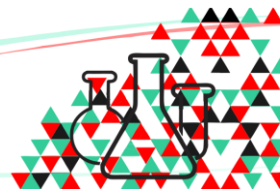




CONGRESSO BRASILEIRO
DE ENGENHARIA QUÍMICA EM
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

21-24 Julho de 2019
Uberlândia/MG



MODELO NEURAL DA PERMEABILIDADE AO VAPOR D'ÁGUA DE UM MATERIAL PARA EMBALAGENS BIODEGRADÁVEIS

M.SIDONE, J.T. FREIRE e F.B.FREIRE

Universidade Federal de São Carlos, Departamento de Engenharia Química
E-mail para contato: bentes@ufscar.br

RESUMO – Embalagens de material biodegradável já são produzidas e utilizadas no setor de alimentos. Grupos de pesquisa se debruçam sobre o tema para melhorar a qualidade desses materiais e ampliar o leque de aplicações. No trabalho aqui apresentado foi desenvolvida uma rede neural artificial capaz de estimar a permeabilidade ao vapor d'água de um filme biodegradável em função das concentrações de seus constituintes (amido, quitosana, nanopartículas de montmorilonita e nanofibras de bambu). Os resultados obtidos mostraram que a ferramenta proposta mostrou potencial para ser usada para estimar a permeabilidade em embalagens biodegradáveis.

1. INTRODUÇÃO

As restrições impostas por exigências ambientais mais rígidas têm exercido um papel fundamental na pesquisa para desenvolvimento de novos produtos. Nada é feito, neste sentido, sem antes contextualizar o problema e a solução com eventuais impactos ambientais. As etapas de processamento de matéria-prima, bem como o produto final, devem atender à um conjunto de leis e requisitos cada vez mais exigentes, dentro do interesse amplo e coletivo que norteia os avanços tecnológicos. Novas gerações, nos cinco continentes, têm contato, desde muito cedo, com temas como reciclagem e descarte consciente, tornando acessível o conceito de sustentabilidade até mesmo para crianças. O uso excessivo de plástico em embalagens tornou-se um vilão da natureza, sendo um dos piores causadores de poluição e danos ao meio ambiente.

Embalagens são usadas para armazenar, proteger, manusear, transportar e expor mercadorias, de matérias-primas a produtos acabados, de produtores a consumidores. Podem ser feitas de metal, vidro, polímero, papelão, madeira, tecido têxtil, multicamadas, cerâmica e outros tipos. No setor alimentício, a embalagem deve atender a uma série de condições, como legislação, segurança e muitas outras, além da funcionalidade, devendo ser fácil de usar e com design atraente. Uma das principais tarefas da embalagem na indústria de alimentos é proteger o produto do impacto químico, mecânico e microbiológico, e também preservar seu sabor e valor nutricional. O ponto-chave da embalagem é que ela é parte integrante da produção, preservação, armazenamento, distribuição e, em alguns casos, até do preparo de alimentos.

Atualmente, embalagens biodegradáveis, que se decompõem por via de processos naturais, tornaram-se foco de muito estudo e pesquisa.

A biodegradação é a decomposição espontânea da matéria orgânica por microrganismos, como bactérias, fungos ou algas. É avaliada tendo em conta tanto o grau de decomposição como o tempo necessário para obtê-la. A taxa de biodegradação de uma substância depende principalmente da estabilidade de sua molécula e do ambiente em que se encontra. Embalagens de alimentos com essas características podem ser feitas, por exemplo, a partir de blendas de amido e quitosana que, uma vez juntos, somam propriedades interessantes. O principal objetivo desse trabalho foi projetar e testar uma rede neural capaz de estimar a permeabilidade ao vapor d'água de filmes de materiais poliméricos obtidos a partir de blendas de amido/quitosana estruturadas com nanopartículas de montmorilonita ou nanofibras de bambu. Foi utilizado um banco de dados com medidas de permeabilidade para diferentes concentrações de amido, quitosana, nanopartículas de montmorilonita e nanofibras de bambu, obtidas a partir de experimentos realizados na Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da USP de Pirassununga. Com isso, obteve-se uma ferramenta matemática e computacional de suporte ao desenvolvimento de novas blendas desse material.

2. METODOLOGIA

O trabalho foi desenvolvido usando o *Neural Network toolbox* do MatLab 2015a. Fundamentos básicos sobre o uso de redes neurais e noções gerais sobre filmes de materiais biodegradáveis são apresentados na sequência.

2.1. Fundamentos Básicos Sobre Redes Neurais Artificiais (RNAs)

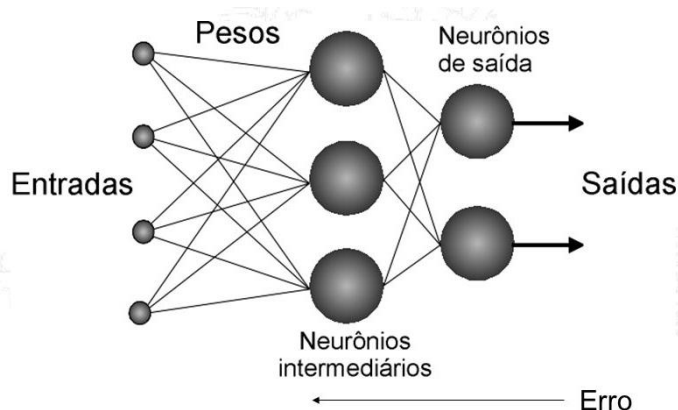
Redes neurais artificiais são um método computacional de programação formado por várias unidades de processamento, chamadas neurônios artificiais, que podem correlacionar bancos de dados entre si. Essa estrutura essencialmente matemática busca imitar o funcionamento do cérebro humano, em que o conhecimento e sua generalização ocorrem através de numerosas conexões. O primeiro passo para projetar uma rede neural é selecionar sua estrutura básica, com determinado número neurônios em camadas ocultas, ou intermediárias, entre a entrada e a saída. Uma relação típica de entrada/saída de uma rede neural de três camadas é dada por:

$$y = b_2 + LW.tansig(b_1 + IW.x) \quad (1)$$

onde y é o vetor de saída, x é o vetor de entrada, LW é a matriz de conexão dos pesos correspondentes a todas as conexões entre a camada intermediária e a de saída, IW é a matriz de conexão da camada de entrada à camada intermediária, b_1 e b_2 são os vetores de *bias* para as camadas intermediárias e de saída, respectivamente.

A figura 1 mostra uma estrutura típica de uma rede neural de três camadas:

Figura 1 - Rede Neural de Três Camadas



Em uma rede neural do tipo *feedforward*, o sinal recebido pela camada intermediária vai para os neurônios da camada de saída. Na camada intermediária, por sua vez, cada unidade (y_j) soma suas entradas ponderadas e aplica a função de ativação para gerar o sinal de saída de acordo com:

$$Y_j = f_{act} \cdot \left(\sum_{i=1} W_{ij} X_i + b_j \right) \quad (2)$$

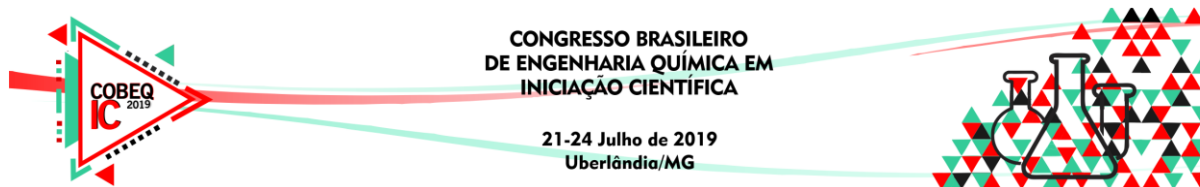
onde W_{ij} é o peso da conexão entre a i -ésima entrada e o j -ésimo neurônio na camada intermediária e b_j é o peso da polarização da unidade j . A função de ativação utilizada daqui em diante é o tan-sigmoial, dada por:

$$f_{act}(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad (3)$$

A saída do neurônio y_j é enviada para todas as unidades da camada de saída. Cada neurônio de saída O_k soma o sinal de entrada ponderado e aplica a função de ativação de acordo com:

$$O_k = f_{act} \left(\sum_{j=1} V_{jk} Y_j + b_k \right) \quad (4)$$

Os pesos W_{ij} de cada conexão entre os neurônios nas camadas adjacentes são determinados durante o processo de aprendizagem da rede. O processo de aprendizagem, ou treinamento, usa algoritmos de otimização não-linear para atualizar os pesos e, uma vez treinada, a rede pode fornecer uma resposta com cálculos diretos (Eq. 1), uma das vantagens de se usar uma rede neural em vez de equações diferenciais de modelos teóricos (Himmelblau, 2008). A etapa de aprendizado consiste em iterações que geralmente começam atribuindo pequenos valores aleatórios aos pesos da rede. As entradas do conjunto de treinamento são fornecidas para a rede e as saídas resultantes são calculadas. A diferença entre as saídas da rede e os valores conhecidos (alvos) é calculado, um algoritmo de otimização é executado para alterar os pesos e diminuir o erro. As iterações são encerradas



quando o valor do erro calculado começa a aumentar com cuidado especial para evitar mínimos locais (Estiati et al, 2016).

Como qualquer técnica de ajuste de funções a dados experimentais, a rede neural também é avaliada quanto à capacidade de se ajustar aos dados de treinamento e prever, ou generalizar, fora dele. Geralmente, o objetivo dos métodos estatísticos é identificar o efeito de cada variável na resposta, de modo a justificar o aumento ou a diminuição dos componentes do modelo. No entanto, é difícil interpretar a estrutura da rede neural em termos dos componentes de um processo físico. Dado que as redes neurais são modelos empíricos, a questão da adequação de um modelo deve estar relacionada ao processo de interesse e aos critérios de decisão empregados. Uma rede neural apropriada deve apresentar uma boa generalização para novos dados e eficiência computacional, o que significa que quanto menor a rede, menos parâmetros e dados são necessários e menor o tempo de identificação envolvido (Freire et al., 2018).

2.2. Permeabilidade ao Vapor (PVA) Em Filmes Biodegradáveis

A permeabilidade ao vapor de água (PVA) é uma constante de proporcionalidade considerada independente do gradiente de pressão de vapor de água aplicado nos filmes. No entanto, materiais hidrofílicos, como filmes de proteínas, desviam-se desse comportamento ideal devido à interação da água com grupos polares na estrutura do filme (Ren et al, 2017). Como a função principal de um filme biodegradável ou comestível é frequentemente impedir a transferência de umidade entre o alimento e a atmosfera circundante, ou entre dois componentes de um produto alimentício heterogêneo, a permeabilidade ao vapor de água deve ser a mais baixa possível. Um banco de dados com medidas de permeabilidade em função das concentrações de constituintes dos filmes biodegradáveis foi disponibilizado para esse trabalho pelo professor Gustavo César Dacanal da Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos da USP de Pirassununga. Os testes de permeabilidade ao vapor foram feitos pelo método gravimétrico de acordo com a norma ASTM E96/E96M, utilizando o equipamento PVA/4 (REGMED. Detalhes sobre os experimentos e o equipamento utilizado estão em Llanos (2018).

3. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os resultados foram obtidos a partir de uma rede neural de 5 neurônios, projetada usando o MatLab 2015a. Foram utilizados 38 valores do banco de dados para o treinamento e cinco para a verificação. O treinamento da rede foi feito pelo método *backpropagation* utilizando o algoritmo de otimização de *Levenberg–Marquardt*. A Figura 1 e a Tabela 1 mostram os valores simulados e medidos nas etapas de treinamento e verificação, respectivamente.

Figura 2 - Treinamento da RNA com 38 valores de PVA ($10^{-4} \cdot \text{g} \cdot \text{mm} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$)

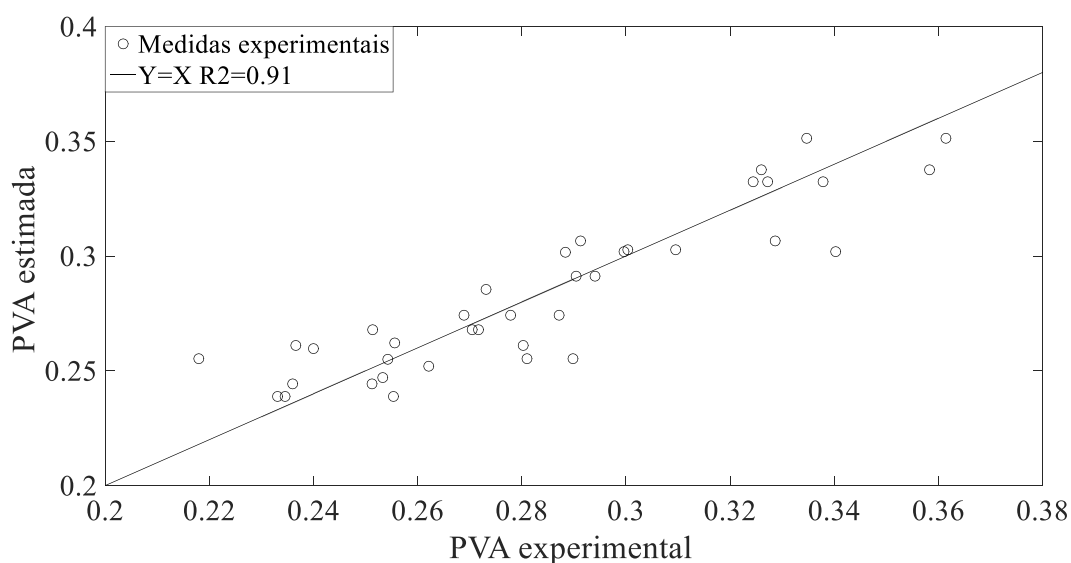


Tabela 1 - Verificação de valores de PVA ($10^{-4} \cdot \text{g} \cdot \text{mm} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{h}^{-1} \cdot \text{Pa}^{-1}$) fora do banco de dados

PVA estimada	PVA medida
0.2669	0.2635
0.3456	0.3487
0.2618	0.2537
0.2508	0.2381
0.2508	0.2697

Apesar de limitado, o banco de dados forneceu informação suficiente para que uma rede satisfatória fosse obtida. Seguramente, um bando de dados mais amplo e abrangente melhoraria o desempenho da rede tanto em sua capacidade de estimar valores internos a esse banco como em prever valores fora dele, ou seja, sua capacidade de generalizar seria maior.

4. CONCLUSÕES

Valores de permeabilidade ao vapor de água (PVA) em função das concentrações de constituintes dos filmes biodegradáveis foram utilizados para gerar uma rede neural artificial. Simulações mostraram que a rede obtida conseguiu se ajustar bem ao banco de dados de treinamento além de prever satisfatoriamente fora desse banco de dados.

5. REFERÊNCIAS

HIMMELBLAU, D.M. *Accounts of Experiences in the Application of Artificial Neural Networks in Chemical Engineering*. Industrial and Engineering Chemistry Research, v.47, p.5782-5796, 2008.



CONGRESSO BRASILEIRO
DE ENGENHARIA QUÍMICA EM
INICIAÇÃO CIENTÍFICA

21-24 Julho de 2019
Uberlândia/MG



- ESTIATI, I. ; FREIRE, F. B. ; FREIRE, J. T. ; AGUADO, R. ; OLAZAR, M. Fitting performance of artificial neural networks and empirical correlations to estimate higher heating values of biomass. *Fuel* (Guildford), v. 180, p. 377-383, 2016.
- FREIRE, F. B.; FREIRE, Fl. B. ; FERREIRA, M. C. ; FREIRE, J. T. . AN OVERVIEW ON NEURAL NETWORKS IN PHYSICAL PROPERTIES AND DRYING TECHNOLOGY. In: Alex Martynenko, Andreas Bück. (Org.). *Intelligent Control in Drying (Advances in Drying Science and Technology)*. 'ed.Halifax: CRC Book Series-Francis Taylor, v. 1, p. 001-464, 2018.
- LLANOS, J.H.R. *Desenvolvimento e caracterização de bionanocompósitos pelo método de extrusão*. Tese de Doutorado, Programa de Pós-graduação em Engenharia e Ciências dos Materiais da Faculdade de Zootecnia e Engenharia de Alimentos, Universidade de São Paulo, Pirassununga, 2018.
- REN, L.; Yan, X.; Zhou, J.; Tong, J.; Su, X. *Influence of chitosan concentration on mechanical and barrier properties of corn starch/chitosan films*, *International Journal of Biological Macromolecules*, v.105, p. 1636–1643, 2017.