90	0.29	0.65	0.36	0.24	0.55
188.	0.37	0.10	0.68	0.29	0.42	0.57	0.84	0.81	228.	0.37	0.50	0.90	0.29	0.63	0.43	0.35	0.62
189.	0.37	0.10	0.68	0.44	0.76	0.31	0.25	0.68	229.	0.37	0.50	0.90	0.29	0.53	0.50	0.55	0.71
190.	0.37	0.10	0.68	0.44	0.71	0.36	0.36	0.77	230.	0.37	0.50	0.90	0.29	0.47	0.51	0.65	0.75
191.	0.37	0.10	0.68	0.44	0.58	0.43	0.56	0.85	231.	0.37	0.50	0.90	0.29	0.39	0.58	0.84	0.77
192.	0.37	0.10	0.68	0.44	0.54	0.47	0.65	0.88	232.	0.37	0.50	0.90	0.44	0.65	0.41	0.14	0.37
193.	0.37	0.10	0.68	0.44	0.44	0.54	0.83	0.87	233.	0.37	0.50	0.90	0.44	0.51	0.46	0.35	0.51
194.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.68	0.32	0.14	0.45	234.	0.37	0.50	0.90	0.44	0.49	0.48	0.44	0.58
195.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.62	0.39	0.36	0.67	235.	0.37	0.50	0.90	0.44	0.45	0.56	0.64	0.67
196.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.59	0.42	0.45	0.74	236.	0.37	0.50	0.90	0.44	0.40	0.55	0.74	0.72
197.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.51	0.50	0.65	0.81	237.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.52	0.48	0.14	0.27
198.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.48	0.52	0.75	0.85	238.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.52	0.50	0.25	0.37
199.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.60	0.36	0.16	0.38	239.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.43	0.51	0.44	0.50
200.	0.37	0.10	0.68	0.75	0.64	0.44	0.25	0.49	240.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.40	0.55	0.55	0.54



TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Treinamento

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
241.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.40	0.59	0.73	0.66	281.	0.10	0.90	0.90	0.59	0.48	0.56	0.36	0.42
242.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.36	0.62	0.82	0.65	282.	0.10	0.90	0.90	0.59	0.45	0.58	0.45	0.46
243.	0.37	0.50	0.90	0.75	0.48	0.56	0.24	0.30	283.	0.10	0.90	0.90	0.59	0.39	0.64	0.81	0.65
244.	0.37	0.50	0.90	0.75	0.43	0.55	0.35	0.38	284.	0.10	0.90	0.90	0.74	0.33	0.62	0.73	0.55
245.	0.37	0.50	0.90	0.75	0.40	0.60	0.55	0.50	285.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.58	0.48	0.14	0.29
246.	0.37	0.50	0.90	0.75	0.37	0.62	0.64	0.53	286.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.34	0.62	0.23	0.17
247.	0.37	0.50	0.90	0.75	0.34	0.67	0.82	0.58	287.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.21	0.79	0.42	0.13
248.	0.37	0.90	0.68	0.13	0.66	0.38	0.14	0.40	288.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.15	0.84	0.53	0.12
249.	0.37	0.90	0.68	0.13	0.50	0.49	0.34	0.47	289.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.62	0.36	0.23	0.52
250.	0.37	0.90	0.68	0.13	0.49	0.56	0.44	0.51	290.	0.90	0.10	0.10	0.27	0.54	0.48	0.34	0.51
251.	0.37	0.90	0.68	0.13	0.37	0.64	0.64	0.50	291.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.33	0.62	0.53	0.41
252.	0.37	0.90	0.68	0.13	0.32	0.66	0.72	0.50	292.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.28	0.69	0.62	0.37
253.	0.37	0.90	0.68	0.29	0.51	0.50	0.37	0.49	293.	0.90	0.10	0.10	0.28	0.12	0.84	0.81	0.20
254.	0.37	0.90	0.68	0.29	0.50	0.55	0.45	0.54	294.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.84	0.24	0.14	0.59
255.	0.37	0.90	0.68	0.29	0.35	0.64	0.65	0.48	295.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.65	0.42	0.35	0.64
256.	0.37	0.90	0.68	0.29	0.32	0.68	0.74	0.49	296.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.54	0.46	0.44	0.64
257.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.87	0.18	0.14	0.66	297.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.36	0.61	0.64	0.52
258.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.82	0.25	0.24	0.75	298.	0.90	0.10	0.10	0.43	0.29	0.69	0.73	0.45
259.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.67	0.37	0.45	0.85	299.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.74	0.27	0.15	0.53
260.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.62	0.43	0.55	0.88	300.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.68	0.32	0.23	0.59
261.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.51	0.51	0.75	0.90	301.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.56	0.46	0.43	0.65
262.	0.37	0.50	0.68	0.13	0.48	0.55	0.83	0.89	302.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.49	0.50	0.53	0.66
263.	0.37	0.50	0.68	0.29	0.53	0.49	0.67	0.86	303.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.31	0.64	0.72	0.52
264.	0.37	0.50	0.68	0.29	0.50	0.51	0.75	0.89	304.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.28	0.71	0.80	0.46
265.	0.10	0.90	0.90	0.13	0.79	0.31	0.14	0.51	305.	0.90	0.10	0.10	0.73	0.59	0.40	0.24	0.49
266.	0.10	0.90	0.90	0.13	0.70	0.33	0.24	0.61	306.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.57	0.43	0.35	0.58
267.	0.10	0.90	0.90	0.13	0.55	0.43	0.44	0.68	307.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.44	0.49	0.53	0.63
268.	0.10	0.90	0.90	0.13	0.55	0.49	0.53	0.72	308.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.41	0.54	0.63	0.63
269.	0.10	0.90	0.90	0.13	0.41	0.55	0.72	0.71	309.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.31	0.65	0.81	0.57
270.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.66	0.34	0.14	0.43	310.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.78	0.22	0.14	0.57
271.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.59	0.46	0.35	0.57	311.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.62	0.41	0.34	0.63
272.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.53	0.48	0.43	0.60	312.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.53	0.45	0.44	0.63
273.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.44	0.54	0.63	0.67	313.	0.90	0.90	0.10	0.13	0.44	0.55	0.63	0.66
274.	0.10	0.90	0.90	0.29	0.43	0.58	0.73	0.70	314.	0.90	0.90	0.10	0.12	0.38	0.60	0.72	0.62
275.	0.10	0.90	0.90	0.46	0.57	0.46	0.17	0.34	315.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.84	0.24	0.15	0.62
276.	0.10	0.90	0.90	0.44	0.55	0.47	0.24	0.40	316.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.76	0.30	0.25	0.68
277.	0.10	0.90	0.90	0.44	0.50	0.51	0.43	0.54	317.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.60	0.42	0.44	0.74
278.	0.10	0.90	0.90	0.44	0.43	0.51	0.54	0.60	318.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.57	0.48	0.53	0.75
279.	0.10	0.90	0.90	0.44	0.41	0.59	0.82	0.75	319.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.46	0.52	0.71	0.80
280.	0.10	0.90	0.90	0.59	0.53	0.54	0.17	0.26	320.	0.90	0.90	0.10	0.28	0.36	0.59	0.90	0.77

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Treinamento

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
321.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.69	0.35	0.26	0.61	352.	0.90	0.10	0.10	0.60	0.61	0.33	0.25	0.57
322.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.64	0.40	0.36	0.68	353.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.52	0.46	0.45	0.64
323.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.52	0.47	0.57	0.75	354.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.45	0.50	0.56	0.65
324.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.47	0.49	0.67	0.79	355.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.31	0.64	0.75	0.53
325.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.42	0.58	0.84	0.80	356.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.25	0.68	0.84	0.49
326.	0.90	0.90	0.10	0.58	0.59	0.45	0.36	0.59	357.	0.90	0.10	0.10	0.75	0.55	0.44	0.37	0.58
327.	0.90	0.90	0.10	0.58	0.51	0.50	0.56	0.71	358.	0.90	0.10	0.10	0.75	0.50	0.47	0.46	0.61
328.	0.90	0.90	0.10	0.58	0.49	0.54	0.66	0.75	359.	0.90	0.10	0.10	0.75	0.39	0.56	0.66	0.62
329.	0.90	0.90	0.10	0.59	0.44	0.61	0.85	0.78	360.	0.90	0.10	0.10	0.75	0.35	0.62	0.75	0.60
330.	0.90	0.90	0.10	0.74	0.56	0.51	0.16	0.29	361.	0.90	0.10	0.10	0.90	0.44	0.50	0.47	0.56
331.	0.90	0.90	0.10	0.73	0.52	0.52	0.37	0.48	362.	0.90	0.10	0.10	0.90	0.43	0.54	0.55	0.58
332.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.62	0.39	0.13	0.36	363.	0.90	0.10	0.10	0.90	0.34	0.63	0.74	0.57
333.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.35	0.62	0.36	0.28	364.	0.90	0.10	0.10	0.90	0.30	0.67	0.83	0.54
334.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.24	0.72	0.46	0.21	365.	0.90	0.10	0.90	0.14	0.58	0.43	0.27	0.48
335.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.27	0.67	0.64	0.39	366.	0.90	0.10	0.90	0.13	0.50	0.52	0.38	0.49
336.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.23	0.74	0.73	0.34	367.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.71	0.28	0.19	0.58
337.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.63	0.36	0.15	0.40	368.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.63	0.36	0.29	0.62
338.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.51	0.50	0.28	0.37	369.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.50	0.50	0.51	0.64
339.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.28	0.70	0.46	0.26	370.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.43	0.56	0.59	0.60
340.	0.90	0.10	0.10	0.13	0.18	0.78	0.58	0.19	371.	0.90	0.10	0.90	0.29	0.31	0.64	0.88	0.63
341.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.68	0.32	0.25	0.62	372.	0.90	0.10	0.90	0.45	0.59	0.36	0.35	0.66
342.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.55	0.44	0.36	0.57	373.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.53	0.46	0.48	0.68
343.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.37	0.62	0.57	0.46	374.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.49	0.53	0.59	0.69
344.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.31	0.69	0.65	0.42	375.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.37	0.62	0.80	0.65
345.	0.90	0.10	0.10	0.29	0.15	0.80	0.83	0.28	376.	0.90	0.10	0.90	0.44	0.32	0.67	0.90	0.60
346.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.73	0.22	0.15	0.57	377.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.50	0.45	0.39	0.58
347.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.58	0.38	0.36	0.65	378.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.50	0.49	0.47	0.61
348.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.52	0.47	0.45	0.63	379.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.43	0.56	0.66	0.68
349.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.36	0.58	0.65	0.56	380.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.41	0.62	0.76	0.66
350.	0.90	0.10	0.10	0.44	0.28	0.69	0.76	0.46	381.	0.90	0.10	0.90	0.74	0.38	0.56	0.59	0.55
351.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.62	0.31	0.16	0.46	382.	0.90	0.10	0.90	0.75	0.38	0.58	0.67	0.60

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Teste (ou Validação)

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>s</sub>	r <sub>w</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
1.	0.10	0.10	0.10	0.11	0.70	0.26	0.32	0.82	41.	0.90	0.10	0.90	0.27	0.53	0.52	0.44	0.90
2.	0.10	0.10	0.10	0.11	0.53	0.47	0.61	0.85	42.	0.90	0.10	0.90	0.27	0.35	0.73	0.75	0.90
3.	0.10	0.10	0.10	0.26	0.85	0.15	0.12	0.65	43.	0.90	0.10	0.90	0.43	0.70	0.35	0.24	0.90
4.	0.10	0.10	0.10	0.21	0.69	0.40	0.41	0.81	44.	0.90	0.10	0.90	0.43	0.48	0.53	0.56	0.90
5.	0.10	0.10	0.10	0.23	0.51	0.55	0.71	0.85	45.	0.90	0.10	0.90	0.43	0.34	0.72	0.85	0.90
6.	0.10	0.10	0.10	0.43	0.74	0.32	0.21	0.62	46.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.59	0.43	0.35	0.90
7.	0.10	0.10	0.10	0.42	0.58	0.46	0.52	0.80	47.	0.90	0.10	0.90	0.59	0.49	0.58	0.66	0.90
8.	0.10	0.10	0.10	0.42	0.43	0.57	0.80	0.84	48.	0.90	0.10	0.90	0.74	0.54	0.40	0.15	0.90
9.	0.10	0.10	0.90	0.11	0.75	0.33	0.33	0.80	49.	0.90	0.10	0.90	0.74	0.51	0.53	0.45	0.90
10.	0.10	0.10	0.90	0.11	0.57	0.48	0.61	0.88	50.	0.90	0.10	0.90	0.74	0.43	0.67	0.76	0.90
11.	0.10	0.10	0.90	0.27	0.79	0.19	0.12	0.59	51.	0.90	0.90	0.10	0.11	0.70	0.37	0.21	0.90
12.	0.10	0.10	0.90	0.27	0.62	0.35	0.43	0.82	52.	0.90	0.90	0.10	0.11	0.43	0.54	0.51	0.90
13.	0.10	0.10	0.90	0.27	0.47	0.49	0.72	0.88	53.	0.90	0.90	0.10	0.11	0.32	0.73	0.79	0.90
14.	0.10	0.10	0.90	0.43	0.65	0.34	0.21	0.56	54.	0.90	0.90	0.10	0.27	0.66	0.41	0.31	0.90
15.	0.10	0.10	0.90	0.43	0.52	0.43	0.53	0.78	55.	0.90	0.90	0.10	0.27	0.45	0.56	0.61	0.90
16.	0.10	0.10	0.90	0.43	0.41	0.56	0.80	0.81	56.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.63	0.36	0.21	0.90
17.	0.10	0.90	0.10	0.11	0.68	0.39	0.32	0.69	57.	0.90	0.90	0.10	0.42	0.52	0.54	0.52	0.90
18.	0.10	0.90	0.10	0.11	0.53	0.53	0.60	0.79	58.	0.90	0.90	0.10	0.43	0.40	0.65	0.80	0.90
19.	0.10	0.90	0.10	0.29	0.70	0.37	0.12	0.44	59.	0.90	0.90	0.90	0.11	0.43	0.58	0.38	0.90
20.	0.10	0.90	0.10	0.27	0.57	0.47	0.42	0.67	60.	0.90	0.90	0.90	0.27	0.67	0.37	0.26	0.90
21.	0.10	0.90	0.10	0.26	0.45	0.59	0.72	0.76	61.	0.90	0.90	0.90	0.27	0.41	0.63	0.60	0.90
22.	0.10	0.90	0.10	0.42	0.51	0.55	0.42	0.56	62.	0.90	0.90	0.90	0.43	0.71	0.27	0.16	0.90
23.	0.10	0.90	0.10	0.42	0.45	0.63	0.71	0.71	63.	0.90	0.90	0.90	0.43	0.49	0.47	0.49	0.90
24.	0.10	0.90	0.90	0.27	0.61	0.43	0.22	0.48	64.	0.90	0.90	0.90	0.43	0.35	0.71	0.81	0.90
25.	0.10	0.90	0.90	0.27	0.47	0.57	0.53	0.61	65.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.60	0.37	0.26	0.90
26.	0.90	0.10	0.10	0.12	0.51	0.54	0.12	0.26	66.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.48	0.55	0.60	0.90
27.	0.90	0.10	0.10	0.11	0.13	0.93	0.41	0.10	67.	0.90	0.90	0.90	0.59	0.34	0.73	0.90	0.90
28.	0.90	0.10	0.10	0.27	0.47	0.50	0.32	0.47	68.	0.90	0.90	0.90	0.74	0.56	0.50	0.38	0.90
29.	0.90	0.10	0.10	0.26	0.20	0.84	0.61	0.27	69.	0.90	0.90	0.90	0.74	0.41	0.64	0.71	0.90
30.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.78	0.26	0.11	0.52	70.	0.10	0.50	0.68	0.11	0.88	0.14	0.12	0.10
31.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.49	0.51	0.41	0.56	71.	0.10	0.50	0.68	0.11	0.62	0.41	0.42	0.10
32.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.26	0.81	0.71	0.39	72.	0.10	0.50	0.68	0.11	0.52	0.57	0.72	0.10
33.	0.90	0.10	0.10	0.59	0.68	0.32	0.21	0.59	73.	0.10	0.50	0.68	0.25	0.72	0.28	0.22	0.10
34.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.45	0.55	0.52	0.62	74.	0.10	0.50	0.68	0.26	0.58	0.47	0.52	0.10
35.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.27	0.76	0.79	0.49	75.	0.10	0.50	0.68	0.26	0.49	0.60	0.80	0.10
36.	0.90	0.10	0.10	0.68	0.59	0.47	0.33	0.58	76.	0.90	0.50	0.68	0.11	0.61	0.46	0.26	0.90
37.	0.90	0.10	0.10	0.74	0.41	0.80	0.61	0.61	77.	0.90	0.50	0.68	0.11	0.35	0.70	0.59	0.90
38.	0.90	0.10	0.90	0.12	0.72	0.33	0.14	0.50	78.	0.90	0.50	0.68	0.11	0.21	0.88	0.89	0.90
39.	0.90	0.10	0.90	0.12	0.42	0.63	0.44	0.46	79.	0.90	0.50	0.68	0.27	0.59	0.42	0.38	0.90
40.	0.90	0.10	0.90	0.27	0.81	0.23	0.13	0.59	80.	0.90	0.50	0.68	0.27	0.39	0.67	0.70	0.90

TABELA B.1 – Valores normalizados das variáveis utilizadas como dados do programa (todas as grandezas estão apresentadas em unidades arbitrárias (u.a.)) e classificados em dois conjuntos: Treinamento com 382 experimentos e Teste (também chamado de Validação) com 191 experimentos (cont.)

Conjunto de Teste ( ou Validação)

VALORES NORMALIZADOS DAS GRANDEZAS																	
NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>W</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU	NUM EXP	D <sub>S</sub>	r <sub>W</sub>	Z <sub>E</sub>	P <sub>P</sub>	R'	R''	F	δU
81.	0.90	0.50	0.68	0.43	0.79	0.30	0.15	0.90	121.	0.37	0.50	0.90	0.74	0.45	0.59	0.13	0.37
82.	0.90	0.50	0.68	0.43	0.57	0.50	0.48	0.90	122.	0.37	0.50	0.90	0.74	0.42	0.65	0.43	0.37
83.	0.90	0.50	0.68	0.43	0.39	0.62	0.81	0.90	123.	0.37	0.50	0.90	0.74	0.36	0.70	0.75	0.37
84.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.65	0.40	0.27	0.90	124.	0.37	0.90	0.68	0.11	0.61	0.49	0.23	0.37
85.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.50	0.53	0.60	0.90	125.	0.37	0.90	0.68	0.11	0.44	0.65	0.54	0.37
86.	0.90	0.50	0.68	0.59	0.37	0.68	0.89	0.90	126.	0.37	0.90	0.68	0.11	0.29	0.77	0.83	0.37
87.	0.90	0.50	0.68	0.74	0.56	0.51	0.40	0.90	127.	0.37	0.90	0.68	0.27	0.40	0.62	0.55	0.37
88.	0.90	0.50	0.68	0.74	0.43	0.59	0.70	0.90	128.	0.37	0.90	0.68	0.27	0.31	0.77	0.84	0.37
89.	0.37	0.10	0.68	0.12	0.90	0.10	0.13	0.37	129.	0.37	0.50	0.68	0.12	0.72	0.31	0.34	0.37
90.	0.37	0.10	0.68	0.11	0.65	0.38	0.44	0.37	130.	0.37	0.50	0.68	0.12	0.51	0.48	0.65	0.37
91.	0.37	0.10	0.68	0.12	0.44	0.62	0.75	0.37	131.	0.37	0.50	0.68	0.27	0.51	0.43	0.57	0.37
92.	0.37	0.10	0.68	0.27	0.66	0.27	0.36	0.37	132.	0.37	0.50	0.68	0.27	0.46	0.57	0.84	0.37
93.	0.37	0.10	0.68	0.27	0.53	0.50	0.66	0.37	133.	0.10	0.90	0.90	0.11	0.61	0.41	0.34	0.10
94.	0.37	0.10	0.68	0.43	0.77	0.23	0.14	0.37	134.	0.10	0.90	0.90	0.11	0.50	0.58	0.63	0.10
95.	0.37	0.10	0.68	0.43	0.62	0.38	0.44	0.37	135.	0.10	0.90	0.90	0.27	0.64	0.42	0.23	0.10
96.	0.37	0.10	0.68	0.43	0.50	0.55	0.75	0.37	136.	0.10	0.90	0.90	0.27	0.51	0.57	0.54	0.10
97.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.66	0.36	0.24	0.37	137.	0.10	0.90	0.90	0.27	0.40	0.67	0.62	0.10
98.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.57	0.51	0.56	0.37	138.	0.10	0.90	0.90	0.43	0.53	0.53	0.34	0.10
99.	0.37	0.10	0.68	0.59	0.43	0.61	0.84	0.37	139.	0.10	0.90	0.90	0.43	0.44	0.62	0.61	0.10
100.	0.37	0.10	0.68	0.74	0.56	0.45	0.35	0.37	140.	0.10	0.90	0.90	0.59	0.49	0.59	0.25	0.10
101.	0.37	0.10	0.68	0.74	0.48	0.57	0.66	0.37	141.	0.10	0.90	0.90	0.58	0.44	0.62	0.54	0.10
102.	0.37	0.50	0.10	0.11	0.79	0.13	0.14	0.37	142.	0.10	0.90	0.90	0.74	0.36	0.75	0.82	0.10
103.	0.37	0.50	0.10	0.12	0.66	0.39	0.42	0.37	143.	0.90	0.10	0.10	0.11	0.27	0.61	0.33	0.90
104.	0.37	0.50	0.10	0.12	0.51	0.60	0.70	0.37	144.	0.90	0.10	0.10	0.26	0.78	0.27	0.12	0.90
105.	0.37	0.50	0.10	0.27	0.82	0.23	0.12	0.37	145.	0.90	0.10	0.10	0.26	0.44	0.62	0.43	0.90
106.	0.37	0.50	0.10	0.27	0.62	0.37	0.42	0.37	146.	0.90	0.10	0.10	0.26	0.20	0.84	0.73	0.90
107.	0.37	0.50	0.10	0.27	0.52	0.56	0.72	0.37	147.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.75	0.33	0.23	0.90
108.	0.37	0.50	0.10	0.43	0.68	0.38	0.21	0.37	148.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.44	0.58	0.54	0.90
109.	0.37	0.50	0.10	0.43	0.56	0.47	0.53	0.37	149.	0.90	0.10	0.10	0.42	0.20	0.88	0.61	0.90
110.	0.37	0.50	0.10	0.43	0.46	0.60	0.81	0.37	150.	0.90	0.10	0.10	0.57	0.62	0.40	0.33	0.90
111.	0.37	0.50	0.90	0.11	0.63	0.40	0.35	0.37	151.	0.90	0.10	0.10	0.58	0.40	0.61	0.63	0.90
112.	0.37	0.50	0.90	0.11	0.48	0.55	0.67	0.37	152.	0.90	0.10	0.10	0.73	0.60	0.38	0.14	0.90
113.	0.37	0.50	0.90	0.27	0.71	0.31	0.12	0.37	153.	0.90	0.10	0.10	0.73	0.57	0.52	0.42	0.90
114.	0.37	0.50	0.90	0.27	0.52	0.47	0.44	0.37	154.	0.90	0.10	0.10	0.73	0.36	0.66	0.72	0.90
115.	0.37	0.50	0.90	0.27	0.43	0.58	0.75	0.37	155.	0.90	0.90	0.10	0.11	0.70	0.29	0.22	0.90
116.	0.37	0.50	0.90	0.43	0.57	0.46	0.23	0.37	156.	0.90	0.90	0.10	0.10	0.49	0.53	0.54	0.90
117.	0.37	0.50	0.90	0.43	0.47	0.58	0.54	0.37	157.	0.90	0.90	0.10	0.11	0.34	0.68	0.61	0.90
118.	0.37	0.50	0.90	0.43	0.38	0.64	0.83	0.37	158.	0.90	0.90	0.10	0.26	0.66	0.38	0.35	0.90
119.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.48	0.55	0.34	0.37	159.	0.90	0.90	0.10	0.26	0.45	0.52	0.63	0.90
120.	0.37	0.50	0.90	0.59	0.42	0.65	0.65	0.37	160.	0.90	0.90	0.10	0.42	0.74	0.31	0.14	0.90



### **8.3. APÊNDICE C – Descrição da rede neural alternativa para o cálculo dos parâmetros separativos pelo modelo fenomenológico (substituição do modelo fenomenológico)**

Como mencionado, o programa fenomenológico para o cálculo dos parâmetros separativos descrito no Apêndice A, se mostrou muito lento. O treinamento da rede neural híbrida executa a subrotina do programa fenomenológico pelo menos 4 vezes para cada dado experimental a cada apresentação, pois a estimativa do valor do Jacobiano da função em cada ponto é realizada numericamente. Assim, tempos de execução da ordem de 1 s já se tornam proibitivos. Com 382 dados experimentais, a cada apresentação somente a parte fenomenológica do programa consumiria  $4 \times 382 = 1528$  s = 25,6 min. Supondo um mínimo de 20.000 apresentações para o treinamento de uma rede, teríamos um gasto de 8488,9 horas = 357,7 dias. Por isso, a subrotina a ser usada na descrição fenomenológica do processo no treinamento de uma rede neural híbrida deve ser extremamente rápida. Uma vez que não seria possível aprimorar o programa fenomenológico a ponto de ter a velocidade necessária para o treinamento da rede neural híbrida, optamos por substituir o modelo fenomenológico por uma rede neural padrão, treinada com valores gerados pelo modelo fenomenológico de modo a abranger todo o domínio das variáveis de processo e o domínio presumido das variáveis  $B_W$  e  $B_S$  que descrevem a contracorrente. O intervalo de validade para  $B_W$  e  $B_S$  é respeitado pela rede neural através dos limites superior e inferior para a normalização dos dados.

A rede definida para a tarefa de substituir o modelo fenomenológico é composta por 15 neurônios na camada oculta e seu ajuste pode ser representado pelas Figuras 8.1 a 8.3. Uma vez que os dados apresentados à rede foram originados por um modelo, não existem ruídos experimentais, e a quantidade de dados é bastante farta. Assim, como seria esperada, a rede apresentou um processo de treinamento bastante fácil, como ilustra a Figura 8.1 e seu ajuste é praticamente perfeito, como pode ser observado nas Figuras 8.2 e 8.3.

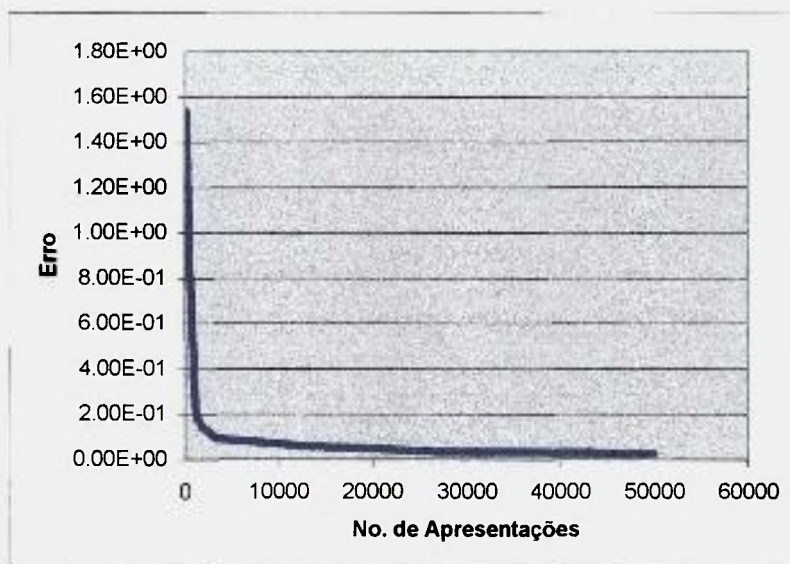


Figura 8.1 - Evolução do erro global ao longo do treinamento da rede neural com NH=15 para substituir o modelo fenomenológico

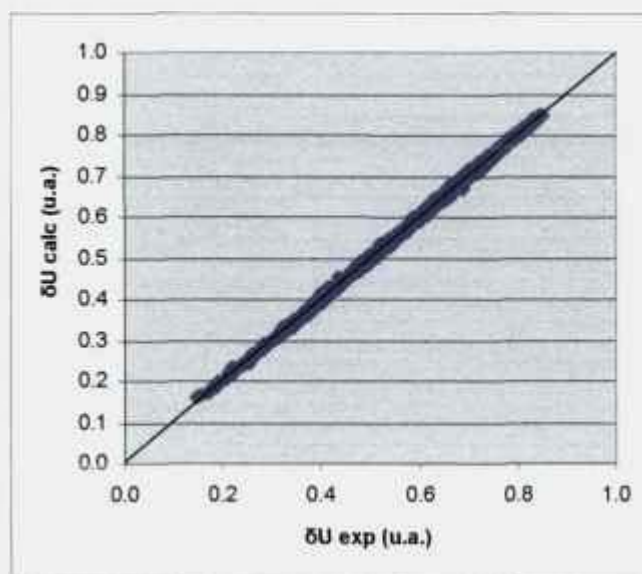
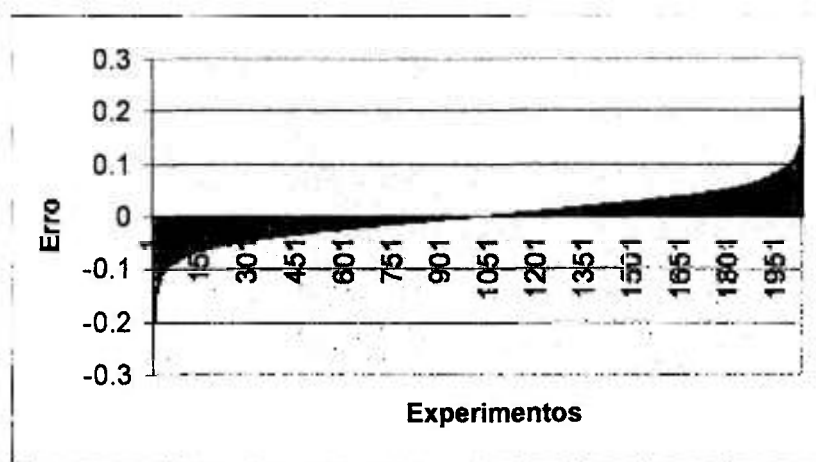


Figura 8.2 - Dispersão dos valores calculados pelo modelo fenomenológico apresentados à rede ( $\delta U$  experimental) e os valores calculados pela rede treinada com NH=15 neurônios



**Figura 8.3** - Função distância referente ao treinamento da rede neural para substituir o modelo fenomenológico