

Tese de Doutorado

UTILIZAÇÃO DE METODOLOGIA DE OTIMIZAÇÃO  
DE PROCESSOS QUÍMICOS APLICADA A  
REAÇÕES DE NITRAÇÃO

**Autora:** Erika Christina Ashton Nunes

**Orientador:** Armando Celso Rodrigues Fabriani

(Tese defendida no IME, em 14 de janeiro de 1998)

Toda vez que se propõe uma metodologia para se obter um determinado resultado em ciência há a necessidade de testá-la para ver sua validade e sua abrangência. Assim, o presente trabalho buscou verificar a aplicabilidade da metodologia de otimização proposta a um conjunto de reações sobre as quais se tem boas informações mecanísticas. O modelo escolhido foi a reação de substituição eletrofílica aromática,  $S_EAr$ , de nitração. Escolheu-se como substratos o fenol, o ácido benzóico, o etilbenzeno e o bromobenzeno, pois os grupos substituintes abrangem uma larga faixa de efeitos, indo de ativante a desativante de reações de  $S_EAr$ . Os substratos foram submetidos a nitração por mistura sulfonítrica, variando-se quatro parâmetros reacionais de acordo com as técnicas de planejamento de experimentos de análise fatorial de dois níveis e posterior extensão para o método de superfície de resposta. Para todos os casos foi possível desenvolver um modelo estatístico para a reação que considerasse como resposta o rendimento total e o rendimento de cada um dos três isômeros possíveis de serem formados pela mononitração. A escolha das faixas de variação dos parâmetros se mostrou adequada, já que obteve-se respostas com valores bem diferentes, mas chegando perto do rendimento total quantitativo. As variações experimentais observadas tiveram sua causa identificada, sendo coerente com o mecanismo proposto para este tipo de reação.

A comparação dos modelos estatísticos obtidos revelou grande similaridade de comportamento entre o ácido benzóico e o etilbenzeno, evidenciando que os grupos substituintes atuam no anel pelo mesmo mecanismo, efeito indutivo. Já o modelo para o bromobenzeno é mais parecido com o fenol, evidenciando que o efeito predominante é o de ressonância.

Foram detectadas indicações de que o mecanismo do bromobenzeno deve ser um pouco diferente dos demais, sendo sugerido que a diferença seja devida à possibilidade de *back bonding* dos orbitais *d* do bromo.

Em todos os quatro casos observam-se condições de reação que provocam a mudança do passo determinante da velocidade de reação, indicando uma mudança no mecanismo.

A metodologia permitiu obter-se melhorias de rendimento total e uma boa seletividade para o isômero *para*, especialmente no caso do fenol (9:1) e do bromobenzeno (15:1), quando a seletividade é maior do que a reportada na literatura.

Para o substrato ácido benzóico foi possível determinar as condições de maior produção dos isômeros *meta* e *orto* em quantidades expressivas (acima de 25%).

Obteve-se, ainda, uma boa correlação de energia livre para o isômero *para*. A variância experimental, aliada aos baixos valores absolutos de rendimento dos outros isômeros, não permitiu fazer o mesmo estudo para eles.

*Dissertações de Mestrado*

## ANÁLISE DOS FATORES QUE AFETAM A CONFIABILIDADE DE QUESTIONÁRIOS DE SATISFAÇÃO DO CLIENTE

**Autora:** *Livia Cavalcanti Figueiredo*

**Orientador:** *Vicente Luz – MC*

(Tese defendida no IME, em 7 de julho de 1997)

Uma organização precisa conhecer como os clientes julgam seus produtos ou serviços. Devido a isso, torna-se necessário desenvolver instrumentos de pesquisa que meçam a percepção do cliente em relação ao produto ou serviço oferecido. Um dos instrumentos mais utilizados é o questionário. Entretanto, na elaboração deste tipo de instrumento de pesquisa é necessário assegurar que os dados obtidos a partir dele possuam a confiabilidade e validade da informação. A confiabilidade pode ser afetada por diversos fatores que diminuem a precisão do instrumento. Este trabalho apresenta uma aplicação da Abordagem dos Incidentes Críticos e Desenvolvimento de Dimensões da Qualidade na elaboração de questionário de medida de satisfação, bem como a análise dos fatores que afetam a confiabilidade deste instrumento de pesquisa.

## RESSONÂNCIA FERROMAGNÉTICA DE FILMES FINOS DE FERRO – ÓXIDO DE FERRO

**Autora:** *Vera Lúcia Duque de Matos Cura*

**Orientador:** *Antonio Alberto Ribeiro Fernandes*

(Tese defendida no IME, em 7 de novembro de 1997)

Os filmes finos magnéticos são de grande interesse científico devido a sua importância para a pesquisa científica fundamental e também por suas inúmeras aplicações tecnológicas.

Entre as técnicas experimentais utilizadas no estudo das propriedades magnéticas de filmes finos de Fe, a ressonância ferromagnética é uma das mais promissoras. As propriedades magnéticas dos filmes são fortemente modificadas pelas condições de superfície, entre as quais a oxidação, a rugosidade etc.

Neste trabalho, medidas da variação angular do campo de ressonância foram realizadas em amostras de filmes finos metálicos magnéticos sistematicamente oxidadas, com o objetivo de identificar uma relação entre a anisotropia perpendicular uniaxial e a espessura da camada superficial de óxido destes filmes.

Amostras de filmes de ferro de 500 Å, 1.000 Å e 2.000 Å de espessura foram produzidas sobre substrato de vidro opticamente polido por evaporação resistiva em câmara de vácuo a  $10^{-6}$  torr, a uma taxa de deposição de 1 Å/s, monitorada por cristal de quartzo.

As amostras foram oxidadas em atmosfera de  $O_2$  à pressão parcial de  $10^{-2}$  torr e à pressão atmosférica, à temperatura de 100°C, por 10, 20, 40, 60 e 180min.

As medidas de ressonância ferromagnética foram realizadas em banda X (9.5 GHz) à temperatura ambiente, com o campo magnético externo aplicado inicialmente no plano do filme e variando até a normal (geometria fora do plano).

Os resultados experimentais mostram a existência de forte correlação entre a oxidação da superfície dos filmes e a variação angular do campo de ressonância.

# CANAL QUENTE DE UM REATOR NUCLEAR: SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL SIMPLIFICADA

**Autor:** *Ubiratan de Carvalho Oliveira – Cap QEM*

**Orientador:** *Cláudio Luiz de Oliveira – PhD*

(Tese defendida no IME, em 27 de novembro de 1997)

Desenvolveu-se um programa computacional, PSATH, para determinação de parâmetros termofluidos no canal quente de um reator nuclear genérico, no que concerne à refrigeração.

Objetivando-se desenvolver um trabalho auto-sustentado, inseriu-se conhecimentos e estudos permitindo-se que, de uma visão global, fosse alcançado um objetivo mais particular.

Neste contexto, fez-se necessária a introdução de uma breve revisão histórica da energia nuclear no mundo, objetivando mostrar sua importância no contexto mundial.

Ressaltou-se a importância da engenharia de reatores, mostrando seus aspectos gerais, bem como um modelo genérico de análise computacional de um reator nuclear.

Objetivou-se dar um caráter genérico aos reatores, trabalhando-se sempre com as características comuns aos diversos tipos, abordando em separado somente as características específicas de cada um deles.

Apresentou-se um estudo dos reatores nucleares e seus sistemas de refrigeração, fazendo-se em seguida uma descrição sucinta de um sistema nuclear de suprimento de vapor.

Estudou-se um sistema de potência nuclear genérico mostrando o ciclo de potência. Descreveu-se, ainda, as partes de um reator, mostrando a constituição física de um reator genérico.

Apresentou-se um estudo da transferência de calor em um reator nuclear, com o objetivo de levantar os perfis de temperatura no núcleo de um reator genérico, através das equações analíticas que determinam as quedas de temperaturas do elemento combustível.

Tendo como base o estudo analítico da variação axial e radial da temperatura no elemento combustível desenvolveu-se o PSATH.

# ALOCAÇÃO DE REQUISITOS DE CONFIABILIDADE, MANUTENIBILIDADE E DISPONIBILIDADE (RAM) COM DESDOBRAMENTO DA FUNÇÃO QUALIDADE (QFD)

**Autor:** *Francisco Raul Aguirre Cabrera – Capitão do Exército mexicano*

**Orientadores:** *Paulo Afonso Lopes da Silva – PhD*

*Vicente Luz – MC*

(Tese defendida no IME, em 1º de dezembro de 1997)

Este presente trabalho visa a apresentar o desenvolvimento de uma metodologia para a alocação dos Requisitos de Confiabilidade, Disponibilidade e Manutenibilidade (*Reliability, Availability and Maintainability* – RAM) de um sistema, aplicando a metodologia de Desdobramento da Função Qualidade (QFD), de modo que, desde a fase de planejamento, seja considerada a voz do cliente e possa-se assegurar a qualidade do sistema no tempo e desta forma maximizar a satisfação do cliente.

Para cumprir esse objetivo realizou-se um estudo bibliográfico da Metodologia do Desdobramento da Função Qualidade (QFD), Requisitos de Confiabilidade, Manutenibilidade e Disponibilidade denominados Requisitos “RAM”, diversos métodos de alocação e Análise de Modos de Falha (FMEA).

A metodologia começa com a consideração dos Requisitos do Cliente e descrição geral do sistema, e através do uso do Desdobramento da Função Qualidade (QFD) são traduzidos esses Requisitos do Cliente em Requisitos de Projeto, os quais são alocados nos subsistemas e componentes do sistema, e desta forma assegurar a qualidade do sistema no tempo e conduzir a um nível maior de satisfação do cliente.

Finalmente, é desenvolvida uma aplicação desta metodologia a uma adaptação de uma viatura do Exército Brasileiro, com o objetivo de mostrar a utilidade do mesmo, como ferramenta para a equipe de projetistas do sistema possa priorizar os componentes de maior importância para garantir a qualidade do produto.

## AVALIAÇÃO DE DADOS ESTRUTURAIS UTILIZANDO MÉTODOS DE OTIMIZAÇÃO GLOBAL

**Autor:** *Vanderlei de Campos Bueno*

**Orientador:** *José Francisco da Cunha Pires Soeiro, PhD*

(Tese defendida no IME, em 5 de dezembro de 1997)

A presente dissertação tem o propósito de apresentar uma formulação para a avaliação, determinação e localização de danos estruturais. A mesma é baseada nas técnicas de identificação de sistemas, resultando num problema de otimização sem restrições.

Supõe-se que o dano produz redução da rigidez da estrutura inicial (sem dano). Utilizando o método do erro de saída que é uma das técnicas de identificação de sistemas, seleciona-se algum tipo de resposta característica do sistema e, através de um processo iterativo, procura-se obter a concordância entre a resposta medida da estrutura danificada e a resposta analítica do modelo através da alteração de seus parâmetros. Dentre os tipos de respostas características possíveis para este propósito, no presente trabalho foram utilizados deslocamentos estáticos, deformações dos elementos e modos de vibração.

A função objetivo a ser minimizada neste problema, é uma função erro dada pela diferença quadrática das duas respostas definidas anteriormente (analítica e medida), e que resulta em um problema de otimização com o espaço de projeto não convexo, ou seja, com vários mínimos locais. Na busca da solução são utilizados os métodos do recozimento simulado e do *zooming*, que são métodos de otimização global. Também se utiliza um método de otimização local, que é o método do “BFGS”, com o objetivo de se estabelecer um paralelo entre os métodos de otimização global e este método de otimização local já consagrado.

## DETERMINAÇÃO DE ACTINÍDEOS EM COMBUSTÍVEL IRRADIADO ATRAVÉS DA INTEGRAÇÃO E ANÁLISE DE SISTEMA DE CÓDIGOS

**Autor:** *Robson Pinheiro Lins – Cap QEM*

**Orientador:** *Cláudio Luiz de Oliveira – PhD*

(Tese defendida no IME, em 28 de novembro de 1997)

O presente trabalho propõe um método para determinação de actínidos em combustível irradiado através do acoplamento do código para cálculo da queima do combustível nuclear ORIGEN-2, com o código para cálculo de célula WIMS-D/4 versão TRACA, originando o sistema de códigos WIMOR.

No sistema WIMOR, as sessões de choque efetivas a um grupo de energia para os principais actínidos (U235, U236, U238, Pu239, Pu240, Pu241 e Pu242) são calculadas pelo WIMS, para um determinado intervalo de tempo, utilizando as concentrações calculadas pelo ORIGEN-2, sendo estas sessões de choque repassadas ao próprio ORIGEN-2 para o cálculo das novas concentrações, as quais, por sua vez, serão utilizadas pelo WIMS no próximo intervalo de tempo. O processo prossegue durante toda história de potência do reator.

O sistema WIMOR é validado através de uma série de testes realizados em três reatores do tipo PWR. Os testes consistem na comparação dos resultados calculados pelo WIMOR com os resultados experimentais e com os resultados calculados através do ORIGEN-2. Em um dos testes, os resultados do WIMOR são comparados com os resultados obtidos por outros 21 códigos para cálculo da queima do combustível nuclear.

## METODOLOGIAS PARA CLASSIFICAÇÃO DE TEXTURAS E CONSULTA A BASES DE IMAGENS

**Autor:** *Wladimir da Silva Meyer – Cap QEM*

**Orientador:** *Emmanuel Piseces Lopes Passos – DC*

**Co-Orientadora:** *Cláudia Maria Garcia Medeiros de Oliveira – PhD*

(Tese defendida no IME, em 19 de dezembro de 1997)

### Resumo

Este trabalho teve por objetivo a pesquisa de técnicas de classificação de texturas, a formulação de algoritmos utilizando resultados de trabalhos, bem como a construção de um protótipo capaz de possibilitar uma avaliação eficaz dessas técnicas.

Como objetivos específicos, incluem-se aspectos que envolvem a investigação de técnicas adequadas de realce (Processamento de Sinais), estudo da adequabilidade de modelos neurais na função de classificadores de texturas (Inteligência Artificial) bem como a utilização de descritores de textura na recuperação de imagens, por conteúdo, em bancos de dados relacionais (Banco de Dados).

### Introdução

Na maioria dos trabalhos pesquisados sobre processamento digital de imagens e classificação de padrões, o processamento utilizado na obtenção da invariância à rotação foi feito no domínio bidimensional, representando um alto custo computacional. Na etapa de classificação, percebeu-se o predomínio do uso de métodos estatísticos na classificação dos padrões sob análise, tais como classificadores bayesianos e classificadores baseados em modelos de Markov.

O que se propõe no presente trabalho é uma redução na dimensionalidade do problema visando a diminuir esforços computacionais através do emprego de técnicas que realizem o processamento unidimensional das imagens utilizadas, a utilização de redes neurais em lugar dos classificadores estatísticos e o emprego de bancos de dados em sistemas classificadores de texturas como meio auxiliar na catalogação dos descritores

empregados, visando a aumentar a flexibilidade de tais sistemas com respeito ao treinamento e testes de redes neurais bem como a recuperação de imagens baseado nos descritores das texturas existentes nas mesmas. Isto pode ser alcançado mediante o estudo dos tipos de pré-processamento necessários a estes sistemas, o estudo das técnicas de extração de características mais empregadas em problemas de classificação de texturas e sua adaptação para uso associado a redes neurais.

### Módulo Classificador

O sistema classificador de texturas empregado segue, de maneira simplificada, a estrutura de um sistema típico (figura 1).

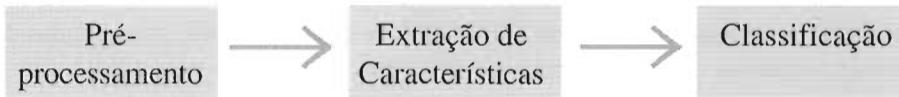


Figura 1: Estrutura típica de um sistema classificador de texturas

As amostras de texturas empregadas são compostas de imagens no formato *bitmap* sem codificação na dimensão de 64x64 pixels. Estas amostras sofrem, na etapa de pré-processamento, um tratamento visando adotar o sistema de invariância à iluminação (filtragem homomórfica). Ainda na etapa de pré-processamento, o espectro de potência bidimensional é calculado a partir da dupla aplicação do algoritmo FFT *Mix-Radix* unidimensional.

O espectro de potência da amostra sob análise é então reamostrado segundo a aplicação de uma espiral discreta uniforme, na etapa de extração de características. Esta reamostragem, associada a uma divisão em camadas do espectro de potência (figura 2), visam adotar o sistema de invariância à rotação e ao mesmo tempo diminuir a dimensão do vetor-descritor utilizado tanto no treinamento de redes neurais, quanto na classificação de novas amostras.

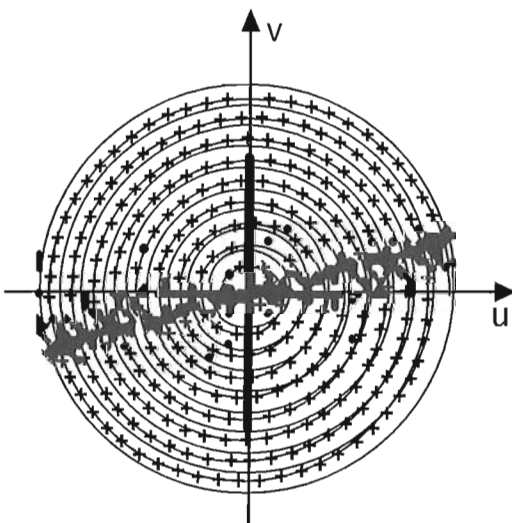


Figura 2: Reamostragem em espiral associada e a decomposição do espectro em camadas

O vetor descritor é composto de dez pares média/variância extraídos de cada uma das camadas em que foi dividido o espectro de potência.

A etapa de classificação é composta por uma rede neural do tipo *Back Propagation* de três camadas, treinada segundo o processo estocástico (correção dos pesos a cada apresentação de nova amostra).

### A recuperação de imagens por conteúdo em banco de dados

O sistema classificador de texturas anterior foi utilizado em conjunto com um sistema gerenciador de bancos de dados com o propósito de gerar consultas a imagens digitalizadas armazenadas em um banco de dados. Esta consulta, feita em SQL, emprega a distância mínima quadrática entre o descritor da amostra e os descritores das texturas presentes nas imagens armazenadas. Uma pré-

classificação da amostra, feita por rede neural, contribui na redução do espaço de busca, uma vez que também é levada em consideração pela cláusula SQL (figura 3).

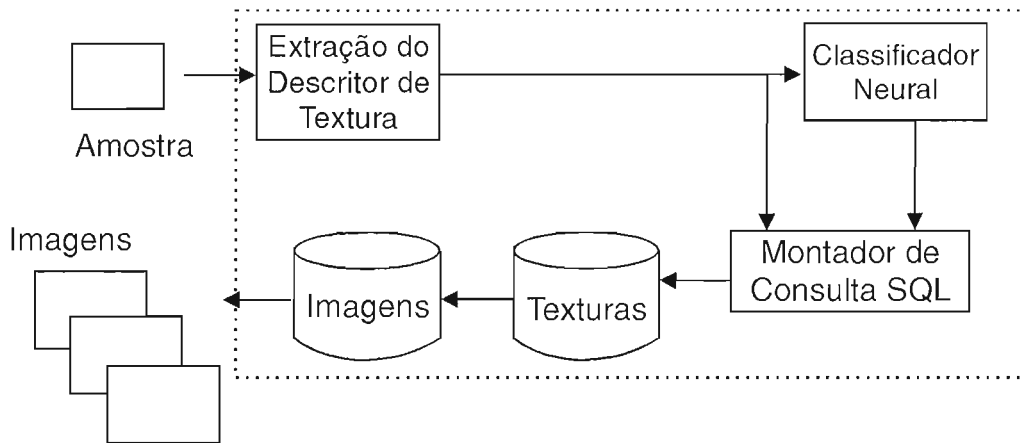


Figura 3: Estrutura da consulta

O ambiente de trabalho foi composto pelos produtos: Oracle 7, C++ Builder, ERwin e Adobe Photoshop. Os testes foram realizados sobre três classes de texturas extraídas do álbum Brodatz, tendo se conseguido resultados bastante satisfatórios.

## ENGENHARIA REVERSA DE REGRAS ATIVAS EM BANCOS DE DADOS RELACIONAIS

**Autor:** *George Hamilton Andrade Costa – CT (IM)*

**Orientador:** *Astério Kiyoshi Tanaka*

(Tese defendida no IME, em 22 de dezembro de 1997)

Uma das características dos sistemas de banco de dados é a habilidade de gerenciar eficientemente grande quantidade de informação. Quando regras são introduzidas nos sistemas de banco de dados, resultando nos chamados sistemas de banco de dados ativo, esta característica deve ser aplicada também às regras.

O desenvolvimento de grandes sistemas com regras ativas requer o entendimento do comportamento das regras, especialmente porque a sua execução pode ser não determinística ou conflitante.

Existem várias ferramentas visuais para projeto de bancos de dados, baseadas em metodologias consagradas de modelagem de sistemas. Contudo, sente-se a necessidade de um tipo de ferramenta que possa suportar a visualização do comportamento ativo, para que o desenvolvimento e manutenção de regras

ativas seja feito de forma mais fácil. De outro modo, seria muito difícil prever as interações complexas entre regras, eventos e as transações sobre entidades e relacionamentos do banco de dados.

O presente trabalho descreve um ambiente de projeto de regras para bancos de dados ativos, baseado no modelo conceitual (ER)<sup>2</sup> (Entidade, Relacionamento, Evento e Regra). Realiza uma análise comparativa de modelos, como também formula metamodelos, com a finalidade de verificar a sua capacidade de expressão de restrições de integridade, principalmente as representadas como regras ativas. Um protótipo de ferramenta para captura de regras ativas, especificadas como *triggers* em bancos de dados relacionais, é apresentado como prova de princípios da proposta.

## UMA CONTRIBUIÇÃO AO ESTUDO DE ASFALTOS MODIFICADOS POR POLÍMEROS

**Autor:** *Romulo Keller Rodrigues*

**Orientadores:** *Luiz Antônio Silveira Lopes – TC*

*Salomão Pinto – Professor*

(Tese defendida no IME, em 10 de novembro de 1997)

Estima-se que em virtude da ineficiência da malha viária, o sistema rodoviário nacional é responsável por perdas estimadas em 25% da produção agrícola, o que representa cerca de 9 bilhões de dólares. Tal número decorre do aumento em 38% dos custos operacionais, 35% no consumo de combustíveis e em até 100% o tempo de viagem. Embora o estado de conservação dos pavimentos não seja a única fonte geradora dos números acima, pode-se considerar que seja o fator preponderante.

Dentre as camadas componentes de um pavimento flexível, o revestimento asfáltico é a que sofre ação maior das cargas transmitidas ao corpo estradal. Suas principais funções são resistir as cargas provenientes do tráfego, proteger as camadas subjacentes do pavimento, oferecer boa condição de rolamento, flexibilidade, resistir a ação abrasiva do tráfego e ao intemperismo.

A qualidade do ligante asfáltico é fundamental para um bom desempenho do revestimento. Desde o fim do século XIX, vários produtos têm sido adicionados ao cimento asfáltico na tentativa de aprimorar suas características reológicas e conseqüentemente aumentar a durabilidade dos revestimentos. Dentre os inúmeros produtos, os polímeros com características elastoméricas são os que têm apresentado resultados satisfatórios.

O presente trabalho teve como objetivo avaliar o desempenho das misturas betuminosas densas do tipo concreto asfáltico e abertas do tipo camada drenante contemplando o emprego de asfaltos modificados por SBS (Copolímero em bloco de estireno-butadieno-estireno).

A partir dos resultados de bancada, verificou-se que as misturas com asfaltos modificados apresentaram excelente comportamento mecânico, caracterizado pela elevada flexibilidade e resistência à ruptura plástica. Quanto aos revestimentos drenantes, verificou-se que as misturas com asfaltos modificados por SBS apresentaram menor desgastes por abrasão, evidenciando a grande capacidade de coesão proporcionada por este tipo de ligante, característica fundamental no que concerne às misturas abertas. CBT