

PREDIÇÃO DA ELEVAÇÃO ADIABÁTICA DA TEMPERATURA DO
CONCRETO ATRAVÉS DE MODELOS BASEADOS EM DADOS

Daniel Dias Fonseca

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

Prof. Eduardo de Moraes Rego Fairbairn, Dr.Ing.

Prof. Marcos Martinez Silvano, D.Sc.

Prof. Romildo Dias Toledo Filho, D.Sc.

Prof. Alexandre Gonçalves Evsukoff, Dr.

Prof. Hélio José Corrêa Barbosa, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2008

FONSECA, DANIEL DIAS

Predição da elevação adiabática da
temperatura do concreto através de modelos
baseados em dados [Rio de Janeiro] 2008

XV, 115 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc.,
Engenharia Civil, 2008)

Tese – Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

1. Concreto
2. Exotermia do concreto
3. Modelos preditivos

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedico este trabalho de números
às belezas imensuráveis e indefiníveis da vida
e principalmente às pessoas que nos aproximam desse belo.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, porque faz bem agradecer a Deus e porque tudo poderia ter sido diferente.

Aos meus pais, que foram exemplos fundamentais para mim e sempre me apoiaram em tudo.

Ao meu irmão, que me serviu como exemplo de superação e que sempre me acompanhou, apoiando e arredondando os cantos da minha personalidade quadrada.

Aos meus numerosos e preciosos familiares, que sempre me ajudaram, aconselharam, divertiram, torceram por mim, ouviram e sempre acreditaram em mim.

Aos meus orientadores, que souberam me guiar exemplarmente, sempre elevando o meu moral e nunca me causando desânimo.

Aos amigos de trabalho, amigos de estudo, amigos de lazer, amigos de bons e maus momentos, amigos professores, enfim, a todos aqueles que me aconselharam e ajudaram, mesmo que brevemente.

Às honrosas instituições

Exército Brasileiro, especialmente Instituto Militar de Engenharia e Comissão Regional de Obras da 1ª Região Militar;

Instituto Alberto Luiz Coimbra de Pós-graduação e Pesquisa de Engenharia – COPPE/UFRJ;

Furnas Centrais Elétricas S.A.;

Petrobras – Petróleo Brasileiro S.A..

Um agradecimento especial a todos que sentiram minha falta durante esse percurso que tanto demandou de meu corpo e mente.

Finalmente, agradeço à Professora Janete*, cuja imagem se forma tênue em minhas lembranças da primeira infância, numa justa homenagem a todos os nobres profissionais que, a cada dia, guiam os primeiros passos de nosso país. Um dia o país há de valorizá-los à altura da responsabilidade que possuem.

* Janete Boyd Sulaiman, professora da Classe de Alfabetização (C.A.) do Colégio Marista São José, em 1987, no Rio de Janeiro – RJ.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

PREDIÇÃO DA ELEVAÇÃO ADIABÁTICA DA TEMPERATURA DO CONCRETO ATRAVÉS DE MODELOS BASEADOS EM DADOS

Daniel Dias Fonseca

Março/2008

Orientadores: Eduardo de Moraes Rego Fairbairn
Marcos Martinez Silvano

Programa: Engenharia Civil

Este trabalho apresenta um modelo baseado em análise de dados para a previsão da elevação adiabática de temperatura de concretos massivos. O banco de dados é oriundo de 226 ensaios experimentais realizados no Laboratório de Concreto de FURNAS Centrais Elétricas S.A. Os ensaios dizem respeito às mais importantes obras de concreto massa no Brasil, tais como a represa de Itaipu (a maior usina hidrelétrica em operação no mundo), a represa de Tucuruí, e vários outros concretos massivos usados para a construção de usinas hidrelétricas e nucleares. A entrada do modelo é um variado conjunto de dados correspondente às propriedades físicas e químicas do aglutinante e às proporções da mistura do concreto. A saída é um conjunto de sete parâmetros que determinam a função que é capaz de descrever a elevação adiabática de temperatura durante a hidratação do concreto. A comparação entre os dados experimentais e os resultados do modelo mostra a precisão da abordagem proposta e que mineração de dados é uma ferramenta potencial para prever tensões térmicas no projeto de estruturas de concreto massa.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

PREDICTING CONCRETE ADIABATIC TEMPERATURE RISE THROUGH
MODELS BASED ON DATA

Daniel Dias Fonseca

March/2008

Advisors: Eduardo de Moraes Rego Fairbairn
Marcos Martinez Silvano

Department: Civil Engineering

This work presents a model based on data analysis for the prediction of the adiabatic temperature rise of massive concrete. The data bank was assembled from 226 experimental tests carried out at the Concrete Laboratory of FURNAS Centrais Elétricas S.A. The tests concerns the most important mass concrete constructions in Brazil, such as Itaipu dam (the hugest hydropower plant in operation in the world) Tucuruí dam, and several other mass concrete used for the construction of hydroelectric and nuclear power plants. The input of the model is a variable data set corresponding to the binder physical and chemical properties and concrete mixture proportions. The output is a set of seven parameters that determine a function which is capable to describe the adiabatic temperature rise during concrete hydration. The comparison between experimental data and modeling results shows the accuracy of the proposed approach and that data mining is a potential tool to predict thermal stresses in the design of massive concrete structures.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1 - Introdução.....	16
1.1 - DEFINIÇÃO E DELIMITAÇÃO DO ASSUNTO.....	16
1.2 – CONTEXTUALIZAÇÃO	16
CAPÍTULO 2 - Fundamentos	19
2.1 - CONSTITUINTES DO CONCRETO	19
2.2 - HIDRATAÇÃO DO CIMENTO PORTLAND E SUA EXOTERMIA	20
2.2.1 - Mecanismo de hidratação.....	20
2.2.2 - Reações químicas e suas exotermias.....	21
2.2.3 - Hidratação dos aluminatos	22
2.2.4 - Hidratação dos silicatos.....	22
2.3 – HIDRATAÇÃO DAS ADIÇÕES E SUAS EXOTERMIAS	23
2.4 – CÁLCULO DAS FASES MINERAIS DO CIMENTO	23
2.5 - ELEVAÇÃO ADIABÁTICA DA TEMPERATURA DO CONCRETO.....	25
2.5.1 - Fatores influentes	25
2.5.2 - A curva de elevação adiabática de temperatura	26
2.5.3 – Ensaio para determinação da curva de elevação adiabática de temperatura	27
2.6 - SOBRE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs).....	27
2.6.1 - O que são redes neurais artificiais.....	27
2.6.2 – Estrutura da RNA	28
2.6.3 – Cálculo dos parâmetros da RNA	30
2.6.4 - Avaliação da RNA já com seus parâmetros definidos	31
2.7 - DISTÂNCIA MAHALANOBIS.....	33
CAPÍTULO 3 - Elaboração do Modelo.....	36
3.1 - PREPARAÇÃO DO BANCO DE DADOS	36
3.1.1 - Exclusão de ensaios.....	36
3.1.2 - Alterações de valores no banco de dados.....	37
3.1.3 - Identificação da elevação de temperatura incomum num trecho da curva .	38
3.1.4 - Preenchimento de campos vazios.....	42
3.1.5 – Preenchimento de campos vazios relativos a teores de óxidos	43
3.2 - PREPARAÇÃO DOS ALVOS DO MODELO	47
3.2.1 – Variáveis componentes do vetor alvo – parte 1.....	47
3.2.2 – O problema do ajuste <i>hill duplo</i>	54
3.2.3 – Variáveis componentes do vetor alvo – parte 2.....	55
3.2.4 - Comparação gráfica entre as duas opções de vetor alvo.....	57
3.3 – PREPARAÇÃO DOS VETORES DE APRENDIZAGEM DO MODELO	61
3.3.1 – Vetor de aprendizagem baseado em FARIA [15]	63
3.3.2 – Vetor de aprendizagem considerando as massas dos óxidos.....	66
3.3.3 – Vetor de aprendizagem considerando os percentuais dos óxidos.....	68
3.3.4 - Sobre os gráficos de projeção e histogramas	72
3.4 - ESTRUTURA DO MODELO	72
3.4.1 - Configuração do modelo	73
3.4.2 - Número de neurônios escondidos – é preciso escolher.....	75
3.4.3 - Módulos de normalização e desnormalização.....	75
3.5 – CÁLCULO DOS PARÂMETROS DAS REDES NEURAIS	76

3.5.1 - Preparação dos subconjuntos de treinamento, validação e teste	76
3.5.2 – Seqüência de treinamentos e avaliação de cada treinamento	81
CAPÍTULO 4 - Análise dos Resultados.....	84
4.1 – RESULTADOS PARA OS MÓDULOS DE REDE NEURAL.....	84
4.1.1 - $RMSE_N$ versus $RMSE_N^*$	85
4.1.2 – Sobre os desempenhos dos formatos FAR, MOX e POX.....	87
4.1.3 – Sobre os desempenhos das RNAs	88
4.2 - CURVAS DE ELEVAÇÃO ADIABÁTICA – RESULTADOS	98
CAPÍTULO 5 - Conclusões.....	110
Referências Bibliográficas.....	112
Apêndice A - CÓDIGOS DOS ENSAIOS	114

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Influência da temperatura inicial T_0 do concreto na curva de elevação adiabática de temperatura. Fonte: [23].	26
Figura 2.2 – Evolução típica no tempo (escala logarítmica) para a taxa de liberação de calor na hidratação do cimento Portland. Fonte: [29].	27
Figura 2.3 – RNA <i>feedforward</i> multicamadas. Fonte: [17].	29
Figura 2.4 – Gráfico de evolução do treinamento de uma RNA.	32
Figura 2.5 – Gráfico mostrando o desempenho da RNA para uma certa componente do vetor de saída. O gráfico compara os alvos do conjunto de aprendizado (variável T) com as saídas da RNA para todo o conjunto de aprendizado.	33
Figura 2.6 – Exemplo de um conjunto de 500 vetores com duas componentes. Os vetores marcados com um quadrado são todos eles com distância Mahalanobis quase igual (D_M de 3,5 a 3,7). D_M varia aproximadamente de 0 a 14 entre os 500 vetores do conjunto.	34
Figura 2.7 – Distâncias Mahalanobis, em ordem crescente, dos 500 vetores da Figura 2.6.	35
Figura 3.1 - Quantidade de pontos registrados da curva de elevação adiabática de temperatura em cada ensaio do banco de dados.	37
Figura 3.2 - Exemplo de uma elevação de temperatura tardia incomum. Curva experimental de elevação adiabática relativa ao ensaio 002 do banco de dados.	39
Figura 3.3 - Estudo da variação, entre os ensaios, da segunda derivada da curva de elevação adiabática. Contabilizaram-se apenas os pontos com segunda derivada positiva.	40
Figura 3.4 – Curva de elevação adiabática registrada no ensaio 212.	41
Figura 3.5 – Curva de elevação adiabática registrada no ensaio 133. O estudo sobre a segunda derivada das curvas apontou a correção do ponto de abscissa 20.	41
Figura 3.6 - Diagrama de poligonais com 90 adições. Cada linha poligonal representa a adição ao cimento em um ensaio. Na figura não constam as composições químicas preenchidas depois nas as seis adições que estavam vazias.	44
Figura 3.7 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 14 adições do tipo “cimentantes” [24]. Todas as curvas são escória de alto forno.	45
Figura 3.8 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 28 adições de “pozolana altamente reativa” [24]. Todas as curvas são microsilica, com exceção daquela com pico no Al_2O_3 , que é metacaulim.	45
Figura 3.9 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 48 adições de “pozolana comum” [24]. Todas as curvas com teor normalizado de Fe_2O_3 acima de 0,7 são cinzas volantes.	46
Figura 3.10 – Influência do parâmetro k_1 no formato da curva de ajuste tipo <i>hill</i> . Os valores de k_1 nas curvas são respectivamente: 0,28; 1,50 e 3,39. Tais valores vêm das curvas experimentais do banco de dados. Eles são: o mínimo, a média e a média somada ao desvio padrão. Os valores de T_1 e n_1 são 31,4 e 1,73 nas três curvas.	49

Figura 3.11 – Influência do parâmetro n_1 no formato da curva de ajuste tipo <i>hill</i> . Os valores de n_1 nas curvas A, B e C são respectivamente: 1,03; 1,73 e 2,43. Tais valores vêm das curvas experimentais do banco de dados. Eles são: a média subtraída do desvio padrão, a média e a média somada ao desvio padrão. Os valores de T_1 e k_1 são 31,4 e 1,50 nas três curvas.	50
Figura 3.12 – Melhor ajuste da função <i>hill</i> . RMSTE = 0,004 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 121.....	52
Figura 3.13 – Pior ajuste da função <i>hill</i> . RMSTE = 1,80 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 143.....	52
Figura 3.14 – Melhor ajuste da função <i>hill duplo</i> . RMSTE = 0,001 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 141.....	53
Figura 3.15 – Pior ajuste da função <i>hill duplo</i> . RMSTE = 0,61 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 082.....	53
Figura 3.16 – Ajuste possível da função <i>hill duplo</i> no ensaio 014. RMSTE = 0,27 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente.....	55
Figura 3.17 – Ajuste possível da função <i>hill duplo</i> no ensaio 014. RMSTE = 0,39 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente.....	55
Figura 3.18 – Gráficos de correlação e histogramas dos parâmetros do ajuste <i>hill duplo</i> , englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.	58
Figura 3.19 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.6, com a distância Mahalanobis dada pela cor da linha. O diagrama engloba todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa o ajuste <i>hill duplo</i> de um ensaio.....	59
Figura 3.20 – Gráficos de correlação e histogramas dos parâmetros da equação (3.5), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.	59
Figura 3.21 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.6, com a distância Mahalanobis dada pela cor da linha. O diagrama engloba todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa o vetor alvo de um ensaio segundo a equação (3.5).	60
Figura 3.22 – Distâncias Mahalanobis dos vetores alvos segundo a equação (3.1) (ajuste <i>hill duplo</i>), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.....	60
Figura 3.23 – Distâncias Mahalanobis dos vetores alvos segundo a equação (3.5), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.	61
Figura 3.24 - Gráficos de projeção e histogramas das componentes do vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.1, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. A ordem das figuras é igual à ordem da listagem das variáveis no texto (incluindo lista no item 3.3).....	64
Figura 3.25 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.1. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.....	65
Figura 3.26 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.1.	65

Figura 3.27 - Gráficos de projeção e histogramas das componentes do vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.2, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. A ordem das figuras é igual à ordem da listagem das variáveis no texto (incluindo lista no item 3.3).....	67
Figura 3.28 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.2. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.....	68
Figura 3.29 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.2.	68
Figura 3.30 - Gráficos de projeção e histogramas das componentes do vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.3, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. A ordem das figuras é igual à ordem da listagem das variáveis no texto (incluindo lista no item 3.3).....	70
Figura 3.31 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.3. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.....	71
Figura 3.32 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.3.	71
Figura 3.33 – Estrutura do modelo. Cada RNA fornece uma variável de saída, as quais são os sete parâmetros da equação (3.5).....	73
Figura 3.34 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois <i>outliers</i> . Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.1.....	80
Figura 3.35 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois <i>outliers</i> . Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.2.....	80
Figura 3.36 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois <i>outliers</i> . Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.3.....	81
Figura 4.1 – Erros da nova rede neural adotada para o módulo RNA5, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.....	86
Figura 4.2 – Erros da rede neural originalmente adotada para o módulo RNA5, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.	86
Figura 4.3 – Erros da nova rede neural adotada para o módulo RNA6, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.....	87
Figura 4.4 – Erros da rede neural originalmente adotada para o módulo RNA6, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.	87

Figura 4.5 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê t_{TOPO}	90
Figura 4.6 – Desempenho da RNA que prevê t_{TOPO} (dias).	90
Figura 4.7 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T1.....	91
Figura 4.8 – Desempenho da RNA que prevê T1.....	91
Figura 4.9 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T2.....	92
Figura 4.10 – Desempenho da RNA que prevê T2.....	92
Figura 4.11 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T3.....	93
Figura 4.12 – Desempenho da RNA que prevê T3.....	93
Figura 4.13 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T4.....	94
Figura 4.14 – Desempenho da RNA que prevê T4.....	94
Figura 4.15 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T5.....	95
Figura 4.16 – Desempenho da RNA que prevê T5.....	95
Figura 4.17 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T6 (variável que equivale a 97,32% da elevação final de temperatura, ou seja, praticamente a amplitude liberação de calor).	96
Figura 4.18 – Desempenho da RNA que prevê T6 (variável que equivale a 97,32% da elevação final de temperatura, ou seja, praticamente a amplitude liberação de calor).....	96
Figura 4.19 – Erro da curva de elevação adiabática calculada pelo modelo.	99
Figura 4.20 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 247. Ensaio com adição de metacaulim, anômalo no banco de dados.	100
Figura 4.21 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 244. Ensaio com 444 kg de cimento por metro cúbico de concreto.	101
Figura 4.22 – Relação entre o erro na predição de t_{TOPO} e o erro global da curva. Não constam na figura os ensaios <i>outliers</i> (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.	101
Figura 4.23 – Distribuição de frequência de erro do modelo. A figura não considera os ensaios <i>outliers</i> (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.	102
Figura 4.24 – Relação entre o tempo final de hidratação (t_{TOPO}) e o erro de predição do modelo. Não constam na figura os ensaios <i>outliers</i> (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.	103
Figura 4.25 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 018. Erro na predição de t_{TOPO} igual a 1,55 dia para menos. t_{TOPO} experimental igual a 13,45 dias. $\text{RMSTE}_6 = 2,1^\circ\text{C}$	104
Figura 4.26 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 254. Erro na predição de t_{TOPO} igual a 1,56 dia para menos. t_{TOPO} experimental igual a 3,23 dias. $\text{RMSTE}_6 = 12,1^\circ\text{C}$	104
Figura 4.27 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 92. $\text{RMSTE}_6 = 3,97^\circ\text{C}$	105
Figura 4.28 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 69. $\text{RMSTE}_6 = 3,98^\circ\text{C}$	106
Figura 4.29 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 262. $\text{RMSTE}_6 = 4,02^\circ\text{C}$	106

Figura 4.30 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 116. $RMSTE_6 = 4,03^{\circ}C$	107
Figura 4.31 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 165 (ponto anômalo da Figura 4.18). $RMSTE_6 = 8,54^{\circ}C$	108
Figura 4.32 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 227. $RMSTE_6 = 0,64^{\circ}C$	109
Figura 4.33 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 227. $RMSTE_6 = 0,64^{\circ}C$	109

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Quadro comparativo da velocidade de reação com a água dos principais compostos do cimento Portland [24].	23
Tabela 3.1 – Comparação entre os ajustes <i>hill</i> e <i>hill duplo</i> .	51
Tabela 3.2 – Dois exemplos de ajuste <i>hill duplo</i> para a curva do ensaio 014. O parâmetro RMSTE é conforme a equação (3.4).	54
Tabela 3.3 – Ensaio que foram considerados <i>outliers</i> para cada tipo de vetor de aprendizagem.	77
Tabela 3.4 – Erro de representatividade relativo à escolha final dos subconjuntos feita para cada tipo de vetor de aprendizagem.	79
Tabela 3.5 – Sequência de treinamentos realizada para cada um dos módulos RNA1 a RNA7 da Figura 3.33.	82
Tabela 4.1 – As três melhores redes neurais obtidas para cada módulo RNA1 até RNA7. São as três melhores RNAs de um total de 780, conforme Tabela 3.5.	84
Tabela 4.2 – Comparação, nos módulos pertinentes, entre a melhor configuração pelo parâmetro $RMSE_N$ e a melhor configuração pelo parâmetro $RMSE_N^*$.	85
Tabela 4.3 – Composição química do cimento do ensaio 165. Percentuais em massa.	89

SÍMBOLOS, NOMENCLATURA E DEFINIÇÕES

C, S, A, F	Conforme notação tradicional da Química do Cimento, esses quatro símbolos representam respectivamente os óxidos CaO, SiO ₂ , Al ₂ O ₃ e Fe ₂ O ₃ .
Distância Mahalanobis	Ver item 2.7.
FAR, MOX, POX	Simbologias definidas nos itens 3.3.1, 3.3.2 e 3.3.3.
Generalização	Capacidade de um modelo matemático de gerar saídas próximas da realidade do fenômeno estudado, para todos os possíveis vetores de entrada num subconjunto contínuo do domínio ao invés de somente em um subconjunto discreto de pontos.
<i>Outlier</i>	Vetor considerado como fora do conjunto de vetores ao qual pertenceria a princípio, pelo fato de ser um vetor muito distante do centro do conjunto.
Pré-adição	Designação dada a um material quando este compõe o cimento junto com os tradicionais clínquer e gesso. Ex.: “Este tipo de cimento tem pré-adição de escória e alto forno”.
RNA	Rede neural artificial

CAPÍTULO 1

- Introdução

1.1 - DEFINIÇÃO E DELIMITAÇÃO DO ASSUNTO

Este trabalho trata da elaboração de um modelo matemático para previsão da curva de elevação de temperatura do concreto durante seu endurecimento em condições adiabáticas (sem troca de calor com o meio externo). Sem o uso de modelos matemáticos, tal curva de elevação adiabática é tradicionalmente obtida em ensaio de laboratório, onde a temperatura é medida várias vezes, determinando-se um conjunto de pontos da curva, até a estabilização da elevação de temperatura. Trata-se de um ensaio de difícil realização, com duração de 28 dias.

Os dados de entrada do modelo referem-se: aos materiais constituintes do concreto, à finura do material cimentante utilizado e à temperatura inicial do concreto (no ato da adição da água). Os dados de saída são parâmetros que definem numericamente a curva de elevação adiabática do concreto, através de uma função que se ajuste à curva.

O modelo utiliza redes neurais artificiais (RNA) para processar os dados de entrada e calcular os parâmetros da função de ajuste. Os parâmetros que definem as redes neurais são calculados em função de um banco de dados com os resultados de 263 ensaios de elevação adiabática de temperatura [6] realizados no Laboratório de FURNAS Centrais Elétricas S.A..

Neste trabalho, os ensaios do banco de dados foram numerados seqüencialmente de 1 a 263. Essa numeração é utilizada no texto para mencionar ensaios em particular. Tal numeração difere do código originalmente registrado para cada ensaio. Por isso há neste trabalho um apêndice com uma tabela associando a numeração seqüencial aos códigos originais dos ensaios.

1.2 – CONTEXTUALIZAÇÃO

A elevação de temperatura do concreto ocorre porque a reação química entre o cimento e a água (reação de hidratação) libera calor, isto é, trata-se de uma reação exotérmica. Fora dos laboratórios, nas concretagens em obras, a elevação de

temperatura ocorre de forma não uniforme no volume de concreto. Isso ocorre porque a velocidade da reação química que libera calor depende da temperatura da mistura. E, em condições normais de obra, a temperatura do concreto não evolui por igual em todo o volume de concreto.

Naturalmente, a elevação de temperatura provoca dilatações térmicas no concreto. Assim como a temperatura, a dilatação térmica não evolui igualmente em todos os pontos do volume de concreto, em condições normais de obra. Com isso, e também devido às restrições de movimento na estrutura sendo concretada, surgem tensões no concreto (tensões térmicas). Essas tensões podem levar o concreto à fissuração [1].

O problema acima descrito foi observado inicialmente em obras com grandes volumes de concreto, como represas [2]. Nesse tipo de obra, a estrutura de concreto é espessa o suficiente para que a dissipação do calor gerado no interior do volume seja significativamente retardada pelas camadas mais externas de concreto. Isso faz com que tais estruturas sejam mais sujeitas ao problema de fissuração acima descrito.

Porém nos últimos anos a espessura de concreto necessária para a estrutura ter o problema em questão foi reduzida. Porque hoje existem, entre os concretos de alto desempenho (CAD), aqueles que liberam uma quantidade de calor muito acima do que era considerado comum. Isso significa maior elevação de temperatura em menos tempo, o que aumenta as tensões térmicas.

A escolha criteriosa dos constituintes do concreto é um método comum para controlar de antemão a liberação de calor durante a hidratação, com o intuito de evitar a fissuração excessiva da estrutura nas primeiras idades do concreto. Já na década de 1930, empregava-se material pozolânico substituindo uma fração do cimento, com o objetivo de diminuir a exotermia da hidratação do concreto.

Pode-se também reduzir a temperatura inicial do concreto esfriando-se a água que será misturada. Isso reduz a temperatura final do concreto, não somente porque a elevação de temperatura se inicia de um nível inferior, mas também porque a reação de hidratação fica mais lenta (é uma reação termo ativada), o que traz mais tempo para o calor produzido se dissipar no ambiente. Na construção da usina hidrelétrica de Itaipu, por exemplo, o concreto chegou a ser lançado a uma temperatura de 7 °C [9].

Para lidar com o problema de fissuração causado pela elevação de temperatura do concreto, foram criados vários modelos numéricos [5] [10] [12] [14] [22] [27]. Esses modelos têm como um dos principais dados de entrada a curva que descreve a elevação

adiabática de temperatura do concreto. Apesar de a elevação de temperatura não acontecer em condições adiabáticas nas obras de engenharia, a curva de elevação adiabática é um parâmetro que informa com precisão o potencial de liberação de calor inerente ao concreto empregado na obra.

Como dito anteriormente, a curva de elevação adiabática é tradicionalmente obtida em ensaio de laboratório. Porém, face à importância do problema e às dificuldades de realização do ensaio, vários modelos numéricos foram propostos para a predição da curva de elevação adiabática de temperatura do concreto [11] [23] [30]. Recentemente foram propostos modelos utilizando redes neurais artificiais [13] [15] com o intuito de superar limitações de aplicabilidade dos modelos anteriores. Esses últimos modelos utilizaram o mesmo banco de dados usado neste trabalho. Porém hoje o banco de dados tem cerca de o dobro da quantidade de informação. Isso motivou a busca de um modelo aplicável a um número maior de casos. Além disso, o banco de dados conta agora com informações valiosas sobre as composições químicas das adições minerais. Tais adições, presentes em boa parte dos concretos analisados, contribuem de forma significativa no calor gerado durante o endurecimento do concreto. Este trabalho buscou utilizar esses dados de modo a considerar o papel das adições minerais na evolução da elevação adiabática da temperatura do concreto.

Modelos numéricos para predição da curva de elevação adiabática não objetivam substituir o ensaio de laboratório. Na realidade, o emprego de tais modelos serve para projetar um concreto com resultados satisfatórios realizando-se um número bem reduzido de ensaios de elevação adiabática de temperatura. Desse modo o ensaio de laboratório assume o papel de confirmar o resultado do modelo numérico.

CAPÍTULO 2

- Fundamentos

2.1 - CONSTITUINTES DO CONCRETO

O concreto é gerado misturando-se vários constituintes. Neste trabalho, e em inúmeros casos práticos, esses constituintes podem ser divididos nas quatro partes listadas abaixo e descritas a seguir.

- Material sólido inerte;
- Água;
- Material sólido cimentante;
- Adições químicas.

O material sólido inerte é rocha, pulverizada ou em grãos maiores, que não reage quimicamente com nenhum outro constituinte do concreto durante o endurecimento. Após o endurecimento, o material sólido inerte pode reagir quimicamente com outros constituintes do concreto, com efeitos relevantes. Porém essa fase de amadurecimento do concreto foge do tema deste trabalho.

Apesar de considerada inerte, a rocha tem forte influência na elevação de temperatura do concreto, pois ela, assim como os outros constituintes, influencia nas propriedades térmicas do concreto através de seu calor específico e massa específica. Comparada com a água, a rocha tem calor específico baixo e massa específica alta.

O material sólido cimentante apresenta-se em pó e é quimicamente reativo. Essa parte do concreto é formada por cimento, pozolana e escória de alto forno, podendo-se dispensar a pozolana, mas obrigatoriamente com a presença de cimento ou escória. A presença de cimento ou escória é obrigatória por que são eles que reagem diretamente com a água, enquanto que a pozolana reage com um produto da reação do cimento com a água. A escória de alto forno e a pozolana são designadas “adição ao cimento”, exceto quando o material cimentante possui somente escória, não havendo cimento.

O cimento comercial é cimento Portland com ou sem pré-adições. Tais pré-adições são freqüentemente escória de alto forno ou pozolana.

A escória de alto-forno é um subproduto da indústria siderúrgica. É corrente a utilização desse material como aditivo ao cimento Portland. Para esse fim, normalmente

a escória de alto-forno é moída de 4000 a 5000 cm²/g de finura Blaine [24] (para comparação, a finura do cimento Portland predomina entre 2400 cm²/g e 5000 cm²/g [26] [6] [24]). A escória de alto-forno é predominantemente composta de cal (CaO), magnésia (MgO), sílica (SiO₂) e alumina (Al₂O₃) ordenados em estado não cristalino (vítreo) [24]. Isso faz com que esse material seja reativo com a água à temperatura ambiente.

As adições químicas são substâncias que interferem nas reações químicas entre os outros constituintes do concreto. Essas substâncias são adicionadas ao concreto em quantidades muito pequenas [24], predominantemente inferiores a um quilo por metro cúbico de concreto, podendo chegar a alguns quilos [6]. As adições químicas são usadas principalmente para incorporar ar, aumentar a plasticidade do concreto ainda fresco, ou controlar o tempo de pega¹ [24].

No banco de dados utilizado neste trabalho, as adições químicas empregadas nos ensaios são: incorporadores de ar, retardadores de pega e plastificantes. Esses três tipos de adição química têm o efeito de atrasar a evolução das reações de hidratação [24] [13], contribuindo portanto para retardar a liberação de calor mencionada no item 1.2.

2.2 - HIDRATAÇÃO DO CIMENTO PORTLAND E SUA EXOTERMIA

Hidratação é uma reação química onde moléculas de água se unem a outros compostos, mantendo ou não sua estrutura original H₂O. No caso da hidratação do cimento Portland, os compostos formados pela hidratação são sólidos, o que explica o endurecimento da pasta de cimento.

2.2.1 - Mecanismo de hidratação

Existem dois mecanismos propostos para a hidratação do cimento Portland [24]:

- hidratação por dissolução-precipitação;
- hidratação topoquímica ou hidratação no estado sólido.

Estudos indicam que ambos os mecanismos acontecem de fato na hidratação do cimento Portland [24], ocorrendo segundo o processo explicado a seguir. Será descrito o que se “vê” microscopicamente quando a água entra em contato com a superfície do grão de cimento.

Primeiramente ocorre a dissolução dos primeiros minerais do cimento, situados junto à superfície do grão de cimento. A solução em volta do grão de cimento fica cada

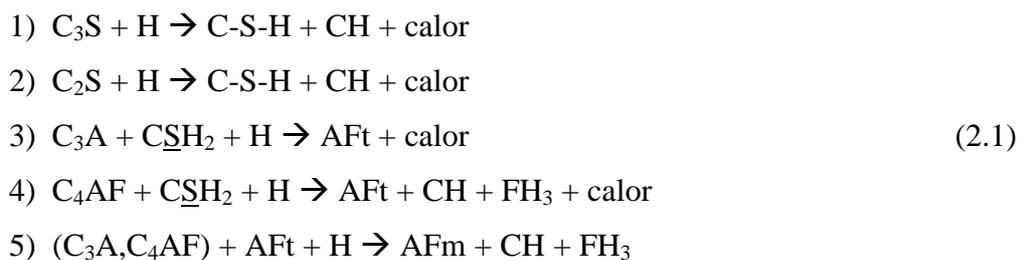
¹ Pega: Momento em que o concreto deixa de ser uma suspensão de grãos (microscópicos ou não) na água, para ser um corpo sólido poroso com os poros preenchidos com água e ar.

vez mais concentrada até que se formam os primeiros hidratos, da união entre os íons dissolvidos e a água. Como os hidratos têm baixa solubilidade, eles precipitam. Os sólidos precipitados na água formam gradativamente um “esqueleto”, um corpo esponjoso. Durante a formação do corpo esponjoso, a dissipação de íons recém dissolvidos torna-se cada vez mais lenta, o que faz crescer a concentração da solução em volta da partícula residual de cimento. Com isso a dissolução dos minerais diminui, dando lugar para a hidratação *topoquímica* na superfície do que restou do grão de cimento, nas “profundezas” do corpo esponjoso de hidratos.

Em suma, o cenário microscópico da hidratação do cimento Portland é um conjunto de grãos de cimento suspensos na água, envolvidos por uma “coroa” de hidratos, a qual, numa escala menor, mostra ser um “esqueleto” em formação. Com o avanço da hidratação, chega um momento em que a “coroa” de hidratos de um grão alcança as “coroas” dos grãos vizinhos, gerando uma ligação sólida entre os grãos. Quando essas ligações sólidas chegam a fechar caminhos sólidos que percorrem toda a extensão do corpo de concreto, diz-se que ocorreu a pega [3]. Em outras palavras, a pega é o momento em que a pasta de cimento deixa de ser uma suspensão, passando a ser um corpo sólido poroso.

2.2.2 - Reações químicas e suas exotermias

Como o cimento Portland é uma mistura de compostos minerais hidratáveis, a hidratação dessa mistura é na verdade um conjunto de reações de hidratação. As principais reações estão descritas a seguir [21], sem quantificação estequiométrica.



onde

C = CaO , S = SiO₂ , F = Fe₂O₃ , A = Al₂O₃ , S = SO₃ , H = H₂O

(notação tradicional da Química do Cimento),

e

C-S-H é o silicato de cálcio hidratado, onde o símbolo “-” significa que a expressão não indica proporção estequiométrica,

AFt é a etringita [Ca₆Al₂(SO₄)₃(OH)₁₂ · 26H₂O] ,

AFm é o monossulfato $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6(\text{SO}_4) \cdot 14\text{H}_2\text{O}$,

As exotermias (calores de hidratação) teóricas das reações (2.1) são [23]:

- 1) 120 cal por grama de C_3S ;
- 2) 62 cal por grama de C_2S ;
- 3) 207 cal por grama de C_3A ;
- 4) 100 cal por grama de C_4AF .

Adiante serão discutidas separadamente as reações de hidratação dos aluminatos (reações 3, 4 e 5) e dos silicatos (reações 1 e 2).

2.2.3 - Hidratação dos aluminatos

Na ausência da gipsita (CSH_2), a reação do C_3A com a água é imediata [24], o que proporcionaria um rápido endurecimento logo após a mistura do cimento com a água. Mas todos sabem que numa obra o concreto não endurece ainda dentro da betoneira, tampouco antes da concretagem. De fato a rapidez do endurecimento é controlada com a adição de gesso (CSH_2) na produção do cimento Portland [24].

O gesso é a fonte de sulfatos na mistura. E graças à elevada relação sulfato/aluminato existente na primeira fase da hidratação é que se forma a etringita (AFt) – um trissulfato [24]. Depois do sulfato da solução ter sido consumido, os aluminatos passam a reagir com a etringita, degradando-a e formando um monossulfato hidratado (AFm) [24].

2.2.4 - Hidratação dos silicatos

Os silicatos não hidratam tão facilmente quanto os aluminatos. Na verdade, a capacidade de hidratação dos silicatos depende principalmente da estrutura cristalina em que se encontram [24]. Quanto mais regular e estável é a estrutura cristalina, menor é o potencial reativo da hidratação do silicato. É por esse motivo que a alita (C_3S) hidrata mais rápido que a belita ($\beta\text{C}_2\text{S}$): o mineral alita possui uma estrutura mais amorfa e instável que a belita. Um exemplo extremo é a areia, cuja estrutura mineralógica é altamente regular, sendo considerada inerte em presença da água.

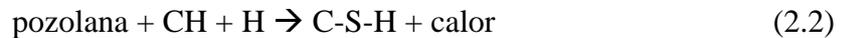
Tabela 2.1 – Quadro comparativo da velocidade de reação com a água dos principais compostos do cimento Portland [24].

Composto	Velocidade de reação
C ₃ S	média
βC ₂ S	lenta
C ₃ A	rápida
C ₄ AF	média

2.3 – HIDRATAÇÃO DAS ADIÇÕES E SUAS EXOTERMIAS

As principais adições ao cimento empregadas nos ensaios do banco de dados foram: escória de alto forno, e as pozolanas microssílica e cinza volante.

Existem várias espécies de pozolana. As pozolanas são caracterizadas pela reação pozolânica [24]:



A reação pozolânica é lenta comparada à hidratação do cimento Portland [24]. Por isso as pozolanas podem ser adicionadas ao cimento com o intuito de reduzir a taxa de liberação de calor do concreto. Porém a adição de pozolana não reduz necessariamente a quantidade final de calor liberada pelo concreto. Vários tipos de microssílica e cinza volante podem ter exotermia de reação superior ao calor de hidratação da alita (C₃S) ou mesmo do C₃A, no caso da microssílica [11].

A cinza volante empregada nos ensaios do banco de dados foi a cinza de baixo teor de cálcio (teor inferior a 10%) [24]. Esse tipo de cinza volante, diferentemente da cinza alto-cálcio, é apenas pozolânica, ou seja, não possui uma parcela que reage diretamente com a água [24].

A escória de alto forno reage diretamente com a água, porém sua hidratação é mais lenta que a do cimento Portland. Apesar de seus produtos de hidratação serem semelhantes aos produtos do cimento Portland, o calor de hidratação da escória é inferior [6]. Por isso a adição de escória ao cimento corresponde geralmente a uma redução na liberação de calor do concreto [13].

2.4 – CÁLCULO DAS FASES MINERAIS DO CIMENTO

As fases minerais do cimento são as quantidades dos diferentes compostos que formam o cimento. Como mostra o item 2.2.2, cada composto tem seu calor de hidratação próprio. Com isso, pode-se prever o calor total de hidratação do cimento somando-se os calores de hidratação dos compostos multiplicados pelas respectivas quantidades de cada composto [24]. De fato, vários modelos para predição de exotermia

do concreto [11] [23] [30] utilizam as quantidades dos compostos como parte dos dados de entrada. Porém a determinação direta das quantidades dos compostos requer equipamentos e técnicas especiais [24]. Já as quantidades dos óxidos (CaO, SiO₂, etc.) são obtidas em análises químicas de rotina [24]. Por isso, é comum utilizar equações para calcular as fases minerais em função dos teores dos óxidos [8] [28]. Um exemplo disso são as equações de BOGUE [8]:

$$\begin{aligned} C_3S &= 4,071 \cdot C - 7,600 \cdot S - 6,718 \cdot A - 1,430 \cdot F - 2,850 \cdot S \\ C_2S &= 2,867 \cdot S - 0,7544 \cdot C_3S \\ C_3A &= 2,650 \cdot C - 1,692 \cdot F \\ C_4AF &= 3,043 \cdot F \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde os compostos e os óxidos são quantificados em massa ou fração da massa do cimento.

As equações de BOGUE não são aplicáveis para os cimentos com alto percentual de adição mineral comuns no Brasil [13]. Por isso, os modelos de predição de exotermia baseados nas equações de BOGUE têm aplicabilidade limitada no Brasil.

As equações de BOGUE são a solução de um caso particular do sistema de equações seguinte.

$$\begin{aligned} o_1 &= a_{11}c_1 + \dots + a_{16}c_6 \\ \dots & \dots \dots \dots \dots \dots \\ o_6 &= a_{61}c_1 + \dots + a_{66}c_6 \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde

- o_i é a massa de óxido i na mistura,
- c_j é a massa de composto j na mistura,
- a_{ij} é a fração do óxido i na massa elementar do composto j .

O sistema (2.3) será válido para um cimento somente se cada óxido estiver presente exclusivamente nos seis compostos que aparecem no sistema. Caso contrário, a massa do primeiro óxido, por exemplo, será na realidade:

$$o_1 = a_{11}c_1 + \dots + a_{16}c_6 + a_{17}c_7 ,$$

onde c_7 é a massa que resta do cimento que não os seis compostos, e a_{17} é a fração do óxido 1 nessa massa restante.

O interessante do sistema (2.3) é que, uma vez obtido um sistema como esse válido para todos os cimentos de interesse, fica resolvido o problema de encontrar as fases minerais em função dos teores dos óxidos. Bastaria solucionar o sistema,

obtendo-se a equação matricial (2.5) a seguir. De fato, as equações de BOGUE são uma solução do tipo (2.5).

$$\{c_j\} = [a_{ij}]^{-1} \{o_i\} \quad (2.5)$$

onde c_j , a_{ij} , o_i são conforme equação (2.3).

Para que exista um sistema do tipo (2.3) válido para toda uma família de cimentos, basta que existam seis compostos (mesmo que definidos cada um com um percentual fixo de impureza) tais que a massa dos seis totalize sempre próxima da massa total de cimento. Em outras palavras, o cimento seria sempre uma mistura quase que exclusivamente dos seis compostos.

O erro de um sistema do tipo (2.3) está na definição da estequiometria e do percentual fixo de impureza para cada composto. Porque a estequiometria exata e o percentual de impureza de um composto varia de cimento para cimento. Por exemplo, se definimos um composto chamado “escória de alto forno”, fica claro que a estequiometria de óxidos desse composto não é exatamente a mesma em todos os cimentos. Mas isso já seria uma aproximação aceitável dependendo do problema.

Definindo-se um número suficiente de compostos, com base nos agrupamentos químicos predominantes num grupo de cimentos, pode-se minimizar o erro de um sistema do tipo (2.3).

2.5 - ELEVAÇÃO ADIABÁTICA DA TEMPERATURA DO CONCRETO

A palavra “adiabática” significa sem troca de calor com o meio externo, ou seja, trata-se de um concreto isolado termicamente.

2.5.1 - Fatores influentes

Como já visto, os constituintes do concreto estão diretamente ligados à elevação de temperatura durante a hidratação. Outros fatores importantes são a temperatura inicial do concreto e a finura da massa cimentante. Segundo MEHTA [24], a taxa e magnitude do aumento adiabático de temperatura são em função da quantidade, composição e finura do cimento, e da sua temperatura durante a hidratação. De fato, como a reação de hidratação é exotérmica e termo ativada, tem-se que uma temperatura inicial elevada proporciona maior velocidade de reação, acelerando a liberação de calor e a elevação de temperatura. A Figura 2.1 ilustra a influência da temperatura inicial do concreto na curva de elevação adiabática de temperatura.

A finura da massa cimentante também é importante porque ela quantifica a superfície de contato entre o reagente sólido e a água. Quanto maior é a superfície de

contato, mais rápida é a hidratação. Conseqüentemente, mais rápidos são a liberação de calor e o aumento de temperatura.

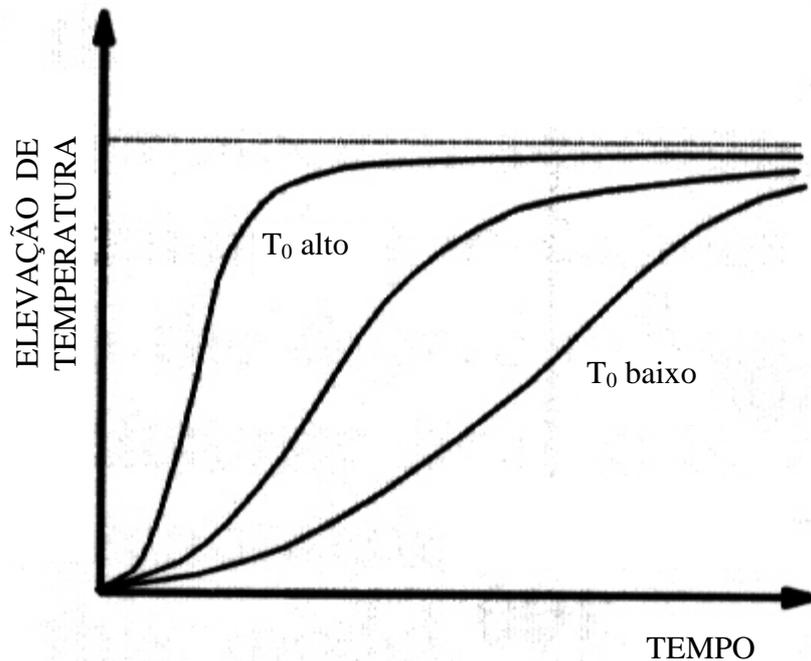


Figura 2.1 – Influência da temperatura inicial T_0 do concreto na curva de elevação adiabática de temperatura. Fonte: [23].

2.5.2 - A curva de elevação adiabática de temperatura

A elevação adiabática de temperatura é diretamente proporcional à liberação de calor da reação de hidratação, como mostra a equação a seguir.

$$Q(t) = m c \Delta T(t) \quad (2.6)$$

onde

Q é o calor total absorvido pelo concreto até o tempo t . Como não há troca de calor com o meio externo, esse calor é exatamente o calor originado no próprio concreto pela reação de hidratação.

m é a massa de concreto.

c é o calor específico do concreto. Esse parâmetro varia muito pouco ao longo do endurecimento e pode ser considerado constante [7] [30].

Do exposto acima, conclui-se que a curva de elevação adiabática é crescente em todos os instantes até a estabilização da temperatura, já que a quantidade total de calor liberado só aumenta até o final da hidratação do concreto.

Em função das propriedades dos compostos do cimento Portland (item 2.2), a curva de elevação adiabática possui a cinética típica apresentada na Figura 2.2. Essa

figura mostra o gráfico da primeira derivada da curva de elevação adiabática de temperatura.

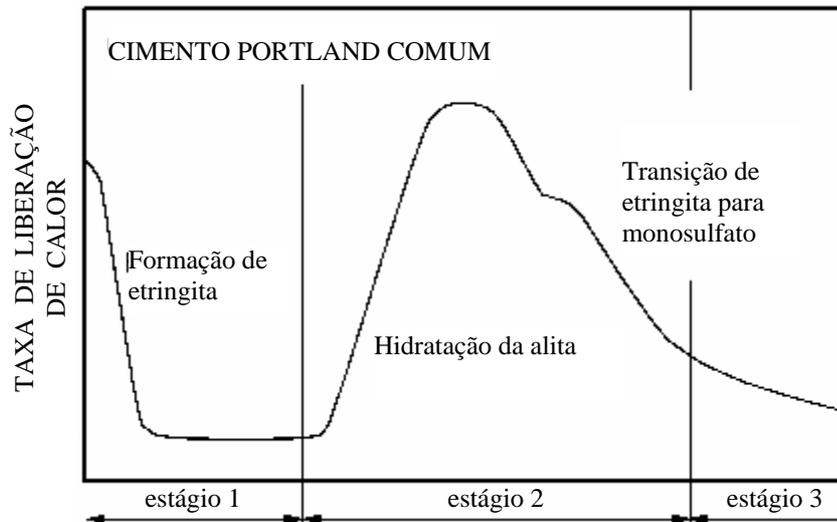


Figura 2.2 – Evolução típica no tempo (escala logarítmica) para a taxa de liberação de calor na hidratação do cimento Portland. Fonte: [29].

2.5.3 – Ensaio para determinação da curva de elevação adiabática de temperatura

Como dito na Introdução, a curva de elevação adiabática é tradicionalmente obtida em ensaio de laboratório [6] [25]. O ensaio consiste em medir a temperatura do concreto uma série de vezes a partir da formação da mistura (início do processo de hidratação). Para garantir que o concreto não trocará calor com o meio externo, o ensaio é realizado em um calorímetro adiabático, que consiste numa câmara com seu interior isolado termicamente do meio externo.

Os ensaios que alimentaram o banco de dados utilizado neste trabalho foram realizados nos últimos trinta anos pelo Laboratório de Concreto de FURNAS Centrais Elétricas S.A. A elevação de temperatura do concreto foi medida em um calorímetro adiabático com câmara e ante-câmara, em condições que garantissem o isolamento térmico do concreto [6].

2.6 - SOBRE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNAs)

2.6.1 - O que são redes neurais artificiais

São modelos matemáticos que processam números, imitando alguns aspectos do processamento de impulsos realizado por uma rede real de neurônios.

Redes neurais artificiais podem ser usadas para resolver o problema descrito a seguir [19].

Seja uma função desconhecida f e um conjunto de pares entrada-saída associado à função f . O conjunto de pares entrada-saída contém vetores de entrada e seus respectivos vetores de saída. Deseja-se construir uma função f^* , tal que $f^*(x)$ tenha valor próximo de $f(x)$, qualquer que seja o vetor de entrada x dentro de um espaço de interesse. Ou seja, deseja-se construir uma função f^* com comportamento próximo da função desconhecida f .

O método consiste em calcular uma RNA que seja uma função com a propriedade de f^* acima descrita.

Neste trabalho, os passos para construir RNAs foram:

- 1) Definir uma estrutura para a rede neural;
- 2) Calcular os parâmetros da RNA usando o conjunto de pares entrada-saída, através de um método conhecido como aprendizado supervisionado;
- 3) Avaliar a RNA já com seus parâmetros definidos;
- 4) No caso de a avaliação mostrar que a RNA é insatisfatória, voltar para o passo 1, onde é definida uma nova estrutura para a RNA, ou voltar para o passo 2, onde novos parâmetros são calculados com ou sem a definição de uma estrutura diferente no passo 1.

Cada execução do passo 2 acima gera novos parâmetros para a RNA mesmo que não seja alterada a estrutura da rede. Isso ocorre porque, no método empregado, o cálculo dos parâmetros começa com uma escolha aleatória de valores para os parâmetros da rede neural.

Os itens seguintes tratam dos passos 1, 2 e 3 acima.

2.6.2 – Estrutura da RNA

Definir a estrutura da rede neural consiste em definir sua arquitetura e as funções de transferência de seus neurônios. Serão explicados esses conceitos.

Em geral, podemos identificar quatro classes diferentes de arquitetura de rede [17]. Neste trabalho, emprega-se arquitetura do tipo *feedforward* multicamadas. A Figura 2.3 ilustra uma RNA com esse tipo de arquitetura. Na figura, os pequenos quadrados são as componentes do vetor de entrada da RNA. Segundo a analogia com as redes neurais biológicas, cada círculo é um neurônio e as setas que apontam para um dado neurônio são os dendritos desse neurônio. A RNA da figura é do tipo *feedforward* multicamadas, totalmente conectada, com somente uma camada escondida, quatro neurônios escondidos e dois neurônios de saída.

Uma RNA *feedforward* multicamadas pode ter mais de uma camada escondida, porém estudos mostram que não há necessidade alguma de usar mais que duas camadas escondidas [19]. Neste trabalho, as RNAs foram definidas possuindo apenas uma camada escondida.

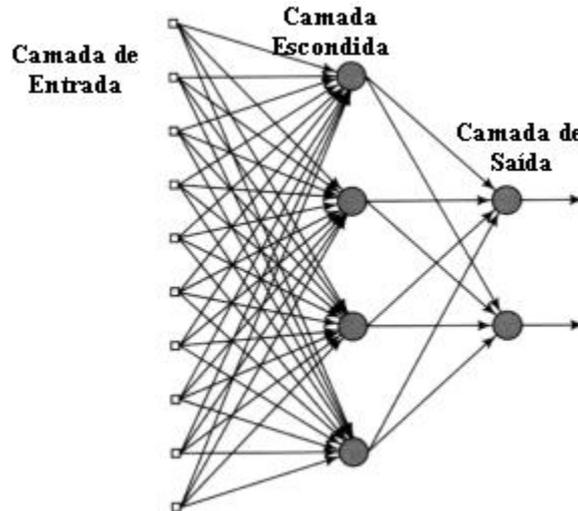


Figura 2.3 – RNA *feedforward* multicamadas. Fonte: [17].

A Figura 2.3 é uma representação gráfica para a equação (2.7).

$$y = f_B[B f_A(A x + a) + b], \quad (2.7)$$

onde

y é o vetor de saída da RNA, no caso da figura, um vetor coluna com duas componentes.

x é o vetor de entrada da RNA, no caso da figura, um vetor coluna com dez componentes.

A é a matriz de pesos da primeira camada (camada escondida), no caso da figura, uma matriz com quatro linhas e dez colunas. Cada peso é referente a um dendrito.

a é o vetor de vieses da primeira camada, no caso da figura, um vetor coluna com quatro componentes. Cada viés é referente a um neurônio.

f_A é o vetor de funções de transferência da primeira camada, no caso da figura, um vetor coluna com quatro componentes. Cada função de transferência é referente a um neurônio.

$f_A(A x + a)$ é o vetor de saída da primeira camada, no caso da figura, um vetor coluna com quatro componentes, onde cada componente $[f_A(Ax+a)]_k$ equivale a $f_{Ak}[(Ax+a)_k]$.

- B é a matriz de pesos da camada de saída, no caso da figura, uma matriz com duas linhas e quatro colunas.
- b é o vetor de vieses da camada de saída, no caso da figura, um vetor coluna com duas componentes.
- f_B é o vetor de funções de transferência da camada de saída, no caso da figura, um vetor coluna com duas componentes.

Os parâmetros da RNA são os pesos e vieses da equação (2.7).

Uma vez definida a arquitetura da RNA, resta definir a função de transferência de cada neurônio, isto é, definir os vetores f_A e f_B da equação (2.7). Neste trabalho, todas as componentes de f_A foram definidas como sendo a função tangente hiperbólica, e todas as componentes de f_B foram definidas como sendo a função identidade, ou seja, a reta bissetriz dos eixos.

2.6.3 – Cálculo dos parâmetros da RNA

Neste trabalho, o cálculo dos parâmetros (pesos e vieses) da RNA se deu através de um processo conhecido como “aprendizado supervisionado”. Nesse processo empregaram-se etapas de cálculo comuns [17] [19] [31], as quais estão descritas sumariamente a seguir.

Primeiro normaliza-se o conjunto de pares entrada-saída (conjunto de aprendizado). Na normalização, as componentes dos vetores de entrada e saída do conjunto de aprendizado são convertidas para novos valores, todos na mesma ordem de grandeza. O item 3.4.3 descreve a normalização realizada neste trabalho.

Em seguida divide-se o conjunto de aprendizado em três subconjuntos: treinamento, validação e teste. É comum separar para esses subconjuntos 70%, 20% e 10% do conjunto total, respectivamente. É importante que cada subconjunto seja uma amostra representativa do conjunto total. Essa condição é facilmente atendida pelo subconjunto de treinamento, uma vez que ele engloba 70% do conjunto total. Porém é preciso tomar certos cuidados na escolha dos elementos dos subconjuntos de validação e teste. O procedimento adotado neste trabalho é explicado no item 3.5.1.

Uma vez definidos os subconjuntos de treinamento, validação e teste, inicia-se o cálculo propriamente dito. O cálculo ocorre segundo os passos seguintes:

- 1) Definição aleatória de valores para os parâmetros da RNA.
- 2) Discriminação de parte ou da totalidade do subconjunto de treinamento.
- 3) Apresentação do conjunto discriminado à rede neural.

- 4) Aplicação da RNA em todas as entradas do conjunto discriminado, obtendo-se saídas da rede neural.
- 5) Cálculo do erro da RNA através da comparação entre as saídas da rede neural e as saídas do conjunto discriminado (alvos).
- 6) Repetição dos passos 3, 4 e 5 para o subconjunto de treinamento. Assim é obtido o erro de treinamento.
- 7) Repetição dos passos 3, 4 e 5 para o subconjunto de validação. Assim é obtido o erro de validação.
- 8) Repetição dos passos 3, 4 e 5 para o subconjunto de teste. Assim é obtido o erro de teste.
- 9) Com base no erro encontrado no passo 5, correção dos parâmetros da RNA mediante de um processo conhecido como retropropagação. Num algoritmo retropropagação, o erro é “propagado” para as camadas anteriores da RNA na forma de correções nos parâmetros da rede.
- 10) Repetição dos passos 2 a 9 até o erro de validação (passo 7) ser maior que no ciclo anterior.
- 11) Adoção da RNA obtida no penúltimo ciclo (passo 9) como sendo o resultado final do cálculo. Não é adotada a última RNA obtida porque ela está ligada ao aumento do erro de validação (passo 10).

2.6.4 - Avaliação da RNA já com seus parâmetros definidos

A avaliação de uma RNA pode ser feita através de um gráfico como o exemplificado na Figura 2.4.

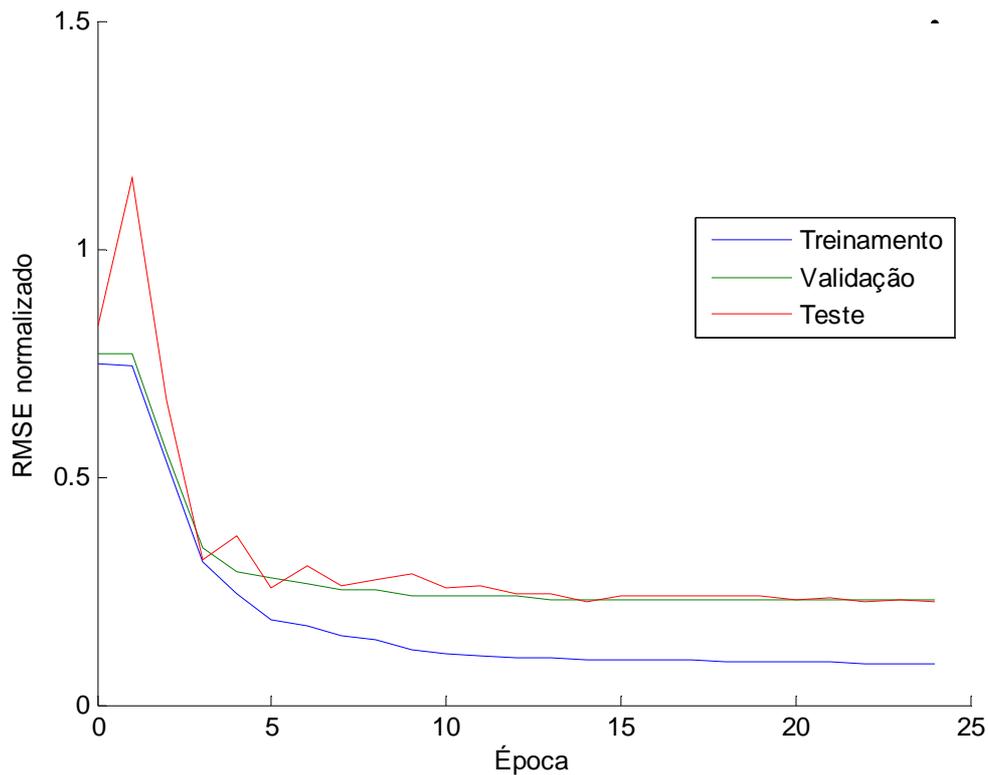


Figura 2.4 – Gráfico de evolução do treinamento de uma RNA.

A Figura 2.4 mostra a evolução dos erros de treinamento, validação e teste, obtidos a cada execução dos passos 6, 7 e 8 do item anterior. Para a quantificação do erro, podem ser usados diferentes parâmetros de erro. O parâmetro de erro utilizado neste trabalho, e exemplificado na Figura 2.4, é explicado no item 3.5.2, na equação (3.18).

No gráfico de evolução do treinamento, avalia-se a RNA não somente pelo tamanho dos erros, mas também pela comparação entre os erros finais de validação e teste. A ocorrência de valores muito diferentes para os erros finais de validação e teste pode ser consequência de uma má generalização da RNA, ou seja, *overfitting* nos vetores do conjunto de treinamento.

Outro gráfico muito útil para a avaliação da RNA está exemplificado na Figura 2.5, onde as abscissas representam o valor experimental e as ordenadas o resultado obtido através do modelo preditivo.

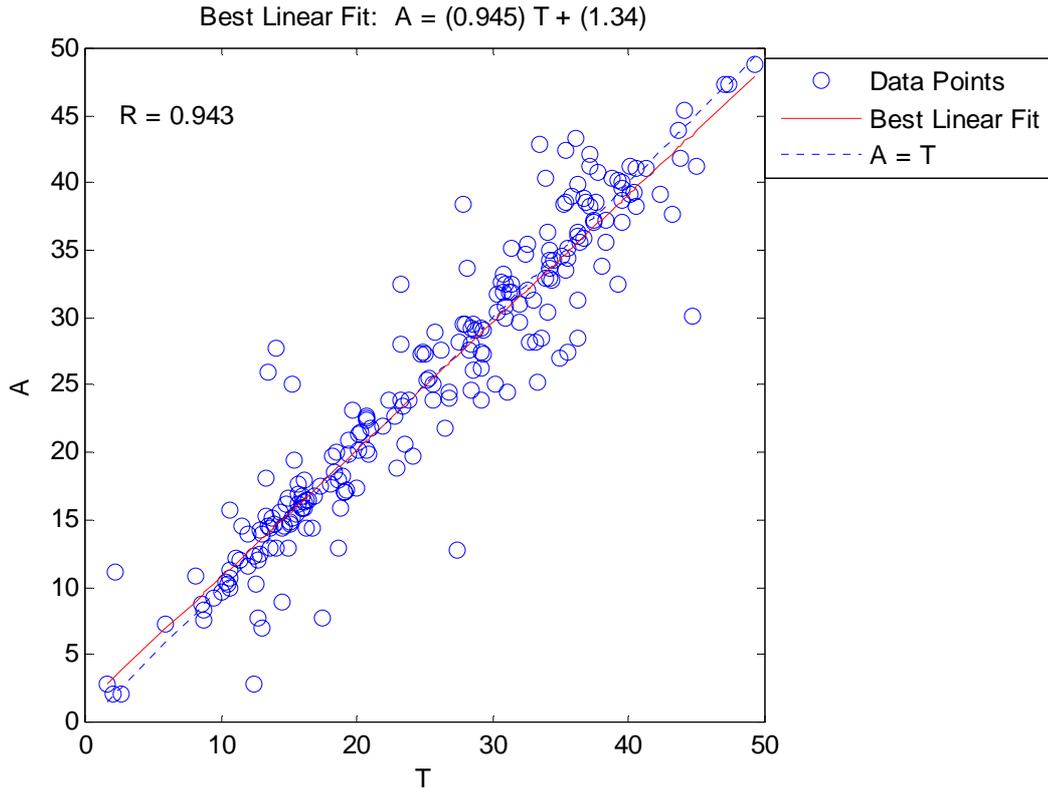


Figura 2.5 – Gráfico mostrando o desempenho da RNA para uma certa componente do vetor de saída. O gráfico compara os alvos do conjunto de aprendizado (variável T) com as saídas da RNA para todo o conjunto de aprendizado.

Na Figura 2.5, quanto mais próximos da bissetriz dos eixos estão os pontos, menor é o erro médio da RNA, e melhor é o seu desempenho.

2.7 - DISTÂNCIA MAHALANOBIS

A distância Mahalanobis pode ser definida como:

$$d(\vec{x}, \vec{y}) = \sqrt{(\vec{x} - \vec{y})^T P^{-1} (\vec{x} - \vec{y})}, \quad (2.8)$$

onde

$d(\vec{x}, \vec{y})$ é a distância Mahalanobis entre os vetores \vec{x} e \vec{y} ,

\vec{x} e \vec{y} são vetores coluna,

P é a matriz de covariância de um dado conjunto de vetores.

Neste trabalho foi empregado o parâmetro de distância calculado pela sub-rotina “mahal”, do aplicativo Matlab[®], versão 7.0.0.19920 (R14), de 6 de maio de 2004. Essa sub-rotina consiste na equação (2.9). O aplicativo utilizado define a distância Mahalanobis como sendo o parâmetro D_M dado pela equação citada. Neste trabalho foi

adotada essa definição. Portanto a partir deste ponto, a expressão “distância Mahalanobis” refere-se ao parâmetro D_M dado pela equação (2.9).

$$D_M(\bar{x}) = (\bar{x} - \bar{\mu})^T P^{-1} (\bar{x} - \bar{\mu}), \quad (2.9)$$

onde

D_M é o parâmetro de distância calculado pela sub-rotina “mahal”,

\bar{x} é um vetor coluna,

$\bar{\mu}$ é a média aritmética de todos os vetores de um dado conjunto,

P é a matriz de covariância do conjunto de vetores.

A Figura 2.6 e a Figura 2.7 ilustram um estudo de distância Mahalanobis para um exemplo de conjunto de vetores. Na Figura 2.6, percebe-se a que a distância Mahalanobis considera o espalhamento do conjunto de vetores no cálculo da distância ao centro do conjunto. Tal propriedade é importante no uso da distância Mahalanobis para identificar vetores afastados do conjunto (vetores *outliers*).

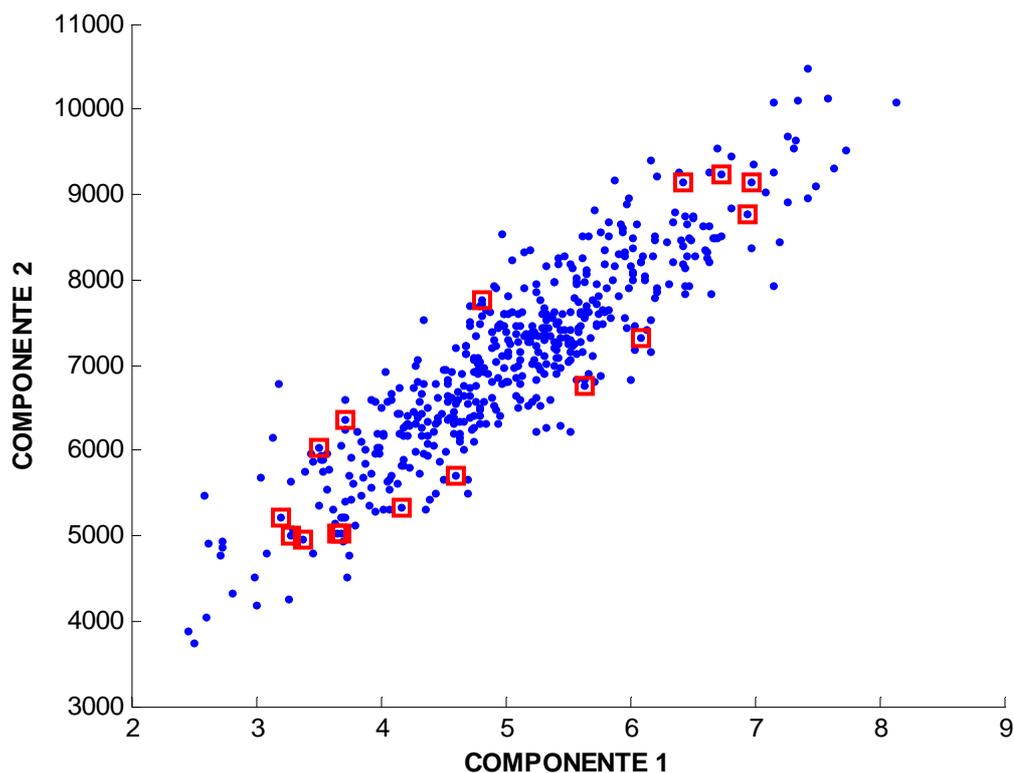


Figura 2.6 – Exemplo de um conjunto de 500 vetores com duas componentes. Os vetores marcados com um quadrado são todos eles com distância Mahalanobis quase igual (D_M de 3,5 a 3,7). D_M varia aproximadamente de 0 a 14 entre os 500 vetores do conjunto.

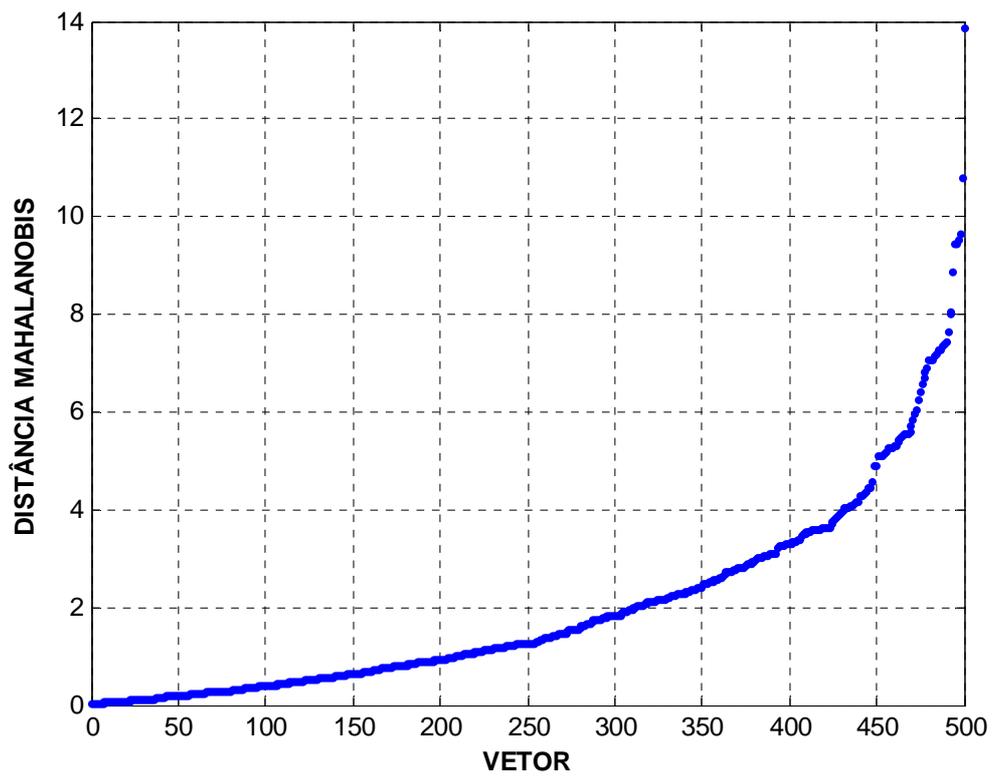


Figura 2.7 – Distâncias Mahalanobis, em ordem crescente, dos 500 vetores da Figura 2.6.

CAPÍTULO 3

- Elaboração do Modelo

3.1 - PREPARAÇÃO DO BANCO DE DADOS

O banco de dados contém os resultados de 263 ensaios de elevação adiabática de temperatura. Para cada ensaio (cada linha do banco de dados), constam muitas informações sobre a composição do concreto e os resultados do ensaio. Neste trabalho foram utilizadas as informações listadas a seguir, consideradas relevantes para o problema estudado:

- Quantidade de cimento (kg/m^3);
- Tipo e quantidade de adição ao cimento (kg/m^3);
- Quantidade de adição química (kg/m^3);
- Quantidade de mineral inerte (agregados do concreto, kg/m^3);
- Quantidade de água (kg/m^3);
- Quantidades de SO_3 , MgO , SiO_2 , Fe_2O_3 , Al_2O_3 e CaO no cimento (percentuais em massa), isto é, a composição química do cimento;
- Tipo e quantidade de pré-adição no cimento (percentual em massa);
- Finura Blaine do cimento (cm^2/g);
- Quantidades de SO_3 , MgO , SiO_2 , Fe_2O_3 , Al_2O_3 e CaO na adição ao cimento (percentuais em massa), isto é, a composição química da adição;
- Finura Blaine da adição ao cimento (cm^2/g);
- Temperatura inicial do concreto (no ato da adição da água, $^\circ\text{C}$);
- Curva de elevação adiabática de temperatura, segundo um conjunto de pontos da curva, com no máximo 55 pontos (a Figura 3.1 mostra a quantidade de pontos por ensaio).

3.1.1 - Exclusão de ensaios

Dos 263 ensaios do banco de dados, apenas 226 foram usados neste trabalho. Foram excluídos deste trabalho os ensaios registrados com as seguintes incoerências, ausências e peculiaridades:

- Falta de pontos no final da curva de elevação de temperatura (entendendo-se “final da curva” como a parte logo antes da estabilização da temperatura).

- Massas dos constituintes com somatório muito maior ou muito menor que a massa total de concreto.
- Registro de apenas dois pontos da curva de elevação de temperatura (portanto onze foi a menor quantidade de pontos utilizada neste trabalho, como se pode ver na Figura 3.1).
- Ensaios de estudos com utilização de borracha como agregado do concreto.
- Curva de elevação de temperatura com pequenos saltos e patamares (não suave) antes da estabilização da temperatura.
- Falta dos valores percentuais dos seis óxidos SO_3 , MgO , SiO_2 , Fe_2O_3 , Al_2O_3 e CaO , seja no cimento, seja na adição quando consta adição ao cimento.

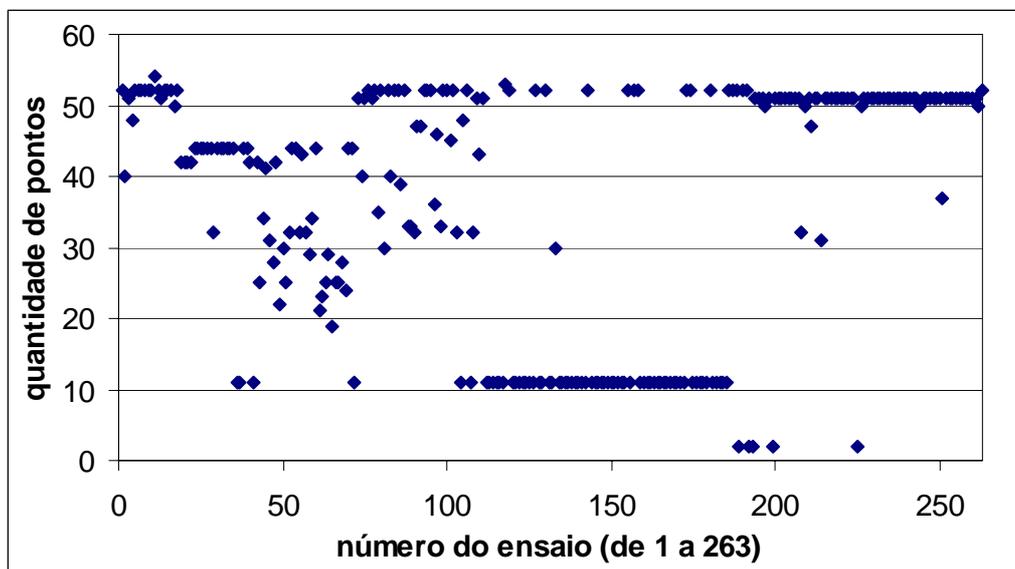


Figura 3.1 - Quantidade de pontos registrados da curva de elevação adiabática de temperatura em cada ensaio do banco de dados.

Foi verificado que não há linhas repetidas no banco de dados.

3.1.2 - Alterações de valores no banco de dados

Foram feitas alterações em valores do banco de dados com o intuito de corrigir dados julgados incorretos. Dessas alterações, alguns tipos foram os seguintes:

- Correção na quantidade de um constituinte do concreto para que a soma das massas dos constituintes fique ao menos próxima da massa total da mistura. Julgou-se que houve erro de digitação em alguns casos assim.
- Correção de valores por comparação com ensaios “vizinhos”. Por exemplo, em alguns casos a composição química (teores dos óxidos) do cimento era a mesma em diferentes ensaios, evidenciando o uso do mesmo cimento para vários ensaios.

Nesses casos ficava claro um erro de digitação quando um dos ensaios tinha a composição química do cimento quase idêntica à dos demais, diferindo apenas num único dígito no teor de um dos óxidos.

- Correção de erros de digitação evidentes em valores incompatíveis com a realidade prática, ou fisicamente impossíveis. Por exemplo, valores com ordem de grandeza diferente em função do uso de outra unidade de medida, como 1000 gramas ao invés de 1 quilo.
- Exclusão de pontos da curva de elevação adiabática que indicavam uma elevação de temperatura tardia incomum, por exemplo, elevação após sete dias de temperatura estável. Esse tipo de elevação evidencia uma falha operacional durante o ensaio de laboratório. A elevação de temperatura incomum foi identificada através da segunda derivada da curva, conforme explicado no item 3.1.3.
- Exclusão de pontos da curva de elevação adiabática que indicavam um decréscimo na temperatura, ou correção de erro de digitação na ordenada do ponto. Como visto no CAPÍTULO 2, é fisicamente incoerente haver trecho com redução de temperatura na curva de elevação adiabática.
- Exclusão de pontos nitidamente fora da curva de elevação adiabática, ou correção de erro de digitação na ordenada do ponto.

Foram preenchidos alguns campos vazios no banco de dados, em ensaios que não tinham completo o conjunto de informações utilizadas neste trabalho.

3.1.3 - Identificação da elevação de temperatura incomum num trecho da curva

A Figura 3.2 mostra uma elevação de temperatura tardia incomum ocorrendo entre os dias 15 e 25. Na figura, o quadrado tracejado marca um salto na primeira derivada da curva, num trecho onde normalmente a primeira derivada só decresce. Primeira derivada crescente significa segunda derivada positiva e, de fato, são incomuns em todo o banco de dados os pontos com segunda derivada positiva a partir do terceiro dia de hidratação. Um estudo específico explicado mais à frente corroborou essa noção.

Como mostra a Figura 3.2, um salto na primeira derivada da curva está associado à anomalia em questão. Um salto na primeira derivada significa um ponto de segunda derivada alta, isto é, um pico na segunda derivada. Portanto tais picos após uma certa idade, quando a temperatura já se aproxima da estabilização, indicam haver o problema da elevação de temperatura anômala.

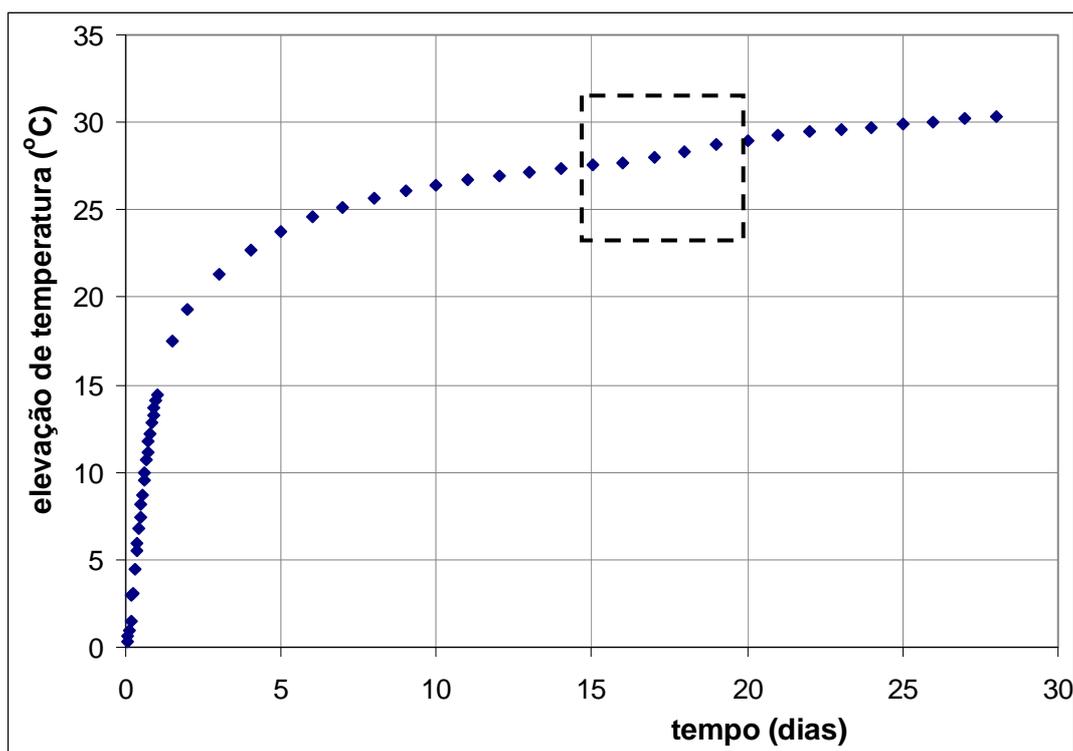


Figura 3.2 - Exemplo de uma elevação de temperatura tardia incomum. Curva experimental de elevação adiabática relativa ao ensaio 002 do banco de dados.

A Figura 3.3 mostra um estudo da variação, entre os ensaios do banco de dados, da segunda derivada da curva a cada tempo de hidratação do concreto. Para fins desse estudo, foram ignorados os valores negativos de segunda derivada. Foram ignorados também os ensaios com apenas dois pontos registrados na curva experimental. A segunda derivada foi calculada de forma aproximada tomando-se três pontos consecutivos da curva experimental.

Englobando todos os ensaios, contabiliza-se que a segunda derivada positiva ocorre em apenas 9% dos pontos experimentais a partir do terceiro dia de hidratação. Além disso, entre esses pontos a partir do terceiro dia, o valor da segunda derivada nunca ultrapassa $2\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{dia}^2$, enquanto que a média para a segunda derivada positiva é $78\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{dia}^2$ (considerando todos os pontos desde o tempo zero). Essa média foi calculada englobando todos os pontos de todas as curvas experimentais do banco de dados, ignorando-se os ensaios excluídos como descrito anteriormente no item 3.1.1.

Pelo exposto acima, conclui-se que a partir do terceiro dia de hidratação predomina a estabilização da temperatura. Em outras palavras, a segunda derivada da curva tende a ser negativa a partir do terceiro dia de hidratação.

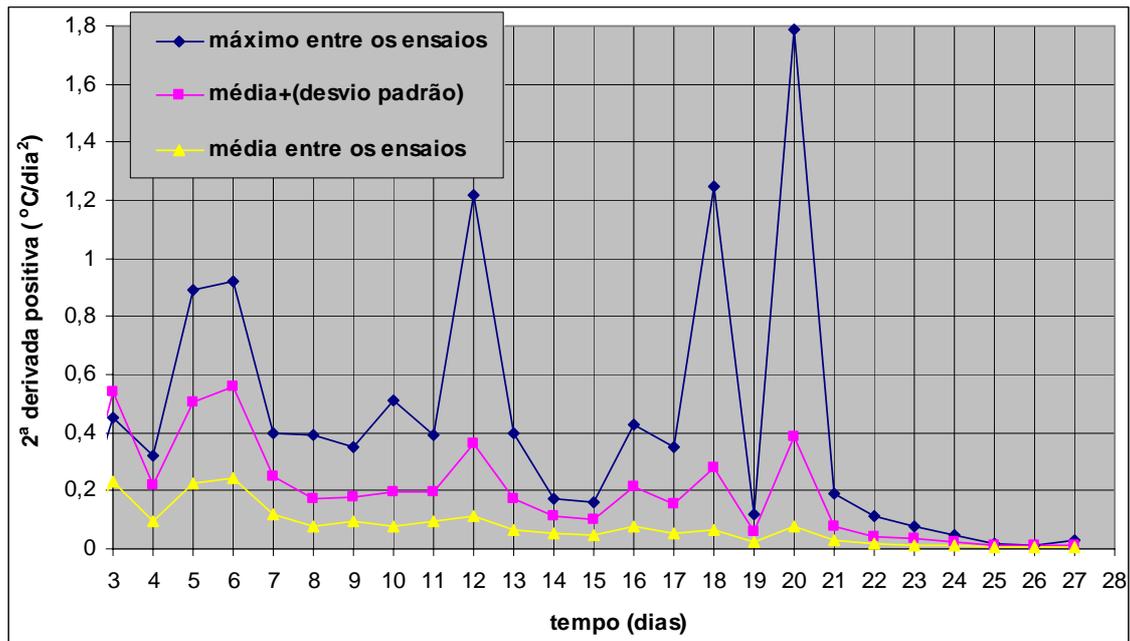


Figura 3.3 - Estudo da variação, entre os ensaios, da segunda derivada da curva de elevação adiabática. Contabilizaram-se apenas os pontos com segunda derivada positiva.

Na Figura 3.3 aparecem três picos anômalos no valor da segunda derivada, caracterizados pelo forte distanciamento da curva azul em relação à curva rosa. Os dois primeiros picos têm origem no ensaio 212, cuja curva aparece na Figura 3.4. Esse ensaio foi excluído deste trabalho. O terceiro pico tem origem no ensaio 133, cuja curva aparece na Figura 3.5. Para esse ensaio, bastou excluir o ponto da curva com abscissa 20 dias. Esse ensaio utilizou apenas escória de alto forno como material cimentante.

A anomalia na curva do ensaio 002 (Figura 3.2) foi detectada visualmente, e não pelo estudo da Figura 3.3. Na curva do ensaio 002, o pico da segunda derivada (quadrado pontilhado) ficou abaixo da curva rosa da Figura 3.3. Ou seja, outros ensaios “ofuscaram” o ensaio 002, no estudo da segunda derivada. Como a maioria desses outros ensaios não tem problema algum, conclui-se que o estudo da Figura 3.3 é recurso insuficiente para detectar todos os ensaios com elevação de temperatura tardia anômala.

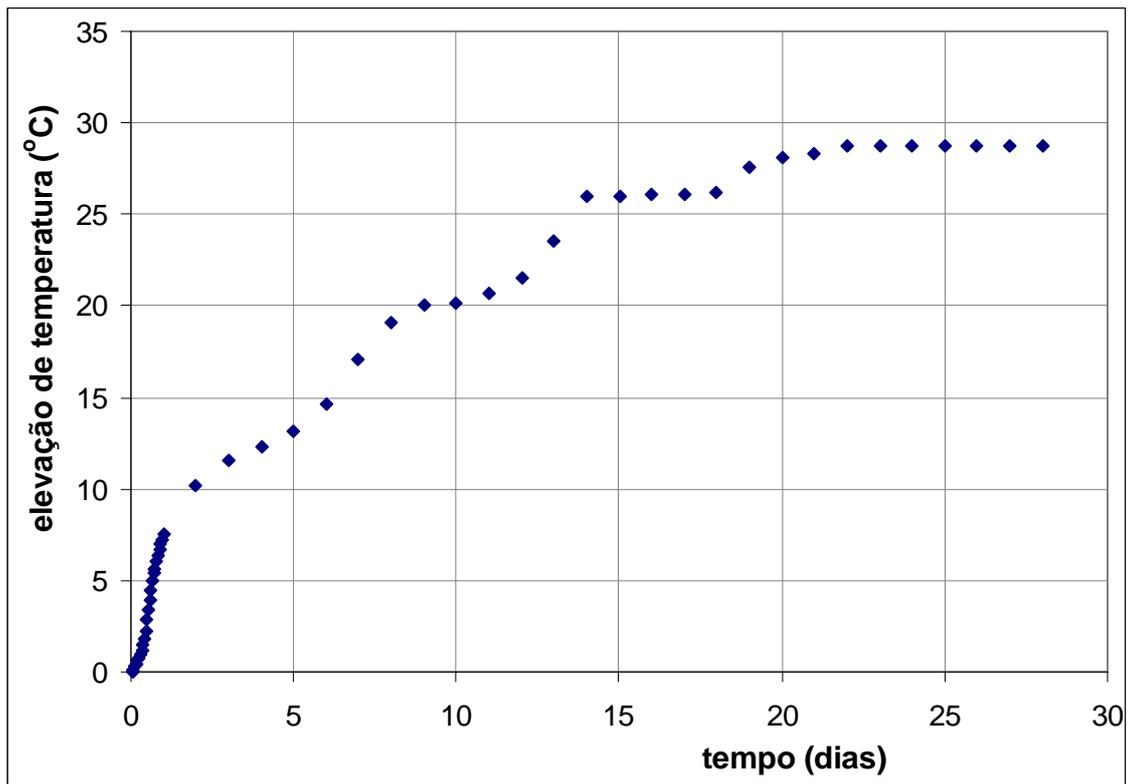


Figura 3.4 – Curva de elevação adiabática registrada no ensaio 212.

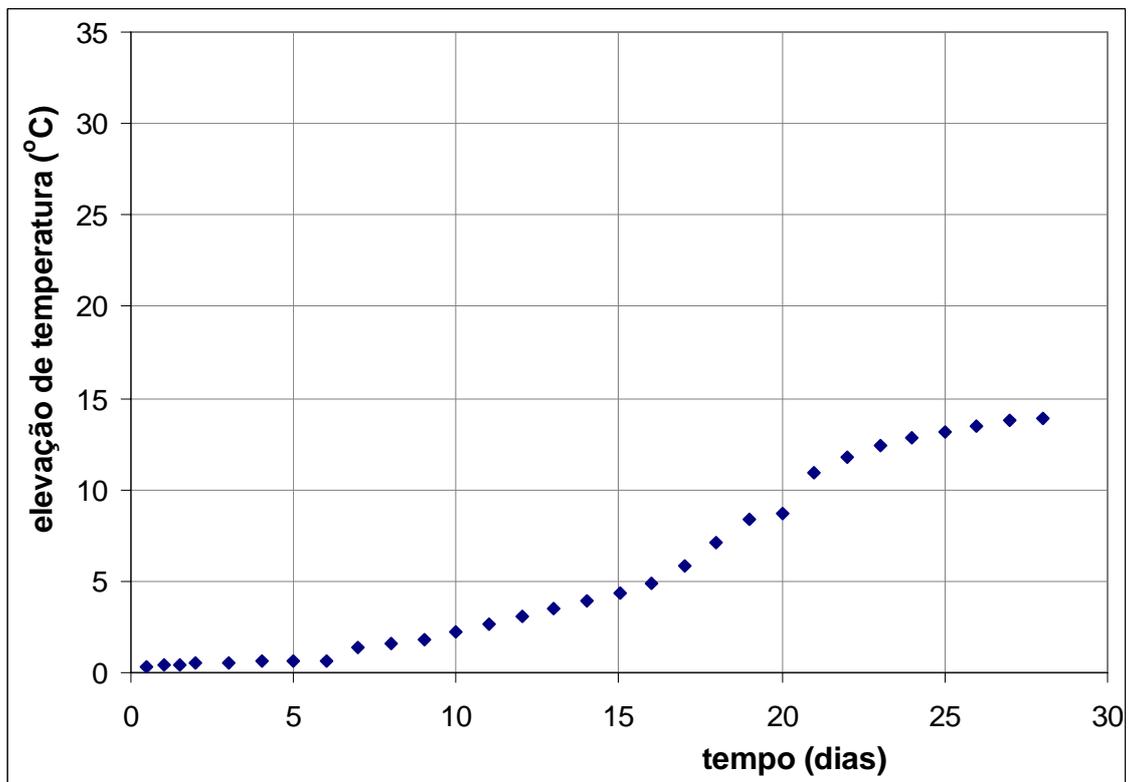


Figura 3.5 – Curva de elevação adiabática registrada no ensaio 133. O estudo sobre a segunda derivada das curvas apontou a correção do ponto de abscissa 20.

3.1.4 - Preenchimento de campos vazios

Foram preenchidos alguns campos vazios no banco de dados. Deixando-se um campo vazio, a ausência do dado provoca não apenas a perda pontual daquela informação, conforme será explicado a seguir.

Para a elaboração do modelo deste trabalho, é necessário que cada ensaio tenha um conjunto igualmente completo de informações, seja esse conjunto simples ou complexo. Por isso, a ausência de um dado num ensaio obriga a escolha de uma entre as seguintes opções:

- Exclusão do ensaio;
- Exclusão daquele dado em todos os ensaios;
- Preenchimento do campo vazio segundo algum critério.

As duas primeiras opções podem provocar uma redução na qualidade do modelo, tanto em sua precisão quanto em sua generalização (aplicabilidade em grande variedade de casos). Porém a exclusão de um ensaio pode contribuir para uma especialização do modelo proveitosa, em face de uma diversificação limitada no banco de dados. E uma simplificação inteligente no conjunto de dados pode ser benéfica, facilitando a elaboração do modelo e aumentando sua qualidade. A terceira opção, que é preencher o campo vazio segundo algum critério, tem um efeito sobre o modelo que depende de três fatores:

- Nível de influência da variável preenchida no resultado do ensaio;
- Quantidade de ensaios que recebem o mesmo tipo de preenchimento, isto é, preenchimento na mesma variável segundo o mesmo critério;
- Erro cometido no preenchimento.

Para que não seja inserido um erro significativo no modelo, o preenchimento de um dado deve ter um erro tão menor quanto maiores forem os dois primeiros fatores acima.

Foram preenchidos em diversos ensaios os seguintes campos vazios no banco de dados:

- Tipo da pré-adição presente no cimento. Todos esses campos foram preenchidos copiando-se o dado de outro ensaio em outra linha do banco de dados. Nesses casos, a linha que fornecia o dado tinha valores em comum com a linha que recebia o dado. Esses valores em comum apontavam que ambos os ensaios tinham o mesmo tipo de pré-adição no cimento.

- Finura Blaine do cimento, da pré-adição ou da adição. Em muitos desses casos fez-se um procedimento análogo ao descrito acima sobre a pré-adição. No resto dos casos, separou-se um grupo de materiais semelhantes àquele com a finura vazia (principalmente em função do tipo de cimento, ou de pré-adição, ou de adição, conforme o caso), calculou-se a finura média nesse grupo, e atribuiu-se esse valor médio de finura no campo vazio.
- Tipo da adição ao cimento. Em muitos desses casos fez-se um procedimento análogo ao descrito antes sobre a pré-adição. No resto dos casos, o tipo da adição foi identificado através da composição química (teores dos óxidos). Tal procedimento se baseou num estudo explicado no item 3.1.5.
- Os teores dos seis óxidos SO_3 , MgO , SiO_2 , Fe_2O_3 , Al_2O_3 e CaO na pré-adição presente no cimento ou na adição ao cimento. O procedimento aplicado nesse tipo de preenchimento será explicado mais à frente, no item 3.1.5.

3.1.5 – Preenchimento de campos vazios relativos a teores de óxidos

Foram excluídos todos os ensaios com a composição química do cimento vazia.

Em 44 ensaios, havia adição de cinza volante com os teores de Fe_2O_3 e Al_2O_3 vazios, em função do método experimental empregado na determinação da composição química da adição. Desse modo sabia-se apenas a soma dos dois teores vazios, pois ela tinha que ser o que faltava para a soma de todos os teores chegar a 100%. Porém identificou-se que as cinzas volantes desses 44 ensaios eram de um tipo tal com a razão “teor de Fe_2O_3 / teor de Al_2O_3 ” conhecida e com pouca variação. Com isso, conhecendo-se a soma e a razão entre os teores de Fe_2O_3 e Al_2O_3 , foram calculados ambos os teores e preenchidos tais campos vazios no 44 ensaios.

Em quatro adições ao cimento (quatro linhas do banco de dados), os teores dos seis óxidos principais estavam vazios. Tratava-se de duas cinzas volantes e duas escórias de alto forno. Esses campos vazios puderam ser preenchidos com teores médios em função do tipo de adição. Esse procedimento baseou-se no estudo ilustrado nas figuras Figura 3.6 até Figura 3.9. Nas figuras, o teor de cada óxido é dado normalizado entre os teores mínimo e máximo nos 90 ensaios com adição ao cimento. As figuras mostram que certas adições como escória, microssílica e cinza volante têm as seguintes propriedades:

- A composição química varia pouco de um ensaio para outro.
- A composição química é bem diferente das composições de outros tipos de adição.

As propriedades acima se baseiam exclusivamente nos ensaios do banco de dados usado neste trabalho. Elas não são propriedades válidas em qualquer parte do mundo ou mesmo do Brasil, especialmente no caso da cinza volante, a qual pode ter composições químicas bem diferentes dependendo do tipo de cinza. Porém, no banco de dados, essas propriedades permitem:

- Identificar com alto grau de certeza o tipo de adição sabendo-se apenas a composição química;
- Preencher uma composição química em branco sabendo-se apenas o tipo de adição, sem inserir um erro expressivo no banco de dados.

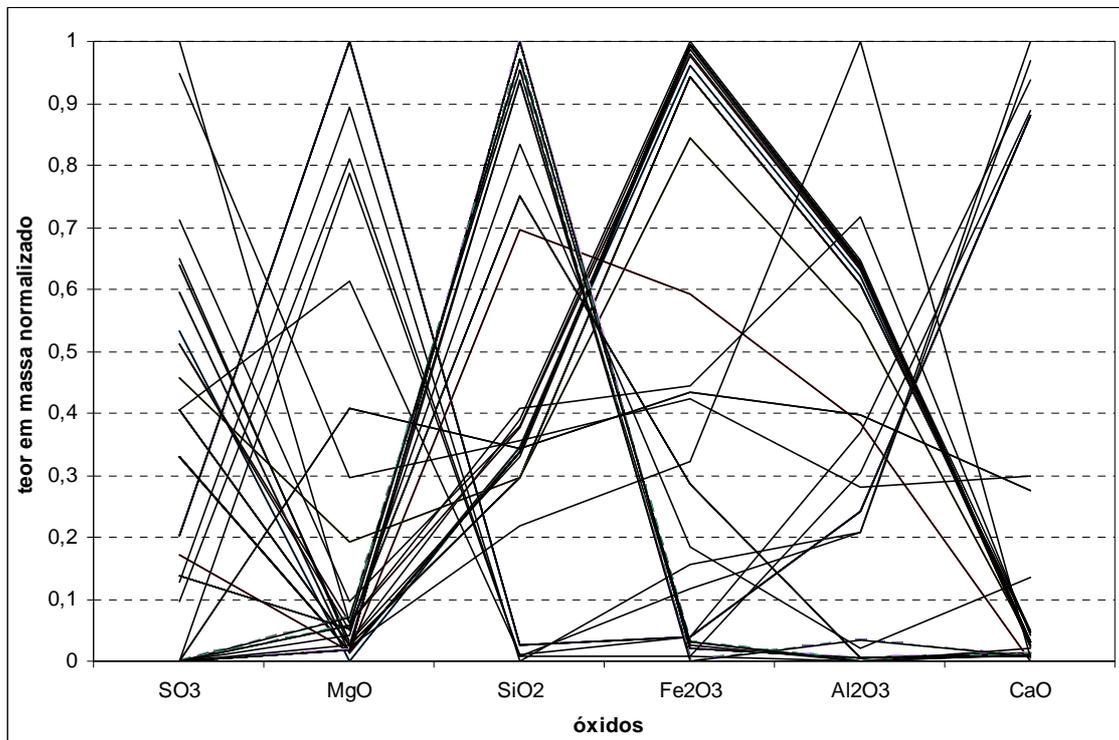


Figura 3.6 - Diagrama de poligonais com 90 adições. Cada linha poligonal representa a adição ao cimento em um ensaio. Na figura não constam as composições químicas preenchidas depois nas as seis adições que estavam vazias.

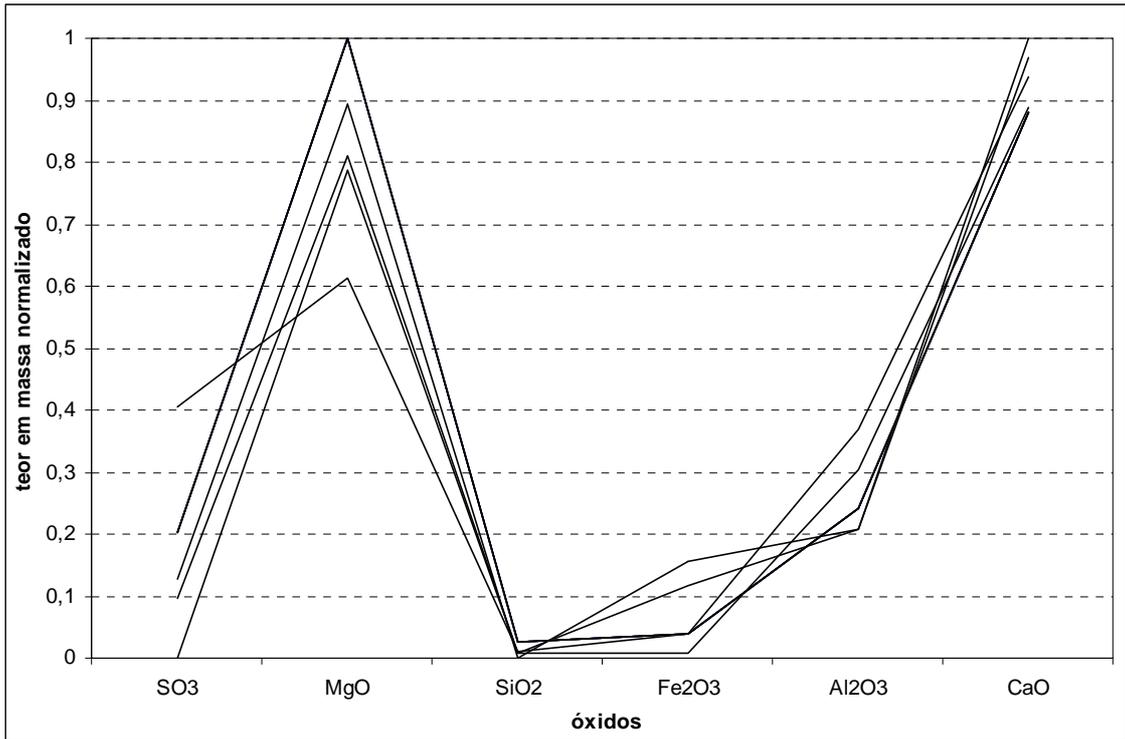


Figura 3.7 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 14 adições do tipo “cimentantes” [24]. Todas as curvas são escória de alto forno.

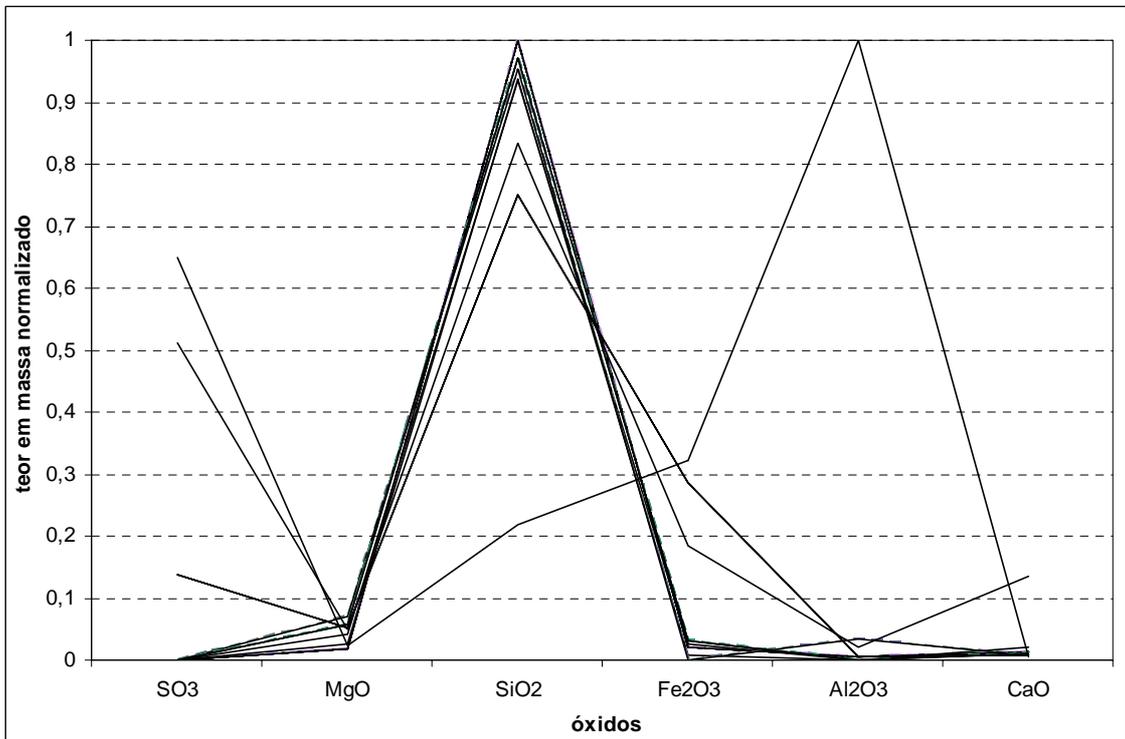


Figura 3.8 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 28 adições de “pozolana altamente reativa” [24]. Todas as curvas são microsílica, com exceção daquela com pico no Al₂O₃, que é metacaulim.

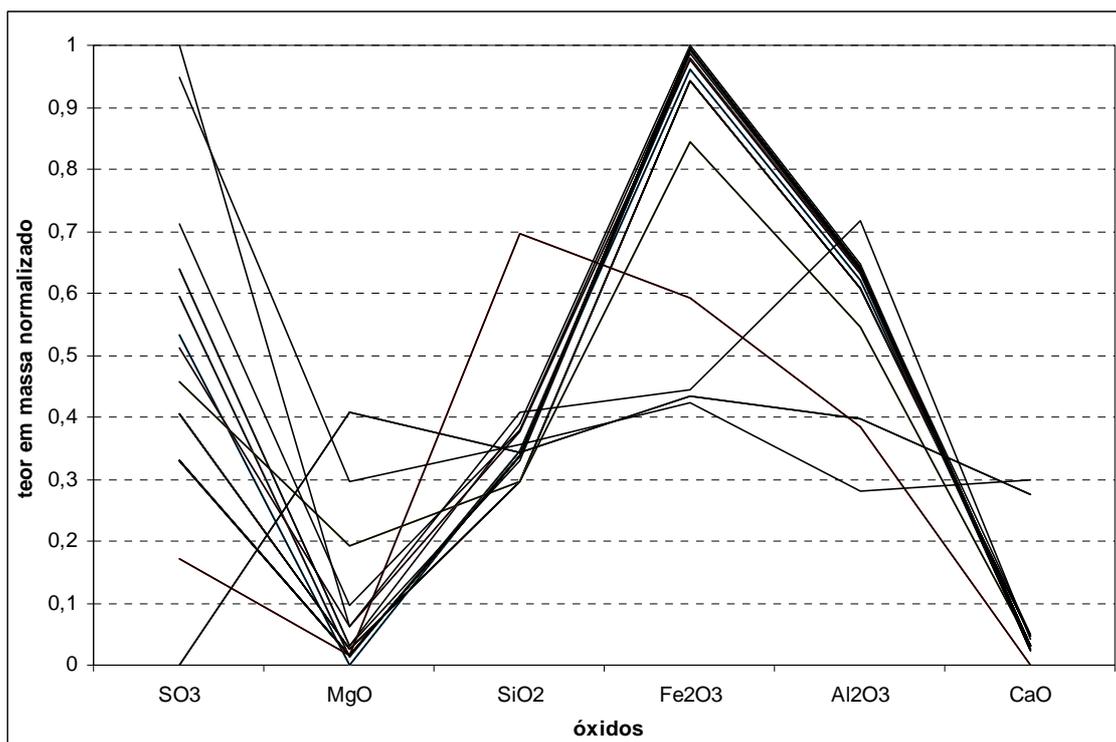


Figura 3.9 - Diagrama de poligonais igual ao da Figura 3.6, porém mostrando apenas as 48 adições de “pozolana comum” [24]. Todas as curvas com teor normalizado de Fe₂O₃ acima de 0,7 são cinzas volantes.

O estudo descrito acima foi base também para o preenchimento de composições químicas de pré-adições no cimento. O banco de dados não informa a composição química de nenhuma pré-adição, nos 51 ensaios em que consta algum percentual de pré-adição no cimento. Porém em 17 desses 51 ensaios, a composição química da pré-adição já está implícita na composição química do cimento. Em outras palavras, os valores na composição química do cimento consideram a presença da pré-adição. Já nos 34 ensaios restantes, verificou-se que a composição química do cimento refere-se a apenas uma fração do cimento, ignorando a pré-adição.

Em função do acima exposto, todos os 51 cimentos com pré-adição foram divididos em dois casos:

- A composição química considera a pré-adição.
- A composição química ignora a pré-adição.

Para identificar em qual caso se enquadrava cada cimento, os 51 ensaios foram divididos em grupos tais que um só tipo de cimento era empregado para todos os ensaios do grupo. Porém num mesmo grupo havia diferentes percentuais de pré-adição nos cimentos. Quando a composição química de um cimento era a mesma nos outros cimentos do grupo, significava que a variação no percentual de pré-adição não fazia

variar a composição química do cimento. Como isso é impossível, ficava constatado o enquadramento dos cimentos no segundo caso, isto é, a composição química ignora a pré-adição.

Nos casos em que a composição química do cimento ignorava a pré-adição, foi preenchida a composição química da pré-adição com teores médios para os óxidos, em função do tipo de pré-adição, e com base no estudo ilustrado nas figuras Figura 3.6 até Figura 3.9.

3.2 - PREPARAÇÃO DOS ALVOS DO MODELO

Os alvos do modelo são um conjunto de vetores, cada um deles representando a curva de elevação adiabática de um ensaio do banco de dados. Tal conjunto fornece o alvo do par entrada-alvo de cada ensaio, dando suporte ao cálculo de RNAs para comporem o modelo.

3.2.1 – Variáveis componentes do vetor alvo – parte 1

Para o cálculo da RNA através da retropropagação, os vetores do conjunto de alvos devem ter todos o mesmo número de componentes. Por exemplo, cada vetor poderia ser uma lista com 50 temperaturas da curva de elevação adiabática de um ensaio.

A quantidade de informação disponível no banco de dados limita o número de componentes a ser adotado para os vetores alvos. Pois quanto mais componentes, mais complexo deve ser o modelo, e mais informação é necessária no banco de dados para a elaboração do modelo. Por isso adotam-se como componentes do vetor alvo os parâmetros de uma função que se ajuste à curva de elevação adiabática experimental.

Neste trabalho, adotou-se um vetor alvo com sete componentes (sete parâmetros), o qual é calculado em função de um outro vetor com seis componentes. O vetor com seis componentes adotado para cada ensaio foi conforme a equação (3.1).

$$v_A = (T_1, k_1, n_1, T_2, k_2, n_2), \quad (3.1)$$

onde

v_A é o vetor com seis componentes relativo ao ensaio,

$T_1, k_1, n_1, T_2, k_2, n_2$ são os parâmetros da função da equação (3.2).

Função *hill duplo*:

$$\Delta T = T_1 \cdot t^{n_1} / (k_1^{n_1} + t^{n_1}) + T_2 \cdot t^{n_2} / (k_2^{n_2} + t^{n_2}), \quad (3.2)$$

onde

ΔT é a elevação de temperatura do concreto no tempo de hidratação t ,
 $T_1, k_1, n_1, T_2, k_2, n_2$ são os parâmetros que definem uma curva de ajuste para os pontos experimentais da curva de elevação adiabática de um ensaio.

A função de ajuste da equação (3.2) é uma evolução de outra função de ajuste conhecida como *hill* [15]. A função *hill duplo* nada mais é que a soma de duas funções *hill*, como mostram as figuras Figura 3.14 e Figura 3.15.

Função *hill*:

$$\Delta T = T_1 \cdot t^{n_1} / (k_1^{n_1} + t^{n_1}) , \quad (3.3)$$

ΔT é a elevação de temperatura do concreto no tempo de hidratação t ,
 T_1, k_1, n_1 são os parâmetros que definem uma curva de ajuste para os pontos experimentais da curva de elevação adiabática de um ensaio.

As figuras seguintes ilustram a influência dos parâmetros k_1 e n_1 no formato da curva de ajuste tipo *hill*. As figuras mostram curvas com diferentes valores para os parâmetros k_1 e n_1 . Os valores escolhidos para os parâmetros são baseados nas curvas experimentais do banco de dados.

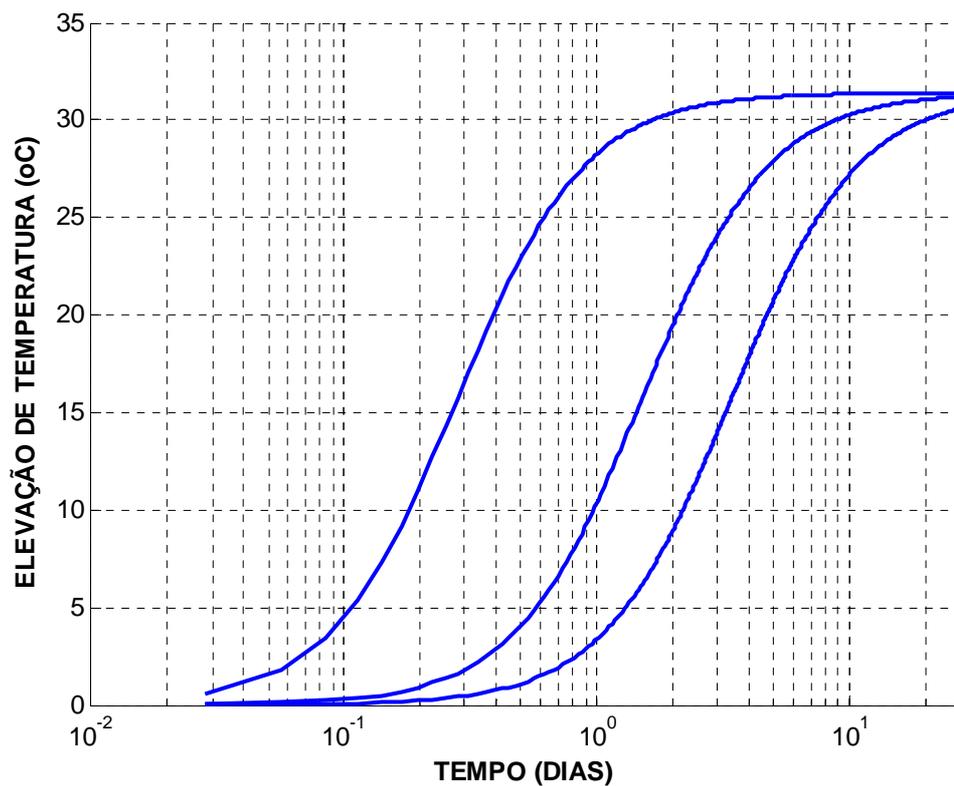
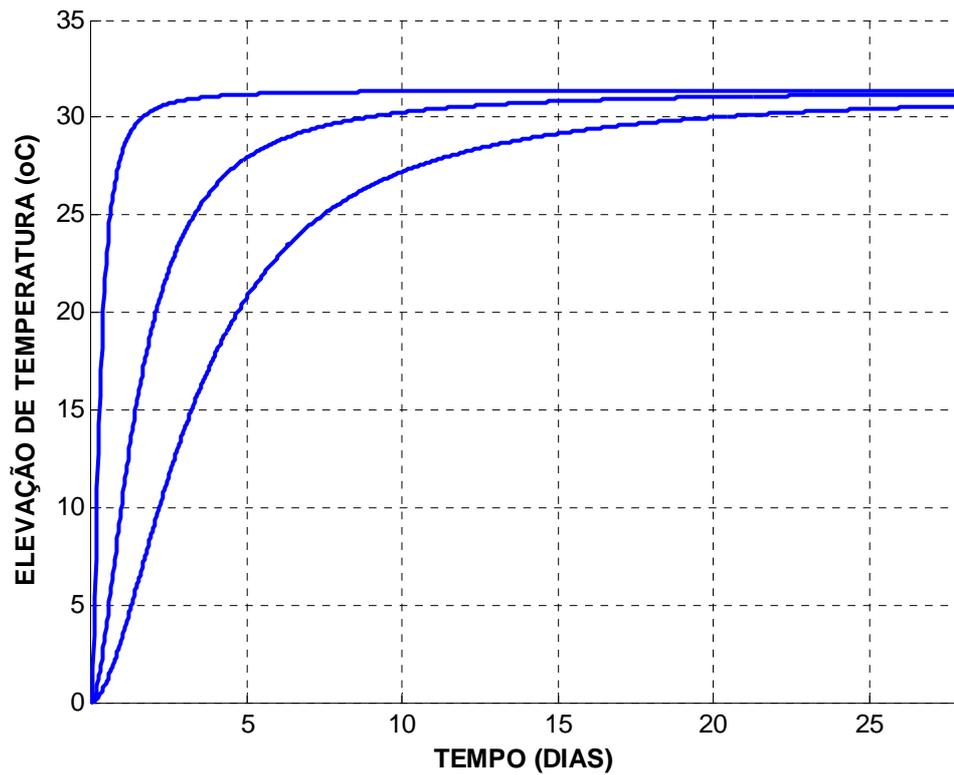


Figura 3.10 – Influência do parâmetro k_1 no formato da curva de ajuste tipo *hill*. Os valores de k_1 nas curvas são respectivamente: 0,28; 1,50 e 3,39. Tais valores vêm das curvas experimentais do banco de dados. Eles são: o mínimo, a média e a média somada ao desvio padrão. Os valores de T_1 e n_1 são 31,4 e 1,73 nas três curvas.

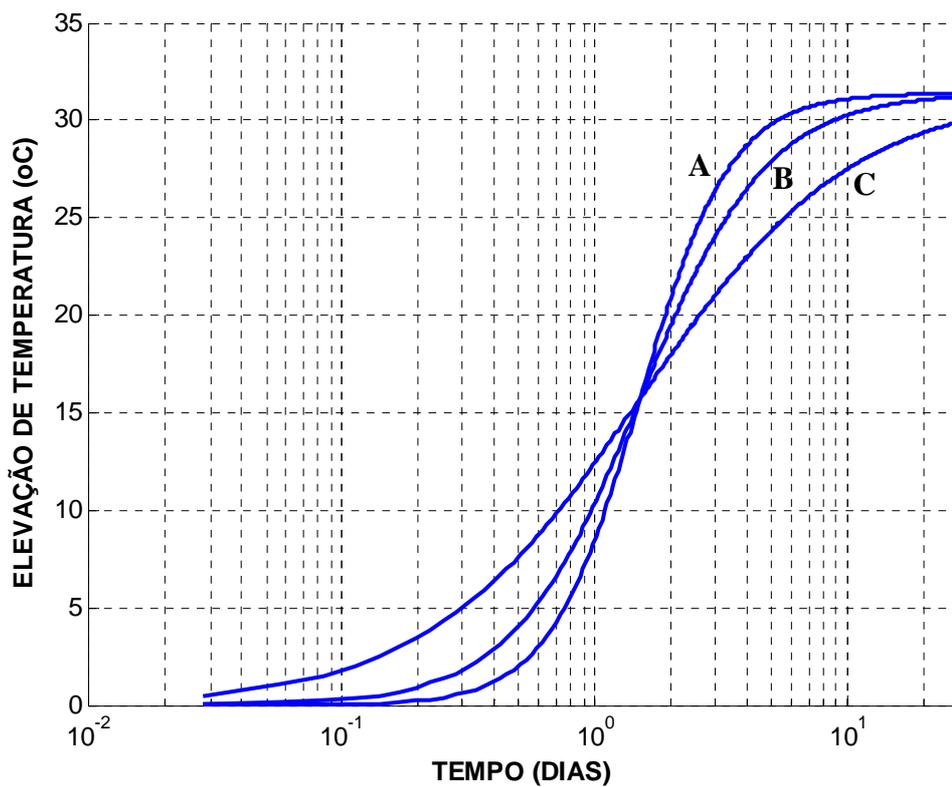
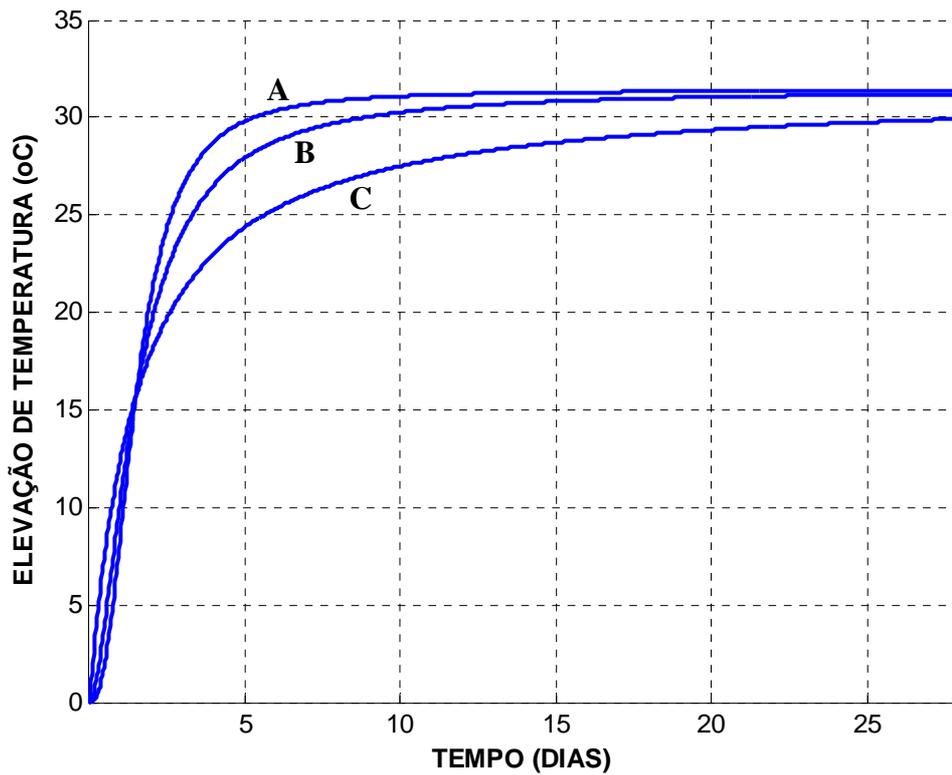


Figura 3.11 – Influência do parâmetro n_1 no formato da curva de ajuste tipo *hill*. Os valores de n_1 nas curvas A, B e C são respectivamente: 1,03; 1,73 e 2,43. Tais valores vêm das curvas experimentais do banco de dados. Eles são: a média subtraída do desvio padrão, a média e a média somada ao desvio padrão. Os valores de T_1 e k_1 são 31,4 e 1,50 nas três curvas.

A Tabela 3.1 compara os desempenhos das funções *hill* e *hill duplo* na geração de curvas de ajuste para todos os ensaios incluídos neste trabalho (conforme item 3.1.1).

A comparação é feita através do parâmetro de erro RMSTE [13], dado pela equação (3.4).

$$RMSTE = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{k=1}^N (T_{EXP}(t_k) - T_{CALC}(t_k))^2} \quad , \quad (3.4)$$

onde

RMSTE é a raiz do erro de temperatura quadrático médio;

N é a quantidade de pontos registrados na curva experimental de elevação adiabática;

t_k é o tempo de hidratação no ponto de número k , da curva experimental de elevação adiabática;

T_{EXP} é a elevação de temperatura no tempo t_k , num ponto registrado da curva experimental de elevação adiabática;

T_{CALC} é a elevação de temperatura dada pela curva de ajuste no tempo t_k .

Tabela 3.1 – Comparação entre os ajustes *hill* e *hill duplo*.

		<i>hill</i>	<i>hill duplo</i>
RMSTE (°C)	média entre os ensaios	0,48	0,15
	média + desvio padrão	0,84	0,26
	máximo entre os ensaios	1,80	0,61

As figuras Figura 3.12 até Figura 3.15 mostram o melhor e o pior ajuste para as funções *hill* e *hill duplo*.

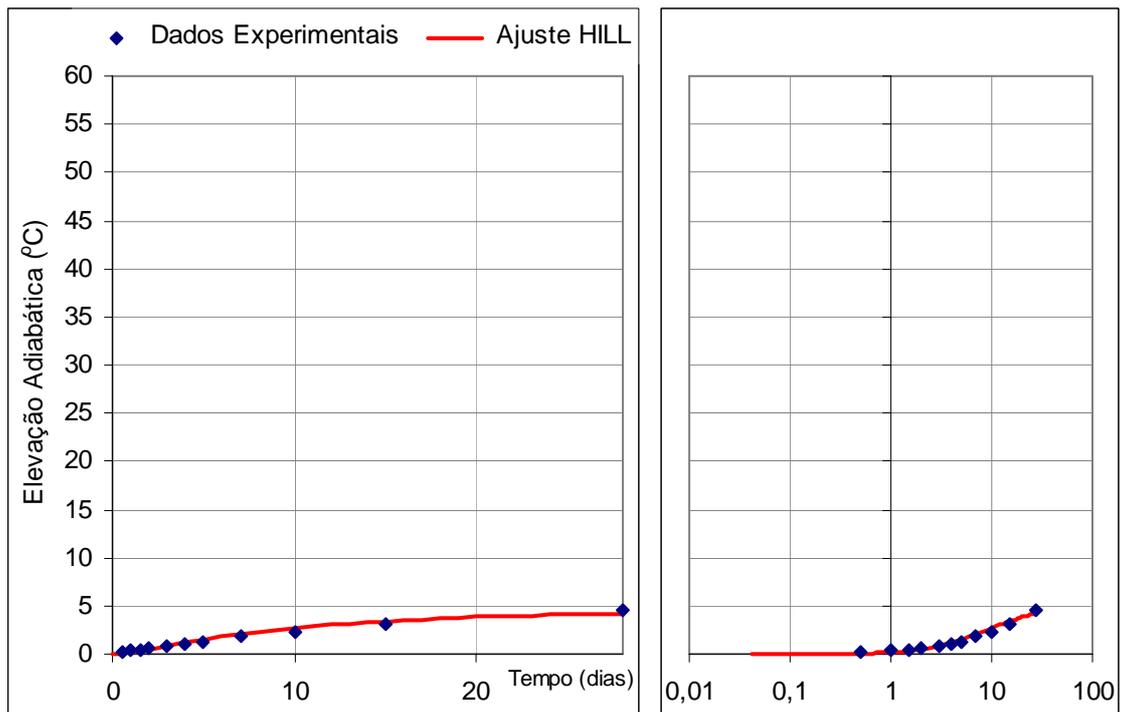


Figura 3.12 – Melhor ajuste da função *hill*. RMSTE = 0,004 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 121.

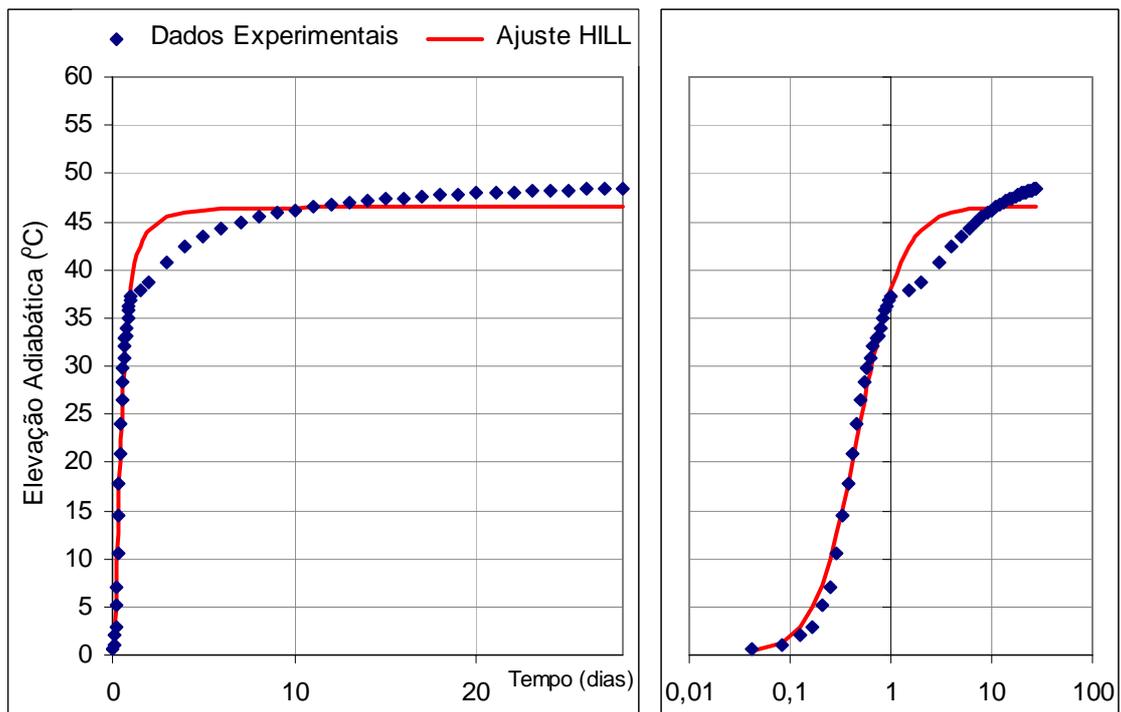


Figura 3.13 – Pior ajuste da função *hill*. RMSTE = 1,80 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 143.

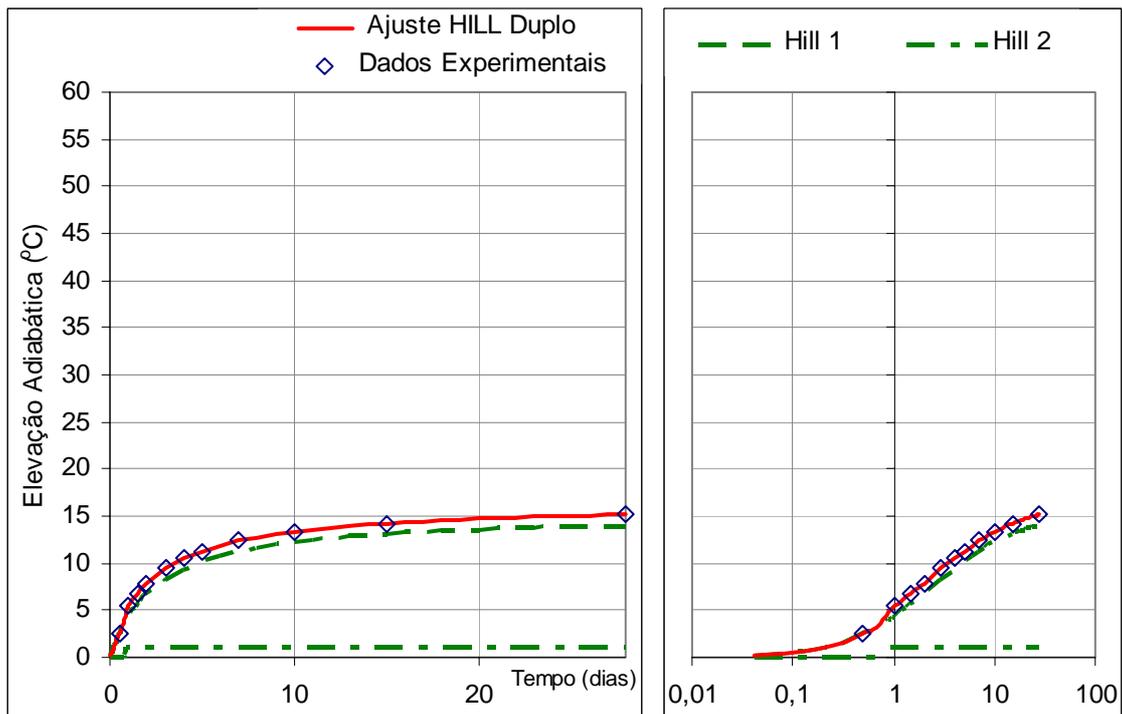


Figura 3.14 – Melhor ajuste da função *hill duplo*. RMSTE = 0,001 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 141.

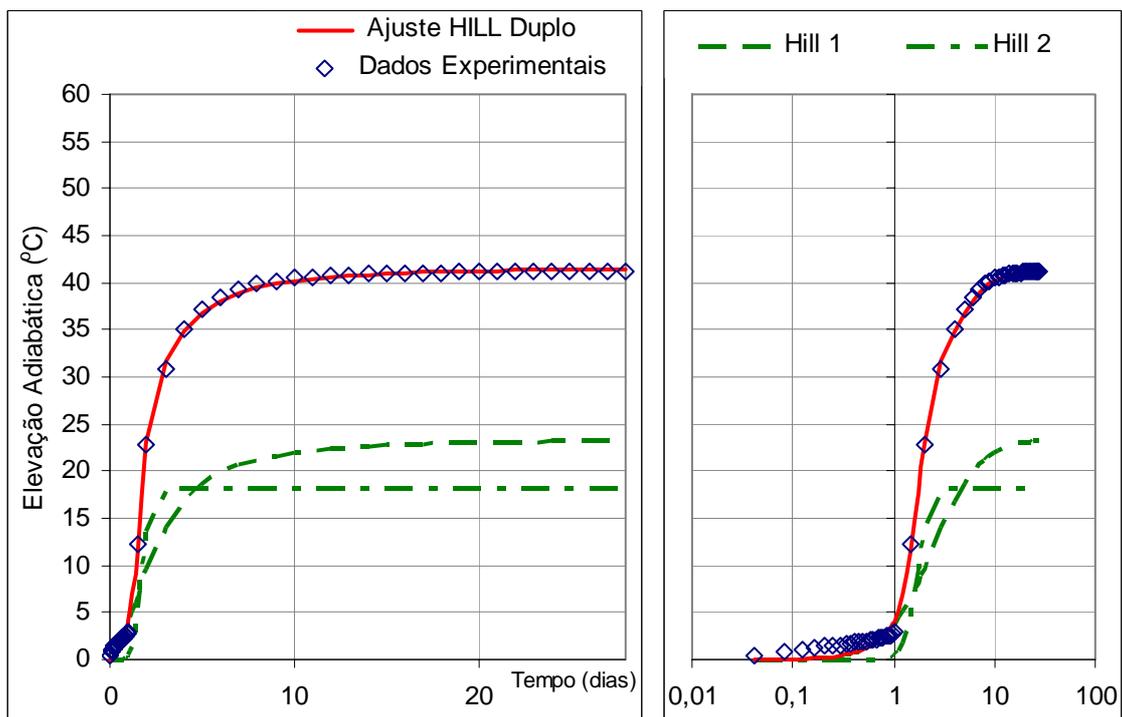


Figura 3.15 – Pior ajuste da função *hill duplo*. RMSTE = 0,61 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente. Trata-se do ensaio 082.

Como ilustram as figuras anteriores, o ajuste *hill duplo* se adequou bem aos dados. O desempenho do ajuste *hill duplo* foi melhor que o do ajuste *hill* e outros ajustes testados neste trabalho e em trabalhos anteriores [15]. Na realidade, a intenção

inicial neste trabalho foi compor os vetores alvos conforme a equação (3.1). Seriam vetores alvos com seis componentes: os seis parâmetros do ajuste *hill duplo*. Porém partiu-se para uma outra solução pelos motivos explicados no item 3.2.2.

3.2.2 – O problema do ajuste *hill duplo*

Neste trabalho, busca-se uma função (ou modelo) f^* que equivalha a uma outra f desconhecida, onde f é a função que liga perfeitamente um projeto de concreto à sua curva de elevação adiabática de temperatura. Para isso aplica-se um método empregando redes neurais artificiais. Em função desse método, foi preciso adotar uma f ligeiramente diferente do descrito acima. Ao invés da curva de elevação adiabática, a função f responde parâmetros que descrevem a curva através de uma função de ajuste (item 3.2.1).

O método com redes neurais aplicado tem a seguinte limitação: É preciso que a função desconhecida f seja suave [19]. Em outras palavras, é preciso que projetos semelhantes de concreto gerem parâmetros semelhantes para a curva de elevação adiabática. Porém isso não ocorre quando se usa o vetor da equação (3.1) como alvo, ou seja, quando se usam os parâmetros do ajuste *hill duplo* como alvo. As explicações a seguir esclarecerão por quê.

No ensaio 014 foram observados dois ajustes *hill duplo* com parâmetros totalmente distintos para a curva experimental, sendo ambos os ajustes bem adaptados aos dados. A Tabela 3.2 mostra os valores. As figuras Figura 3.15 e Figura 3.17 mostram os ajustes.

Tabela 3.2 – Dois exemplos de ajuste *hill duplo* para a curva do ensaio 014. O parâmetro RMSTE é conforme a equação (3.4).

	T_1	k_1	n_1	T_2	k_2	n_2	RMSTE
ajuste 1	38,6032	2,26483	1,73611	5,15843	0,953075	11,4397	0,27 °C
ajuste 2	29,6957	1,33037	2,48342	13,3522	4,80901	2,91634	0,39 °C

A ocorrência acima descrita se repete para vários outros ensaios além do 014. Com isso, percebe-se que o ajuste *hill duplo* é instável em seus parâmetros. Em outras palavras, é possível que um projeto de concreto muito semelhante ao 014 tenha como melhor ajuste *hill duplo* algo totalmente diferente dos parâmetros do ajuste 1 da Tabela 3.2.

Pelo acima exposto, tem-se que o uso do vetor da equação (3.1) como alvo faz de f uma função não suave, o que é um obstáculo para a elaboração do modelo, como explicado antes.

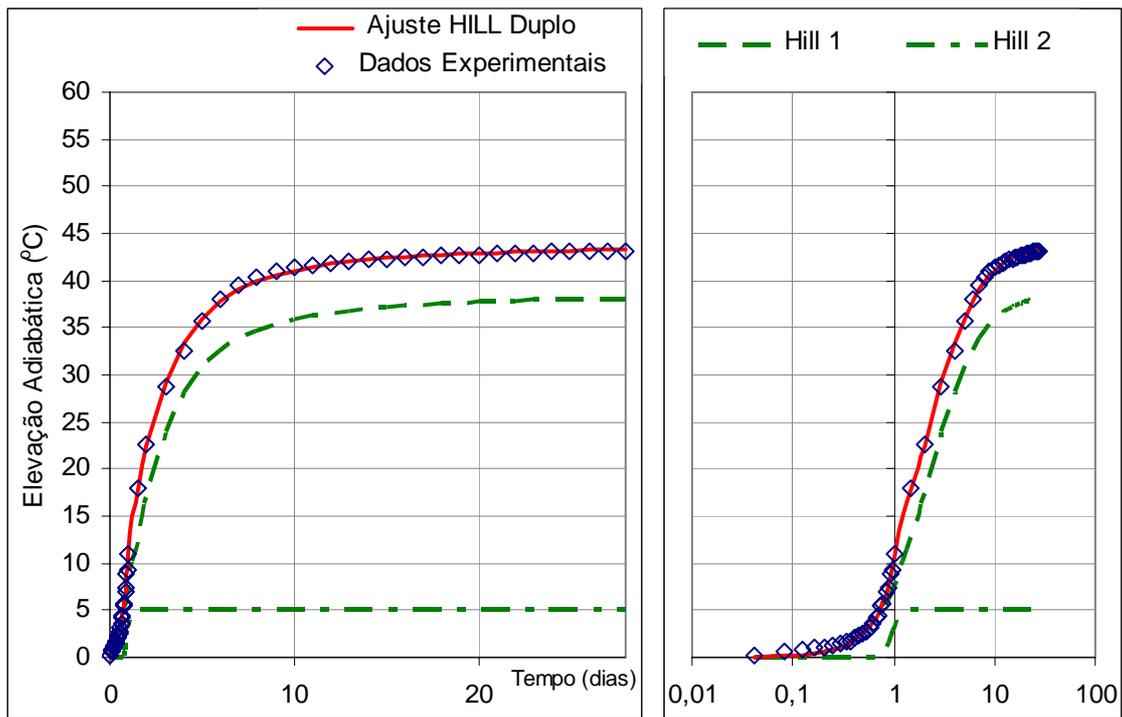


Figura 3.16 – Ajuste possível da função *hill duplo* no ensaio 014. RMSTE = 0,27 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente.

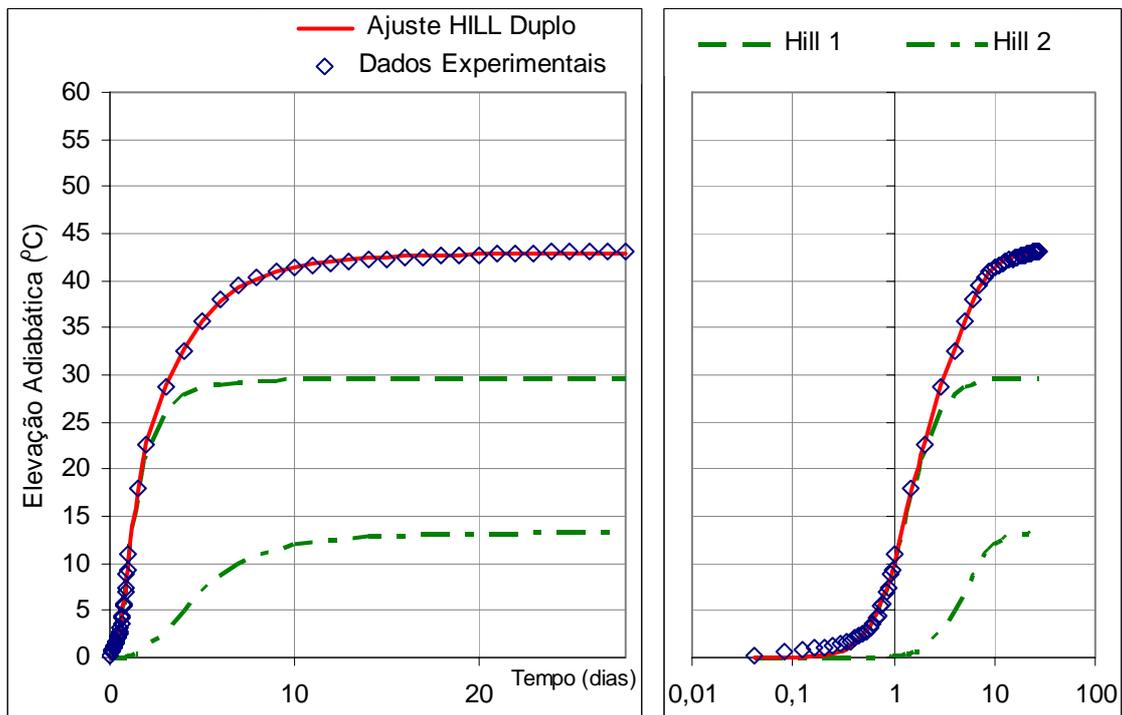


Figura 3.17 – Ajuste possível da função *hill duplo* no ensaio 014. RMSTE = 0,39 °C. Abscissas em escala linear e logarítmica, respectivamente.

3.2.3 – Variáveis componentes do vetor alvo – parte 2

Neste trabalho, adotou-se um vetor alvo com sete componentes. O vetor alvo adotado para cada ensaio foi conforme a equação (3.5), ao invés da equação (3.1).

Procedeu-se assim com o intuito de contornar o problema descrito no item 3.2.2 sem desperdiçar a boa adaptação do ajuste *hill duplo* às curvas experimentais.

$$\mathbf{v}_A = (t_{\text{TOPO}} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , T_6) , \quad (3.5)$$

onde

\mathbf{v}_A é o vetor alvo do ensaio,

t_{TOPO} é o tempo de hidratação onde a curva de elevação adiabática atinge 97,32% da elevação final de temperatura (“topo” da curva),

$T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , T_6$ são as elevações de temperatura nos tempos de hidratação equivalentes às seguintes frações de t_{TOPO} , respectivamente:

6,06%; 9,36%; 13,70%; 20,48%; 34,17%; 100%,

sendo que, para cada ensaio, as variáveis $t_{\text{TOPO}} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5$ e T_6 são calculadas em função da curva de ajuste *hill duplo* do ensaio, definida pelos parâmetros presentes no vetor da equação (3.1).

Com a equação (3.5), tem-se que, para cada ensaio, o vetor alvo define seis pontos da curva de ajuste *hill duplo* do ensaio. Com seis pontos é possível calcular os seis parâmetros do ajuste *hill duplo* do ensaio. Portanto os sete parâmetros da equação (3.5) determinam uma curva de elevação adiabática de modo tão realista quanto os seis parâmetros do ajuste *hill duplo* da equação (3.2).

Com o vetor alvo dado pela equação (3.5), tem-se que função f (item 3.2.2) não mais responde os seis parâmetros do ajuste *hill duplo*, mas sim os sete parâmetros da equação (3.5). Com isso fica contornado o problema descrito no item 3.2.2, uma vez que os parâmetros da equação (3.5) não variam de forma errática entre diferentes projetos de concreto.

Os valores percentuais citados na equação (3.5) (97,32%; 6,06%; 9,36%; 13,70%; 20,48%; 34,17%) foram escolhidos de modo a maximizar o parâmetro dado pela equação (3.6). A expressão da equação (3.6) é uma função $g(\mathbf{x})$ onde \mathbf{x} é um vetor com seis valores percentuais.

$$(\text{espaçamento médio de temperatura}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \text{mínimo}_{k=1}^6 (T_k - T_{k-1}) , \quad (3.6)$$

onde

N é a quantidade de ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1)

$T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , T_6$ são elevações de temperatura do ensaio i , calculadas conforme a equação (3.5), para seis tempos de hidratação do ensaio, definidos conforme

a equação (3.5), porém com um dado conjunto de valores percentuais não necessariamente iguais àqueles seis da equação (3.5),

T_0 é igual a zero.

Maximizar o parâmetro dado pela equação (3.6) significa buscar tempos de hidratação entre os quais haja de fato variações significativas de temperatura, independentemente do ensaio. Isso não ocorre nos tempos de hidratação após a estabilização de temperatura.

A maximização do parâmetro da equação (3.6) foi feita com o aplicativo Matlab[®], versão 7.0.0.19920 (R14), de 6 de maio de 2004. Empregou-se uma sub-rotina do aplicativo chamada “fminsearch”.

Como dito na equação (3.5), as variáveis t_{TOPO} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 e T_6 , nas equações (3.5) e (3.6), foram calculadas para cada ensaio através da curva de ajuste *hill duplo* do ensaio. Tais variáveis também poderiam ter sido calculadas através de interpolação linear entre os pontos da curva experimental do ensaio. Essa segunda opção seria mais precisa nos trechos de curva onde o ajuste *hill duplo* se descola dos pontos experimentais. Mas no restante dos trechos, a segunda opção seria menos precisa, pois o ajuste *hill duplo* passa em meio aos pontos experimentais, descrevendo uma curva que foge do erro de medição de cada ponto. Como o ajuste *hill duplo* apresentou grande precisão (item 3.2.1), foi mantido o cálculo das variáveis t_{TOPO} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 e T_6 através da curva de ajuste *hill duplo* do ensaio.

3.2.4 - Comparação gráfica entre as duas opções de vetor alvo

As figuras a seguir mostram a variação do vetor alvo entre todos os ensaios incluídos neste trabalho, primeiro considerando o vetor alvo conforme a equação (3.1), depois conforme a equação (3.5).

Nas figuras Figura 3.19 e Figura 3.21, cada linha poligonal representa um vetor alvo. A cor da linha tem significado: Quanto mais escura, maior é a distância Mahalanobis (item 2.7) do vetor alvo associado à linha.

Na Figura 3.18, os histogramas dos parâmetros k_1 e k_2 representam um obstáculo para a elaboração do modelo. Pois as redes neurais empregadas dificilmente conseguem prever adequadamente os valores altos de k_1 e k_2 . Os histogramas citados demonstram uma forte tendência de valores baixos para k_1 e k_2 . Com isso, as RNAs tendem a errar para menos os valores altos de k_1 e k_2 , porque elas acabam seguindo a tendência de valores baixos demonstrada pelo conjunto de dados.

Comparando os histogramas da Figura 3.18 com os da Figura 3.20, percebe-se que o problema descrito acima é contornado quando se adota o vetor alvo conforme a equação (3.5) ao invés da equação (3.1) (ajuste *hill duplo*). Além desse problema, a equação (3.5) contorna também o problema exposto no item 3.2.2, como já explicado antes.

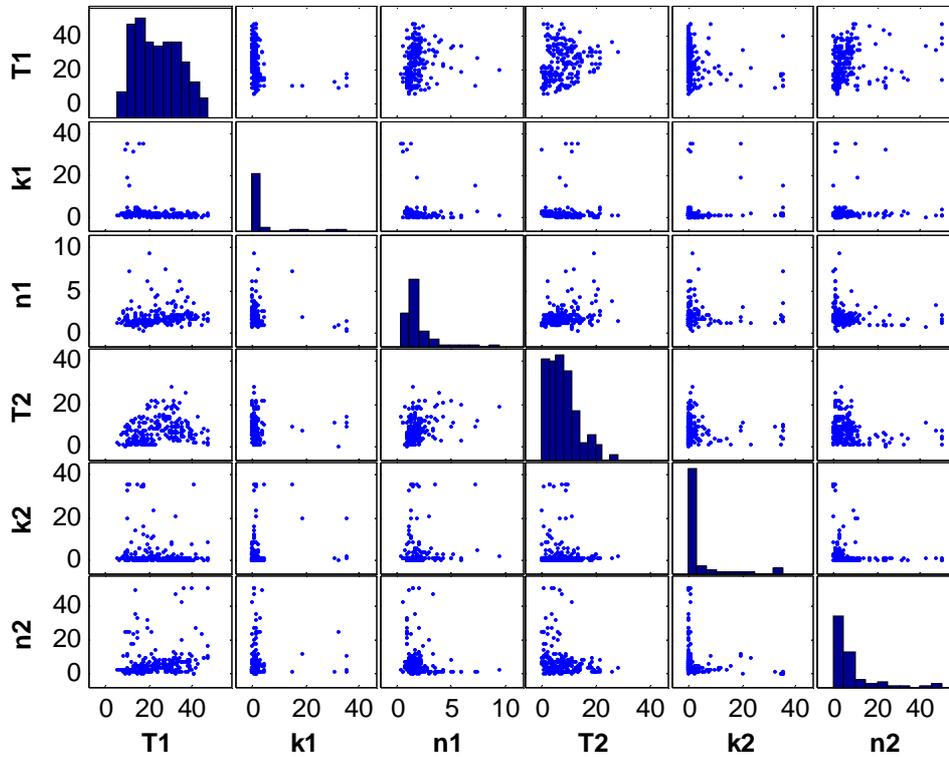


Figura 3.18 – Gráficos de correlação e histogramas dos parâmetros do ajuste *hill duplo*, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.

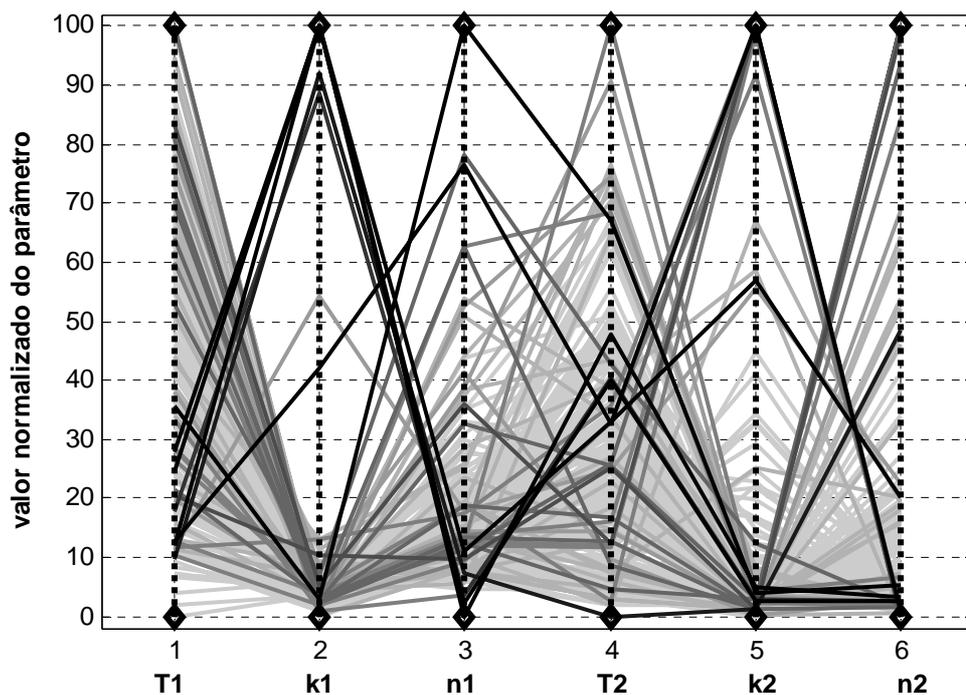


Figura 3.19 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.6, com a distância Mahalanobis dada pela cor da linha. O diagrama engloba todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa o ajuste *hill duplo* de um ensaio.

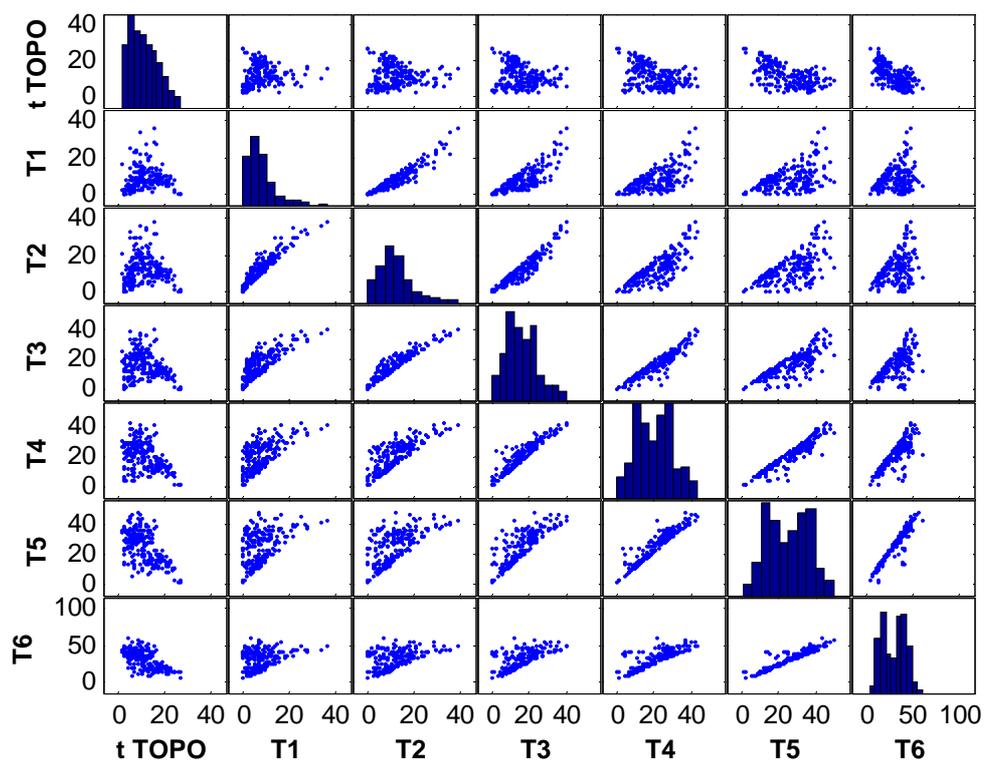


Figura 3.20 – Gráficos de correlação e histogramas dos parâmetros da equação (3.5), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.

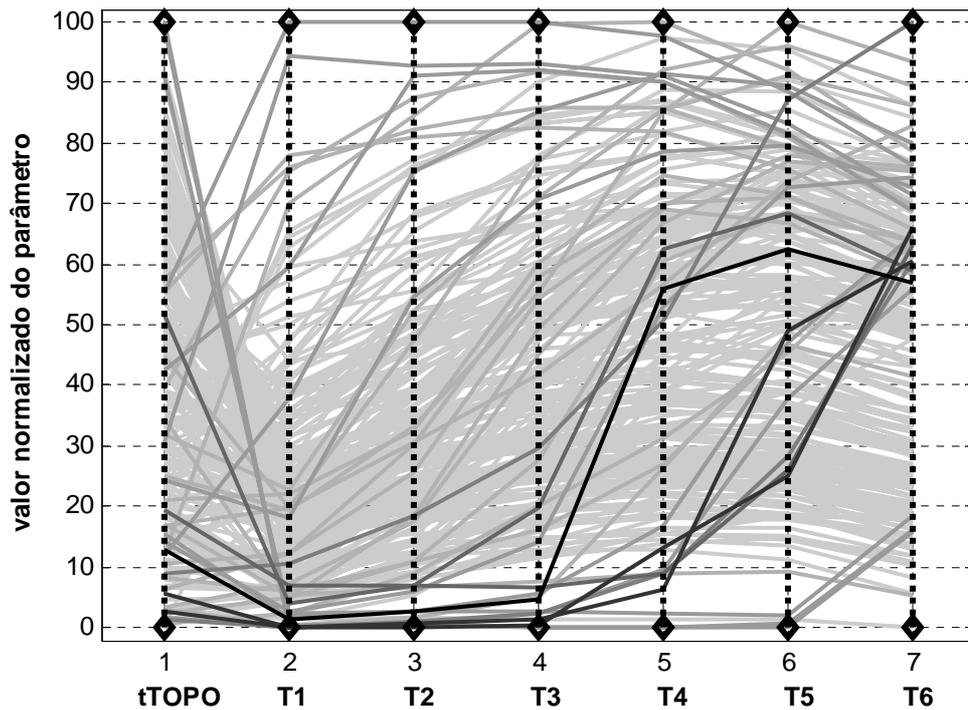


Figura 3.21 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.6, com a distância Mahalanobis dada pela cor da linha. O diagrama engloba todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa o vetor alvo de um ensaio segundo a equação (3.5).

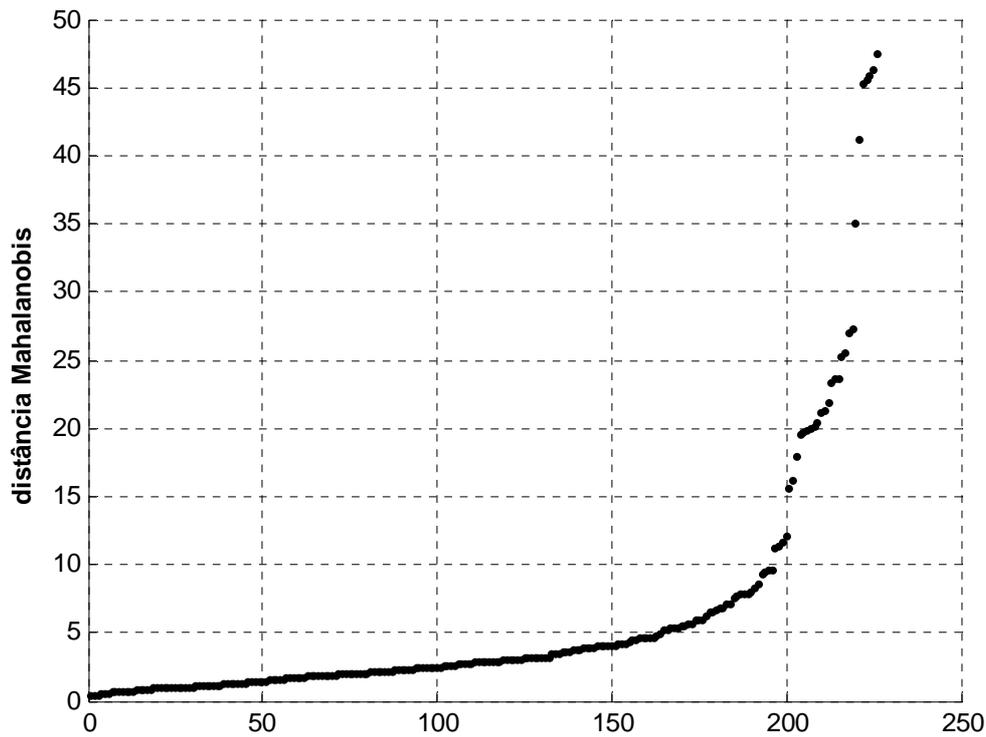


Figura 3.22 – Distâncias Mahalanobis dos vetores alvos segundo a equação (3.1) (ajuste *hill duplo*), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.

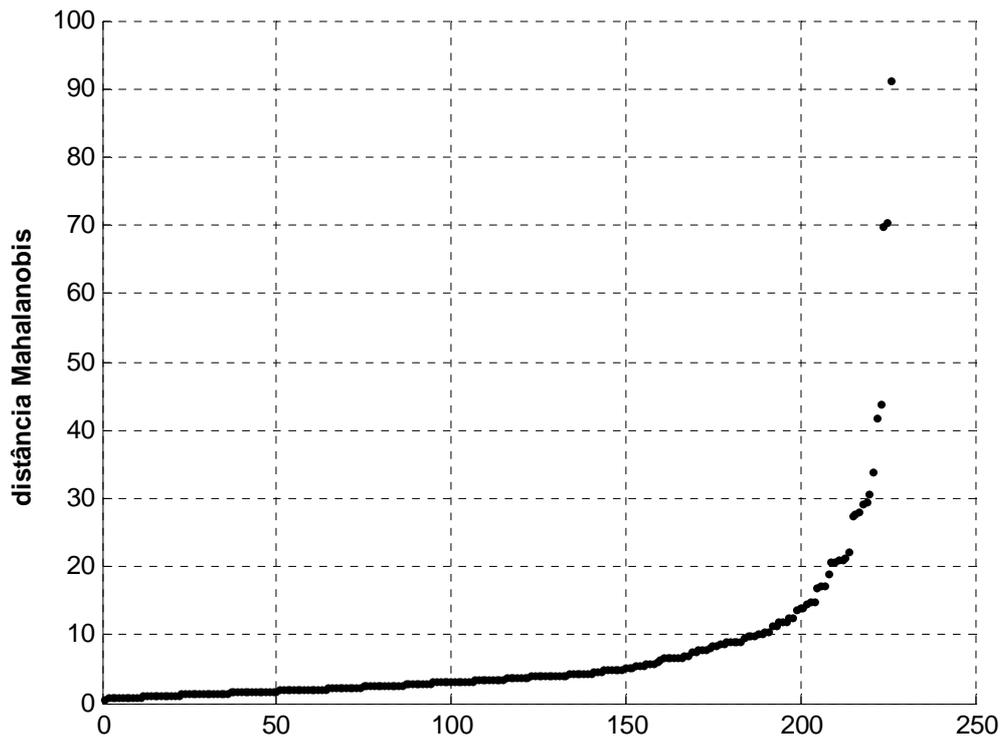


Figura 3.23 – Distâncias Mahalanobis dos vetores alvos segundo a equação (3.5), englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho.

3.3 – PREPARAÇÃO DOS VETORES DE APRENDIZAGEM DO MODELO

Os vetores de aprendizagem do modelo representam cada um o projeto de concreto de um ensaio do banco de dados. Cada vetor de aprendizagem é a entrada do par entrada-alvo de um ensaio do banco de dados. Isso dá suporte ao cálculo de RNAs para comporem o modelo.

Neste trabalho foram testados três tipos de vetor de aprendizagem, os quais serão tratados mais à frente nos itens subseqüentes. Os três tipos possuem as seguintes componentes em comum, de um total de quinze componentes:

- 1) Quantidade de mineral inerte (kg/m^3);
- 2) Quantidade de água (kg/m^3);
- 3) Concentração de adição química na água (g/L);
- 4) Finura Blaine do material cimentante (cm^2/g);
- 5) Temperatura inicial do concreto (no ato da adição da água, $^{\circ}\text{C}$).

As demais componentes contabilizam quantidades de materiais cimentantes e quantidades dos óxidos principais nesses materiais. Nessa quantificação, as adições ao cimento e as pré-adições no cimento foram classificadas em três tipos [24]:

- Cimentante;
- Pozolana comum;
- Pozolana altamente reativa.

As escórias de alto forno foram classificadas como “cimentante”. Microsílica, cinza de casca de arroz e metacaulim foram classificadas como “pozolana altamente reativa”. Cinza volante e demais pozolanas foram classificadas como “pozolana comum”. Tais classificações foram segundo MEHTA e MONTEIRO [24], com exceção da metacaulim, a qual não recebera classificação no trabalho referenciado. No presente trabalho, a metacaulim foi classificada como “pozolana altamente reativa” porque, de fato, trata-se de uma pozolana com alta reatividade.

Para os três tipos de vetor de aprendizagem, fez-se verificação de *outliers*² no conjunto de vetores através da distância Mahalanobis [13] (item 2.7). As figuras Figura 3.26, Figura 3.29 e Figura 3.32 ilustram o procedimento. Foram excluídos dois ensaios de cada um dos três conjuntos.

Sobre a componente 1 do vetor de aprendizagem, em algumas linhas do banco de dados constava rocha inerte pulverizada como adição ao cimento. Nesses casos o pulverizado foi considerado como parte da massa inerte, e não como adição ao cimento.

Sobre a terceira componente, o trabalho de FARIA [15] usava a massa de adição química, ao invés da concentração na água. Considerou-se que a concentração na água seria um valor mais significativo para o resultado do ensaio. No banco de dados, a quantidade de adição química é dada separada em:

- Incorporadora de ar;
- Retardadora de pega / plastificante.

A quantidade de adição química considerada na terceira componente do vetor de aprendizagem é a soma das quantidades das adições acima. Procedeu-se assim com base em trabalhos anteriores [13] [15], onde a quantidade de adição química considerada no vetor de aprendizagem foi a soma de diferentes tipos de adição química. Como dito no item 2.1, os três tipos de adição química acima têm o efeito de atrasar a evolução das reações de hidratação.

Sobre a quarta componente, a finura Blaine do material cimentante é calculada segundo uma média ponderada, conforme a equação (3.7).

$$F = (m_{\text{CIM}} \cdot F_{\text{CIM}} + m_{\text{ADIC}} \cdot F_{\text{ADIC}}) / m_{\text{TOTAL}}, \quad (3.7)$$

² *Outlier*: Vetor considerado como fora do conjunto de vetores ao qual pertenceria a princípio, pelo fato de ser um vetor muito distante do centro do conjunto.

onde

F é a finura Blaine do material cimentante,

F_{CIM} é a finura Blaine do cimento, calculada como descrito adiante,

F_{ADIC} é a finura Blaine da adição,

m_{CIM} é a massa de cimento por metro cúbico de concreto,

m_{ADIC} é a massa de adição por metro cúbico de concreto,

m_{TOTAL} é a massa total de cimento mais adição por metro cúbico de concreto.

Nas linhas do banco de dados em que a composição química do cimento ignorava a presença de pré-adição (item 3.1.5), considerou-se que a finura do cimento também desconsiderava a pré-adição. Nesses casos a finura Blaine do cimento foi calculada segundo uma média ponderada, levando em conta a finura da pré-adição e a quantidade de pré-adição no cimento.

3.3.1 – Vetor de aprendizagem baseado em FARIA [15]

A partir daqui, este tipo de vetor será chamado de “FAR”, para facilitar a identificação.

Este primeiro tipo de vetor de aprendizagem possui as seguintes componentes além das cinco primeiras já vistas:

- 1) Quantidade de cimento (kg/m^3);
- 2) Quantidade de adição cimentante (kg/m^3);
- 3) Quantidade de adição tipo pozolana comum (kg/m^3);
- 4) Quantidade de adição tipo pozolana altamente reativa (kg/m^3);
- 5) Quantidade de SO_3 no cimento (percentual em massa);
- 6) Quantidade de MgO no cimento (percentual em massa);
- 7) Quantidade de SiO_2 no cimento (percentual em massa);
- 8) Quantidade de Fe_2O_3 no cimento (percentual em massa);
- 9) Quantidade de Al_2O_3 no cimento (percentual em massa);
- 10) Quantidade de CaO no cimento (percentual em massa).

Para concretos sem cimento (apenas com escória de alto forno), cada componente de 5 a 10 acima assumiu um valor médio entre os cimentos do banco de dados. Foi como se houvesse no concreto, além da escória, uma quantidade ínfima de um cimento médio. Os teores de óxido adotados nesses casos para as componentes de 5 a 10 foram, respectivamente: 2,38%; 3,24%; 22,95%; 2,97%; 6,59%; 57,14%.

A Figura 3.24 a seguir é comentada no item 3.3.4.

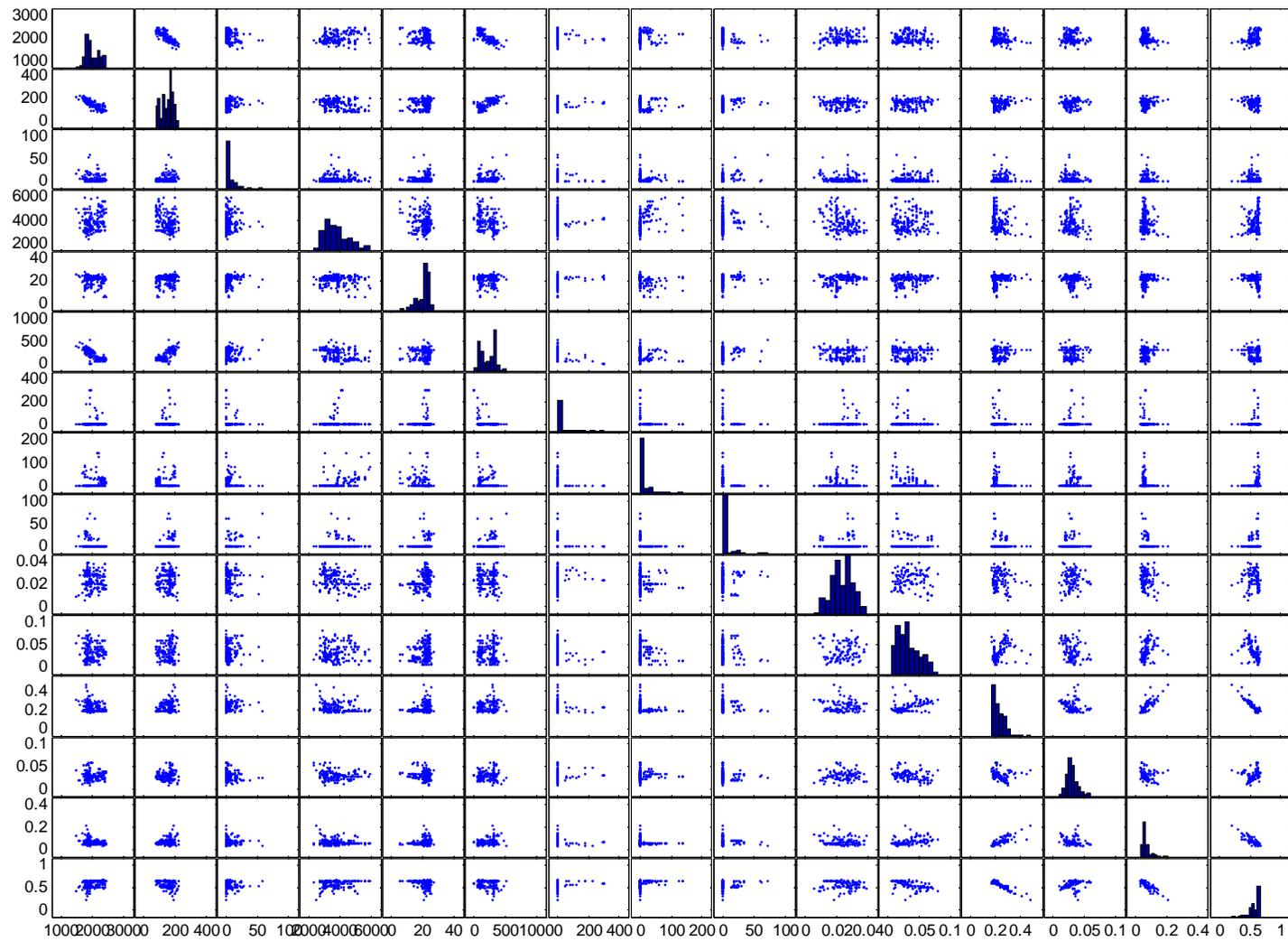


Figura 3.24 - Gráficos de projeção e histogramas das componentes do vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.1, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. A ordem das figuras é igual à ordem da listagem das variáveis no texto (incluindo lista no item 3.3).

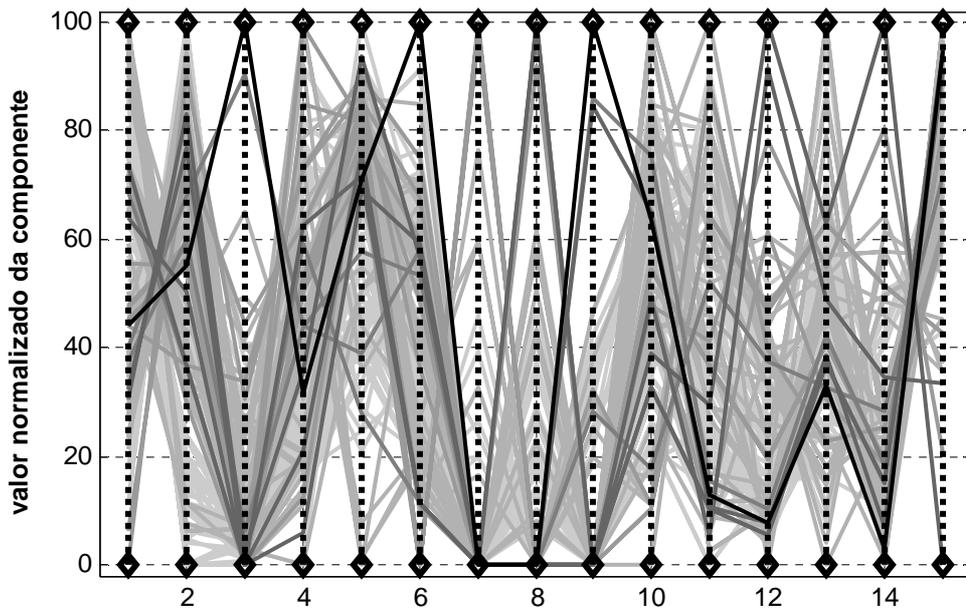


Figura 3.25 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.1. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.

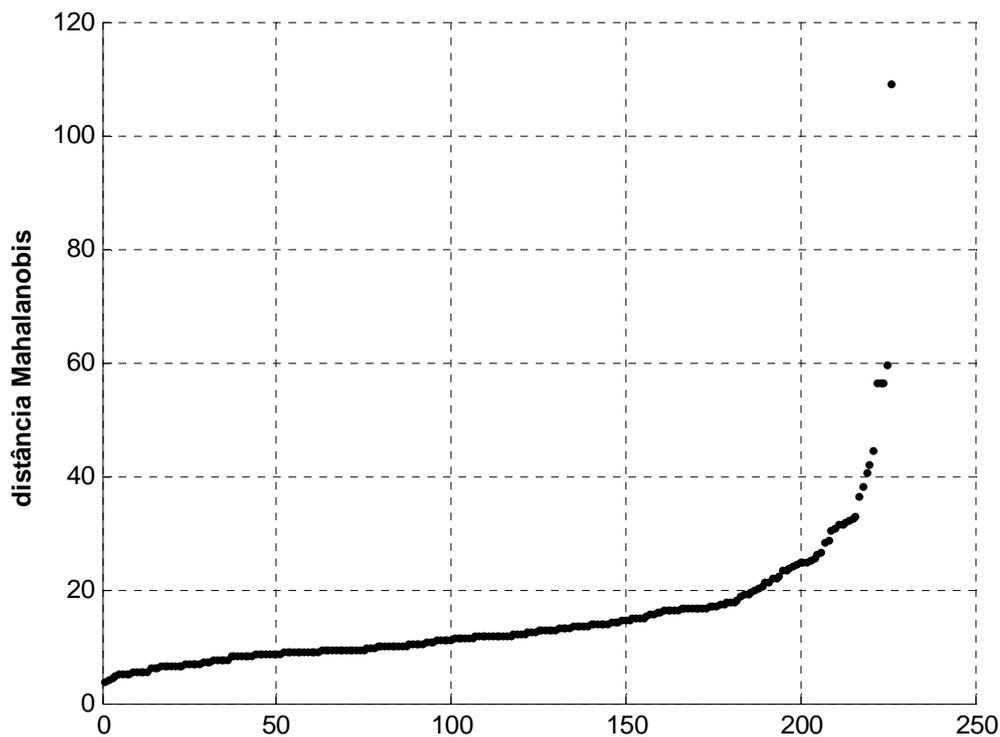


Figura 3.26 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.1.

Como dito anteriormente, em função da verificação de *outliers* da Figura 3.26 excluíram-se dois ensaios do conjunto de vetores de aprendizagem. Porém a Figura 3.26 indica a retirada de apenas um vetor. Mas após a exclusão desse vetor e recálculo das

distâncias Mahalanobis, surge o segundo vetor *outlier* no gráfico. No item 3.5.1, há o gráfico da Figura 3.26 sem os dois *outliers*.

3.3.2 – Vetor de aprendizagem considerando as massas dos óxidos

A partir daqui, este tipo de vetor será chamado de “MOX” (massas dos óxidos), para facilitar a identificação.

Neste tipo, todas as pré-adições em cimentos foram somadas às adições e contabilizadas em conjunto como “adição”. As componentes do vetor, além das cinco já vistas, são:

- 1) Fração de adição cimentante no material cimentante;
- 2) Fração de adição tipo pozolana comum no material cimentante;
- 3) Fração de adição tipo pozolana altamente reativa no material cimentante;
- 4) Quantidade de SO_3 no material cimentante (kg/m^3);
- 5) Quantidade de MgO no material cimentante (kg/m^3);
- 6) Quantidade de SiO_2 no material cimentante (kg/m^3);
- 7) Quantidade de Fe_2O_3 no material cimentante (kg/m^3);
- 8) Quantidade de Al_2O_3 no material cimentante (kg/m^3);
- 9) Quantidade de CaO no material cimentante (kg/m^3);
- 10) Quantidade de outros óxidos no material cimentante (kg/m^3).

A Figura 3.27 a seguir é comentada no item 3.3.4.

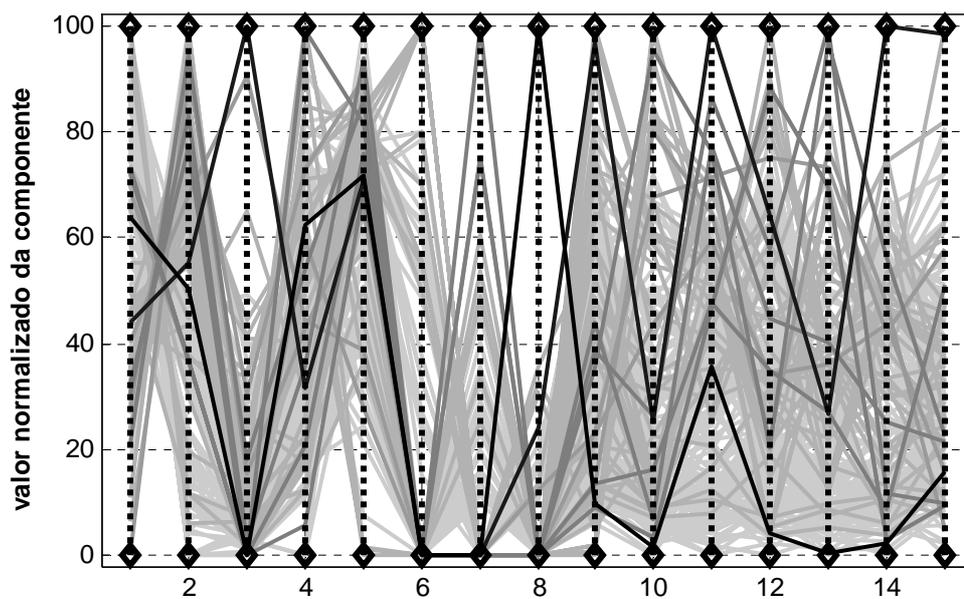


Figura 3.28 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.2. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.

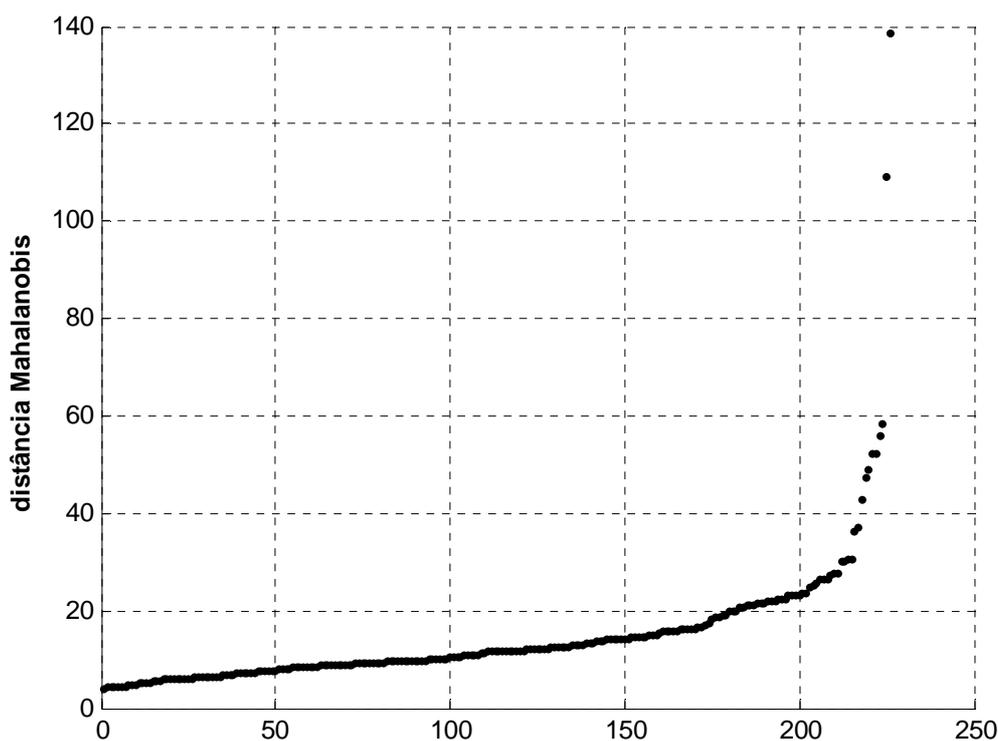


Figura 3.29 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.2.

Mais à frente, no item 3.5.1, há o gráfico da Figura 3.29 sem dois *outliers*.

3.3.3 – Vetor de aprendizagem considerando os percentuais dos óxidos

A partir daqui, este tipo de vetor será chamado de “POX” (percentuais dos óxidos), para facilitar a identificação.

Neste tipo, todas as pré-adições em cimentos foram somadas às adições e contabilizadas em conjunto como “adição”. As componentes do vetor, além das cinco já vistas, são:

- 1) Massa total de material cimentante (kg/m^3);
- 2) Fração de adição cimentante no material cimentante;
- 3) Fração de adição tipo pozolana comum no material cimentante;
- 4) Fração de adição tipo pozolana altamente reativa no material cimentante;
- 5) Quantidade de SO_3 no material cimentante (percentual em massa);
- 6) Quantidade de MgO no material cimentante (percentual em massa);
- 7) Quantidade de SiO_2 no material cimentante (percentual em massa);
- 8) Quantidade de Fe_2O_3 no material cimentante (percentual em massa);
- 9) Quantidade de Al_2O_3 no material cimentante (percentual em massa);
- 10) Quantidade de CaO no material cimentante (percentual em massa).

A Figura 3.30 a seguir é comentada no item 3.3.4.

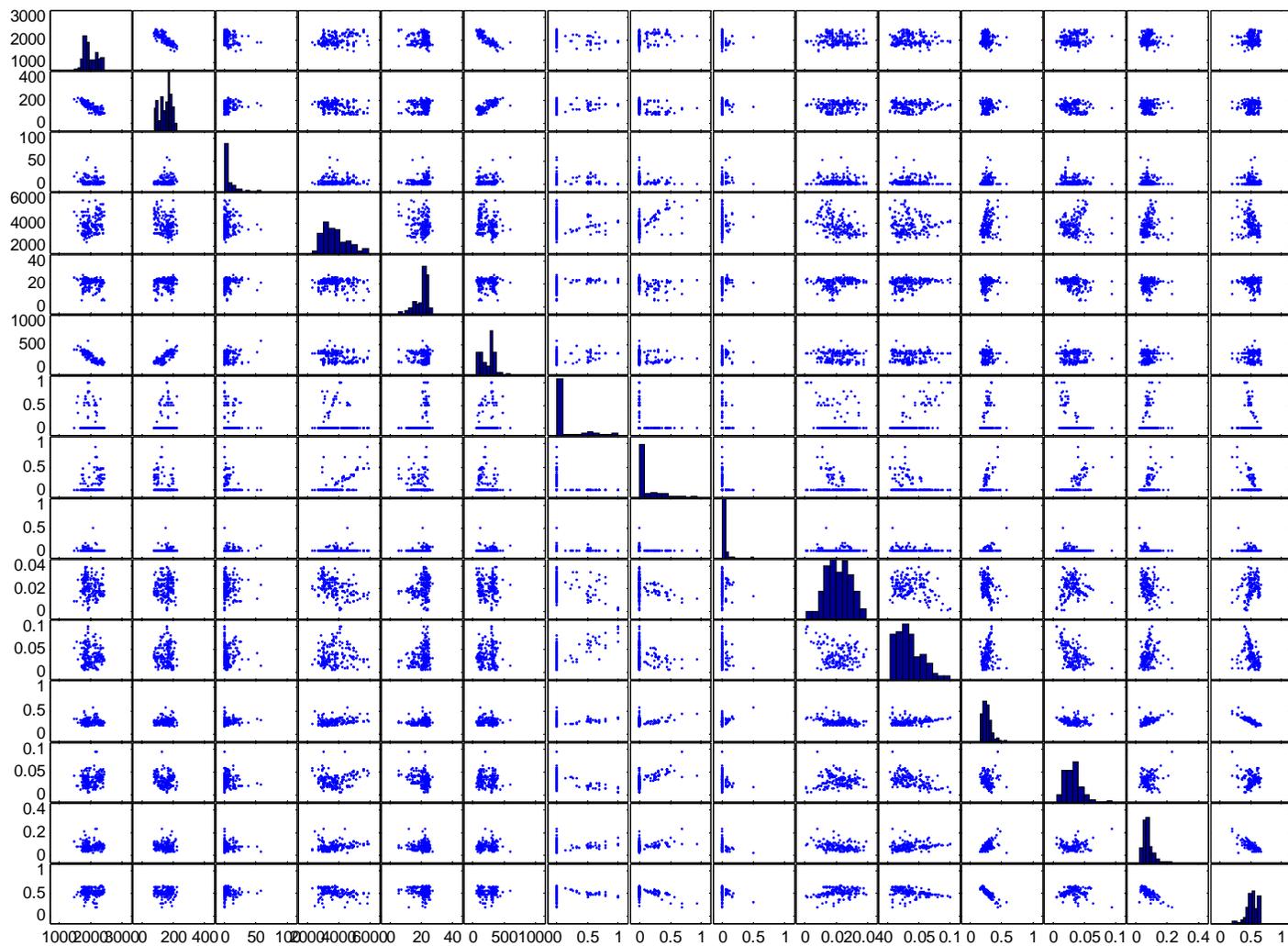


Figura 3.30 - Gráficos de projeção e histogramas das componentes do vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.3, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. A ordem das figuras é igual à ordem da listagem das variáveis no texto (incluindo lista no item 3.3).

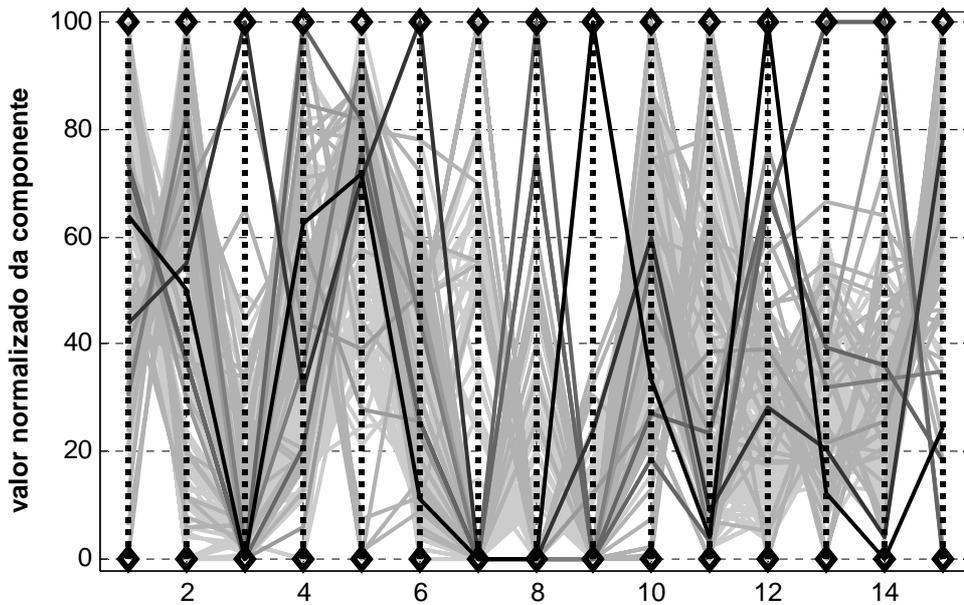


Figura 3.31 – Diagrama de poligonais na mesma lógica da Figura 3.19, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Cada linha poligonal representa um vetor de aprendizagem conforme o item 3.3.3. A ordem na abscissa é igual à ordem da listagem das variáveis no texto.

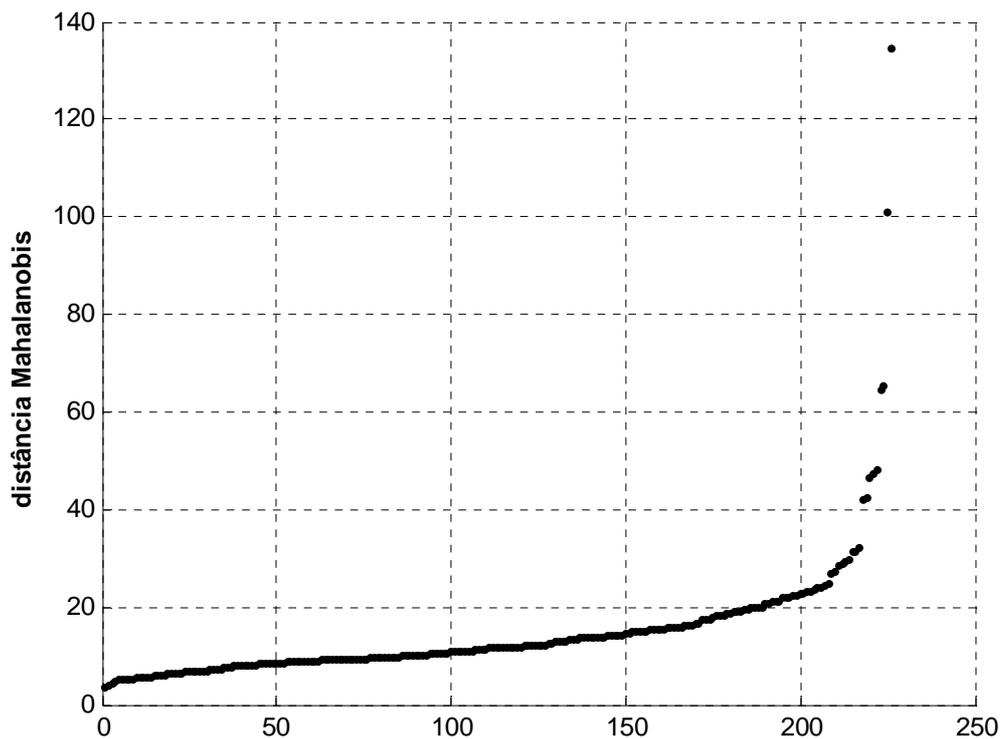


Figura 3.32 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.3.

Mais à frente, no item 3.5.1, há o gráfico da Figura 3.32 sem dois *outliers*.

3.3.4 - Sobre os gráficos de projeção e histogramas

Nos itens 3.3.1, 3.3.2 e 3.3.3, as figuras Figura 3.24, Figura 3.27 e Figura 3.30 mostram gráficos de projeção e histogramas relativos às componentes do vetor de aprendizagem.

Nos gráficos de projeção não foram observadas correlações implausíveis entre duas componentes quaisquer. Também não foram observadas correlações que indicassem a presença de duas componentes redundantes no vetor de aprendizagem.

Nos histogramas, nota-se que as componentes relativas às adições químicas e às adições minerais possuem valores predominando em uma única coluna do histograma. Isso normalmente representa um obstáculo para a elaboração de um modelo como o deste trabalho. Pois o modelo tende a fazer pouca diferenciação entre todos esses valores concentrados na coluna maior do histograma. Porém, no caso deste trabalho, de fato não há diferença alguma entre todos esses valores concentrados na coluna maior, pois esses valores são todos iguais a zero. Esses valores iguais a zero no histograma são relativos aos ensaios sem a adição a qual se refere o histograma.

3.4 - ESTRUTURA DO MODELO

Conforme ilustra a Figura 3.33 abaixo, o modelo possui sete redes neurais independentes, cada uma voltada para o cálculo de um único parâmetro da curva de elevação adiabática de temperatura. Na figura, apesar de o modelo ter 25 entradas, os módulos RNA1 a RNA7 recebem cada um quinze entradas, como será explicado no item seguinte.

Dados para cálculo do vetor de entrada de cada RNA				PROCESSO			SAÍDAS	
1	mineral inerte		kg/m ³	MONTAGEM DO VETOR DE ENTRADA DE CADA RNA	NORMALIZAÇÃO DAS COMPONENTES DE CADA VETOR DE ENTRADA	RNA1	DESNORMALIZAÇÃO DA SAÍDA DE CADA RNA	t _{TOPO}
2	água		kg/m ³					
3	adição química		kg/m ³					
4	finura Blaine do material cimentante		cm ² /g					
5	temperatura inicial do concreto		°C					
6	cimento		kg/m ³					
7	pré-adição no cimento	cimentante e pozolânica	kg/m ³					
8		pozolana comum	kg/m ³					
9		pozolana altamente reativa	kg/m ³					
10	adição ao cimento	cimentante e pozolânica	kg/m ³					
11		pozolana comum	kg/m ³					
12		pozolana altamente reativa	kg/m ³					
13	composição química do cimento	SO ₃	kg/m ³					
14		MgO	kg/m ³					
15		SiO ₂	kg/m ³					
16		Fe ₂ O ₃	kg/m ³					
17		Al ₂ O ₃	kg/m ³					
18		CaO	kg/m ³					
19	composição química do material cimentante	SO ₃	kg/m ³					
20		MgO	kg/m ³					
21		SiO ₂	kg/m ³					
22		Fe ₂ O ₃	kg/m ³					
23		Al ₂ O ₃	kg/m ³					
24		CaO	kg/m ³					
25	outros		kg/m ³					
				RNA7	T6			

Figura 3.33 – Estrutura do modelo. Cada RNA fornece uma variável de saída, as quais são os sete parâmetros da equação (3.5).

3.4.1 - Configuração do modelo

Na estrutura da Figura 3.33, foram testadas diferentes opções internas nos módulos:

- Montagem do vetor de entrada de cada RNA;
- RNA1 até RNA7.

Quanto à montagem do vetor de entrada de cada RNA, cada vetor de entrada é montado segundo um dos três formatos abaixo. Esses vetores de entrada têm suas quinze componentes calculadas em função dos 25 dados de entrada do modelo, através de operações simples de soma e divisão.

- Conforme item 3.3.1 – Vetor de aprendizagem baseado em FARIA [15];
- Conforme item 3.3.2 – Vetor de aprendizagem considerando as massas dos óxidos;
- Conforme item 3.3.3 – Vetor de aprendizagem considerando os percentuais dos óxidos.

Diferentemente dos módulos RNA1 a RNA6, o módulo RNA7 ignora as duas seguintes componentes do vetor de entrada:

- Concentração de adição química na água (g/L);
- Temperatura inicial do concreto (°C).

Procede-se assim porque a sétima rede neural prevê o parâmetro T_6 , o qual é praticamente a elevação final de temperatura do concreto (97,32% da elevação final). Considerou-se que o parâmetro T_6 independe dos dois fatores acima.

Apesar de os três tipos de vetor de aprendizagem terem quinze componentes, o vetor de entrada da rede neural pode ter menos. Isso ocorre com a sétima rede neural, em função do que se explicou acima.

As sete redes neurais da Figura 3.33 possuem as seguintes configurações em comum:

- São do tipo *feedforward* multicamadas;
- São totalmente conectadas;
- Possuem somente uma camada escondida;
- Os neurônios da camada escondida têm como função de transferência a tangente hiperbólica;
- Possuem um único neurônio na camada de saída;
- O neurônio da camada de saída tem como função de transferência a reta bissetriz dos eixos, ou seja, a saída da função é igual a entrada.

As opções que foram testadas nos módulos RNA1 a RNA7 são quanto ao número de neurônios na camada escondida. Testou-se com 5, 6 e 7 neurônios. A escolha desses valores é comentada no item 3.4.2.

Resumindo, cada uma das sete RNAs tem três opções quanto à sua arquitetura e três opções quanto ao vetor de entrada.

Mudar o tipo de vetor de entrada não altera a arquitetura da rede neural, pois os três tipos de vetor de entrada geram a mesma quantidade de entradas para rede neural. Porém cada tipo de vetor de entrada requer diferentes valores para os pesos e vieses da rede neural, em prol de uma predição adequada da variável de saída. Portanto mudar o tipo de vetor de entrada altera a RNA, apesar de não mudar sua arquitetura.

Pelo exposto, cada RNA tem nove opções de configuração (três vezes três). Como são sete redes neurais, resulta que a estrutura da Figura 3.33 tem 4,8 milhões de opções de configuração (nove elevado a sete). Mas não foram testadas todas essas opções de modelo. Na realidade as sete redes neurais foram analisadas de forma independente. Para cada RNA, foram testadas as nove opções de configuração de rede neural, verificando-se o desempenho da RNA na predição da variável de saída.

3.4.2 - Número de neurônios escondidos – é preciso escolher

Em outros modelos de predição de exotermia do concreto [11] [23] [30], um item importante é a obtenção das fases minerais do cimento (item 2.4). Como dito no item 2.4, pode-se calcular a liberação final de calor do cimento através das fases minerais. Percebe-se que a elevação final de temperatura do concreto está intimamente ligada às quantidades dos compostos presentes no cimento e na adição. Tais quantidades podem ser calculadas através de equações como a equação (2.5). Comparando-se a equação (2.5) com a equação (2.7), nota-se que a estrutura adotada para as RNAs possui os meios para calcular as quantidades dos compostos. Pois as quantidades dos óxidos são componentes do vetor x , e as funções de transferência em f_A possuem um trecho linear central (tangente hiperbólica).

Com base no exposta acima, incluiu-se uma quantidade de neurônios escondidos próxima do número de compostos principais presentes no material cimentante. Foram testadas redes neurais com 5, 6 e 7 neurônios na camada escondida.

3.4.3 - Módulos de normalização e desnormalização

Na Figura 3.33, o módulo “normalização das componentes de cada vetor de entrada” é conforme a equação (3.8). A normalização aplicada é uma transformação para valores no intervalo [-1,+1].

$$x_N = (x - x_{CENTRO}) / (x_{MÁX} - x_{CENTRO}), \quad (3.8)$$

onde

x é a componente a ser normalizada,

x_N é a componente normalizada,

$x_{MÁX}$ é o valor máximo da componente, entre todos os ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1), sem os ensaios *outliers* (item 3.3),

x_{CENTRO} é igual a $(x_{MÁX} + x_{MÍN}) / 2$,

$x_{MÍN}$ é o valor mínimo da componente, entre todos os ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1), sem os ensaios *outliers* (item 3.3).

Na Figura 3.33, o módulo “desnormalização da saída de cada RNA” é conforme a equação (3.9).

$$y_N = (y - y_{CENTRO}) / (y_{MÁX} - y_{CENTRO}), \quad (3.9)$$

onde

y_N é o valor fornecido pela RNA como saída (valor que entra no módulo),

y é o valor desnormalizado (valor que sai do módulo),

$y_{MÁX}$ é o valor máximo do parâmetro a ser previsto pela RNA, entre todos os vetores alvos conforme equação (3.5), considerando todos os ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1), sem os ensaios *outliers* (item 3.3),

y_{CENTRO} é igual a $(y_{MÁX} + y_{MÍN}) / 2$,

$y_{MÍN}$ é o valor mínimo do parâmetro a ser previsto pela RNA, entre todos os vetores alvos conforme equação (3.5), considerando todos os ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1), sem os ensaios *outliers* (item 3.3).

3.5 – CÁLCULO DOS PARÂMETROS DAS REDES NEURAIS

3.5.1 - Preparação dos subconjuntos de treinamento, validação e teste

Cada ensaio do banco de dados possui associado a ele um par entrada-alvo onde:

- O alvo é um vetor alvo conforme equação (3.5);
- A entrada é um vetor de aprendizagem conforme item 3.3.

A entrada do par entrada-alvo depende do tipo de vetor de aprendizagem adotado:

- Conforme item 3.3.1 – Vetor de aprendizagem baseado em FARIA [15];
- Conforme item 3.3.2 – Vetor de aprendizagem considerando as massas dos óxidos;
- Conforme item 3.3.3 – Vetor de aprendizagem considerando os percentuais dos óxidos.

Antes do treinamento de qualquer rede neural, as componentes das entradas e alvos dos pares entrada-alvo foram normalizadas conforme a equação (3.8) (item 3.4.3).

Para o treinamento de cada uma das sete redes neurais, os ensaios foram divididos em três subconjuntos chamados treinamento, validação e teste.

Os subconjuntos de treinamento, validação e teste englobam, respectivamente, 70%, 20% e 10% de todos os ensaios incluídos neste trabalho (item 3.1.1), sem dois ensaios considerados *outliers* (item 3.3). Os ensaios considerados *outliers* variam dependendo do tipo de vetor de aprendizagem adotado. A Tabela 3.3 mostra quais ensaios foram considerados *outliers* para cada tipo de vetor de aprendizagem.

Tabela 3.3 – Ensaios que foram considerados *outliers* para cada tipo de vetor de aprendizagem.

Tipo de vetor de aprendizagem	Ensaios que foram considerados <i>outliers</i>
FAR (conforme item 3.3.1)	177 e 221
MOX (conforme item 3.3.2)	112 e 177
POX (conforme item 3.3.3)	112 e 177

Os subconjuntos de treinamento, validação e teste devem ser amostras representativas do conjunto total de ensaios. Considerou-se que os subconjuntos seriam amostras representativas do todo se seus vetores de aprendizagem tivessem parâmetros de média e dispersão próximos aos parâmetros de média e dispersão do conjunto total. Com base nisso, os ensaios incluídos em cada subconjunto foram escolhidos de modo a minimizar o parâmetro da equação (3.10).

$$(\text{erro de representatividade}) = [(\text{erro}_1^2 + \text{erro}_2^2) / 2]^{1/2}, \quad (3.10)$$

onde

erro₁ é dado pela equação (3.11),

erro₂ é dado pela equação (3.14).

$$\text{erro}_1 = \sqrt{\frac{1}{2 \cdot C \cdot B} \left(\sum_i^C \sum_j^B e_{Mij}^2 + \sum_i^C \sum_j^B e_{Sij}^2 \right)}, \quad (3.11)$$

onde

C é o número de componentes do vetor de aprendizagem,

B é o número de subconjuntos, no caso, três,

e_{Mij} é dado pela equação (3.12),

e_{Sij} é dado pela equação (3.13).

$$e_{Mij} = (m_{ij} - \mu_i) / \sigma_i, \quad (3.12)$$

onde

m_{ij} é a média da componente *i*, entre todos os ensaios do subconjunto *j*,

μ_i é a média da componente *i*, entre todos os ensaios do conjunto total,

σ_i é o desvio padrão da componente *i*, entre todos os ensaios do conjunto total.

$$e_{Sij} = (s_{ij} - \sigma_i) / \sigma_i, \quad (3.13)$$

onde

s_{ij} é o desvio padrão da componente i , entre todos os ensaios do subconjunto j ,

σ_i é o desvio padrão da componente i , entre todos os ensaios do conjunto total.

$$\text{erro}_2 = \sqrt{\frac{1}{2 \cdot B} \left(\sum_j^B e_{MDj}^2 + \sum_j^B e_{SDj}^2 \right)}, \quad (3.14)$$

onde

B é o número de subconjuntos, no caso, três,

e_{MDj} é dado pela equação (3.15),

e_{SDj} é dado pela equação (3.16).

$$e_{MDj} = (m_{Dj} - \mu_{Dj}) / \sigma_D, \quad (3.15)$$

onde

m_{Dj} é a média da distância Mahalanobis do vetor de aprendizagem, entre todos os ensaios do subconjunto j , sendo a distância Mahalanobis calculada com base no conjunto total,

μ_{Dj} é a média da distância Mahalanobis do vetor de aprendizagem, entre todos os ensaios do conjunto total,

σ_D é o desvio padrão da distância Mahalanobis do vetor de aprendizagem, entre todos os ensaios do conjunto total.

$$e_{SDj} = (s_{Dj} - \sigma_D) / \sigma_D, \quad (3.16)$$

onde

s_{Dj} é o desvio padrão da distância Mahalanobis do vetor de aprendizagem, entre todos os ensaios do subconjunto j , sendo a distância Mahalanobis calculada com base no conjunto total,

σ_D é o desvio padrão da distância Mahalanobis do vetor de aprendizagem, entre todos os ensaios do conjunto total.

O erro de representatividade dos subconjuntos, dado pela equação (3.10), é calculado em função dos vetores de aprendizagem dos ensaios. Com isso, para uma dada escolha de subconjuntos, o erro de representatividade depende do tipo de vetor de aprendizagem adotado (item 3.3). Por isso, para cada tipo de vetor de aprendizagem fez-se uma escolha diferente de subconjuntos, de modo a minimizar o erro de representatividade dos subconjuntos. A Tabela 3.4 mostra o erro de representatividade, já minimizado, relativo aos subconjuntos de treinamento, validação e teste escolhidos para cada tipo de vetor de aprendizagem.

Tabela 3.4 – Erro de representatividade relativo à escolha final dos subconjuntos feita para cada tipo de vetor de aprendizagem.

Tipo de vetor de aprendizagem	Erro de representatividade relativo aos subconjuntos de treinamento, validação e teste
FAR (conforme item 3.3.1)	0,0730
MOX (conforme item 3.3.2)	0,0622
POX (conforme item 3.3.3)	0,0641

Na Tabela 3.4 acima, o valor 0,073, por exemplo, significaria que cada subconjunto possui uma alteração de posição e dispersão em relação ao conjunto total ambas na ordem de 7% do desvio padrão do conjunto total.

A minimização do erro de representatividade foi feita por tentativas. Para cada tipo de vetor de aprendizagem, calculou-se o erro de representatividade para 70 mil escolhas aleatórias dos subconjuntos de treinamento, validação e teste. Cada escolha aleatória manteve a proporção já mencionada de 70%, 20% e 10% respectivamente para treinamento, validação e teste. Adotou-se a escolha com menor erro de representatividade entre as 70 mil.

Histogramas e gráficos de distância Mahalanobis indicaram que a minimização do erro de representatividade, dado pela da equação (3.10), proporciona de fato subconjuntos com espalhamento no domínio semelhante ao espalhamento do conjunto total.

As figuras seguintes mostram a escolha final dos subconjuntos de treinamento, validação e teste, marcada no gráfico de distâncias Mahalanobis.

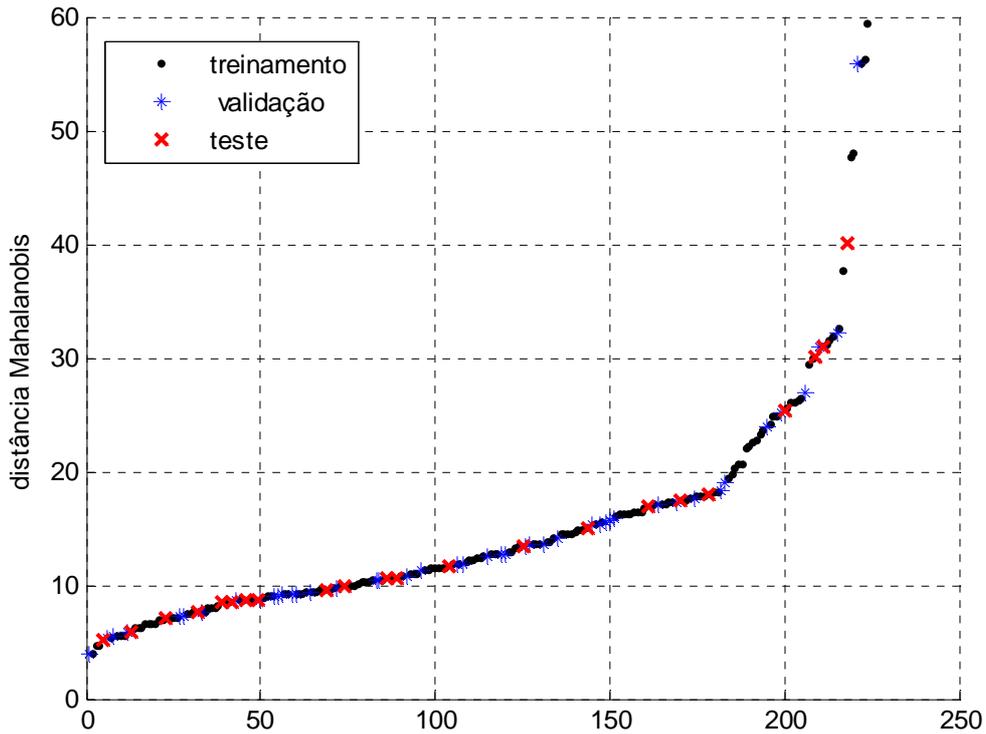


Figura 3.34 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois *outliers*. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.1.

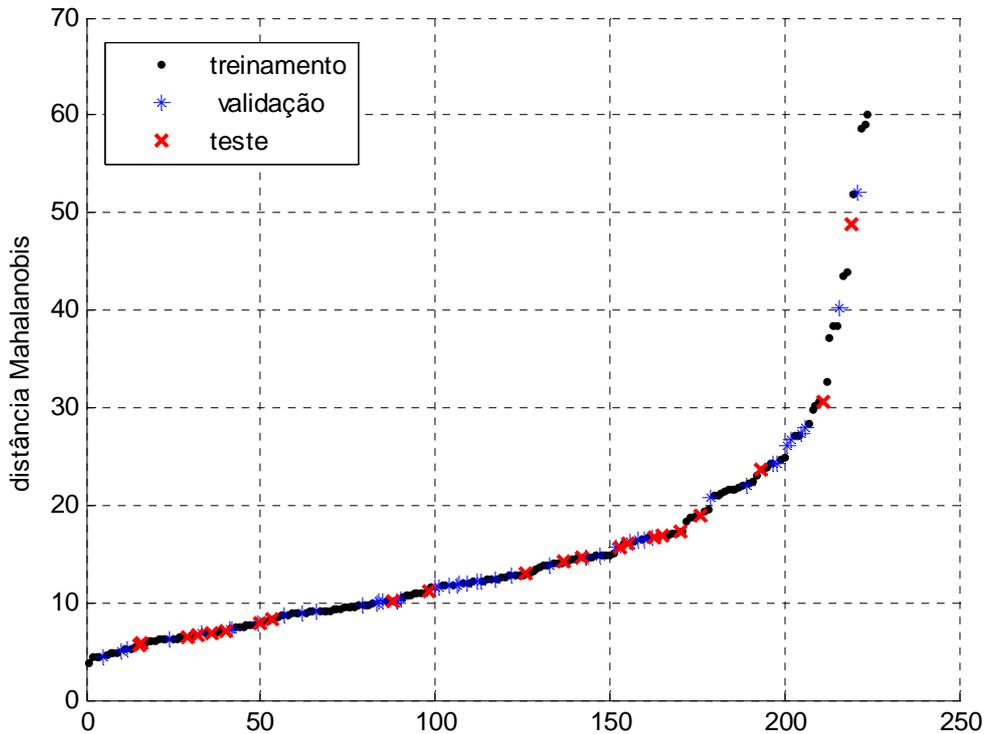


Figura 3.35 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois *outliers*. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.2.

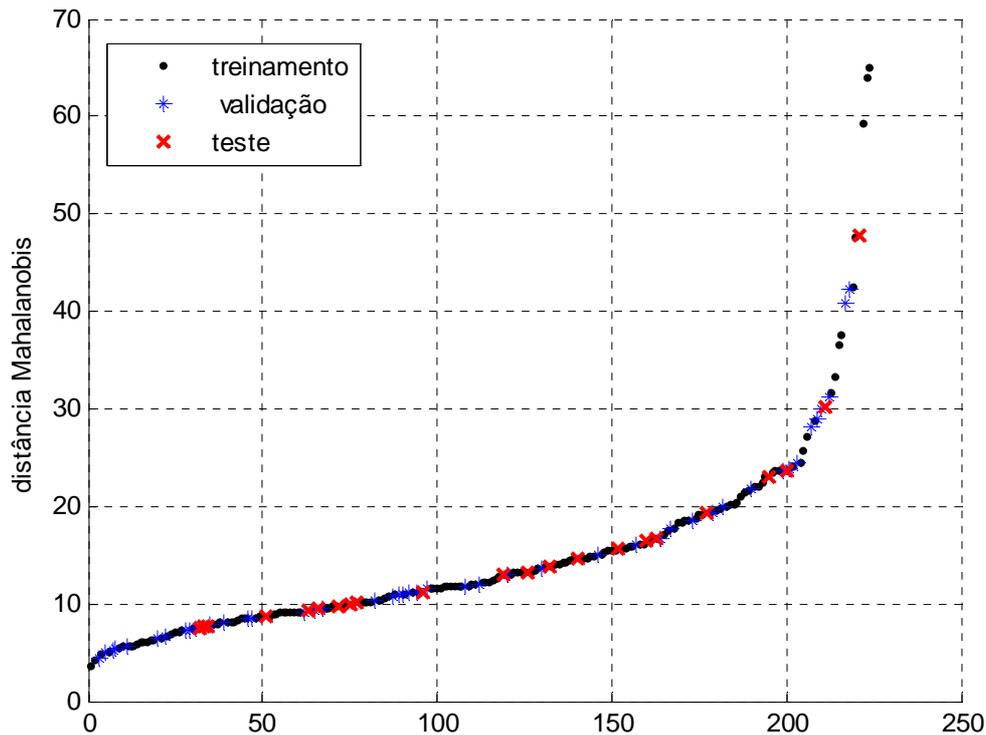


Figura 3.36 – Distâncias Mahalanobis dos vetores de aprendizagem, colocadas em ordem crescente, englobando todos os ensaios incluídos neste trabalho, sem dois *outliers*. Tipo de vetor de aprendizagem conforme item 3.3.3.

3.5.2 – Seqüência de treinamentos e avaliação de cada treinamento

Cada uma das sete redes neurais do modelo (Figura 3.33) foi treinada diversas vezes, variando-se as seguintes opções de configuração (item 3.4.1):

- O número de neurônios na camada escondida (5, 6 ou 7);
- O tipo de vetor de aprendizagem (item 3.3).

Cada treinamento foi conforme explicado no capítulo de fundamentos. Para cada RNA, os treinamentos gravavam resultados similares, mas diferentes entre si. Por isso cada rede neural foi treinada diversas vezes para que fosse selecionado o melhor resultado, isto é, a melhor RNA já com os pesos e vieses definidos. O modo de avaliação para a escolha do melhor resultado foi conforme explicado mais à frente. A seqüência de treinamentos foi conforme a Tabela 3.5.

Tabela 3.5 – Sequência de treinamentos realizada para cada um dos módulos RNA1 a RNA7 da Figura 3.33.

Tipo de vetor de aprendizagem	Número de neurônios na camada escondida	Número de treinamentos realizados
FAR (conforme item 3.3.1)	5	120
	6	70
	7	70
MOX (conforme item 3.3.2)	5	120
	6	70
	7	70
POX (conforme item 3.3.3)	5	120
	6	70
	7	70
TOTAL →		780

Na tabela Tabela 3.5, o número de treinamentos realizados variou entre 70 ou 120 apenas por uma questão de logística do trabalho, sem motivo especial.

Ao final de cada treinamento, a RNA obtida foi avaliada com o parâmetro de erro da equação (3.17).

$$RMSE_N^* = RMSE_N \cdot F_M , \quad (3.17)$$

onde

$RMSE_N^*$ é o parâmetro de erro usado para avaliar as redes neurais,

$RMSE_N$ é a raiz do erro quadrático médio normalizado, dada pela equação (3.18),

F_M é um fator de majoração, dado pela equação (3.20).

$$RMSE_N = \sqrt{\frac{1}{C \cdot B} \sum_i^C \sum_j^B e_{Nij}^2} , \quad (3.18)$$

onde

$RMSE_N$ é a raiz do erro quadrático médio normalizado,

C é o número de componentes do vetor de saída da RNA, no caso, um, pois cada RNA tem somente uma variável de saída,

B é o número pares entrada-alvo, englobando todo o conjunto de aprendizado (união dos subconjuntos de treinamento, validação e teste),

e_{Nij} é dado pela equação (3.19).

$$e_{Nij} = \hat{y}_{Nij} - y_{Nij} , \quad (3.19)$$

onde

e_{Nij} é o erro normalizado da componente i do vetor de saída da RNA, no par entrada-alvo j ,

\hat{y}_{Nij} é a componente i do vetor de saída da RNA, no par entrada-alvo j ,
 y_{Nij} é a componente i do vetor alvo da RNA, normalizada conforme equação (3.8), no par entrada-alvo j .

$$F_M = \begin{cases} 1, & \text{para } RMSE_{N3} \leq RMSE_{N12} \\ 1 + \tanh\left(\frac{RMSE_{N3} - RMSE_{N12}}{|RMSE_{N2} - RMSE_{N1}|}\right), & \text{para } RMSE_{N3} > RMSE_{N12} \end{cases} \quad (3.20)$$

onde

$RMSE_{N3}$ é o parâmetro de erro conforme equação (3.18), porém englobando somente o subconjunto de teste,

$RMSE_{N2}$ é o parâmetro de erro conforme equação (3.18), porém englobando somente o subconjunto de validação,

$RMSE_{N1}$ é o parâmetro de erro conforme equação (3.18), porém englobando somente o subconjunto de treinamento,

$RMSE_{N12}$ é o maior dos dois valores $RMSE_{N1}$ e $RMSE_{N2}$, sendo portanto igual a $RMSE_{N2}$ normalmente.

O fator de majoração F_M da equação (3.20) eleva o valor de $RMSE_N^*$ quando a rede neural apresenta erros grandes no conjunto de teste. O fator F_M está ligado a uma avaliação da generalização da rede neural. Considerou-se que uma RNA com boa generalização apresenta desempenhos parecidos no teste e na validação. De fato, não faz sentido um modelo com boa generalização ter alto desempenho num subconjunto dos dados e desempenho baixo em outro subconjunto, quando ambos os subconjuntos são representativos do conjunto total.

Resumindo, para cada módulo RNA1 a RNA7, foram geradas 780 redes neurais através da seqüência de treinamentos da Tabela 3.5. Para cada um dos sete módulos foi adotada a RNA com o menor parâmetro de erro $RMSE_N^*$, dado pela equação (3.17).

CAPÍTULO 4

- Análise dos Resultados

4.1 – RESULTADOS PARA OS MÓDULOS DE REDE NEURAL

A tabela a seguir mostra o resultado obtido para a configuração de cada módulo RNA1 a RNA7 (Figura 3.33). Cada resultado foi obtido através dos procedimentos descritos no item 3.5.2.

Tabela 4.1 – As três melhores redes neurais obtidas para cada módulo RNA1 até RNA7. São as três melhores RNAs de um total de 780, conforme Tabela 3.5.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
módulo	variável alvo	amplitude de variação do alvo no banco de dados	formato do vetor de entrada	Número de entradas da RNA	Número de neurônios na camada escondida	RMSE (unidade igual col. 2)	maior erro negativo (unidade igual col. 2)	maior erro positivo (unidade igual col. 2)	RMSE _N	RMSE _N *
RNA1	t ^{TOPO} (dias)	24,157	FAR	15	7	2,472	-8,702	9,099	0,2047	0,2047
			FAR	15	5	2,787	-8,648	7,365	0,2308	0,2308
			POX	15	7	2,802	-11,095	11,883	0,2320	0,2320
RNA2	T1 (°C)	36,0	FAR	15	5	4,1	-20,5	11,7	0,2268	0,2268
			FAR	15	7	4,3	-22,9	9,4	0,2416	0,2416
			FAR	15	6	4,6	-23,9	10,7	0,2541	0,2541
RNA3	T2 (°C)	38,4	FAR	15	6	4,7	-19,9	16,5	0,2473	0,2473
			FAR	15	5	4,9	-21,9	15,7	0,2571	0,2571
			FAR	15	7	4,9	-16,5	13,6	0,2576	0,2576
RNA4	T3 (°C)	39,7	FAR	15	7	4,6	-15,2	20,0	0,2306	0,2460
			FAR	15	5	4,9	-21,0	22,6	0,2491	0,2552
			FAR	15	5	5,3	-17,0	20,7	0,2649	0,2690
RNA5	T4 (°C)	40,9	MOX	15	7	4,1	-15,0	17,5	0,2013	0,2209
			MOX	15	5	4,4	-14,5	19,0	0,2136	0,2261
			FAR	15	6	4,6	-16,1	20,1	0,2266	0,2266
RNA6	T5 (°C)	47,8	MOX	15	6	3,6	-14,6	13,7	0,1505	0,1505
			POX	15	6	3,7	-10,1	19,4	0,1532	0,1532
			FAR	15	7	3,8	-16,5	17,7	0,1572	0,1572
RNA7	T6 (°C)	56,2	POX	13	7	2,7	-20,5	8,7	0,0963	0,0963
			MOX	13	7	2,8	-10,7	14,5	0,0990	0,0990
			FAR	13	7	3,1	-19,8	10,1	0,1091	0,1091

Na Tabela 4.1, os campos em negrito, nas colunas 4 e 6, representam a melhor configuração para cada módulo RNA1 a RNA7. Nas colunas 7 a 11 constam parâmetros

de erro ligados ao desempenho da rede neural calculada. Todos esses parâmetros são em função de todo o conjunto de aprendizado. A escolha da melhor configuração foi em função do parâmetro $RMSE_N^*$ (coluna 11), dado pela equação (3.17). O parâmetro $RMSE_N$ é dado pela equação (3.18). Os parâmetros de erro das colunas 7 a 9 têm a mesma unidade de medida da variável alvo (coluna 2). Em função das equações de normalização empregadas, tem-se que:

$$RMSE = RMSE_N \cdot [\text{amplitude na coluna 3}] / 2 \quad (4.1)$$

4.1.1 - $RMSE_N$ versus $RMSE_N^*$

Fez-se o teste para ver o que mudaria se a escolha da melhor configuração para cada módulo RNA1 a RNA7 tivesse sido pelo parâmetro $RMSE_N$, ao invés de $RMSE_N^*$. Surgiram resultados diferentes nos módulos RNA3, RNA5 e RNA6. A Tabela 4.2 mostra a mudança de resultado.

Tabela 4.2 – Comparação, nos módulos pertinentes, entre a melhor configuração pelo parâmetro $RMSE_N$ e a melhor configuração pelo parâmetro $RMSE_N^*$.

1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
módulo	variável alvo	amplitude de variação do alvo no banco de dados	formato do vetor de entrada	Número de entradas da RNA	Número de neurônios na camada escondida	RMSE	maior erro negativo	maior erro positivo	$RMSE_N$	$RMSE_N^*$
RNA3	T2	38,4	POX	15	7	4,7	-23,3	20,8	0,2436	0,4770
			FAR	15	6	4,7	-19,9	16,5	0,2473	0,2473
RNA5	T4	40,9	FAR	15	7	4,1	-13,8	15,5	0,2012	0,3323
			MOX	15	7	4,1	-15,0	17,5	0,2013	0,2209
RNA6	T5	47,8	FAR	15	7	3,4	-13,0	12,1	0,1420	0,2230
			MOX	15	6	3,6	-14,6	13,7	0,1505	0,1505

Na Tabela 4.2, no módulo RNA3, o novo resultado apresenta $RMSE_N$ ligeiramente menor. Mas a análise dos cinco parâmetros de erro em conjunto indica que a nova rede neural apresenta desempenho de generalização muito inferior, para pouca melhoria no $RMSE_N$. Por isso foi mantida a configuração anterior no módulo RNA3.

No módulo RNA5, a nova configuração mostra-se melhor que a anterior nas colunas 8, 9 e 10. Porém a coluna 11 acusa um problema de generalização na nova rede neural. As figuras Figura 4.1 e Figura 4.2 mostram haver de fato o problema. Pela Figura 4.1, percebe-se que a nova rede neural tende a errar mais em concretos com pouca ou nenhuma adição ao cimento. Isso indica especialização da rede em um subconjunto dos dados. Já na Figura 4.2 nota-se uma melhor generalização por parte da

rede neural originalmente adotada para o módulo RNA5. Foi mantida a configuração original no módulo RNA5.

No módulo RNA6 ocorreu exatamente o mesmo que no RNA5, como se pode verificar na Figura 4.3 e na Figura 4.4. Foi mantida a configuração original no módulo RNA6.

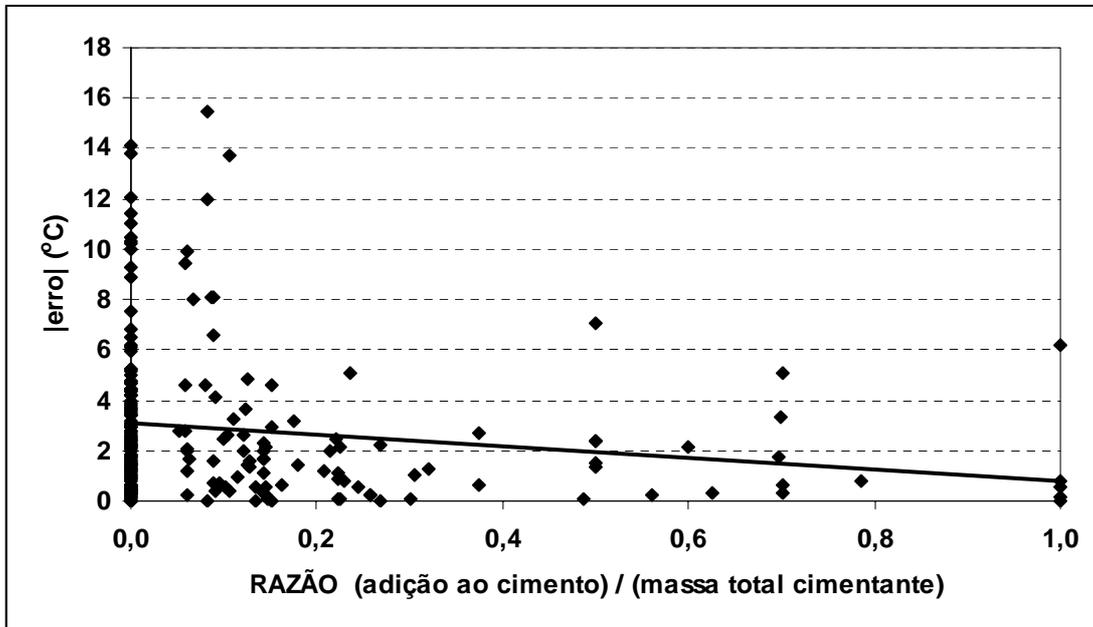


Figura 4.1 – Erros da nova rede neural adotada para o módulo RNA5, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.

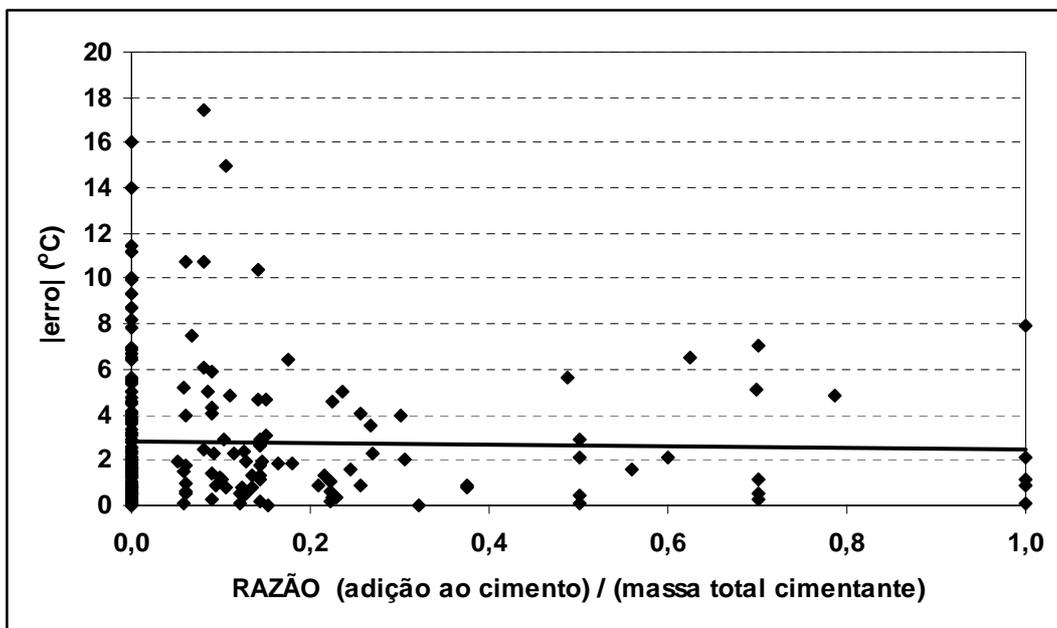


Figura 4.2 – Erros da rede neural originalmente adotada para o módulo RNA5, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.

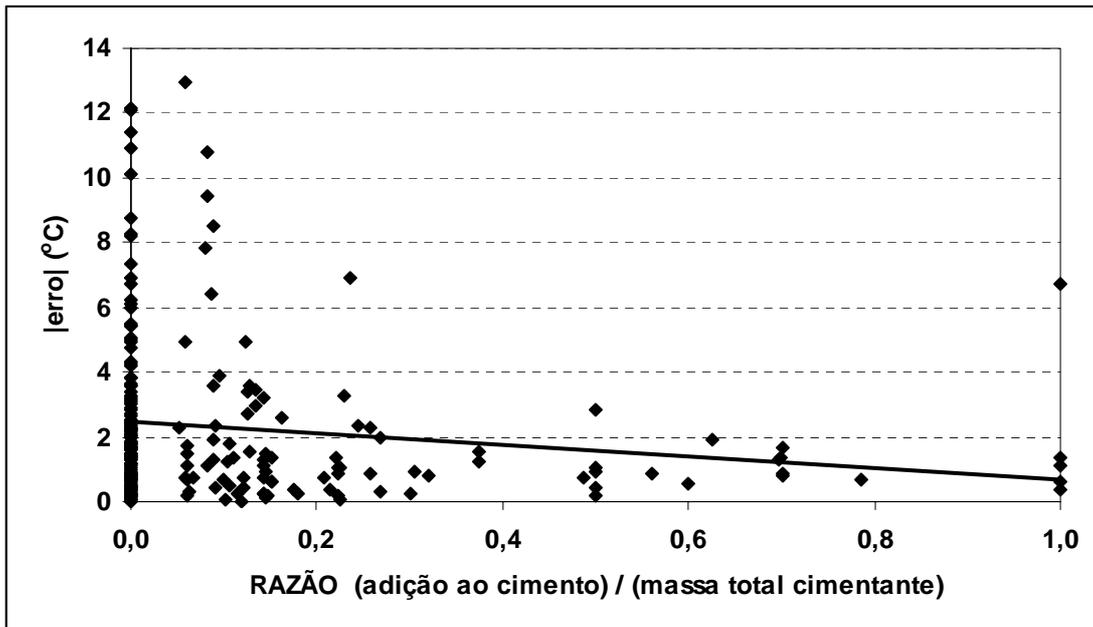


Figura 4.3 – Erros da nova rede neural adotada para o módulo RNA6, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.

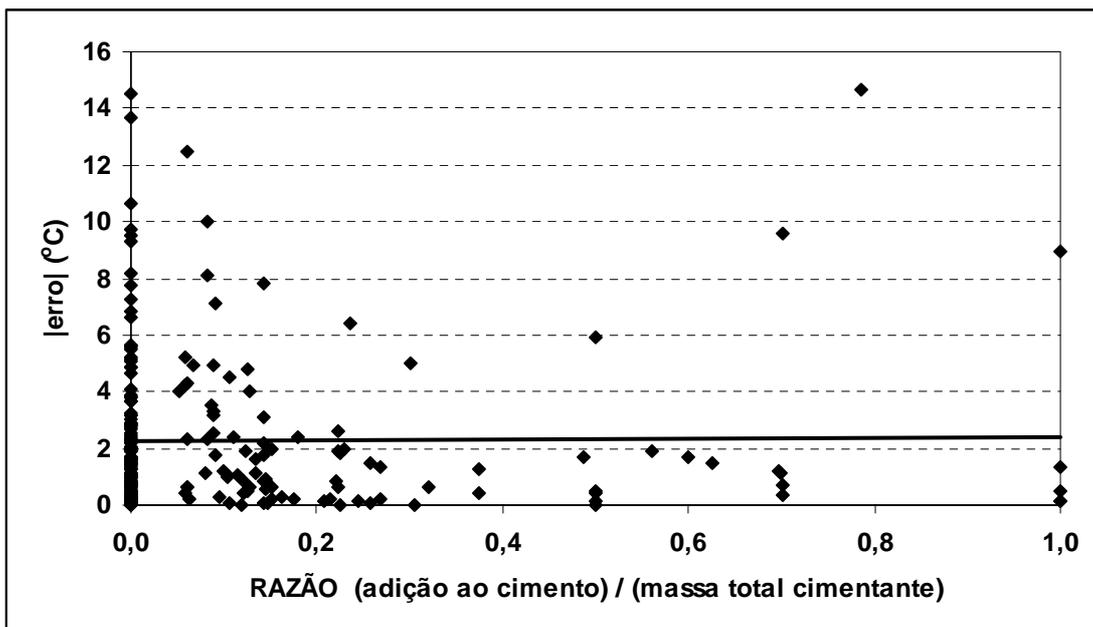


Figura 4.4 – Erros da rede neural originalmente adotada para o módulo RNA6, englobando todo o conjunto de aprendizado. Foi ajustada uma reta nos pontos para verificar a tendência.

4.1.2 – Sobre os desempenhos dos formatos FAR, MOX e POX

Como mostra a Tabela 4.1, o formato FAR obteve melhor desempenho na predição das variáveis T_1 , T_2 , T_3 e t_{TOPO} , enquanto que os formatos MOX e POX obtiveram melhor desempenho na predição das variáveis T_4 , T_5 e T_6 .

O resultado acima é quimicamente coerente. O formato FAR descreve com mais precisão o cimento, em detrimento da adição, pois a composição de óxidos presente

nesse formato é exclusivamente relativa ao cimento. De fato, as temperaturas T_1 , T_2 e T_3 são predominantemente em função do cimento, já que este hidrata mais rapidamente que a adição (itens 2.2 e 2.3). O tempo t_{TOPO} também é muito ligado ao cimento. Pois o cimento libera maiores quantidades de calor primeiro, ativando termicamente a hidratação de outros constituintes, acelerando suas reações.

Os formatos MOX e POX quantificam os óxidos englobando todos os constituintes que são fontes de calor. Chega um momento na hidratação do concreto a partir do qual todos esses constituintes já contribuíram significativamente para liberação total de calor. Por isso é coerente que os formatos MOX e POX tenham melhor desempenho na predição de T_4 , T_5 e T_6 , uma vez que tais temperaturas ocorrem mais tarde.

4.1.3 – Sobre os desempenhos das RNAs

As figuras seguintes mostram os gráficos de avaliação das redes neurais dos módulos RNA1 a RNA7. São gráficos de evolução do treinamento e de desempenho conforme o item 2.6.4. Nos gráficos de evolução do treinamento, os dois pontos pretos mostram, apenas como uma informação adicional, os erros da RNA para os dois *outliers* excluídos (item 3.3).

Ainda nos gráficos de evolução do treinamento, o erro final de teste é sempre próximo ou inferior ao erro final de validação. De fato, o parâmetro de erro RMSE_N^* prioriza a escolha de RNAs com essa característica, em prol de uma melhor generalização, como explicado no item 3.5.2 e ilustrado no item 4.1.1.

Os gráficos de desempenho, além de ilustrarem os erros de predição de um dado parâmetro, mostram na abscissa a faixa de variação do parâmetro entre todos os ensaios.

Sobre a Figura 4.8, foram analisados os ensaios relativos aos oito pontos com os erros de maior magnitude. A única ocorrência incomum notada foi no ensaio 112, onde constava apenas 60 kg/m^3 de cimento. Com outros 60 kg/m^3 de microssílica, o ensaio totalizava 120 kg/m^3 de material cimentante, o que representa uma quantidade baixa em relação aos demais ensaios. Nesse ensaio, o erro na predição de T_1 foi de $11,7 \text{ }^\circ\text{C}$ para mais. Nos ensaios relativos aos grandes erros para menos (cinco ensaios), não foram observadas ocorrências incomuns. Aparentemente, a predominância de valores baixos para T_1 foi um obstáculo para a construção da rede neural. No item 3.2.4 há uma explicação de como se dá esse tipo de obstáculo.

Sobre a Figura 4.18, foi analisado o ensaio relativo ao ponto anômalo com o grande erro para menos, perto da abscissa 20 °C. Trata-se do ensaio de número 165. Nesse ensaio, a composição de óxidos do cimento é incomum (Tabela 4.3). Os teores de SiO₂ e Al₂O₃ são os maiores entre todos os cimentos do banco de dados.

Tabela 4.3 – Composição química do cimento do ensaio 165. Percentuais em massa.

SO ₃	MgO	SiO ₂	Fe ₂ O ₃	Al ₂ O ₃	CaO
1,87%	2,71%	47,81%	4,06%	21,08%	21,31%

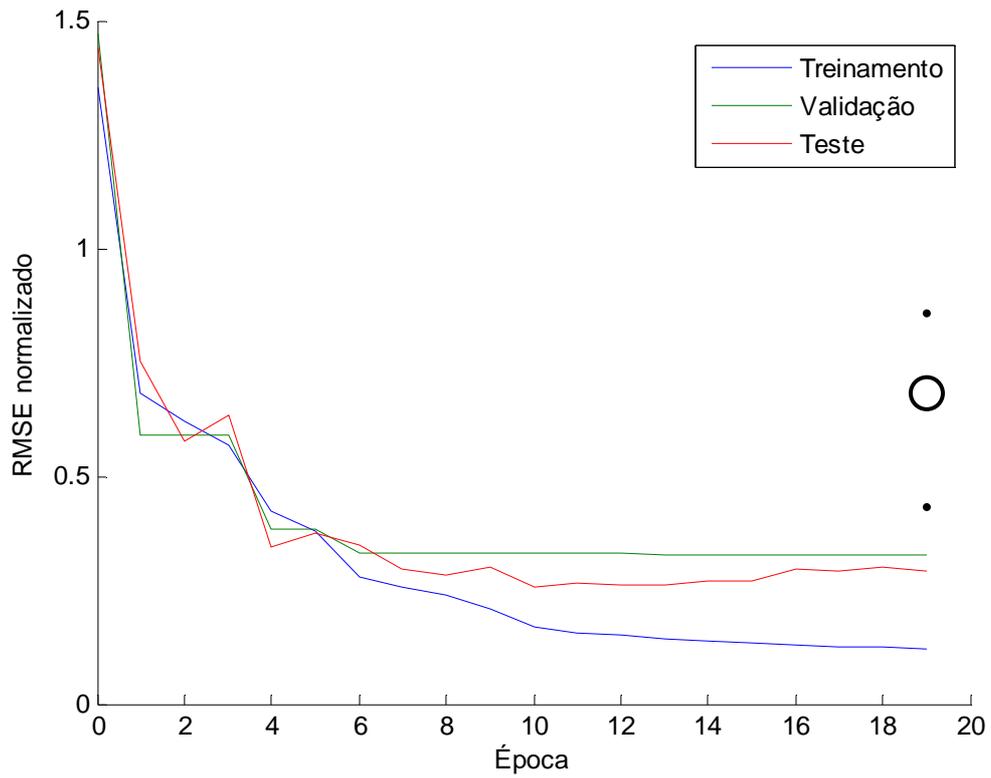


Figura 4.5 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê t_{TOPO} .

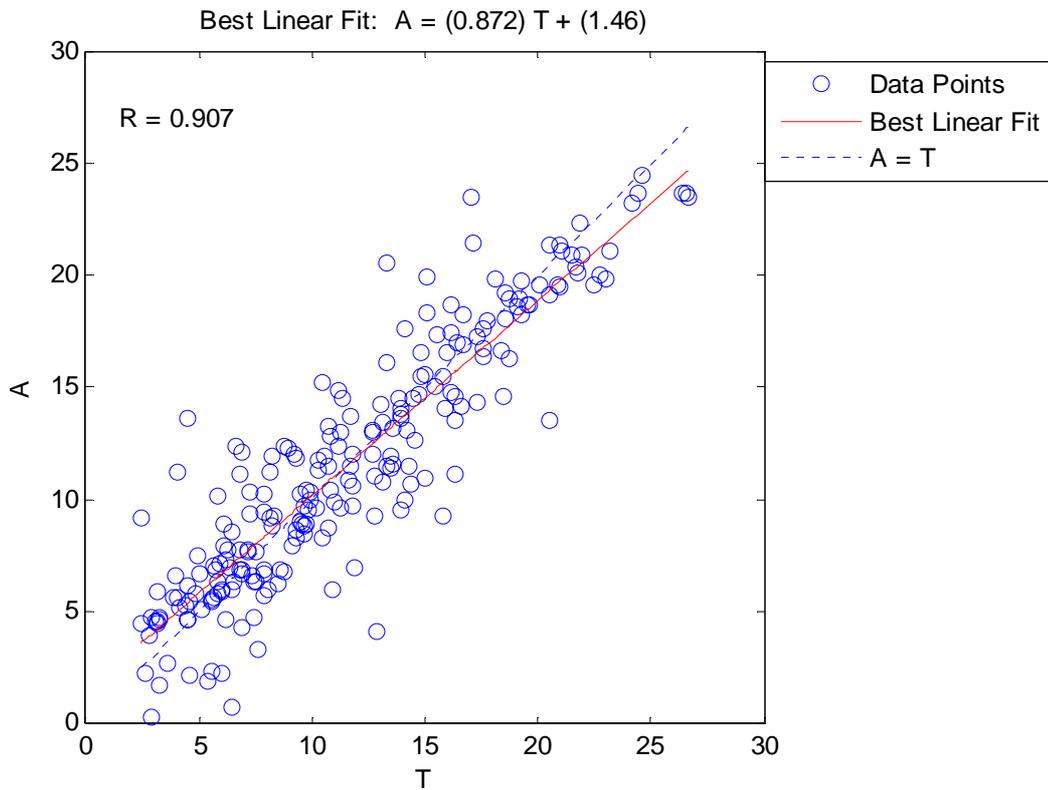


Figura 4.6 – Desempenho da RNA que prevê t_{TOPO} (dias).

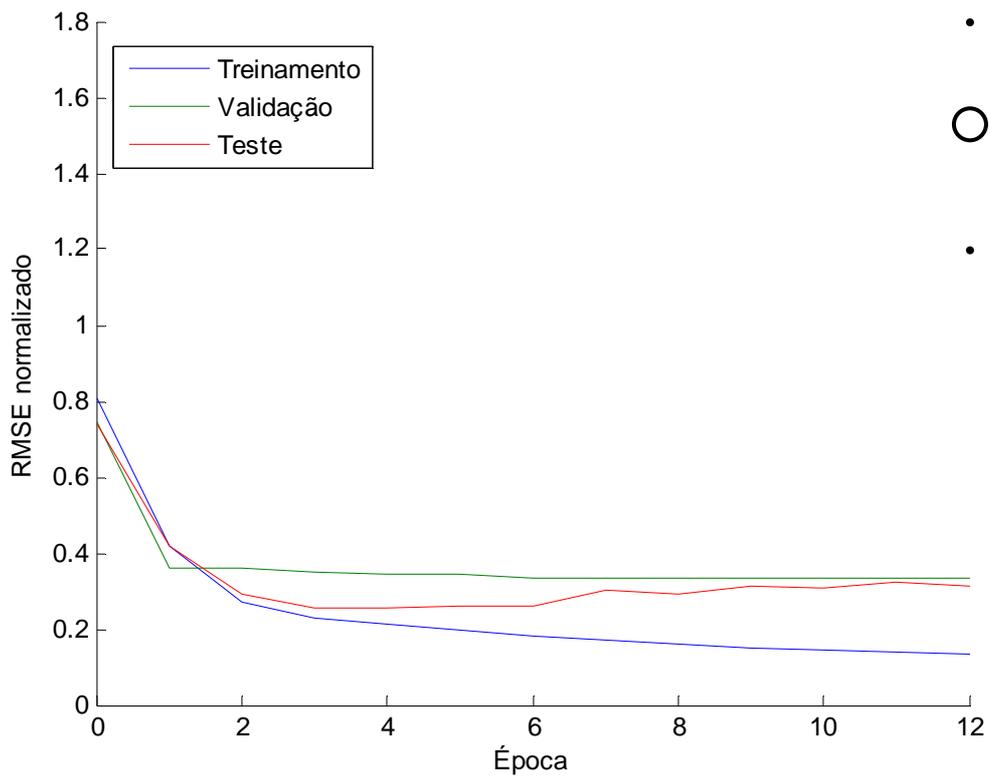


Figura 4.7 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T1.

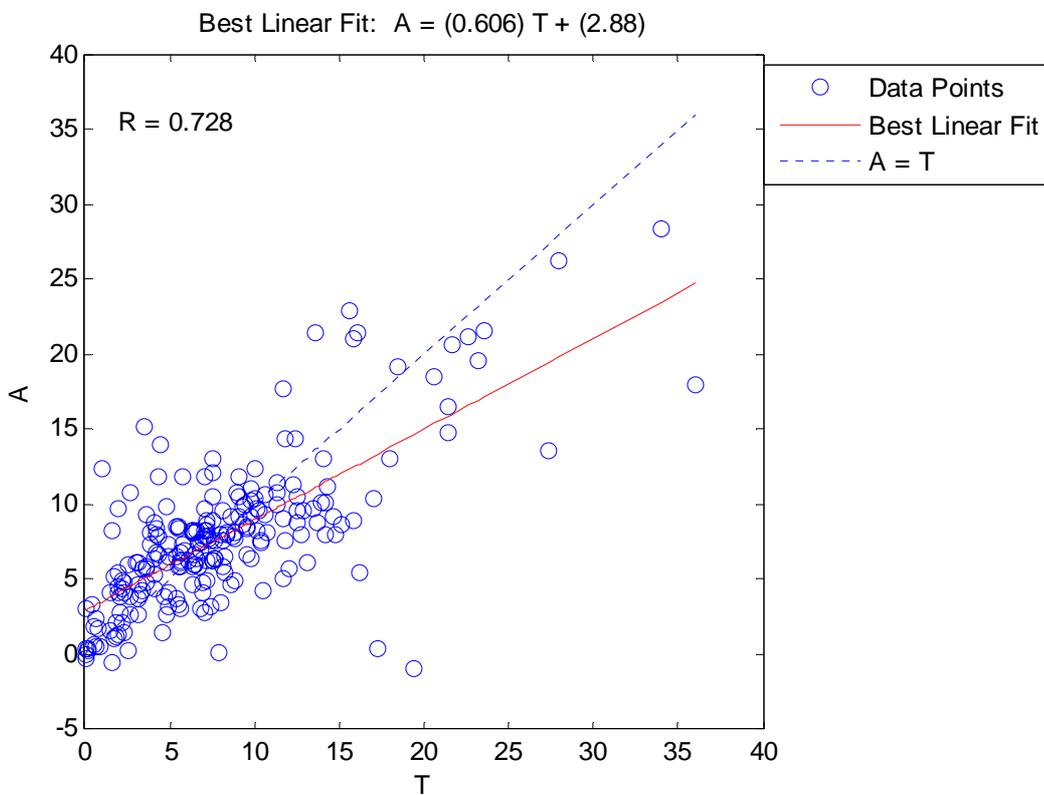


Figura 4.8 – Desempenho da RNA que prevê T1.

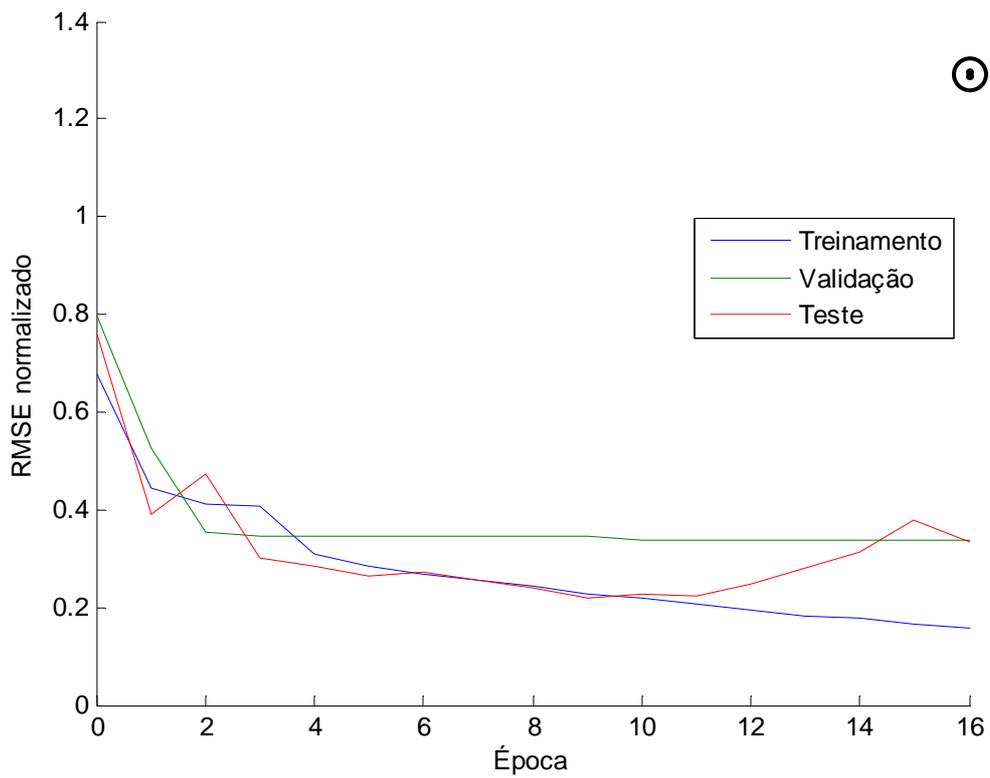


Figura 4.9 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T2.

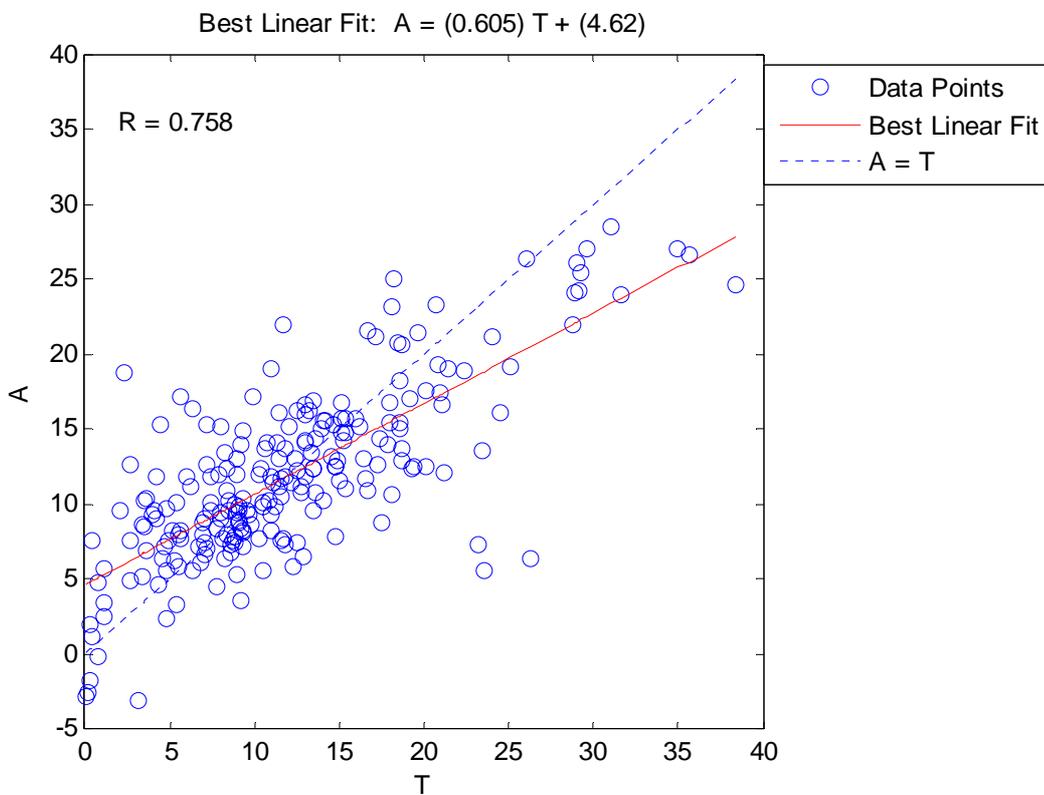


Figura 4.10 – Desempenho da RNA que prevê T2.

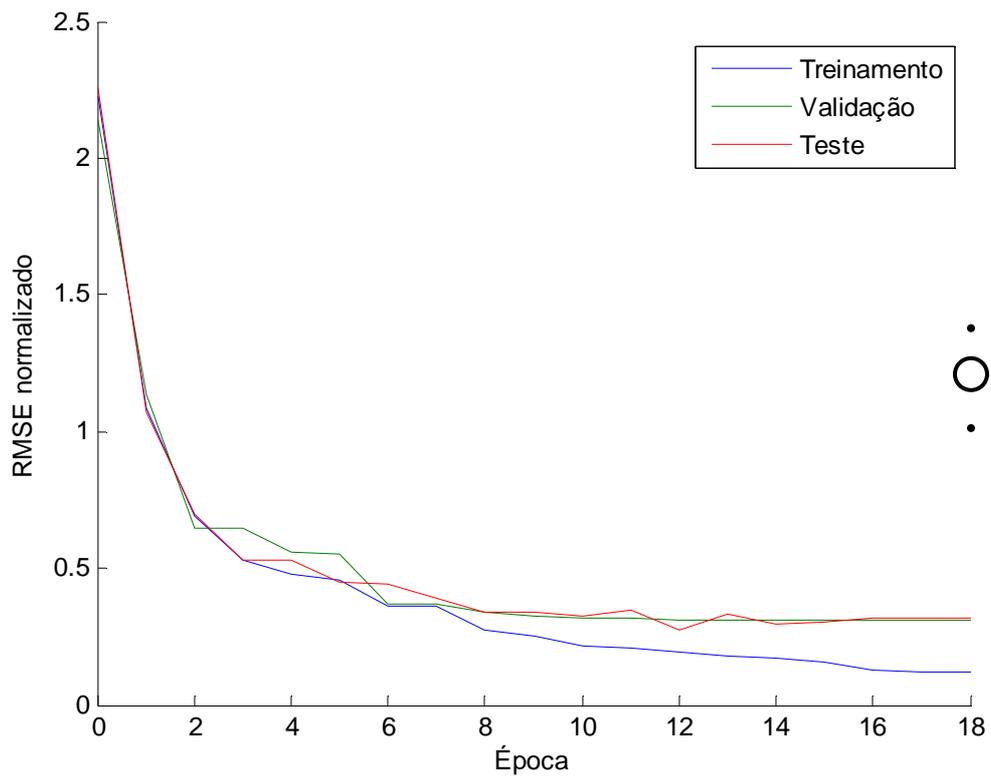


Figura 4.11 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T3.

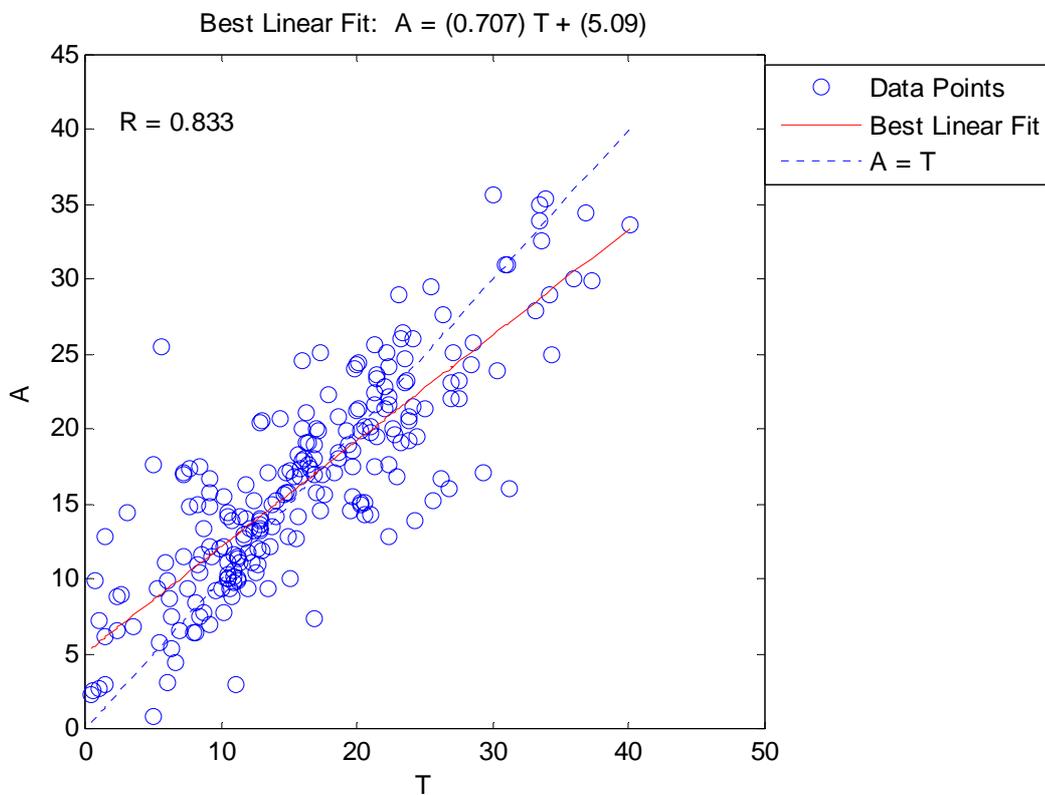


Figura 4.12 – Desempenho da RNA que prevê T3.

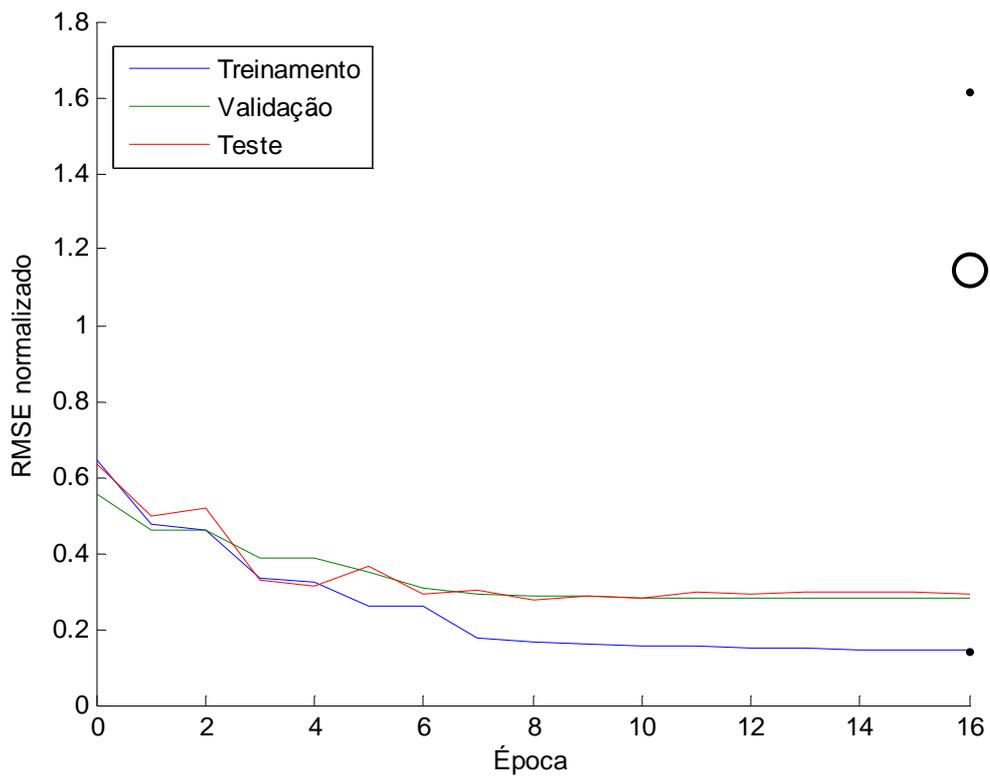


Figura 4.13 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T4.

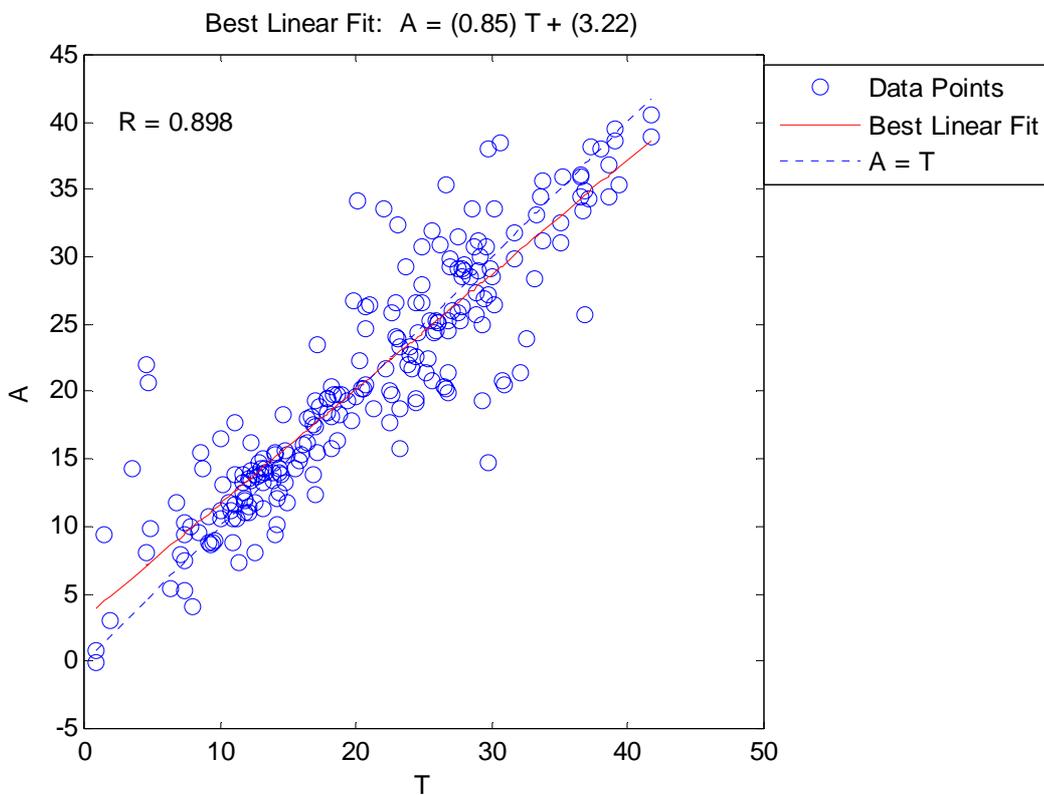


Figura 4.14 – Desempenho da RNA que prevê T4.

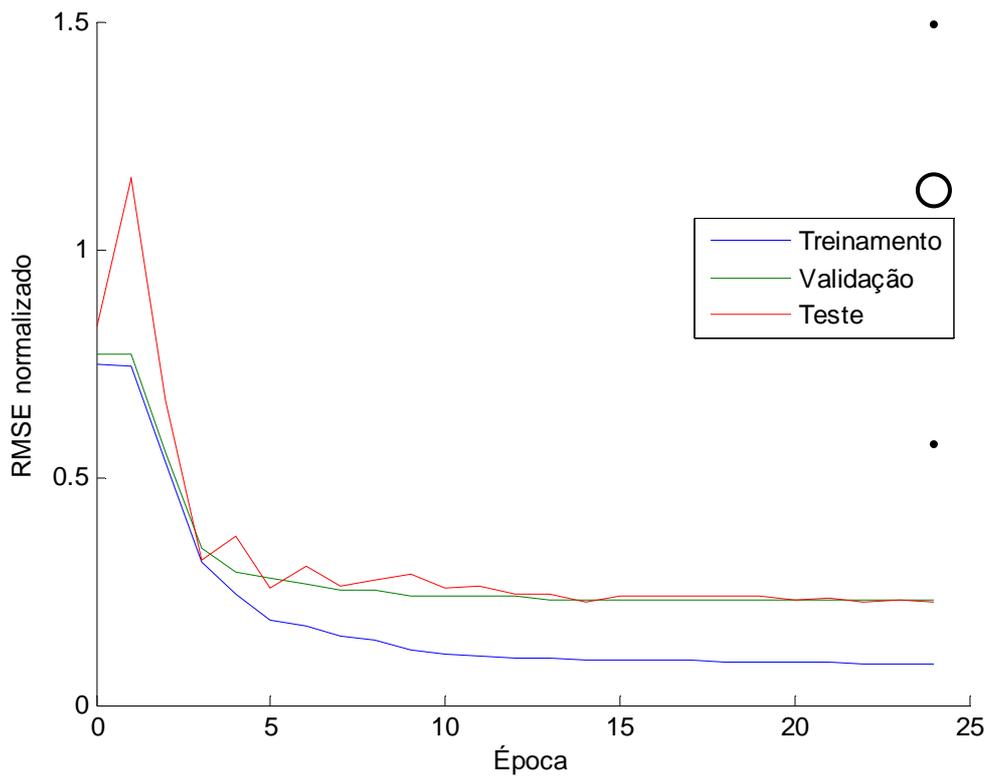


Figura 4.15 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T5.

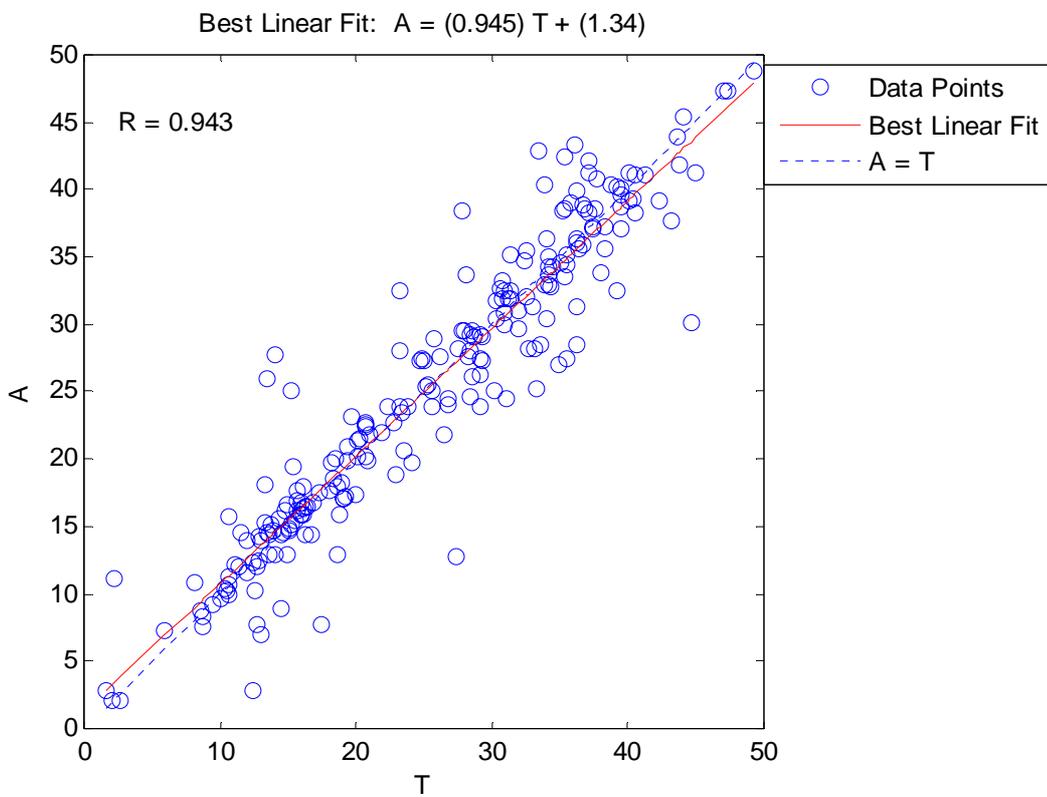


Figura 4.16 – Desempenho da RNA que prevê T5.

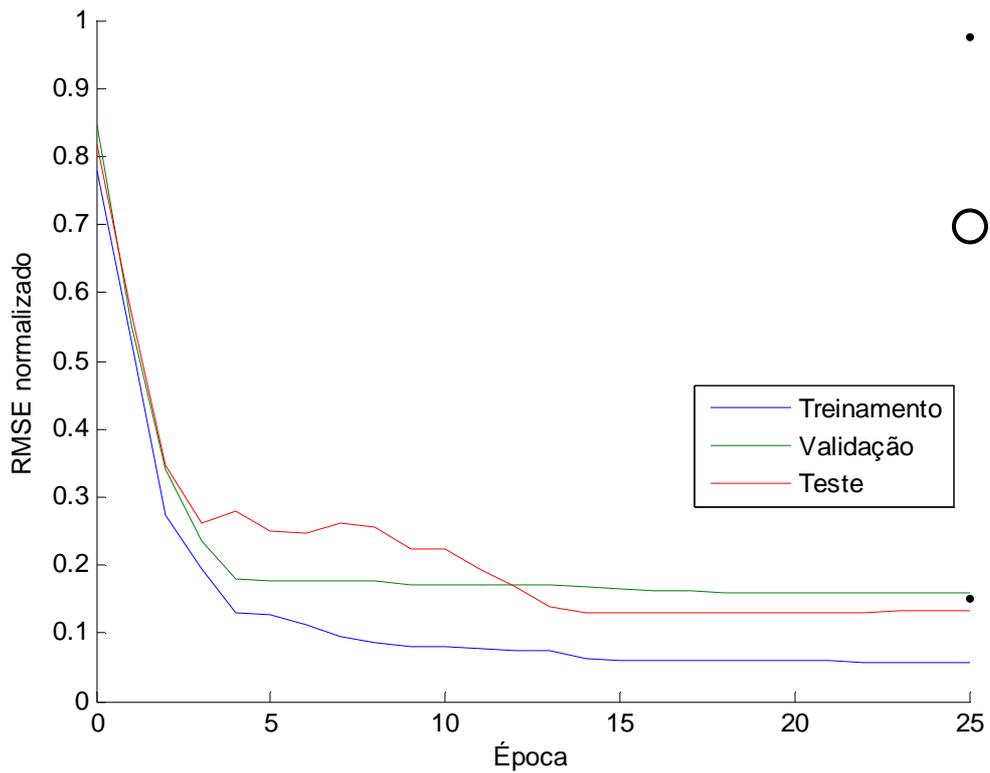


Figura 4.17 – Gráfico de evolução do treinamento da RNA que prevê T6 (variável que equivale a 97,32% da elevação final de temperatura, ou seja, praticamente a amplitude liberação de calor).

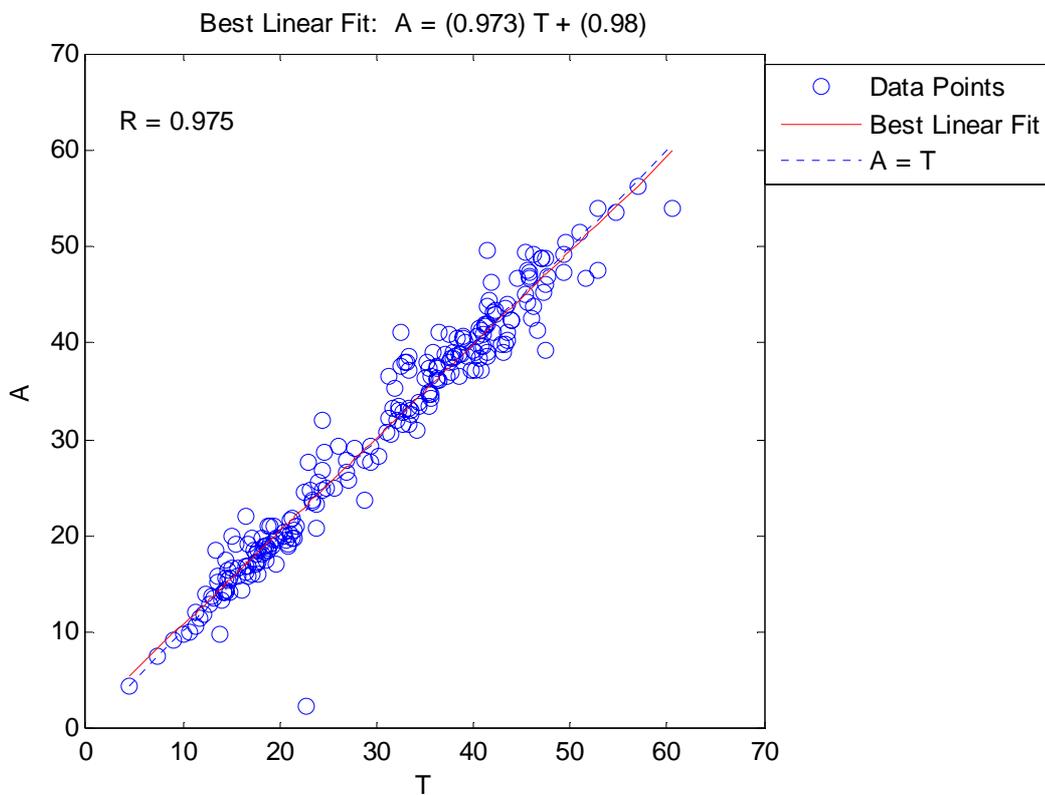


Figura 4.18 – Desempenho da RNA que prevê T6 (variável que equivale a 97,32% da elevação final de temperatura, ou seja, praticamente a amplitude liberação de calor).

Pela Tabela 4.1 e pelos gráficos de desempenho anteriores, percebe-se que a rede neural que prevê T_6 teve desempenho muito superior ao das outras redes neurais. Seguem possíveis explicações para tal fato.

Como explicado no item 4.1.2, o desempenho superior do formato FAR na predição de T_1 , T_2 , T_3 e t_{TOPO} tem a ver com o fato de esse formato priorizar a descrição química do cimento, tendo esse constituinte hidratação mais rápida que a adição. Porém muitos cimentos possuem altos percentuais de pré-adição. Nesses casos, a descrição química do cimento deixa de ser uma descrição precisa do material que hidrata mais rapidamente, uma vez que somente uma parcela do cimento hidrata de fato mais rapidamente. Com isso, uma possível evolução do formato FAR seria separar a pré-adição do cimento, quantificando-a junto com a adição. Nesse formato FAR modificado, a quantidade e composição química do cimento seriam substituídas pela quantidade e composição química da parcela do cimento que não é pré-adição.

Diferentemente da temperatura T_6 , as demais variáveis t_{TOPO} a T_5 podem ser influenciadas pela adição química, uma vez que esta retarda a hidratação (item 2.1). A única informação sobre adição química presente como entrada para as RNAs é um valor representando a soma de três tipos diferentes de adição (item 3.3): incorporador de ar, retardador de pega e plastificante. É possível que um tratamento melhor da entrada “adição química” seja necessário para melhorar a predição de t_{TOPO} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 e T_5 .

No item 3.4.2 foi explicado que a elevação final de temperatura do concreto está intimamente ligada às quantidades dos compostos presentes no cimento e na adição. Também foi explicado como a estrutura adotada para as redes neurais é propícia ao cálculo das quantidades desses compostos. Por isso há coerência no fato de esse tipo de RNA ter bom desempenho na predição de T_6 , já que esta variável é praticamente a elevação final de temperatura (97,32% da elevação final).

Porém, comparadas à variável T_6 , as variáveis t_{TOPO} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 e T_5 não possuem essa relação tão direta com as quantidades dos compostos, havendo um número maior de fatores influenciando. Por isso é possível que a estrutura adotada nas redes neurais dos módulos RNA1 a RNA6 não seja a mais adequada, sendo de grande valia o teste com o emprego de funções de transferência de base radial (RBF) na camada escondida [13].

4.2 - CURVAS DE ELEVAÇÃO ADIABÁTICA – RESULTADOS

Para cada ensaio, a curva de elevação adiabática calculada pelo modelo foi avaliada pelo parâmetro de erro da equação (4.2).

$$RMSTE_6 = \sqrt{\frac{1}{6} \sum_i^6 [y(t_i) - \hat{y}(t_i)]^2} , \quad (4.2)$$

onde:

t_i é a componente i do vetor de tempos

$$v_{\text{TEMPOS}} = [t_{\text{TOPO}} (6,06\%; 9,36\%; 13,70\%; 20,48\%; 34,17\%; 100\%)],$$

onde t_{TOPO} é conforme equação (3.5), sendo um valor definido em função da curva experimental.

$y(t)$ é a ordenada no tempo t da curva de elevação adiabática interpolada nos pontos experimentais. A interpolação foi do tipo polinomial cúbica, contínua até a primeira derivada (sem quina nos pontos e sem oscilação entre os pontos) [16] [18].

$\hat{y}(t)$ é a ordenada no tempo t da curva de elevação adiabática calculada pelo modelo. A curva calculada pelo modelo foi obtida usando-se o mesmo tipo de interpolação acima, nos seis pontos calculados pelo modelo através dos valores de saída para as variáveis t_{TOPO} , T_1 , T_2 , T_3 , T_4 , T_5 , T_6 .

$RMSTE_6$ é a raiz do erro de temperatura quadrático médio, considerando os seis tempos de hidratação t_1 a t_6 .

Em trabalhos anteriores [13] [15] que abordam o mesmo problema da presente dissertação, empregou-se um parâmetro de erro semelhante ao da equação (4.2). A única diferença é quanto aos tempos de hidratação considerados no parâmetro. Nesses trabalhos antecessores o parâmetro de erro considerava o tempo de hidratação de todos os pontos experimentais da curva, ao invés dos seis tempos de hidratação descritos acima.

Uma propriedade do parâmetro $RMSTE_6$ é que ele avalia somente o trecho da curva que de fato a caracteriza, ignorando o trecho com temperatura quase constante.

Num modelo que prevê a curva de elevação adiabática, os erros de temperatura são em média maiores no trecho íngreme da curva que no trecho com temperatura quase constante. Isso ocorre porque pequenos deslocamentos laterais na curva prevista proporcionam grandes erros de temperatura no trecho íngreme da curva, sem alterar os erros no trecho com temperatura quase constante. Já os pequenos deslocamentos

verticais na curva prevista representam erros de temperatura também pequenos independentemente do trecho da curva. Essa tendência de erros maiores no trecho íngreme só não existiria se os modelos fossem muito mais precisos nos deslocamentos laterais que nos verticais. Porém em trabalhos anteriores [13] [15], entre os três parâmetros previstos pelos modelos, os dois parâmetros ligados ao deslocamento lateral da curva não receberam um tratamento diferenciado que indicasse que a predição desses parâmetros em particular seria mais precisa que a predição do terceiro parâmetro.

Pela propriedade mencionada do parâmetro $RMSTE_6$, tem-se que tal parâmetro avalia o erro no trecho íngreme da curva de elevação adiabática. Pelo exposto acima, conclui-se que o parâmetro de erro $RMSTE_6$ tende a assumir valores maiores, comparado ao parâmetro de erro usado nos trabalhos antecessores referenciados [13] [15].

A Figura 4.19 mostra os valores de $RMSTE_6$ obtidos para todos os ensaios, excluindo os ensaios considerados *outliers* (item 3.3).

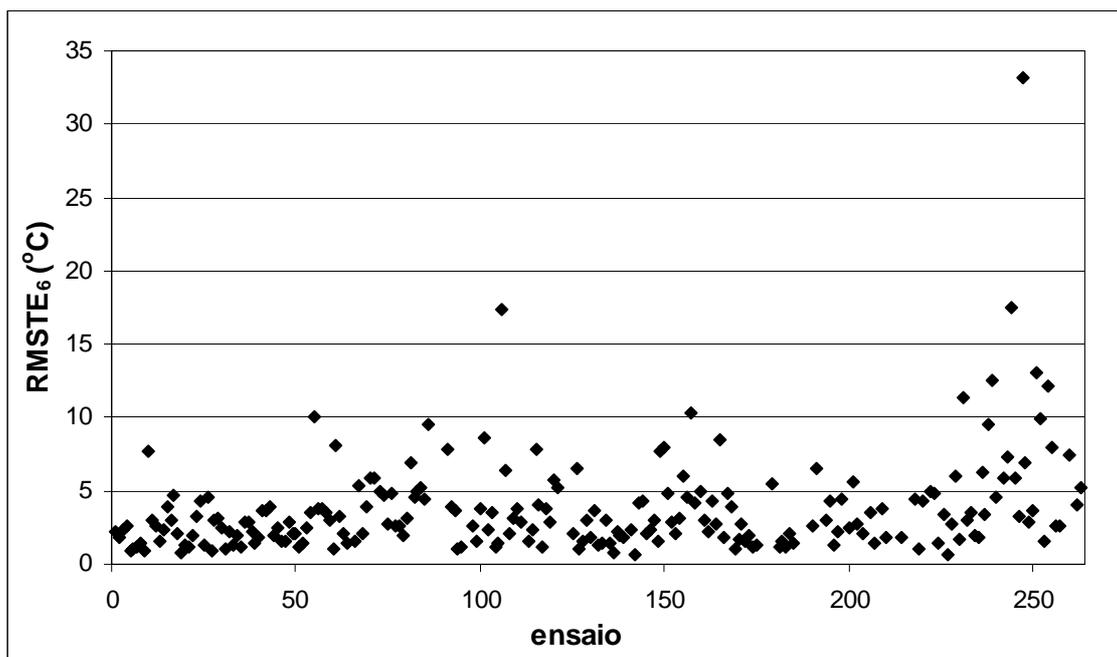


Figura 4.19 – Erro da curva de elevação adiabática calculada pelo modelo.

Na Figura 4.19, o erro acima de 30°C é relativo ao ensaio 247. Esse ensaio é o único com adição de metacaulim ao cimento (25 kg de metacaulim e 347 kg de cimento, por metro cúbico de concreto). Trata-se de uma adição altamente reativa e elevado teor de Al_2O_3 (Figura 3.8). Pela adição de um material diferenciado, esse ensaio pode ser considerado anômalo no banco de dados. A Figura 4.20 mostra o resultado do modelo

para o ensaio 247. Os losangos são os pontos experimentais e as linhas vermelhas verticais são os valores calculados para as temperaturas T_1 a T_6 .

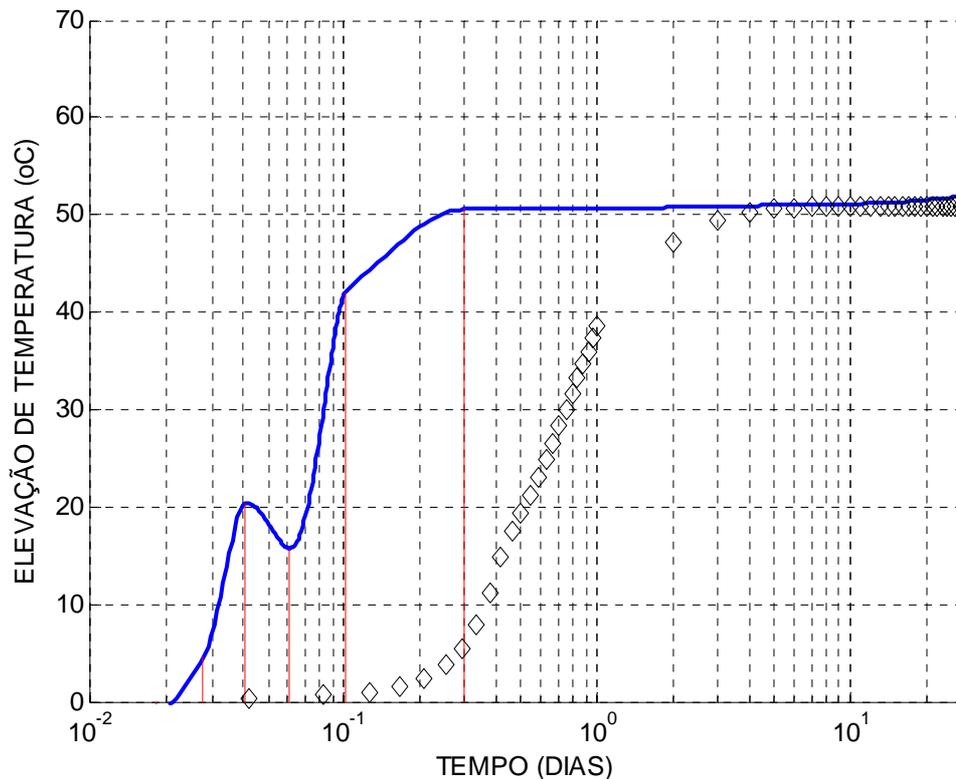


Figura 4.20 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 247. Ensaio com adição de metacaulim, anômalo no banco de dados.

Ainda na Figura 4.19, o segundo erro acima de 15°C é relativo ao ensaio 244. Nesse ensaio a quantidade de cimento é 444 kg/m^3 . Essa quantidade é superada apenas nos ensaios 262, 263 (475 kg/m^3 , ambos) e 177 (522 kg/m^3), sendo que este último ensaio é *outlier* (item 3.3). A Figura 4.21 mostra o resultado do modelo para o ensaio 244.

A Figura 4.20 e a Figura 4.21 ilustram como o deslocamento lateral da curva calculada pode impactar no erro global da curva (RMSTE_6). No modelo deste trabalho, o parâmetro ligado ao deslocamento lateral da curva é o parâmetro t_{TOPO} . A Figura 4.22 mostra que as seis piores previsões da curva de elevação adiabática estão associadas a erros para menos na previsão de t_{TOPO} com magnitudes superiores a 48%.

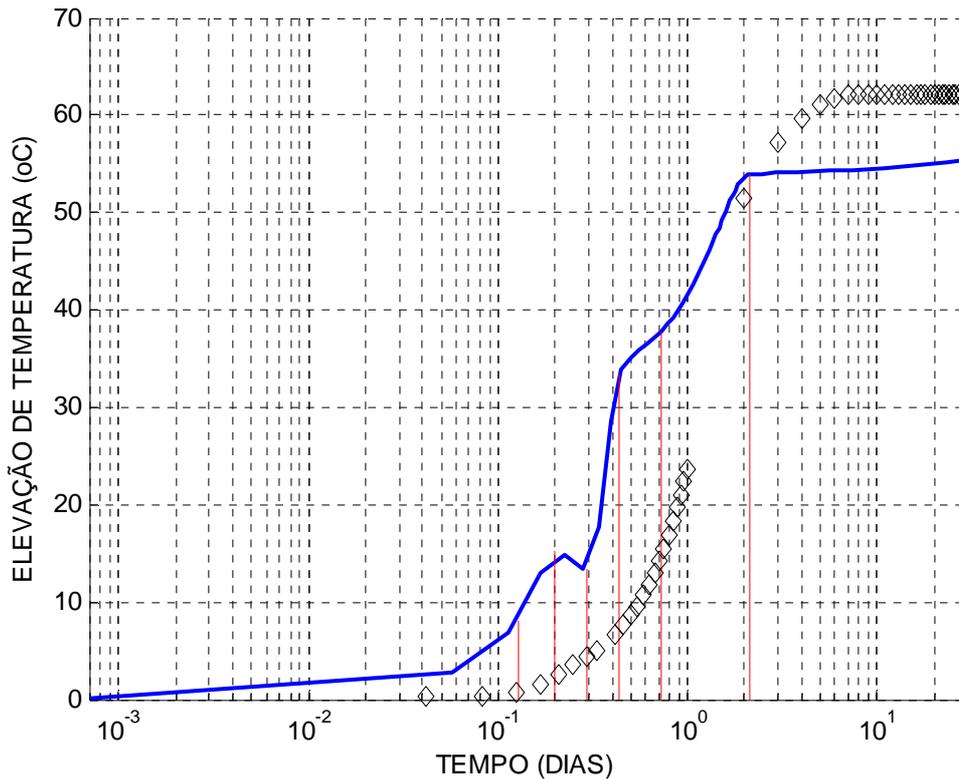


Figura 4.21 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 244. Ensaio com 444 kg de cimento por metro cúbico de concreto.

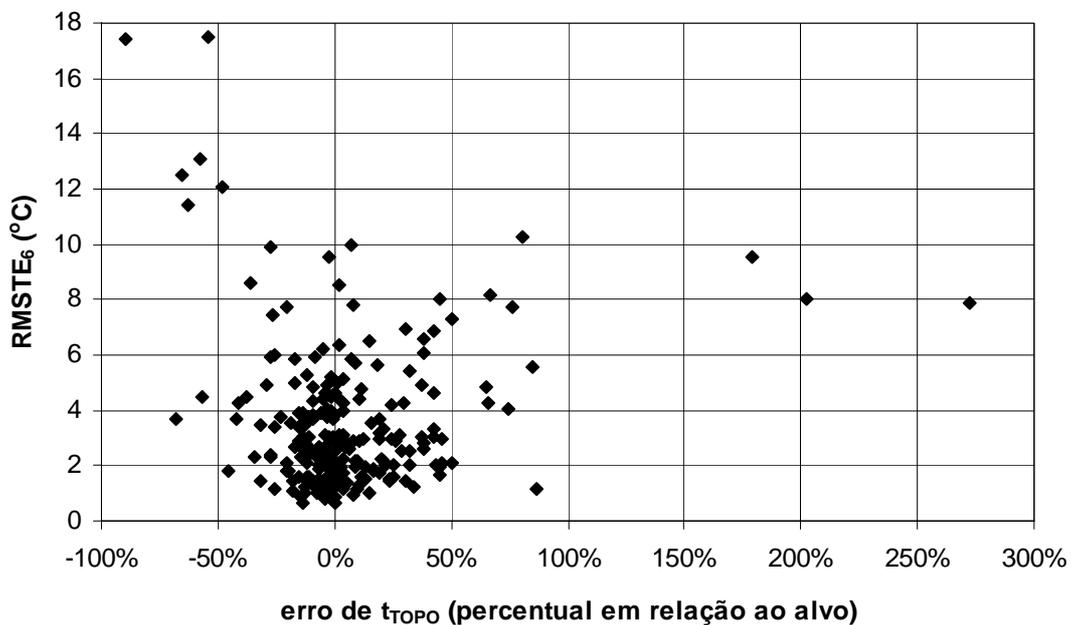


Figura 4.22 – Relação entre o erro na previsão de t_{TOPO} e o erro global da curva. Não constam na figura os ensaios *outliers* (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.

A Figura 4.23 mostra o desempenho global do modelo. Nota-se que: para 70% dos ensaios o erro $RMSTE_6$ é inferior a $4^{\circ}C$; para 86% dos ensaios o erro $RMSTE_6$ é inferior a $6^{\circ}C$. O valor médio de $RMSTE_6$ na Figura 4.23 é $3,60^{\circ}C$. Esses valores de desempenho são similares aos valores obtidos nos trabalhos anteriores já referidos [13]

[15]. Porém vale lembrar que, como explicado anteriormente, o parâmetro de erro adotado neste trabalho tende a assumir valores mais altos em relação ao parâmetro de erro adotado nos trabalhos citados.

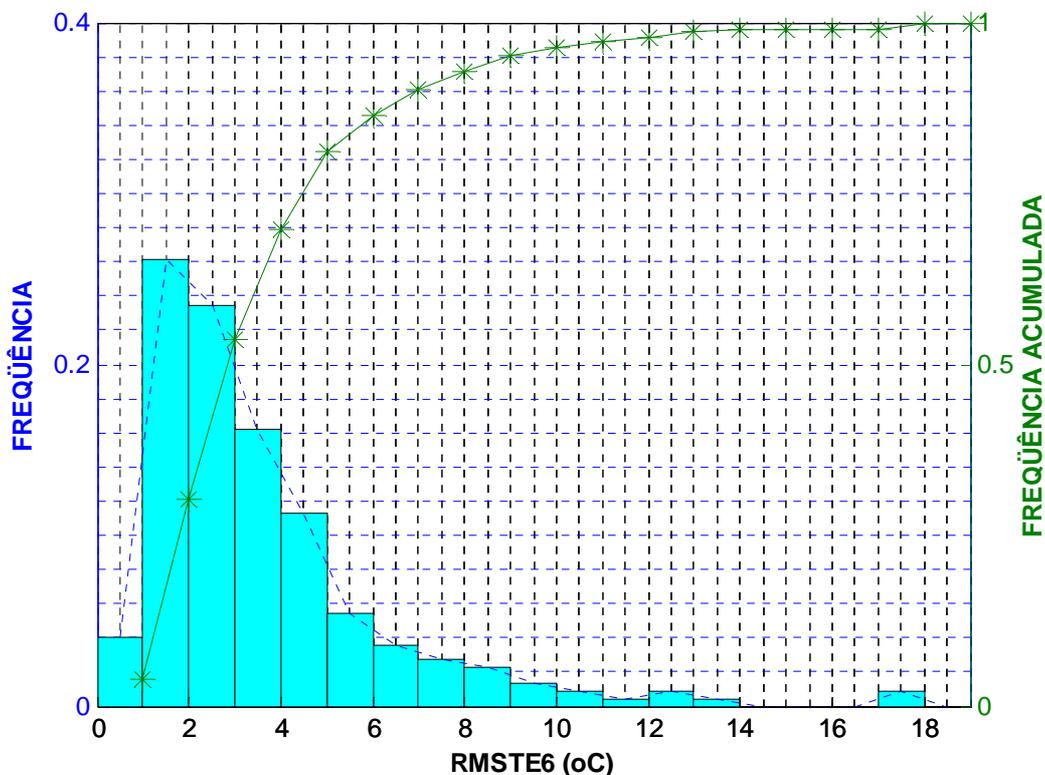


Figura 4.23 – Distribuição de frequência de erro do modelo. A figura não considera os ensaios *outliers* (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.

A Figura 4.24 mostra que os erros de predição acima de 9 °C (Figura 4.23) ocorreram em ensaios com tempo final de hidratação t_{TOPO} inferior a 8 dias, ou seja, em ensaios com elevação temperatura relativamente rápida. Nesses ensaios, o erro na predição de t_{TOPO} é mais impactante no erro global da curva que em ensaios com hidratação mais lenta. A Figura 4.25 e a Figura 4.26 ilustram esse fato. As figuras mostram duas predições de curva de elevação adiabática, ambas com valor quase igual de erro na predição de t_{TOPO} (erros de -1,55 e -1,56 dia). Porém uma curva tem o erro RMSTE_6 muito superior ao da outra.

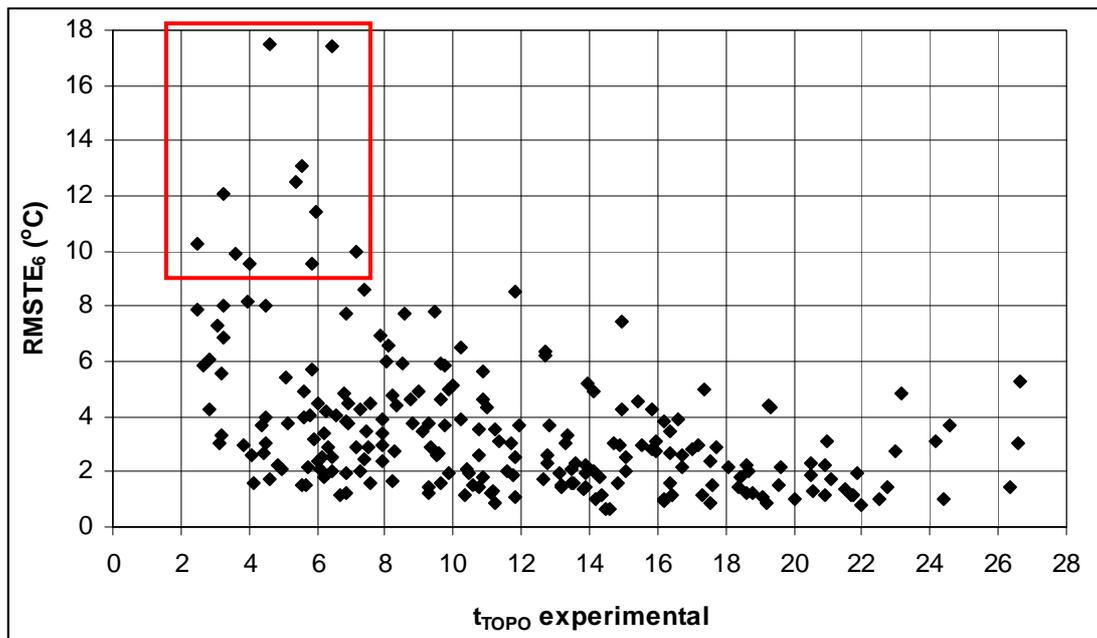


Figura 4.24 – Relação entre o tempo final de hidratação (t_{TOPO}) e o erro de predição do modelo. Não constam na figura os ensaios *outliers* (item 3.3) e o ensaio anômalo da Figura 4.20.

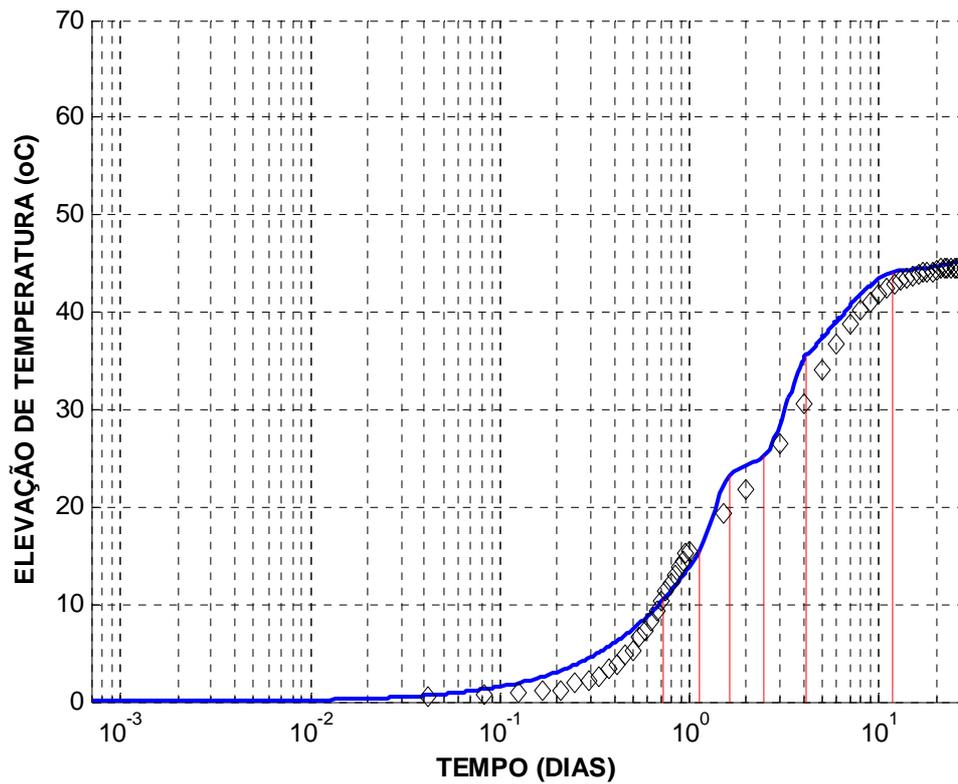


Figura 4.25 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 018. Erro na predição de t_{TOPO} igual a 1,55 dia para menos. t_{TOPO} experimental igual a 13,45 dias. $RMSTE_6 = 2,1^{\circ}C$.

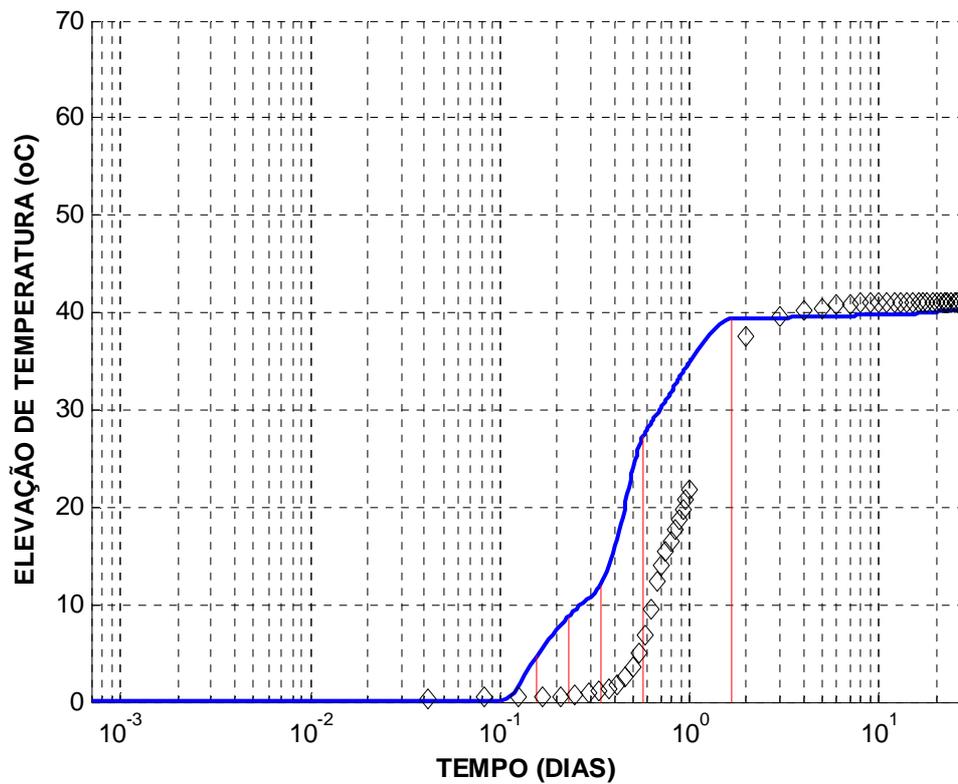


Figura 4.26 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 254. Erro na predição de t_{TOPO} igual a 1,56 dia para menos. t_{TOPO} experimental igual a 3,23 dias. $RMSTE_6 = 12,1^{\circ}C$.

As figuras seguintes mostram as quatro predições do modelo com $RMSTE_6$ igual a $4,0 \pm 0,05^\circ\text{C}$. Nota-se que a predição demasiadamente errada de um parâmetro de temperatura (T_1 a T_6) muitas vezes é denunciada através de um “morrote”, uma concavidade, ou uma angulosidade na curva calculada. Isso permite que a predição de uma curva seja melhorada através da exclusão de um parâmetro de temperatura ou através da correção de dois desses parâmetros com base na tendência visualizada na curva prevista. Com isso, tem-se que na prática o erro do modelo é inferior ao ilustrado na Figura 4.23. Pois a curva obtida após uma análise geométrica simples possui erro inferior à curva originalmente calculada pelo modelo.

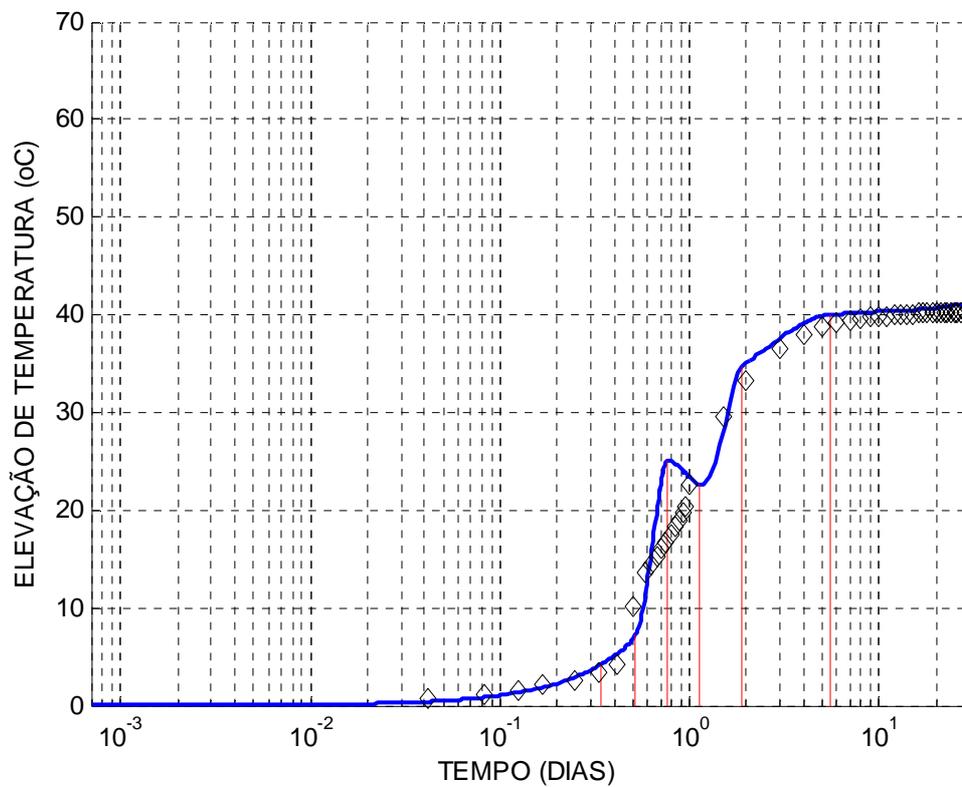


Figura 4.27 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 92. $RMSTE_6 = 3,97^\circ\text{C}$.

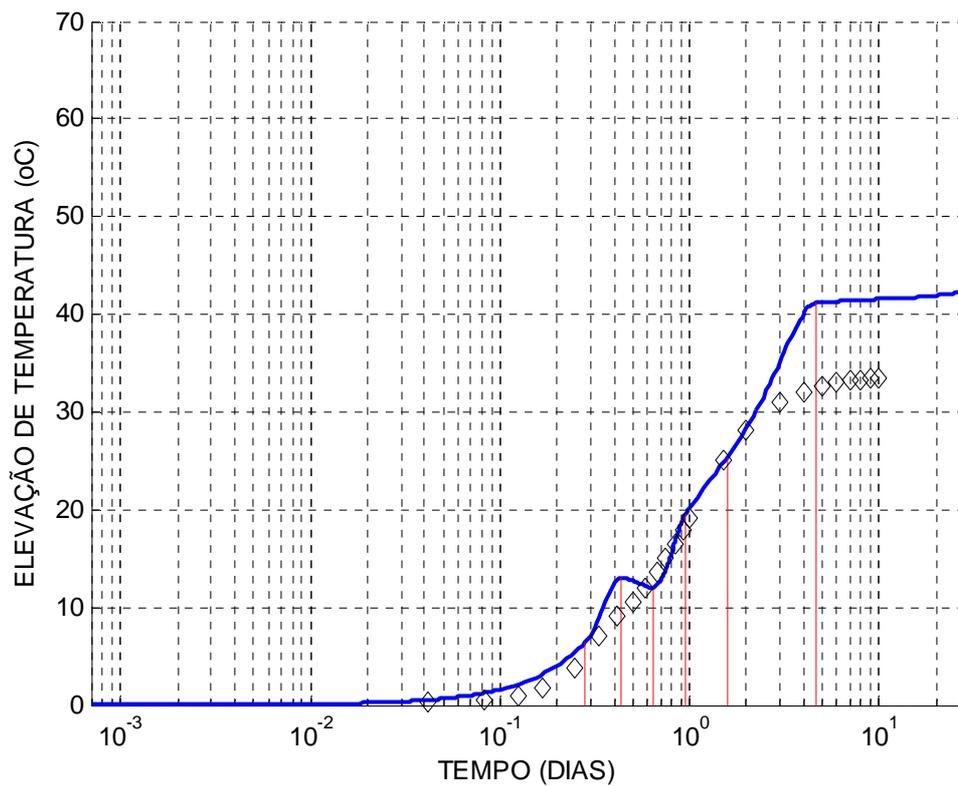


Figura 4.28 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 69. $RMSTE_6 = 3,98^{\circ}C$.

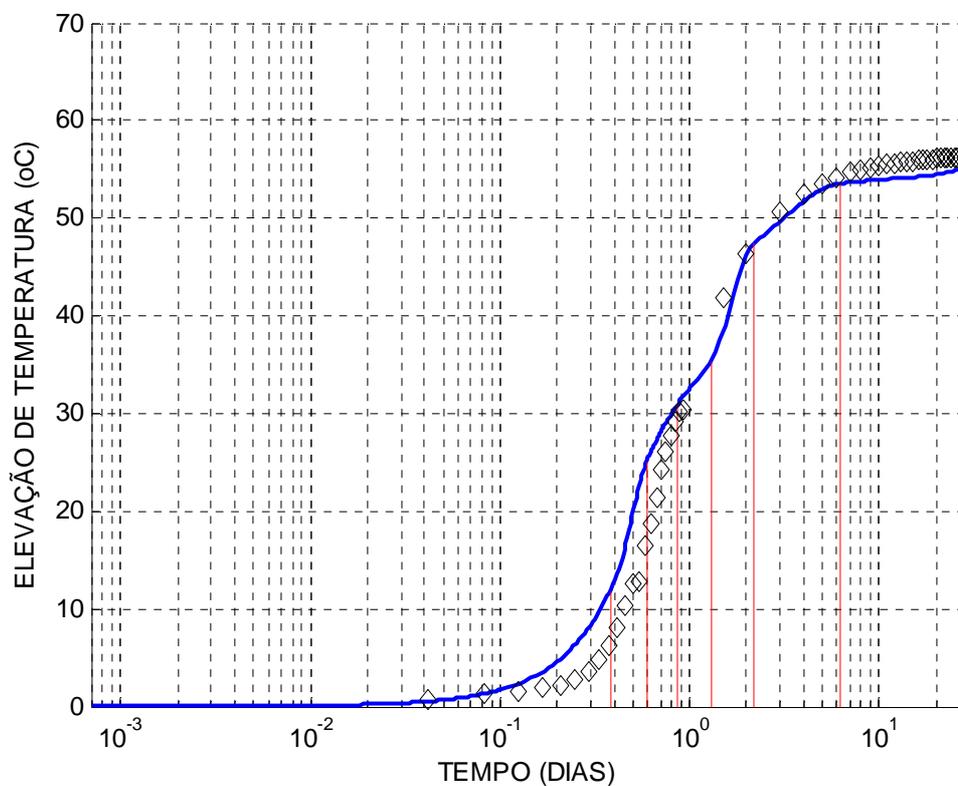


Figura 4.29 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 262. $RMSTE_6 = 4,02^{\circ}C$.

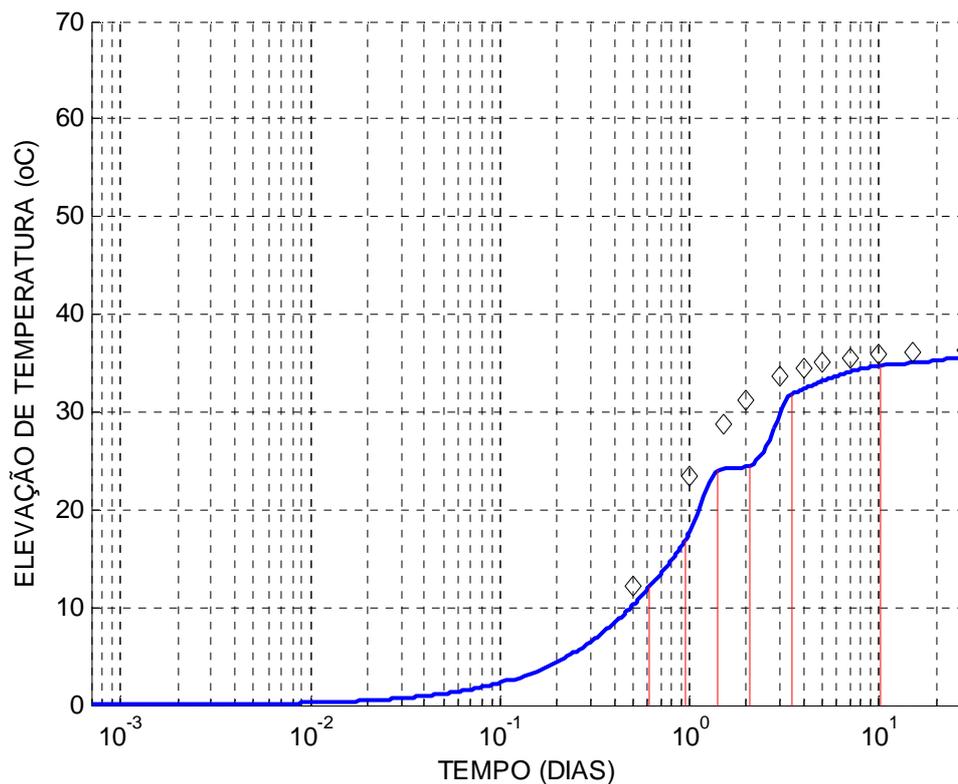


Figura 4.30 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 116. $RMSTE_6 = 4,03^{\circ}C$.

A Figura 4.31 ilustra como o erro de predição após a análise geométrica pode ser muito inferior ao erro de predição da curva originalmente calculada. Na figura, a curva calculada indica claramente que a predição de T_6 está completamente errada.

Os fatores que dão suporte ao uso da análise geométrica para melhoria da predição são:

- A curva de elevação adiabática é sempre crescente e possui uma evolução típica (item 2.5).
- Como o modelo prevê os parâmetros em módulos independentes entre si, torna-se uma coincidência nada freqüente dois ou mais parâmetros terem predição muito errada na mesma curva, uma vez que para cada parâmetro a predição muito errada é minoria dos casos. Com isso pode-se excluir um parâmetro de temperatura com base nos outros.

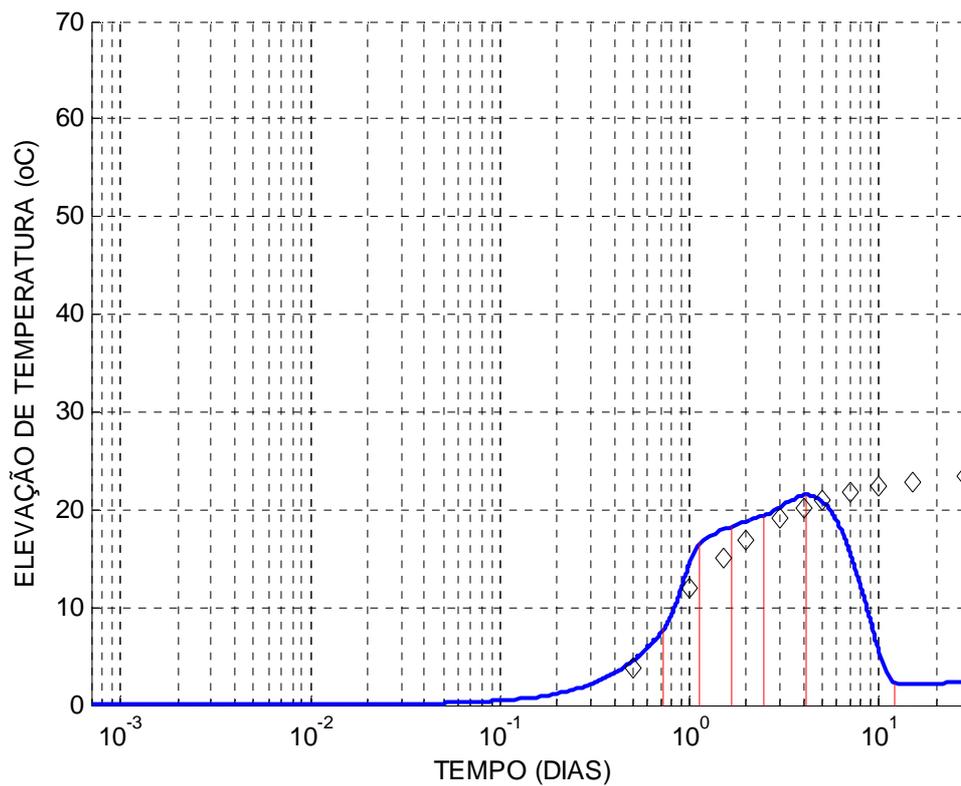


Figura 4.31 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 165 (ponto anômalo da Figura 4.18).
 $RMSTE_6 = 8,54^{\circ}C$.

As figuras a seguir mostram as duas melhores previsões do modelo entre todos os ensaios.

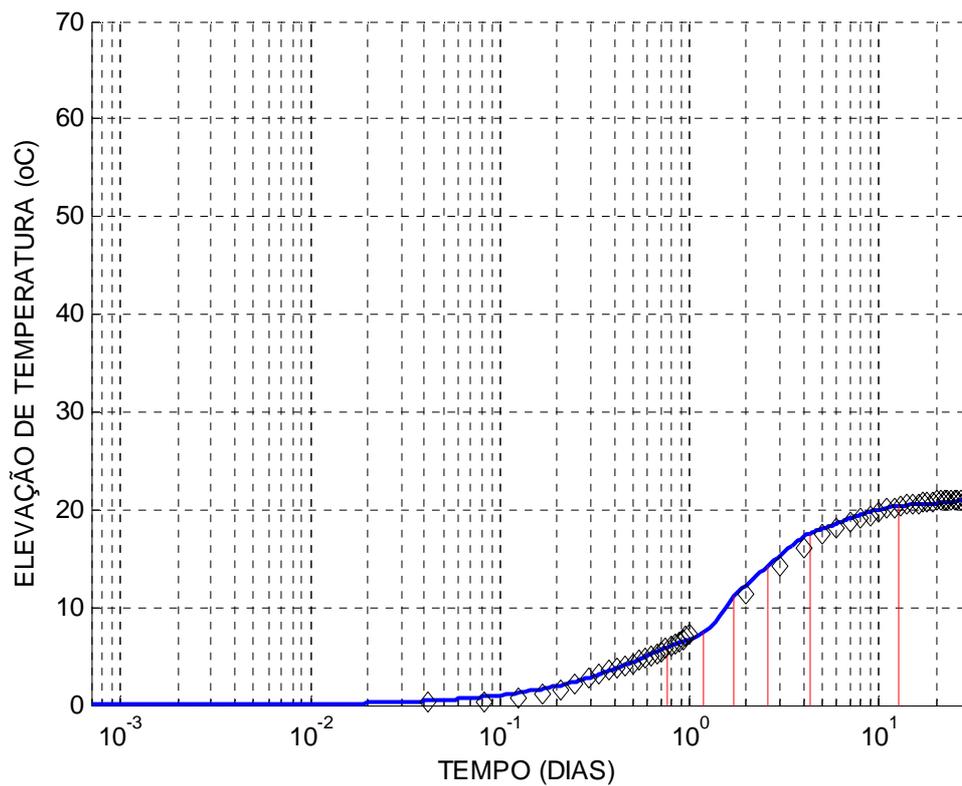


Figura 4.32 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 227. $RMSTE_6 = 0,64^{\circ}C$.

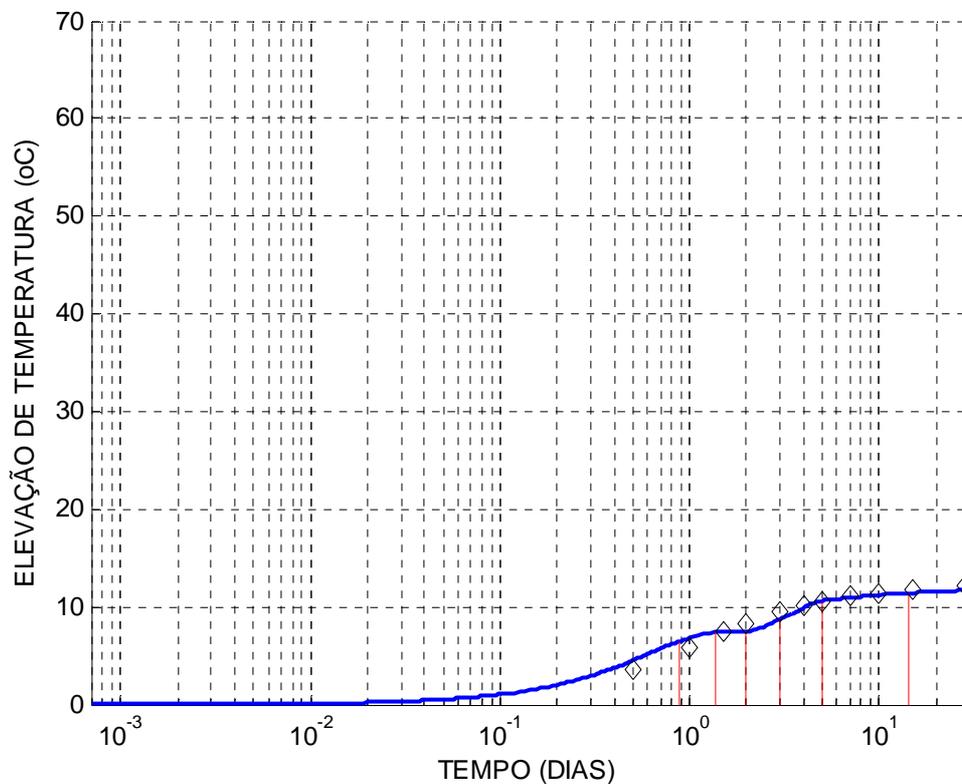


Figura 4.33 – Curva calculada pelo modelo para o ensaio 227. $RMSTE_6 = 0,64^{\circ}C$.

CAPÍTULO 5

- Conclusões

Este trabalho deu continuidade a trabalhos anteriores [13] [15] que também utilizaram dados fornecidos por FURNAS Centrais Elétricas S.A., relativos a ensaios de elevação adiabática. O volume de dados utilizado neste trabalho foi consideravelmente superior. Nos trabalhos referenciados o número de ensaios registrados no banco de dados era 136, enquanto que este trabalho teve acesso às informações de 263 ensaios. Além disso, o banco de dados passou a contar com importantes informações sobre a composição química das adições minerais.

Com o estudo do banco de dados, foram corrigidos registros e identificadas duas premissas diferentes nos registros de composição química do cimento. Dependendo do ensaio, a composição química do cimento englobava ou não a pré-adição. Para cada ensaio, foi identificada qual premissa fora utilizada. O trabalho no banco de dados permitiu o bom aproveitamento das novas informações que foram disponibilizadas.

Este trabalho representa considerável avanço na predição da elevação final de temperatura, face ao bom desempenho atingido pelo modelo neste quesito. O bom resultado na predição da elevação final de temperatura evidencia a importância de incluir a composição química das adições minerais como dado de entrada do modelo. Pois as adições minerais têm influência significativa na liberação final de calor.

Este trabalho mostrou que a melhor escolha para as variáveis de entrada do modelo depende de qual aspecto da curva de elevação adiabática pretende-se prever com mais precisão. Diferentes aspectos da curva de elevação adiabática são representados por diferentes parâmetros, os quais se busca prever. No modelo desenvolvido, tais parâmetros são calculados em módulos independentes, tendo cada módulo uma escolha diferente de variáveis de entrada. Isso melhorou o aproveitamento dos dados disponíveis. Além disso, a separação de um módulo para cada parâmetro da curva confere versatilidade ao modelo. Pois assim é possível trabalhar na melhoria da predição de um parâmetro sem alterar a precisão do modelo na predição dos demais parâmetros.

Os parâmetros escolhidos para representar a curva de elevação adiabática facilitaram significativamente a análise crítica da curva prevista pelo modelo. Isso

trouxe a possibilidade de, através de uma simples análise geométrica, efetuar alterações na curva prevista, obtendo-se uma curva muito mais precisa.

O desempenho global do modelo desenvolvido se mostrou similar ao desempenho de predição apresentado nos trabalhos antecessores [13] [15]. Porém o atual modelo abrange uma diversidade maior de casos. Além disso, como explicado acima, a saída do modelo é de tal forma que facilita a melhoria da curva prevista.

Referências Bibliográficas

- [1] ACI Committe 207, *Effect of restraint, volume change, and reinforcement on cracking of mass concrete*, ACI Manual of Concrete Practice, 2002.
- [2] ACI Committe 207, *Mass concrete*, ACI Manual of Concrete Practice, 2002.
- [3] ACKER, P., *Comportement mécanique du béton: apports de l'approche physico-chimique*, Res. Rep. LCPC 152, Paris, 1988.
- [4] AÏTCIN, P. C., *High-Performance Concrete*, E & FN Spon, Québec, 1998.
- [5] ANDRADE, W. P., BASTOS, J., BITTENCOURT, R. B., “Concreto massa para a usina nuclear de angra dos reis – Cálculo de temperatura”, *XIV Seminário Nacional de Grandes Barragens*, Recife, agosto, 1981.
- [6] ANDRADE, W. P., e Equipe do Laboratório de Concreto de FURNAS, *Concretos massa, estrutural, projetado e compactado com rolo – Ensaios e Propriedades*. 1 ed. São Paulo, Pini, 1997.
- [7] BASTIAN, G., KHELIDJ, A., “Propriétés thermophysiques d'un béton fraîchement coulé”, *Bulletin de Liaison des LPC*, v. 200, pp. 25-35. 1995.
- [8] BOGUE, R. H., *The Chemistry of Portland Cement*, Reinhold Publishing Corporation, New York, Cap. 10, pp 245–268, 1955.
- [9] CBGB (Comitê Brasileiro de Grandes Barragens), ELETROBRAS e IBRACON, *Concreto massa no Brasil – Memória técnica*, Rio de Janeiro, 1989.
- [10] CERVERA, M., OLIVER, J. and PRATO, T., “Simulation of construction of RCC dams. I: Temperature and aging. II Stress and damage”, *Journal of Structural Engineering (ASCE)*, v. 126, pp. 1053-1069, 2000.
- [11] DE LARRARD, F., *Concrete Mixture Proportioning: A Scientific Approach*, 1 ed., French, E & FN SPON, 1999.
- [12] EMBORG, M., “Models and methods for computation of thermal stresses”, in *Prevention of thermal cracking in concrete at early age*, Ed. R. Springenschmid, pp. 178-230, E&FN Spon, London, 1998.
- [13] EVSUKOFF, A. G., FAIRBAIRN, E. M. R., FARIA, E. F., SILVOSO, M. M., TOLEDO FILHO, R. D., “Modeling adiabatic temperature rise during concrete hydration: a data mining approach”, *Elsevier – Computer & Structures*, v. 84, n. 31-32, pp. 2351-2362, 2006.
- [14] FAIRBAIRN, E. M. R., SILVOSO, M. M., TOLÊDO FILHO, R. D., ALVES, J. L. D., EBECKEN, N. F. F., “Optimization of mass concrete construction using genetic algorithms”, *Computer & Structures*, In Press, available online, october, 2003.
- [15] FARIA, E. F., *Predição da exotermia da reação de hidratação do concreto através de modelo termo-químico e modelo de dados*, Tese de Mestrado, COPPE / UFRJ – Programa de Engenharia Civil, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2004.
- [16] FRITSCH, F. N., CARLSON, R. E., “Monotone Piecewise Cubic Interpolation”, *SIAM J. Numerical Analysis*, v. 17, pp. 238-246, 1980.

- [17] HAYKIN S., *Neural networks – a comprehensive foundation*. New York, Macmillian College Publishing Company, 1994.
- [18] KAHANER, D., MOLER, C., NASH, S., *Numerical Methods and Software*, Prentice Hall, 1988.
- [19] KECCMAN, V., *Learning and soft computing: support vector machines, neural networks, and fuzzy logic models*. 1 ed. Massachusetts, Massachusetts Institute of Technology, 2001.
- [20] LEA, F. M., *The Chemistry of Cement and Concrete*, Chemical Publishing Company, Inc., New York, 1971.
- [21] LEA, F. M., *The Chemistry of Cement and Concrete*, Chemical Publishing Company, Inc., p. 596, New York, 1971.
- [22] LUNA, R., WU, Y., “Simulation of temperature and stress fields during RCC dam construction”, *Journal of Construction Engineering and Management (ASCE)*, v.126, pp. 381-388, 2000.
- [23] MAEKAWA, K., CHAUBE, R., KISHI, T., *Modeling of Concrete Performance: Hydration, Microstructure Formation and Mass Transport*, 1 ed., E & FN Spon, London, 1999.
- [24] MEHTA, P.K., MONTEIRO, P.J.M., *Concreto: estrutura, propriedades e materiais*. 1 ed. São Paulo, Pini, 1994.
- [25] NBR 12819 – *Concreto e Argamassa – Determinação da Elevação Adiabática da Temperatura*, ABNT NBR 12819. Associação Brasileira de Normas Técnicas - ABNT, Rio de Janeiro, 1996.
- [26] NBR 5732 – CB 18 – Comitê Brasileiro de Cimento Concreto e Agregados, Cimento Portland comum, ABNT NBR 12819. Associação Brasileira de Normas Técnicas - ABNT, Rio de Janeiro, 1991.
- [27] SILVOSO, M. M., *Otimização da fase construtiva de estruturas de concreto em face dos efeitos da hidratação via algoritmos genéticos*, Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ-PEC, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2003.
- [28] TAYLOR, H. F. W., “Modification of the Bogue Calculation”, *Advances in Cement Research*, v. 2, n. 6, pp. 73-77, 1989.
- [29] UCHIKAWA, H., “Effect of blending component on hydration and structure formation”, *8th International Congress on the Chemistry of Cement*, Rio de Janeiro, Brazil, 1986.
- [30] WALLER, V., *Relations entre Composition des Betons, Exothermie en Cours de Prise et Resistance en Compression*, Thèse de Doctorat, École Nationale des Ponts et Chaussées, Spécialité Structures et Matériaux, France, 1999.
- [31] WASSERMAN, P. D., *Neural computing: theory and practice*. New York. Van Nostrand Reinhold. 1989.

Apêndice A - CÓDIGOS DOS ENSAIOS

Segue uma lista dos ensaios associando a numeração seqüencial utilizada neste trabalho aos códigos originais dos ensaios.

<u>1</u>	<u>140.6.3</u>	<u>41</u>	<u>2380</u>	<u>81</u>	<u>2873</u>
<u>2</u>	<u>1395</u>	<u>42</u>	<u>2434</u>	<u>82</u>	<u>2936</u>
<u>3</u>	<u>1399</u>	<u>43</u>	<u>2437</u>	<u>83</u>	<u>2942</u>
<u>4</u>	<u>1412</u>	<u>44</u>	<u>2438</u>	<u>84</u>	<u>2982</u>
<u>5</u>	<u>1416</u>	<u>45</u>	<u>2440</u>	<u>85</u>	<u>3001</u>
<u>6</u>	<u>1421</u>	<u>46</u>	<u>2455</u>	<u>86</u>	<u>3026</u>
<u>7</u>	<u>1423</u>	<u>47</u>	<u>2458</u>	<u>87</u>	<u>3039</u>
<u>8</u>	<u>1433</u>	<u>48</u>	<u>2460</u>	<u>88</u>	<u>3039 A</u>
<u>9</u>	<u>1437</u>	<u>49</u>	<u>2460 R</u>	<u>89</u>	<u>3039 B</u>
<u>10</u>	<u>1484</u>	<u>50</u>	<u>2471</u>	<u>90</u>	<u>3039 C</u>
<u>11</u>	<u>1757</u>	<u>51</u>	<u>2472</u>	<u>91</u>	<u>3082</u>
<u>12</u>	<u>1758</u>	<u>52</u>	<u>2473</u>	<u>92</u>	<u>3185</u>
<u>13</u>	<u>1759</u>	<u>53</u>	<u>2477</u>	<u>93</u>	<u>3266</u>
<u>14</u>	<u>1772</u>	<u>54</u>	<u>2486</u>	<u>94</u>	<u>3303 A</u>
<u>15</u>	<u>1806</u>	<u>55</u>	<u>2488</u>	<u>95</u>	<u>3303 B</u>
<u>16</u>	<u>1808</u>	<u>56</u>	<u>2503</u>	<u>96</u>	<u>3358</u>
<u>17</u>	<u>1900</u>	<u>57</u>	<u>2504</u>	<u>97</u>	<u>3394</u>
<u>18</u>	<u>1941</u>	<u>58</u>	<u>2542</u>	<u>98</u>	<u>3395</u>
<u>19</u>	<u>1972</u>	<u>59</u>	<u>2569</u>	<u>99</u>	<u>3422</u>
<u>20</u>	<u>1997</u>	<u>60</u>	<u>2616</u>	<u>100</u>	<u>3460</u>
<u>21</u>	<u>2010</u>	<u>61</u>	<u>2619</u>	<u>101</u>	<u>3467</u>
<u>22</u>	<u>2019</u>	<u>62</u>	<u>2627</u>	<u>102</u>	<u>3481</u>
<u>23</u>	<u>2039</u>	<u>63</u>	<u>2634</u>	<u>103</u>	<u>3514</u>
<u>24</u>	<u>2041</u>	<u>64</u>	<u>2677</u>	<u>104</u>	<u>3522</u>
<u>25</u>	<u>2046</u>	<u>65</u>	<u>2725</u>	<u>105</u>	<u>3552</u>
<u>26</u>	<u>2055</u>	<u>66</u>	<u>2766</u>	<u>106</u>	<u>3561</u>
<u>27</u>	<u>2057</u>	<u>67</u>	<u>2769</u>	<u>107</u>	<u>3578</u>
<u>28</u>	<u>2068</u>	<u>68</u>	<u>2775</u>	<u>108</u>	<u>3632</u>
<u>29</u>	<u>2299</u>	<u>69</u>	<u>2778</u>	<u>109</u>	<u>3648</u>
<u>30</u>	<u>2300</u>	<u>70</u>	<u>2805</u>	<u>110</u>	<u>3673</u>
<u>31</u>	<u>2301</u>	<u>71</u>	<u>2812</u>	<u>111</u>	<u>3682</u>
<u>32</u>	<u>2304</u>	<u>72</u>	<u>2818</u>	<u>112</u>	<u>3750</u>
<u>33</u>	<u>2305</u>	<u>73</u>	<u>2820</u>	<u>113</u>	<u>3751</u>
<u>34</u>	<u>2312</u>	<u>74</u>	<u>2820 A</u>	<u>114</u>	<u>3756</u>
<u>35</u>	<u>2337</u>	<u>75</u>	<u>2832</u>	<u>115</u>	<u>3778</u>
<u>36</u>	<u>2363</u>	<u>76</u>	<u>2835</u>	<u>116</u>	<u>3822</u>
<u>37</u>	<u>2366</u>	<u>77</u>	<u>2847</u>	<u>117</u>	<u>3839</u>
<u>38</u>	<u>2376</u>	<u>78</u>	<u>2849</u>	<u>118</u>	<u>3846</u>
<u>39</u>	<u>2378</u>	<u>79</u>	<u>2857 A</u>	<u>119</u>	<u>3859</u>
<u>40</u>	<u>2379</u>	<u>80</u>	<u>2857 B</u>	<u>120</u>	<u>3882 R</u>

121 3883
122 3885
123 3886
124 3899
125 3900
126 4022
127 4056
128 4061
129 4062
130 4065
131 4086
132 4108
133 4110
134 4127
135 4216
136 4217
137 4247
138 4259
139 4290
140 4324
141 4366
142 4392
143 4400
144 4403
145 4433
146 4436
147 4454
148 4459
149 4473
150 4476
151 4481
152 4529
153 4636
154 4673
155 4697
156 4726
157 4731
158 4771
159 4793
160 4801
161 4809
162 4809 R
163 4817
164 4825
165 4835
166 4893
167 4902
168 4954

169 4959
170 4977
171 4994
172 4995
173 4995 R
174 5005
175 5171
176 5309
177 5310
178 5328
179 5346
180 5416
181 980
182 980A
183 2081
184 2147
185 6822
186 5477
187 5478
188 5479
189 5525
190 5703
191 5731
192 5692
193 5736
194 5796
195 5802
196 5833
197 5866
198 5992
199 6048
200 6119
201 6068
202 6198
203 6281
204 6244
205 6343
206 6324
207 6305
208 6637
209 6813
210 6912
211 7062
212 7149
213 7226
214 7269
215 7498
216 7530

217 7542
218 7533
219 7535
220 7536
221 7911-A
222 8031
223 8064
224 8127
225 8169
226 8246
227 8176
228 8177
229 8401
230 8444
231 8476
232 8537
233 8620
234 8669
235 8785
236 8788
237 8791
238 8893
239 8900
240 8902
241 9063
242 9130
243 9819
244 9911
245 9952
246 10013
247 10092
248 10185
249 10271
250 10315
251 10423
252 10506
253 10538
254 10626
255 10751
256 10845
257 10907
258 10944
259 11101
260 11149
261 11221
262 4460
263 4460A