



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA CAMPUS I
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL**

MARIZABEL DA SILVA RAMOS

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA) NA MODELAGEM
MATEMÁTICA DO PROCESSO DE ADSORÇÃO DE CORANTES TÊXTEIS
PRESENTES EM ÁGUAS RESIDUÁRIAS USANDO A FIBRA DE SISAL COMO
ADSORVENTE**

**CAMPINA GRANDE - PB
2022**

MARIZABEL DA SILVA RAMOS

**APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA) NA MODELAGEM
MATEMÁTICA DO PROCESSO DE ADSORÇÃO DE CORANTES TÊXTEIS
PRESENTES EM ÁGUAS RESIDUÁRIAS USANDO A FIBRA DE SISAL COMO
ADSORVENTE**

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba, como requisito parcial à obtenção do título de Bacharel em Engenharia Sanitária e Ambiental.

Área de concentração: Engenharias.

Orientador: Prof. Dr. FERNANDO FERNANDES VIEIRA.

**CAMPINA GRANDE - PB
2022**

É expressamente proibido a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano do trabalho.

R175a Ramos, Marizabel da Silva.

Aplicação de redes neurais artificiais (RNA) na modelagem matemática do processo de adsorção de corantes têxteis presentes em águas residuárias usando a fibra de sisal como adsorvente [manuscrito] / Marizabel da Silva Ramos. - 2022.

55 p. : il. colorido.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia , 2022.

"Orientação : Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira , Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - CCT."

1. Modelagem Matemática. 2. Redes Neurais Artificiais. 3. Tratamento de Águas Residuárias. 4. Adsorção . I. Título

21. ed. CDD 628.162

MARIZABEL DA SILVA RAMOS

APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA) NA MODELAGEM
MATEMÁTICA DO PROCESSO DE ADSORÇÃO DE CORANTES TÊXTEIS
PRESENTES EM ÁGUAS RESIDUÁRIAS USANDO A FIBRA DE SISAL COMO
ADSORVENTE

Trabalho de Conclusão de Curso
apresentado ao departamento de
Engenharia Sanitária e Ambiental da
Universidade Estadual da Paraíba, como
requisito parcial à obtenção do título de
Bacharel em Engenharia Sanitária e
Ambiental.

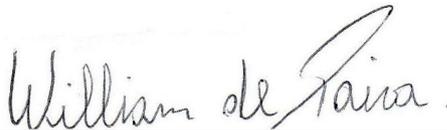
Área de concentração: Engenharias.

Aprovada em: 14/07/2022.

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira (Orientador)
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. William de Paiva
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Bel. Daniel Epifânio Bezerra
Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)

Aos meus pais, irmãos e ao meu
companheiro, DEDICO.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus por todas as oportunidades concedidas, por me dar forças e discernimento para que pudesse trilhar meu caminho, seguindo firme até o presente momento. E principalmente por Ele estar sempre comigo principalmente nos momentos difíceis forças para que eu não desistisse.

Aos meus familiares que sempre estiveram ao meu lado principalmente aos meus pais Eriberto Ramos e Maria das Dores Ramos me dando todo apoio, amor, carinho e paciência, em também ao meu irmão Euclides Neto, que apesar de ser mais novo, sempre me apoiou e cuidou de mim para que eu pudesse sentir segura e ir atrás dos meus sonhos.

Ao meu companheiro Anderson Antonio, pela paciência e persistência, por estar sempre ao meu lado desde o início me apoiando, estimulando e compreendendo as minhas ausências, obrigada por tanto.

Aos meus amigos e colegas, pelo carinho, apoio e compreensão pela minha ausência, vocês fazem parte da minha vida e tornam tudo mais fácil, em especial a Ana Vitoria Medeiros, Darlane Cavalcante, Cléo Kaluaná, Daniel Bezerra, Iluliane Correia, Naiara Laurentino, Paula Monise Martins e Paula Monise Bezerra.

Também quero agradecer as minhas amigas Amanda Oliveira e Bianca Honório, por estarem sempre comigo durante esses anos de graduação, foram momentos mágicos e difíceis que tive o prazer de compartilhar com vocês, quero levar vocês para sempre comigo.

Aos meus mentores que tive durante toda graduação, em especial a professora Neyliane Costa, por ter confiado no meu potencial e ter abeto as portas da pesquisa científica e por todo conhecimento repassado, ao professor Fernando Vieira, professor que sempre admirei durante toda a graduação, devido sua ética, comprometimento, empenho e dedicação e que acabou sendo o meu orientador no trabalho de conclusão, obrigada professor, por todo conhecimento repassado.

Aos meus amigos Luan Xavier e Antônio Pereira por ter me apoiado e ajudado nos primeiros passos dentro da pesquisa científica e por todo aprendizado compartilhado.

Aos meus professores do ECIT Monsenhor José Borges de Carvalho, em especial a professora Flavianne Alexandre que me repassou seu carinho pela área de

exatas e ao professor Dr. Damião Queiroz, que me ensinou que a dedicação e persistência nos faz conquistar os nossos sonhos e objetivos.

Por fim, agradeço a todos que cruzaram e se envolveram na minha trajetória, em todos momentos se fizeram presentes, nos momentos de alegrias, tristezas, brincadeiras, surpresas, críticas e sermões, vocês contribuíram no meu amadurecimento como pessoa e como profissional, ou seja, vocês são a minha base.

Minha eterna gratidão a todos vocês...

“Tudo, antes de ser fácil, é difícil.”

(Thomas Fuller)

RESUMO

Com o advento da crise hídrica nos últimos anos, houve o aumento na busca e aplicação de metodologias de tratamento de águas e efluentes. Destacando-se o tratamento de efluentes, o mesmo tem por objetivo adequar a água imprópria para reuso ou para que possa ser disposta em um corpo hídrico, mas que não interfira de forma significativa a sua qualidade. A indústria têxtil tem uma considerável importância socioeconômica no Brasil, tendo em vista o seu potencial econômico, porém este tipo de empreendimento acaba gerando um efluente, que necessita da adoção de um processo de tratamento adequado antes da sua disposição final ambientalmente adequada. O processo de adsorção vem sendo bastante aplicado no tratamento de efluentes têxteis devido a sua eficiência, facilidade de manuseio, disponibilidade de manuseio, bem como o seu elevado custo benefício. Vinculado a isto, está o desenvolvimento de metodologias de otimização por meio de modelagem de ensaios como a aplicação de redes neurais artificiais. Para tanto, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver e aplicar redes neurais artificiais na modelagem matemática do processo de adsorção de corantes têxteis presentes em águas residuárias, usando a fibra de sisal como adsorvente. A modelagem desse processo visa a simulação do experimento real, de modo corrobore na otimização do mesmo. Dessa forma, o modelo desenvolvido conseguiu aprimorar os resultados simulados aproximando-os dos dados reais, reproduzindo métricas de desempenho satisfatórias para ambas as saídas finais do processo (remoção e quantidade de corante removida por unidade de massa de adsorvente), atingindo um coeficiente de determinação de 0,57 e 0,85, respectivamente. Os erros absoluto e quadrático médio, foram de 11% e 2%, respectivamente para a saída remoção e para a quantidade de corante removida por unidade de massa de adsorvente, foi de 6% para o erro absoluto e de 0,7% o erro quadrático médio. Enfatizando assim, a viabilidade da aplicação de redes neurais artificiais na simulação de processos experimentais de adsorção.

Palavras-Chave: Modelagem Matemática; Modelagem Empírica; Redes Neurais Artificiais; Adsorção; Tratamento de Águas Residuárias.

ABSTRACT

With the advent of the water crisis in recent years, there has been an increase in the search and application of methodologies for the treatment of water and effluents. Emphasizing the treatment of effluents, it aims to adapt the inappropriate water for reuse or so that it can be disposed of in a water body, but that does not significantly interfere with its quality. The textile industry has considerable socioeconomic importance in Brazil, given its economic potential, but this type of enterprise ends up generating an effluent, which requires the adoption of an adequate treatment process before its environmentally adequate final disposal. The adsorption process has been widely applied in the treatment of textile effluents due to its efficiency, ease of handling, availability of handling, as well as its high cost benefit. Linked to this is the development of optimization methodologies through testing modeling such as the application of artificial neural networks. Therefore, the present work aimed to develop and apply artificial neural networks in the mathematical modeling of the adsorption process of textile dyes present in wastewater, using sisal fiber as an adsorbent. The modeling of this process aims at simulating the real experiment, in order to corroborate its optimization. In this way, the developed model was able to improve the simulated results by approaching them to the real data, reproducing satisfactory performance metrics for both final process outputs (removal and amount of dye removed per unit mass of adsorbent), reaching a coefficient of determination of 0.57 and 0.85, respectively. The absolute and root-mean-square errors were 11% and 2%, respectively for the removal output and for the amount of dye removed per unit of adsorbent mass, it was 6% for the absolute error and 0.7% for the error mean quadratic. Thus, emphasizing the feasibility of applying artificial neural networks in the simulation of experimental adsorption processes.

Keywords: Mathematical Modeling; Empirical Modeling; Artificial Neural Networks; Adsorption; Wastewater Treatment.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Esquema de um neurônio artificial	20
Figura 2 - Bibliotecas utilizadas.....	24
Figura 3 - Esboço da arquitetura da rede neural desenvolvida	25
Figura 4 - Fluxograma do funcionamento da rede neural.....	26
Figura 5 - Influência da função de ativação no R^2 treino (ambas saídas)	28
Figura 6 – Influência da função de ativação no R^2 teste (ambas saídas).....	29
Figura 7 – Influência da função de ativação no MAE (ambas saídas).....	29
Figura 8 – Influência da função de ativação no MSE (ambas saídas).....	30
Figura 9 – Influência da quantidade de épocas no R^2 treino (ambas saídas)	30
Figura 10 – Influência da quantidade de épocas no R^2 teste (ambas saídas).....	31
Figura 11 – Influência da quantidade de épocas no MAE (ambas saídas)	31
Figura 12 – Influência da quantidade de épocas no MSE (ambas saídas)	32
Figura 13 – Influência da porcentagem de teste no R^2 treino (ambas saídas)	32
Figura 14 – Influência da porcentagem de teste no R^2 teste (ambas saídas)	33
Figura 15 – Influência da porcentagem de teste no MAE (ambas saídas)	33
Figura 16 – Influência da porcentagem de teste no MSE (ambas saídas)	34
Figura 17 – Influência da quantidade de neurônios no R^2 treino (ambas saídas)	34
Figura 18 – Influência da quantidade de neurônios no R^2 teste (ambas saídas)	34
Figura 19 – Influência da quantidade de neurônios no MAE (ambas saídas)	35
Figura 20 – Influência da quantidade de neurônios no MSE (ambas saídas)	35
Figura 21 – Influência da função de ativação no R^2 treino (ambas saídas).....	36
Figura 22 – Influência da função de ativação no R^2 teste (ambas saídas).....	37
Figura 23 – Influência da função de ativação no MAE (ambas saídas).....	37
Figura 24 – Influência da função de ativação no MSE (ambas saídas).....	38
Figura 25 – Influência da quantidade de épocas no R^2 treino (ambas saídas)	38
Figura 26 – Influência da quantidade de épocas no R^2 teste (ambas saídas).....	39
Figura 27 – Influência da quantidade de épocas no MAE (ambas saídas)	39
Figura 28 – Influência da quantidade de épocas no MSE (ambas saídas)	39
Figura 29 – Influência da porcentagem de teste no R^2 treino (ambas saídas)	40
Figura 30 – Influência da porcentagem de teste no R^2 teste (ambas saídas)	40
Figura 31 – Influência da porcentagem de teste no MAE (ambas saídas)	41
Figura 32 – Influência da porcentagem de teste no MSE (ambas saídas)	41

Figura 33 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no R^2 treino (ambas saídas).....	42
Figura 34 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no R^2 teste (ambas saídas).....	42
Figura 35 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no MAE (ambas saídas).....	43
Figura 36 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no MSE (ambas saídas).....	44
Figura 37 – Valores reais x preditos (a – j) – <i>remoção</i>	46
Figura 38 – Valores reais x preditos (a – j) – <i>qt.</i>	47

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Composição média dos efluentes têxteis versus valores permitidos...	17
Tabela 2 – Síntese do planejamento experimental	27
Tabela 3 - Combinação com melhor desempenho	35
Tabela 4 - Valores das métricas de desempenho da melhor combinação	36
Tabela 5 – Combinação com melhor desempenho	45
Tabela 6 – Valores das métricas de desempenho da melhor combinação	45

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

IA	Inteligência Artificial
HCl	Ácido Clorídrico
NaOH	Hidróxido de Sódio
LAPECA	Laboratório de Pesquisa em Ciências Ambientais
MAE	Mean Absolute Error
MSE	Mean Squared Error
PE	Planejamento Experimental
QT	Quantidade de Corante Removida por Unidade de Massa de Adsorvente
R ²	Coefficiente de Determinação
ReLU	Unidade Linear Retificada
RNA	Redes Neurais Artificiais

Sumário

1 INTRODUÇÃO	14
2 OBJETIVOS.....	16
2.1 Objetivo geral	16
2.2 Objetivos específicos	16
3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	17
3.1 Efluentes têxteis.....	17
3.2 Metodologias de tratamento de efluentes	18
3.2.1 Adsorção	18
3.3 Modelagem matemática.....	19
3.4 Rede Neural Artificial (RNA).....	19
4 METODOLOGIA	22
4.1 Origem dos dados experimentais.....	22
4.2 Análise preliminar e divisão dos dados	22
4.3 Determinação das variáveis de entrada.....	22
4.4 Criação da rede neural artificial.....	22
4.5 Treinamento da rede neural artificial	23
4.6 Bibliotecas e estrutura da rede neural	24
4.7 Pré-processamento.....	26
4.8 Planejamento.....	26
5 RESULTADOS E DISCUSSÃO	28
5.1 Planejamento 1 (P1).....	28
5.1.1 <i>Análise da influência das funções de ativação</i>	28
5.1.2 <i>Análise da influência da quantidade de épocas</i>	30
5.1.3 <i>Análise da influência da porcentagem de teste</i>	32
5.1.4 <i>Análise da influência da quantidade de neurônios</i>	34
5.2 Planejamento 2 (P2).....	36
5.2.1 <i>Análise da influência das funções de ativação</i>	36
5.2.2 <i>Análise da influência da quantidade de épocas</i>	38
5.2.3 <i>Análise da influência da porcentagem de teste</i>	40
5.2.4 <i>Análise da influência da quantidade de neurônios</i>	41
5.3 Análise visual do ajuste do modelo	45
6 CONCLUSÃO	49
REFERÊNCIAS.....	50
APÊNDICE A – SCRIPTY EM PYTHON	53

1 INTRODUÇÃO

A indústria têxtil tem uma considerável importância socioeconômica no Brasil, pois está presente no país desde meados do início do processo de industrialização se tornando, em algumas regiões do país, até os dias atuais, a principal fonte de renda (RIBEIRO, 2020).

No Brasil, contribui de forma relevante para a geração de economia e de emprego como destaca RIBEIRO (2020) em seu trabalho:

O setor se encontra no segundo lugar como maior empregador da Indústria de Transformação, perdendo apenas para o ramo alimentício e de bebidas (juntos), isso representa 16,7% dos empregos e em termos de faturamento, é equivalente a 5,7% do faturamento da Indústria de Transformação. O Brasil possui vários polos industriais espalhados, o núcleo paulistano-mineiro é o grande circuito de malharia nacional, em Santa Catarina fica o segundo maior polo têxtil do Brasil e na região Nordeste se destaca os estados do Ceará que abriga mais de 2 mil empresas e emprega cerca de 100 mil funcionários. (RIBEIRO, 2020, p 3).

A indústria têxtil gera um efluente que causa efeitos desfavoráveis aos ecossistemas aquáticos quando lançados sem nenhum tipo de tratamento adequado. Isso ocorre devido a este tipo de indústria utilizar vários produtos químicos durante seu processo produtivo, como os corantes. Tiwari et al., (2015), descreve como os corantes podem afetar o corpo aquático, quando lançados sem a aplicação de tratamento:

Íons de corantes dispersos nas correntes de água refletem a radiação solar ou dispersão nos corpos d'água. A radiação solar não pode penetrar além da zona litorânea e, portanto, a zona de águas profundas (isto é, zona afótica) desenvolve condição anaeróbica. (Tiwari et al., 2015, p 1).

Esse tipo de contaminação na água ou no solo é um sinal visível e evidencia características de poluição. Ainda cabe destacar que os corantes são usados em diversos tipos de indústrias além da têxtil, tais como: papel, borracha, plástico, indústrias de drogas e cosméticos, tintas, tintas de impressão, arte e artesanato, couro, alimentos, entre outros. (MARKANDEYA, 2020).

Os efluentes gerados a partir desses processos, necessitam de maiores cuidados pois, mesmo realizando a aplicação de tratamentos (pré, primários e secundários) ainda podem conter corantes em sua composição que não podem ser removidos pelos métodos tradicionais (TOPARE, 2021).

Adegoke (2022) afirma que o processo de adsorção continua sendo a técnica mais atraente devido à sua maior eficiência, facilidade de manuseio, disponibilidade de adsorventes e custo-benefício. Atrelado ao desenvolvimento dos estudos de adsorção também estão sendo desenvolvidas as metodologias de otimização por meio de modelagem de ensaios.

É possível evidenciar isso, ao citar o exemplo de Farias (2020), que utilizou a fibra de sisal no processo de adsorção de efluentes têxteis. Onde o material foi colhido a partir de um processo de seleção manual, lavado e posteriormente submetido a secagem.

Uma metodologia que se mostra crescente para auxiliar na otimização destes experimentos, é a aplicação de Redes Neurais Artificiais (RNA). Este tipo de metodologia vem sendo utilizada como, por exemplo, para a previsão da capacidade de adsorção e está sendo adotada por diversos cientistas (ADEGOKE et al, 2022).

A exemplo disso, o estudo realizado por Adegoke (2022), onde o mesmo utilizou adsorção para remoção de corante em efluentes têxteis e atrelado a isto aplicou a metodologia de redes neurais artificiais com o intuito de verificar a eficiência do seu estudo. Ele aplicou uma rede neural de propagação feedforward e backpropagation para prever a absorção do corante Rodamina B em vagem de manga e chegou à conclusão que essas metodologias se mostraram eficientes e eficazes quando utilizadas de forma associada.

Reforçando a tese de que a aplicação de RNA para modelagem matemática de processos de adsorção, se mostram eficientes e auxiliam na otimização do processo, tendo em vista, que a maioria destes, tem por intuito prever o resultado final do processo e dessa forma, aumentando o interesse dessa pesquisa envolvendo a referida temática.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo geral

Desenvolver e aplicar RNA na modelagem matemática do processo de adsorção de corantes têxteis presentes em águas residuárias, usando a fibra de sisal como adsorvente.

2.2 Objetivos específicos

- Construir códigos computacionais na linguagem Python que implementem diversas arquiteturas de RNA.
- Avaliar o uso de diferentes funções de ativação na modelagem dos dados.
- Avaliar as métricas de desempenho da RNA desenvolvida.
- Comparar os modelos desenvolvidos.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Efluentes têxteis

Os efluentes têxteis são subprodutos gerados a partir do processo produtivo da indústria e os corantes fabricados, em sua grande maioria, são destinados a indústria têxtil, em seguida vêm as indústrias de artesanatos de couro e de papel, indústria alimentícia, cosméticos, tintas e plásticos. Essa indústria é muito importante para economia, porém, nesse processo são geradas grandes quantidades de efluente que se não tratados adequadamente provocam sérios danos ao meio ambiente (JORGE *et al.*, 2015)

As indústrias têxteis, no processo de produção, geram grandes quantidade de efluentes contaminados com corante. Os processos de tinturaria e lavagem são os principais poluidores da água, produzem de 45 a 65 litros de efluente por quilograma de tecido processado (CARDOSO, 2012).

O aumento da demanda por recursos hídricos fez com que crescesse a preocupação acerca do lançamento de efluente têxtil, que utiliza uma grande quantidade de água durante a produção, quando lançado sem tratamento contamina as águas e desequilibra o meio aquático. Esse tipo de contaminação também causa problemas à saúde, pois alguns corantes sintéticos são tóxicos podendo ser carcinogênicos (LACERDA, 2017).

A composição média dos efluentes têxteis é dada por:

Tabela 1- Composição média dos efluentes têxteis versus valores permitidos

Composto	Concentração média (mg/L)	Concentração (mg/L)
		CONAMA nº 357/2005 e nº 397/2008
Sólidos Totais	Entre 1000 e 1600	500
DBO	Entre 200 e 600	Até 3
pH	Alcalino	Neutro
Alcalinidade total	Entre 300 e 900	250

Fonte: CARDOSO, 2012 (Adaptado pelo autor)

Verifica-se que esses valores são maiores do que os valores apresentados pela resolução CONAMA nº 357/2005 e nº 397/2008, para águas doces.

Os efluentes possuem uma concentração que varia de 10 a 200 mg/L dependendo do tipo de corante e fibra usada. A presença dessa substancia na água

reduz a entrada da luz no corpo aquático, isso acaba interferindo os processos de fotossíntese, além de causar um impacto visual (CARDOSO, 2012).

3.2 Metodologias de tratamento de efluentes

Existem muitos procedimentos que podem ser usados no tratamento de água contaminada por corante, como por exemplo, a coagulação e floculação, ozonização, decomposição oxidativa usando processo Fenton, degradação eletroquímica, filtração por membranas, foto-decomposição catalítica com uso de óxido de titânio como catalisador e adsorção em carvão ativado (BARKA *et al.*, 2008).

3.2.1 Adsorção

Segundo Topare (2021) o processo de adsorção envolve simplesmente a concentração de um material (adsorbato) da solução gasosa/aquosa para a superfície externa de um adsorvente. Cabe destacar que a adsorção é considerada como a única abordagem alternativa que fornece soluções mais limpas e ambientes mais enxutos em comparação com outros métodos que não são apenas caro, mas também difícil de operar e menos eficiente.

O carvão ativado é o adsorvente mais utilizado na remoção de corantes de efluentes devido sua elevada área superficial. Entretanto, a utilização dessa matéria na remoção de corantes ainda é muito cara, isso torna inviável a aplicação no tratamento de efluentes têxteis. Contudo, tem aumentado o interesse na busca por novos adsorventes alternativos de baixo custo, que apresentam capacidade de adsorção semelhante à do carvão ativo (CARDOSO, 2012).

O Brasil possui um grande potencial agrícola, onde são produzidas grandes quantidades de resíduos que, na maioria das vezes são descartados. Nesse contexto, aliando-se a necessidade de reduzir custos com adsorventes comerciais há uma grande vantagem em se utilizar resíduos de origem vegetal como biossorventes para a remoção de corantes dos efluentes industriais (BARCELLOS *et al.*, 2009).

Para a otimização do processo de adsorção, diversas metodologias para modelagem dos ensaios são aplicadas, visando a minimização de possíveis erros, principalmente quando um número relativamente reduzido de experimentos é realizado para avaliação de um maior número de variáveis (BARCELLOS *et al.*, 2009).

Uma dessas metodologias que vem em crescente aplicação são as Redes Neurais Artificiais (RNA) (BAXTER *et al.*, 2002; DUTTA *et al.*, 2010).

3.3 Modelagem matemática

O início dos estudos sobre inteligência artificial (IA) surgiu por volta da década de 50, com o intuito aperfeiçoar o desenvolvimento de tarefas complexas a partir da aplicação de algoritmos eficientes. Nilsson (2009), descreve IA como um conjunto de técnicas para a construção de máquinas inteligentes, capazes de resolver problemas que requerem inteligência humana.

A inteligência artificial vem sendo bastante aplicada em processos que envolvem a utilização modelagem empírica, principalmente por meio da aprendizagem de máquina, quem tem por intuito auxiliar na criação de um modelo que possa simular uma dada situação ou um experimento real. Freitas (2008) define modelo como “uma descrição de um processo (comportamento) real ou não que se pretende trabalhar por meio de relações matemáticas ou lógicas”.

Dessa forma, ao modelarmos um processo/experimento, estamos desenvolvendo um modelo que possa simular/descrever seu comportamento real.

3.4 Rede Neural Artificial (RNA)

As RNAs estão sendo frequentemente utilizadas para o desenlace de diversos problemas considerados complexos, em que o comportamento das variáveis existentes, não é exatamente conhecido. Tem como principal característica, a aptidão de aprender por meio de exemplos e de generalizar a informação aprendida, gerando um modelo não-linear, tornando sua aplicação na análise espacial bastante eficiente (SPÖRL *et al.*, 2011).

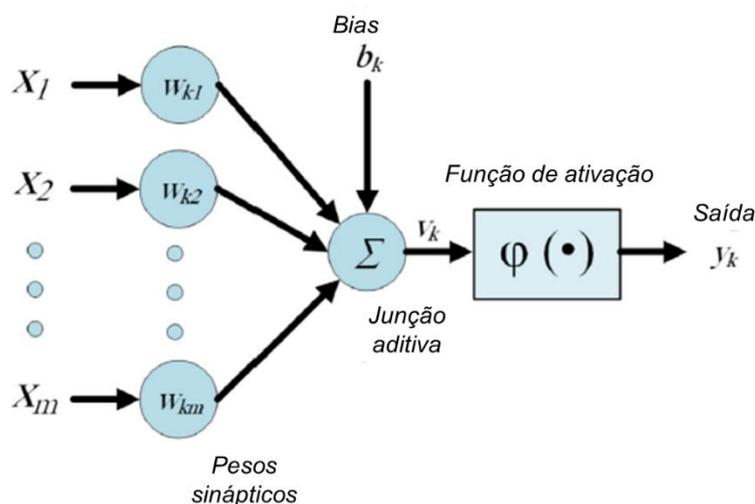
SPÖRL *et al.* (2011) define RNAs como “algoritmos computacionais que apresentam um modelo matemático inspirado na estrutura neural de organismos inteligentes tentando emular em máquinas o funcionamento do cérebro humano, mesmo que de maneira simplificada”.

Este sistema se assemelha ao cérebro humano, o qual funciona como uma grande e complexa rede neural que recebe informações contínuas e assim toma decisões. Estas informações são transmitidas pelos neurônios por meio das sinapses

as quais são unidades estruturais e funcionais elementares (HAYKIN, 2001; BRAGA *et al.* 2000).

O modelo de um neurônio artificial (Ver Fig. 1) utilizado para o desenvolvimento de RNA consiste de conexões chamadas sinapses, cada uma contendo seu peso w_{kj} . Esses pesos são multiplicados pelos valores de entrada correspondentes aos dados experimentais (x_j) os quais quando somados, formam a junção aditiva (Σ). Após isso, uma função de ativação ou função restritiva (φ) é aplicada, buscando limitar o intervalo permissível do sinal de saída (y_k) (HAYKIN, 2001; ELSHEIKH *et al.*, 2019). Ainda na junção aditiva, pode ocorrer a inserção de um bias externo b_k , o qual é responsável pelo aumento ou diminuição da entrada líquida da função de ativação, interferindo diretamente no valor de saída (HAYKIN, 2001).

Figura 1 – Esquema de um neurônio artificial



Fonte: ELSHEIKH *et al.* (2019) (Adaptado pelo autor)

A arquitetura de uma rede neural está diretamente relacionada com o algoritmo de aprendizagem utilizado para treinar a rede. Portanto, é importante que a estrutura da rede seja definida levando em consideração o objetivo da modelagem (HAYKIN, 2001; SILVA *et al.*, 2010). Haykin (2001) classifica os três tipos de estruturas como:

- **Feedforward de única camada:** consiste de uma rede simples, com uma camada de entrada de nós e uma camada de saída de neurônios, sendo estritamente do tipo alimentada adiante. Este tipo de estrutura é comumente empregada em problemas de classificação de padrões e filtragem.
- **Feedforward de múltiplas camadas:** consiste de uma rede com uma ou mais camadas ocultas, cujos nós computacionais são chamados de neurônios

ocultos, os quais têm como função tornar a rede capaz extrair estatísticas de ordem elevada. Essa estrutura é bastante utilizada na otimização e controle de processos e na robótica.

- **Realimentada:** esta estrutura se distingue das demais por possuir pelo menos um laço de realimentação, podendo ser de camada única, tendo cada neurônio alimentando o seu sinal de saída de volta para as entradas de todos os outros neurônios.

Para que uma RNA atenda o seu objetivo, ela deve ser submetida a um treinamento que envolve a alimentação da rede com um conjunto de dados de entrada e saída, previamente conhecidos, até que a rede possa produzir por ela mesma os dados de saída apropriados (BAUGHMAN, LIU, 1995). Simpson (1990) classifica o treinamento de um RNA em dois grupos:

- **Treinamento supervisionado:** o sistema é alimentado e controlado por um agente externo que irá incorporar informações necessárias, de entrada e saída, para que os pesos e limiares sejam ajustados pelo algoritmo de aprendizagem. Esse tipo de treinamento permite a correção dos erros na aprendizagem;
- **Treinamento não supervisionado:** o controle do processo de aprendizado é realizado pela própria rede, a qual desenvolve seu próprio modelo sem a adição de novas informações.

4 METODOLOGIA

4.1 Origem dos dados experimentais

A base de dados utilizadas neste trabalho foram provenientes de uma pesquisa desenvolvida no Grupo de Pesquisas em Processos Oxidativos Avançados e Adsorção (GPPOAA) do Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental (DESA/UEPB).

Farias (2020) usou como adsorvente a fibra de sisal para adsorver corante têxtil, neste trabalho, foi usado o adsorvente na forma in natura e após a ativação química e alcalina, usando soluções HCl e NaOH 0,1 mol.L⁻¹. Para esse estudo, foi utilizado o banco de dados gerado por Farias (2020) referente ao seu experimento realizado in natura.

4.2 Análise preliminar e divisão dos dados

Em todo o processo de modelagem, a familiaridade com os dados disponíveis é de máxima importância. Portanto, para realizar o treinamento da rede neural e avaliar seu desempenho o banco de dados foi dividido em dois subconjuntos.

Foi utilizado um conjunto de 70% das amostras para treinamento da rede e 30% para a verificação do modelo, posteriormente houve a variação de 70% para 60% das amostras para treinamento da rede e conseqüentemente de 30% para 40% voltadas para a verificação do modelo.

4.3 Determinação das variáveis de entrada

As variáveis utilizadas como dados de entrada para a RNA foram a massa de adsorvente, concentração da solução de corante, pH da solução, tempo de contato e agitação, estes foram definidos como variáveis independentes na investigação sobre o efeito gerado nas variáveis quantidade de corante removida por unidade de massa de adsorvente qt (mg.g⁻¹) e eficiência na *Remoção* (%).

4.4 Criação da rede neural artificial

Na criação da rede, foi considerada uma arquitetura do tipo *Feedforward* múltiplas camadas. As variáveis massa de adsorvente, concentração do soluto, pH da

solução, tempo de contato e agitação serão a camada de entrada, enquanto que a quantidade de corante removida por unidade de massa de adsorvente e eficiência de remoção serão as informações da camada de saída.

Com relação à camada intermediária, foram consideradas duas situações, uma rede composta por apenas uma camada intermediária, e outra com duas camadas intermediárias (ver Figura 3). Nessas camadas intermediárias foram alternadas a quantidades de neurônios presentes entre 20, 40 e 80 neurônios, o mesmo ocorreu na RNA com duas camadas.

Outro componente importante do neurônio artificial é a sua Função de Ativação ou Transferência. Ela tem por objetivo limitar a amplitude válida do sinal de saída do neurônio a um valor finito. Normalmente, esta amplitude normalizada se encontra em um intervalo fechado unitário [0, 1] ou, em alguns casos, [-1, 1]. Iremos investigar a influência da escolha de diferentes funções de ativação.

Neste trabalho aconteceu a variação entre a função *sigmoide* (SIG) e a unidade linear retificada (ReLU). A função SIG é bastante utilizada, possui intervalo de variação entre [0, 1] e utiliza a Equação I.

$$f(x) = \frac{1}{1 + e^{-x}} \quad \text{Equação (I)}$$

A função ReLU, assim como a SIG, também é bastante utilizada, possui intervalo de variação entre [0, ∞) e utiliza a Equação II.

$$f(x) = \max(0, x) \quad \text{Equação (II)}$$

4.5 Treinamento da rede neural artificial

Para treinamento e teste da rede, o conjunto de dados foi dividido em subconjuntos com diferentes percentuais de dados usados para treinamento e teste (ver item 4.2). Foi elaborado um planejamento para identificar a combinação que melhor representa a saída da rede, onde foram testados vários parâmetros em diferentes condições com uma taxa de aprendizagem adaptativa que mantém a taxa de aprendizado constante para 0,001 (ver item 4.7).

A separação dos dados de treinamento e teste ocorre de maneira aleatória no programa *Python* e assim, o treinamento envolveu todos os parâmetros mencionados e objetivou encontrar o melhor modelo neural que descreva de forma eficiente o processo de tratamento de corantes por adsorção com fibra de sisal.

4.6 Bibliotecas e estrutura da rede neural

No algoritmo foram utilizadas bibliotecas com o intuito de auxiliar na manipulação, organização e modelagem dos dados. Na Figura 2, pode-se observar quais bibliotecas foram utilizadas.

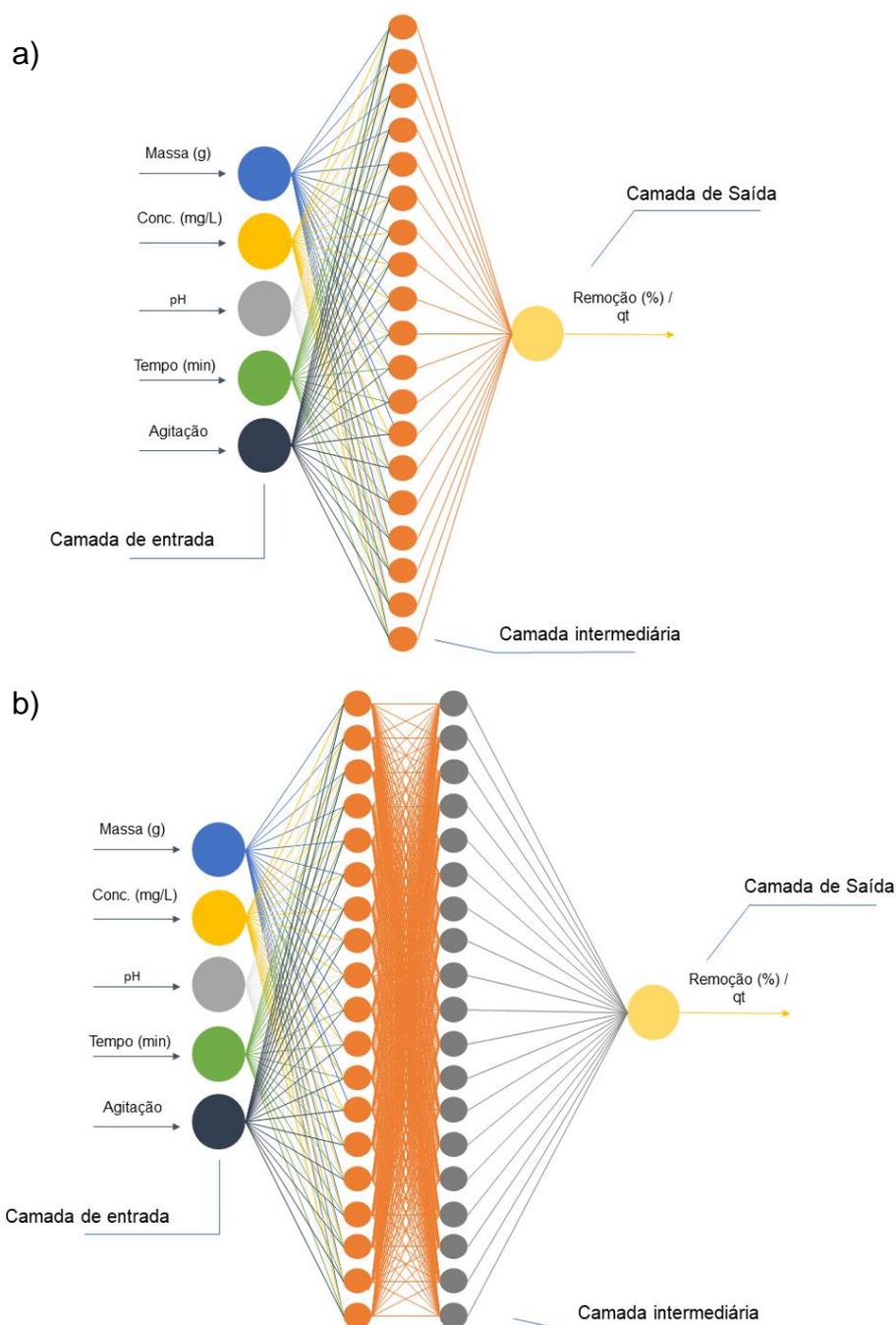
Figura 2 - Bibliotecas utilizadas

```
# -*- coding: utf-8 -*-  
"""  
Created on Tue Jul  5 08:43:21 2022  
  
@author: Marizabel  
"""  
  
import pandas as pd  
import numpy as np  
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler  
from sklearn.model_selection import train_test_split  
from sklearn.metrics import r2_score  
from sklearn.metrics import mean_absolute_error  
from sklearn.metrics import mean_squared_error  
from sklearn.neural_network import MLPRegressor  
import matplotlib.pyplot as plt
```

Na Figura 2, traz as bibliotecas utilizadas onde, a *pandas* auxilia na importação e leitura do banco de dados, a *numpy* para operações matemáticas, a *matplotlib* para geração de gráficos e a *scikit-learn* tem o intuito de realizar a predição dos dados a partir do algoritmo de aprendizado supervisionado *MLP Regressor*, que aplica regressão de multicamadas, bem como observar as métricas de desempenho.

A partir da implementação destas bibliotecas, desenvolveu-se a RNA, de modo a encontrar o melhor desempenho relacionando os dados simulados com o banco de dados original. Fixando 5 neurônios de entrada e dois de saída, realizou-se vários treinamentos alternando outros componentes das estruturas (Figuras 3a e 3b).

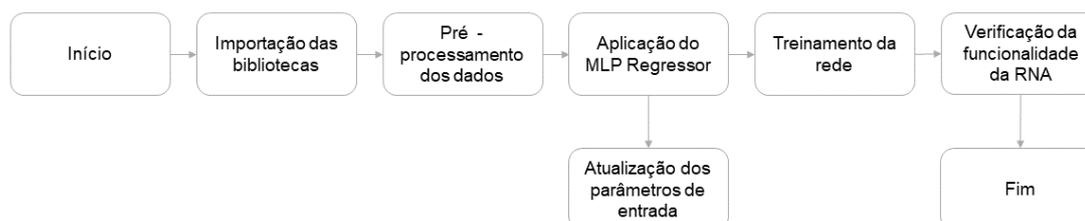
Figura 3 - Esboço das arquiteturas das redes neurais desenvolvidas



Nas Figuras 3a e 3b, pode-se identificar as camadas bem definidas (entrada, intermediária e de saída). Destaca-se que as arquiteturas apresentam diferentes quantidades de camadas ocultas, a Figura 3a apresenta uma camada intermediária enquanto a Figura 3b apresenta duas camadas.

Para melhor compreensão do funcionamento da RNA, a Figura 4 traz um fluxograma do funcionamento da rede.

Figura 4 – Fluxograma do funcionamento da rede neural



A Figura 4, fornece, de forma simplória, uma análise visual de como o algoritmo desenvolvido funciona.

4.7 Pré-processamento

O pré-processamento do banco de dados teve por finalidade retirar as colunas que não eram essenciais para o funcionamento da RNA, bem como a verificação da estrutura dos dados e assim realizar a normalização destes.

A metodologia de normalização utilizada foi a *MinMaxScaler* da *scikit-learn*, que dimensionou o banco de dados entre zero (0) e um (1) utilizando a Equação (III).

$$x = \frac{x - \min(x)}{\max(x) - \min(x)} \quad \text{Equação (III)}$$

Segundo a biblioteca desta ferramenta, ela proporciona robustez para desvios padrão muito pequenos de recursos e preservação de entradas zero em dados esparsos.

4.8 Planejamento

Foi realizado o planejamento computacional realizando combinações entre os parâmetros variáveis e significativos dentro do algoritmo, tais como: quantidade de camadas (1 e 2), quantidade de neurônios (20, 40 e 80), número de épocas (2000, 4000 e 8000), função de ativação (SIG e ReLU) e a porcentagem de teste dos dados (30% e 40%). Foram formados dois blocos experimentais, no primeiro fixou em uma camada e variando os demais parâmetros e no segundo todos os parâmetros foram variando.

Tabela 2 – Síntese do planejamento

Planejamento 1 (P1)		Planejamento 2 (P2)	
Camadas	1	Camadas	2
Func. Ativação	sigmoide e relu	Func. Ativação	sigmoide e relu
Épocas	2000, 4000 e 8000	Épocas	2000, 4000 e 8000
Validação (%)	30% e 40%	Validação (%)	30% e 40%
Neurônios	20, 40 e 80	Neurônios	20, 40 e 80
Total	36	Total	108

Cabe salientar que todos os experimentos foram realizados com 10 repetições cada, e assim armazenado alguns parâmetros estatísticos, como o coeficiente de determinação (R^2 – observado tanto nos dados de teste, quanto com os dados de treino, a fim de verificar quanto a generalização da eficiência do modelo), o *mean absolute error* (MAE) e o *mean squared error* (MSE), estes últimos apenas para teste.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Com o algoritmo finalizado, foi possível aplicar os planejamentos experimentais descritos anteriormente e acarretando assim, na verificação da funcionalidade e aplicação da RNA neste estudo de caso.

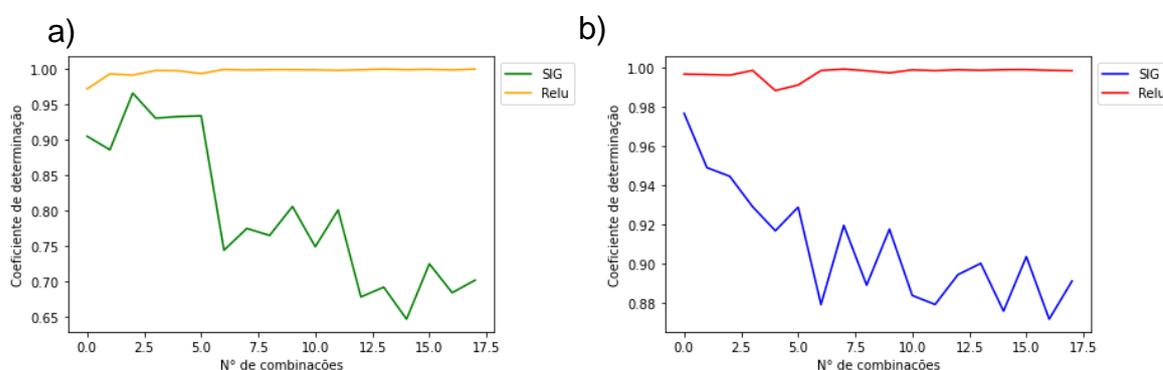
5.1 Planejamento 1 (P1)

Após o desenvolvimento do planejamento, que continha 36 combinações, foram analisadas todas as métricas desejadas e foram geradas figuras para facilitar a compreensão. Dessa forma, as figuras com o conjunto de cores: verde, laranja e em alguns momentos, preto, representam as análises para a saída *remoção* e o conjunto de cores: azul, vermelho e em alguns momentos, amarelo representam as análises para a saída *qt*.

5.1.1 Análise da influência das funções de ativação

Foram aplicadas duas funções de ativação diferentes, a SIG e a ReLU com o intuito de observar qual oferecia um melhor desempenho diante de todas as combinações previstas para ambas as saídas (*remoção* e *qt*). Para tanto, foi analisado como essas funções afetam o desempenho das métricas de desempenho (R^2 treino e teste, mae e mse).

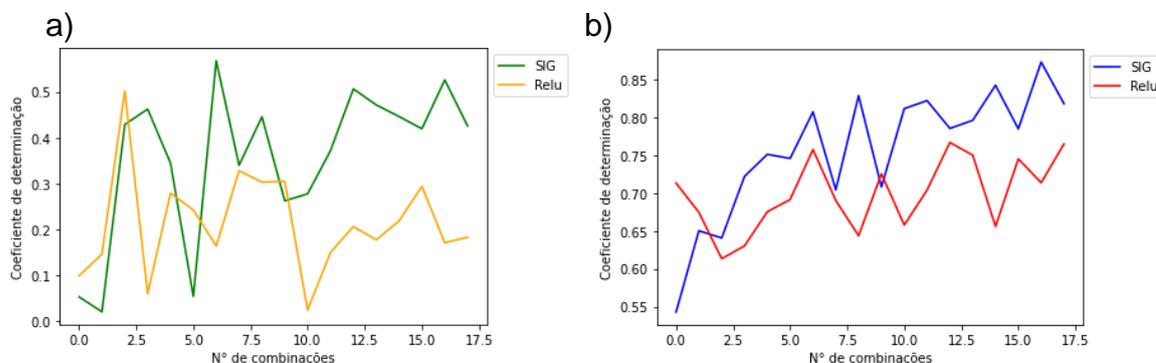
Figura 5 – Influência da função de ativação no R^2 treino (ambas saídas)



A partir da Figura 5a – remoção e Figura 5b - qt, é perceptível que a função de ativação ReLU pôde proporcionar um ajuste melhor aos dados de treino, alcançando valores muito próximos a 1, para ambas as saídas. A sigmoide (SIG), se mostrou

instável, e oferecendo um ajuste variando de 0,67 até 0,98 para *remoção* e se mantendo acima de 0,85 para *qt*.

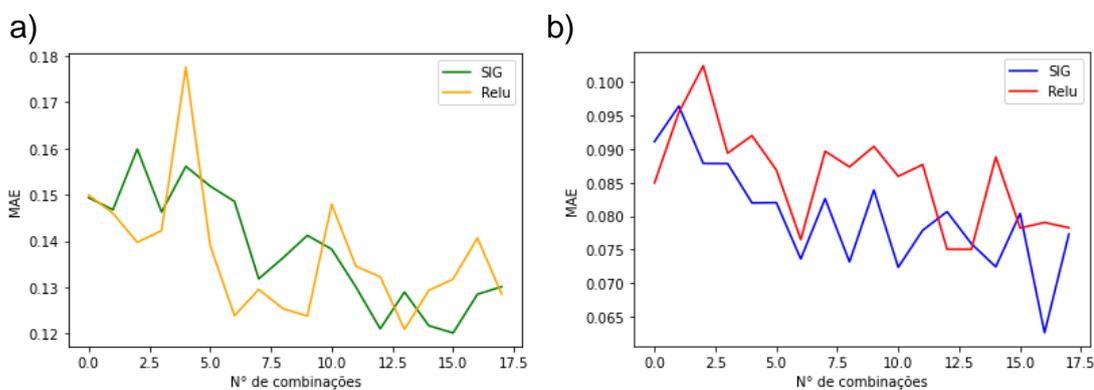
Figura 6 – Influência da função de ativação no R^2 teste (ambas saídas)



Na Figura 6a – *remoção* e Figura 6b - *qt*, ficou claro que ambas as funções causaram oscilações, mas que a SIG obteve índices melhores que a ReLU, para ambos os casos. Para a saída *remoção*, o maior valor de R^2 teste foi de 0,56 e para *qt* foi de 0,87. Em um primeiro momento, pode-se dizer que, a RNA se ajustou ao banco de dados, mas se ajustando melhor para uma das saídas (*qt*).

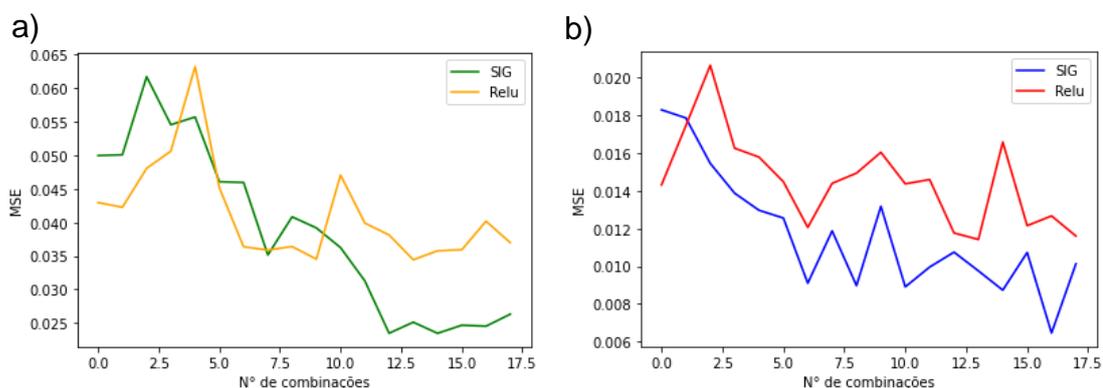
Em seguida, pode-se analisar como essas funções de ativação interferem nos erros (absoluto e quadrático), a partir das Figuras 7 e 8 respectivamente.

Figura 7 – Influência da função de ativação no MAE (ambas saídas)



Na Figura 7a – *remoção* e Figura 7b - *qt*, fica perceptível que a função SIG, mais uma vez, se mostrou mais eficiente apesar das oscilações. Sendo, de 0,12 (12%) para *remoção* (a) e de 0,06 (6%) para *qt* (a).

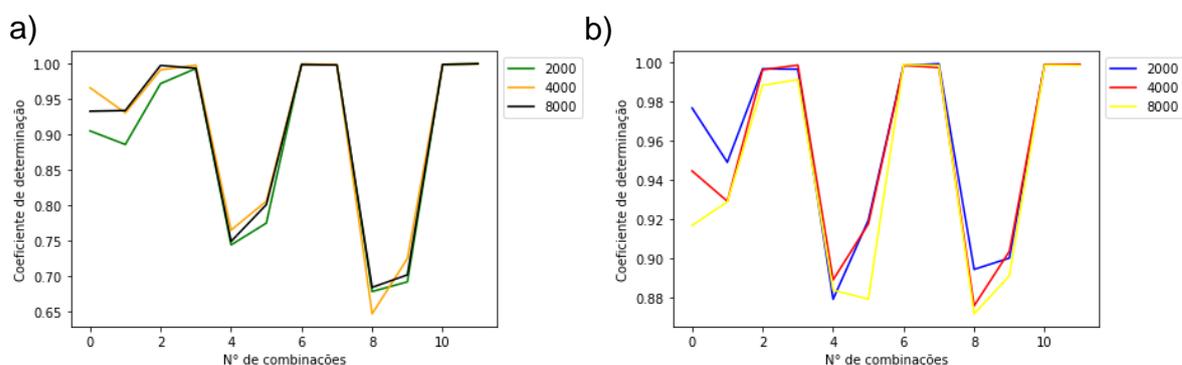
Figura 8 – Influência da função de ativação no MSE (ambas saídas)



A Figura 8a – remoção e Figura 8b - qt mostra que a função SIG desempenhou um comportamento mais satisfatório que a ReLU. Apresentando valores de 0,02 (2%) para remoção (a) e 0,0065 (0,65%) para qt (b).

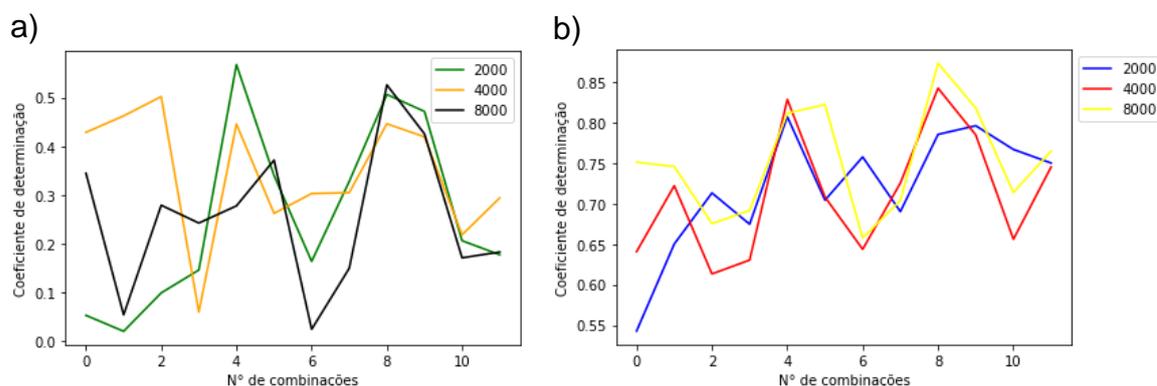
5.1.2 Análise da influência da quantidade de épocas

Um outro parâmetro muito importante que deve ser observado, é influência da quantidade de épocas, nas métricas de desempenho. Dessa forma, foram utilizadas 2000, 4000 e 8000 épocas.

Figura 9 – Influência da quantidade de épocas no R^2 treino (ambas saídas)

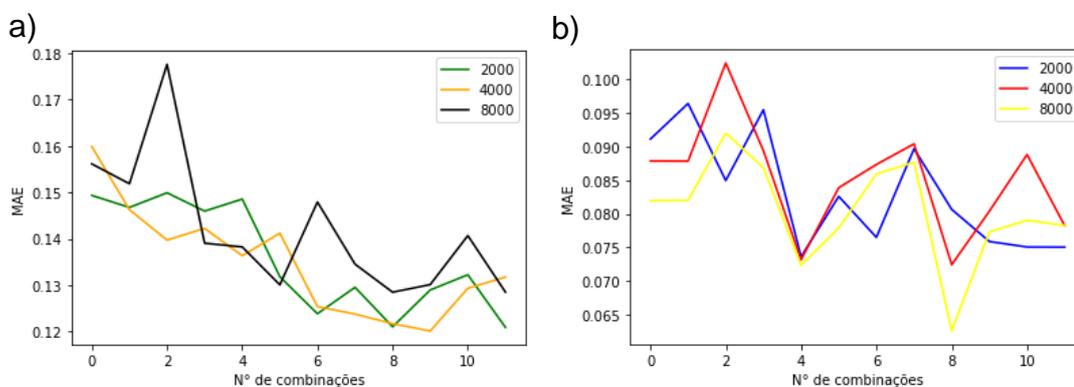
Aqui, na Figura 9a – remoção e Figura 9b - qt, fica claro que todas apresentaram oscilações, mas que, em algum momento, apresentaram valores próximos a 1 e comportamento semelhantes para ambas as saídas.

Figura 10 – Influência da quantidade de épocas no R^2 teste (ambas saídas)



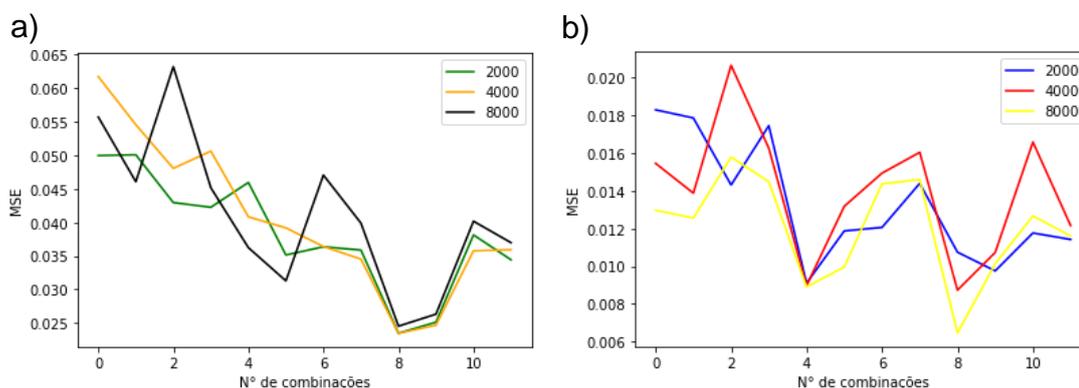
Ao realizar o teste da RNA, e ao analisarmos a influência da quantidade de épocas no r^2 , percebe-se na Figura 10a – remoção e Figura 10b - qt, que para a saída *remoção* (a) 2000 épocas foram suficientes para alcançar um $R^2 = 0,56$, quando utilizados 8000 épocas, obteve um comportamento semelhante, com $R^2 = 0,52$ assim como 4000. Quando observamos para saída *qt* (b), quando utilizado 8000 épocas, alcançamos um $R^2 = 0,87$ e as demais, em algum momento, também conseguiram alcançar um R^2 superior a 0,80.

Figura 11 – Influência da quantidade de épocas no MAE (ambas saídas)



Na Figura 11a – remoção e Figura 11b - qt, o desempenho para *remoção* (a), tanto 4000 épocas quanto 2000 proporcionaram um MAE = 0,12 (12%). Para *qt* (b) as 8000 épocas obtiveram desempenho superior as demais (MAE = 0,06), o mesmo ocorreu para o MSE.

Figura 12 – Influência da quantidade de épocas no MSE (ambas saídas)

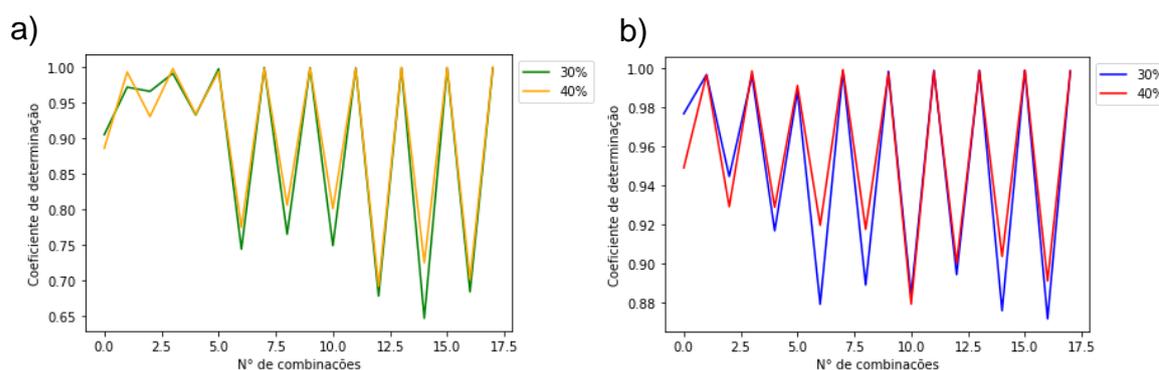


Na métrica MSE, Figura 12a – remoção e Figura 12b - qt, o comportamento não foi diferente das análises anteriores, onde, para *remoção* (a), as três variações tiveram um bom comportamento, alcançando um MSE = 0,02 e para *qt* (b), ao aplicar 8000 épocas, obtivemos melhores resultados *qt* (b).

5.1.3 Análise da influência da porcentagem de teste

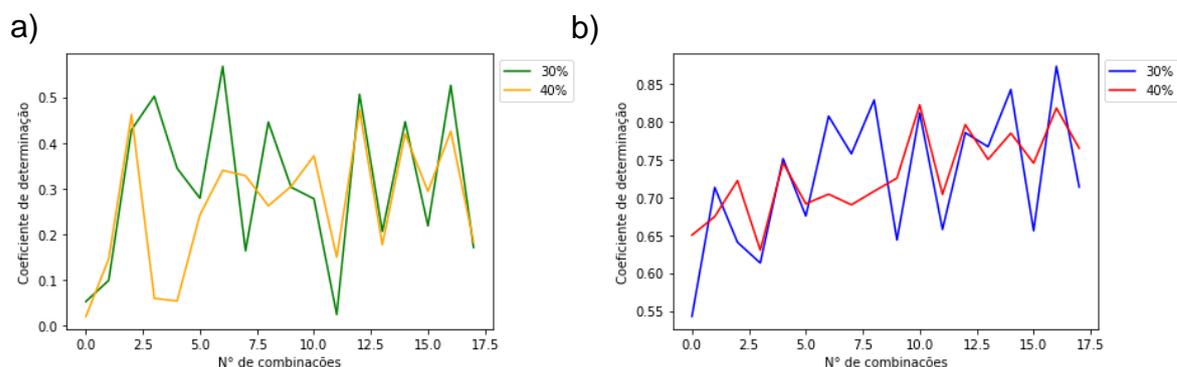
O banco de dados havia sido dividido em dados para treino e dados para teste, os dados reservados para teste, nada mais são do que os dados utilizados para validar o modelo. Sendo assim, foram utilizadas porcentagens diferentes de subdivisão do banco de dados.

Figura 13 – Influência da porcentagem de teste no R^2 treino (ambas saídas)



Com relação ao R^2 treino, Figura 13a – remoção e Figura 13b - qt, pode-se observar um comportamento similar entre as duas variações (30% e 40%).

Figura 14 – Influência da porcentagem de teste no R^2 teste (ambas saídas)



Na Figura 14a – remoção e Figura 14b - qt, estão representados a variação do coeficiente de determinação para os dados de teste para ambas as saídas, tem-se uma oscilação comportamental durante o desenvolvimento do estudo o R^2 , podendo observar picos altos e baixos. Na saída *remoção* (a), o teste com 30% (0,52) obteve melhor eficiência do que com 40% (0,47). Com um desempenho superior a este, para a saída *qt* (b), o teste com 30% do banco de dados, se mostrou melhor, com $r^2 = 0,87$.

Um comportamento semelhante, podemos observar no desenvolvimento do MAE e MSE, onde o teste com 30% retornou resultados melhores que o teste com 40%, como mostram as Figuras 15 e 16, respectivamente.

Figura 15 – Influência da porcentagem de teste no MAE (ambas saídas)

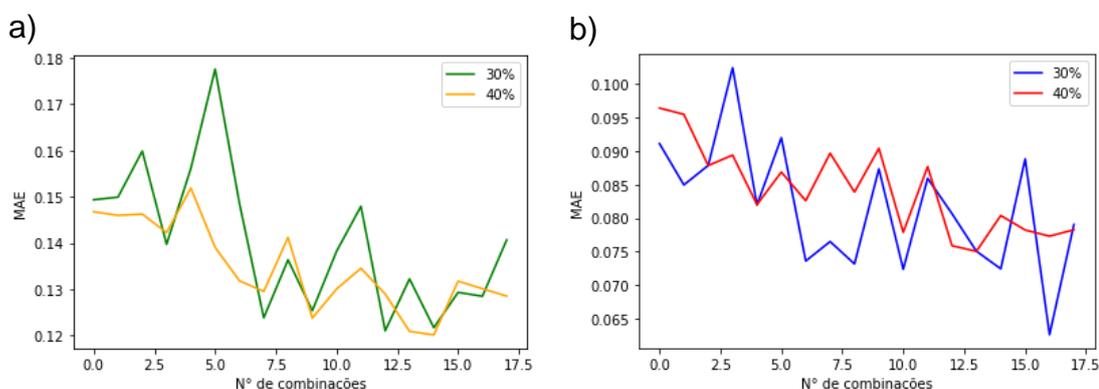
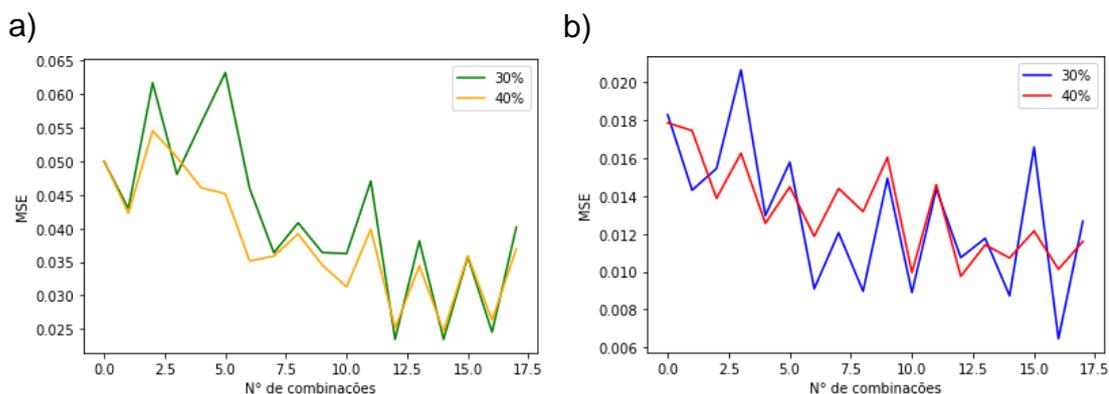
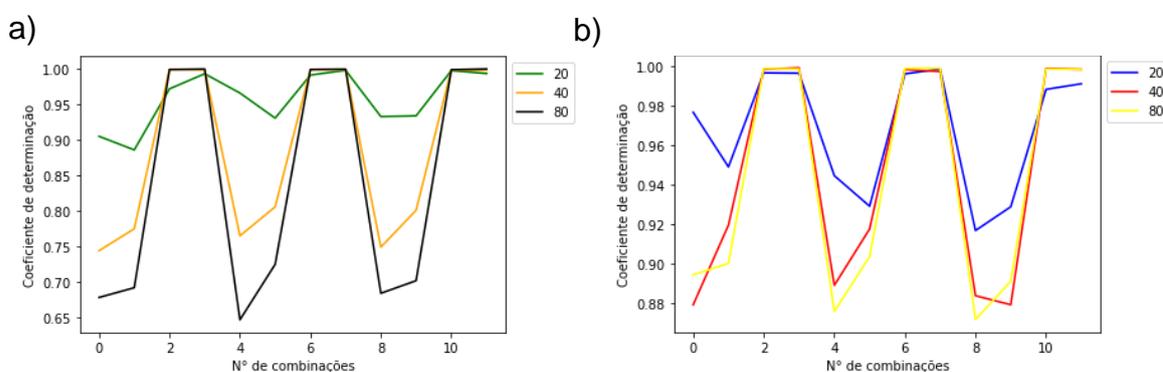
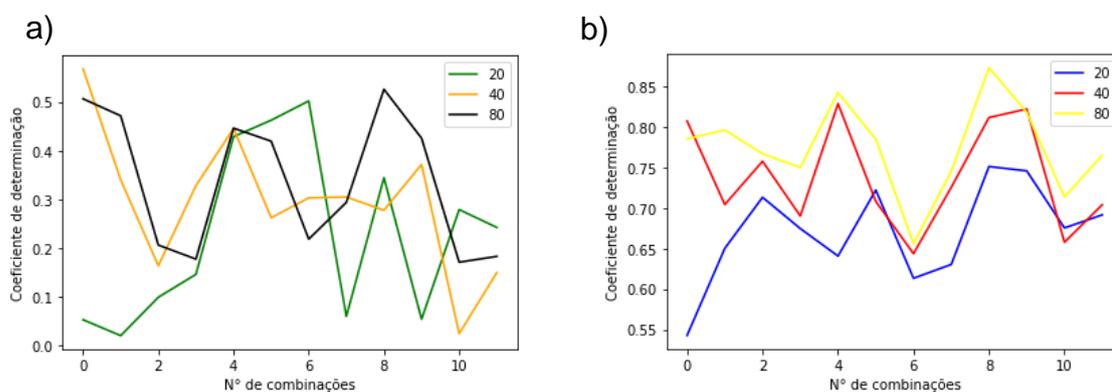


Figura 16 – Influência da porcentagem de teste no MSE (ambas saídas)



5.1.4 Análise da influência da quantidade de neurônios

Na única camada oculta presente na RNA proposta no P1, foram variados a quantidade de neurônios e conseqüentemente, analisado a sua influência nas métricas de desempenho. Desse modo, as Figuras 17 e 18 trazem o desempenho do R^2 para treino e teste, respectivamente, de acordo com a quantidade de neurônios dispostos na camada oculta.

Figura 17 – Influência da quantidade de neurônios no R^2 treino (ambas saídas)Figura 18 – Influência da quantidade de neurônios no R^2 teste (ambas saídas)

Com base nas Figuras 17 e 18, verificou-se um desempenho satisfatório quando a RNA foi executada com 40 e 80 neurônios na camada oculta, sendo superior ao comportamento observado com 20 neurônios. Pode-se observar que para teste a saída remoção (Figura 17a) o $R^2 > 0,50$ e para qt (Figura 17b) $R^2 > 0,80$.

Comportamento similar, apresentou para o MAE e o MSE (figuras 19 e 20, respectivamente), onde os resultados obtidos quando utilizamos a RNA com 80 e 40 neurônios na camada oculta, os resultados são satisfatórios mas a com 80 neuronios se sobressai.

Figura 19 – Influência da quantidade de neurônios no MAE (ambas saídas)

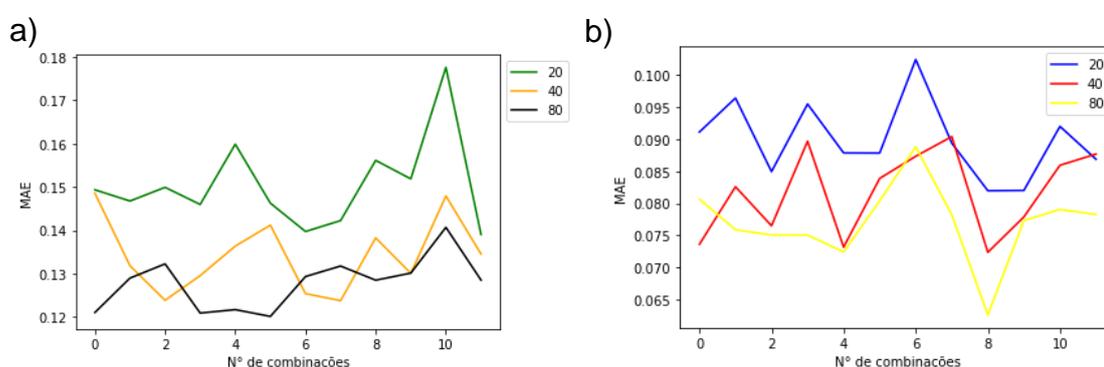
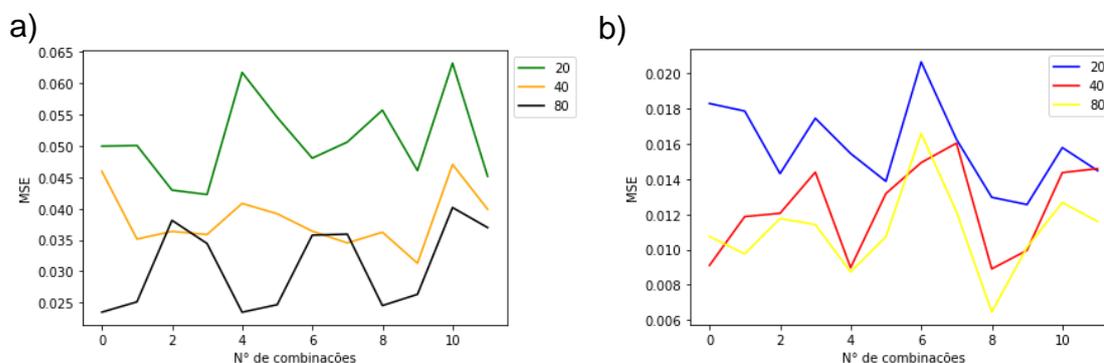


Figura 20 – Influência da quantidade de neurônios no MSE (ambas saídas)



Finalizada a análise do P1, é possível concluir que, a RNA desenvolvida pôde se ajustar aos valores reais, mesmo que, para a saída *qt* tenha desempenhado um ajuste melhor do que para a saída *remoção*.

De forma resumida, a Tabela 3, destacam as combinações que obtiveram melhor desempenho de acordo com as métricas analisadas (Tabela 4).

Tabela 3 – Combinação com melhor desempenho

Ordem	Neurônios	Épocas	Função – Atv.	Validação
1	40	2000	SIG	30%
2	80	8000	SIG	30%

Tabela 4 – Valores das métricas de desempenho da melhor combinação

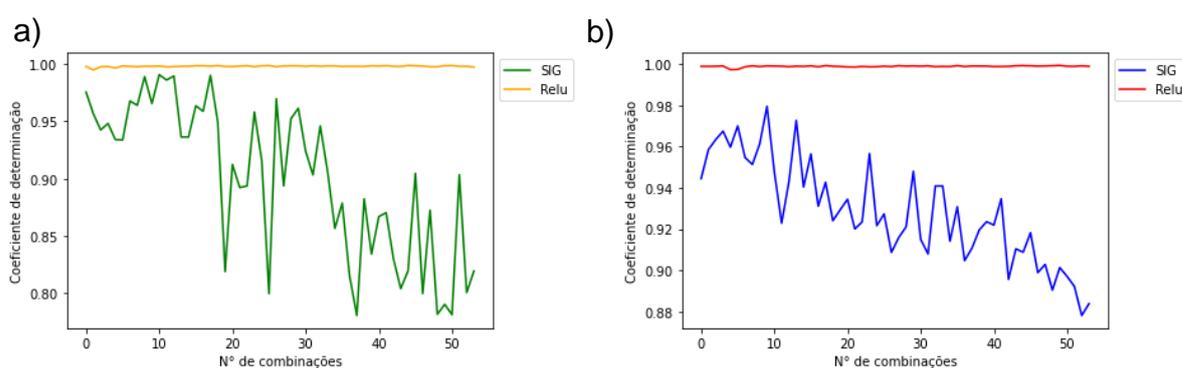
Ordem	Remoção				qt			
	r ² treino	r ² teste	MAE	MSE	r ² treino	r ² teste	MAE	MSE
1	0,7437	0,5674	0,1486	0,0460	0,8794	0,8073	0,0736	0,0091
2	0,6838	0,5258	0,1285	0,0245	0,8720	0,8732	0,0626	0,0065

5.2 Planejamento 2 (P2)

Para o segundo planejamento, foi adicionado mais uma camada oculta, ou seja, diferentemente do P1 onde, este continha apenas uma única camada oculta, para o P2 foram configuradas duas camadas ocultas variando a quantidade de neurônios em cada. Além de haver a variação na quantidade de neurônios nas camadas ocultas, as variáveis: função de ativação, quantidade de épocas e % de teste, bem como descrito no item 4.7 da metodologia.

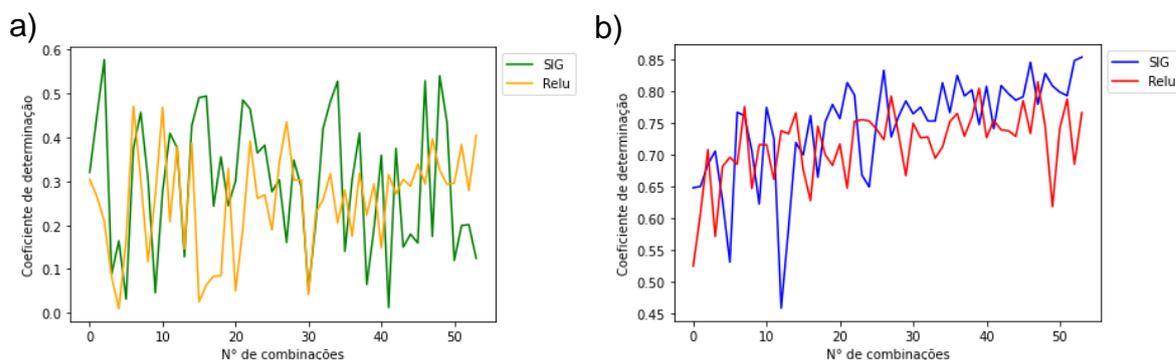
5.2.1 Análise da influência das funções de ativação

Do mesmo modo que foi desenvolvido no P1, no P2 houve a variação entre as funções de ativação (SIG e ReLU). Deste modo, as Figuras 21, 22, 23 e 24 trazem a influência destas funções nas métricas de desempenho.

Figura 21 – Influência da função de ativação no R² treino (ambas saídas)

Observou-se na Figura 21a - remoção e Figura 21b - qt, que a ReLU se sobressai quando se trata dos dados de treinamento, embora não consiga reproduzir a mesma eficiência no teste, no treinamento ela atinge um valor para R² quase que constante de 0,99, tanto para *remoção* (a) quanto para *qt* (b). Já a SIG, causou uma grande oscilação e foi diminuindo ao longo do desenvolvimento do planejamento.

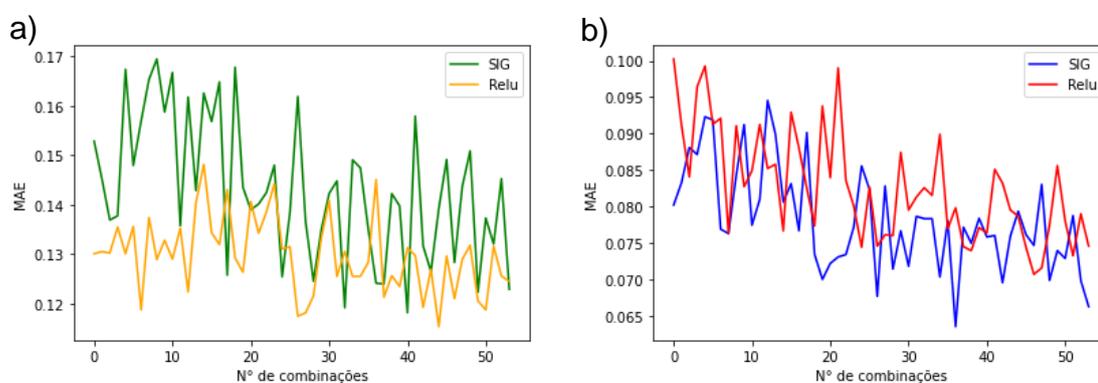
Figura 22 – Influência da função de ativação no R^2 teste (ambas saídas)



Diferentemente do comportamento observado na análise anterior, onde a ReLU se sobressai a SIG, na Figura 22a – remoção e Figura 22b - qt, nos dados de teste ocorreu o contrário, percebe-se que a SIG obteve um melhor desempenho, apesar das oscilações. O que evidencia isso, é que para *remoção* (a) a SIG proporcionou um $R^2 = 0,57$ enquanto que a ReLU gerou um $R^2 = 0,47$. Para *qt* (b), quando é aplicada a SIG o $R^2 = 0,85$ e para ReLU o $R^2 = 0,80$.

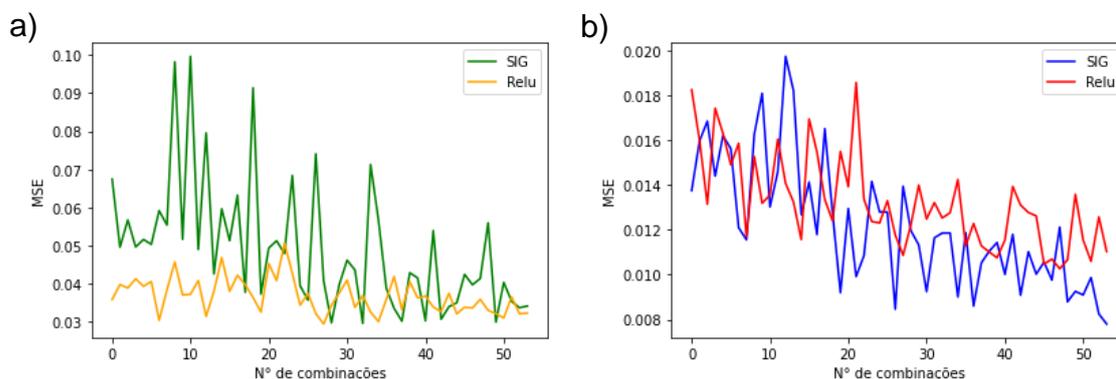
Seguindo as análises, observa-se a influência destas mesmas funções no MAE e MSE, nas Figuras 23 e 24, respectivamente.

Figura 23 – Influência da função de ativação no MAE (ambas saídas)



Ao analisar a Figura 23a – remoção e Figura 23b – qt, os dados para *remoção* (a), ambas funções tem um desempenho com MAE = 0,11 (11%). Para *qt* (b), a SIG se mostrou superior com MAE = 0,063 (6,3%).

Figura 24 – Influência da função de ativação no MSE (ambas saídas)

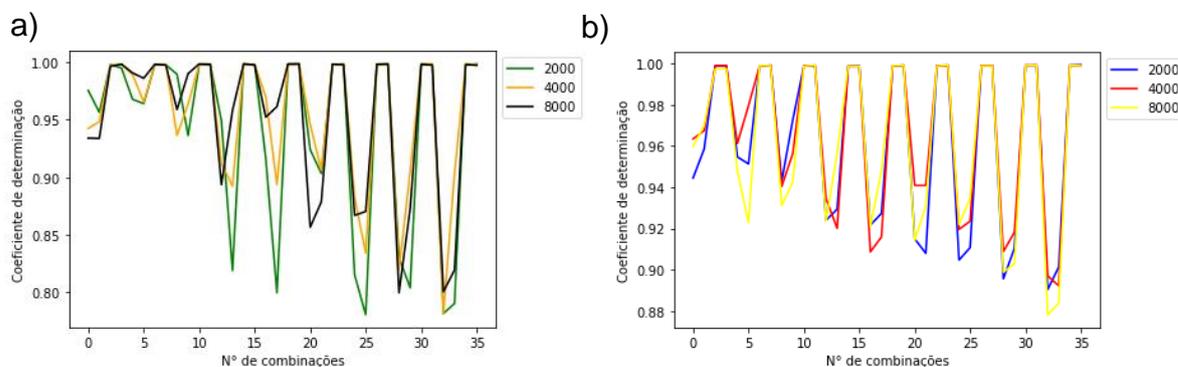


Para o MSE, Figura 24a – remoção e Figura 24b - qt, o comportamento segue a mesma lógica da análise anterior. Quando os dados de *remoção* (a) ambas têm bom desempenho com MSE = 0,02 (2%) e para *qt* (b) a função SIG se mostrou melhor, com MSE = 0,007 (0,7%).

5.2.2 Análise da influência da quantidade de épocas

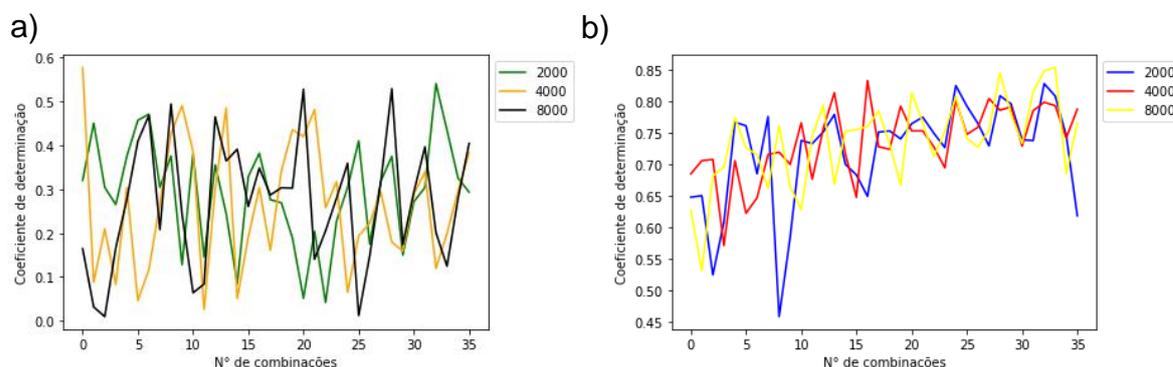
A variação na quantidade de épocas foi entre 2000, 4000 e 8000 épocas e combinando com as demais variáveis.

Figura 25 – Influência da quantidade de épocas no R² treino (ambas saídas)



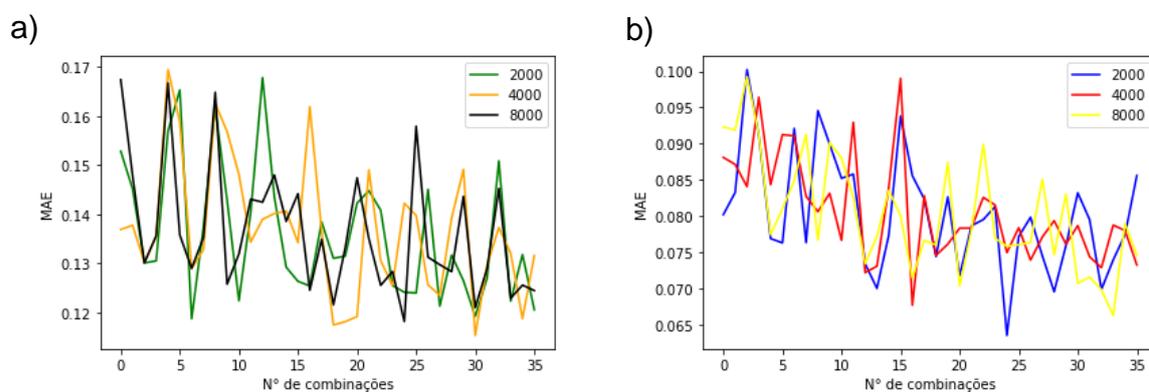
A partir da análise da Figura 25a – remoção e 25b - qt, a variação na quantidade de épocas causou bastante oscilações, mas em alguns momentos todas elas demonstraram um excelente desempenho para ambas as saídas, *remoção* e *qt* (a e b, respectivamente), com R² acima de 0,97.

Figura 26 – Influência da quantidade de épocas no R^2 teste (ambas saídas)



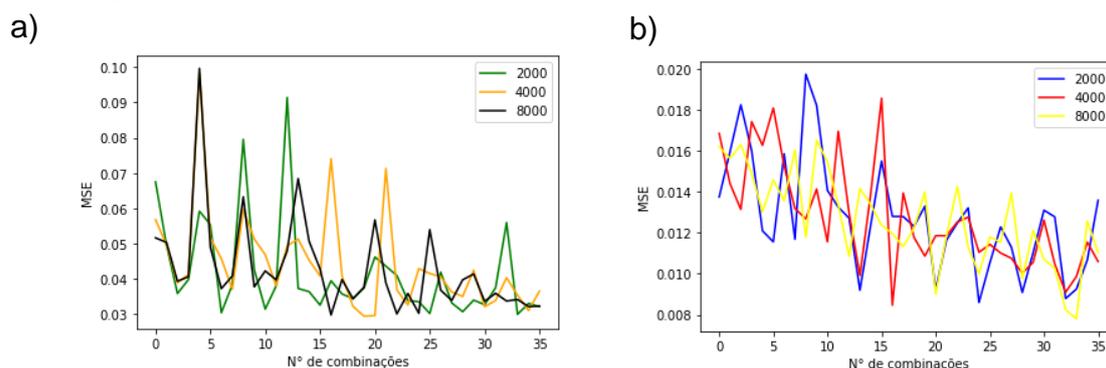
Na Figura 26a – remoção e 26b – qt, que representa os dados de teste, assim como nos dados de treino, é perceptível uma grande variação, porém, para *remoção* (a) ao utilizar 4000 épocas corroborou no melhor resultado, sendo $R^2 = 0,57$ e as demais, apresentam valores próximos. Um comportamento diferente pode ser observado para *qt* (b), onde 8000 épocas gerou um melhor desempenho da RNA, com $R^2 = 0,85$, embora as demais também apresentem um desempenho acima de 0,80.

Figura 27 – Influência da quantidade de épocas no MAE (ambas saídas)



Observa-se que o MAE em função da quantidade de épocas na Figura 27a - remoção e 27b - qt, para *remoção* (a), 4000 épocas retorna um melhor desempenho, com MAE = 0,02 (2%) e quem mais se aproxima é 8000 épocas. E para saída *qt* (b), 2000 épocas proporciona um MAE = 0,06 (6,3%), assim como 8000 épocas.

Figura 28 – Influência da quantidade de épocas no MSE (ambas saídas)

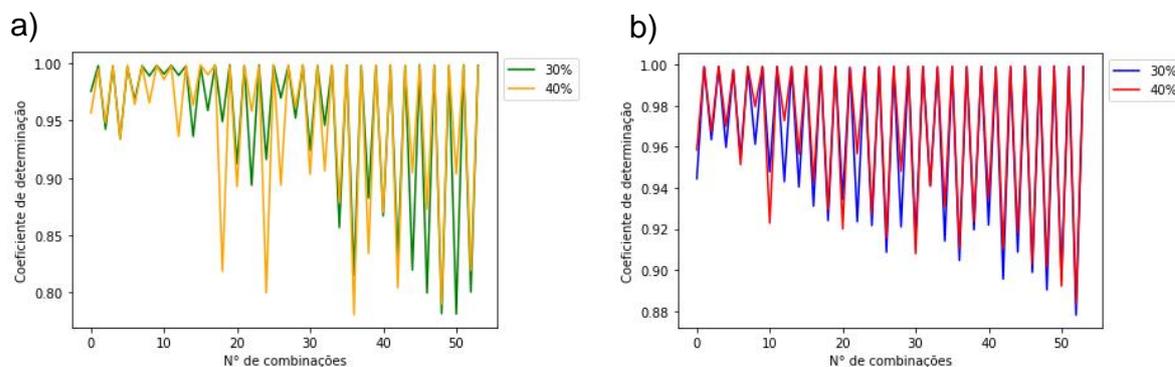


Para o MSE, Figura 28a – remoção e Figura 28b - qt, o comportamento é o mesmo do MAE ao analisar os dados de *remoção* (a), as três variações oferecem um desempenho de MAE = 0,11 (11%). Mas para *qt* (b), quem oferece o melhor desempenho é 8000 épocas (0,007 – 0,7%), embora as demais apresentem um comportamento similar com MSE = 0,008 e 0,009 para 2000 e 4000 épocas, respectivamente.

5.2.3 Análise da influência da porcentagem de teste

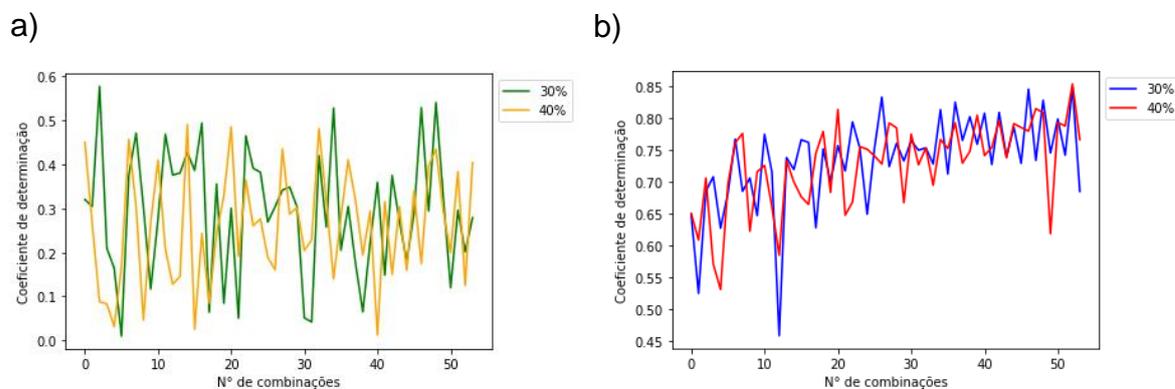
Durante a execução da RNA, o banco de dados foi subdividido em dados de treino e teste, para tanto foram utilizadas as variações 70% para treino com 30% para teste e 60% para treino e 40% para teste.

Figura 29 – Influência da porcentagem de teste no R^2 treino (ambas saídas)



O comportamento observado na Figura 29a – remoção e Figura 29b - qt, é que apesar das oscilações, em algum momento, ambas as porcentagens de validação obtiveram resultados satisfatórios, se aproximando de 1.

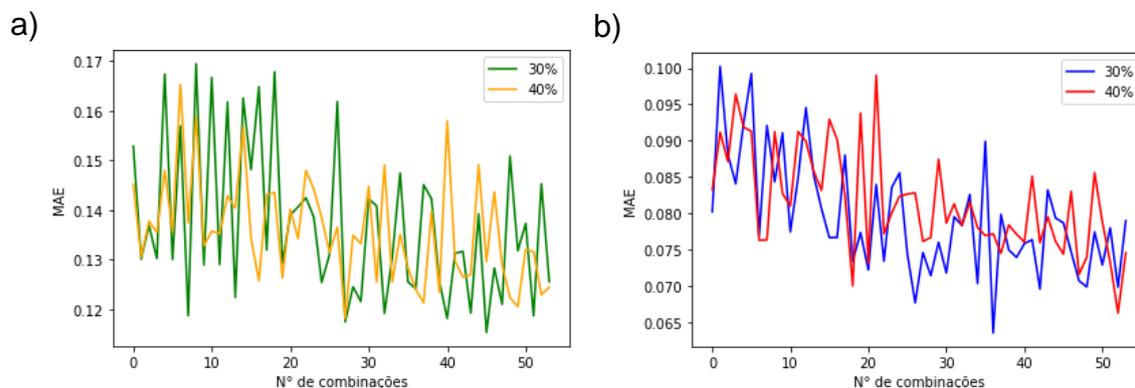
Figura 30 – Influência da porcentagem de teste no R^2 teste (ambas saídas)



Percebe-se que na Figura 30a – remoção e Figura 30b - qt, a saída *remoção* (a), o melhor comportamento é observado quando utilizado 30% dos dados para teste,

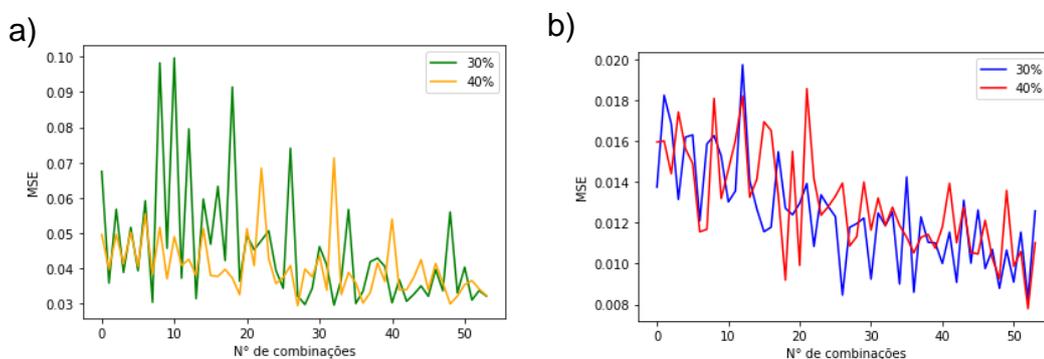
sendo superior a 0,50. Para *qt* (b), ambas variações possuem comportamento semelhante, gerando R^2 entre a 0,70 e 0,85, na maioria das combinações.

Figura 31 – Influência da porcentagem de teste no MAE (ambas saídas)



No MAE, Figura 31a – remoção e Figura 31b - *qt*, observando a saída *remoção* (a), quando executado a RNA com 30% dos dados para teste, isso retorna um melhor desempenho da rede, e para *qt* (b) esse comportamento segue o mesmo. Para o MSE (Figura 32a – remoção e Figura 32b - *qt*), segue a mesma análise embora para *remoção* (a), ambas demonstrem um comportamento similar.

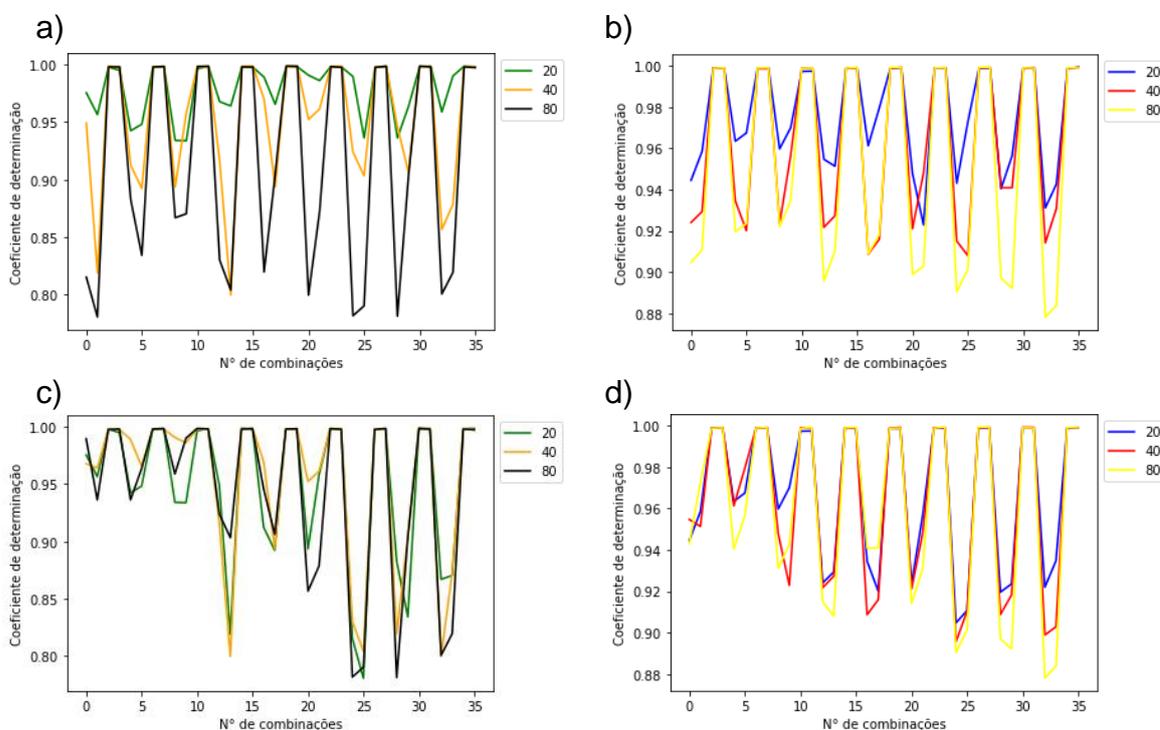
Figura 32 – Influência da porcentagem de teste no MSE (ambas saídas)



5.2.4 Análise da influência da quantidade de neurônios

No P2 foram estruturadas duas camadas ocultas e que quantidade de neurônios em cada uma, foram variando. Afim de facilitar a análise, cabe ressaltar que os itens *a* e *b* de cada figura corresponde a CAM1 – camada oculta 1, bem como os itens *c* e *d* correspondem a CAM2 – camada oculta 2.

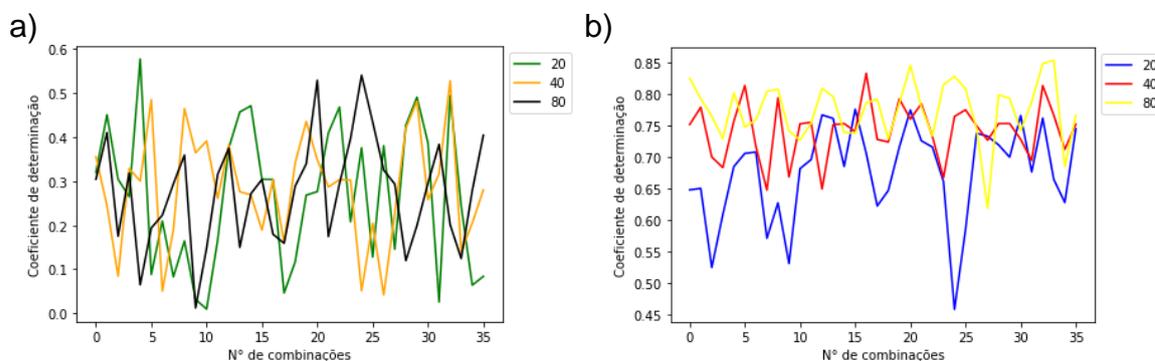
Figura 33 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no R^2 treino (ambas saídas)

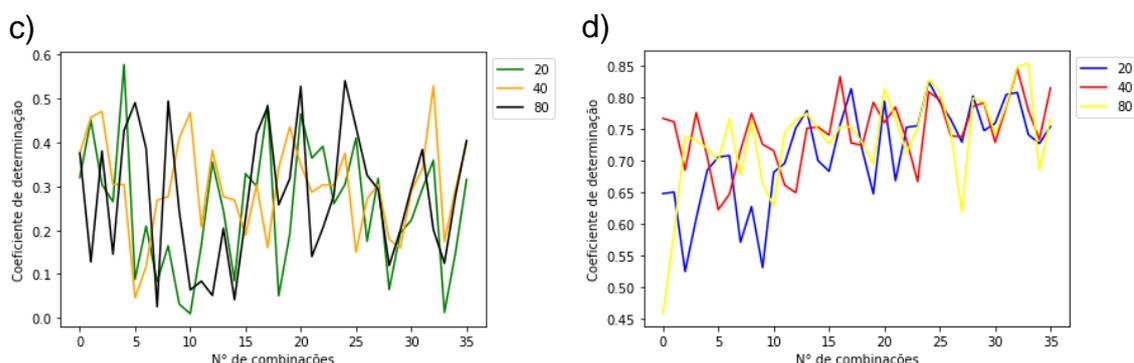


Neste bloco de Figuras 33a – remoção CAM1, Figura 33b – qt CAM1, Figura 33c – remoção CAM2 e Figura 33d – qt CAM 2, pode-se reforçar aquilo que já vinha sendo observado nas demais análises. Onde existem oscilações, mas que em algum momento, o R^2 se aproxima de 1 para todas as combinações.

Essas oscilações ocorrem, também, em decorrência das diversas combinações com as outras variáveis estudadas.

Figura 34 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no R^2 teste (ambas saídas)

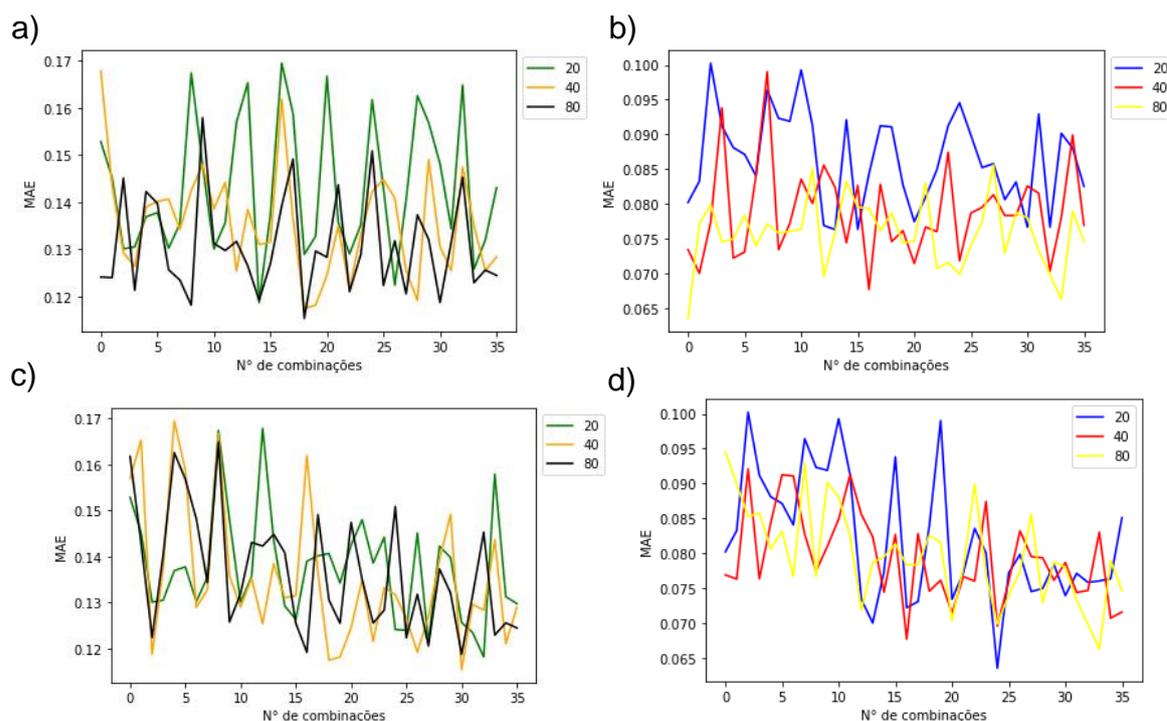




Observando-se as Figuras 34a – remoção CAM1, Figura 34b – qt CAM1, Figura 34c – remoção CAM2 e Figura 34d – qt CAM 2, para o R^2 teste, pode-se observar na CAM1 (a e b), para *remoção* (a) quando utilizados 20 e 80 neurônios corrobora com o melhor ajuste, assim como para *qt* (b), que é com 80 neurônios e comportamento similar apresenta com 40 neurônios.

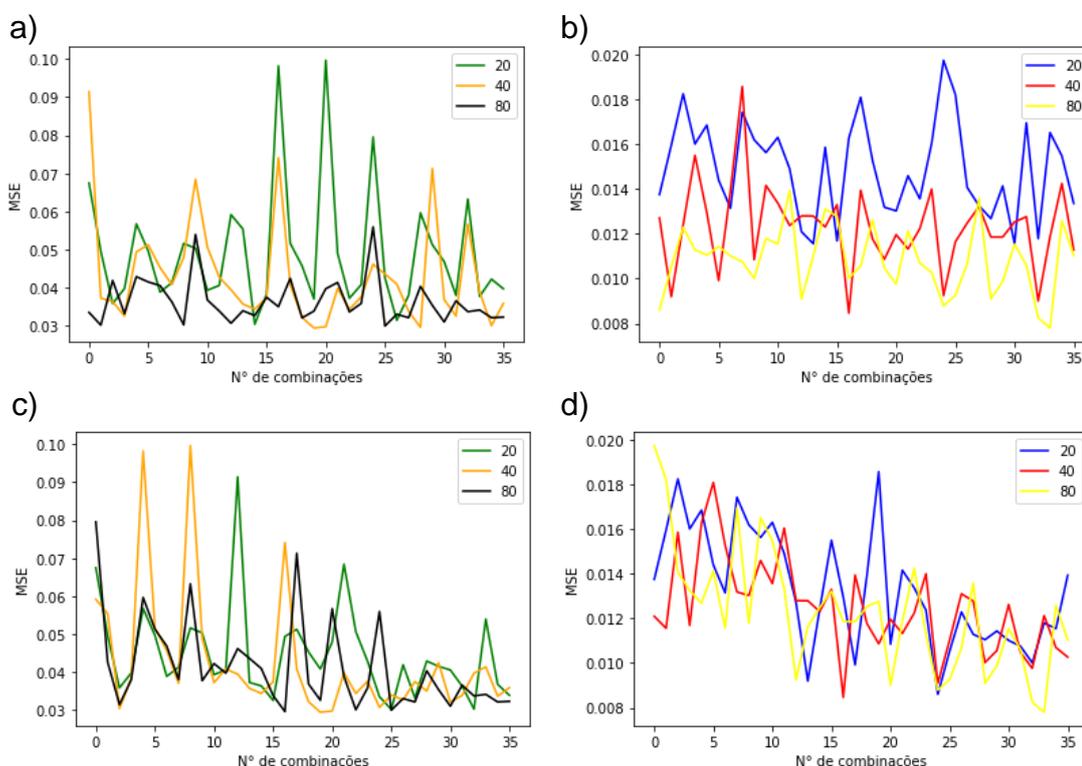
Com relação a CAM2 (c e d), um comportamento um semelhante é observado ao analisar a saída *remoção* (c), pois ela continua apresentando um melhor ajuste quando utilizados 20 e 80 neurônios na camada oculta. Para *qt* (d), o comportamento é o mesmo do analisado na CAM1, onde o melhor desempenho é com 40 e 80 neurônios.

Figura 35 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no MAE (ambas saídas)



Seguindo a análise e observando-se o MAE, bloco de Figuras 35a – remoção CAM1, Figura 35b – qt CAM1, Figura 35c – remoção CAM2 e Figura 35d – qt CAM 2, para *remoção* (a e c), é observado que o melhor desempenho na CAM1 (a) foi com 40 e 80 e na CAM2 (c) foi com 40 e 80 neurônios. Mas para *qt* (b e d), é perceptível um comportamento diferente, onde o melhor desempenho na CAM1 (b) foi com 40 e 80 e na CAM2 (d) foi com 20 e 80 neurônios.

Figura 36 – Influência da quantidade de neurônios (CAM1 e CAM2) no MSE (ambas saídas)



No MSE, bloco de Figuras 36a – remoção CAM1, Figura 36b – qt CAM1, Figura 36c – remoção CAM2 e Figura 36d – qt CAM 2, ao observar a saída *remoção* (a e c), fica claro um mesmo comportamento como destacado na análise do MAE. Onde, a CAM1 (a) com 40 e 80 neurônios e na CAM2 (c) com 40 e 80.

Mas para *qt* (b e d), o comportamento idêntico. O melhor desempenho na CAM1 (b) é com 40 e 80 neurônios, e na CAM2 (d) é também com 40 e 80 neurônios.

Resumidamente, a Tabela 5, destaca as combinações que obtiveram melhor desempenho de acordo com as métricas analisadas (Tabela 6). Devido ao maior número de combinações possíveis, isso acarretou em mais de uma combinação que pudesse gerar um melhor ajuste para cada saída.

Tabela 5 – Combinação com melhor desempenho

Ordem	CAM1	CAM2	Épocas	Função – Atv.	Validação
1	20	20	4000	SIG	30%
2	40	40	4000	SIG	30%
3	40	40	4000	ReLU	40%
4	40	40	8000	SIG	30%
5	40	80	8000	SIG	30%
6	80	20	8000	SIG	30%
7	80	40	4000	ReLU	30%
8	80	80	2000	SIG	30%
9	80	80	8000	SIG	40%

Tabela 6 – Valores das métricas de desempenho da melhor combinação

Ordem	Remoção				qt			
	r^2 treino	r^2 teste	MAE	MSE	r^2 treino	r^2 teste	MAE	MSE
1	0,9425	<u>0,5774</u>	0,1369	0,0567	0,9635	0,6849	0,0881	0,0169
2	0,9699	0,3036	0,1619	0,0741	0,9086	<u>0,8326</u>	<u>0,0676</u>	<u>0,0085</u>
3	0,9985	<u>0,4355</u>	<u>0,1181</u>	<u>0,0294</u>	0,9993	0,7921	0,0761	0,0109
4	0,9524	0,3484	<u>0,1245</u>	<u>0,0297</u>	0,9210	0,7601	0,0714	0,0120
5	0,8567	0,5279	0,1474	0,0567	0,9141	<u>0,8132</u>	<u>0,0703</u>	<u>0,0090</u>
6	0,8153	0,3045	<u>0,1241</u>	<u>0,0335</u>	0,9047	<u>0,8248</u>	<u>0,0635</u>	<u>0,0086</u>
7	0,9989	0,2888	<u>0,1153</u>	<u>0,0321</u>	0,9993	0,7289	0,0787	0,0126
8	0,7816	<u>0,5407</u>	0,1509	0,0559	0,8903	<u>0,8279</u>	<u>0,0698</u>	<u>0,0088</u>
9	0,8194	0,1246	0,1229	0,0341	0,8838	<u>0,8534</u>	<u>0,0662</u>	<u>0,0078</u>

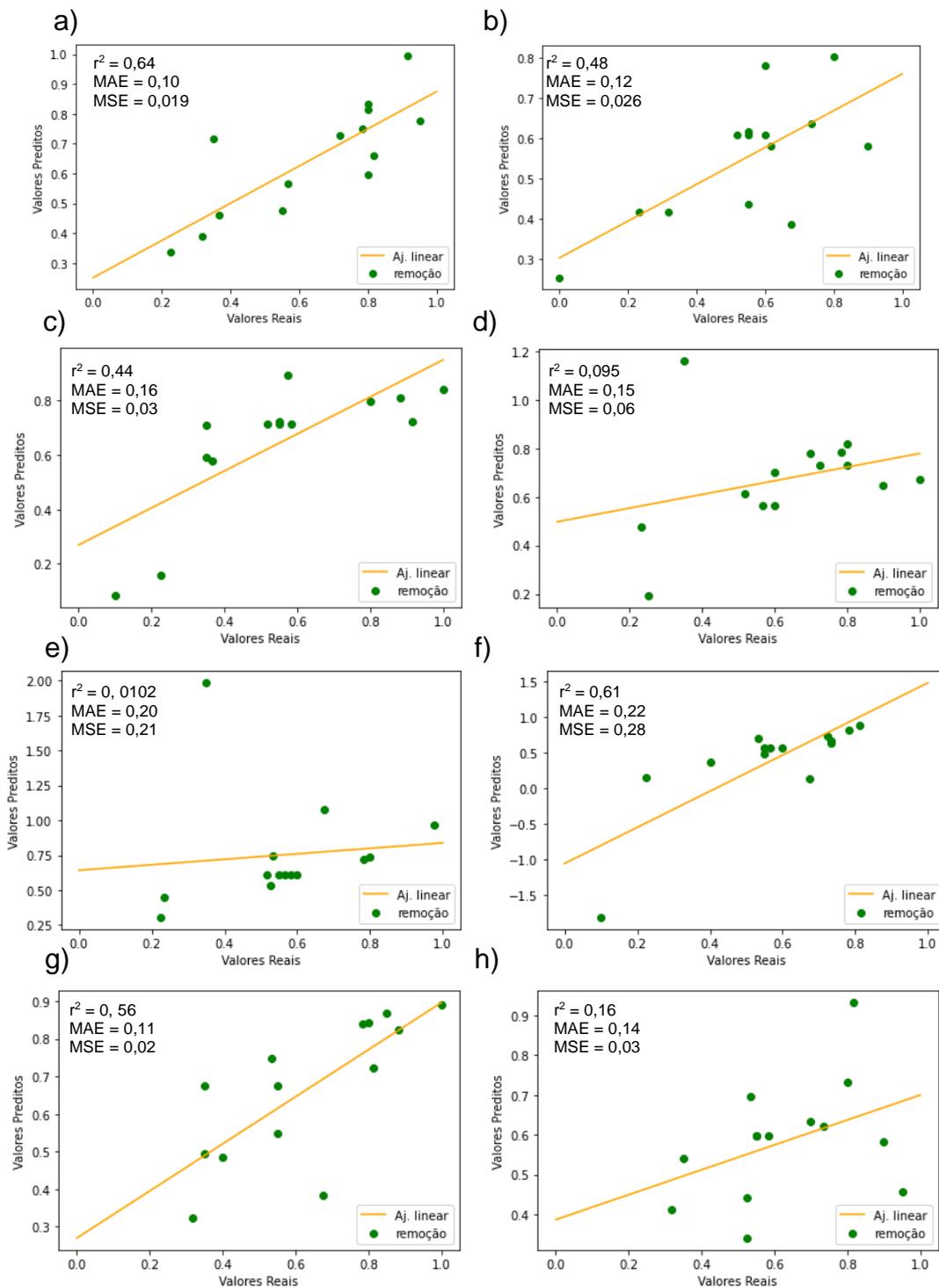
Mediante aos resultados obtidos, também é possível afirmar que a estrutura da RNA com duas camadas ocultas, se mostrou mais eficiente ao prever resultados semelhantes aos reais, possuindo assim um melhor ajuste ao modelo.

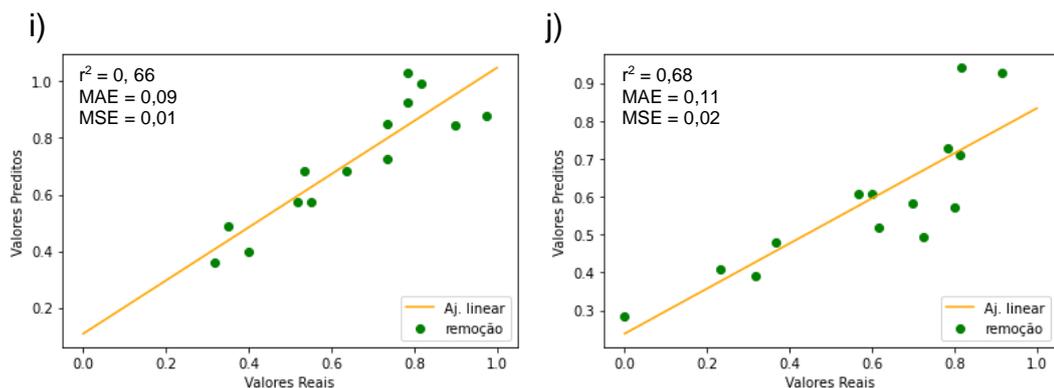
5.3 Análise visual do ajuste do modelo

A partir das análises anteriores, pode-se afirmar que a RNA com estrutura de duas camadas ocultas, proporciona o melhor ajuste, o mesmo comportamento foi observado por Choji (2021), que também aplicou RNA para a modelagem do processo de adsorção.

Agora é possível observar de forma gráfica o ajuste entre os valores preditos pela RNA e os valores reais, nos blocos de Figuras 37 e 38.

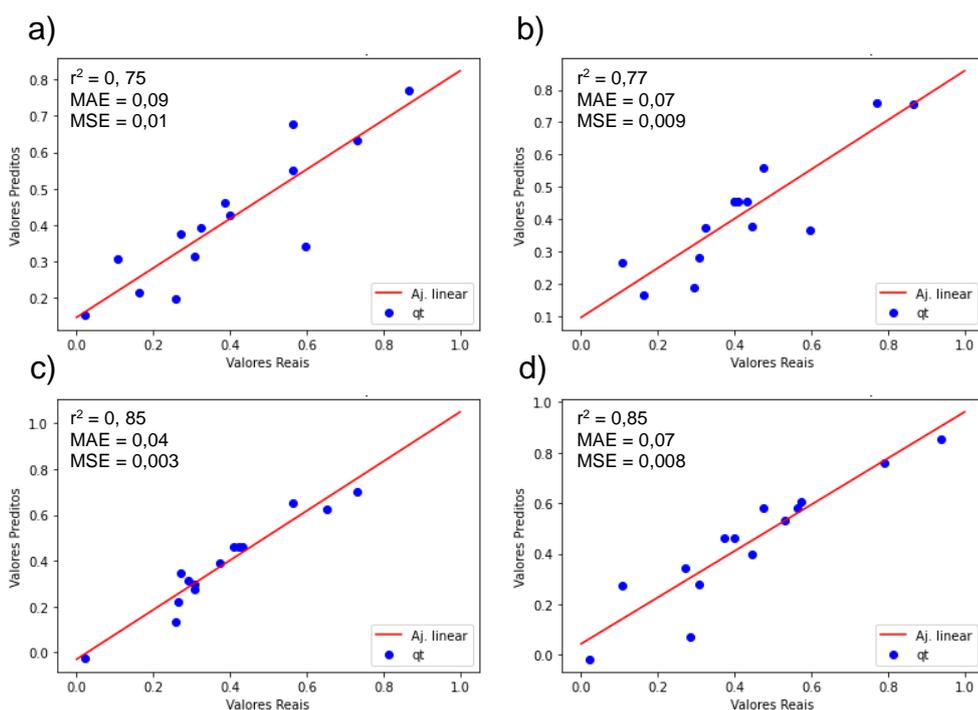
Figura 37 – Valores reais x preditos (a – j) – remoção

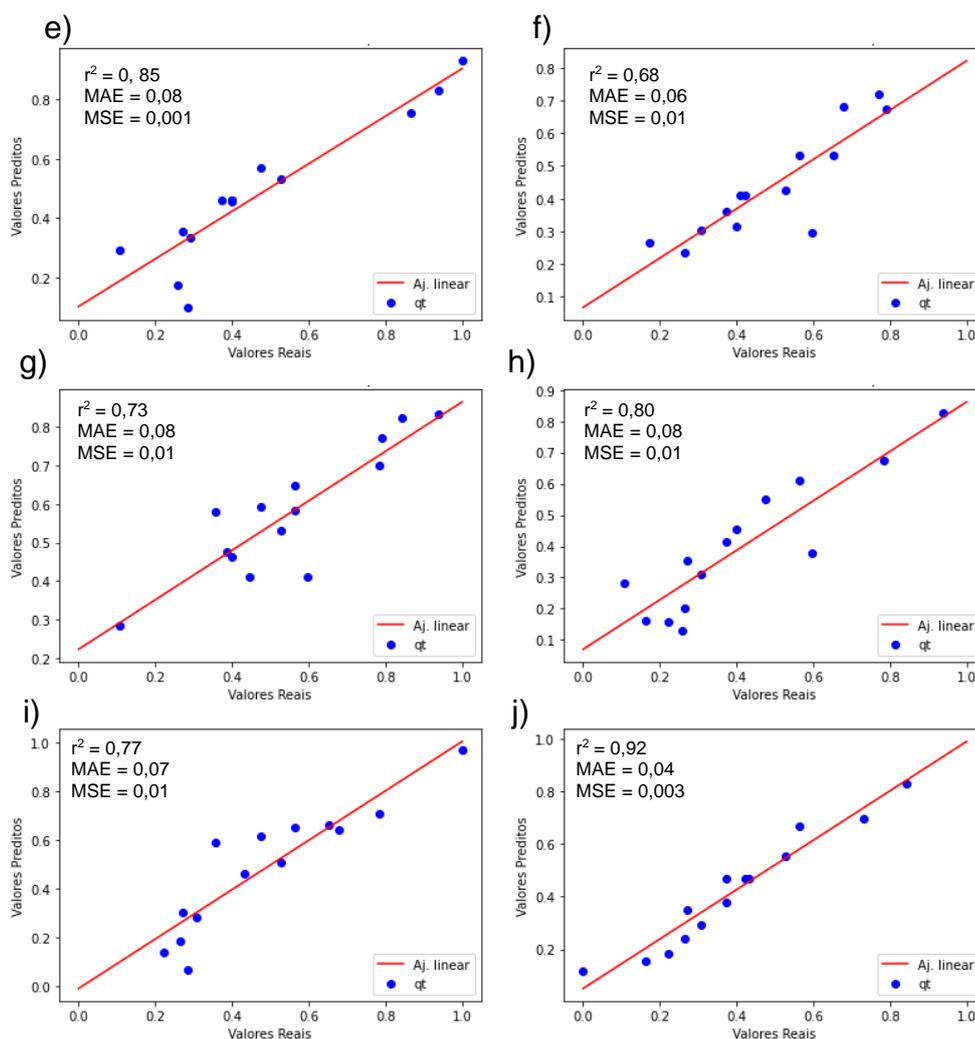




O bloco de Figuras 37, possibilita observar de forma visualmente como os valores preditos pela RNA se ajustam aos valores reais. Como já observado nas análises anteriores, em alguns momentos a RNA não oferece um bom ajuste para a saída *remoção*, a exemplo das figuras *d* e *e*, mas que na maioria das vezes o modelo consegue um melhor ajuste, como exposto nas demais imagens.

Figura 38 – Valores reais x preditos (a – j) – qt





Na observação dos valores reais versus preditos para a saída *qt*, bloco de Figuras 38, pôde confirmar mais uma vez, que a RNA oferece um melhor desempenho gerando um ótimo ajuste entre esses valores.

Cabe ressaltar que a RNA se mostrou eficiente principalmente na etapa de treinamento, ou seja, a rede estava sendo bem treinada, porém ela não conseguiu generalizar essa eficiência. Isso ocorre porque o banco de dados utilizado possui uma estrutura não linear, provocando assim dificuldade de generalização entre treinamento e teste.

Os blocos de figuras 37 e 38, corroboram na verificação da eficiência da RNA desenvolvida, para ambas as saídas. Onde, ficou notório que esta consegue simular o experimento real e prever suas respectivas saídas, embora ofereça melhor ajuste para uma (*qt*) do que para outra (*remoção*).

6 CONCLUSÃO

O referido trabalho tinha como principal objetivo estudar a aplicação de redes neurais artificiais para simular o processo de adsorção com fibra de sisal de corantes têxteis, observando o quanto o modelo se ajustava aos valores reais experimentais.

A RNA demonstrou que é capaz de se ajustar de forma satisfatória as variáveis de saída do experimento desejado. Isso ficou claro quando o coeficiente de determinação (r^2) para qt alcançou um valor superior a 0,85 (observando PE1 e PE2) e conseqüentemente gerou um erro, entre os valores reais e preditos pelo modelo de até 0,06 (MAE) e 0,007 (MSE). Enfatizando ainda mais a eficiência do modelo ao simular esta saída.

Para a segunda saída desejada, *remoção*, a RNA não se mostrou tão eficiente, embora tenha conseguido gerar um ajuste de até 0,57, com um erro absoluto chegando a 11% e o erro quadrático médio de 2%, enfatizando a sua dificuldade em se ajustar de forma satisfatória a esta saída.

Portanto, a partir do estudo em questão torna-se viável a aplicação da RNA para simular e otimizar processos experimentais. Mesmo com os diversos treinamentos realizados, pode-se sugerir para trabalhos futuros a realização de novas simulações aplicando outras funções de ativação, bem como a utilização de outras bibliotecas que proporcionem o melhor ajuste. Corroborando assim para o acervo de estudos envolvendo a aplicação de RNA's em processos experimentais.

REFERÊNCIAS

- ADEGOKE, Kayode Adesina *et al.* **Clean technology for sequestering Rhodamine B dye on modified mango pod using artificial intelligence techniques.** Current Research in Green and Sustainable Chemistry journal. Current Research in Green and Sustainable Chemistry 5 (2022) 100275
<https://doi.org/10.1016/j.crgsc.2022.100275>
- BARCELLOS, I.O.; GIOVANELLA, R.F.; CHIARELLO, L.M.; BLOSFELD, A.M. **Remoção de cor de soluções de corantes reativos com cinza de casca de arroz.** Dynamis revista técnico científica, n.2, vol. 15, p. 1-6, 2009.
- BARKA, N.; ASSABBANE, A.; NOUNAH, A.; ICHOU, Y.A. **Photocatalytic degradation of indigo carmine in aqueous solution by TiO₂-coated non-woven fibres.** J. Hazard. Mater., v. 152, p. 1054-1059, 2008.
- BAXTER, C. W.; STANLEY, S. J.; ZHANG, Q.; SMITH, D. W. **Developing artificial neural network models of water treatment process: a guide for utilities.** *Journal of Environmental Engineering and Science*, v.3, nº 01, 201-211, 2002.
- BERTOLINI, Cristiano *et al.* **Linguagem de programação I** – 1. ed. – Santa Maria, RS: UFSM, NTE, 2019.
- BRAGA, A.P; CARVALHO, FERREIRA A. P. L.; LUDERMIR, T.B., **Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações.** Rio de Janeiro: LTC, 2000.
- Capítulo 8 - Funções de Ativação. **Deep Learning Book.** Disponível em: <
<https://www.deeplearningbook.com.br/funcao-de-ativacao/#:~:text=A%20fun%C3%A7%C3%A3o%20de%20ativa%C3%A7%C3%A3o%20%C3%A9%20a%20transforma%C3%A7%C3%A3o%20n%C3%A3o%20linear%20que,simplesmente%20fazem%20uma%20transforma%C3%A7%C3%A3o%20linear>> Acesso em: Acesso em: 16 de jul. de 2022.
- CARDOSO, N. F., **Adsorção de corantes têxteis utilizando biossorventes alternativos,** Tese (Doutor em Engenharia Química). Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química da Universidade Federal do Rio Grande do Sul - RS, 2012.
- CHOJI, Thamyres Tetsue *et al.* Cinética da biossorção da mistura Ni⁺²– Cr⁺³ via redes neurais artificiais. Revista de Engenharia e Tecnologia. V. 13, Nº. 1. P.200 - 210, 2021
- DUTTA, S.; SIMON, S. A.; BHATTAACHARJEE, C. **Development of an artificial neural network model for adsorption and photocatalysis of reactive dye on TiO₂ surface,** *Expert Systems with Applications*, 37, p. 8634–8638, 2010.
- ELSHEIKH Ammar H. *et al.* **Modeling of solar energy systems using artificial neural network: A comprehensive review.** Solar Energy 180 (2019) 622–639.
<https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.01.037>. Received 20 October 2018; Received in revised form 3 January 2019; Accepted 11 January 2019. Available online 25 January 2019.

FARIAS, F.C **Avaliação da fibra do sisal como adsorvente de corante têxtil, presente em águas residuárias do processo de tingimento**. Dissertação (Mestrado em Ciências e Tecnologias Ambientais) – Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande - PB, 2020.

FREITAS Filho, P. J., **Introdução à Modelagem e Simulação de Sistemas com aplicações em Arena**. 2ª ed. Visual Books. Florianópolis, 2008. Pag. 44-45.

HAYKIN, SIMON. **Redes Neurais: princípios e práticas**. Trad. Paulo Martins Engel. 2ª ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

JORGE, I. R.; TAVARES, F. P.; SANTOS, K. G. dos. Remoção do corante azul de metileno no tratamento de efluentes por adsorção em bagaço de cana de açúcar. In: Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados – ENEMP. São Paulo, p. 491-500., 2015.

LACERDA, K. D. R. **Secagem do Mesocarpo do Coco Verde e Estudo da sua Utilização como Adsorvente de Corante de Indústria Têxtil**. Dissertação (Mestrado em Ciências e Tecnologias Ambientais) – Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande - PB, 2017.

Markandeya; Devendra Mohan; Sheo Prasad Shukla. **Hazardous consequences of textile mill effluents on soil and their remediation approaches**. Cleaner Engineering and Technology 7 (2022) 100434. Elsevier 2022.

Preprocessing Data MinMaxScaler. **Scikit – Learn**. Disponível em: < <https://scikit-learn.org/stable/modules/preprocessing.html#preprocessing-scaler>> Acesso em: 16 de jul. de 2022.

NILSSON, N. **The quest for artificial intelligence: a history of ideas and achievements**. Cambridge: Cambridge University Press, 2009.

RIBEIRO, Milena Hellen Damasceno; NETO, André Pedro Fernandes. **O impacto da automação na indústria têxtil no município de Jaguaruana – CE**. Universidade Federal Rural do Semiárido – Ufersa, Curso de Bacharelado em Ciência e Tecnologia. Trabalho de Conclusão de Curso - Rio Grande do Norte, 2020.

Russell, Stuart J. (Stuart Jonathan), 1962 - **Inteligência artificial / Stuart Russell, Peter Norvig**; tradução Regina Célia Simille. – Rio de Janeiro: Elsevier, 2013. Disponível em: < <https://www.cin.ufpe.br/~gtsa/Periodo/PDF/4P/SI.pdf>>.

SILVA, E. A. **Estudo da remoção dos íons cromo (III) e cobre (II) em coluna de leito fixo pela alga marinha *Sargassum sp.***, Campinas: Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, 2001, 165 p. Tese (Doutorado).

SPÖRL, C.; CASTRO, E. G.; LUCHIARI, A. **Aplicação de Redes Neurais Artificiais na construção de modelos de fragilidade ambiental**. Revista do Departamento de Geografia, v. 21, n.1, p. 113-135, 2011.

Tiwari, M., Shukla, S.P., Mohan, D., Bhargava, D.S., Kisku, G.C. **Modified cenospheres as an adsorbent for the removal of disperse dyes.** Hindawi Publishing Corporation Advances in Environmental Chemistry Volume 2015, Article ID 349254, 8 pages <http://dx.doi.org/10.1155/2015/349254>. 2015.

TOPARE, Niraj S.; BOKIL, Shantini A. **Adsorption of textile industry effluent in a fixed bed column using activated carbon prepared from agro-waste materials.** Materials Today: Proceedings 43 (2021) 530–534
<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.12.029>

APÊNDICE A – SCRIPTY EM PYTHON

```

# -*- coding: utf-8 -*-
"""
Created on Tue Jul  5 08:43:21 2022

@author: Marizabel
"""

import pandas as pd
import numpy as np
from sklearn.preprocessing import MinMaxScaler
from sklearn.model_selection import train_test_split
from sklearn.metrics import r2_score
from sklearn.metrics import mean_absolute_error
from sklearn.metrics import mean_squared_error
from sklearn.neural_network import MLPRegressor
import matplotlib.pyplot as plt

#Importando os dados
df1 = pd.read_excel("DADOS SISAL (IN-NATURA).xlsx")

#Retirando a coluna 'Nº experimento' porque não vai influenciar nos dados
df1 = df1.drop(['Nº experimento'], axis=1)

#Verificando a estrutura dos dados importados
print("Estrutura do banco de dados IN NATURA: ", df1.shape)

#Análise estatística básica (média, desvio padrão, max., min.)
print("Análise estatística básica (média, desvio padrão, max., min.), banco de dados IN NATURA: ", '\n', df1.describe())

#Verificando se existem valores nulos
df1.isnull().values.any()

#Atribuindo as variáveis
Y = df1.drop(['Massa (g)', 'Concentração (mg/L)', 'pH', 'Tempo (min)', 'Agitação %'], axis=1)
X = df1.drop(['Remoção%', 'qt'], axis=1)

#Normalizando os dados com MinMaxScaler
scaler = MinMaxScaler(feature_range = (0 , 1))
X = scaler.fit_transform(X)
Y = scaler.fit_transform(Y)

#Laço de repetição - criação de variáveis para armazenar os valores das métricas desejadas
r2_trainrem = list()
r2_testrem = list()
mae_testrem = list()
mse_testrem = list()

r2_trainqt = list()
r2_testqt = list()
mae_testqt = list()
mse_testqt = list()

for i in range(10):
    X_train, X_test, Y_train, Y_test = train_test_split(X, Y, test_size = 0.3)
    modelo = MLPRegressor (hidden_layer_sizes = (20, 20), activation = 'relu', max_iter = 8000,
                           solver = 'lbfgs', learning_rate = 'adaptive')

    Y_train = pd.DataFrame(Y_train)
    Y_train.rename(columns = {0:'Remoção%', 1:'qt'}, inplace = True)

    y1 = Y_train['Remoção%'].values
    modelo.fit(X_train, y1)
    Y1_modelo_prev = modelo.predict(X_test)

#Transformando em dataframe para facilitar a análise
v1_model = Y1_modelo_prev
v1_model = pd.DataFrame(v1_model)
v1_model.rename(columns = {0:'Remoção%'}, inplace = True)

```

```

Y_test = pd.DataFrame(Y_test)
Y_test.rename(columns = {0:'Remoção%', 1:'qt'}, inplace = True)

#Análise do treino Remoção
r2_tr_rem = modelo.score(X_train, y1)
r2_trainrem.append(r2_tr_rem)

#Análise da saída Remoção
r2_te_rem = r2_score(Y_test['Remoção%'].values, v1_model['Remoção%'].values, sample_weight = None,
                    multioutput = 'variance_weighted' )
r2_testrem.append(r2_te_rem)
mae_te_rem = mean_absolute_error(Y_test['Remoção%'].values, v1_model['Remoção%'].values, sample_weight = None ,
                                multioutput = 'uniform_average')
mae_testrem.append(mae_te_rem)
mse_te_rem = mean_squared_error(Y_test['Remoção%'].values, v1_model['Remoção%'].values, sample_weight = None ,
                                multioutput = 'uniform_average' , squared = True)
mse_testrem.append(mse_te_rem)

#Análise do treino qt
y2 = Y_train['qt'].values
modelo.fit(X_train, y2)
Y2_modelo_prev = modelo.predict(X_test)

#Transformando em dataframe para facilitar a análise
v2_model = Y2_modelo_prev
v2_model = pd.DataFrame(v2_model)
v2_model.rename(columns = {0:'qt'}, inplace = True)

#Análise do treino qt
r2_tr_qt = modelo.score(X_train, y2)
r2_trainqt.append(r2_tr_qt)

#Análise da saída qt
r2_te_qt = r2_score(Y_test['qt'].values, v2_model['qt'].values, sample_weight = None,
                    multioutput = 'variance_weighted' )

r2_testqt.append(r2_te_qt)
mae_te_qt = mean_absolute_error(Y_test['qt'].values, v2_model['qt'].values, sample_weight = None ,
                                multioutput = 'uniform_average')
mae_testqt.append(mae_te_qt)
mse_te_qt = mean_squared_error(Y_test['qt'].values, v2_model['qt'].values, sample_weight = None ,
                                multioutput = 'uniform_average' , squared = True)
mse_testqt.append(mse_te_qt)

#Gerando os Gráficos
plt.scatter(Y_test['Remoção%'].values, v1_model['Remoção%'], color = "green", label = 'Remoção')
plt.title("Valores Reais x Preditos - remoção")
plt.xlabel("Valores Reais")
plt.ylabel("Valores Preditos")

linear_model2 = np.polyfit(Y_test['Remoção%'].values,v1_model['Remoção%'].values, 1)
linear_model_fn2 = np.poly1d(linear_model2)
x_s = np.arange(0,2)
plt.plot(x_s,linear_model_fn2(x_s), color = "orange", label = 'Aj. linear')
plt.legend(loc = "lower right")
plt.show()

plt.scatter(Y_test['qt'].values, v2_model['qt'], color = "blue", label = 'qt')
plt.title("Valores Reais x Preditos - qt")
plt.xlabel("Valores Reais")
plt.ylabel("Valores Preditos")

linear_model1 = np.polyfit(Y_test['qt'].values,v2_model['qt'].values, 1)
linear_model_fn1 = np.poly1d(linear_model1)
x_s = np.arange(0,2)
plt.plot(x_s,linear_model_fn1(x_s), color = "red", label = 'Aj. linear')
plt.legend(loc = "lower right")
plt.show()

#Retornando os valores das métricas desejadas
print('Valores para a saída Remoção%: ')
print(f'\033[32mValores de R2 Geral (Treino): {r2_trainrem}\033[m', '\n')

print(f'\033[32mValores de R2 (Teste): {r2_testrem}\033[m')
print(f'\033[32mValores do Erro Medio Absoluto (MAE - Teste): {mae_testrem}\033[m')
print(f'\033[32mValores do erro quadrático médio (MSE - Teste): {mse_testrem}\033[m', '\n')

print('Valores para a saída qt: ')
print(f'\033[32mValores de R2 Geral (Treino): {r2_trainqt}\033[m', '\n')

print(f'\033[32mValores de R2 (Teste): {r2_testqt}\033[m')
print(f'\033[32mValores do Erro Medio Absoluto (MAE - Teste): {mae_testqt}\033[m')
print(f'\033[32mValores do erro quadrático médio (MSE - Teste): {mse_testqt}\033[m')

```

