

3 Metodologia

3.1. Descrição do processo polimérico

Em sua origem, a palavra plástico é derivada do grego *plastikós*, que significa aquilo “que serve para modelar” ou “relativo à arte de modelar”. De maneira simplificada, os plásticos, também denominados de resinas termoplásticas, são materiais poliméricos, cujo processo químico de produção é denominado de processo de polimerização. Uma importante característica das resinas termoplásticas é o fato que, ao serem aquecidas, elas não sofrem alterações em sua estrutura química. Desta forma, elas podem ser moldadas durante o aquecimento e solidificadas por resfriamento. O polietileno de baixa densidade (PEBD) é um tipo de resina termoplástica, cujas aplicações incluem a fabricação de embalagens para alimentos básicos (arroz, feijão, etc.) e para frigoríficos, entre outros usos.

O presente trabalho tem como objetivo modelar a qualidade do PEBD em função das variáveis de processo do sistema reacional utilizando redes neurais artificiais. Para este fim, foram utilizados dados industriais da planta de PEBD de uma empresa petroquímica nacional. O sistema reacional da planta em questão é constituído por um reator de leito fluidizado, um compressor, um trocador de calor e um ou mais tanques de armazenamento, conforme pode ser visto na Figura 6.

A corrente de alimentação do reator é composta por uma mistura de eteno (monômero), buteno ou hexeno (comonômeros) e hidrogênio. O catalisador do tipo Ziegler-Natta é alimentado ao reator por meio de uma corrente de nitrogênio purificado de alta pressão. Na zona expandida do reator, ocorre a separação entre as partículas fluidizadas e o gás de reação. O gás de reação que sai no topo do reator, formando a corrente de reciclo, é composto por gases não-reagidos. Dado que a reação de polimerização é altamente exotérmica, o gás de reciclo deve ser resfriado antes de retornar ao reator. Para tal, emprega-se um trocador de calor do

tipo casco e tubo de um passe, onde o gás quente escoar dentro dos tubos e a água de refrigeração escoar em contra-corrente no casco.

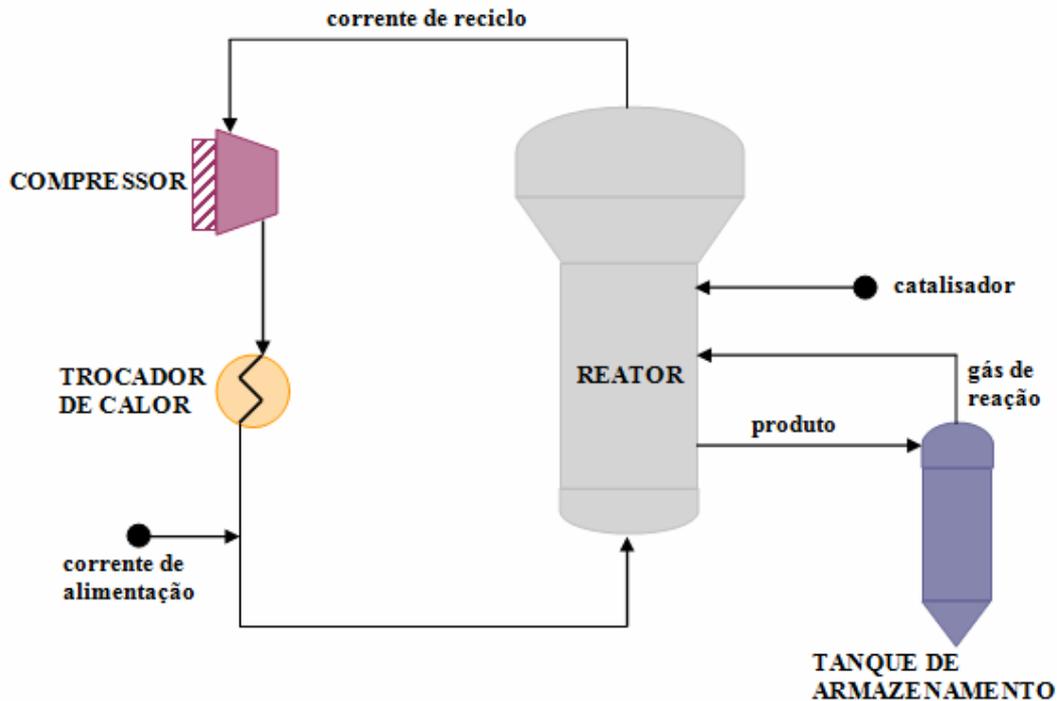


Figura 6 – Fluxograma simplificado do sistema reacional de produção de PEBD
(adaptado de McAuley e MacGregor, 1991)

Uma das características desta reação de polimerização é que a conversão por passe é muito baixa, fazendo com que a corrente de reciclo seja maior do que a corrente de alimentação de carga fresca. Visto que as partículas de polímero no leito fluidizado são bem misturadas e a conversão por passe é baixa, pode-se considerar que a composição do gás e a temperatura dentro do reator são essencialmente uniformes ao longo do leito.

Periodicamente, a válvula de descarga localizada próxima ao fundo do reator é aberta e o produto fluidizado, composto por resina granular e gás de reação, é enviado para os tanques de armazenamento. Nos tanques, ocorre a separação entre o gás de reação, que é enviado de volta ao reator, e a resina, que continua a escoar à jusante, indo para outras etapas de processamento.

O controle da qualidade do PEBD pode ser feito através do monitoramento de duas de suas propriedades: densidade e índice de fluidez. Cabe mencionar que o índice de fluidez é uma medida da viscosidade (facilidade de escoamento) do polímero fundido, e o seu valor é calculado determinando-se o peso de polímero

fundido que, quando submetido a uma determinada força e à temperatura de 190°C, escoar através de um capilar no espaço de tempo de 10 minutos (Sharmin *et al.*, 2006). A densidade e o índice de fluidez do polímero no leito reacional dependem das propriedades do catalisador, da composição do gás reacional e da temperatura do reator (McAuley e MacGregor, 1991). O reator em questão é bem instrumentado com sensores de temperatura, pressão e vazão. Dado que, até o momento, não se dispõe de instrumentos capazes de medir, em tempo real, o índice de fluidez e a densidade, é necessário coletar amostras do polímero periodicamente e enviá-las para o laboratório de controle de qualidade, onde são calculadas as propriedades da amostra coletada. Quando os resultados do laboratório tornam-se disponíveis, eles são usados para ajustar as condições operacionais, de forma a garantir que o polímero produzido esteja dentro das especificações de produção.

3.2. Modelagem do processo polimérico

O desenvolvimento de qualquer sistema de inferência baseado em dados históricos do processo deve se basear em pelo menos três etapas (Sharmin *et al.*, 2006). A primeira etapa envolve a coleta de dados operacionais; a segunda está relacionada com o pré-processamento dos dados operacionais; a terceira corresponde à determinação do modelo do processo produtivo analisado.

3.2.1. Coleta dos dados operacionais

No presente trabalho, a coleta dos dados operacionais se deu através do acesso ao banco de dados da planta, onde são armazenados os valores das variáveis de processo medidas *on-line* a cada minuto, bem como os resultados das análises laboratoriais de qualidade do produto.

Dado que os modelos baseados em dados operacionais visam a determinar relações entre as variáveis de processo e as propriedades representativas da qualidade do produto, a quantidade e qualidade dos dados operacionais utilizados são de extrema importância para o sucesso da modelagem do processo. De fato, visando a garantir que os principais estados operacionais serão bem modelados,

deve-se coletar uma quantidade de dados representativa do processo. No presente estudo, foram coletados dados operacionais do reator de PEBD ao longo de cinco meses de operação da planta. Os dados coletados foram organizados em planilhas, separando-se cada mês em uma planilha. A organização dos dados foi feita de forma a facilitar a sua visualização e garantir que o número máximo de linhas disponível para preenchimento em cada planilha não seria excedido. Desta forma, cada planilha de dados possuía onze colunas e tantas linhas quanto fosse a quantidade de dados operacionais coletados em um dado mês. A primeira coluna de cada planilha apresentava o tempo (*time stamp*) no formato “dd/mm/aa hr:min:seg”. A segunda e terceira colunas apresentavam os valores experimentais do índice de fluidez (em g/10 min) e da densidade do polímero (em g/cm³), respectivamente. Na quarta e quinta colunas, constavam os valores calculados pelo sistema de controle avançado referentes ao índice de fluidez (em g/10 min) e à densidade do polímero (em g/cm³), respectivamente. A sexta coluna apresentava os valores da temperatura no interior do reator (em °C), enquanto que a sétima coluna apresentava os valores da razão molar entre buteno e eteno (adimensional). A oitava e nona colunas apresentavam os valores da razão molar entre hidrogênio e eteno e da razão molar entre hexeno e eteno, respectivamente (ambas adimensionais). Finalmente, as duas últimas colunas apresentavam os valores da produção de polietileno de baixa densidade no reator (em ton/h) e do peso do leito reacional (em ton), respectivamente.

Dado que a frequência de amostragem do produto para monitoramento da qualidade no laboratório é bastante inferior à frequência de medição das variáveis de processo, foram coletados apenas os valores das variáveis de processo em instantes de tempo onde havia sido realizada uma amostragem do polímero. Desta forma, para cada mês, foram coletados entre 200 e 350 valores de cada uma das variáveis. Somando-se os cinco meses de operação, a quantidade de dados coletados para cada uma das variáveis totalizou 1307 valores.

Cabe destacar que a amostragem do PEBD para monitoramento da qualidade é feita na saída do reator de polimerização. Visto que, no presente estudo, apenas as variáveis de processo do reator de polimerização são consideradas para a modelagem, pode-se desconsiderar a existência de qualquer defasagem de tempo entre o momento em que o polímero encontra-se dentro do reator e o momento em que uma amostra é coletada. Desta forma, pode-se

considerar que a qualidade do produto amostrado, por exemplo, no instante de tempo t , está relacionada com os valores das variáveis de processo no reator no mesmo instante t .

3.2.2. Pré-processamento dos dados operacionais

Apesar de receber relativamente pouca atenção na literatura, a etapa de pré-processamento dos dados pode ser a chave do sucesso de qualquer sistema de inferência da qualidade (Sharmin *et al.*, 2006). Com o intuito de detalhar todas as tarefas que devem ser realizadas nesta etapa, convém subdividi-la em quatro etapas, conforme ilustra a Figura 7.

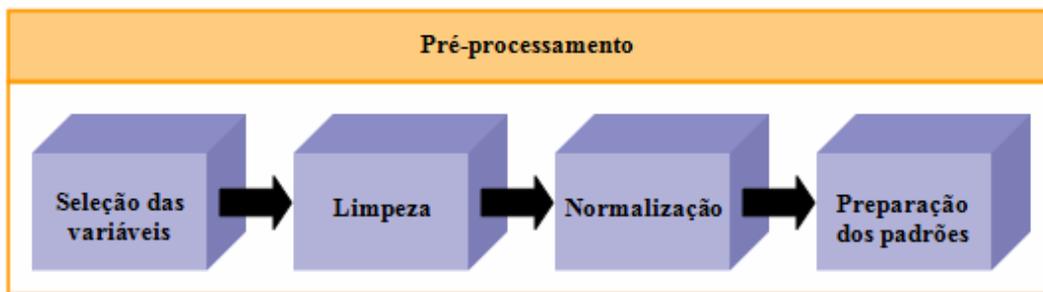


Figura 7 – Etapas do pré-processamento dos dados operacionais (adaptado de Corrêa, 2005)

1ª Etapa – Seleção das variáveis

Ao se desenvolver um sistema de inferência baseado em redes neurais artificiais, a seleção das variáveis de processo a serem consideradas acarreta na diminuição do número de variáveis de entrada da rede neural artificial, o que contribui para a diminuição do tempo necessário para o treinamento da rede, bem como para o aumento do poder de generalização da rede (Rallo *et al.*, 2002).

No presente estudo, a seleção de variáveis foi feita com base no conhecimento de um especialista no processo, sendo corroborada pela literatura científica pertinente. De fato, a literatura sugere que as variáveis de processo mais relevantes ao monitoramento da qualidade do sistema reacional de produção de PEBD são a temperatura do reator de polimerização, a razão entre a concentração de hidrogênio e a concentração de eteno no reator e a razão entre a concentração de comonômero e a concentração de eteno no reator (Bragança *et al.*, 2004). No

caso do processo polimérico estudado no presente trabalho, dois tipos de comonômeros (buteno e hexeno) podem ser utilizados, dependendo da resina a ser produzida. Desta forma, um total de quatro variáveis de processo foi considerado para o desenvolvimento do modelo do processo polimérico.

Além das variáveis de processo do reator de polimerização, dados de qualidade do produto também foram utilizados. Estes dados incluem o valor do índice de fluidez medido no laboratório da empresa a partir de uma amostra do produto, bem como o valor do índice de fluidez do polímero calculado em tempo real pelo sistema de controle avançado existente na empresa. Cabe mencionar que, das duas variáveis representativas da qualidade do polímero (índice de fluidez e densidade), somente uma (índice de fluidez) foi utilizada neste estudo. A seleção desta variável levou em consideração o fato de que, no dia-a-dia de uma planta industrial, o controle do índice de fluidez é geralmente uma tarefa mais desafiadora do que o controle da densidade do polímero (Liu, 2007). A descrição de todas as variáveis selecionadas encontra-se na Tabela 5.

<i>Variável</i>	<i>Unidade</i>	<i>Descrição</i>
T	°C	Temperatura no interior do reator
H_2/C_2	adimensional	Razão entre a concentração de hidrogênio e a concentração de eteno no reator
C_4/C_2	adimensional	Razão entre a concentração de buteno e a concentração de eteno no reator
C_6/C_2	adimensional	Razão entre a concentração de hexeno e a concentração de eteno no reator
IF medido	g/10 min	Índice de fluidez do polímero medido no laboratório após amostragem do produto
IF calculado	g/10 min	Índice de fluidez do polímero calculado pelo sistema de controle avançado da empresa

Tabela 5 – Descrição das variáveis selecionadas

2ª Etapa – Limpeza

A limpeza dos dados foi feita através da inspeção visual dos dados operacionais e da conseqüente remoção manual de valores errôneos. No presente estudo, cada planilha de dados foi analisada linha a linha, verificando-se, em cada instante de tempo, se pelo menos uma das variáveis possuía valor ruidoso. Cabe

salientar que não foram aplicadas técnicas estatísticas de remoção de ruídos e *outliers*, e que os seguintes valores foram considerados como ruidosos: valores do tipo “*Bad Data*” ou “*I/O Timeout*”; valores negativos; valores com ordem de grandeza duas ou mais vezes superior à faixa operacional da variável. A existência destes dados ruidosos indicava a ocorrência de falhas operacionais do sensor, sendo que apenas o primeiro tipo de ruído apresentava esta informação de maneira explícita. Porém, visto que valores negativos das variáveis de processo não possuem significado físico, a captação de tais dados é uma indicação indireta da ocorrência de falhas de medição. Convém salientar que o terceiro tipo de valor errôneo considerado foi aquele cuja ordem de grandeza era, por exemplo 10^3 , enquanto que a faixa operacional da variável medida apresentava ordem de grandeza de 10^{-1} . Como apenas alguns poucos valores destacavam-se neste quesito, os mesmos foram considerados como erros isolados de medição. Caso fosse constatado que qualquer uma das variáveis apresentava valor ruidoso, os valores de todas as seis variáveis naquele instante de tempo eram descartados, isto é, uma linha era removida da planilha.

É importante mencionar que a etapa de limpeza dos dados também incluiu a remoção de dados operacionais que correspondiam à produção de resinas de média ou alta densidade. Isto foi feito analisando-se o valor do índice de fluidez medido no laboratório, pois resinas de baixa densidade apresentavam índice de fluidez inferior a um determinado limite, enquanto que resinas de média e alta densidade apresentavam índice de fluidez superior a este mesmo limite. Como o presente estudo visa a modelar apenas a qualidade do polietileno de baixa densidade, os dados operacionais correspondentes à produção das resinas de média e alta densidade foram descartados. Levando-se em consideração tanto a limpeza de valores ruidosos, quanto a remoção de dados operacionais correspondentes às resinas de média e alta densidade, aproximadamente 29% dos dados foram descartados. Desta forma, um total de 934 valores de cada uma das variáveis operacionais foi utilizado nas etapas subseqüentes.

3ª Etapa – Normalização

O uso de redes neurais artificiais como uma ferramenta para a modelagem de processos químicos torna necessário alguns cuidados em relação aos dados operacionais que serão alimentados à rede. Quando se tem um conhecimento

profundo sobre o processo modelado, pode ser possível inferir algum tipo de informação sobre a importância relativa das variáveis de processo para o modelo, isto é, pode ser possível determinar se alguma das variáveis exerce mais influência sobre o resultado do modelo do que as outras. Neste caso, torna-se interessante explicitar esta influência durante o treinamento da rede, concedendo a esta variável um peso maior do que às outras. Dado que é comum, em processos químicos, que as variáveis de processo tenham ordens de grandeza bastante distintas – por exemplo, os valores de temperatura podem ser da ordem de 10^2 , enquanto que os valores das razões molares podem ser da ordem de 10^{-1} – pode-se evidenciar a influência de uma das variáveis (neste caso, da temperatura) alimentando-se a rede com os valores absolutos de todas as variáveis. Contudo, quando não se tem conhecimento prévio sobre a importância relativa das variáveis, deve-se garantir que todas exerçam a mesma influência sobre o resultado do modelo durante o treinamento da rede. Além disso, é importante ajustar a ordem de grandeza dos dados de entrada de forma a impedir a ocorrência do fenômeno de paralisia da rede. Para tal, torna-se indispensável normalizar os dados operacionais.

No caso do sistema reacional do processo de produção de PEBD, não haviam justificativas para se supor que qualquer uma das variáveis de processo selecionadas seria mais importante para a determinação do modelo do que as outras. Logo, todas as variáveis selecionadas foram normalizadas entre 0,1 e 0,9 de acordo com a seguinte equação:

$$x_n = 0,8 \left(\frac{x - x_{\min}}{x_{\max} - x_{\min}} \right) + 0,1 \quad (3.1)$$

onde:

x_n – valor normalizado da variável

x – valor da variável sem normalização

x_{\min} – limite mínimo aceitável da faixa de operação da variável

x_{\max} – limite máximo aceitável da faixa de operação da variável

Convém mencionar que o critério de normalização utilizado no presente estudo permite que qualquer conjunto de dados seja normalizado de maneira

consistente, já que a faixa aceitável de operação de cada variável independe da condição operacional. Por exemplo, para uma variável cuja faixa operacional varia entre 10 e 20, o valor 15 corresponderá sempre ao valor normalizado 0,5, independente dos valores dos outros dados (que são reflexo das condições operacionais) e do número de dados na amostra. Além disso, é importante salientar que o uso da equação (3.1) também contempla a obtenção de valores normalizados inferiores a 0,1 e superiores a 0,9. Tal fato é de grande utilidade no presente estudo, já que é possível existirem condições operacionais onde o produto gerado está dentro das especificações, enquanto que os valores da(s) variável(is) de processo encontram-se ligeiramente fora da faixa aceitável de operação.

4ª Etapa – Preparação dos padrões

A etapa de preparação dos padrões inclui a divisão dos dados operacionais em três conjuntos: dados de treinamento, dados de validação e dados de teste. Os dados de treinamento são utilizados exclusivamente durante o treinamento da rede neural artificial, sendo responsáveis pela determinação do modelo neural. Os dados de validação também são alimentados à rede neural artificial durante o treinamento da mesma, porém não influenciam diretamente na determinação do modelo. Após o término do treinamento da rede, os dados de teste são usados com o intuito de verificar a adequação do modelo neural previamente determinado. A obtenção de baixos erros para os dados de teste indica que a rede é capaz de modelar adequadamente o processo analisado.

Rallo e colaboradores (2002) afirmam que a etapa de preparação dos padrões é uma das mais importantes no pré-processamento dos dados. Para aplicações onde a modelagem não é função da organização temporal dos dados, os pesquisadores sugerem que os dados operacionais sejam divididos independentemente da sua ordem cronológica, de forma a garantir que a rede seja apresentada à maior variedade possível de informações. Seguindo as recomendações de Rallo e colaboradores (2002), todos os dados operacionais limpos e normalizados foram organizados em uma seqüência randômica. Em seguida, os dados foram divididos em três grupos, de forma que 60% dos dados operacionais foram utilizados para o treinamento da rede neural artificial, 30% para a validação e 10% para o teste.

3.2.3. Determinação do modelo do processo

Como não havia informação disponível *a priori* sobre o modelo neural mais adequado para a inferência da qualidade do sistema reacional de produção de PEBD, foram testadas várias configurações de redes neurais artificiais com o intuito de determinar aquela que mais se adequava ao processo analisado. Para tal, fez-se uso do *Neural Network Toolbox* disponível no software MATLAB[®] (Matlab, 2008). Todas as configurações de redes neurais artificiais consideradas no presente trabalho apresentam arquitetura *feedforward*, três camadas de neurônios, cinco neurônios na camada de entrada – sendo um neurônio para cada uma das variáveis de processo selecionadas e um neurônio de bias – e um neurônio na camada de saída, cujo valor corresponde ao índice de fluidez do PEBD. A diferenciação entre cada uma das configurações testadas consiste em variações no número de neurônios na camada escondida, na função de ativação da camada de saída, e no algoritmo de treinamento da rede.

O critério de escolha do número de neurônios da camada escondida visou a garantir que este número fosse sempre inferior a 8, ou seja, a duas vezes o número de neurônios da camada de entrada. Desta forma, o número de neurônios da camada escondida pôde variar entre 1 e 7. A função de ativação utilizada na camada escondida foi a função sigmóide, sendo que a justificativa para tal escolha foi apresentada na seção 2.4.3.1.1. Em relação à função de ativação da camada de saída, considerou-se tanto a função sigmóide, quanto a função linear. Todas as configurações de redes neurais artificiais foram treinadas através da retropropagação do erro, sendo que dois algoritmos diferentes de treinamento foram considerados.

É importante mencionar que a diferenciação entre os algoritmos de treinamento considerados encontra-se na etapa de atualização dos pesos (cabe lembrar que as etapas do treinamento através da retropropagação do erro foram descritas na seção 2.4.3.1.1). O primeiro algoritmo de retropropagação do erro considerado neste estudo apresenta parâmetro de aprendizado (η) adaptativo e possui um termo relativo à constante de momento (α). Neste caso, a atualização

dos pesos é feita através da seguinte equação, onde η e α podem variar a cada iteração:

$$w_{ijk}^{p+1} = w_{ijk}^p + \alpha w_{ijk}^{p-1} + \eta \delta_j^p y_j^p \quad (3.2)$$

O segundo algoritmo considerado realiza a retropropagação do erro através do algoritmo de Levenberg-Marquardt (Bezerra *et al.*, 2008). Neste caso, a atualização dos pesos é feita através da seguinte equação:

$$w_{ijk}^{p+1} = w_{ijk}^p + \mathcal{W}_{ijk}^p \quad (3.3)$$

Onde o termo \mathcal{W}_{ijk}^p é calculado da seguinte forma:

$$\mathcal{W}_{ijk}^p = -\left(J_k^T E(w_{ijk}^p)\right) \left(J_k^T J_k + \lambda I\right)^{-1} \quad (3.4)$$

onde:

$E(w_{ijk}^p)$ – função erro

J_k – jacobiano de $E(w_{ijk}^p)$

λ – parâmetro de Marquardt

I – matriz identidade

Convém ressaltar que o presente trabalho fez uso da técnica estatística de validação cruzada (*cross-validation*), através da qual é possível otimizar a busca pelo melhor modelo neural para um determinado conjunto de dados. O objetivo desta técnica é validar o modelo neural com dados diferentes dos usados para estimar os parâmetros do modelo (Haykin, 1999). Desta forma, o desempenho dos vários modelos pode ser comparado e o “melhor” modelo pode ser identificado. Um dos modos de utilização da técnica de validação cruzada é comumente denominado de método *hold-out* e consiste em dividir um conjunto de N dados de treinamento em K subconjuntos, onde N deve ser um número divisível por K . A rede neural é, então, treinada com $K-1$ subconjuntos e validada com um único subconjunto. Este procedimento deve ser repetido K vezes, sendo que a cada nova

tentativa, deve-se variar o subconjunto que é destinado à validação da rede. Neste contexto, o desempenho do modelo neural é dado pela média dos erros de validação ao longo de K tentativas. Uma representação ilustrativa do método *hold-out* está apresentada na Figura 8: para cada tentativa, o subconjunto sombreado é utilizado para validação do modelo neural, enquanto que os outros subconjuntos são utilizados como dados de treinamento.

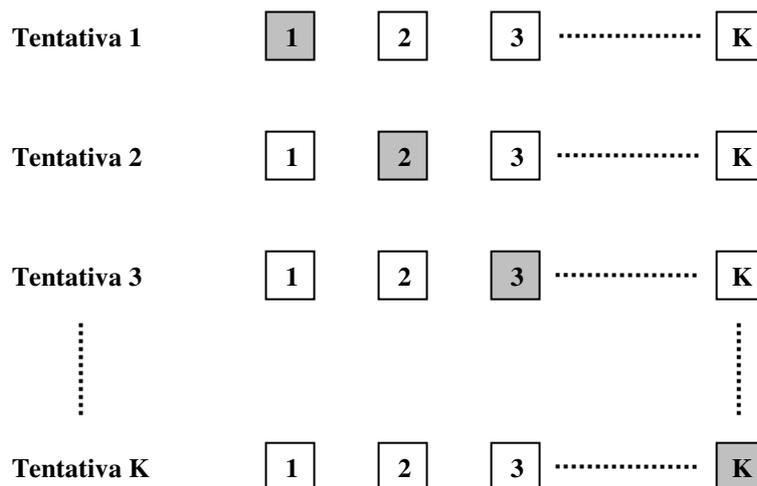


Figura 8 – Representação ilustrativa do método *hold-out* (adaptado de Haykin, 1999)

No presente trabalho, um total de 840 valores de cada variável de processo foi destinado para treinamento e validação das redes neurais. De forma a fazer uso do método *hold-out*, estes dados foram divididos em cinco subconjuntos de 168 valores. A escolha da quantidade de subconjuntos baseou-se em dois parâmetros: esforço computacional, que aumenta consideravelmente com o aumento do número de subconjuntos, e quantidade suficiente de dados em cada subconjunto. Deste modo, o conjunto de dados de treinamento foi composto por 672 valores, enquanto que o conjunto de dados de validação apresentou 168 valores. As redes neurais foram treinadas cinco vezes, sendo que a cada nova tentativa de treinamento, um novo subconjunto de dados de validação era utilizado (conforme apresentado na Figura 8, considerando-se $K = 5$).

Cabe mencionar que o uso da validação cruzada é especialmente recomendado em casos onde se deseja conferir um alto poder de generalização ao modelo neural (Haykin, 1999). Neste contexto, também é importante determinar o momento adequado para se encerrar o treinamento da rede. Isto é feito através de

um procedimento denominado de treinamento com parada antecipada (*early stopping method of training*). Este procedimento consiste em comparar, durante o treinamento, o erro dos dados de treinamento com o erro dos dados de validação, com o intuito de determinar o ponto de parada antecipada, isto é, o momento em que o treinamento da rede deve ser encerrado. A Figura 9 apresenta uma ilustração esquemática do comportamento dos erros de treinamento e de validação em função do número de épocas de treinamento de uma rede neural artificial, bem como o ponto de parada antecipada.

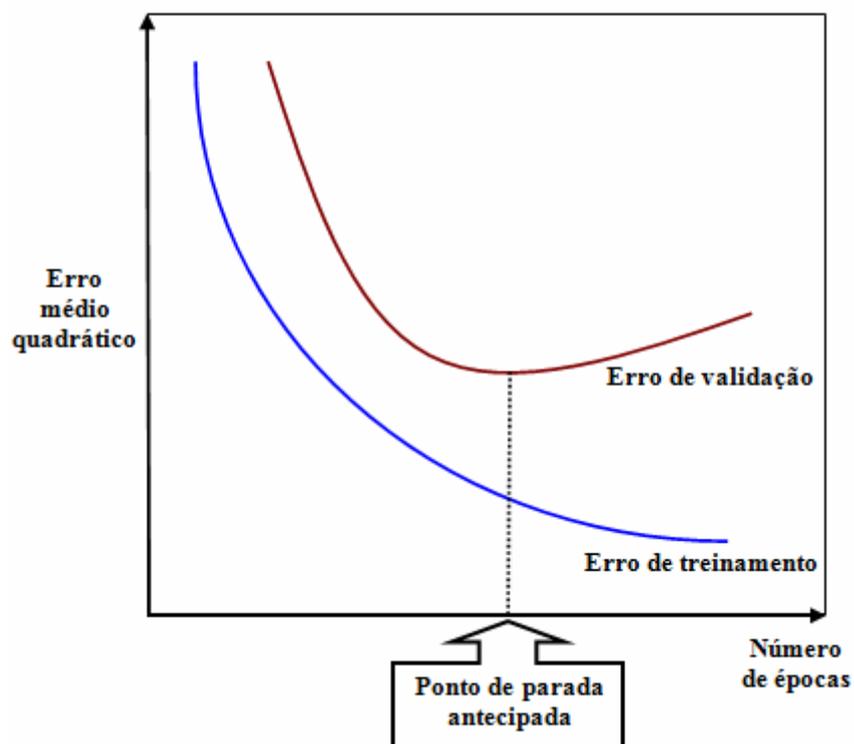


Figura 9 – Perfil ilustrativo dos erros de treinamento e validação utilizado no treinamento com parada antecipada (adaptado de Haykin, 1999)

Conforme pode ser visto na Figura 9, tanto o erro de treinamento quanto o de validação apresentam comportamento semelhante até um determinado momento do treinamento. De fato, inicialmente ambos os erros diminuem, indicando que o aprendizado da rede está evoluindo de maneira adequada. Porém, a partir de um determinado número de épocas, o comportamento do erro de validação altera-se e este passa a aumentar. O aumento do erro de validação é indicativo de que a rede está se tornando mais especializada em modelar os

padrões incluídos nos dados de treinamento, e que a sua capacidade de modelar outros padrões, como, por exemplo, aqueles correspondentes aos dados de validação, está diminuindo. Isto significa que a rede está perdendo o seu poder de generalização e que, caso o treinamento seja continuado, a rede conseguirá representar de maneira cada vez menos adequada o comportamento de outros padrões. Desta forma, o ponto de parada antecipada corresponde ao momento do treinamento em que o erro de validação começa a aumentar.

O modelo obtido através das redes neurais artificiais consideradas neste estudo relaciona o índice de fluidez do PEBD com os valores das variáveis de processo do sistema reacional por meio das equações apresentadas na Tabela 6.

<i>Modelo neural para o índice de fluidez do PEBD</i>
$IF = \Phi_2 \left(\sum_{j=1}^{N_j} W_j F_j + W_B \right)$ $F_j = \Phi_1 (E_j)$ $E_j = \sum_{i=1}^{N_i} w_{ij} x_i + w_{jb}$

Tabela 6 – Modelo neural desenvolvido no presente trabalho para inferir o valor do índice de fluidez a partir dos valores das variáveis de processo do sistema reacional de PEBD

Nas equações da modelagem neural (Tabela 6), IF representa o valor (normalizado) do índice de fluidez do PEBD, Φ_1 representa a função de ativação da camada escondida, Φ_2 representa a função de ativação da camada de saída, W_j representa o peso que relaciona o neurônio j da camada escondida com o neurônio de saída, W_B representa o valor do *bias* associado ao neurônio da camada de saída, N_j representa o número de neurônios na camada escondida, N_i representa o número de neurônios na camada de entrada, w_{ij} representa o peso que relaciona o neurônio i da camada de entrada com o neurônio j da camada escondida, x_i representa o valor (normalizado) da variável de processo associada ao neurônio i da camada de entrada, e w_{jb} representa o valor do *bias* associado ao neurônio j da camada escondida.

O Capítulo 4 apresenta a modelagem neural desenvolvida neste estudo, bem como uma análise crítica dos resultados obtidos.