



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA  
CENTRO TECNOLÓGICO DE JOINVILLE  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA E CIÊNCIAS MECÂNICAS

Rodolfo Gabriel Pabst

**MODELAGEM DA PRESSÃO E DA TEMPERATURA DO MOLDE EM UM  
PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO**

Joinville  
2021

Rodolfo Gabriel Pabst

**MODELAGEM DA PRESSÃO E DA TEMPERATURA DO MOLDE EM UM  
PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia e Ciências Mecânicas da Universidade Federal de Santa Catarina para a obtenção do título de mestre em engenharia mecânica.  
Orientador: Prof. Adriano Fagali de Souza, Dr.  
Coorientador: Prof. Alexandro Garro Brito, Dr.

Joinville  
2021

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor,  
através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Pabst, Rodolfo Gabriel

Modelagem da pressão e da temperatura do molde em um  
processo de moldagem por injeção / Rodolfo Gabriel Pabst ;  
orientador, Adriano Fagali de Souza, coorientador,  
Alexandro Garro Brito, 2021.

94 p.

Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Santa  
Catarina, Campus Joinville, Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia e Ciências Mecânicas, Joinville, 2021.

Inclui referências.

1. Engenharia e Ciências Mecânicas. 2. Processos de  
moldagem por injeção. 3. Método K-means. 4. Modelos SARIMA.  
I. Souza, Adriano Fagali de. II. Brito, Alexandro Garro.  
III. Universidade Federal de Santa Catarina. Programa de  
Pós-Graduação em Engenharia e Ciências Mecânicas. IV. Título.

Rodolfo Gabriel Pabst

**MODELAGEM DA PRESSÃO E DA TEMPERATURA DO MOLDE EM UM  
PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO**

O presente trabalho em nível de mestrado foi avaliado e aprovado por banca examinadora composta pelos seguintes membros:

Prof. Carlos Henrique Ahrens, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Diogo Lôndero da Silva, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Roberto Simoni, Dr.  
Universidade Federal de Santa Catarina

Certificamos que esta é a **versão original e final** do trabalho de conclusão que foi julgado adequado para obtenção do título de mestre em engenharia mecânica.

---

Coordenação do Programa de  
Pós-Graduação

---

Prof. Adriano Fagali de Souza, Dr.  
Orientador

Joinville, 2021.

## **AGRADECIMENTOS**

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001. Sendo assim, presto meus agradecimentos à instituição, bem como à Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC), onde o mesmo foi realizado.

Agradeço também a orientação e coorientação dos professores Dr. Adriano Fagali de Souza e Dr. Alexandro Garro Brito (respectivamente), ao Grupo de Pesquisa de Manufatura Auxiliada por Computador (GPCAM), a Brnqs Automação e aos colegas pesquisadores Me. Jackson Miranda e Me. Lindomar Becker. Os resultados dos trabalhos desses últimos, sob mesma orientação, foram essenciais para a obtenção dos resultados apresentados nesta dissertação.

"παντα ρηει".  
(HERÁCLITO)

## RESUMO

Processos de moldagem por injeção são o método mais utilizado para produzir peças de plástico. Entretanto a moldagem por injeção é bastante suscetível a perturbações causadas por mudanças nas propriedades do material e nas condições do processo. Abordagens de controle do maquinário hidráulico são capazes de mitigar a variância do processo, mas a qualidade das peças também depende de fenômenos que ocorrem dentro da cavidade do molde. Neste trabalho, perfis de temperatura do molde e de pressão na cavidade (variáveis de processo) foram medidos com o objetivo de ajustar modelos capazes de descrever o processo — para aplicações futuras em abordagens de controle. A distribuição das etapas da moldagem por injeção e as dinâmicas das variáveis de processo foram consideradas. O estudo do primeiro tópico resultou em um modelo capaz de classificar, por meio do método *k-means*, a situação atual do processo em regimes de incompressibilidade e compressibilidade. O primeiro regime compreende as etapas de preenchimento e resfriamento, enquanto o segundo compreende as etapas de compressão e recalque. Já a modelagem das dinâmicas das variáveis de processo, através de modelos SARIMA, se mostrou capaz de descrever os comportamentos sazonais do processo. Esta abordagem forneceu modelos cujos resíduos apresentaram valores inferiores aos erros experimentais, inerentes à medição das variáveis de processo.

**Palavras-chave:** Modelos SARIMA. Método *K-means*. Processos de Moldagem por Injeção.

## ABSTRACT

Injection moulding processes are the most used method to manufacture plastic parts. However injection moulding is very susceptible to disturbances caused by changes in the material properties or in the processing conditions. Hydraulic machinery control approaches are able to mitigate the process variance, but the quality of the parts also depends on phenomena that occur within the mould cavity. In this work, mould temperature and cavity pressure (process variables) profiles were measured with the aim of fitting models capable of describing the process — for future applications in control approaches. The stages distribution of injection moulding and the process variables dynamics were addressed. The study of the first topic yielded a model capable of classifying, through the k-means method, the current status of the process in incompressible and compressible regimes. The first regime comprises the stages of filling and cooling, while the second one comprises the stages of packing and holding. The modelling of the process variables dynamics, by means of SARIMA models, was proved capable of describing the seasonal behaviours in the process. This approach furnished models whose residues presented values below the experimental errors, inherent to the measurement of the process variables.

**Keywords:** SARIMA Models. K-means Method. Injection Moulding Processes.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Máquina de moldagem por injeção. . . . .	16
Figura 2 – Variáveis de processo durante um ciclo de injeção. . . . .	19
Figura 3 – Curva de escoamento genérica. . . . .	26
Figura 4 – Fluxo típico descrito pelo modelo de Hele-Shaw. . . . .	33
Figura 5 – Queda de pressão isotérmica e não-isotérmica na cavidade do molde. . . . .	37
Figura 6 – Perfil de avanço da rosca recíproca. . . . .	40
Figura 7 – Modelos CAD da peça e do molde. . . . .	44
Figura 8 – Posições dos termopares. . . . .	45
Figura 9 – Variáveis de processo — Processo (II). . . . .	46
Figura 10 – Partição de um conjunto de amostras através do método <i>k-means</i> . . . . .	48
Figura 11 – Autocorrelação de processos de ordens $p = 1$ e $P = 1$ . . . . .	54
Figura 12 – Autocorrelação dos processos de ordens $q = 1$ e $Q = 1$ . . . . .	55
Figura 13 – Pressão na cavidade do molde. . . . .	62
Figura 14 – Temperatura do molde . . . . .	63
Figura 15 – Agrupamentos das amostras das variáveis de processo. . . . .	64
Figura 16 – Partição das amostras $(p_t, T_t, T_t^*)$ através do método <i>k-means</i> . . . . .	65
Figura 17 – Partição da série temporal $p_t$ através do método <i>k-means</i> . . . . .	66
Figura 18 – Variáveis de processo diferenciadas. . . . .	67
Figura 19 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 1). . . . .	68
Figura 20 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(3, 0, 0) $\times$ (2, 1, 0) <sub>92</sub> . . . . .	69
Figura 21 – Estimativas do modelo SARIMA(3, 0, 0) $\times$ (2, 1, 0) <sub>92</sub> . . . . .	69
Figura 22 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 2). . . . .	70
Figura 23 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(4, 0, 1) $\times$ (1, 1, 1) <sub>92</sub> . . . . .	71
Figura 24 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 1) $\times$ (1, 1, 1) <sub>92</sub> . . . . .	72
Figura 25 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 2). . . . .	72
Figura 26 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(4, 0, 0) $\times$ (0, 1, 0) <sub>92</sub> . . . . .	73
Figura 27 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 0) $\times$ (0, 1, 0) <sub>92</sub> . . . . .	73
Figura 28 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(4, 0, 0) $\times$ (1, 1, 0) <sub>111</sub> . . . . .	75
Figura 29 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 0) $\times$ (1, 1, 0) <sub>111</sub> . . . . .	76
Figura 30 – Validação do modelo SARIMA(3, 0, 0) $\times$ (2, 1, 0) <sub>92</sub> . . . . .	78
Figura 31 – Validação do modelo SARIMA(4, 0, 1) $\times$ (1, 1, 1) <sub>92</sub> . . . . .	78
Figura 32 – Validação do modelo SARIMA(4, 0, 0) $\times$ (0, 1, 1) <sub>92</sub> . . . . .	78
Figura 33 – Validação do modelo SARIMA(1, 0, 1) $\times$ (1, 1, 0) <sub>96</sub> . . . . .	79
Figura 34 – Validação do modelo SARIMA(2, 0, 2) $\times$ (1, 1, 0) <sub>96</sub> . . . . .	79
Figura 35 – Validação do modelo SARIMA(3, 0, 1) $\times$ (1, 1, 1) <sub>111</sub> . . . . .	79

## LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação entre modelos da moldagem por injeção. . . . .	17
Tabela 2 – Seleção de variáveis na Equação Genérica de Transporte. . . . .	28
Tabela 3 – Resultados da modelagem do processo . . . . .	74
Tabela 4 – Validação dos modelos . . . . .	77

## LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ARIMA	autorregressivo de média móvel integrada ( <i>autoregressive integrated moving average model</i> )
CAE	engenharia assistida por computador ( <i>computer aided engineering</i> )
CAPES	Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil
DBSCAN	clusterização espacial de aplicações com ruído baseada em densidade ( <i>density-based spatial clustering of applications with noise</i> )
DTW	sincronização temporal dinâmica ( <i>dynamic time warping</i> )
GPCAM	Grupo de Pesquisa de Manufatura Auxiliada por Computador
HDPE	polietileno de alta densidade ( <i>high density polyethylene</i> )
i.i.d.	independentes e identicamente distribuídas
ILC	controle por aprendizagem iterativa ( <i>iterative learning control</i> )
LOF	fator local de anormalidade ( <i>local outlier factor</i> )
OLC	controle online ( <i>online control</i> )
OLP	planejamento offline de processo ( <i>offline process planning</i> )
OLTS	solução offline de problemas ( <i>offline trouble shooting</i> )
PP	polipropileno
PS	pontos singulares
PVC	policloreto de vinila
RNA	rede neural artificial
SARIMA	sazonal autorregressivo de média móvel integrada ( <i>seasonal autoregressive integrated moving average model</i> )
SARIMAX	SARIMA com entrada exógena
SVM	máquina de vetor de suporte ( <i>support vector machine</i> )
UFSC	Universidade Federal de Santa Catarina
WLF	Williams-Landel-Ferry

## LISTA DE SÍMBOLOS

$\Gamma_{PS}$	Instante da ocorrência do ponto singular
$\Omega_{PS}$	Magnitude do ponto singular
$\Psi_{PS}$	Tipo do ponto singular
$\omega_{PS}$	Janela de tempo associada a pontos singulares do tipo 1
$\tau_{PS}$	Janela de tempo associada a pontos singulares do tipo 3
$\lambda_T$	Tempo de relaxação
$T_T$	Duração do experimento reológico
De	Número de Deborah
$\tau$	Tensão de cisalhamento
$\dot{\gamma}$	Taxa de cisalhamento
$\eta_0$	Coeficiente de consistência
$n$	Índice da lei de potências
$\tau^*$	Tensão de transição entre o primeiro regime Newtoniano e o regime pseudo-plástico
$a_T$	Fator de deslocamento tempo-temperatura
$T_g$	Temperatura de transição vítrea
$\rho$	Densidade
$t$	Tempo
$\varphi$	Propriedade genérica transportada pelo escoamento
$\Gamma$	Difusividade
$S_\varphi$	Fontes da propriedade $\varphi$
$\vec{u}$	Campo de velocidades do escoamento
$e_i$	Energia interna específica
$\eta$	Viscosidade
$k$	Condutividade térmica
$p$	Pressão
$\vec{f}_c$	Forças de campo
$\Phi$	Fonte de calor por dissipação
$c_v$	Calor específico a volume constante
$T$	Temperatura
$e_h$	Entalpia específica
$c_p$	Calor específico à pressão constante
$\vec{g}$	Aceleração gravitacional
$\bar{\dot{\gamma}}$	Taxa de deformação
$B$	Sensibilidade do material polimérico à pressão
$C$	Constante universal dos polímeros
$T_v$	Temperatura de transição volumétrica
$v_t$	Varição do volume específico devido à solidificação do polímero

$n_A$	Número de Avrami
$K_{nak}$	Coeficiente de Nakamura
$\alpha$	Índice de cristalinidade
$L$	Escala de comprimento do escoamento
$U$	Escala de velocidade do escoamento
$\mu$	Viscosidade cinemática de um fluido Newtoniano
$z$	Coordenada cartesiana paralela à espessura da peça
$h$	Espessura da peça
$(x, y)$	Dimensões planares perpendiculares à espessura da peça
$s^+$	Coordenada $z$ da interface líquido-sólido superior no polímero
$s^-$	Coordenada $z$ da interface líquido-sólido inferior no polímero
$\psi$	Fluidez do polímero
$\Pi_T$	Contribuição da variação de temperatura à variação da densidade do polímero ao longo da espessura da peça
$H_\alpha$	Contribuição da variação do índice de cristalinidade à variação da densidade do polímero ao longo da espessura da peça
$h_0$	Espessura da peça à pressão manométrica nula
$C_M$	Coeficiente de complacência da cavidade
$\kappa$	Compressibilidade térmica do polímero fundido
$\beta$	Coeficiente de expansão do polímero fundido
$h_{eff}$	Espessura efetiva do escoamento na cavidade
$Q$	Vazão volumétrica de polímero fundido para cavidade do molde
$D_p$	Atraso de tempo da relação entrada-saída entre abertura da servoválvula e pressão na cavidade
$\tau_p$	Constante de tempo da relação entrada-saída entre abertura da servoválvula e pressão na cavidade
$p_t$	Série temporal da pressão na cavidade
$T_t$	Série temporal da temperatura do molde (termopar 1)
$T_t^*$	Série temporal da temperatura do molde (termopar 2)
$J(c)$	Função de custo do método <i>k-means</i>
$K$	Número de <i>clusters</i> na amostra
$c(t)$	Função de codificação do método <i>k-means</i>
$D$	Número de dimensões da amostra (método <i>k-means</i> )
$a_t$	Série temporal dos resíduos (modelo SARIMA)
$x_t$	Série temporal de variável de processo (modelo SARIMA)
$z^{-1}$	Operador de defasagem
$\varphi_p(z^{-1})$	Operador autorregressivo de ordem $p$
$\theta_q(z^{-1})$	Operador de média móvel de ordem $q$
$\lambda$	Parâmetro da transformação de Box-Cox

$x_t^{(\lambda)}$	Transformação de Box-Cox da série temporal $x_t$
$\Delta$	Operador diferenciador
$\Delta_s$	Operador diferenciador de ordem sazonal $s$
$\Phi_P(z^{-s})$	Operador autorregressivo de ordem sazonal $P$
$\Theta_Q(z^{-s})$	Operador de média móvel de ordem sazonal $Q$
$\varrho(k)$	Função de autocorrelação
$\gamma(k)$	Função de autocovariância
$\hat{\gamma}(k)$	Autocorrelação da amostra
$\varphi_{rr}$	Função de autocorrelação parcial
$\mathcal{N}(0, 1)$	Distribuição normal com valor esperado nulo e variância unitária
$L(\{w_t^t\}; \theta)$	Função de verossimilhança com série temporal $w_t$ e conjunto de parâmetros $\theta$
$\mathbb{E}$	Operador de valor esperado
$\sigma_a^2$	Variância da série de resíduos $a_t$
$Q_{LB}$	Estatística do teste de Ljung-Box
$\chi^2(k)$	Distribuição qui-quadrada com $k$ graus de liberdade
$\varepsilon$	Nível de significância de um determinado teste estatístico
$\varkappa_s$	Assimetria da distribuição dos resíduos
$\varkappa_k$	Curtose da distribuição dos resíduos
$Q_{JB}$	Estatística do teste de Jarque-Bera
$Q_j$	Quartil de índice $j$
IQR	Amplitude interquartil

## SUMÁRIO

<b>1</b>	<b>INTRODUÇÃO</b>	<b>15</b>
1.1	VARIÁVEIS DE PROCESSO E VARIÁVEIS DE MÁQUINA	17
1.2	APLICAÇÕES DE MODELOS DO PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO	20
1.3	OBJETIVOS	21
<b>1.3.1</b>	<b>Objetivo geral</b>	<b>22</b>
<b>1.3.2</b>	<b>Objetivos específicos</b>	<b>22</b>
<b>2</b>	<b>REVISÃO DA LITERATURA</b>	<b>23</b>
2.1	DINÂMICA DO PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO	24
<b>2.1.1</b>	<b>Teoria do escoamento genérico</b>	<b>25</b>
<b>2.1.2</b>	<b>Equações de conservação</b>	<b>28</b>
<b>2.1.3</b>	<b>Modelo de Hele-Shaw</b>	<b>32</b>
<b>2.1.4</b>	<b>Efeitos do congelamento do polímero</b>	<b>35</b>
2.2	MODELAGEM DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO	36
<b>3</b>	<b>METODOLOGIA</b>	<b>43</b>
3.1	MEDIÇÃO DA PRESSÃO E DA TEMPERATURA NA CAVIDADE	44
3.2	ESTUDO 1: IDENTIFICAÇÃO DOS REGIMES DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO ATRAVÉS DO MÉTODO K-MEANS	46
3.3	ESTUDO 2: MODELOS REGRESSIVOS DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO	49
<b>3.3.1</b>	<b>Modelos SARIMA</b>	<b>51</b>
<b>3.3.2</b>	<b>Estimativa das ordens dos operadores lineares</b>	<b>52</b>
<b>3.3.3</b>	<b>Identificação do processo</b>	<b>56</b>
<b>3.3.4</b>	<b>Diagnóstico dos resíduos</b>	<b>58</b>
<b>3.3.5</b>	<b>Validação dos modelos</b>	<b>61</b>
<b>4</b>	<b>RESULTADOS E DISCUSSÃO</b>	<b>62</b>
4.1	CLASSIFICAÇÃO DAS AMOSTRAS DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO	63
4.2	MODELAGEM DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO	66
<b>5</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b>	<b>81</b>
	<b>Referências</b>	<b>83</b>
	<b>APÊNDICE A – DESCRIÇÃO DOS ALGORITMOS</b>	<b>88</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Os processos de moldagem por injeção são o método mais utilizado para produzir peças plásticas. Este tipo de processo é caracterizado por baixo custo, alta produtividade e capacidade de produzir peças com baixa espessura e geometrias complexas. De acordo com Fernandes *et al.* (2016), nas últimas três décadas, a relevância da moldagem por injeção teve um rápido crescimento devido à sua aplicação em indústrias automotivas, eletrônica, médica e de embalagens.

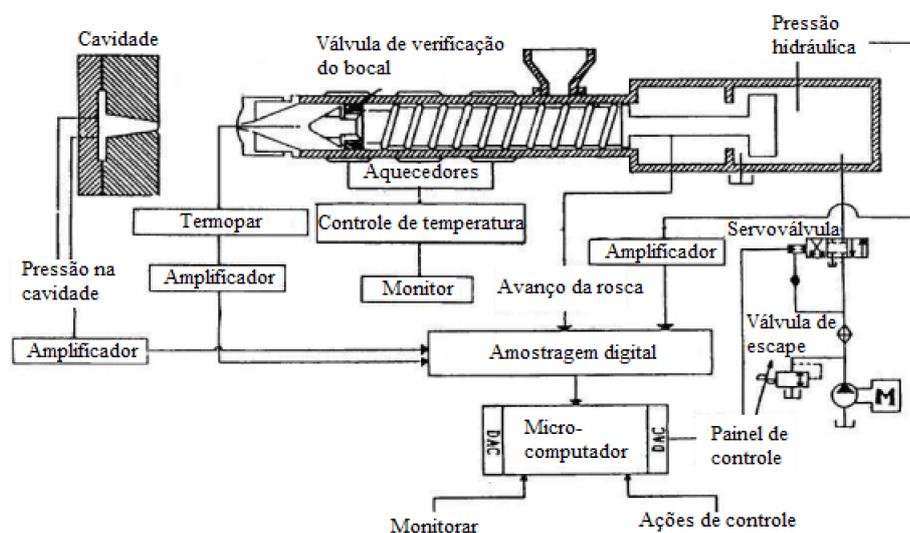
A moldagem por injeção é um processo cíclico e compreende as etapas de preenchimento, compressão, recalque e resfriamento. A forma do produto final é determinada pela deposição do material fundido dentro de um molde. Para isso, a unidade de injeção funde e move o material para dentro da cavidade (GRELLE, 2006). Esse movimento é causado pelo avanço de uma rosca recíproca e pela pressão termodinâmica do material no interior da unidade de injeção. Conforme Beaumont (2004), durante a etapa de preenchimento, material se deposita nas paredes do molde. O material restante flui por cima desse, avançando até ocorrer o fenômeno conhecido como fluxo de fonte. Durante todo o processo, o termoplástico fundido é empurrado através dos canais de injeção, apresentando um perfil de velocidade parabólico. Simultaneamente, há a formação de uma camada congelada na interface entre o termoplástico e as paredes da cavidade e dos canais de injeção.

A Figura 1 apresenta uma máquina de moldagem por injeção controlada por microcomputador. Como é possível observar, a rosca recíproca está acoplada a uma unidade hidráulica, de modo que seu deslocamento é controlado por uma servoválvula. Os grânulos de termoplásticos são fundidos no canhão de injeção devido ao calor dissipado por aquecedores elétricos fora do mesmo, e homogeneizados pela rotação da rosca recíproca.

O polímero fundido oferece resistência aos movimentos de avanço e rotação da rosca recíproca, bem como ao escoamento nos canais de injeção e na cavidade. A viscosidade é uma medida dessa resistência. Logo, quanto menor a viscosidade, menor a resistência. Em fluidos newtonianos, essa é afetada pela variação de temperatura, mas se mantém constante com a variação da taxa de cisalhamento. Entretanto termoplásticos são não-newtonianos e geralmente apresentam comportamento pseudoplástico. Esse é caracterizado pela diminuição da viscosidade conforme a taxa de cisalhamento aumenta, e é causado pela orientação das cadeias poliméricas mediante a aplicação de uma tensão de cisalhamento. Na ausência de um campo de cisalhamento, as cadeias poliméricas apresentam disposição aleatória, retornando a essa quando a tensão de cisalhamento cessa (BEAUMONT, 2004).

Escoamentos viscosos laminares são fenômenos de transporte em que a troca de quantidade de movimento se dá majoritariamente por forças viscosas entre cama-

Figura 1 – Máquina de moldagem por injeção.



Fonte – adaptado de Wang (2012).

das de fluido que deslizam paralelamente. Esses podem ser descritos pela equação genérica de transporte, apresentada em detalhes na Seção 2.1.2.

Embora as equações de conservação possam ser simplificadas (como é apresentado na Seção 2.1), a análise do processo através de equações de transporte é bastante difícil, já que se trata de uma equação diferencial parcial não-linear de segunda ordem. Sadeghi (2000) cita a natureza multivariável do processo e os escoamentos em regime transiente como um fator agravante em tal análise.

As soluções das equações de transporte geralmente são aproximadas através do método de elementos finitos utilizando softwares de engenharia assistida por computador (CAE, *computer aided engineering*). Todavia esses costumam simular as dinâmicas do processo em apenas um ciclo de moldagem por injeção. Logo, regimes transientes que compreendem mais de um ciclo de injeção podem ser negligenciados por abordagens genéricas em CAE. Além disso, de acordo com Finkeldey *et al.* (2020), simulações geralmente falham ao representar os mecanismos de controle das máquinas de moldagem por injeção. Isso pode resultar em desvios consideráveis entre dados simulados e medições ao longo do processo.

Uma alternativa ao modelo descrito por equações de transporte é dada por modelos empíricos do processo de moldagem por injeção, utilizando medições das variáveis de máquina ou do estado termodinâmico do material dentro da cavidade. A Tabela 1 apresenta a comparação entre modelos analíticos, simulações em software CAE e modelos empíricos. As duas primeiras são baseadas em soluções analíticas e aproximadas das equações de transporte, respectivamente. Esses são discutidos na

Seção 2.1 de modo a contemplar o estado da arte.

Tabela 1 – Comparação entre modelos da moldagem por injeção.

	Modelos analíticos	Simulações de CAE	Modelos empíricos
Geometria	Geometrias simples, como placas paralelas e tubos cilíndricos (BRETAS; D'ÁVILA, 2005)	Geometrias complexas aproximadas por malhas de elementos finitos (ZHOU; HU; LI, 2013)	Informações sobre a geometria não são necessárias; dados são obtidos por sensores na cavidade do molde (SADEGHI, 2000)
Parâmetros	Parâmetros de difusividade e equações de estado reológica e termodinâmica	Parâmetros de difusividade e equações de estado reológica e termodinâmica	Os parâmetros são estimados por meio de amostras das variáveis
Dinâmicas	Ao longo de etapas isoladas — e. g., escoamento incompressível (equivalente ao preenchimento) (DAPRÀ; SCARPI, 2006) e resfriamento (PIGNON <i>et al.</i> , 2018)	Ao longo do ciclo de injeção (ZHOU; HU; LI, 2013)	Ao longo do ciclo de injeção e ao longo de intervalos de ordem sazonal (ver Seção 2.2)

Fonte – Elaborado pelo autor.

O presente trabalho tem foco em modelos empíricos, dadas as vantagens enunciadas na Tabela 1. Esse tipo de abordagem pode ser facilmente reproduzido para diferentes geometrias devido à amostragem de variáveis na cavidade do molde.

## 1.1 VARIÁVEIS DE PROCESSO E VARIÁVEIS DE MÁQUINA

Os efeitos transientes que afetam o processo ciclo-a-ciclo podem ser induzidos por mudanças nas propriedades do material ou por perturbação térmica. Yang e Gao (1999) classificam o processo de moldagem por injeção como um processo variável no tempo. Os autores atribuem isso às características sensíveis à temperatura no material polimérico, no óleo hidráulico e em componentes da máquina, e a não-linearidades no comportamento das servoválvulas. Além disso, Sadeghi (2000) cita as variações no índice de fluidez do polímero como uma das principais fontes de variação na qualidade da peça.

Neste trabalho, foi assumido que as variáveis medidas durante a moldagem por injeção podem ser divididas em duas categorias: variáveis de processo e variáveis de máquina. As primeiras são medidas no interior da cavidade do molde ou em

inserções no mesmo. O estado termodinâmico do material injetado e as velocidades de escoamento podem ser consideradas como variáveis de processo. Já as variáveis de máquina compreendem grandezas medidas na máquina de moldagem por injeção, como pressões hidráulicas, forças de fechamento e a velocidade de avanço da rosca recíproca.

A qualidade das peças injetadas é mais correlacionada às variáveis de processo do que às variáveis de máquina. Isso ocorre porque os fenômenos de transporte de calor e de massa durante a moldagem por injeção dependem da geometria do molde. Estudos têm sido realizados para verificar a influência da geometria do molde na moldagem por injeção. A exemplo, Kuo e Jeng (2010) avaliaram os efeitos da variação da espessura da cavidade nas propriedades elásticas da peça injetada. Eles concluíram, após experimentos, que em cavidades mais espessas o calor gerado por atrito viscoso aumenta a ocorrência da autodifusão de ligações moleculares no material fundido.

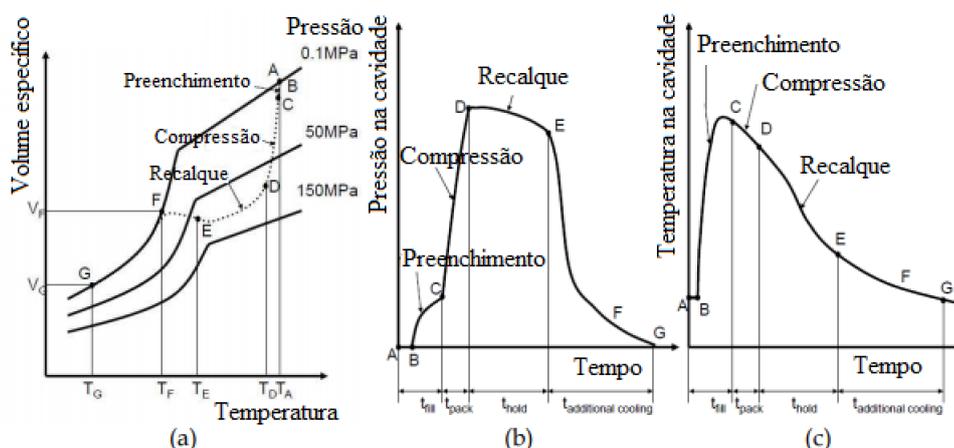
Kovács e Sikló (2011), por sua vez, estudaram os defeitos induzidos por resfriamento não-uniforme em seções com perfil anguloso na cavidade do molde. Através de simulações, no software de CAE Autodesk Moldflow, foi verificado que o resfriamento é assimétrico devido às diferenças de temperatura nas duas metades do molde. Os autores atribuíram a isso a principal causa dos defeitos em seções angulosas. Nam *et al.* (2016) utilizaram os sinais de pressão e temperatura na cavidade para modelar o erro de forma em lentes injetadas, através de um modelo de superfície de resposta. A comparação com resultados experimentais demonstrou que variáveis de pressão e temperatura na cavidade podem ser utilizadas para prever a qualidade das peças.

A Figura 2 apresenta perfis típicos de pressão (Figura 2.b) e da temperatura (Figura 2.c) na cavidade do molde. Essas representam o estado termodinâmico do material ao longo de um ciclo de moldagem por injeção. O volume específico (Figura 2.a)  $v = 1/\rho$ , geralmente, é determinado por uma equação de estado.

O processo retratado na Figura 2 é iniciado no instante A. Entretanto o material fundido só entra em contato com os sensores no instante B. Entre os instantes B e C ocorre o preenchimento. Nessa etapa a cavidade é apenas volumetricamente preenchida, sem que o material tenha sido comprimido. O crescimento do perfil de pressão entre os pontos B e C se deve à deposição de material na cavidade do molde e à troca de quantidade de movimento com as paredes da mesma (ZHOU; HU; LI, 2013). Na etapa seguinte, esse passa por uma rápida compressão, até que o perfil de pressão exibe um pico no instante D. Ocorre, então, a comutação da pressão de injeção para a pressão de recalque. O controle de pressão de recalque mantém a pressão na cavidade em um valor pré-estabelecido, enquanto mais material é injetado para compensar a contração térmica (WANG, 2012).

Diversas características da peça injetada, como peso, morfologia, homogenei-

Figura 2 – Variáveis de processo durante um ciclo de injeção.



Fonte – adaptado de Wang (2012).

dade da superfície, contração térmica e empenamento, são definidas pela pressão na cavidade. De acordo com Michaeli e Schreiber (2009), essa correlação com a qualidade da peça torna a pressão na cavidade uma variável principal no monitoramento e no controle do processo de moldagem por injeção. Essa variável de processo é relevante, sobretudo, durante as etapas de compressão e recalque. Chen e Gao (2003) estudaram a influência do perfil de pressão na cavidade sobre a qualidade das peças. Os autores concluíram, através de experimentos, que o peso das peças é uma função não-monotônica da pressão na cavidade durante as etapas de compressão e recalque. Além do peso, fenômenos como o empenamento e a contração térmica também dependem do perfil de pressão.

Após o congelamento do ponto de injeção (ponto E), uma etapa a volume constante se inicia. Conforme Wang (2012), a configuração da temperatura no ponto E pode ser usada para ajustar o tempo de resfriamento a fim de produzir peças com precisão dimensional otimizada. Porém a temperatura na cavidade não pode ser controlada no intervalo de tempo de um ciclo de injeção devido a um alto grau de inércia do sistema em relação a temperaturas (MICHAELI; SCHREIBER, 2009). Após o instante F, a peça não pode mais ser influenciada pelo processo, sendo ejetada no instante G.

Wang (2012) classifica o ponto D como um importante ponto de transferência, por delimitar a transição para pressão de recalque. De acordo com Huang (2007), o ponto D e o ponto de preenchimento volumétrico (ponto C) servem de referência para diversos métodos de controle de comutação. Para assegurar a qualidade das peças, é necessário que a comutação ocorra entre os pontos C e D. Quando essa ocorre antes do preenchimento volumétrico (subempacotamento), o perfil de pressão apresenta uma queda durante a etapa de compressão e parte do preenchimento ocorre à pressão

de recalque. Isso pode resultar em peças com peso deficiente, dimensões reduzidas e marcas de encolhimento. Quando a comutação ocorre após o ponto D (sobreempacotamento), o perfil de pressão apresenta um pico característico que se mantém até a transição para pressão de recalque. Cavidades sobreempacotadas podem adicionar estresse residual as peças e dificultar a ejeção.

Embora os perfis de temperatura e de pressão na cavidade sejam contínuos, esses são suaves por parte. Alguns pontos, na Figura 2, apresentam seções angulosas que implicam em descontinuidades da primeira derivada desses sinais. Isso se deve a mudanças nas propriedades termodinâmicas do processo, causadas pela incidência de efeitos de compressibilidade nas etapas de recalque e compressão.

## 1.2 APLICAÇÕES DE MODELOS DO PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO

Modelos das variáveis de processo são ferramentas importantes no monitoramento, previsão e controle da moldagem por injeção. As ocorrências de anomalias e de transições entre etapas da moldagem por injeção estão associadas a pontos singulares nos perfis das variáveis de processo. Logo, através do monitoramento do processo é possível identificar comportamentos anômalos e otimizar a segmentação do mesmo (em termos das etapas de preenchimento, compressão, recalque e resfriamento).

Srinivasan e Qian (2005) denominam como pontos singulares (PS), observações que indiquem descontinuidades, pontos de inflexão e máximos e mínimos locais do sinal. Formalmente, um PS pode ser definido como uma tripla  $(\Gamma_{PS}, \Omega_{PS}, \Psi_{PS})$ , onde  $\Gamma_{PS}$  é o instante de ocorrência do PS,  $\Omega_{PS}$  é a magnitude do PS e  $\Psi_{PS}$  é seu tipo. Esses autores classificam três tipos diferentes de PS: 1) pontos de máximo ou mínimo; 2) mudanças abruptas; e 3) mudanças de tendência.

Um PS do tipo (1) pode ser identificado através de mudanças de sinal nas duas primeiras derivadas (ou diferenciações numéricas) da variável de processo. Mudanças abruptas podem ser identificadas através da comparação entre observações em uma janela (com largura  $\omega_{PS}$ ) avançando ao longo do sinal. Nesse contexto, a ocorrência de um PS do tipo (2) pode ser considerada quando a diferença entre o ponto máximo e o ponto mínimo nessa janela ultrapassar um determinado limiar.

Já um PS do tipo (3), é identificado através da análise estatística do sinal em uma janela (com largura  $\tau_{PS}$ ,  $\tau_{PS} > \omega_{PS}$ ) através de modelos estatísticos das observações. Esses podem ser detectados por modelos regressivos quando o erro de previsão excede um determinado limiar. Esse tipo de PS é particularmente comum em perfis de pressão na cavidade, durante certas transições entre etapas (preenchimento-compressão e recalque-resfriamento).

Modelos das variáveis de processo também são úteis no controle da moldagem por injeção. Abordagens baseadas em modelos compreendem, geralmente, modelos adaptativos ou preditivos do processo. A exemplo, Froelich, Kemmetmüller e Kugi

(2019) obtiveram o controle preditivo desse através da modelagem de variáveis de máquina. Já Zou, Wu e R. Zhang (2018) projetaram um modelo preditivo no espaço de estados para o controle de velocidade de injeção otimizando a matriz de pesos desse através de um algoritmo genético. Há ainda abordagens mistas, como o controle por aprendizagem iterativa (ILC, *iterative learning control*) da pressão na cavidade proposto por Hopmann *et al.* (2017), cuja otimização foi baseada em um modelo do processo.

### 1.3 OBJETIVOS

O estado da arte da modelagem de processos de moldagem por injeção é discutido com mais detalhes na Seção 2.2. Contudo é possível mencionar que esse carece de modelos capazes de descrever as dinâmicas do processo ao longo de intervalos contendo várias etapas ou vários ciclos (intervalos sazonais) de moldagem por injeção. Logo, os modelos contêm incertezas<sup>1</sup> devido às dinâmicas não modeladas.

Um modelo com incertezas pode falhar durante procedimentos de detecção de pontos singulares. A existência de dinâmicas não modeladas pode indicar pontos singulares que não correspondem a nenhuma das categorias propostas por Srinivasan e Qian (2005) — i. e., pontos singulares falsos. Procedimentos de previsão também podem ser prejudicados, resultando em resíduos autocorrelacionados.

Neste trabalho foram assumidas duas hipóteses a respeito das variáveis de processo. A primeira enuncia que suas observações se distribuem de maneira distinta em cada uma das etapas da moldagem por injeção. Isso se deve a ocorrência de regimes incompressíveis e compressíveis no escoamento. Logo, é possível segmentar os perfis dessas variáveis com base no regime do escoamento no interior da cavidade.

A segunda hipótese assume que as observações das variáveis de processo estão correlacionadas às observações em ciclos anteriores devido a dinâmicas de ordem sazonal. Isso implica na necessidade de modelar essas dinâmicas a fim de reduzir as incertezas do modelo.

Os estudos apresentados neste trabalho foram baseados em medições da pressão na cavidade e da temperatura do molde. Nas seções seguintes, a expressão *variáveis de processo* é usada como referência exclusiva a essas (e não a qualquer grandeza medida na cavidade do molde).

<sup>1</sup> A adequação de um modelo a um conjunto de dados é sujeita a existência de incertezas estruturadas e não-estruturadas. O primeiro tipo ocorre quando o modelo tem parâmetros constantes, mas o processo é variável no tempo. Já o segundo tipo está associado a modos de frequência não modelados, ou ocorre quando o modelo é linear e o processo é não-linear (OGATA, 2010).

### 1.3.1 Objetivo geral

Dada a contextualização, o objetivo geral desse trabalho é a obtenção de modelos capazes de descrever os perfis das variáveis de processo durante um processo de moldagem por injeção.

### 1.3.2 Objetivos específicos

Para cumprir o objetivo geral, foram propostos como objetivos específicos:

- Aquisição de dados através da amostragem das variáveis de processo durante a produção de peças de polipropileno (PP) H105.
- Segmentação dos perfis das variáveis de processo com base no regime de compressibilidade da moldagem por injeção.
- Análise dos perfis das variáveis de processo, para determinar a influência de dinâmicas de ordem sazonal.
- Obtenção de modelos capazes de descrever as variáveis de processo ao longo de intervalos sazonais.
- Validação dos modelos obtidos.

## 2 REVISÃO DA LITERATURA

O estado termodinâmico de um sistema compressível simples é completamente determinado por duas propriedades intensivas<sup>2</sup> independentes. As noções de estado termodinâmico e fase estão intimamente ligadas, já que a fase de uma substância pura pode ser determinada por suas condições de temperatura e pressão. Tipicamente, uma substância pura pode existir nas fases sólida, líquida e gasosa. Essas diferem entre si quanto a estrutura molecular, a intensidade das forças intermoleculares e a ocorrência de colisão entre as partículas (CENGEL; BOLES, 2004).

Entretanto polímeros fundidos não constituem sistemas compressíveis simples, devido a presença de efeitos de movimento molecular. A compreensão do comportamento de polímeros fundidos é dada pela reologia<sup>3</sup>. Conforme Bretas e D'ávila (2005), o conceito reológico de fase é determinado pela relação entre o tempo de relaxação  $\lambda_T$  do material e a duração  $T_T$  do experimento reológico (aplicação da deformação). A razão entre esses intervalos define o número de Deborah De:

$$De = \lambda_T / T_T \quad (1)$$

que representa a razão entre as forças elásticas e as forças viscosas atuando em um material. Já o tempo de relaxação compreende o intervalo de tempo necessário para que as moléculas desse retornem à conformação de equilíbrio após o experimento reológico.

Em sólidos elásticos,  $\lambda_T \rightarrow \infty$  (i.e.,  $De \rightarrow \infty$ ), enquanto em líquidos viscosos  $\lambda_T \rightarrow 0$  (i.e.,  $De \rightarrow 0$ ). Já polímeros fundidos apresentam  $\lambda_T$  variando entre 1 e 1000 segundos, dependendo do seu peso molecular. Isso os classifica como materiais viscoelásticos (BRETAS; D'ÁVILA, 2005). As principais características de materiais viscoelásticos são a viscosidade não-Newtoniana e os laços de histerese em curvas de tensão-deformação (tixotropia<sup>4</sup> e reopexia<sup>5</sup>). Embora polímeros fundidos apresentem comportamentos tixotrópicos e reopéxicos, esses não serão discutidos neste trabalho, devido a predominância do comportamento não-Newtoniano (pseudoplástico) durante os processos de moldagem por injeção.

Além das categorias compreendendo sólidos elásticos, líquidos viscosos e materiais viscoelásticos, é possível classificar uma substância com base na duração  $\tau$  do experimento reológico. Um material pode se comportar como sólido elástico, se  $T_T \ll \lambda_T$ , ou como líquido viscoso, se  $T_T \gg \lambda_T$ . Assim, do ponto de vista reológico, tudo flui<sup>6</sup> (LENK, 1978; BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

<sup>2</sup> Propriedades que não dependem da massa do sistema (e. g., temperatura e pressão).

<sup>3</sup> Ramo da física que estuda a deformação da matéria.

<sup>4</sup> Quando a viscosidade diminui com o tempo à taxa de cisalhamento constante.

<sup>5</sup> Quando a viscosidade aumenta com o tempo à taxa de cisalhamento constante.

<sup>6</sup> Do grego *παντα ρηει* (panta rei).

A compreensão das etapas e da reologia do processo é necessária para selecionar a metodologia mais adequada às particularidades da moldagem por injeção. Modelos baseados na análise do processo são mais parcimoniosos e consistentes que procedimentos de identificação não-paramétrica, tradicionalmente associada à modelos caixa-preta (ZHAO, P. *et al.*, 2014).

## 2.1 DINÂMICA DO PROCESSO DE MOLDAGEM POR INJEÇÃO

Polímeros são materiais de alto peso molecular constituídos por moléculas de cadeias longas (macromoléculas). Cada macromolécula resulta da polimerização de determinado monômero. A polimerização pode ocorrer em um processo de adição, em que um monômero reage com outros do mesmo tipo formando uma sucessão de meros. Ou então, através de um processo de policondensação. Policondensações envolvem monômeros de tipos diferentes, mas que possuem dois ou mais grupos funcionais reativos. Os monômeros reagem entre si sucessivamente liberando uma molécula pequena (normalmente água ou um álcool) a cada reação. A reação de polimerização depende das condições de temperatura, pressão e concentração dos monômeros. Logo, este é um evento estatístico e produz macromoléculas em uma distribuição de pesos moleculares (BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

Segundo Bretas e D'ávila (2005), a distribuição de peso molecular influencia na quantidade de nós que as macromoléculas formam entre si. Assim, essa influencia o desenvolvimento de tensões e, por consequência, o comportamento reológico do polímero. O modelo mais simples da conformação das cadeias poliméricas é a conformação aleatória. Nesse, as macromoléculas rotacionam livremente em torno das ligações covalentes que formam seu esqueleto. Entretanto as macromoléculas também estão submetidas a restrições devido a interações intermoleculares de curto e longo alcance.

O constante movimento molecular faz com que o enovelamento das macromoléculas seja um processo dinâmico, resultando em uma densidade variável de nós em uma dada localização. Esses movimentos compreendem variações na conformação aleatória da cadeia polimérica e movimentos de translação em relação as macromoléculas vizinhas. Há, ainda, movimentos resultantes da cooperação entre milhares de segmentos de uma macromolécula e movimentos de reptação. A última forma de movimento é prevista pela teoria da reptação de Gennes, que assume que em um polímero fundido, as macromoléculas se movem de maneira semelhante a répteis (BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

A estrutura molecular do material polimérico serve de base para simplificações na modelagem da dinâmica macroscópica do escoamento. De acordo com Zhou, Hu e Li (2013), a maioria das peças moldadas por injeção possui espessura bastante inferior às suas dimensões planares. Além disso, a variação dessa espessura ao

longo das dimensões planares é muito lenta. Nestas condições, a alta viscosidade, produzida pelas longas cadeias moleculares, torna os efeitos da tensão cisalhante viscosa dominante sobre as forças inerciais. Assim, o escoamento na cavidade pode ser descrito pelo modelo de Hele-Shaw, que permite a visualização bidimensional do mesmo (ZHOU; HU; LI, 2013).

O comportamento reológico dos materiais poliméricos também é condicionado pela estrutura molecular de suas cadeias. Esse comportamento reflete a resposta macroscópica do material às tensões e deformações, e é estudado assumindo que o material é um contínuo. Bretas e D'ávila (2005) definem como contínuo uma região do espaço em que as propriedades termodinâmicas do material variam de forma contínua. Essa hipótese é válida quando as dimensões do escoamento são muito maiores do que as dimensões moleculares. Ainda assim, o comportamento reológico do polímero está intimamente relacionado a sua dinâmica microscópica. A relação entre a dinâmica microscópica e a dinâmica macroscópica no escoamento de um material polimérico é explicada por Lenk (1978) através da teoria do escoamento genérico.

É possível concluir que a dinâmica microscópica dos materiais poliméricos é bastante relevante, tanto para fins de caracterização do material (comportamento reológico) como para a modelagem de escoamentos na cavidade do molde. Portanto, a teoria do escoamento genérico será apresentada, precedendo as equações de conservação e o modelo de Hele-Shaw. Isso será feito para utilizar tais modelos como referência ao discutir os resultados nas seções seguintes.

### 2.1.1 Teoria do escoamento genérico

A caracterização de um escoamento viscoso é dada pela medição da tensão de cisalhamento  $\tau$  e da taxa de cisalhamento  $\dot{\gamma}$  em instantes de tempo arbitrários, a fim de determinar a viscosidade do fluido. Em fluidos Newtonianos um único ponto é suficiente, já que a viscosidade é dada pela razão  $\tau/\dot{\gamma}$ . Entretanto em fluidos não-Newtonianos, essa quantidade varia com a inclinação da curva característica  $\tau - \dot{\gamma}$  (LENK, 1978).

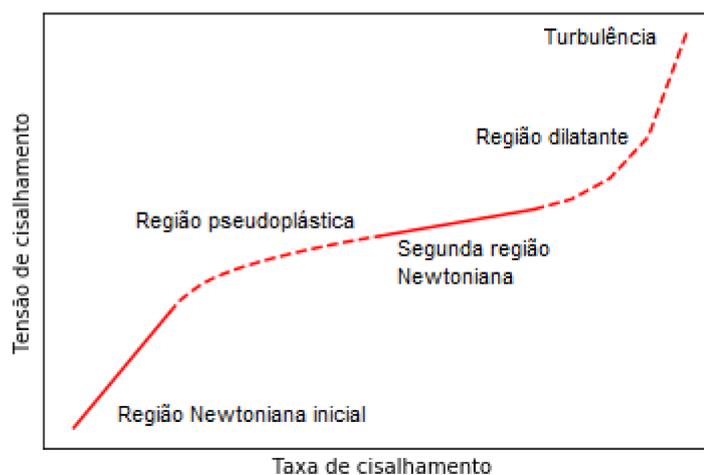
De acordo com Bretas e D'ávila (2005), polímeros apresentam comportamento Newtoniano quando submetidos a taxas de cisalhamento muito baixas. Entretanto processos de moldagem por injeção normalmente apresentam taxas de cisalhamento entre  $10^3$  e  $10^4$   $s^{-1}$ . Para muitos polímeros, é comum que ao longo desse intervalo a viscosidade  $\eta$  seja uma função decrescente da taxa de cisalhamento  $\dot{\gamma}$ . Isso é característico do comportamento pseudoplástico.

Graficamente, o comportamento pseudoplástico é caracterizado por uma curva característica  $\tau - \dot{\gamma}$  convexa (LENK, 1978). Essa pode ser modelada através de uma lei das potências, expressa pela seguinte relação:

$$\tau = \eta_0 \dot{\gamma}^m \quad (2)$$

onde os parâmetros  $\eta_0$  e  $n$  são conhecidos como consistência e índice da lei das potências (BRETAS; D'ÁVILA, 2005). O caso  $m < 1$  corresponde ao comportamento pseudoplástico, enquanto  $m = 1$  e  $m > 1$  correspondem aos comportamentos Newtoniano e dilatante, respectivamente. Conforme Bretas e D'ávila (2005), o comportamento pseudoplástico é o mais comum entre polímeros fundidos, mas não o único. Lenk (1978) propõe um modelo com regimes condicionados pela magnitude da taxa de cisalhamento. Isso pode ser observado na Figura 3.

Figura 3 – Curva de escoamento genérica.



Fonte – adaptado de Lenk (1978).

A teoria do escoamento genérico explica as mudanças no regime de escoamento de polímeros com base em dinâmicas moleculares. Lenk (1978) supõe que em repouso o polímero apresenta conformação e enovelamento aleatórios e efeitos de memória desprezíveis. Assim, pequenas tensões de cisalhamento com duração finita não perturbam a configuração aleatória. Isso resulta em taxas de cisalhamento tal que a razão  $\tau/\dot{\gamma}$  é constante, coincidindo com a primeira região Newtoniana.

Conforme Lenk (1978), aplicando uma tensão de cisalhamento ao polímero fundido, ocorre um decréscimo de entropia e surge uma estrutura orientada pelo cisalhamento. Em um determinado limiar de tensão, o estado aleatório começa a ser perturbado e as moléculas tendem a se organizar de modo a apresentar resistência mínima a deformação. Essa mudança de regime coincide com a região pseudoplástica.

Durante o regime pseudoplástico, as moléculas atingem o máximo alinhamento possível. Isso leva a uma nova mudança de regime, conduzindo a segunda região newtoniana. Quando a tensão de cisalhamento assume valores muito altos, surgem padrões secundários de escoamento. Os segmentos das cadeias poliméricas, alinhados com as linhas de fluxo, começam a ser atritados com moléculas vizinhas. Isso leva à criação de núcleos de enrolamento. Dependendo do diâmetro máximo desses

núcleos, o escoamento pode se tornar impossível. O aumento da resistência ao escoamento, observado nesse regime, coincide com o comportamento dilatante (LENK, 1978).

As duas regiões Newtonianas e a região pseudoplástica são observadas para a maioria dos polímeros fundidos. Entretanto o aumento da taxa de cisalhamento pode tornar o escoamento turbulento, inviabilizando a confirmação experimental da região dilatante. Portanto, o comportamento dilatante é menos comum entre polímeros sob condições ordinárias, mas pode ser observado em alguns polímeros carregados e emulsões de policloreto de vinila (PVC) (BRETAS; D'ÁVILA, 2005). Para esses, as regiões Newtonianas e pseudoplástica se degeneram em um ponto, próximo à origem da curva característica, de modo que não podem ser experimentalmente demonstradas (LENK, 1978).

Conforme Bretas e D'ávila (2005), o comportamento reológico ao longo das duas regiões newtonianas e da região pseudoplástica pode ser representado por modelos de Cross ou por modelos de Carreau-Yasuda. Entretanto apenas o modelo de Cross permite modificações para incluir efeitos de temperatura e pressão. O modelo de Cross genérico é dado pela equação:

$$\eta = \frac{\eta_0}{1 + (\eta_0 \dot{\gamma} / \tau^*)^{1-m}} \quad (3)$$

Nessa,  $\tau^*$  é a tensão na qual ocorre a transição entre o primeiro regime Newtoniano e o regime pseudoplástico e  $n$  é o índice da lei de potências.

O termo  $\eta_0 = \eta_0(\rho, T)$ , na Equação (3), inclui os efeitos de temperatura e pressão no modelo de Cross. Esta modificação é possível porque a viscosidade  $\eta_0$  é uma função viscoelástica do material. Funções viscoelásticas dependem tanto da temperatura quanto dos intervalos de tempo envolvidos nos fenômenos reológicos (ZHENG; TANNER; FAN, 2011). Do ponto de vista energético, materiais viscoelásticos armazenam parte do trabalho externo aplicado e dissipam o restante devido à relaxação. O tempo de relaxação depende da duração de nós temporários após a aplicação de tensões externas, até que o polímero retorne para sua conformação microscópica de equilíbrio (BRETAS; D'ÁVILA, 2005).

Conforme Zheng, Tanner e Fan (2011), para muitos polímeros o logaritmo de uma função viscoelástica à temperatura  $T$  pode ser obtido a partir do valor à temperatura  $T_0$ . Para isso, desloca-se a curva da função viscoelástica no eixo logarítmico do tempo por uma quantidade  $\log a_T(T)$ . O fator de deslocamento tempo-temperatura  $a_T(T)$  é dado pela equação empírica de Williams-Landel-Ferry (WLF):

$$\log a_T(T) = \frac{-C_1^g(T - T_g)}{C_2^g + T - T_g} \quad (4)$$

onde  $T_g$  é a temperatura de transição vítrea e  $C_1^g$  e  $C_2^g$  são constantes determinadas experimentalmente (ZHENG; TANNER; FAN, 2011). A superposição entre tempo e

temperatura é baseada em uma propriedade conhecida como simplicidade termorrológica. Essa é válida quando todos os mecanismos envolvidos em processos de relaxação têm a mesma dependência térmica.

Apesar da natureza empírica, a Equação (4) é baseada no conceito de volume livre (o volume complementar ao efetivamente ocupado pelas moléculas). Portanto, utiliza a temperatura de transição vítrea  $T_g$  como referência. Mas outras temperaturas podem ser utilizadas como referência. A inclusão dos efeitos da pressão também é possível, desde que todos os mecanismos envolvidos nos processos de relaxação tenham a mesma dependência em relação a essa variável (ZHENG; TANNER; FAN, 2011).

### 2.1.2 Equações de conservação

A equação genérica de transporte pode ser postulada em termos do transporte de uma propriedade genérica  $\varphi$  por um fluido com densidade  $\rho$ :

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varphi) + \vec{u} \cdot \nabla(\rho\varphi) = \nabla \cdot (\Gamma \cdot \nabla\varphi) + S_\varphi \quad (5)$$

onde o parâmetro  $\Gamma$  é conhecido como difusividade e  $S_\varphi$  representa fontes adicionais da propriedade  $\varphi$ . Os termos no lado esquerdo da equação representam o transporte convectivo da propriedade  $\varphi$ , enquanto o primeiro termo no lado direito representa o transporte difusivo. Através da seleção da propriedade  $\varphi$  e da difusividade  $\Gamma$  é possível deduzir as equações de conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia (ZHOU; HU; LI, 2013). Como o escoamento do polímero fundido depende das geometrias da cavidade do molde e das seções transversais dos canais de alimentação, cada escoamento exige um sistema de coordenadas adequado.

A Tabela 2 estabelece a relação das equações de conservação com os parâmetros  $\varphi$ ,  $\Gamma$  e  $S_\varphi$ , conforme apresentado por Zhou, Hu e Li (2013). As variáveis características  $\vec{u}$  e  $e_j$  representam o campo de velocidades do escoamento e a energia interna específica do polímero. Suas respectivas difusividades são a viscosidade  $\eta$  e a condutividade térmica  $k$ .

Tabela 2 – Seleção de variáveis na Equação Genérica de Transporte.

Equação	$\varphi$	$\Gamma$	$S_\varphi$
Conservação de massa	1	0	0
Conservação de quantidade de movimento	$\vec{u}$	$\eta$	$-\nabla p + \rho \vec{f}_c$
Conservação de energia	$e_j$	$k$	$\Phi + S_{e_j}$

Fonte – Elaborado pelo autor.

A aceleração do escoamento é representada na equação de conservação de quantidade de movimento através da variação da quantidade  $\rho\vec{u}$ . Conforme a Tabela 2, esse é causado por gradientes de pressão  $-\nabla p$  ao longo do escoamento e forças de campo  $\rho\vec{f}_c$  (agindo sobre o centro de massa do fluido). O sinal negativo atribuído aos gradientes de pressão significa que as partículas, em um volume de polímero fundido, acompanhando linhas de fluxo com  $\nabla p$  positivo são desaceleradas. Já na equação de conservação de energia, o calor gerado por dissipação viscosa  $\Phi$  é responsável pelo aumento da energia interna  $e_i$ .

Embora a energia interna específica  $e_i$  seja a variável característica da equação de energia, é mais conveniente reescrevê-la como uma equação de calor — i. e., em termos da temperatura do fluido (BRETAS; D'ÁVILA, 2005). Assumindo calor específico constante  $c_v$ , a energia interna se relaciona com a temperatura através da expressão  $e_i = c_v T$ . Porém a medição do calor específico a volume constante  $c_v$  é bastante difícil. Isso ocorre porque o receptáculo com a amostra aquecida é submetido a tensões elevadas durante experimentos (ZHOU; HU; LI, 2013).

A relação entre a entalpia específica  $e_h$  e o calor específico à pressão constante  $c_p$  é uma alternativa mais comumente empregada para modificar a equação da energia. Substituindo  $e_i = e_h - p/\rho$  na equação de energia, obtém-se uma equação de conservação de entalpia. Conforme Bretas e D'ávila (2005), a equação de calor é obtida através da substituição da relação termodinâmica:

$$de_h = c_p dT + \left[ v - T \left( \frac{\partial v}{\partial T} \right)_p \right] dp \quad (6)$$

na equação de conservação de entalpia.

A conservação de massa, de quantidade de movimento e de energia é baseada em princípios fundamentais da Física, independentes do comportamento reológico. Porém a combinação entre as equações de conservação e o modelo reológico apropriado fornece as ferramentas necessárias para modelar a moldagem por injeção (LENK, 1978). As equações da continuidade, de conservação de momento e de calor são deduzidas através da substituição das variáveis  $\varphi$  e  $\Gamma$  na Equação (5), conforme a Tabela 2, e da substituição proposta na Equação (6). O procedimento fornece:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0 \quad (7)$$

$$\rho \frac{D\vec{u}}{Dt} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau + \rho \vec{g} \quad (8)$$

$$\rho c_p \frac{DT}{Dt} = \nabla \cdot (k \cdot \nabla T) - T \left( \frac{\partial \ln \rho}{\partial \ln T} \right)_p \frac{Dp}{Dt} + \tau : (\nabla \vec{u}) \quad (9)$$

onde  $\vec{g}$  é o vetor gravitacional,  $k$  é a difusividade térmica<sup>7</sup> do material e  $\tau : (\nabla\vec{u})$  corresponde à dissipação viscosa  $\Phi$ . As equações (7) e (8) estão acopladas à equação de calor devido ao comportamento termorreológico do polímero (ZHENG; TANNER; FAN, 2011) e à relação entre distribuições de velocidade e gradientes de pressão (WHITE, 2006).

A deformação do escoamento é representada pela taxa de deformação  $\bar{\dot{\gamma}}$ . Conforme Bretas e D'ávila (2005), essa grandeza se relaciona com a tensão de cisalhamento  $\tau$  através da equação reológica:

$$\tau = \eta \bar{\dot{\gamma}} = \eta (\nabla\vec{u} + \nabla\vec{u}^t) \quad (10)$$

Embora a taxa de deformação seja equivalente à taxa de cisalhamento em escoamentos unidimensionais, isso não é sempre verdade. Enquanto a taxa de cisalhamento  $\dot{\gamma}$  é uma grandeza escalar, a taxa de deformação  $\bar{\dot{\gamma}}$  é uma grandeza tensorial. A relação entre essas variáveis é dada por:

$$\dot{\gamma} = \sqrt{\frac{\bar{\dot{\gamma}}:\bar{\dot{\gamma}}}{2}} \quad (11)$$

onde o operador  $:$  representa um produto tensorial<sup>8</sup>. Como apresentado na Seção 2.1.1, a relação funcional entre viscosidade e taxa de cisalhamento — i. e.,  $\eta = \eta(\dot{\gamma})$  — pode ser identificada através de um modelo de Cross-WLF modificado.

Lenk (1978) cita que forças gravitacionais e outras forças de campo são desprezíveis quando comparadas as forças viscosas agindo sobre o escoamento. Portanto, o termo  $\rho\vec{g}$  é comumente desprezado. Além disso, é possível submeter as equações (7) - (9) à simplificações, dependendo das etapas do processo. Durante o preenchimento o fluido pode ser considerado incompressível. Isso permite desprezar a derivada temporal  $\partial\rho/\partial t$  na equação da continuidade e os efeitos de dilatação térmica<sup>9</sup> na equação de calor. Bretas e D'ávila (2005) classificam esta situação como bastante relevante na simulação de processamento de polímeros. A incompressibilidade desses é assumida, em geral, devido ao seu alto peso molecular.

Durante o resfriamento, o material na cavidade pode ser considerado isocórico (ZHOU; HU; LI, 2013) e, devido à ausência de transporte convectivo, os efeitos da dissipação viscosa podem ser desprezados. Entretanto durante as etapas de compressão e recalque, a compressibilidade do escoamento deve ser considerada. Para tanto, uma equação termodinâmica de estado é necessária.

<sup>7</sup> A lei de Fourier  $\vec{q} = -k \nabla T$ , onde  $\vec{q}$  é o fluxo de calor, assume que a difusividade é constante. Porém a orientação das cadeias poliméricas, induzida por cisalhamento, torna a difusividade térmica anisotrópica. Conforme Zheng et al. (2011), quando a anisotropia é significativa é necessário formular uma relação tensorial entre o fluxo de calor e a temperatura do material.

<sup>8</sup> Esse produto é dado por  $\bar{\dot{\gamma}} : \bar{\dot{\gamma}} = \sum_{ii} \dot{\gamma}_{ii} \dot{\gamma}_{ii} + \sum_{ij} \dot{\gamma}_{ij} \dot{\gamma}_{ji}$ .

<sup>9</sup> Os fenômenos relacionados à dilatação térmica são contabilizados pelo segundo termo ao lado direito da Equação (9). O sinal negativo indica que a dilatação térmica contribui com a redução da temperatura. O primeiro e o terceiro termos, por sua vez, contabilizam os efeitos de condução de calor e de dissipação viscosa.

Equações termodinâmicas de estado descrevem a compressibilidade do fluido através da relação entre volume específico, pressão e temperatura — i. e.,  $v = v(p, T)$ . Conforme Fernandes *et al.* (2016), a equação termodinâmica de estado também é chamada de relação  $pTv$ , e pode ser modelada através de equações de Spencer-Gilmore ou de equações de Tait.

O modelo de Spencer-Gilmore tem por base uma equação modificada de Van der Waals, ajustada através de dados experimentais em um domínio bem acima da temperatura de transição vítrea. Entretanto esse não é capaz de representar a variação abrupta do volume específico verificada em polímeros semicristalinos em seu ponto de fusão. Já equações de Tait representam tão bem polímeros amorfos quanto polímeros semicristalinos (WANG, 2012; ZHOU; HU; LI, 2013).

A equação modificada de Tait com dois domínios é dada por:

$$v(p, T) = v(0, T) \left[ 1 - C \ln \left( 1 + \frac{p}{B(T)} \right) \right] + v_t(p, T) \quad (12)$$

onde  $v(0, T)$  é o volume específico à pressão manométrica nula,  $B(T)$  é a sensibilidade do material à pressão e  $C$  é uma constante universal igual a 0,0894. De acordo com Wang (2012), dois domínios de temperatura são necessários para modelar a relação  $pTv$ , pois a solidificação muda as propriedades termodinâmicas dos polímeros. A temperatura de transição volumétrica  $T_v$  é assumida como uma função afim da pressão:

$$T_v = b_5 + b_6 p \quad (13)$$

onde  $b_5$  é a temperatura de transição à pressão manométrica nula e  $b_6$  é o incremento linear por unidade de pressão (WANG, 2012). Com base nesses domínios, é possível escrever as funções  $v(0, T)$  e  $B(T)$ :

$$v(0, T) = \begin{cases} b_1^{(s)} + b_2^{(s)}(T - b_5), & \text{se } T \leq T_v \\ b_1^{(m)} + b_2^{(m)}(T - b_5), & \text{se } T > T_v \end{cases} \quad (14)$$

$$B(T) = \begin{cases} b_3^{(s)} \exp [-b_4^{(s)}(T - b_5)], & \text{se } T \leq T_v \\ b_3^{(m)} \exp [-b_4^{(m)}(T - b_5)], & \text{se } T > T_v \end{cases} \quad (15)$$

em que os sobrescritos (s) e (m) denotam os estados sólido e fundido, respectivamente.

A função  $v_t(p, T)$  caracteriza a variação de volume específico no estado sólido. Para polímeros amorfos essa é nula em ambos os domínios, enquanto para polímeros semicristalinos é uma função da pressão e da temperatura:

$$v_t(p, T) = \begin{cases} b_7 \exp [b_8(T - b_5) - b_9 p], & \text{se } T \leq T_v \\ 0, & \text{se } T > T_v \end{cases} \quad (16)$$

Soluções analíticas das equações de conservação comumente envolvem: 1) soluções da equação de momento em condições isotérmicas e 2) soluções da equação

de calor em condições isocóricas. O grupo (1) inclui soluções da Eq. (8) para escoamentos de Couette e de Poiseuille (LENK, 1978; BRETAS; D'ÁVILA, 2005) e para escoamentos pulsáteis. A exemplo, Daprà e Scarpi (2006) apresentaram a solução aproximada de segunda ordem para o escoamento com gradiente de pressão periódico em geometria cilíndrica.

As distribuições de velocidade obtidos através de soluções do grupo (1) podem ser utilizados para solucionar a equação de calor. Porém essas soluções devem ser encaradas apenas como aproximações, pois desprezam o comportamento termorrelológico do polímero. A viscosidade do polímero fundido varia ao longo de gradientes de temperatura. De acordo com Lenk (1978), essa variação não pode ser desprezada quando a distribuição de temperatura compreende gradientes superiores a 1 ou 2 °C.

Soluções do grupo (2) também estão sujeitas a restrições. Pignon *et al.* (2018) apresentam soluções unidimensionais (ao longo da espessura da peça) da equação de calor para polímeros amorfos e semicristalinos. O caso amorfo foi tratado a partir da equação:

$$\rho c_p \frac{\partial T}{\partial t} = k \nabla^2 T \quad (17)$$

assumindo o preenchimento como instantânea e a distribuição inicial de temperatura como uniforme e desprezando anisotropias na condução de calor. Já o caso semicristalino foi tratado a partir do deslocamento de uma interface isotérmica entre as fases amorfa e semicristalina. Um modelo de Nakamura foi empregado para representar a taxa de cristalização do material:

$$\frac{\partial \alpha}{\partial t} = n_A K_{nak} (1 - \alpha) [-\ln(1 - \alpha)]^{(n_A - 1)/n_A} \quad (18)$$

onde  $n_A$  é o expoente de Avrami,  $K_{nak}$  é o coeficiente de Nakamura e  $\alpha$  é o índice de cristalinidade. Entretanto esta aproximação é válida apenas para valores baixos do número de Deborah De.

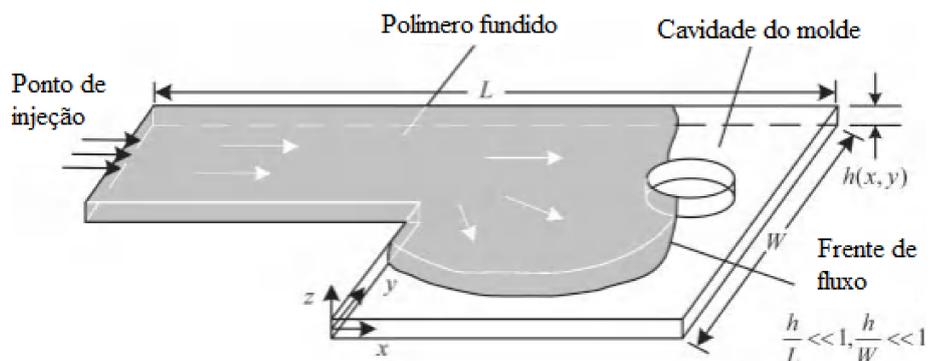
As limitações das soluções analíticas dos grupos (1) e (2), bem como a inexistência de soluções para casos mais genéricos, tornam necessárias as soluções numéricas das equações de conservação. De acordo com Zhou, Hu e Li (2013), o modelo de Hele-Shaw é a simplificação mais utilizada nas simulações de processamento de polímeros.

### 2.1.3 Modelo de Hele-Shaw

Peças fabricadas através de moldagem por injeção geralmente apresentam estruturas com paredes finas. Nestas condições, a estrutura molecular do polímero faz com que as forças inerciais sejam muito menores do que as forças ocasionadas pela tensão de cisalhamento. Conforme Zhou, Hu e Li (2013), quando a espessura  $h$  da peça é muito menor do que suas dimensões planares e varia muito lentamente ao

longo dessas é possível simplificar as equações de conservação conforme o modelo de Hele-Shaw. A Figura 4 apresenta o preenchimento de uma cavidade nas condições supracitadas.

Figura 4 – Fluxo típico descrito pelo modelo de Hele-Shaw.



Fonte – adaptado de Zhou, Hu e Li (2013).

O modelo de Hele-Shaw supõe que o escoamento é laminar e invariante ao longo da espessura da peça. Assim é possível negligenciar o fenômeno de fluxo de fonte e o transporte convectivo de calor perpendicular à espessura (ZHOU; HU; LI, 2013). Estas simplificações são pertinentes à medida que o fluido é pseudoplástico. De acordo com Bretas e D'ávila (2005), quanto maior a pseudoplasticidade mais plana é a distribuição de velocidade ao longo da espessura. Para polímeros com índice da lei de potências  $n$  pequeno o suficiente, ocorre a formação de uma estrutura semelhante a um pistão que concentra o cisalhamento próximo as paredes da cavidade.

O escoamento descrito pelo modelo de Hele-Shaw é semelhante ao escoamento em meio poroso descrito pela lei de Darcy (ZHOU; HU; LI, 2013). A similaridade se deve à predominância das forças viscosas em ambos os escoamentos. Tritton (2007) cita que a similaridade entre dois escoamentos exige a satisfação de critérios geométricos e dinâmicos. Os primeiros envolvem a comparação entre escalas de comprimento  $L$  e de velocidade  $U$ <sup>10</sup>. Já os critérios dinâmicos são satisfeitos se dois escoamentos geometricamente similares apresentam o mesmo número de Reynolds. O número de Reynolds representa a razão entre as forças inerciais e as forças viscosas em um escoamento.

É possível assumir que em processos de moldagem por injeção o número de Reynolds<sup>11</sup> apresenta valores bastante baixos. Os principais argumentos para isso

<sup>10</sup> Escalas de tempo são inviáveis para escoamentos estacionários e podem não se adequar a escoamentos não-estacionários devido a rapidez das flutuações em comparação as escalas de comprimento e velocidade.

<sup>11</sup> Para escoamentos Newtonianos o número de Reynolds é dado por  $Re = \rho UL/\mu$ , onde  $\mu$  é a viscosi-

são a alta viscosidade dos polímeros fundidos e a espessura reduzida da cavidade. Supondo  $Re \ll 1$ , é possível desprezar as forças inerciais na Equação (8), obtendo:

$$\vec{0} = -\nabla p + \nabla \cdot \tau \quad (19)$$

O modelo de Hele-Shaw pode ser deduzido a partir da Equação (19). Entretanto ainda é necessário definir as condições de contorno do escoamento. Para isso, a coordenada cartesiana  $z$  pode ter sua origem determinada a fim de que as paredes da cavidade se localizem em  $z = \pm h/2$ . Já as coordenadas  $z$  das interfaces líquido-sólido no polímero são dadas por funções  $s^+(x, y)$  e  $s^-(x, y)$  das coordenadas planares.

Sob condições de não escorregamento em relação à camada congelada e pressão manométrica nula na frente de fluxo, é possível assumir que o escoamento é simétrico em relação as paredes da cavidade (ZHENG; TANNER; FAN, 2011; FERNANDES *et al.*, 2016). Zheng, Tanner e Fan (2011) deduzem a equação de Hele-Shaw (para coordenada  $x$ ) a partir das condições de contorno:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( S \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \int_{-h/2}^{+h/2} \frac{1}{\rho} \frac{\partial \rho}{\partial t} dz + \frac{\partial h}{\partial t} \quad (20)$$

onde:

$$S = \int_{s^-}^{s^+} \psi z^2 dz - \frac{\left( \int_{s^-}^{s^+} \psi z dz \right)^2}{\int_{s^-}^{s^+} \psi dz} \quad (21)$$

e  $\Psi$  é a fluidez do polímero. Para fluidos Newtonianos genéricos<sup>12</sup>, a fluidez  $\Psi$  é igual ao inverso da viscosidade  $\eta$ . A dedução da equação de Hele-Shaw para coordenada  $y$  produz resultado análogo à Equação (20).

Os termos ao lado direito da Equação (20) contabilizam os efeitos da compressibilidade do polímero e da deformação da cavidade do molde sobre os gradientes de pressão. O primeiro pode ser desprezado durante a etapa de preenchimento, uma vez que o polímero fundido pode ser considerado incompressível.

Durante as etapas de compressão e recalque, contudo, é necessário considerar as variações da densidade em função da temperatura, da pressão e do índice de cristalinidade. A expansão da derivada parcial  $\partial \rho / \partial t$  fornece:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \left( \frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \alpha} \frac{\partial p}{\partial t} + \left( \frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \alpha} \frac{\partial T}{\partial t} + \left( \frac{\partial \rho}{\partial \alpha} \right)_{p, T} \frac{\partial \alpha}{\partial t} \quad (22)$$

dade cinemática do fluido. Entretanto um número de Reynolds genérico, baseado na lei de potências, pode ser encontra em Delplace e Leuliet (1995). Os autores foram capazes de obter curvas características (relacionando o número de Reynolds  $Re$  ao fator de atrito  $f/2$ ) similares para escoamentos geometricamente e dinamicamente similares, independente do comportamento reológico. Esse resultado justifica a análise dimensional da conservação de momento em processos de moldagem por injeção através do número de Reynolds.

<sup>12</sup> Denomina-se fluido Newtoniano genérico o fluido com comportamento reológico Newtoniano ou não-Newtoniano independente do tempo de relaxação.

Assim, substituindo tal igualdade na Equação (20) e desprezando as variações de pressão ao longo da espessura da peça é possível obter:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( S \frac{\partial p}{\partial x} \right) = \bar{\kappa} h \frac{\partial p}{\partial t} + \Pi_T + H_\alpha + \frac{\partial h}{\partial t} = \left( \bar{\kappa} h + \frac{\partial h}{\partial t} \right) \frac{\partial p}{\partial t} + \Pi_T + H_\alpha \quad (23)$$

onde:

$$\Pi_T = \int_{-h/2}^{+h/2} \beta \frac{\partial T}{\partial t} dz, \quad H_\alpha = \int_{-h/2}^{+h/2} \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial \rho}{\partial \alpha} \right)_{p,T} \frac{\partial \alpha}{\partial t} dz, \quad (24)$$

$\bar{\kappa}$  é a compressibilidade térmica média ao longo da espessura e  $\beta$  é o coeficiente de expansão do material<sup>13</sup> (ZHENG; TANNER; FAN, 2011).

De acordo com Zheng, Tanner e Fan (2011), a complacência do molde tem efeito, principalmente, sobre a pressão na cavidade. Isso permite expressar a espessura  $h$  como uma função das coordenadas planares e da pressão local  $p(x, y)$ . Por simplicidade, a expressão a seguir considera apenas a coordenada  $x$ :

$$h(x, p) = h_0(x)(1 + C_M p) \quad (25)$$

O parâmetro  $C_M$  é um coeficiente de complacência, que depende do material e da geometria do molde. Desprezar a deformação da cavidade pode levar a previsões subestimadas da pressão  $p$ . Isso ocorre porque a deformação da cavidade do molde desacelera o decaimento da pressão durante a etapa de resfriamento (ZHENG; TANNER; FAN, 2011).

Durante o resfriamento não há gradientes de pressão na cavidade, já que o material não está submetido a um campo de cisalhamento. Isso permite simplificar a equação de Hele-Shaw, desprezando o termo à esquerda da igualdade. Assim, substituindo a Equação (25) na Equação (23) e solucionando-a para  $\partial p / \partial t$ , obtém-se:

$$\frac{\partial p}{\partial t} = - \frac{\Pi_T + H_\alpha}{[\bar{\kappa} + C_M(1 + \bar{\kappa} p)] h_0} \quad (26)$$

A Equação (26) demonstra que a queda de pressão durante o resfriamento ocorre devido à contração térmica e a cristalização do polímero. Por outro lado, quanto maiores a compressibilidade  $\kappa$ , o coeficiente de complacência  $C_M$  e a pressão na cavidade  $p$ , mais lento é o decaimento dessa última. Sendo a derivada parcial  $\partial p / \partial t$  bastante sensível a complacência da cavidade, mesmo pequenas deformações podem afetar o comportamento da pressão (ZHENG; TANNER; FAN, 2011).

#### 2.1.4 Efeitos do congelamento do polímero

O avanço da interface entre as fases sólida e líquida do material depositado na cavidade é uma das principais causas de variância no tempo no processo de

<sup>13</sup> A compressibilidade térmica  $\kappa$  e o coeficiente de expansão  $\beta$  podem ser calculadas a partir da equação de Tait através das relações termodinâmicas  $\kappa = -(1/\nu)(\partial \nu / \partial p)_T$  e  $\beta = (1/\nu)(\partial \nu / \partial T)_p$ .

moldagem por injeção. Isso causa o estreitamento da espessura entre as interfaces líquido-sólido no polímero. De acordo com Barrie (1978), há indícios experimentais de que a espessura efetiva  $h_{eff}$  varia com o tempo de processamento  $t$  conforme a lei de potência:

$$h_{eff} = h - 4 \left( \frac{k}{\rho c_p} \right)^{1/2} \left( \frac{T_v - T_\theta}{T - T_\theta} \right) t^{1/3} \quad (27)$$

onde  $h$  é a espessura total da cavidade,  $T_v$  é a temperatura de transição para o estado sólido e  $T_\theta$  é a temperatura do molde.

A Equação (27) impõe restrições ao processo, uma vez que a cavidade deve ser preenchida antes que a espessura efetiva  $h_{eff}$  se anule. O intervalo de tempo transcorrido na etapa de preenchimento é estimado pela razão entre o volume da cavidade e a taxa de preenchimento  $Q$ . A taxa de preenchimento, por sua vez, é determinada pela queda de pressão na cavidade do molde. Em condições isotérmicas, é possível calcular analiticamente a vazão volumétrica  $Q$  para geometrias mais simples através da solução da Equação (19). Para um polímero de lei de potência, a relação entre a vazão volumétrica  $Q$  e a queda de pressão  $\Delta p$  ao longo do comprimento  $L$  em uma geometria cilíndrica é:

$$Q = \frac{n\pi R^3}{1 + 3n} \left( \frac{R\Delta p}{2\eta_0 L} \right)^{1/n} \quad (28)$$

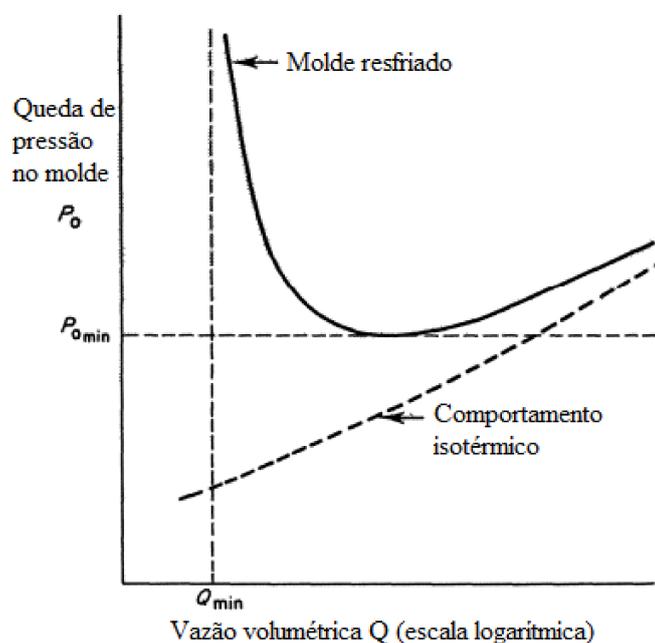
onde  $R$  é o raio da geometria. Tal relação de crescimento monotônico entre as variáveis  $Q$  e  $\Delta p$  condiz com o comportamento isotérmico (linha tracejada) apresentado na Figura 5.

Entretanto em condições não-isotérmicas, a curva característica  $Q - \Delta p$  apresenta uma taxa de preenchimento mínima  $Q_{min}$ , que corresponde ao congelamento completo do polímero fundido na cavidade do molde durante a etapa de preenchimento. O crescimento assintótico da queda de pressão (linha cheia) na Figura 5 determina que abaixo de  $Q_{min}$  qualquer valor de  $\Delta p$  é insuficiente para promover o escoamento. Taxas de preenchimento imediatamente acima de  $Q_{min}$  são caracterizadas pelo decaimento de  $\Delta p$ . Isso ocorre porque o polímero fundido tem menos tempo para trocar calor com as paredes da cavidade, diminuindo a taxa de solidificação do mesmo. A variável  $\Delta p$  apresenta um mínimo para o qual os efeitos do congelamento do polímero e dos gradientes de pressão na cavidade se equilibram. Acima desse ponto, a curva característica  $Q - \Delta p$  converge para o comportamento isotérmico, uma vez que, para uma taxa  $Q$  suficientemente alta, o processo se torna aproximadamente adiabático (BARRIE, 1978).

## 2.2 MODELAGEM DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO

Conforme Sadeghi (2000), é possível classificar técnicas de controle de qualidade em processos de moldagem por injeção como: controle online (OLC, *online*

Figura 5 – Queda de pressão isotérmica e não-isotérmica na cavidade do molde.



Fonte – adaptado de Barrie (1978).

*control*); planejamento offline de processo (OLP, *offline process planning*); e solução offline de problemas (OLTS, *offline trouble shooting*). Abordagens OLC normalmente envolvem o controle adaptativo do processo, com o ajuste (em tempo real) de um modelo, enquanto abordagens OLP são baseadas na prevenção de fenômenos indesejáveis através da escolha ótima dos parâmetros de processamento. A abordagem OLTS, por sua vez, corresponde à reparação de defeitos após suas ocorrências, não empregando modelos do processo.

Abordagens OLP são bastante empregadas para investigar a ocorrência de fenômenos relacionados à qualidade dos produtos. Diversas características das peças podem ser previstas através da simulação em software CAE. Tseng, Chang e Hsu (2017) validaram experimentalmente um método para prever a orientação das cadeias poliméricas em compósitos fibrosos. Sun *et al.* (2016) foram capazes de prever o empenamento em peças de polímero semicristalino através da inclusão do índice de cristalinidade  $\alpha$  em uma relação  $pVT$ . Kovács e Sikló (2011), por sua vez, estudaram o efeito da geometria do molde sobre o resfriamento da peça.

Modelos empíricos também podem ser empregados em abordagens OLP. Sadeghi (2000) treinou uma rede neural artificial (RNA) para prever a ocorrência de fenômenos de preenchimento incompleto e de linha de soldagem. Para tanto, a moldagem por injeção foi simulada diversas vezes, em software CAE, variando as condições do processo. Foram obtidos resultados satisfatórios através do algoritmo de retropro-

pagação após 660 épocas com 2000 conjuntos de amostras. A RNA apresentou boa capacidade de generalização, sendo capaz de fazer previsões corretas para combinações de parâmetros ausentes nas amostras de treinamento.

As abordagens anteriores, contudo, não permitem prever comportamentos de ordem sazonais. Variações ciclo-a-ciclo podem ser causadas por perturbações alheias aos parâmetros de processamento. Sendo assim, a identificação das variáveis de processo requer a modelagem de dados amostrados ao longo das etapas ou dos ciclos do processo de moldagem por injeção. Abordagens baseadas em modelos estáticos e dinâmicos de sinais de pressão e de temperatura foram discutidos para contextualizar o desenvolvimento histórico da modelagem de processos de moldagem por injeção.

Um dos primeiros modelos capazes de descrever o comportamento da pressão na cavidade foi proposta por Haber e Kamal (1987). Esses obtiveram uma série temporal não-estacionária após amostrar a pressão de pico a cada etapa de compressão. Essa foi diferenciada para remover a tendência da série temporal, permitindo sua modelagem através de operadores autorregressivos. A correlação dos resíduos do modelo foi minimizada para um operador de segunda ordem. Apesar dos bons resultados, esse modelo abordou apenas uma amostra a cada ciclo de injeção, ignorando o perfil completo da pressão na cavidade.

Kamal *et al.* (1987) desenvolveram um modelo determinístico da pressão na cavidade durante a etapa de preenchimento. Esse modelo compreendeu a resposta da pressão de preenchimento, medida com transdutores de membrana Dynisco PT 435A, a degraus na abertura de uma servoválvula no maquinário hidráulico. Após submeter a abertura da servoválvula a degraus de 20 e 40%, foi obtida uma resposta de primeira ordem superposta a uma componente de rampa. Esse comportamento foi modelado através de:

$$p(t) = K_1 t + K_2 \left( 1 - e^{-(t-D_p)/\tau_p} \right) \quad (29)$$

onde  $p$  é a pressão na cavidade,  $K_1$  e  $K_2$  são parâmetros constantes,  $D_p$  é um atraso de processo e  $\tau_p$  é uma constante de tempo. O termo não-estacionário  $K_1 t$  é atribuído ao crescimento hidrostático da pressão na cavidade, enquanto a defasagem  $D_p$  é causada pela propagação da frente de fluxo a velocidade finita. De acordo com Kamal *et al.* (1987), este atraso depende da posição do sensor na cavidade.

Este modelo determinístico também é apresentado por Tsai e Lan (2015) e mencionado por Sadeghi (2000), que o classifica como mais pertinente que a análise completa da moldagem por injeção através da Equação (5). Todavia Sadeghi (2000) considera essa abordagem obsoleta, já que sensores ultrassônicos, reométricos e infravermelhos e métodos baseados em inteligência artificial permitem o desenvolvimento da identificação em tempo real.

Kamal *et al.* (1987) também realizaram experimentos estocásticos, variando a abertura da servoválvula conforme um sinal binário pseudoaleatório. O método de Box

e Jenkins foi utilizado para remover a componente não-estacionária das medições, e a pressão diferenciada foi identificada através de um modelo autorregressivo de segunda ordem. Entretanto o modelo não foi capaz de realizar predições satisfatórias. Os autores creditaram isso a níveis excessivos de ruído durante as medições.

C. Zhao e Gao (1999) modelaram perfis relacionando a temperatura no bocal da unidade de injeção, medida com um transdutor infravermelho Dynisco MTX 935, ao avanço da rosca recíproca. Para tanto, foram amostradas os valores iniciais e finais e os valores extremos da temperatura no bocal e do respectivo deslocamento da rosca, durante o processamento de polietileno de alta densidade (HDPE, *high density polyethylene*) e de PP. Amostras correspondentes a deslocamentos intermediários (entre os pontos críticos) também foram coletadas. A relação entrada-saída entre as condições de processamento e as coordenadas do perfil foi modelada através de uma RNA. Essa foi treinada com 25 conjuntos de dados experimentais ao longo de mil épocas, resultando em erro global de 0,1%. Após isso, os perfis relacionando temperatura a deslocamento foram reconstruídos utilizando interpolação de *splines* por partes, resultando em erro máximo de 2,0 °C.

Huang (2007) propôs a identificação da pressão na cavidade através de um modelo autorregressivo, denominado modelo cinzento<sup>14</sup>. Esse foi utilizado para identificar pontos singulares do tipo (3) com a finalidade de evitar condições de comutação inadequadas (i. e., subempacotamento e sobreempacotamento). A abordagem permitiu estimar o instante em que a material começa a ser comprimido na cavidade do molde (ponto C na Figura 2). O método foi validado experimentalmente, e resultou na redução da variância dos pesos das peças e da pressão de compressão máxima. Todavia esse é bastante sensível ao nível de ruído nas observações, bem como as condições de processamento e a proximidade entre o sensor e o ponto de injeção. Conforme

<sup>14</sup> Suponha uma sequência (um conjunto ordenado de amostras sobre uma janela de tempo) não negativa e aproximadamente suave  $x_t$ . Quando essa é submetida a um número finito de operações de acumulação:

$$\tilde{x}_t = \sum_{i=1}^t x_i$$

obtem-se uma sequência acumulada  $\tilde{x}_t$  com padrão de crescimento aproximadamente exponencial e aleatoriedade atenuada. Portanto, é possível representar a sequência acumulada através de uma equação de diferenças (ou diferencial) de primeira ordem. O modelo cinzento GM(1, 1) foi proposto originalmente por Deng (1982) apud Liu, Yang e Forrest (2017) como um modelo autorregressivo:

$$x_t + a\tilde{z}_t = b$$

onde  $\tilde{z}_t$  é a média móvel da sequência acumulada —  $\tilde{z}_t = (\tilde{x}_t + \tilde{x}_{t-1})/2$  — e  $a$  e  $b$  são parâmetros estimados dentro da janela que contém a sequência. Entretanto existem diversas variações, dentre as quais o modelo GM(1, 1) *branqueado*:

$$\frac{d\tilde{x}}{dt} + a\tilde{x}(t) = b$$

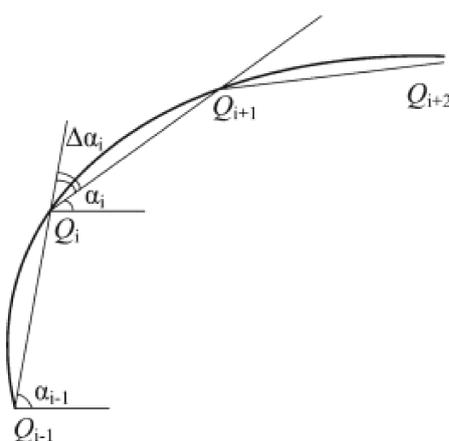
é bastante popular (LIU; YANG; FORREST, 2017).

Huang (2007), os dois últimos fatores podem tornar o ponto C ambíguo, invalidando a abordagem.

Seguindo o desenvolvimento, P. Zhao *et al.* (2014) utilizaram uma RNA para aproximar a relação  $p-vT$  do material na cavidade. Com esse propósito, um transdutor gerou pulsos ultrassônicos na cavidade do molde, refletidos em sua interface. O coeficiente de reflexão, dado pela razão entre as amplitudes de pulsos incidentes e refletidos, foi calculado para estimar a densidade do material. Tais estimativas, junto às amostras da temperatura na cavidade (medida com termopares do tipo K) e amostras de pressão hidráulica foram usados como sinais de entrada da RNA. A pressão na cavidade, medida com sensor piezelétrico Kistler 6190A, foi usada como sinal de saída. As predições realizadas pela RNA mostraram boa concordância com os dados experimentais (erros de predição inferiores a 0,6 MPa).

P. Zhao *et al.* (2014) também desenvolveram um procedimento para segmentar o processo com base na detecção de PS do tipo (3). Os instantes de transições entre diferentes etapas foram estimados por meio de aspectos geométricos do perfil de avanço da rosca recíproca. O procedimento é ilustrado pela Figura 6. Nessa,  $\alpha_j$  representa o ângulo da reta que passa pelas observações  $Q_{j-1}$  e  $Q_j$ , enquanto  $\Delta\alpha_j$  é a diferença  $\alpha_j - \alpha_{j-1}$ . Conforme P. Zhao *et al.* (2014), as transições entre as etapas podem ser detectadas quando  $\Delta\alpha_j$  excede um dado limiar. Embora o método não dependa da adequação de um modelo, esse é baseado em variáveis de máquina. Logo, os pontos singulares detectados não têm relação direta com o material na cavidade do molde.

Figura 6 – Perfil de avanço da rosca recíproca.



Fonte – P. Zhao *et al.* (2014).

J. Zhang *et al.* (2019) propuseram um modelo da pressão na cavidade baseado no alongamento de tração das barras de ligação da máquina de moldagem por injeção. De acordo com a teoria da sonoelasticidade, a relação entre a tensão de tração e

o intervalo de propagação de pulsos ultrassônicos nas barras de ligação é linear. Para ajustar um modelo regressivo, a pressão na cavidade foi medida com um sensor Kistler 6157B simultaneamente a propagação de pulsos nas barras de ligação. O modelo apresentou coeficiente de determinação  $R^2 = 0,99962$  e 4,3% de erro relativo. Entretanto J. Zhang *et al.* (2019) citam que o método requer o uso de perfis de força de fechamento apropriados para não interferir nas predições.

Finkeldey *et al.* (2020) propuseram um método combinando dados simulados e medidos, durante a moldagem por injeção, a fim de prever a qualidade das peças. A relação entre parâmetros de processamento e parâmetros de qualidade foi modelada através de regressão linear e a similaridade entre sinais simulados e reais foi comparada através sincronização temporal dinâmica (DTW, *dynamic time warping*). Por meio dessa metodologia, os autores foram capazes de reduzir a quantidade de experimentos necessários para amostrar as variáveis de processo e de máquina utilizados para modelar a moldagem por injeção.

Rousopoulou *et al.* (2020) abordaram a detecção de pontos singulares nos sinais de diversas variáveis de máquina através de métodos de classificação (regressão linear com variável dependente discreta) e *clusterização* (ver Seção 3.2). As metodologias incluíram: máquina de vetor de suporte (SVM, *support vector machine*), *clusterização* espacial de aplicações com ruído baseada em densidade (DBSCAN, *density-based spatial clustering of applications with noise*), fator local de anormalidade (LOF, *local outlier factor*), árvores de decisão, florestas de decisão aleatória e o método *k-means*. De acordo com os autores, os melhores resultados foram obtidos através dos métodos DBSCAN e LOF e os piores através de SVMs.

Ketonen e Blech (2021) também estudaram a ocorrência de pontos singulares no processo de moldagem por injeção. Para tanto, os sinais de diversas variáveis de máquina foram modelados por redes neurais recorrentes. Esse tipo de RNA é capaz de representar dados sequenciais com dependência temporal entre si. Assim, o modelo estima o valor atual de uma variável quando uma sequência de valores anteriores (correspondente a 100 intervalos de amostragem) é fornecida. Após ajustar o modelo, Ketonen e Blech (2021) avaliaram as estimativas através de uma função de verossimilhança com distribuição normal. Os pontos singulares foram atribuídos a baixas verossimilhanças e utilizados como indicadores de anomalias no processo. Um estudo similar foi realizado por Fitrianti (2020), que identificou variáveis de máquina através do modelo autorregressivo de média móvel integrada (ARIMA, *autoregressive integrated moving average model*). O autor utilizou medidas de erro relativo para detectar a ocorrência de anomalias.

Esta revisão demonstra que a modelagem de variáveis de processo e de máquina foi abordada em trabalhos anteriores. Contudo esses negligenciaram as dependências temporais das variáveis ou as consideraram apenas parcialmente. É possí-

vel classificar os modelos supracitados como: estáticos, baseados em relações  $pVT$  (ZHAO, P. *et al.*, 2014) ou em relações entre variáveis de processo e variáveis de máquina (ZHAO, C.; GAO, 1999; ZHANG, J. *et al.*, 2019); e dinâmicos, com identificação local das variáveis de processo ou de máquina (HUANG, 2007; FITRIANTI, 2020) ou identificação parcial das etapas (KAMAL *et al.*, 1987) e de comportamentos sazonais (HABER; KAMAL, 1987) da moldagem por injeção.

Os modelos dinâmicos são mais vantajosos, pois permitem representar comportamentos autorregressivos das variáveis de processo. Essa relação entre a moldagem por injeção e a variável temporal existe devido aos diversos regimes transientes causados por fenômenos de transporte na cavidade do molde.

Entretanto as abordagens citadas podem ser comprometidas por incertezas, já que não levam em conta as dinâmicas de ordem sazonal. A validade da Equação (29), por exemplo, se restringe às condições experimentais de Kamal *et al.* (1987), enquanto o modelo cinzento (HUANG, 2007) é válido apenas ao longo de curtos intervalos de tempo. Essas incertezas também podem prejudicar a detecção de pontos singulares. O presente trabalho aborda esses problemas, propondo modelos de ordem sazonal da pressão na cavidade e da temperatura do molde e a segmentação dos perfis das variáveis de processo com base na compressibilidade do material dentro da cavidade. Essa abordagem de segmentação não depende da detecção de pontos singulares, sendo imune às incertezas do modelo.

### 3 METODOLOGIA

A modelagem das variáveis de processo (pressão na cavidade e temperatura do molde) foi conduzida através de dois estudos, que compreendem: 1) a segmentação dos perfis de pressão com base na compressibilidade do material na cavidade; e 2) a identificação de dinâmicas de ordem sazonal através de modelos de séries temporais. Esses foram propostos com o objetivo de minimizar as incertezas durante a segmentação e a modelagem das variáveis de processo.

O Estudo 1 foi baseado no agrupamento natural das amostras, ao invés de detectar pontos singulares com base em erros de previsão de um modelo. Para tanto, as amostras foram classificadas através de aprendizagem não supervisionada de propriedades termodinâmicas do processo. Como será discutido na Seção 3.2, a moldagem por injeção comporta regimes de compressibilidade e incompressibilidade. Logo, a classificação das observações permite identificar o status do material na cavidade.

Já o Estudo 2 empregou o modelo sazonal autorregressivo de média móvel integrada (SARIMA, *seasonal autoregressive integrated moving average model*) para identificar as dinâmicas das séries temporais da pressão na cavidade e da temperatura do molde. Conforme Box *et al.* (2016), uma série temporal é um conjunto de observações sequenciais ao longo de um intervalo de tempo. Este trabalho utilizou apenas observações ao longo de intervalos de tempo discreto — i. e., as observações ocorrem em instantes distintos, separados (entre si) por intervalos com duração finita. Futuras menções a séries temporais dizem respeito apenas a séries temporais discretas.

Ainda que RNAs tenham sido bastante empregadas em outras abordagens de aprendizagem supervisionada (ZHAO, C.; GAO, 1999; SADEGHI, 2000; ZHAO, P. *et al.*, 2014), é possível afirmar que os modelos SARIMA são mais parcimoniosos. Estes incorporam a periodicidade das variáveis de processo através de diferenciações de ordem sazonal, enquanto os desvios ciclo-a-ciclo são modelados através de operadores lineares.

Redes neurais artificiais, por sua vez, modelam as amostras de maneira bastante complicada. Normalmente, estas têm camadas de entrada e saída lineares, e camadas internas com função de ativação sigmoideal. O processo é representado em um espaço interno onde as coordenadas são dadas pelos pesos sinápticos da rede neural (HAYKIN, 2008).

Além de questões de parcimônia, é difícil determinar a quantidade de amostras necessárias para treinar uma RNA. A quantidade de exemplos de treinamento está associada ao número de épocas necessária para capacidade de generalização da RNA satisfazer um critério de parada. Conforme Haykin (2008), embora a teoria de Vapnik-Chervonenkis forneça uma aproximação para o tamanho do conjunto de treinamento, esta é normalmente pouco precisa e até subestimada. Por outro lado, a relação entre a

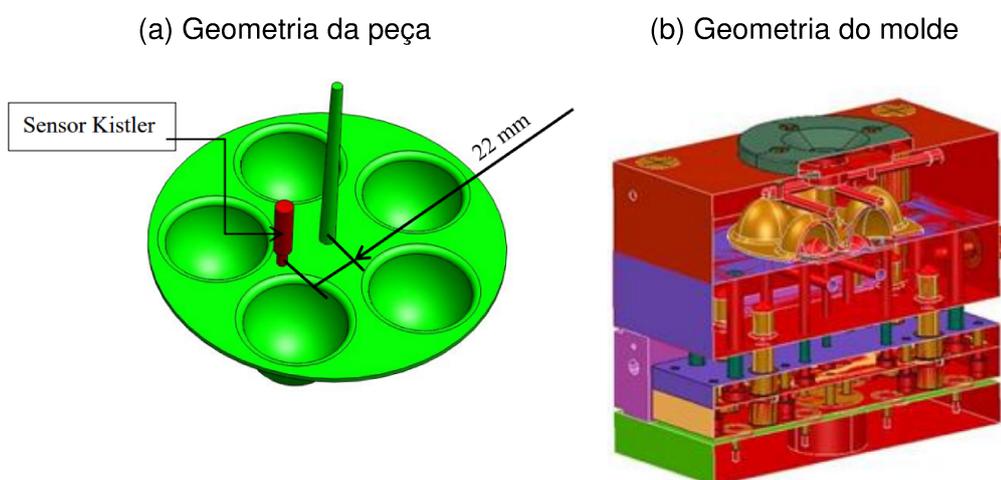
incerteza de um modelo linear e a quantidade de amostras é bem mais simples (como é apresentado na Seção 3.3.4).

As abordagens propostas nos estudos 1 e 2 foram implementadas em linguagem *Python*, de modo que os algoritmos desenvolvidos estão disponíveis no Anexo A. Já os materiais e procedimentos experimentais utilizados para amostrar as variáveis de processo são descritos na seção seguinte. As medições foram feitas durante a produção de peças de PP H105.

### 3.1 MEDIÇÃO DA PRESSÃO E DA TEMPERATURA NA CAVIDADE

A medição das variáveis de processo foi realizada em um molde experimental desenvolvido para conduzir investigações a respeito do processo de moldagem por injeção. A Figura 7 apresenta um modelo CAD da geometria da peça (Figura 7.a) e um modelo CAD do molde desenvolvido para produzi-la (Figura 7.b). Este é um molde para injeção de termoplásticos com sistema de alimentação direta do tipo frio. O sistema de refrigeração possui dois canais com 8,0 mm de diâmetro em forma de U, ambos à 18,0 mm da superfície da cavidade.

Figura 7 – Modelos CAD da peça e do molde.



Fonte – Miranda (2012)

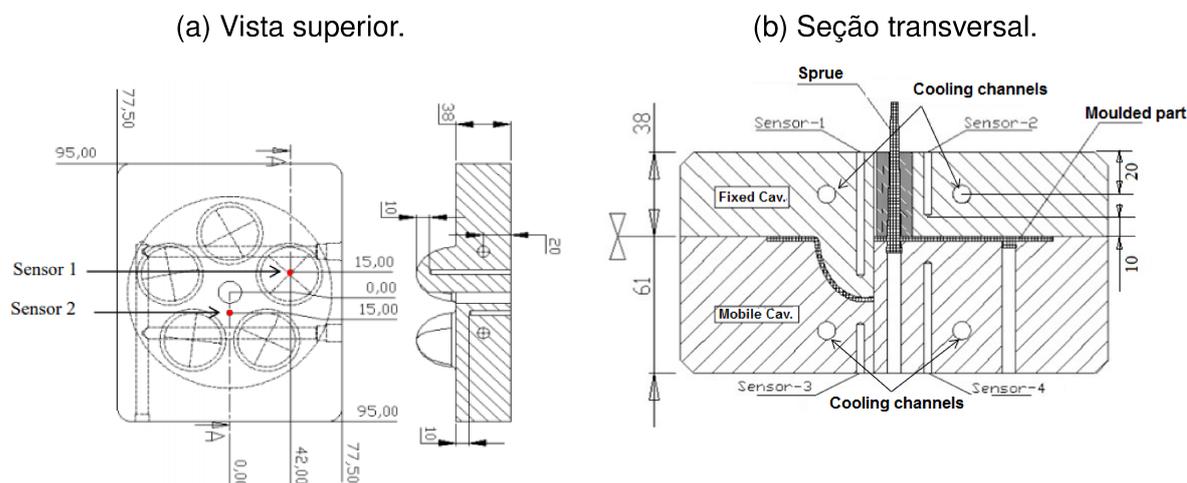
As peças injetadas possuem 140,0 mm de diâmetro e 2,0 mm de espessura. O canal de injeção possui 82,0 mm de comprimento e geometria cônica, com diâmetros de 6,5 mm (perto da peça) e 4,0 mm em suas extremidades. Uma máquina de moldagem por injeção HAITIAN SA1200/410 com rosca recíproca de 40,0 mm de diâmetro, capacidade de 214 cm<sup>3</sup> por lote e força de fechamento de 1200 kN foi utilizada para injetar estas peças.

A pressão absoluta na cavidade foi medida por um sensor Kistler 6190CA. Esse é um sensor piezelétrico, com sensibilidade de -9,0 pC/bar, que permite contato direto com o polímero fundido. Como o sinal de saída corresponde a uma carga elétrica, um

amplificador de carga Kistler 5039A221 foi usado para transduzir um sinal de tensão elétrica. Esse último opera no intervalo de 5 a 50 mil picocoulombs, fornecendo tensão elétrica de -10 a 10 V — com incerteza de  $\pm 10$  mV. Logo, é possível assumir que as medições de pressão têm incerteza de aproximadamente  $\pm 2,5$  bar. O sinal de saída do amplificador de carga foi amostrado por um dispositivo de aquisição de dados Agilent 34970. A posição do sensor Kistler 6190CA é indicada, na Figura 7.a, a 22,0 mm do canal de injeção.

A temperatura na cavidade foi medida por quatro termopares do tipo K instalados em quatro inserções à 10 mm da cavidade do molde (Figura 8). Os sensores 1 e 2 foram instalados na parte fixa do molde, enquanto os sensores 3 e 4 na parte móvel. Esses possuem resposta linear até  $1260$  °C, com erro de linearidade de  $\pm 0,75$  % e incerteza de  $\pm 2,0$  °C.

Figura 8 – Posições dos termopares.



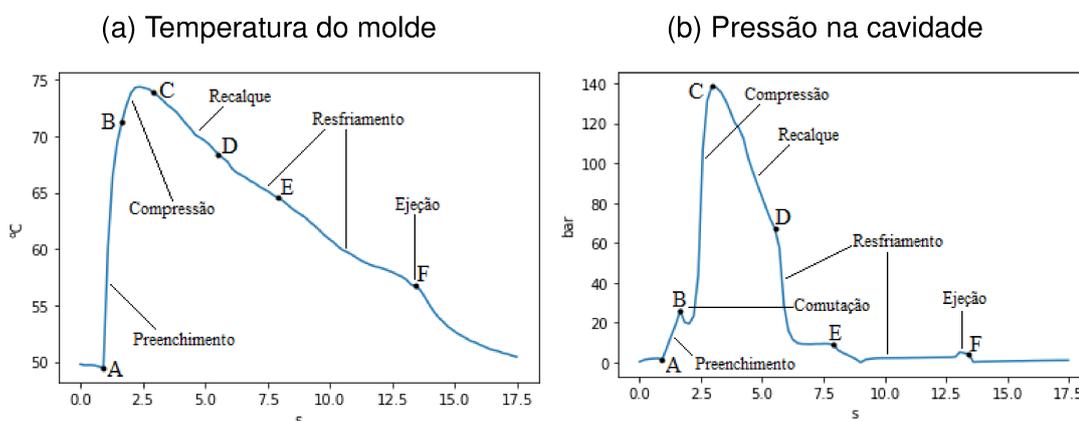
Fonte – Miranda (2012)

As variáveis de processo foram amostradas (com periodicidade de 0.184 segundos) durante a produção de peças de PP H105 em três condições experimentais distintas, determinadas pela duração da etapa de preenchimento: I) 0,5, II) 1,0 e III) 2,0 segundos. Esse parâmetro equivale ao intervalo de tempo entre o início da etapa e a comutação do sistema de controle. A velocidade de avanço da rosca recíproca é calculada automaticamente pelo sistema de controle da máquina de moldagem por injeção a fim de garantir o preenchimento volumétrico da cavidade antes da comutação. Os processos correspondentes as três condições experimentais foram denominados como processos I, II e III nas seções seguintes.

Os perfis de temperatura e de pressão na cavidade ao longo de um único ciclo de moldagem por injeção são apresentados na Figura 9. As transições entre as etapas do processo são delimitadas pelos pontos A ao F. Apesar do preenchimento começar antes do ponto A, é apenas nesse instante que o polímero fundido alcança os sensores.

A comutação entre o controle de preenchimento e o controle de pressão ocorre no ponto B, que precede a etapa de compressão em que a pressão na cavidade se eleva até o ponto C.

Figura 9 – Variáveis de processo — Processo (II).



Fonte – Elaborado pelo autor.

A queda de pressão após o ponto B não ocorre em todos os processos de moldagem por injeção. Esta ocorre, nos processos II e III, devido à condição de subempacotamento. Assim, o preenchimento volumétrico desses se dá em algum instante durante os pontos B e C. Esta condição, todavia, não produz alterações visíveis no perfil de temperatura. Esse é bem menos sensível aos efeitos de compressibilidade do que o perfil de pressão.

Durante a etapa de recalque a pressão foi mantida em um perfil decrescente aproximadamente monotônico até o congelamento do ponto de injeção (ponto D). Após isso, a pressão na cavidade passa por uma rápida queda coincidente com o início da etapa de resfriamento — Equação (26). O ponto E determina o fim do resfriamento, após a qual o processo não pode mais ser influenciado pelas variáveis de máquina.

O intervalo entre os pontos E e F compreende um resfriamento adicional até a ejeção da peça. Após o ponto F, o perfil de temperatura decai exponencialmente. Entretanto esta variação não corresponde a variações de temperatura da peça, sendo determinada por constantes de tempo do sistema de medição.

### 3.2 ESTUDO 1: IDENTIFICAÇÃO DOS REGIMES DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO ATRAVÉS DO MÉTODO K-MEANS

A segmentação do processo, apresentada na Figura 9, permite compreender a situação da peça na cavidade do molde e planejar as transições entre as etapas. A exemplo, a comutação entre os controles de preenchimento e de recalque deve ocorrer simultaneamente ao preenchimento volumétrico da cavidade. Entretanto o escalonamento do ciclo de moldagem por injeção, geralmente, não é baseado nos perfis

das variáveis de processo, mas em estimativas das durações das etapas. Dada esta limitação, esse estudo propõe uma técnica de segmentação baseada em medições da pressão na cavidade e da temperatura do molde.

A relação entre a temperatura e a pressão na cavidade é condicionada pelo comportamento mecânico do polímero fundido. De acordo com Zheng, Tanner e Fan (2011), em fluidos incompressíveis a pressão na cavidade é uma variável dinâmica dada pela solução das equações de conservação de massa e de quantidade de movimento. Entretanto em fluidos compressíveis esta equivale a pressão termodinâmica, que se relaciona com a temperatura através de uma equação termodinâmica de estado — e. g., equação de Tait.

Os efeitos da compressibilidade são incorporados às equações de conservação por meio da dilatação térmica — Equação (9) — e da variação de densidade em função do estado termodinâmico do polímero fundido — Equação (22). Como estes efeitos ocorrem apenas durante as etapas de compressão e recalque, é possível afirmar que o processo comporta dois regimes: incompressível e compressível.

A relação entre as propriedades intensivas do fluido apresenta características distintas dependendo da etapa do processo. Por consequência, o regime da moldagem por injeção pode ser determinado a partir de observações das variáveis de processo. Neste trabalho, as observações das variáveis de processo foram organizadas em triplas  $(p_t, T_t, T_t^*)$ , onde  $T_t$  e  $T_t^*$  são os sinais de temperatura medidos pelos termopares<sup>15</sup> 1 e 2, respectivamente. O regime de compressibilidade foi estimado com base na distribuição dessas no espaço  $\mathbb{R}^3$ . Para tanto, as amostras foram agrupadas em dois regimes distintos através de aprendizagem não supervisionada.

Problemas de aprendizagem não supervisionada, geralmente, compreendem a detecção de padrões em conjuntos de amostras não rotuladas<sup>16</sup> com o objetivo de agrupá-las em partições naturais (ou *clusters*) (RUSSEL; NORVIG, 2016). Conforme Haykin (2008), os *clusters* são delimitados de modo que medidas de similaridade entre pares de amostras pertencentes ao mesmo *cluster* minimizem uma função de custo.

O método *k-means* é uma das técnicas de *clusterização* mais populares (JIN; HAN, 2010), sobretudo, devido à sua simplicidade (HAYKIN, 2008). Esse estima, para cada *cluster*  $k$ , um conjunto de coordenadas  $(\hat{p}_k, \hat{T}_k, \hat{T}_k^*)$ , igual à média das amostras

<sup>15</sup> Como será discutido na Seção 4, as medições dos termopares 3 e 4 não foram empregadas neste trabalho. Apesar das medições desses termopares não ocorrerem dentro da cavidade, essas são relacionadas à temperatura do polímero fundido já que a variação da temperatura do molde se deve ao transporte de calor a partir das paredes da cavidade.

<sup>16</sup> A rotulação de uma amostra depende de seu agrupamento com os demais. Técnicas de aprendizagem supervisionadas buscam otimizar um modelo de modo a rotular corretamente novas amostras. Já técnicas de aprendizagem não supervisionada buscam identificar agrupamentos no conjunto de observações.

no *cluster*, que minimiza a função de custo:

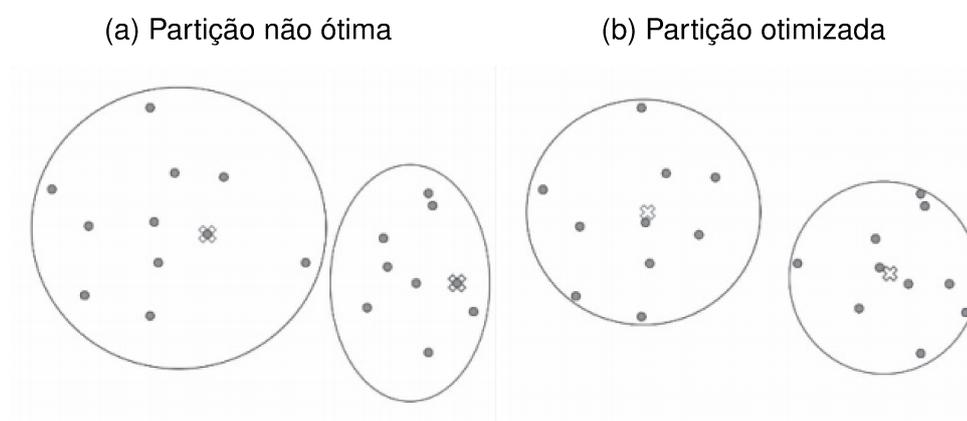
$$J(c) = \sum_{k=1}^K \sum_{c(t)=k} \left\| (p_t - \hat{p}_k) + (T_t - \hat{T}_k) + (T_t^* - \hat{T}_k^*) \right\|^2 \quad (30)$$

onde  $K$  é o número de *clusters* e  $c(t) = k$  é uma função que fornece o índice  $k$  do *cluster* mais próximo (em termos da distância Euclidiana) da amostra com índice  $t$ .

O procedimento é iniciado através da partição não ótima do conjunto de amostras em  $K$  *clusters*. Após isso, a otimização ocorre através da iteração das duas etapas: I) as coordenadas médias  $(\hat{p}_k, \hat{T}_k, \hat{T}_k^*)$  são calculadas para cada *cluster*; e II) a partição do conjunto de amostras é atualizada conforme a associação  $c(t) = k$  em termos das coordenadas das amostras e das coordenadas  $(\hat{p}_k, \hat{T}_k, \hat{T}_k^*)$  calculadas na etapa (I) (JIN; HAN, 2010).

As iterações continuam até que um critério de parada (geralmente baseado no deslocamento das coordenadas médias) seja satisfeito. A exemplo, a Figura 10.a apresenta a partição não ótima de um conjunto de amostras, enquanto a Figura 10.b exibe a partição obtida através do método *k-means*. Após o procedimento de otimização a variância das amostras em cada *cluster* foi reduzida. Isso implica que pares de amostras pertencentes ao mesmo *cluster* são mais similares entre si do que pares pertencentes a *clusters* diferentes.

Figura 10 – Partição de um conjunto de amostras através do método *k-means*.



Fonte – Jin e Han (2010)

Conforme Haykin (2008), a convergência para o mínimo global da função de custo  $J(c)$  não é assegurada, embora a iteração das etapas (I) e (II) sempre resulte na convergência das coordenadas médias  $(\hat{p}_k, \hat{T}_k, \hat{T}_k^*)$ . Para evitar mínimos locais, é necessário que o método *k-means* seja repetido várias vezes a partir de diferentes partições iniciais. Entretanto essa repetição não tem custo excessivo, já que o método *k-means* é computacionalmente eficiente. Jin e Han (2010) citam que a complexidade do método depende linearmente do número de *clusters* — i. e.,  $O(n(D + K))$ , onde  $n$  é o número de amostras e  $D$  é o número dimensões em cada amostra.

Neste trabalho, foi assumido que as amostras  $(\rho_t, T_t, T_t^*)$  ( $D = 3$ ) se distribuem em dois agrupamentos naturais ( $K = 2$ ) conforme os regimes apresentados. Em vista dessa hipótese, o status do processo pode ser estimado por meio da função  $c(\cdot)$  após a partição otimizada do conjunto de amostras pelo método *k-means*.

### 3.3 ESTUDO 2: MODELOS REGRESSIVOS DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO

Processos de fabricação estão sujeitos a fenômenos de transporte de calor, massa e quantidade de movimento, bem como a perturbações na forma de degraus com amplitude arbitrária em instantes aleatórios. Além desses, é comum a ocorrência de perturbações estocásticas na forma de ruído branco<sup>17</sup>.

Os fenômenos de transporte são responsáveis pelos padrões de repetição e decaimento nas séries temporais das variáveis de processo (e. g., pressão e temperatura na cavidade do molde). Já as perturbações estocásticas e os degraus em instantes aleatórios contribuem com a série de desvios (resíduos)  $a_t$  a partir dos valores esperados das mesmas.

Dadas as contribuições determinísticas e estocásticas do processo, é possível supor a existência de uma relação funcional regressiva entre os valores atuais da série temporal  $x_t$ , seus valores passados  $\{x_{t-i}\}_{i=1}^{\infty}$  — i. e., as observações desde o passado longínquo  $\lim_{i \rightarrow \infty} x_{t-i}$  até o valor anterior mais recente  $x_{t-1}$  — e o histórico de contribuições aleatórias  $\{a_{t-j}\}_{j=0}^{\infty}$ . No caso genérico, essa é dada por:

$$x_t = F(x_{t-1}, x_{t-2}, \dots, a_t, a_{t-1}, \dots) \quad (31)$$

onde a função  $F(\cdot)$  depende das hipóteses assumidas durante a modelagem.

Conforme Brockwell e Davis (1991), uma classe bastante ampla de processos pode ser representada pela hipótese dada pelo modelo ARMA:

$$x_t - \sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i x_{t-i} = \theta_0 + a_t - \sum_{j=1}^{\infty} \theta_j a_{t-j} \quad (32)$$

Nesse,  $\{\varphi_i\}_{i=1}^{\infty}$ ,  $\{\theta_j\}_{j=1}^{\infty}$  e  $\theta_0$  são parâmetros constantes, sendo o último relacionado a comportamentos determinísticos<sup>18</sup>. Sob condições adequadas é possível truncar os somatórios  $\sum_{i=1}^{\infty} \varphi_i x_{t-i}$  e  $\sum_{j=1}^{\infty} \theta_j a_{t-j}$  em seus  $p$  e  $q$  primeiros termos, resultando no modelo ARMA de ordem finita  $(p, q)$  — i. e.,  $ARMA(p, q)$ .

<sup>17</sup> Um sinal de ruído branco é formado por sequências de picos não autocorrelacionados com intensidade constante ao longo das bandas que compõem seu espectro.

<sup>18</sup> Quando  $\theta_0 = 0$  o modelo ARMA só é capaz de representar processos estocásticos. A representação de processos com componentes determinísticos requer que essa constante assuma valores não nulos.

Com o objetivo de simplificar a notação da Equação (32), essa pode ser reescrita em termos da operação de defasagem  $z^{-i}x_t = x_{t-i}$ , fornecendo:

$$\left(1 - \sum_{i=1}^p \varphi_i z^{-i}\right) x_t = \theta_0 + \left(1 - \sum_{j=1}^q \theta_j z^{-j}\right) a_t \quad (33)$$

ou:

$$\varphi_p(z^{-1})x_t = \theta_0 + \theta_q(z^{-1})a_t \quad (34)$$

onde os polinômios  $\varphi_p(z^{-1})$  e  $\theta_q(z^{-1})$  são denominados operador autorregressivo e operador de média móvel, respectivamente. As propriedades de causalidade<sup>19</sup> e invertibilidade<sup>20</sup> do processo estão associadas a alocação das raízes desses polinômios.

O modelo ARMA presume a relação linear entre o valor atual e os valores regressados da série temporal  $x_t$ . Entretanto as variáveis de processo, sobretudo a pressão na cavidade<sup>21</sup>, apresentam comportamentos não-lineares, a citar: o comportamento pseudoplástico do polímero fundido durante a etapa de preenchimento e a queda de pressão durante a etapa de resfriamento — Equação (26). Esses são responsáveis por incertezas não-estruturadas do modelo que podem prejudicar a identificação do processo.

Box e Cox (1964) citam que uma série temporal não-linear pode ser aproximadamente linearizada através de transformações de potência. Esse estudo empregou a transformação de Box-Cox de um parâmetro  $\lambda$ :

$$x_t^{(\lambda)} = \begin{cases} (x_t^\lambda - 1)/\lambda, & \text{se } \lambda \neq 0 \\ \ln x_t, & \text{se } \lambda = 0 \end{cases} \quad (35)$$

onde o caso  $\lambda = 0$  é dado pelo limite de  $(x_t^\lambda - 1)/\lambda$  conforme  $\lambda \rightarrow 0$ . Essa transformação permite estender a metodologia baseada no modelo ARMA a uma classe mais ampla de processos. Ainda assim, conforme Box *et al.* (2016), modelos ARMA( $p, q$ ) são restritos a representação de séries temporais que satisfazem a condição de estacionariedade fraca<sup>22</sup>.

<sup>19</sup> O processo é dito causal se a equação  $x_t = \theta_q(z^{-1})a_t/\varphi_p(z^{-1}) = \sum_{i=0}^{\infty} \psi_i a_{t-i}$  possui uma (única) solução estacionária. Para tanto, a convergência da soma infinita  $\sum_{i=0}^{\infty} \psi_i a_{t-i}$  deve ser satisfeita. Isso ocorre se e somente se todas as raízes do polinômio autogressivo  $\varphi_p(z^{-1})$  se situam dentro do círculo unitário  $\|z\| < 1 \in \mathbb{C}$  (BROCKWELL; DAVIS, 1991).

<sup>20</sup> O processo é dito invertível se a equação  $a_t = \varphi_p(z^{-1})x_t/\theta_q(z^{-1}) = \sum_{i=1}^{\infty} \pi_i x_{t-i}$  possui uma (única) solução estacionária. A expressão anterior converge, satisfazendo a invertibilidade, quando todas as raízes do polinômio de média móvel  $\theta_q(z^{-1})$  se situam dentro do círculo unitário  $\|z\| < 1 \in \mathbb{C}$  (BROCKWELL; DAVIS, 1991).

<sup>21</sup> Os comportamentos não-lineares são menos evidentes nos sinais da temperatura do molde. Conforme Pignon *et al.* (2018) o fluxo de calor na cavidade é predominantemente condutivo. Esse é aproximadamente descrito pela Equação (17), que é linear.

<sup>22</sup> A estacionariedade forte implica que duas sequências de observações arbitrárias (com comprimentos idênticos) oriundas de um mesmo processo devem ser estatisticamente similares. Geralmente essa similaridade é assumida em termos da distribuição de probabilidade das observações. Já a estacionariedade fraca implica na satisfação da propriedade de invariância à translação.

A estacionariedade fraca pode ser postulada em termos dos dois primeiros momentos e da função de autocovariância<sup>23</sup> da série temporal  $x_t$ :

- Valor esperado constante:  $\mathbb{E}[x_t] = \bar{x}, \forall t \in \mathbb{Z}$ ;
- Variância finita:  $\mathbb{E}[(x_t - \bar{x})^2] < \infty, \forall t \in \mathbb{Z}$ ;
- Invariância à translação:  $\gamma(r, s) = \gamma(r + t, s + t), \forall r, s, t \in \mathbb{Z}$ .

As variáveis de processo, todavia, não satisfazem a primeira condição, já que seus valores esperados são dados por uma função periódica.

A representação do processo de moldagem por injeção através de operadores autorregressivos e de médias móveis requer a estacionarização das respectivas séries temporais. Neste trabalho, isso foi feito por meio do método de Box e Jenkins (BOX *et al.*, 2016), que emprega modelos SARIMA.

### 3.3.1 Modelos SARIMA

Modelos SARIMA são generalizações dos modelos ARMA capazes de representar séries temporais com comportamentos não estacionários. Isso é feito através da remoção de componentes de tendência e de componentes periódicos por meio de diferenciações de primeira ordem  $\Delta = 1 - z^{-1}$  e de ordem sazonal  $\Delta_s = 1 - z^{-s}$ , onde  $s$  é a periodicidade do processo.

Box *et al.* (2016) propõem a seguinte equação para representar o modelo SARIMA:

$$\varphi_p(z^{-1})\Phi_P(z^{-s})\Delta^d\Delta_s^D x_t = \theta_0 + \theta_q(z^{-1})\Theta_Q(z^{-s})a_t \quad (36)$$

Esse inclui, além dos polinômios  $\varphi_p(z^{-1})$  e  $\theta_q(z^{-1})$ , os polinômios autorregressivo e de média móvel de ordem sazonal  $s$ :

$$\Phi_P(z^{-s}) = 1 - \sum_{i=1}^P \Phi_i z^{-is} \quad (37)$$

$$\Theta_Q(z^{-s}) = 1 - \sum_{j=1}^Q \Theta_j z^{-js} \quad (38)$$

que levam em conta a regressão entre valores separados por intervalos sazonais (i. e., em ciclos de moldagem anteriores). Os parâmetros  $P$  e  $Q$  correspondem as ordens dos mesmos. De maneira análoga, os parâmetros  $d$  e  $D$  correspondem às ordens dos operadores de diferenciação. Um modelo com  $d = 2$ , por exemplo, emprega duas diferenciações consecutivas da série temporal  $x_t$ , tal que:

$$\Delta^2 x_t = (1 - z^{-1})^2 x_t = (1 - 2z^{-1} + z^{-2}) x_t = x_t - 2x_{t-1} + x_{t-2} \quad (39)$$

<sup>23</sup> Quando o processo é estacionário, a distribuição de probabilidade conjunta  $p(x_t, x_{t+h})$  é constante para qualquer defasagem  $h$ . Isso permite definir a função de autocovariância, ou covariância cruzada, como:

$$\gamma(h) = \mathbb{E}[(x_t - \bar{x})(x_{t+h} - \bar{x})], \forall t, h \in \mathbb{Z}$$

Com base nas ordens polinomiais  $p$ ,  $d$ ,  $q$ ,  $P$ ,  $D$  e  $Q$  e na periodicidade  $s$  é possível propor a notação  $\text{SARIMA}(p, d, q) \times (P, D, Q)_s$  a fim de referenciar o modelo apresentado na Equação (36). O modelo  $\text{SARIMA}(p, d, q) \times (P, D, Q)_s$  da série temporal  $x_t$  é análogo ao modelo  $\text{ARMA}(p + sP, q + sQ)$  da série temporal diferenciada  $w_t = \Delta^d \Delta_s^D x_t$ . Isso ocorre porque as operações de diferenciação resultam em uma série temporal estacionária.

A modelagem do processo através do modelo  $\text{SARIMA}(p, d, q) \times (P, D, Q)_s$  compreende as seguintes etapas:

- Diferenciação da série temporal  $x_t$ ;
- Estimativa das ordens  $(p, d, q) \times (P, D, Q)_s$ ;
- Estimativa dos parâmetros dos operadores lineares.

A estimativa dos parâmetros tem por objetivo que os resíduos  $a_t$  sejam estocásticos, com comportamento de ruído branco. Embora estimadores comumente abordados na literatura (e. g., estimadores de mínimos quadrados e estimadores de máxima verossimilhança) assumam que os resíduos têm distribuição normal, essa condição pode ser relaxada. Dependendo do propósito da modelagem, a minimização dos quadrados dos resíduos é suficiente. Como será apresentado a diante — Equação (55) — o estimador de máxima verossimilhança minimiza a soma dos quadrados dos resíduos.

### 3.3.2 Estimativa das ordens dos operadores lineares

A estimativa das ordens dos operadores de um modelo SARIMA é análoga a determinação do número de variáveis independentes em um problema de regressão (BOX *et al.*, 2016). Porém, em modelos SARIMA, os regressores são valores defasados da série temporal  $x_t$  e da série de resíduos  $a_t$ .

A função de autocorrelação  $\rho(k)$  das observações pode ser utilizada como medida do grau de interdependência entre os valores atuais e os valores passados da série temporal  $x_t$ . Essa é definida em termos da função de autocovariância:

$$\rho(k) = \gamma(k)/\gamma(0) \quad (40)$$

e compartilha as mesmas propriedades (BROCKWELL; DAVIS, 1991). A função de autocovariância e, conseqüentemente, a função de autocorrelação podem ser estimadas a partir das observações. A autocovariância da amostra é dada por:

$$\hat{\gamma}(k) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n-k} (x_{t+k} - \bar{x})(x_t - \bar{x}) \quad (41)$$

Todavia a análise da série temporal baseada (apenas) na função de autocorrelação pode ser insuficiente. A razão disso é que mesmo em processos autorregressivos de primeira ordem podem apresentar autocorrelação de ordem  $k > 1$ .

Considere o modelo autorregressivo de primeira ordem AR(1):

$$x_t = \varphi x_{t-1} + a_t \quad (42)$$

cuja equação de diferenças pode ser reescrita, através de recursão, em termos do regressor defasado em dois intervalos de amostragem  $x_{t-2}$ :

$$x_t = \varphi^2 x_{t-2} + \varphi a_{t-1} + a_t \quad (43)$$

Esse comportamento recursivo se estende para outras ordens de defasagem fazendo com que a função de autocorrelação apresente um padrão de decaimento exponencial. Por esta razão, a interdependência entre as observações é analisada a partir das funções de autocorrelação e autocorrelação parcial.

A fim de definir a função de autocorrelação parcial, considere o conjunto de coeficientes  $\{\varphi_{kr}\}_{k=1}^r$  que satisfazem a equação:

$$\varrho(k) = \varphi_{r1}\rho(k-1) + \dots + \varphi_{r(r-1)}\rho(k-r+1) + \varphi_{rr}\rho(k-r) \quad (44)$$

Em notação matricial-vetorial, têm-se as equações de Yule-Walker:

$$\begin{bmatrix} 1 & \varrho(1) & \varrho(2) & \dots & \varrho(r-1) \\ \varrho(1) & 1 & \varrho(1) & \dots & \varrho(r-2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \dots \\ \varrho(r-1) & \varrho(r-2) & \varrho(r-3) & \dots & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{r1} \\ \varphi_{r2} \\ \vdots \\ \varphi_{rr} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \varrho(1) \\ \varrho(2) \\ \vdots \\ \varrho(r) \end{bmatrix} \quad (45)$$

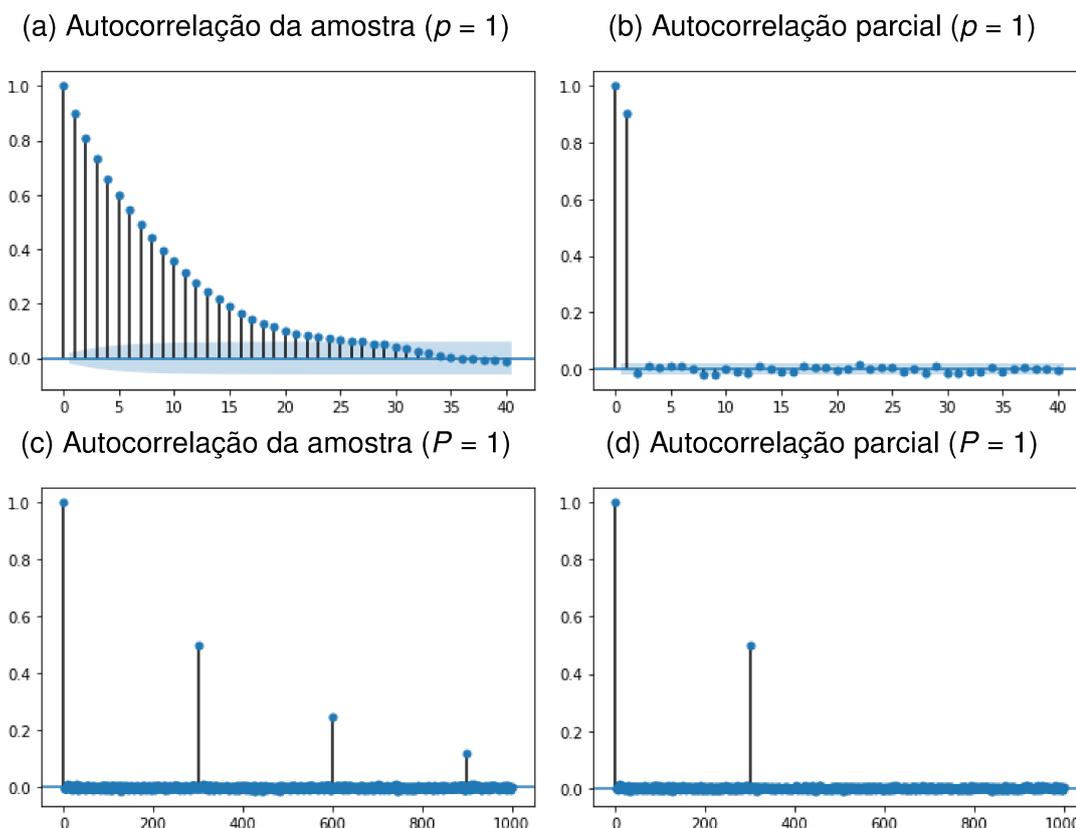
cuja solução, para  $r = 1, 2, 3, \dots$ , fornece os valores  $\varphi_{rr}$  da função de autocorrelação parcial. A função de autocorrelação parcial de um processo autorregressivo de ordem  $p$  — AR( $p$ ) — é nula para  $r > p$ . Portanto, essa permite estimar a ordem do operador autorregressivo (BOX *et al.*, 2016).

As figura 11.a e 11.b apresentam estimativas das funções de autocorrelação e de autocorrelação parcial do processo AR(1), com  $\varphi = 0,9$ , e série de resíduos  $a_t$  normalmente distribuída com média nula e variância unitária —  $a_t \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . Enquanto na primeira há diversos picos significativos com decaimento exponencial, na segunda há um único pico acentuado (após  $h = 0$ ) em  $h = 1$ .

O padrão de decaimento na Figura 11.a ocorre quando a raiz do operador  $\varphi_1(z^{-1})$  é positiva. Quando essa é negativa, os sinais dos picos alternam consecutivamente entre positivo e negativo enquanto a função de autocorrelação converge para zero. Já comportamentos autorregressivos de ordem maior ou igual a dois podem ocasionar decaimentos dominados por mais de um expoente ou comportamentos periódicos exponencialmente atenuados, dependendo da alocação das raízes dos operadores autorregressivos (BOX *et al.*, 2016).

Comportamentos autorregressivos de ordem sazonal também apresentam padrões de decaimento exponencial. As funções de autocorrelação e autocorrelação

Figura 11 – Autocorrelação de processos de ordens  $p = 1$  e  $P = 1$ .



Fonte – Elaborado pelo autor.

parcial do processo podem ser observadas nas figuras 11.c e 11.d:

$$x_t = 0,5x_{t-300} + a_t \tag{46}$$

onde  $a_t \sim \mathcal{N}(0, 1)$ . A ordem sazonal  $s = 300$  do operador  $\Phi_1(z^{-300}) = 1 - 0,5z^{-300}$  determina a distribuição dos picos de ambas as funções. Enquanto a autocorrelação da amostra tem picos exponencialmente decrescentes a cada 300 intervalos de defasagem, a autocorrelação parcial apresenta um único pico (após  $h = 0$ ) em  $h = 300$ .

Conforme Pearson e Ogunnaike (1997), um processo AR causal de ordem finita pode ser equivalentemente representado por um modelo MA de ordem infinita. Esta identidade pode ser deduzida, para o modelo AR(1), a partir da  $n$ -ésima recursão da Equação (42):

$$x_t = \varphi^n x_{t-n} + \sum_{i=0}^{n-1} \varphi^i a_{t-i} \tag{47}$$

Quando  $n \rightarrow \infty$ ,  $\varphi^n \rightarrow 0$ , resultando em uma soma ponderada da série de resíduos. Outrossim, um processo MA invertível de ordem finita pode ser representado por um processo AR de ordem infinita. Por isso, processos de médias móveis são complementares<sup>1</sup> aos autorregressivos. Nesses, enquanto a autocorrelação da amostra é nula

<sup>1</sup> Em termos das funções de autocorrelação e autocorrelação parcial.

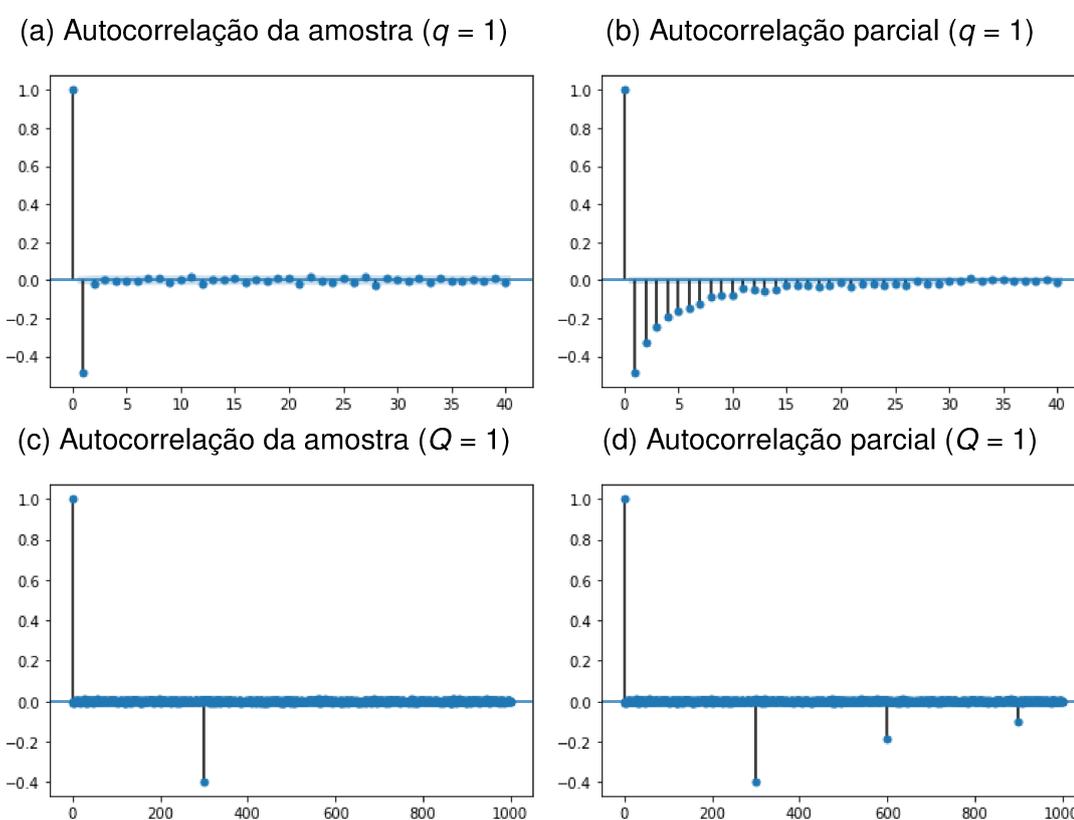
para defasagens superiores a ordem do processo, a autocorrelação parcial apresenta decaimento exponencial.

Esta complementariedade é exemplificada pelas estimativas das funções de autocorrelação e autocorrelação parcial do processo MA(1) —  $a_t \sim \mathcal{N}(0, 1)$ :

$$x_t = a_t - 0,9a_{t-1} \tag{48}$$

na Figura 12. O padrão de decaimento da função de autocorrelação parcial (Figura 12.b) é monotônico porque a raiz do operador  $\theta_1(z^{-1}) = 1 - 0,9z^{-1}$  é positiva. Caso contrário, os sinais dos picos são alternados sucessivamente, assim como em processos autorregressivos com raízes negativas.

Figura 12 – Autocorrelação dos processos de ordens  $q = 1$  e  $Q = 1$ .



Fonte – Elaborado pelo autor.

Em processos de média móvel com ordem maior ou igual a dois, estas funções podem apresentar mais que um modo de decaimento ou comportamentos periódicos atenuados, dependendo da alocação das raízes dos operadores  $\theta_q(z^{-1})$ . Já as funções de autocorrelação e autocorrelação parcial de processos de médias móveis de ordem sazonal apresentam comportamento similar, porém com picos sazonalmente distribuídos<sup>24</sup> (figuras 12.c e 12.d).

<sup>24</sup> Análogo ao observado para processos autorregressivos de ordem sazonal na Figura 11.

As funções de autocorrelação e autocorrelação parcial de processos com comportamento misto (autorregressivo e de média móvel) podem ser ambas infinitas com padrão de decaimento determinado pelas raízes dos operadores autorregressivos e de médias móveis.

A adequação do modelo SARIMA aos valores da série temporal requer que os resíduos sejam independentes e identicamente distribuídas (i.i.d.). A hipótese de aleatoriedade é rejeitada quando esses divergem do comportamento de ruído branco. Box *et al.* (2016) citam que, quando o modelo é inadequado, é possível modificá-lo conforme a autocorrelação dos resíduos. Suponha o modelo SARIMA arbitrário:

$$\varphi^*(z^{-1})\Delta_S^{D^*} x_t = \theta^*(z^{-1})a_t \quad (49)$$

cuja série de resíduos  $a_t$  não é i.i.d. Suponha também que a série de resíduos  $a_t$  é adequadamente descrita pelo modelo SARIMA:

$$\tilde{\varphi}(z^{-1})\Delta_S^{\tilde{D}} a_t = \tilde{\theta}(z^{-1})\tilde{a}_t \quad (50)$$

A combinação entre as equações (49) e (50) fornece o modelo modificado:

$$\varphi^*(z^{-1})\tilde{\varphi}(z^{-1})\Delta_S^{D^*+\tilde{D}} x_t = \theta^*(z^{-1})\tilde{\theta}(z^{-1})\tilde{a}_t \quad (51)$$

que satisfaz a condição de aleatoriedade dos resíduos. Essa abordagem foi empregada, neste trabalho, para modificar modelos inadequados conforme o diagnóstico dos resíduos.

### 3.3.3 Identificação do processo

O estimador de mínimos quadrados, geralmente, não pode ser utilizado para identificar os parâmetros de um modelo SARIMA. De acordo com Box *et al.* (2016), esse método requer que os erros de modelagem não sejam autocorrelacionados. Entretanto esses podem ser correlacionados conforme os operadores de média móvel  $\theta_Q(z^{-1})$  e do operador de média móvel de ordem sazonal  $\Theta_Q(z^{-s})$ . Nesse contexto, estimadores de máxima verossimilhança são alternativas mais adequadas.

Uma função de verossimilhança mede o quão bem ajustado um modelo arbitrário, com conjunto de parâmetros  $\theta$ , é a um conjunto de observações. Conforme Harvey (1990), para um conjunto de observações  $\{w_t\}_{t=0}^T$ , a função de verossimilhança é uma distribuição de probabilidade conjunta:

$$L(\{w_t\}_{t=1}^T; \theta) = \prod_{t=1}^T P(\{w_i\}_{i=1}^t) = \prod_{t=1}^T P(w_t | \{w_i\}_{i=1}^{t-1}) \quad (52)$$

onde  $P(w_t | \{w_i\}_{i=1}^{t-1})$  é a probabilidade condicional de observar  $w_t$  dada a ocorrência de  $\{w_i\}_{i=1}^{t-1}$ .

Como modelos SARIMA apresentam estados internos, correspondentes aos regressores da série temporal e da série de resíduos, o método da máxima verossimilhança requer que o modelo seja estruturado como um filtro de Kalman. Box *et al.* (2016) propõem o seguinte filtro de Kalman para um processo ARMA arbitrário:

$$\begin{cases} \vec{Y}_t = \Phi \vec{Y}_{t-1} + \Psi \vec{a}_t \\ w_t = H \vec{Y}_t \end{cases} \quad (53)$$

com  $\vec{Y}_t = [w_t \ w_{t-1} \ \dots \ w_{t-r-1}]^t$ ,  $H = [1 \ 0 \ \dots \ 0]$  e

$$\Phi = \begin{bmatrix} \vec{0} & I & & \\ \varphi_r & \varphi_{r-1} & \dots & \varphi_1 \end{bmatrix} \quad (54)$$

onde  $I$  é uma matriz identidade. A matriz  $\Psi$  é dada por  $[1 \ \psi_1 \ \dots \ \psi_r]^t$ , onde  $r$  é a maior entre as ordens dos operadores autorregressivo e de média móvel. Embora a Equação (53) represente um modelo ARMA, é simples torná-la genérica a fim de representar um modelo SARIMA. Para tanto, basta substituir as observações  $\{w_t\}_{t=1}^T$  pela série temporal diferenciada  $\nabla^d \nabla_S^D x_t$ .

Quando os resíduos  $a_t = w_t - \hat{w}_{t|t-1}$  são i.i.d., é possível tomar por hipótese que esses são normais (em torno do valor esperado  $\hat{w}_{t|t-1}$ ) com variância<sup>25</sup>  $\sigma_a^2 v_t$  (HARVEY, 1990). Através destas premissas, é possível reescrever a função de verossimilhança como:

$$L(\{w_t\}_{t=1}^T; \theta) = \prod_{t=1}^T \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma_a^2 v_t}} \exp \left[ -\frac{1}{2\sigma_a^2} \sum_{t=1}^T \frac{(w_t - \hat{w}_{t|t-1})^2}{v_t} \right] \quad (55)$$

onde o conjunto de parâmetros  $\theta$  corresponde aos coeficientes dos operadores lineares do modelo SARIMA. A estimativa  $\hat{\theta}$  obtida através desse método, é aquela que maximiza a função  $L(\{w_t\}_{t=1}^T; \theta)$  (BOX *et al.*, 2016).

Conforme Box *et al.* (2016), o uso do logaritmo da função de verossimilhança como estimador é mais comum do que o dela própria. Isso ocorre porque o produto de diversas probabilidades pequenas na Equação (52) pode resultar em valores numericamente instáveis. Portanto, aplicando a função logarítmica à Equação (55) obtém-se:

$$\log L(\{w_t\}_{t=1}^T; \theta) = -\frac{T}{2} \log 2\pi - \frac{1}{2} \sum_{t=1}^T \log \sigma_a^2 v_t - \frac{T}{2\sigma_a^2} \sum_{t=1}^T \frac{(w_t - \hat{w}_{t|t-1})^2}{v_t} \quad (56)$$

O conjunto de parâmetros  $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k\}$  que maximiza o logaritmo da função  $L(\{w_t\}_{t=1}^T; \theta)$  é dado pela solução das equações:

$$\frac{\partial \log L}{\partial \theta_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, k \quad (57)$$

<sup>25</sup> Quando a variância depende da variável temporal  $t$ , os resíduos são ditos heteroscedásticos. Isso é caracterizado pelo aumento ou diminuição da dispersão dos resíduos em relação ao esperado  $\hat{w}_{t|t-1}$ . Quando a variância se mantém constante ao longo do processo, os resíduos são ditos homoscedásticos.

Para que essas soluções sejam um máximo da função de verossimilhança, é necessário que a vizinhança da estimativa  $\hat{\theta}$ , no espaço dos parâmetros, seja localmente côncava. Isso ocorre quando a matriz das derivadas parciais de segunda ordem  $\partial^2 \log L / \partial \theta_i \partial \theta_j$  (matriz Hessiana) é negativa definida.

Porém é bastante difícil obter soluções analíticas da Equação (57). Geralmente as soluções são estimadas iterativamente através do algoritmo de Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno (BFGS). Entretanto esse possui alto custo computacional devido ao tempo necessário para calcular a matriz Hessiana da função  $\log L(\{w_1^t\}; \theta)$ . Em contraste, o método de Nelder-Mead tem custo computacional inferior já que não depende explicitamente das derivadas da função de custo.

O método de Nelder-Mead é baseado na minimização de uma função de custo  $k$ -dimensional calculada nos vértices de entidades geométricas denominadas *simplexes*. O *simplex* é a generalização do triângulo para espaços com números arbitrários de dimensões. *Simplexes* bidimensionais e tridimensionais, por exemplo, são representados por triângulos e tetraedros. Assim, em um espaço  $k$ -dimensional (o espaço dos parâmetros  $\theta = \{\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_k\}$ ), o valor de uma função de custo é comparado nos  $k + 1$  vértices do  $k$ -*simplex*. Após isso, o vértice com maior valor da função de custo é realocado de modo a contrair o  $k$ -*simplex*. O processo continua até que a entidade seja minimizada (NELDER; MEAD, 1965).

O conjunto de parâmetros que maximiza a função de verossimilhança pode ser obtido através da minimização de  $-\log L(\{w_1^t\}; \theta)$ . De acordo com Nelder e Mead (1965), a aplicação do método pressupõe a suavidade e um único mínimo local da função de custo. Esta condição é satisfeita pela função  $-\log L(\{w_1^t\}; \theta)$ , já que o estimador de máxima verossimilhança é consistente. De acordo com Newey e McFadden (1994), um estimador consistente converge em probabilidade para o verdadeiro conjunto de parâmetros conforme o tamanho da amostra cresce. O estimador de máxima verossimilhança satisfaz essa propriedade porque a função de máxima verossimilhança possui um único máximo global.

### 3.3.4 Diagnóstico dos resíduos

Os resíduos do modelo SARIMA podem ser calculados através da equação:

$$\hat{a}_t = \frac{\varphi_p(z^{-1})\Phi_P(z^{-s})}{\theta_q(z^{-1})\Theta_Q(z^{-s})} \Delta^d \Delta_s^D x_t - \frac{\theta_0}{\theta_q(z^{-1})\Theta_Q(z^{-s})} \quad (58)$$

ou através dos devios  $\hat{a}_t = x_t - \hat{x}_{t|t-1}$ , onde  $\hat{x}_{t|t-1}$  é a estimativa do modelo (dada a observação de  $\{x_{ij}\}_{i=1}^{t-1}$ ). A série temporal  $\hat{a}_t$  é uma estimativa dos resíduos, já que a convergência do estimador de máxima verossimilhança para o verdadeiro conjunto de parâmetros depende (assintoticamente) do número de observações da variável de processo. Logo, há incertezas quando a amostra é finita. De acordo com Box *et al.*

(2016), a ordem destas incertezas é  $O(n^{-1/2})$ :

$$\hat{a}_t = a_t + O\left(\frac{1}{\sqrt{n}}\right) \quad (59)$$

onde  $n$  é o número de amostras.

A estimativa  $\hat{a}_t$  pode ser utilizada para verificar se os resíduos são i.i.d. através de exame visual e de testes estatísticos baseados na função de autocorrelação da mesma. Conforme Box *et al.* (2016), quando os resíduos são i.i.d., a função de autocovariância da série temporal  $a_t$  satisfaz:

$$\gamma(k) = \mathbb{E}[a_t a_{t+k}] = \begin{cases} \sigma_a^2 & \text{se } k = 0 \\ 0 & \text{se } k > 0 \end{cases} \quad (60)$$

Em termos da função de autocorrelação, isso condiz com um único pico não nulo  $\rho(0) = 1$ . O exame visual consiste em observar os desvios da função de autocorrelação a partir de zero para  $k > 0$ . Conforme a Equação (59), esses devem estar contidos em intervalos de confiança proporcionais a  $n^{-1/2}$ . Normalmente um ou dois intervalos de confiança (i. e.,  $1/\sqrt{n}$  ou  $2/\sqrt{n}$ ) são assumidos (BOX *et al.*, 2016).

Testes estatísticos do tipo *portmanteau* são utilizados para indicar falhas de ajuste do modelo. A adequação desse é avaliada assumindo os  $n$  primeiros valores da função de autocorrelação dos resíduos. Para tanto, estatística proposta por Ljung e Box (1978) apud Box *et al.* (2016):

$$Q_{LB} = n(n+2) \sum_{t=1}^k \frac{\hat{\rho}^2(t)}{n-t} \quad (61)$$

é empregada para testar a hipótese de autocorrelação dos resíduos. Essa tem distribuição aproximadamente qui-quadrada com  $k$  graus de liberdade —  $\chi^2(k)$ . Quando  $Q_{LB} > \chi_{1-\varepsilon}^2(k)$ , onde  $\chi_{1-\varepsilon}^2(k)$  é o valor da estatística a nível de significância  $\varepsilon$ , a adequação do modelo é rejeitada. Em termos de probabilidade de significância, isso implica em  $P(Q_{LB}) < \varepsilon$ .

A análise dos resíduos quadráticos por meio do teste de Ljung-Box pode indicar autocorrelações dificilmente observáveis entre os resíduos (BROCKWELL; DAVIS, 1991). Porém o uso desse como substituto da exame visual não é aconselhado (BOX *et al.*, 2016). Estas abordagens devem ser utilizadas de maneira conjunta com o objetivo de rejeitar modelos mal ajustados.

O conhecimento da distribuição dos resíduos, por sua vez, permite procedimentos de inferência estatística, como a determinação de intervalos de confiança para as estimativas ou a detecção de anomalias. Essa última pode ser determinada em termos de medidas da dispersão dos resíduos. Quando a distribuição é normal, essa dispersão pode ser mensurada em termos do desvio padrão da amostra. Caso contrário, essa é melhor descrita pela amplitude interquartil.

Jarque e Bera (1987) propuseram um teste de normalidade com base nas medidas de assimetria<sup>26</sup> e de curtose<sup>27</sup> dos resíduos de modelos regressivos. A assimetria  $\varkappa_s$  e a curtose  $\varkappa_k$  são proporcionais ao terceiro e ao quarto momentos dos resíduos:

$$\varkappa_s = \frac{\mathbb{E}[(a_t - \bar{a})^3]}{\sigma_a^3}, \quad \varkappa_k = \frac{\mathbb{E}[(a_t - \bar{a})^4]}{\sigma_a^4} \quad (62)$$

Uma distribuição normal apresenta  $\varkappa_s = 0$  e  $\varkappa_k = 3$ . Logo, a assimetria  $\varkappa_s$  e o excesso de curtose  $\varkappa_k - 3$  permitem mensurar a não normalidade dos resíduos.

O teste de Jarque-Bera utiliza a estatística:

$$Q_{JB} = \frac{n}{6} \left[ \varkappa_s^2 + \frac{1}{4}(\varkappa_k - 3)^2 \right] \quad (63)$$

cuja distribuição é aproximadamente qui-quadrada com dois graus de liberdade —  $\chi^2(2)$ . Quando  $Q_{JB} > \chi_{1-\varepsilon}^2(2)$ , i. e.  $P(Q_{JB}) < \varepsilon$ , diz-se que a hipótese de normalidade foi rejeitada. Como é apresentado na Seção 4.1, a normalidade dos resíduos dos modelos das variáveis de processo foi rejeitada pelo teste de Jarque-Bera. Logo, a ocorrência de discrepâncias foi avaliada com base na amplitude interquartil.

Conforme Dodge (2008), os quartis correspondem as abscissas dos pontos que separam a distribuição de uma amostra em quatro partes iguais (cada uma com 25% das observações). Logo, uma distribuição arbitrária apresenta três quartis:  $Q_1$  (quartil inferior), em que a frequência acumulada excede 25%;  $Q_2$  (quartil mediano), em que a frequência acumulada excede 50%; e  $Q_3$  (quartil superior), em que a frequência acumulada excede 75%.

As posições dos quartis são calculadas pelo seguinte procedimento:

- Seja  $j = 1, 2$  ou  $3$  ( $j$  corresponde ao índice do quartil);
- Sejam  $i$  e  $k$ , a parte inteira e a parte fracionária de  $j(n + 1)/4$ ;
- O  $j$ -ésimo quartil é dado por:

$$Q_j = x_i + k(x_{i+1} - x_i) \quad (64)$$

onde  $x_i$  e  $x_{i+1}$  são os valores das observações em ordem crescente de magnitude.

A amplitude interquartil é dada pela diferença entre os quartis superior e inferior  $IQR = Q_3 - Q_1$ . O intervalo<sup>28</sup> delimitado por  $Q_1 - 1,5 IQR$  e  $Q_3 + 1,5 IQR$  compreende

<sup>26</sup> A assimetria é caracterizada pela diferença entre os comprimentos das caudas da distribuição. Quando essa assume valores negativos, a cauda esquerda é mais comprida e os resíduos são mais concentrados no lado direito da distribuição. Outrossim, valores positivos indicam que a cauda direita é mais comprida e que os resíduos estão mais concentrados no lado esquerdo.

<sup>27</sup> A curtose está associada a incidência de valores discrepantes entre os resíduos. As caudas de distribuições com excesso de curtose positivo se aproximam de zero mais lentamente do que as caudas de distribuições normais. Logo, a probabilidade de resíduos com valores discrepantes é maior. Já em casos de excesso de curtose negativo a convergência para zero é mais rápida.

<sup>28</sup> Análogo ao intervalo delimitado pela distância de mais ou menos dois desvios padrões a partir da média em uma distribuição normal.

aproximadamente 95% das observações. Amostras fora desse intervalo podem ser consideradas discrepantes. Além disso, a amplitude interquartil é pouco influenciada por essas amostras, já que depende das frequências das observações ao invés dos desvios em relação ao valor esperado (DODGE, 2008).

### 3.3.5 Validação dos modelos

Após a identificação e o diagnóstico dos resíduos, os modelos SARIMA foram submetidos à validação cruzada. Esta técnica é baseada na comparação dos desempenhos dos modelos em dois conjuntos de amostras: o conjunto de treinamento (utilizado durante a identificação do processo) e o conjunto de teste. A adequação do modelo depende que o desempenho das estimativas no conjunto de teste seja próximo ao verificado no conjunto de treinamento.

Neste estudo, os diagnósticos dos resíduos foram avaliados pela autocorrelação da amostra e pelo teste de Ljung-Box ao longo de dois intervalos sazonais (i. e.,  $2s$ ). Logo, para manter a consistência, foram empregados conjuntos de teste com  $2s$  amostras. Nesses, os desempenhos dos modelos foram avaliados conforme o valor esperado e a variância da série de resíduos ( $\bar{a}$  e  $\sigma_a^2$ ).

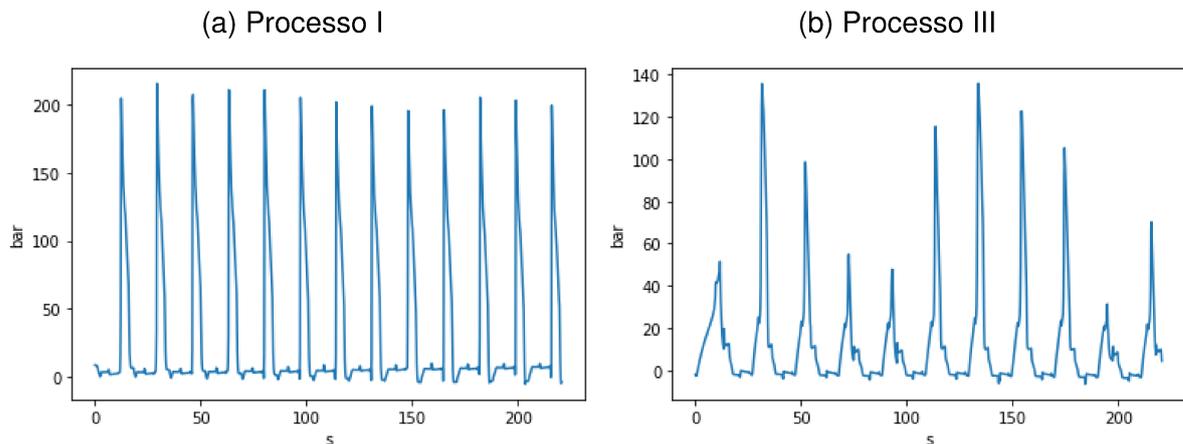
Os intervalos determinados pela amplitude interquartil dos resíduos (no conjunto de treinamento) também foram comparados com os resíduos produzidos pelo conjunto de teste. Esta abordagem foi empregada para verificar se os resíduos se distribuem de maneira similar dentro e fora do conjunto de treinamento. A mesma, junto a comparação das medidas  $\bar{a}$  e  $\sigma_a^2$ , permite inferir a similaridade estatística entre os dois conjuntos. Quando essa é satisfeita, é possível afirmar que os parâmetros do modelo convergiram assintoticamente para seus verdadeiros valores.

## 4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os procedimentos experimentais forneceram séries temporais da pressão na cavidade e da temperatura do molde ao longo de diversos ciclos de injeção. As metodologias, respectivas aos estudos 1 e 2, foram replicadas para cada um dos processos (I, II e III) a fim de obter modelos descritivos dos mesmos.

Verificou-se, através da medição das variáveis de processo, que a moldagem por injeção é bastante influenciada pelas condições experimentais e pela geometria do molde. A Figura 13 compara as séries temporais da pressão na cavidade nos processos I e III. Os experimentos revelaram que a pressão na cavidade assume valores mais altos nas etapas de compressão e recalque do processo I. Por outro lado, a variação ciclo-a-ciclo do processo III é maior.

Figura 13 – Pressão na cavidade do molde.



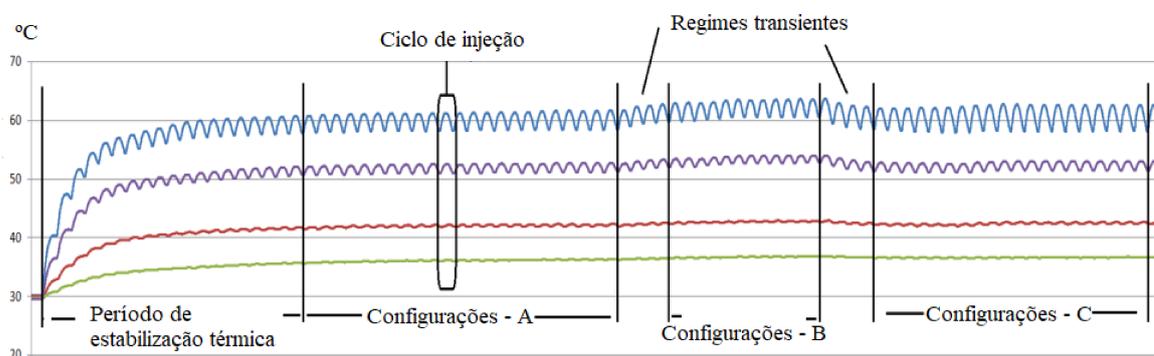
Fonte – Elaborado pelo autor.

A Figura 14 apresenta observações simultâneas de temperatura em diferentes localizações do molde. Cada série temporal corresponde às observações de um termopar, sendo a temperatura média (ao longo do ciclo) maior conforme a proximidade do ponto de injeção. As observações mais próximas do ponto de injeção também exibem maior dispersão em relação ao valor médio.

As figuras 13 e 14 também demonstram que o processo não é perfeitamente periódico. Esse compreende desvios ciclo-a-ciclo (e. g., variações dos picos de pressão por ciclo de moldagem e da temperatura média ao longo do ciclo) que podem ser associados a dinâmicas de ordem sazonal. Esses podem ser causados por mudanças nas configurações do processo (Figura 14) e pela incidência dos efeitos de compressibilidade durante as etapas de compressão e recalque. Como será discutido na Seção 4.1, essa incidência é diferente para os processos I, II e III.

As observações das variáveis de processo foram utilizadas para ajustar modelos da moldagem por injeção. Cada procedimento de identificação utilizou séries temporais

Figura 14 – Temperatura do molde



Fonte – Elaborado pelo autor.

com mil observações, cujas autocorrelações foram analisadas ao longo de dois intervalos sazonais. A convergência dos parâmetros<sup>29</sup> foi assumida quando o gradiente da função de custo (ou do logaritmo da função de verossimilhança) foi inferior a  $1,0 \times 10^{-5}$  por iteração.

Durante o Estudo 2, algumas séries temporais não foram satisfatoriamente representadas por modelos SARIMA, devido a não sazonalidade das mesmas. As falhas durante a identificação são explicadas na Seção 4.2. Além disso, a abordagem não foi bem-sucedida ao representar as séries temporais medidas pelos termopares 3 e 4 em nenhuma das condições experimentais relatadas. Portanto, esta seção trata apenas dos modelos das séries temporais medidas pelos termopares 1 e 2.

#### 4.1 CLASSIFICAÇÃO DAS AMOSTRAS DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO

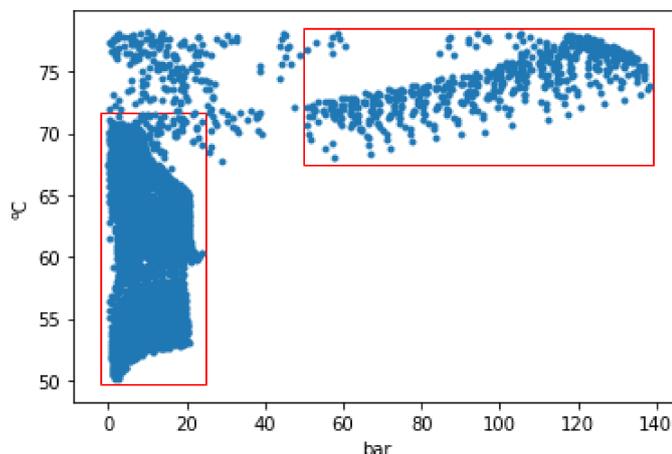
O agrupamento das amostras em diferentes regimes, conforme a compressibilidade do polímero fundido, pode ser exibida graficamente. Os pontos na Figura 15 correspondem a pares<sup>30</sup>  $(p_t, T_t^*)$  medidos pelo sensor piezométrico e por um dos termopares (sensor 2) instalados no molde. Esses são oriundos do processo II. É possível distinguir dois regimes, para  $p_t < 25$  bar e  $p_t > 50$  bar, delimitados pelos retângulos vermelhos.

Durante o primeiro regime, que compreende medições durante as etapas de preenchimento e resfriamento, as amostras apresentam uma grande dispersão ao longo do eixo das ordenadas. Contudo essa dispersão diminui durante o segundo regime, que compreende medições durante as etapas de compressão e recalque. Nesse, é

<sup>29</sup> Os conjuntos de coordenadas médias  $(\hat{\rho}_k, \hat{T}_k, \hat{T}_k^*)$  no Estudo 1 e os parâmetros dos operadores lineares no Estudo 2.

<sup>30</sup> As amostras da série temporal  $T_t$  foram ignoradas na Figura 15 porque a visualização dos agrupamentos se mostrou mais fácil em um gráfico bidimensional. Entretanto nas demais abordagens apresentadas nesta seção a tripla  $(p_t, T_t, T_t^*)$  foi considerada.

Figura 15 – Agrupamentos das amostras das variáveis de processo.



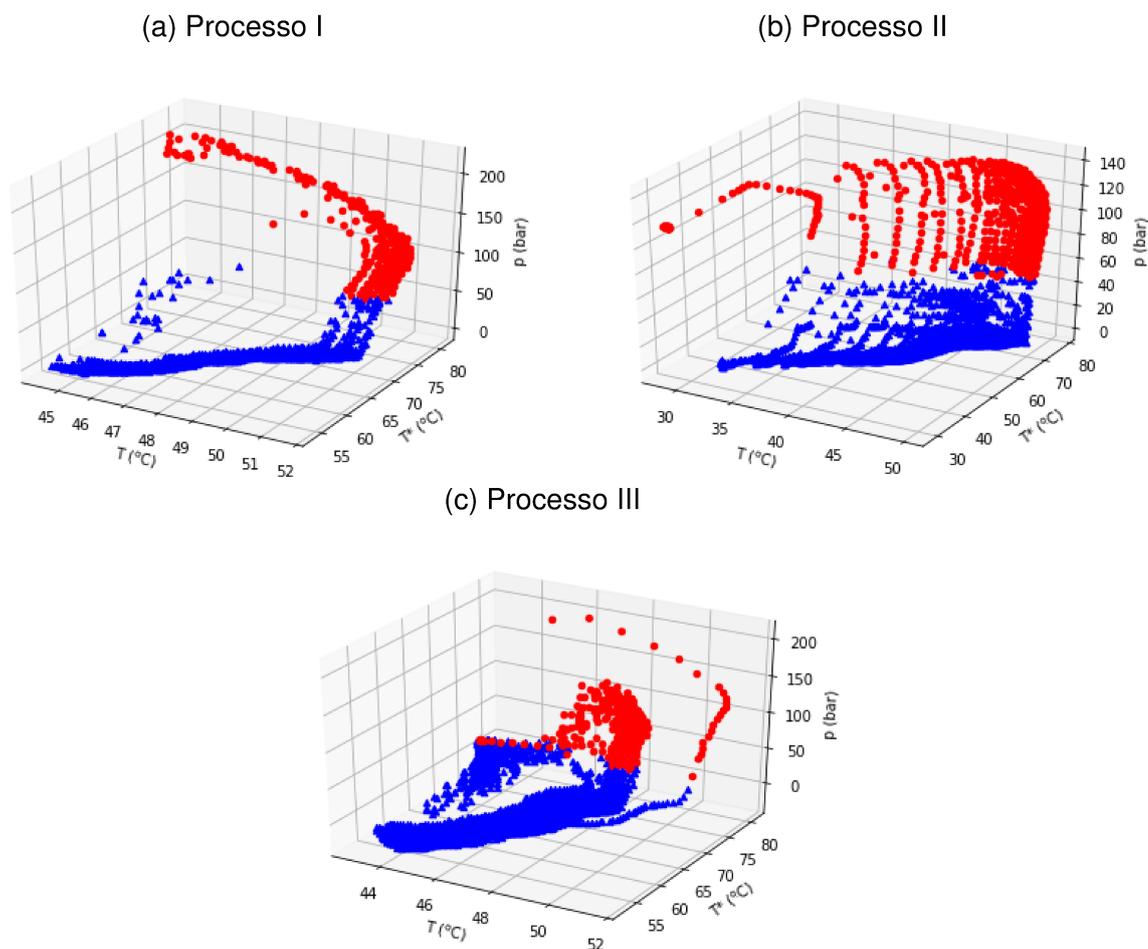
Fonte – Elaborado pelo autor.

possível observar uma tendência aproximadamente linear relacionando o crescimento da pressão ao crescimento da temperatura. Isso ocorre devido à compressibilidade do fluido durante esse último.

O método *k-means* foi empregado para otimizar a partição das amostras das variáveis de processo, já que é difícil determinar a natureza das amostras não delimitadas pelos retângulos. Os resultados dessas partições podem ser vistos na Figura 16. Os círculos vermelhos representam amostras pertencentes ao regime compressível enquanto os triângulos azuis representam amostras pertencentes ao regime incompressível. A mesma partição das amostras foi obtida a cada procedimento de otimização, embora esse tenha sido repetido diversas vezes a partir de diferentes partições iniciais. Isso indica que a função de custo  $J(c)$  não tem mínimos locais para o conjunto de amostras estudado.

A Figura 17 compreende a partição das séries temporais da pressão na cavidade. É possível observar que a partição das amostras corresponde aos regimes de compressibilidade do processo. As observações associadas ao regime compressível (círculos vermelhos) ocorrem durante as etapas de compressão e recalque. Já o comportamento incompressível (triângulos azuis) ocorre durante as etapas de preenchimento e resfriamento e durante o início das etapas de compressão (em casos de subempacotamento). Os períodos intermediários, entre a ejeção de uma peça e o início do preenchimento de outra, são atribuídos ao regime incompressível. Entretanto isso não prejudica a estimativa do status do processo, pois esses períodos podem ser facilmente delimitados pela abertura e fechamento do molde.

A incidência de comportamentos compressíveis e incompressíveis não é a mesma para todos os processos. Com base nos agrupamentos apresentados nas figuras 16 e 17, verifica-se que nos processos I, II e III apenas 19,2, 18,9 e 10,4% das

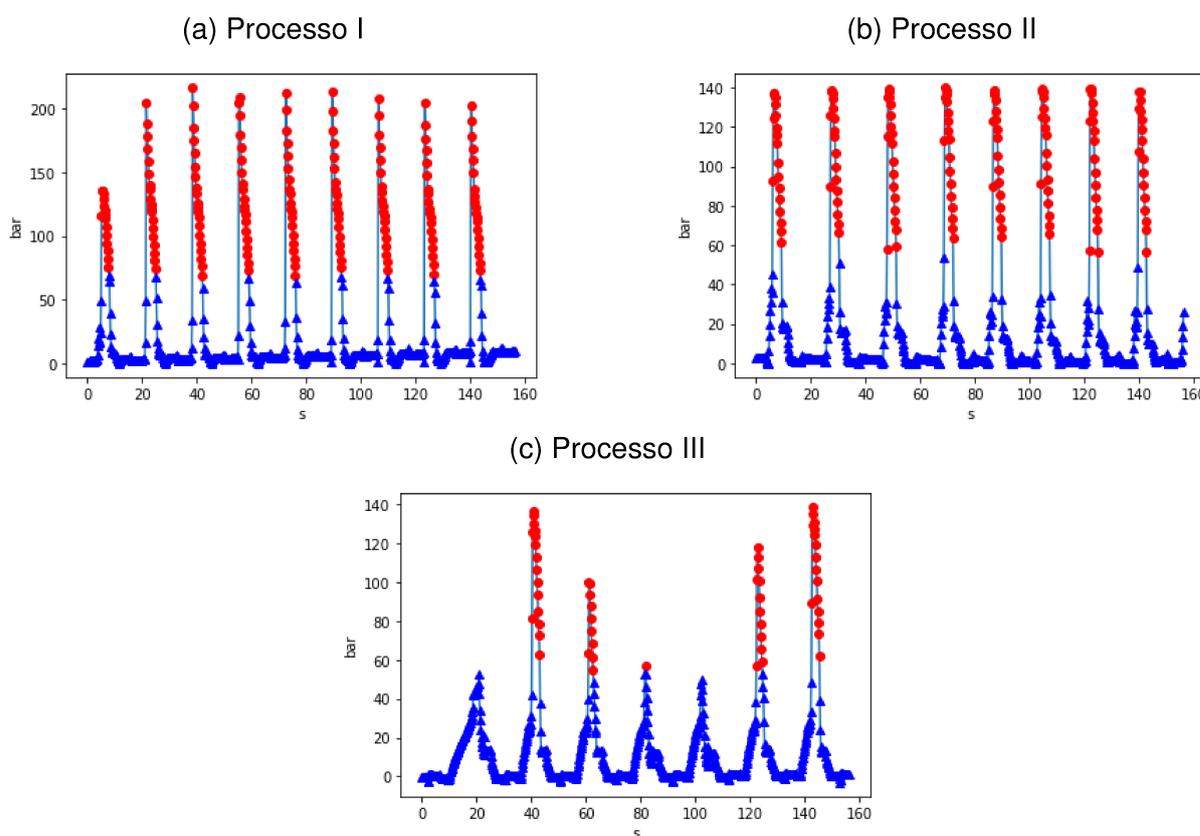
Figura 16 – Partição das amostras ( $p_t$ ,  $T_t$ ,  $T_t^*$ ) através do método *k-means*.

amostras (respectivamente) ocorrem em regime de compressibilidade. Com efeito, a *clusterização* através do método *k-means* indica a ausência de efeitos de compressibilidade em alguns ciclos do processo III. Isso explica a incidência de 10,4%, bastante inferior as incidências nos demais processos.

A não sazonalidade do processo III pode ser compreendida em termos de dois efeitos observados no processo de moldagem por injeção. O primeiro é previsto pela teoria do escoamento genérico (Figura 3). Conforme discutido na Seção 2, essa explica o decréscimo da viscosidade do polímero em função do alinhamento das cadeias poliméricas. Esse é mais intenso conforme a magnitude da taxa de cisalhamento  $\dot{\gamma}$  a que o fluido é submetido.

A rosca recíproca avança mais rapidamente no processo I. Por consequência, o fluido é submetido a campos de cisalhamento mais intensos tornando o comportamento pseudoplástico mais propício. Já no processo III, o cisalhamento é menos intenso fazendo com que a redução da viscosidade do polímero fundido seja menor. Isso ocasiona vazões volumétricas  $Q$  inferiores as observadas no processo I.

Como a resistência ao escoamento no processo III é superior, conclui-se que

Figura 17 – Partição da série temporal  $p_t$  através do método  $k$ -means.

Fonte – Elaborado pelo autor.

esse requer mais tempo até o preenchimento volumétrico da cavidade. Em alguns ciclos de moldagem por injeção o intervalo de 2.0 segundos não é suficiente fazendo com que os efeitos de compressibilidade não sejam observados. Entretanto os efeitos do congelamento do polímero na cavidade também podem contribuir com a não sazonalidade do processo III.

Como é apresentado na Figura 5 (em condições não isotérmicas) quanto menor a vazão volumétrica  $Q$  maior o gradiente de pressão  $\Delta p$  necessário para promover o escoamento. Durante o processo III, não apenas a vazão volumétrica  $Q$  é inferior, mas também a troca de quantidade de movimento entre o polímero fundido e a rosca recíproca. Assumindo a conservação da quantidade de movimento — Equação (19) — deduz-se que os gradientes de pressão ao longo da cavidade também são inferiores. Logo, é possível que os gradientes de pressão na cavidade tenham sido insuficientes para promover o preenchimento volumétrico antes do congelamento do polímero.

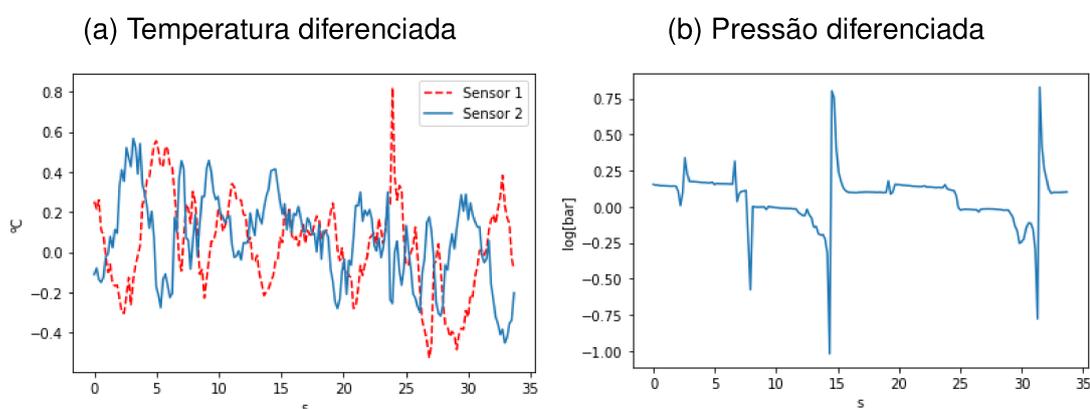
## 4.2 MODELAGEM DAS VARIÁVEIS DE PROCESSO

Os processos I, II e III apresentaram ciclos com duração de  $s = 92, 96$  e  $111$  intervalos de amostragem, respectivamente. Portanto, as séries temporais das variá-

veis de processo foram submetidas a diferenciações de ordens sazonais conforme as periodicidades mencionadas.

A Figura 18 apresenta os resultados das diferenciações de ordem sazonal das séries temporais de temperatura e da transformação de Box-Cox da pressão na cavidade (processo I). Nota-se que as séries temporais diferenciadas apresentam tanto comportamentos estocásticos (Figura 18.a) como respostas determinísticas a degraus (Figura 18.b). Os procedimentos descritos na Seção 4.2.2 foram empregados para determinar as ordens dos comportamentos autorregressivos e de médias móveis desses sinais.

Figura 18 – Variáveis de processo diferenciadas.



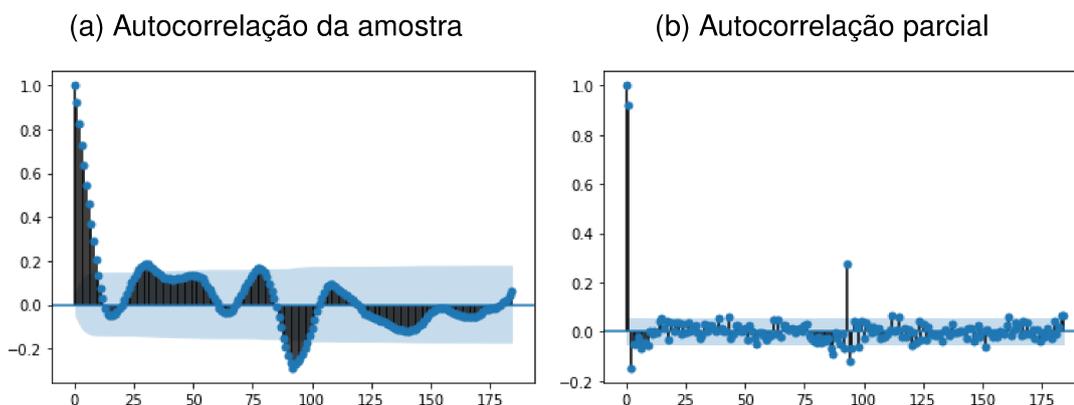
Fonte – Elaborado pelo autor.

As funções de autocorrelação e autocorrelação parcial da série temporal  $\Delta_{92} T_t$  (sensor 1) são apresentadas na Figura 19. Após  $k = 0$ , a autocorrelação da amostra apresenta decaimento exponencial, enquanto a função de autocorrelação parcial apresenta dois picos proeminentes. Este é um indício de comportamento autorregressivo de segunda ordem. Entretanto é difícil conjecturar a respeito dos picos sazonais ( $k = 92$ ).

Através de comparação com as figura 12.c e 12.d, é possível afirmar que este comportamento não se assemelha ao comportamento de média móvel de ordem sazonal  $Q = 1$ . Embora o pico ( $k = 92$ ) da função de autocorrelação seja negativo, o pico da função de autocorrelação parcial (a mesma defasagem) é positivo. Além disso, não é possível afirmar que essa última apresenta decaimento exponencial ao longo do intervalo observado. Assim, o comportamento autorregressivo de ordem sazonal foi considerado.

O modelo  $SARIMA(2, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{92}$  foi tomado por hipótese, se mostrando inadequado. A função de autocorrelação dos resíduos apresentou valores significativos em  $k = 3, 92$  e  $184$ . Essas autocorrelações foram consideradas durante a modificação

Figura 19 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 1).



Fonte – Elaborado pelo autor.

da hipótese, fornecendo o modelo SARIMA(3, 0, 0) × (2, 1, 0)<sub>92</sub>:

$$\begin{aligned}
 (1 - 1,06z^{-1} + 0,0798z^{-2} + 0,0927z^{-3})(1 + 0,349z^{-92} + 0,169z^{-184})\Delta_{92} T_t = \\
 = 0,0117 + a_t
 \end{aligned}
 \tag{65}$$

que se mostrou adequado conforme o exame visual da autocorrelação da amostra e conforme o teste de Ljung-Box (figuras 20.a e 20.b). A linha vermelha tracejada (Figura 20.b) corresponde a nível de confiança  $\varepsilon = 0,05$ .

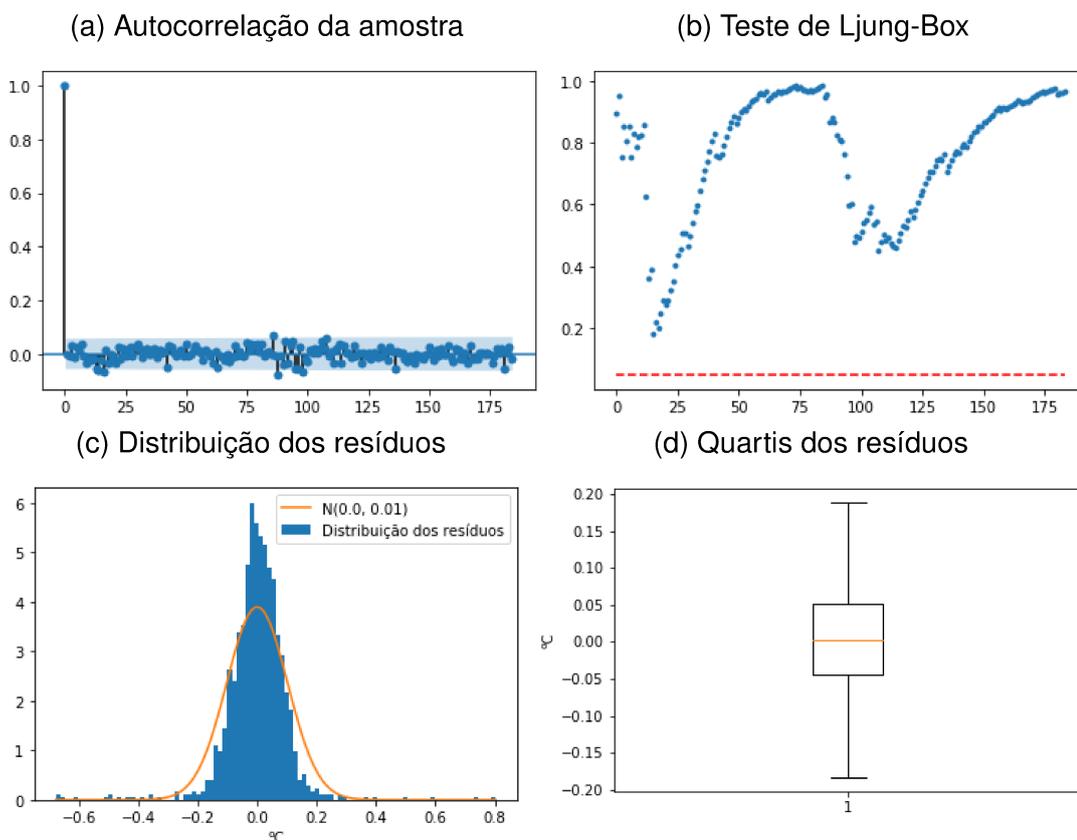
Embora alguns picos da autocorrelação da amostra excedam marginalmente o intervalo de confiança  $\pm 2/\sqrt{n}$ , esses não implicam na rejeição da hipótese de aleatoriedade (para mesma defasagem) pelo teste de Ljung-Box. A Figura 20.b corrobora que os resíduos são i.i.d. ao longo do intervalo observado.

A média e a variância dos resíduos ( $\bar{a} \approx 0$  e  $\sigma_a^2 = 0,0104 \text{ } ^\circ\text{C}^2$ ) dos resíduos foram calculados com a finalidade de comparar a distribuição desses a uma distribuição normal. Nota-se, na Figura 20.c, que a distribuição dos resíduos diverge da distribuição  $\mathcal{N}(0, 0,0104)$ . Tanto a assimetria ( $\chi_S = -0,408$ ) como o excesso de curtose ( $\chi_K - 3 = 13,9$ ) apresentaram valores elevados resultando na rejeição da hipótese de normalidade pelo teste de Jarque-Bera. De fato, o valor da estatística  $Q_{JB} = 9662,5$  é muito superior a  $\chi_{0,95}^2 = 0,1$ .

Uma vez que a hipótese de normalidade foi rejeitada, a distribuição dos resíduos foi particionada em quartis. Esses podem ser visualizados na Figura 20.d, onde o retângulo em torno do quartil mediano  $Q_2$  é delimitado pelos quartis superior  $Q_3$  e inferior  $Q_1$ . Os limites inferior e superior são dados por  $Q_{1,3} \mp 1,5 \text{ IQR}$ . Amostras além desses valores podem ser consideradas discrepantes.

As estimativas do modelo (Figura 21.a) são bastante próximas as observações, embora existam discrepâncias. Essas são sinalizadas (por cruzes) na Figura 21.a (sobre as observações) e na Figura 21.b (sobre os resíduos). A Figura 21.b permite visualizar os desvios dessas em relação aos limites determinados pela amplitude inter-

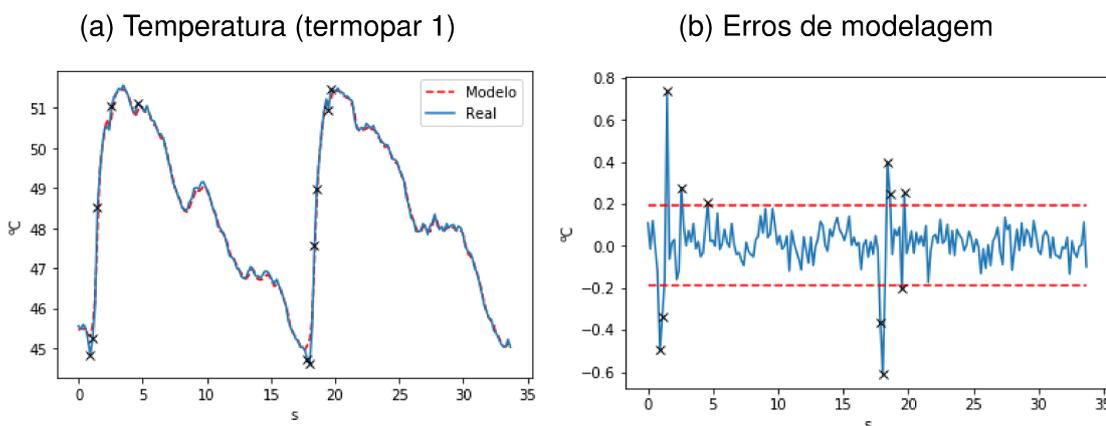
Figura 20 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(3, 0, 0) × (2, 1, 0)<sub>92</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

quartil (linhas tracejadas vermelhas). As discrepâncias ocorrem, sobretudo, durante o início das etapas de preenchimento e durante as etapas de compressão.

Figura 21 – Estimativas do modelo SARIMA(3, 0, 0) × (2, 1, 0)<sub>92</sub>.



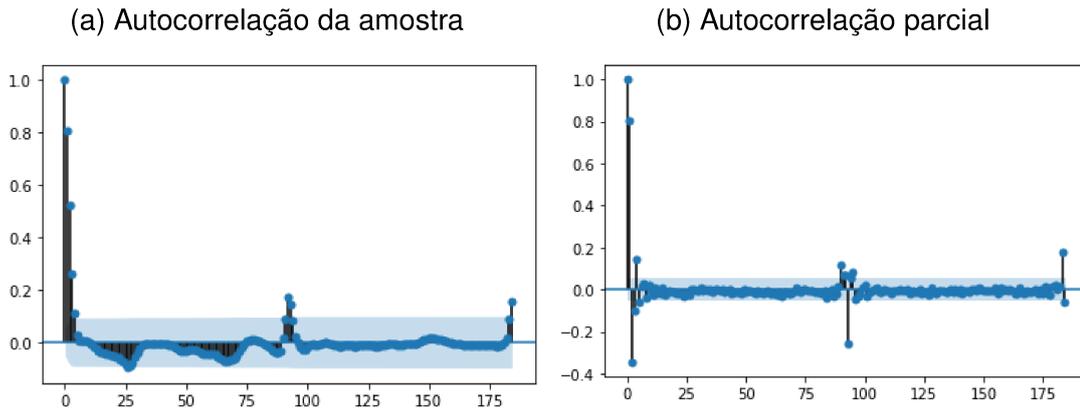
Fonte – Elaborado pelo autor.

Embora a rejeição da hipótese de normalidade implique em incertezas não-estruturadas, essas não comprometeram (de maneira considerável) as estimativas do modelo. Os erros de modelagem são aproximadamente nulos e têm dispersão de

aproximadamente  $\pm 0,2$  °C em relação as observações.

O procedimento de modelagem foi repetido para a série temporal da temperatura medida pelo termopar 2. A autocorrelação da amostra (Figura 22.a) do sinal  $\Delta_{92} T_t^*$  apresentou decaimento exponencial e dois picos sazonalmente defasados. A função de autocorrelação parcial (Figura 22.b), por sua vez, apresentou valores significativos até  $k = 4$  e picos sazonalmente defasados com comportamento alternado.

Figura 22 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 2).



Fonte – Elaborado pelo autor.

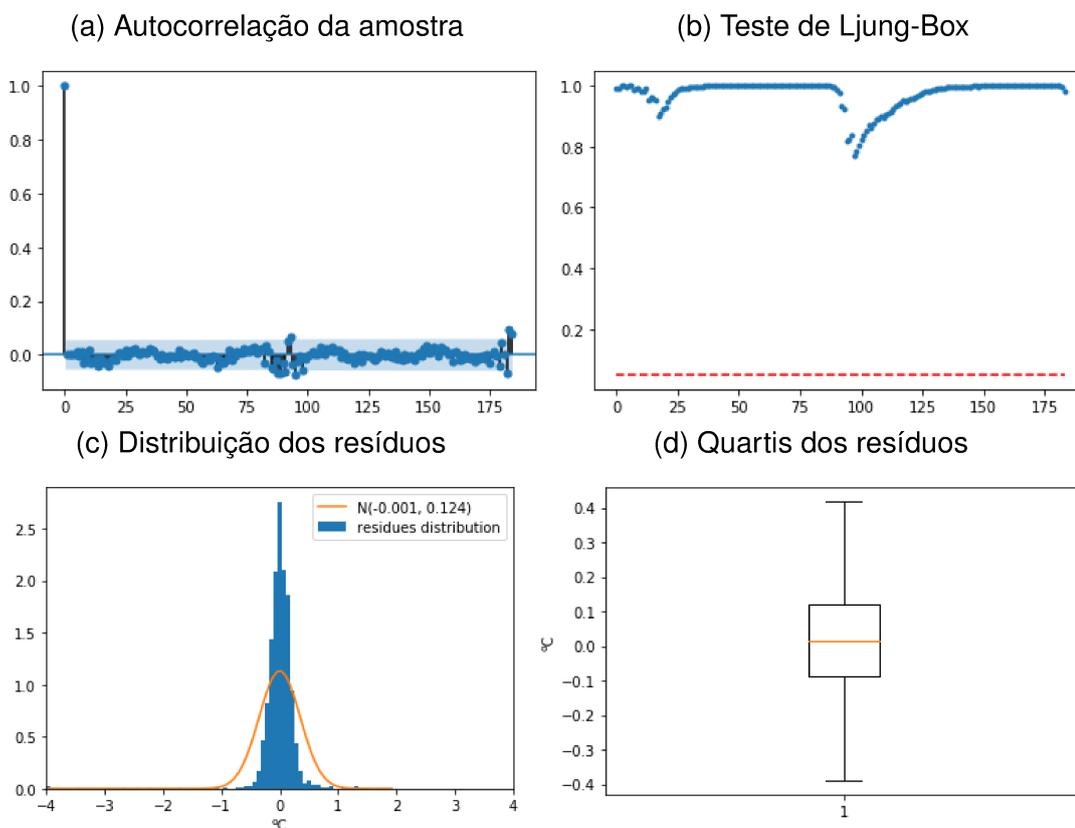
Novamente é difícil determinar a natureza dessa autocorrelação. Porém o comportamento de média móvel de ordem sazonal foi descartado, já que funções de autocorrelação parcial com padrão sazonal alternado ocorrem quando o primeiro pico é positivo. Logo, comportamentos mistos e autorregressivos foram considerados. Entre os modelos testados, o modelo  $SARIMA(4, 0, 0) \times (1, 1, 1)_{92}$  apresentou melhor desempenho ao representar a série temporal. Entretanto os resíduos apresentaram autocorrelação de natureza semelhante a de um processo de média móvel (Figura 12.a). Logo, esse foi descartado em detrimento do modelo  $SARIMA(4, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{92}$ :

$$\begin{aligned} (1 - 0,727z^{-1} - 0,0478z^{-2} + 0,243z^{-3} - 0,178z^{-4})(1 - 0,0261z^{-92})\Delta_{92} T_t = \\ = 0,0159 + (1 + 0,0842z^{-1})(1 + 0,450z^{-92})a_t \end{aligned} \quad (66)$$

que se mostrou adequado com base na falta de autocorrelação dos resíduos (Figura 23).

A autocorrelação da amostra da série de resíduos (Figura 23.a) se mantém dentro do intervalo de confiança  $\pm 2/\sqrt{n}$  ao longo da maioria dos intervalos de defasagem observados. As exceções correspondem a picos marginalmente superiores ao intervalo. Porém esses não resultam na rejeição do modelo pelo teste de Ljung-Box.

Os resíduos do modelo  $SARIMA(4, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{92}$  são i.i.d. com assimetria negativa ( $\chi_S = -6,66$ ) e excesso positivo de curtose ( $\chi_K - 3 = 81,4$ ). O teste de Jarque-Bera rejeita a hipótese de normalidade dada a estatística  $Q_{JB} = 361165,7$ . A divergência

Figura 23 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(4, 0, 1)  $\times$  (1, 1, 1)<sub>92</sub>.

Fonte – Elaborado pelo autor.

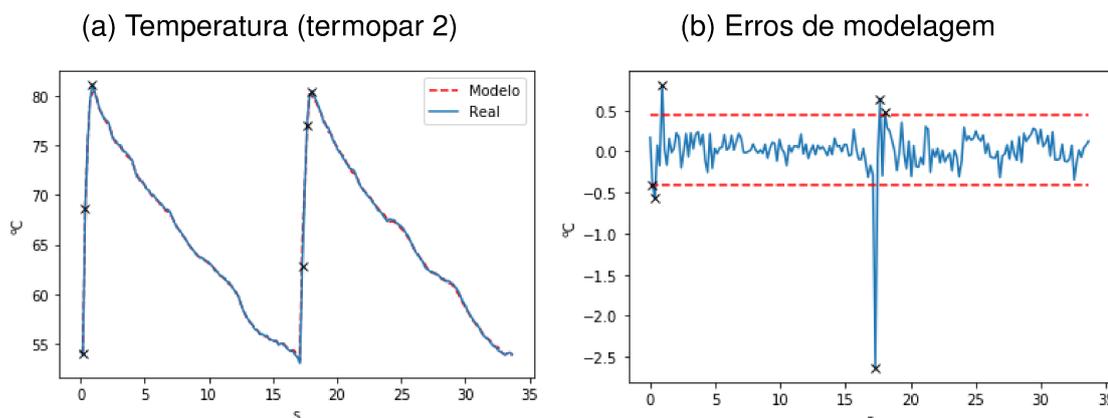
entre a distribuição dos resíduos e a distribuição normal  $\mathcal{N}(-0,01, 0,124)$  é exibida na Figura 23.c.

Devido à rejeição da hipótese de normalidade, os quartis da distribuição dos resíduos foram empregados para compreender a ocorrência de discrepâncias. As discrepâncias negativas (Figura 24.b) ocorrem porque o modelo tende a superestimar o valor da temperatura durante o início das etapas de preenchimento. Já as discrepâncias positivas são causadas pela subestimativa da temperatura durante a etapa de compressão. Outra vez é possível afirmar que as incertezas não-estruturadas não comprometem consideravelmente os resultados da identificação.

A transformação de Box-Cox da pressão na cavidade também foi diferenciada e utilizada para estimar funções de autocorrelação (Figura 25.a) e autocorrelação parcial (Figura 25.b). Diferente dos casos anteriores, essas não apresentaram indícios de comportamentos autorregressivos ou de médias móveis de ordens sazonais.

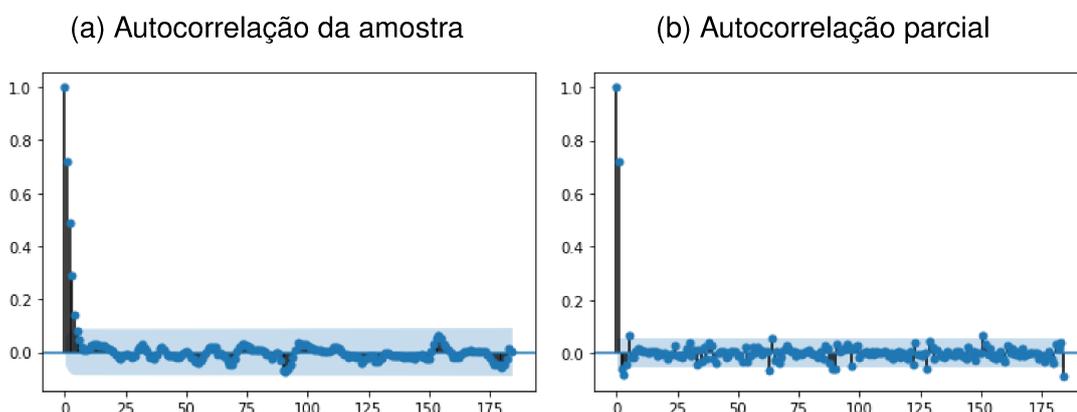
Observa-se, na correlação da amostra, um padrão de decaimento característico de comportamentos autorregressivos. Esse é contíguo a alguns picos da função de autocorrelação parcial. Entretanto é difícil determinar a ordem do modelo a partir destas estimativas, pois estão muito próximas das margens do intervalo de significância. A ordem do operador autorregressivo  $\varphi_p(z^{-1})$  foi incrementada até produzir resíduos i.i.d.

Figura 24 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 1) × (1, 1, 1)<sub>92</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

Figura 25 – Autocorrelação da temperatura diferenciada (Sensor 2).



Fonte – Elaborado pelo autor.

Assim foi obtido o modelo SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 0)<sub>92</sub>:

$$(1 - 0,744z^{-1} - 0,00205z^{-2} + 0,00443z^{-3} + 0,0448z^{-4})\Delta_{92}p_t^{(0)} = 0,0250 + a_t \quad (67)$$

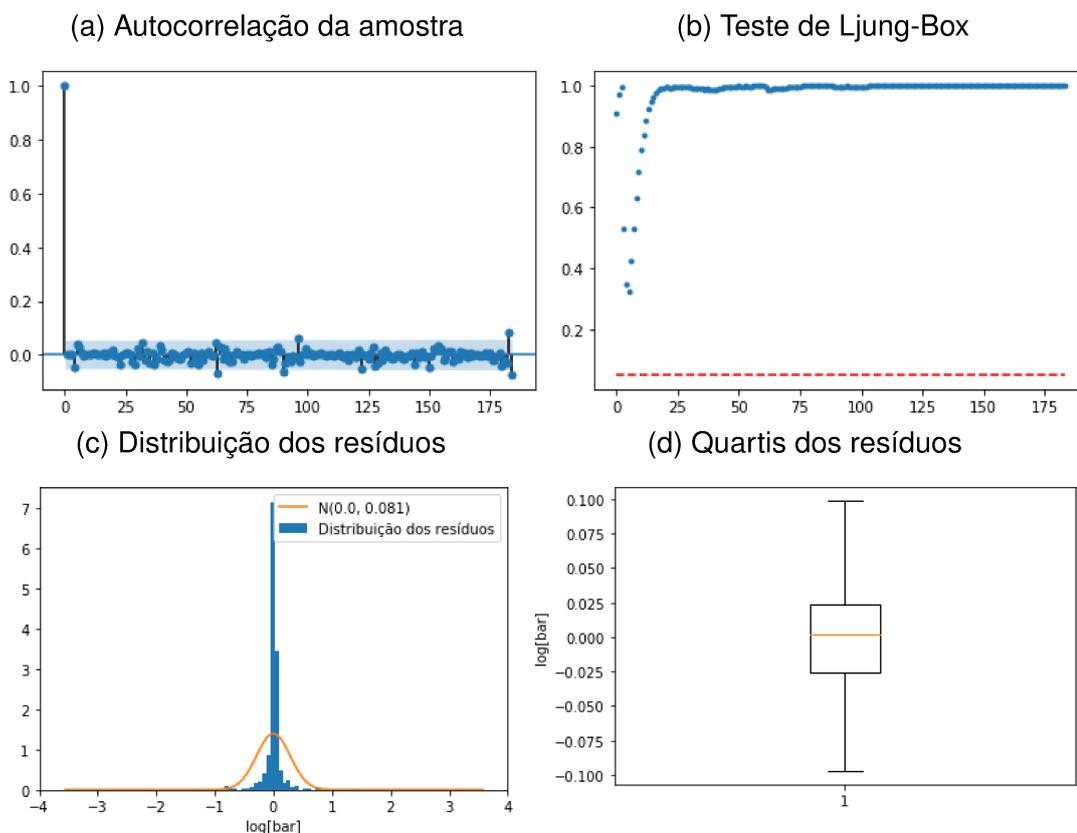
cujo diagnóstico dos resíduos é exibido na Figura 26. O teste de de Ljung-Box permite concluir que o modelo é adequado ao longo do intervalo de defasagem observado.

A distribuição dos resíduos é leptocúrtica<sup>31</sup> ( $\varkappa_k - 3 = 52,1$ ) e assimétrica ( $\varkappa_s = 1,03$ ), com estatística  $Q_{JB} = 154334,6$ . Conforme a Figura 26.d, a dispersão dos resíduos é bastante estreita, fazendo com que as discrepâncias ocorram em uma faixa bastante ampla (comparada a amplitude interquartil). Parte das discrepâncias ocorre porque o modelo superestima a pressão na cavidade ao fim das etapas de compressão. Isso pode ser observado na Figura 27.

A Figura 27.a também apresenta discrepâncias ao fim da etapa de recalque, quando os efeitos de compressibilidade cessam. Outras anomalias ocorrem durante

<sup>31</sup> A distribuição é dita leptocúrtica quando o excesso de curtose é positivo e platicúrtica quando o excesso de curtose é negativo.

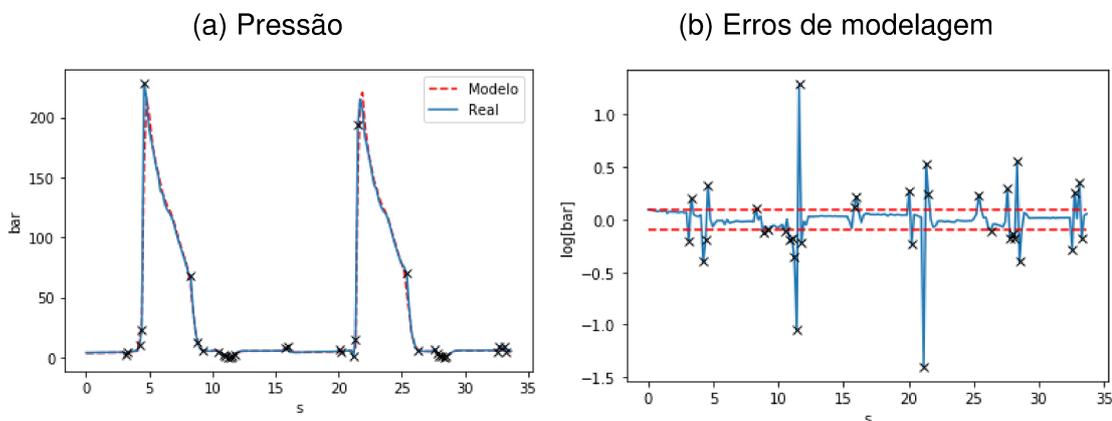
Figura 26 – Diagnóstico dos resíduos — SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 0)<sub>92</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

o início das etapas de preenchimento, durante os congelamentos do ponto de injeção e durante as ejeções das peças. Nos processos II e III, as discrepâncias também ocorrem durante a comutação e logo após o preenchimento volumétrico da cavidade do molde.

Figura 27 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 0)<sub>92</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

A Tabela 3 apresenta os modelos SARIMA obtidos para cada variável (cujos

processos de origem são indicado entre parênteses na primeira coluna). Essa exibe a média, a variância, a assimetria e o excesso de curtose dos resíduos. Os Erros de modelagem foram bastante baixos, exceto durante as etapas de compressão e durante as transições entre as etapas do processo. Todavia é possível considerar esses erros como discrepâncias (a nível de significância<sup>32</sup> de aproximadamente 95%). Essas discrepâncias, por sua vez, são causadas pela divergência entre as estimativas do modelo SARIMA e a variável de processo quando a tendência dessa última é submetida a mudanças abruptas.

Tabela 3 – Resultados da modelagem do processo

Variável	Modelo (ordem)	$\bar{a}$	$\sigma_a^2$	$\varkappa_S$	$\varkappa_K - 3$
$T_t$ (I)	$(3, 0, 0) \times (2, 1, 0)_{92}$	$\approx 0$	0,0104	-0,408	13,9
$T_t^*$ (I)	$(4, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{92}$	$\approx 0$	0,123	-6,65	81,3
$p_t^{(0)}$ (I)	$(4, 0, 0) \times (0, 1, 1)_{92}$	$\approx 0$	0,0810	1,03	52,1
$T_t$ (II)	$(3, 1, 0) \times (2, 1, 2)_{96}$	$\approx 0$	0,00756	0,675	6,93
$T_t^*$ (II)	$(1, 0, 1) \times (1, 1, 0)_{96}$	$\approx 0$	0,0180	3,31	39,4
$p_t$ (II)	$(2, 0, 2) \times (1, 1, 0)_{96}$	$\approx 0$	2,06	14,9	289,7
$T_t$ (III)	$(3, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{111}$	-0,000151	0,00441	0,293	1,47
$T_t^*$ (III)	$(3, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{111}$	$\approx 0$	0,0176	3,02	28,2
$p_t$ (III)	$(4, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{111}$	$\approx 0$	5,18	1,68	33,9

Fonte – Elaborado pelo autor.

A transformação de Box-Cox da pressão na cavidade se mostrou adequado apenas ao processo com 0,5 segundos de preenchimento. Nos demais processos, a redução dos resíduos quadráticos foi maior para modelos da própria pressão na cavidade. Isso pode ser atribuído à curva de escoamento genérica (Figura 3). O comportamento pseudoplástico é menos comum em processos com 1,0 e 2,0 segundos de preenchimento (devido ao cisalhamento menos intenso), resultando em séries temporais aproximadamente lineares. Isso justifica a inconveniência da transformação de Box-Cox nesses casos.

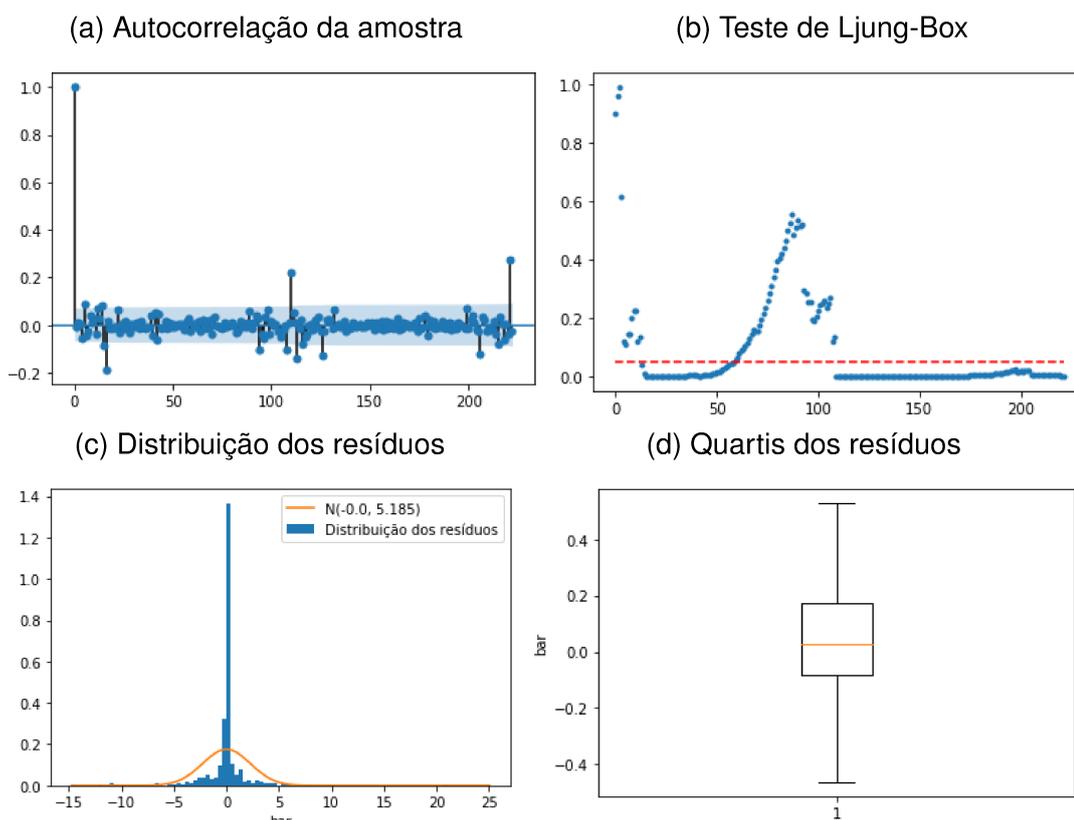
Quase todos os modelos na Tabela 3 apresentaram resíduos i.i.d., com exceção do modelo SARIMA(4, 0, 0)  $\times$  (1, 1, 0)<sub>111</sub> da variável  $p_t$  e dos modelos SARIMA(3, 1, 0)  $\times$  (2, 1, 2)<sub>96</sub> e SARIMA(3, 0, 1)  $\times$  (1, 1, 1)<sub>111</sub> da variável  $T_t$ . Não foi possível encontrar modelos adequados para as mesmas apesar da ordem do modelo ter sido modificada diversas vezes através da autocorrelação dos resíduos. Os modelos mencionados anteriormente são inadequados conforme o exame visual da autocorrelação dos resíduos e/ou o teste de Ljung-Box. Todavia os mesmos são exibidos na Tabela 3 por terem apresentado as menores médias e variâncias entre os modelos considerados.

<sup>32</sup> Essa inferência é baseada nos desvios  $Q_{1,3} \mp 1,5$  IQR dados pela amplitude interquartil.

A inadequação do modelo  $SARIMA(4, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{111}$  da pressão na cavidade pode ser explicada pela irregularidade do respectivo processo. As séries temporais da pressão na cavidade nos processos I e II apresentam os mesmos comportamentos em cada ciclo, diferindo apenas pela amplitude das observações. Já no processo III, há ciclos em que o processo não exibe efeitos de compressibilidade, degenerando as etapas de compressão e recalque. Portanto, o modelo SARIMA é inválido pois a série temporal não se mantém sazonal ao longo do lote de produção.

As figuras 28 e 29 exibem o diagnóstico dos resíduos e as estimativas do modelo  $SARIMA(4, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{111}$ . A correlação da amostra (Figura 28.a) e o teste de Ljung-Box (Figura 28.b) apontam que os resíduos divergem do comportamento de ruído branco. Embora as estimativas sejam bastante próximas das observações a maior parte do tempo, há diversas discrepâncias durante a etapa de recalque, devido a inadequação do modelo.

Figura 28 – Diagnóstico dos resíduos —  $SARIMA(4, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{111}$ .

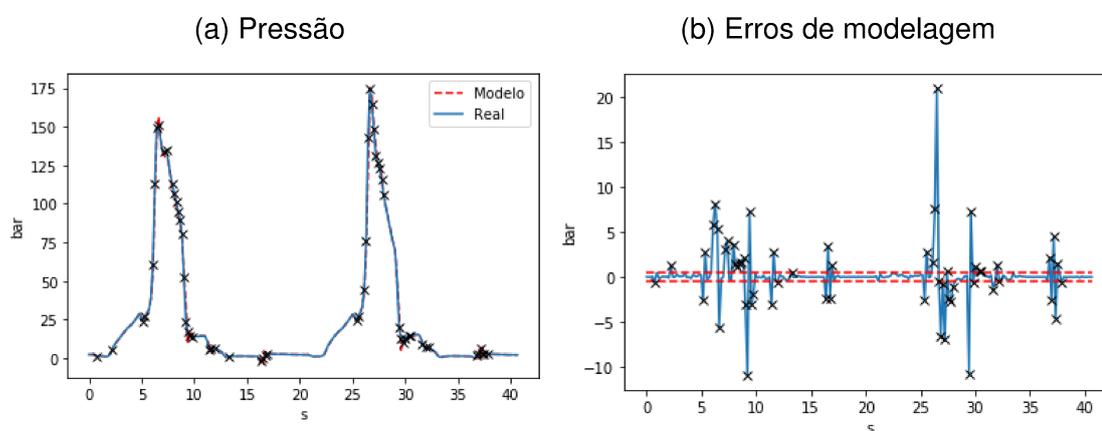


Fonte – Elaborado pelo autor.

Como é apresentado na Figura 29.a, muitas dessas discrepâncias não estão associadas a transições entre etapas ou a comportamentos anormais do processo. O modelo  $SARIMA(4, 0, 0) \times (1, 1, 0)_{111}$  da pressão na cavidade não pode ser empregado em abordagens de monitoramento, já que tende a indicar falsas anomalias devido às incertezas do modelo. Situações semelhantes ocorreram para os modelos inadequados

da temperatura do molde.

Figura 29 – Estimativas do modelo SARIMA(4, 0, 0) × (1, 1, 0)<sub>111</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

Os perfis de temperatura do molde são menos influenciados pela incidência de comportamentos compressíveis. Entretanto esses são bastante influenciados pelas posições dos termopares ao longo da geometria do molde. O preenchimento dos centros das convexidades da peça é tardio e pode ser (até mesmo) deficiente quando a cavidade é subempacotada.

A localização dos sensores pode explicar as falhas dos modelos SARIMA(3, 1, 0) × (2, 1, 2)<sub>96</sub> e SARIMA(3, 0, 1) × (1, 1, 1)<sub>111</sub>, já que o sinal  $T_t$  é medido longe do ponto de injeção (Figura 8). Os processos II e III podem comportar ciclos em que a contração térmica, em regiões próximas ao termopar 1, não é devidamente compensada pela injeção de mais material durante as etapas de recalque e compressão. Isso faz com que a peça esfrie mais rápido nos respectivos ciclos, resultando no comportamento não sazonal. Tal situação é menos provável em regiões próximas ao termopar 2, pois essas são rapidamente preenchidas em função da proximidade com o ponto de injeção.

A hipótese de normalidade foi rejeitada (pelo teste de Jarque-Bera) em todos os procedimentos de modelagem. Todas as amostras de resíduos são assimétricas e leptocúrticas. O maior desvio em relação a distribuição normal foi verificado para os resíduos do modelo SARIMA(2, 0, 2) × (1, 1, 0)<sub>96</sub> da pressão na cavidade. Isso se deve a condição de subempacotamento da cavidade do molde, que contribui com um ponto singular adicional (durante a comutação) anterior a etapa de compressão. As discrepâncias adicionais contribuem<sup>33</sup> com o excesso de curtose  $\varkappa_k - 3 = 289,7$  e com a variância  $\sigma_a^2 = 2,06 \text{ bar}^2$ .

<sup>33</sup> O processo com 2,0 segundos de preenchimento também sofre pela condição de subempacotamento. Contudo não é possível fazer as mesmas conclusões a respeito das medidas de assimetria e de excesso de curtose dos resíduos do modelo SARIMA(4, 0, 0) × (1, 1, 0)<sub>111</sub>, já que esse é inadequado.

Os desempenhos dos modelos<sup>34</sup> foram avaliados fora do conjunto de treinamento através de validação cruzada. Os resultados desse procedimento estão expostos na Tabela 4. Nota-se que, na maioria dos casos, a variância dos resíduos manteve a mesma ordem de magnitude observada no conjunto de treinamento (Tabela 3). Já o valor esperado foi superior em alguns casos, para os modelos da pressão na cavidade. Contudo esses valores são bastante baixos, dadas as escalas de centenas de bares observadas nessas séries temporais.

Tabela 4 – Validação dos modelos

Variável	Modelo (ordem)	$\bar{a}$	$\sigma_a^2$
$\bar{T}_t$ (I)	$(3, 0, 0) \times (2, 1, 0)_{92}$	$\approx 0$	0,0104
$T_t^*$ (I)	$(4, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{92}$	$\approx 0$	0,168
$\rho_t^{(0)}$ (I)	$(4, 0, 0) \times (0, 1, 1)_{92}$	0,0104	0,0248
$T_t^*$ (II)	$(1, 0, 1) \times (1, 1, 0)_{96}$	$\approx 0$	0,0174
$p_t$ (II)	$(2, 0, 2) \times (1, 1, 0)_{96}$	0,0254	1,89
$T_t^*$ (III)	$(3, 0, 1) \times (1, 1, 1)_{111}$	$\approx 0$	0,0387

Fonte – Elaborado pelo autor.

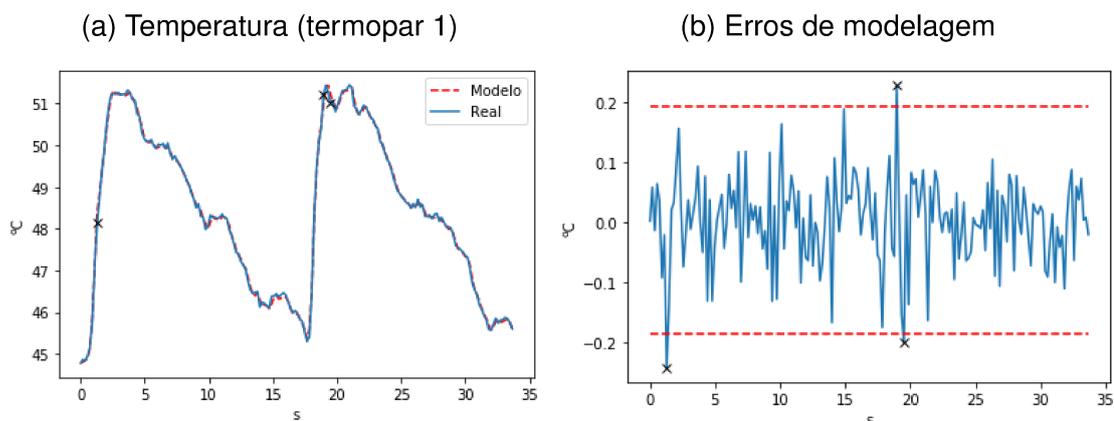
Como as medidas  $\bar{a}$  e  $\sigma_a^2$  se mostraram similares dentro e fora do conjunto de treinamento, é possível concluir que as identificações dos modelos SARIMA convergiram assintoticamente para os verdadeiros conjuntos de parâmetros. Assim, os erros de modelagem no conjunto de teste devem ter distribuições semelhantes às observadas no conjunto de treinamento. De fato, isso é comprovado pelas figuras 30-35.

As medidas na Tabela 4 foram calculadas a partir dos resíduos exibidos nas figuras 30-35. Em cada figura, os erros de modelagem são apresentados junto ao intervalo delimitado por  $Q_{1,3} \pm 1,5 \text{ IQR}$ . Esse último é o intervalo obtido durante o diagnóstico dos resíduos e corrobora a afirmação feita no parágrafo anterior. A dispersão dos resíduos é determinada pela amplitude interquartil dos mesmos ao longo do ciclo de moldagem, exceto pelos pontos singulares associados às transições entre etapas da moldagem por injeção.

As previsões de temperatura apresentaram discrepâncias no início da etapa de preenchimento e durante a etapa de compressão e, além disso, os perfis nas figuras 33.a e 35.a apresentaram discrepâncias durante o congelamento do ponto de injeção. Na modelagem da pressão na cavidade, as discrepâncias também mantiveram o padrão exposto durante a identificação do processo. Dessa forma, é possível afirmar que os modelos são capazes de descrever o processo ao longo da maior parte do ciclo de moldagem, se mostrando adequados.

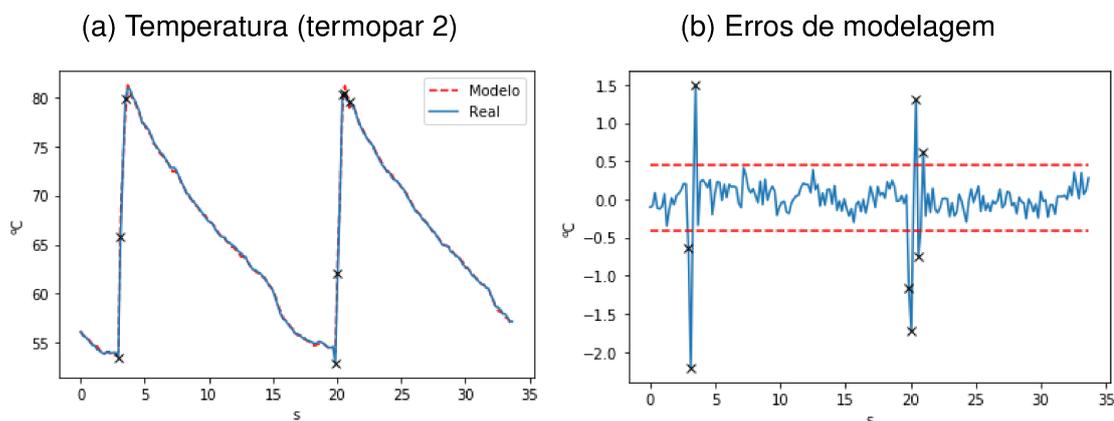
<sup>34</sup> Essa validação excluiu os modelos considerados inadequados conforme os diagnósticos dos resíduos.

Figura 30 – Validação do modelo SARIMA(3, 0, 0) × (2, 1, 0)<sub>g2</sub>.



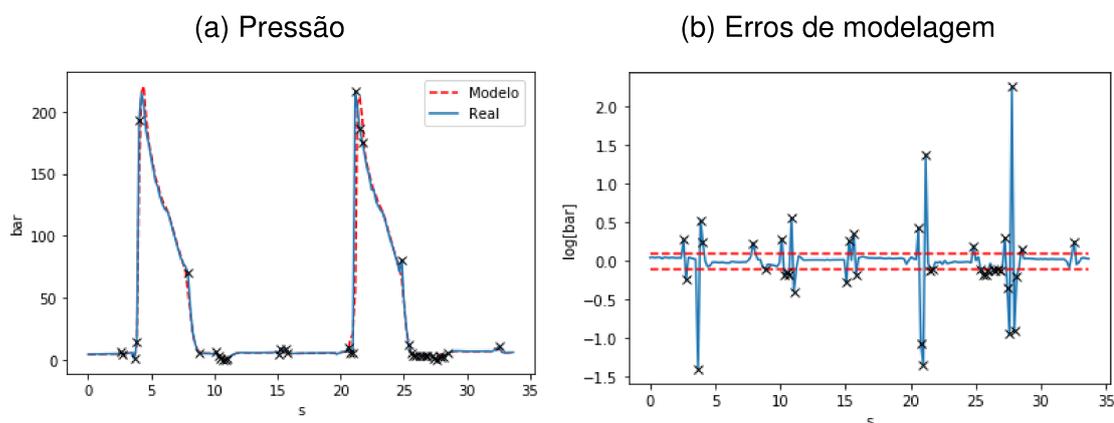
Fonte – Elaborado pelo autor.

Figura 31 – Validação do modelo SARIMA(4, 0, 1) × (1, 1, 1)<sub>g2</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

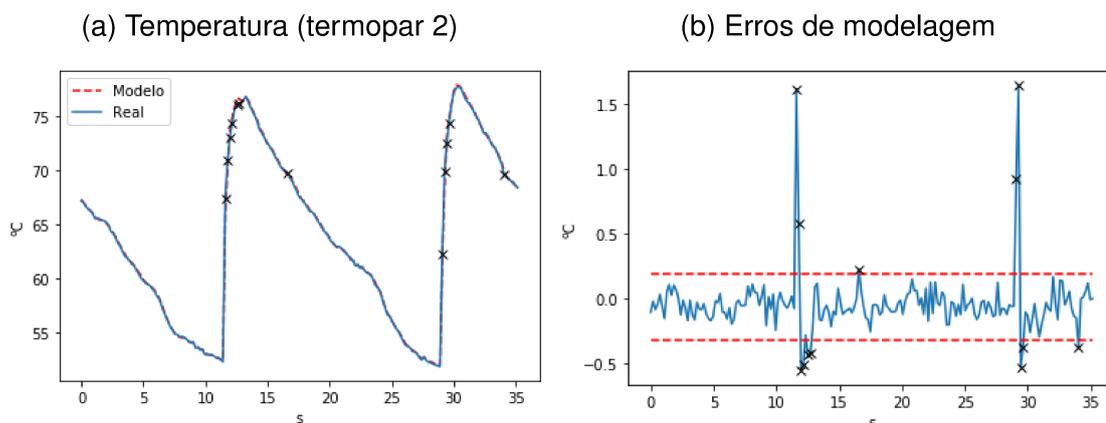
Figura 32 – Validação do modelo SARIMA(4, 0, 0) × (0, 1, 1)<sub>g2</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

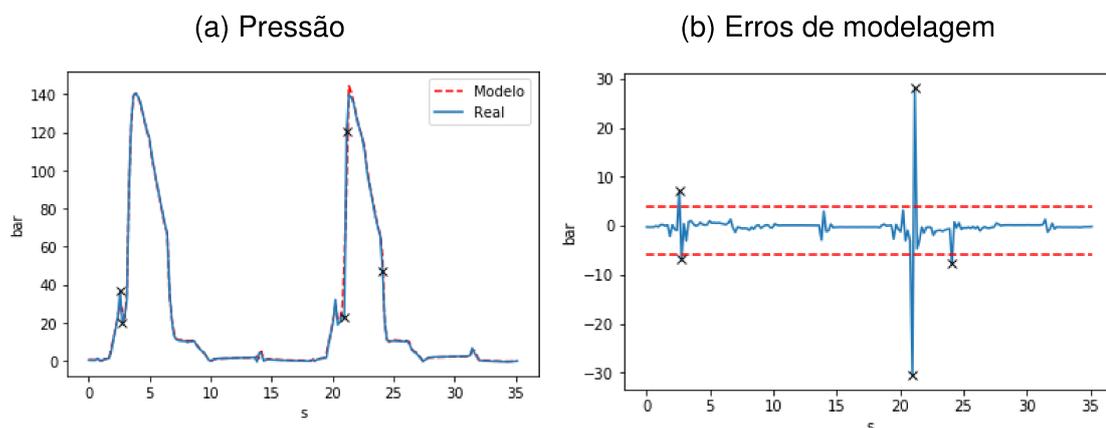
Por fim, é possível considerar os efeitos dos erros experimentais durante a medição das variáveis de processo. A pressão na cavidade e a temperatura do molde foram

Figura 33 – Validação do modelo SARIMA(1, 0, 1) × (1, 1, 0)<sub>96</sub>.



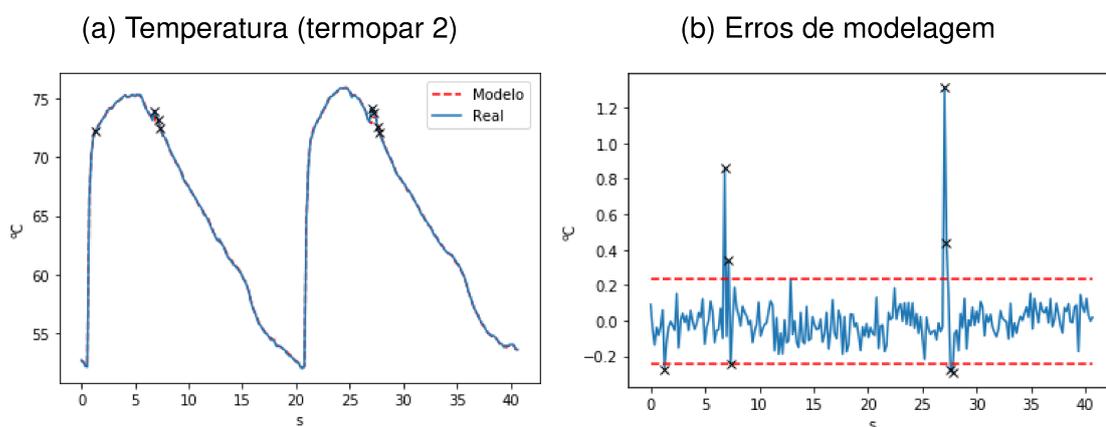
Fonte – Elaborado pelo autor.

Figura 34 – Validação do modelo SARIMA(2, 0, 2) × (1, 1, 0)<sub>96</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

Figura 35 – Validação do modelo SARIMA(3, 0, 1) × (1, 1, 1)<sub>111</sub>.



Fonte – Elaborado pelo autor.

medidos com incertezas de  $\pm 2,5$  bar e  $\pm 2,0$  °C, respectivamente. Esses intervalos são, em geral, bem maiores do que as dispersões dos resíduos — delimitadas pelos valo-

res  $Q_{1,3} \mp 1,5 \text{ IQR}$ . Os resíduos de modelos inadequados constituem a única exceção significativa a esse bom desempenho. A Figura 29 exemplifica a situação, mostrando que os erros de modelagem da pressão na cavidade excedem a incerteza de  $\pm 2,5$  bar em diversos instantes sem que o processo apresente um comporta anômalo. Isso evidencia ainda mais a existência de incertezas nesses modelos.

Em modelos adequados, por sua vez, os erros de modelagem só excedem o erro experimental em alguns instantes, durante transições entre etapas da moldagem por injeção. Esta situação pode ser observada nas figuras 24 e 34. Na Figura 24, o erro de modelagem ultrapassa o limite inferior do erro experimental (i. e.,  $-2,0$  °C) durante o início da etapa de preenchimento. Já na Figura 34, o erro experimental é excedido durante o início e o final da etapa de compressão.

As considerações anteriores são válidas para os resultados da identificação e da validação dos modelos. É possível afirmar que, nos modelos adequados, os erros de modelagem são, em geral, desprezíveis, já que não podem ser confirmados experimentalmente. Isso fornece uma validação adicional aos modelos obtidos neste trabalho, confirmando a convergência dos parâmetros dos mesmos para os verdadeiros conjuntos de parâmetros.

## 5 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho contribuiu com a literatura através da modelagem do processo de moldagem por injeção através do agrupamento e da regressão das amostras de séries temporais da pressão na cavidade e da temperatura do molde. Essas variáveis de processo foram amostradas durante a produção de peças de polipropileno com a finalidade de ajustar e validar os modelos.

As hipóteses formuladas durante a Introdução foram confirmadas através da análise das amostras das variáveis de processo. Sendo assim, os resultados deste trabalho permitem concluir que:

- As amostras das variáveis de processo se distribuem em dois agrupamentos distintos, conforme a compressibilidade do material. Essa informação não foi observada, de maneira explícita, na revisão de literatura.
- Esses agrupamentos podem ser estimados, através do método *k-means*, para segmentar as séries temporais em dois regimes, contendo: 1) as etapas de preenchimento e resfriamento e 2) as etapas de compressão e recalque.
- O perfil de pressão na cavidade é bastante influenciado pela duração da etapa de preenchimento. Através de três condições experimentais, com durações de 0,5, 1,0 e 2,0 segundos, foi observado que a amplitude dos picos de pressão é maior nos processos mais rápidos. Já a variância dos picos é maior em processos mais lentos. Em alguns casos a variância é grande o bastante para que alguns ciclos de moldagem não apresentem as pressões típicas da etapa de compressão.
- Dependendo das condições experimentais e da geometria do molde, algumas séries temporais podem apresentar comportamento não sazonal devido a ausência de efeitos de compressibilidade em alguns ciclos de moldagem por injeção.
- A existência de dinâmicas de ordem sazonal foi confirmada através de funções de autocorrelação da amostra e de autocorrelação parcial.
- Os modelos SARIMA se mostraram adequados para representar as séries temporais (com comportamentos sazonais) estudadas neste trabalho.
- A maioria dos erros de modelagem apresentou valores abaixo dos erros experimentais ( $\pm 2,0$  °C e  $\pm 2,5$  bar), sendo desprezíveis. As únicas exceções ocorreram durante as transições entre as etapas do processo.

As conclusões listadas acima satisfazem os objetivos geral e específicos deste trabalho. Dessa forma, os seguintes temas são propostos como trabalhos futuros:

- A aplicação dos métodos propostos a processos com materiais, condições experimentais e geometrias diferentes.

- A utilização do método *k-means* para controle de comutação, com base na mudança de regime do processo.
- O monitoramento do processo em tempo real através do modelo SARIMA.
- A modelagem de relações entrada-saída entre variáveis de processo e variáveis de máquina, através de modelos SARIMA com entrada exógena (SARIMAX), para controlar o processo em malha fechada.

## REFERÊNCIAS

- BARRIE, I. T. The Rheology of Injection Moulding. *In*: LENK, R. S. (Ed.). **Polymer Rheology**. London (UK): Applied Science, 1978.
- BEAUMONT, J. P. **Runner and Gating Design Handbook**. Cincinnati (USA): Hanser Gardner, 2004.
- BOX, G. E. P.; COX, D. R. An Analysis of Transformations. **Journal of Royal Statistics Society: Series B (Methodological)**, v. 26, n. 2, p. 211–243, 1964.
- BOX, G. E. P.; JENKINS, G. M.; REINSEL, G. C.; LJUNG, G. M. **Time Series Analysis: Forecasting and Control**. 5. ed. Hoboken (USA): Wiley, 2016.
- BRETAS, R. E. S.; D'ÁVILA, M. A. **Reologia de polímeros fundidos**. 2. ed. São Carlos: UFSCar, 2005.
- BROCKWELL, P. J.; DAVIS, R. A. **Time Series: Theory and Methods**. 2. ed. New York (USA): Springer, 1991.
- CENGEL, Y.; BOLES, M. **Thermodynamics: An Engineering Approach**. 5. ed. [S.l.]: McGraw-Hill Science, 2004.
- CHEN, X.; GAO, F. A study of packing profile on injection molded part quality. **Materials Science and Engineering: A**, v. 358, n. 1 - 2, p. 205–213, 2003.
- DAPRÀ, I.; SCARPI, G. Pulsatile pipe flow of pseudoplastic fluids. **Meccanica**, v. 41, p. 501–508, 2006.
- DODGE, Y. **The Concise Encyclopedia of Statistics**. New York (USA): Springer, 2008.
- FERNANDES, C.; PONTES, A. J.; VIANA, J. C.; GASPAR-CHUNHA, A. Modeling and Optimization of the Injection-Molding Process: A Review. **Advances in Polymer Technology**, v. 37, n. 2, p. 429–449, 2016.
- FINKELDEY, F.; VOLKE, J.; ZARGES, J.; HEIM, H.; WIEDERKEHR, P. Learning quality characteristics for plastic injection molding processes using a combination of simulated and measured data. **Journal of Manufacturing Processes**, p. 134–143, 2020.
- FITRIANTI, Z. P. **AI for Predictive Maintenance for Injection Moulding Machines**. Groningen (NL): University of Groningen, 2020.

FROELICH, C.; KEMMETMÜLLER, W.; KUGI, A. Model-Predictive Control of Servo-Pump Driven Injection Molding Machines. **IEEE Transactions on Control Systems Technology**, p. 1–16, 2019.

GRELLE, P. F. Injection Molding. *In*: HARPER, C. (Ed.). **Handbook of Plastic Processes**. Hoboken (USA): Wiley, 2006.

HABER, A.; KAMAL, M. R. The Dynamics of Peak Cavity Pressure in Injection Molding. **Polymer Engineering and Science**, v. 27, n. 18, p. 1411–1418, 1987.

HARVEY, A. C. **Forecasting, structural time series models and the Kalman filter**. Cambridge (UK): Cambridge, 1990.

HAYKIN, S. **Neural Networks: A Comprehensive Foundation**. 3. ed. Harlow (UK): Prentice Hall, 2008.

HOPMANN, C.; ABEL, D.; HEINISCH, J.; STEMMLER, S. Self-optimizing injection molding based on iterative learning cavity pressure control. **Production Engineering**, v. 11, n. 2, p. 97–106, 2017.

HUANG, M. S. Cavity pressure based grey prediction of the filling-to-packing switchover point for injection molding. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 183, n. 2 - 3, p. 419–424, 2007.

JARQUE, C. M.; BERA, A. K. A Test for Normality of Observations and Regression Residuals. **International Statistical Review**, v. 55, n. 2, p. 163–172, 1987.

JIN, X.; HAN, J. K-Means Clustering. *In*: SAMMUT, C.; WEBB, G. I. (Ed.). **Encyclopedia of Machine Learning**. Boston (USA): Springer, 2010.

KAMAL, M. R.; PATTERSON, W. I.; CONLEY, N.; FARA, D. Abu; LOHFINK, G. Dynamics and Control of Pressure in the Injection Molding of Thermoplastics. **Polymer Engineering and Science**, v. 27, n. 18, p. 1403–1410, 1987.

KETONEN, V.; BLECH, J. O. Anomaly Detection for Injection Molding Using Probabilistic Deep Learning. *In*: 4TH IEEE International Conference on Industrial Cyber-Physical Systems. Victoria (CA): [s.n.], 2021. p. 70–77.

KOVÁCS, J. G.; SIKLÓ, B. Investigation of cooling effect at corners in injection molding. **International Communications in Heat and Mass Transfer**, v. 38, n. 10, p. 1330–1334, 2011.

KUO, H. C.; JENG, M. C. Effects of part geometry and injection molding conditions on the tensile properties of ultra-high molecular weight polyethylene polymer. **Materials & Design**, v. 31, n. 2, p. 884–893, 2010.

LENK, R. S. The Characterisation of Viscous Flow, Viscosity, Shear Rate and Shear Stress. *In*: LENK, R. S. (Ed.). **Polymer Rheology**. London (UK): Applied Science, 1978.

LIU, S.; YANG, Y.; FORREST, J. **Grey Data Analysis: Methods, Models and Applications**. [S.l.]: Springer, 2017.

MICHAELI, W.; SCHREIBER, A. Online Control of the Injection Molding Process Based on Process Variables. **Advances in Polymer Technology**, v. 28, n. 2, p. 65–76, 2009.

MIRANDA, J. R. **Estudo da influência da viscosidade do polímero, da velocidade de injeção e do material da cavidade do molde sobre a pressão e temperatura durante o processo de injeção**. Joinville: SOCIESC, 2012.

NAM, J. S.; NA, C. R.; JO, H. H.; SONG, J. Y.; HA, T. H.; LEE, S. W. Injection moulded lens form error prediction using cavity pressure and temperature signals based on k-fold cross validation. **Journal of Engineering Manufature**, v. 232, n. 5, p. 928–934, 2016.

NELDER, J. A.; MEAD, R. A Simplex Method for Function Minimization. **The Computer Journal**, v. 7, n. 4, p. 308–313, 1965.

NEWAY, W. K.; MCFADDEN, D. Large sample estimation and hypothesis testing. *In*: ENGLE, R.; MCFADDEN, R. (Ed.). **Handbook of Econometrics**. [S.l.]: Elsevier, 1994. v. 4.

OGATA, K. **Engenharia de Controle Moderno**. Tradução: Heloísa Coimbra de Sousa. 5. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2010.

PEARSON, R. K.; OGUNNAIKE, B. A. Nonlinear Process Identification. *In*: HANSON, M. A.; SEBORG, D. E. (Ed.). **Nonlinear Process Control**. [S.l.]: Prentice Hall, 1997.

PIGNON, B.; SOBOTKA, V.; BOYARD, N.; DELAUNAY, D. Improvement of heat transfer analytical models for thermoplastic injection molding and comparison with experiments. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 118, p. 14–26, 2018.

ROUSOPOULOU, V.; NIZAMIS, A.; VAFEIADIS, T.; IOANNIDIS, D.; TZOVARAS, D. Predictive Maintenance for Injection Molding Machines Enabled by Cognitive Analytics for Industry 4.0. **Frontiers in Artificial Intelligence**, v. 3, p. 1–12, 2020.

RUSSEL, S. J.; NORVIG, P. **Artificial Intelligence - A Modern Approach**. 3. ed. Essex (UK): Pearson, 2016.

SADEGHI, B. H. M. A BP-Neural network predictor model for plastic injection molding process. **Journal of Materials Processing Technology**, v. 103, n. 3, p. 411–416, 2000.

SRINIVASAN, R.; QIAN, M. S. Off-line Temporal Signal Comparison Using Singular Points Augmented Time Warping. **American Chemical Society**, v. 44, n. 13, p. 4697–4716, 2005.

SUN, X.; SU, X.; TIBBENHAM, P.; MAO, J.; TAO, J. The application of modified PVT data on the warpage prediction of injection molded part. **Journal of Polymer Research**, v. 23, n. 86, 2016.

TRITTON, D. J. **Physical Fluid Dynamics**. 2. ed. Oxford (UK): Oxford, 2007.

TSAI, K. M.; LAN, J. K. Correlation between runner pressure and cavity pressure within injection mold. **International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 79, p. 273–284, 2015.

TSENG, H. C.; CHANG, R. Y.; HSU, H. C. Improved fiber orientation predictions for injection molded fiber composites. **Composites Part A: Applied Science and Manufacturing**, v. 99, p. 65–75, 2017.

WANG, J. **PVT Properties of Polymers for Injection Molding**. [S.l.: s.n.], 2012. ISBN 9789535102977.

WHITE, F. M. **Viscous Fluid Flow**. 3. ed. New York (USA): McGraw-Hill, 2006.

YANG, Y.; GAO, F. Cycle-to-cycle and within-cycle adaptive control of nozzle pressure during packing-holding for thermoplastic injection molding. **Polymer Engineering & Science**, v. 39, n. 10, p. 2042–2063, 1999.

ZHANG, J.; ZHAO, P.; ZHAO, Y.; HUANG, J.; XIA, N.; FU, J. On-line measurement of cavity pressure during Injection Molding via Ultrasonic Investigation of Tie Bar. **Sensors and Actuators A: Physical**, v. 1, p. 118–126, 2019.

ZHAO, C.; GAO, F. Melt temperature profile prediction for thermoplastic injection molding. **Polymer Engineering and Science**, v. 39, n. 9, p. 1787–1801, 1999.

ZHAO, P.; ZHOU, H.; HE, Y.; CAI, K.; FU, J. A nondestructive online method for monitoring the injection molding process by collecting and analysing machine running data. **International Journal of Advanced Manufacturing Technology**, v. 72, n. 5 - 8, p. 765–777, 2014.

ZHENG, R.; TANNER, R. I.; FAN, X. J. **Injection Molding: Integration of Theory and Modelling Methods**. Sidney (AUS): Springer, 2011.

ZHOU, H.; HU, Z.; LI, D. Mathematical Models for the Filling and Packing Simulation. *In*: ZHOU, H. (Ed.). **Computer Modeling for Injection Molding**. Hoboken (USA): Wiley, 2013.

ZOU, T.; WU, S.; ZHANG, R. Improved state-space model predictive fault-tolerant control for injection molding batch processes with partial actuator faults using GA optimization. **ISA Transactions**, p. 1–7, 2018.

## APÊNDICE A – DESCRIÇÃO DOS ALGORITMOS

Este trabalho empregou algoritmos, em linguagem *Python*, para realizar a *clusterização* e a regressão das variáveis de processo. O presente apêndice descreve os mesmos para permitir a reprodutibilidade dos estudos. A discussão é focada no processamento das amostras, negligenciando a representação gráfica dos resultados<sup>35</sup>. Essa omissão é justificada já que a visualização dos mesmos é, geralmente, arbitrária e não constitui um método a ser repetido.

O Estudo 1 utilizou funções das bibliotecas *numpy* e *sklearn* para *clusterizar* os conjuntos de amostras. As linhas de código abaixo apresentam a importação da biblioteca *numpy* e da classe *KMeans* (biblioteca *sklearn.cluster*).

```
import numpy as np
from sklearn.cluster import KMeans
```

As séries temporais da temperatura do molde e da pressão na cavidade foram lidos de arquivos com extensão *.txt* através da função *numpy.loadtxt()*. Os nomes destes arquivos correspondem às *strings* *'pressure1\_2s.txt'* e *'temperatureX\_2s.txt'*. A leitura de arquivos com os dados dos sinais de pressão e de temperatura do processo III é exemplificada a seguir.

```
p = np.loadtxt('pressure1_2s.txt',
              dtype = np.float64, usecols = [0])
T1 = np.loadtxt('temperature1_2s.txt',
              dtype = np.float64, usecols = [0])
T2 = np.loadtxt('temperature2_2s.txt',
              dtype = np.float64, usecols = [0])
```

Antes de processar as amostras, os dados foram reagrupados em um *array* de três colunas, onde cada linha contém os valores simultâneos da pressão na cavidade e das temperaturas medidas pelos tempopares 1 e 2 em um determinado instante de tempo. As amostras foram agrupadas em dois *clusters*, como informado durante a instanciação da classe *KMeans*.

```
X = np.zeros((p.size, 3))
X[:, 0] = p[:]
X[:, 1] = T1[:]
X[:, 2] = T2[:]

kmeans = KMeans(n_clusters = 2, random_state = 0).fit(X)
```

<sup>35</sup> Essa negligência não compreende os gráficos de autocorrelação da amostra e autocorrelação parcial, já que estes fazem parte do método proposto.

No procedimento anterior, cada uma das triplas  $(p_t, T_t, T_t^*)$  foi atribuída a um dos *clusters* cujas identificações são dadas pelos números 0 e 1 (no atributo *labels\_* do objeto *kmeans*). Novas amostras podem ser atribuídas a um dos dois *clusters* através do método *predict()*. As linhas de código abaixo demonstram a *clusterização* das amostras no *array*  $X_n$ :

```
res = kmeans.predict(X_n)
```

O resultado *res* é um *array* onde cada elemento corresponde ao cluster de uma tripla  $(p_t, T_t, T_t^*)$  no *array*  $X_n$ .

O Estudo 2 foi baseado nos mesmos conjuntos de amostras, lidos de arquivos com extensão *.txt* por meio da função *numpy.loadtxt()*. As bibliotecas e classes empregadas neste estudo incluem:

```
import numpy as np
from numpy.polynomial import Polynomial
import statsmodels.api as sm
from scipy.optimize import minimize
from scipy.stats import zscore, skew, kurtosis, norm, jarque_bera
```

A biblioteca *statsmodels* contém classes correspondentes a modelos SARIMA. Contudo essas não foram empregadas neste trabalho, pois calculam a matriz Hessiana da função de verossimilhança (resultando em custo computacional excessivo). Como proposto na Seção 3.3.3, a função de verossimilhança foi maximizada através do método de Nelder-Mead. Logo funções foram definidas com este objetivo.

As funções *difference()* e *i\_difference()* realizam a diferenciação de ordem sazonal e a inversão dessa última. Nessas, *x* representa a série temporal original e *y* a série temporal diferenciada. Na função *i\_difference()*, os primeiros valores da série temporal reconstruída são idênticos aos da série original, já que o tamanho da série temporal diferenciada é inferior ao dessa última.

```
def difference(x, s):
    return x[s:x.size] - x[0:(x.size - s)]

def i_difference(x, y):
    x_ = y + x[0:y.size]
    x_ = np.append(x[0:(x.size - y.size)], x_)
    return x_
```

Após a diferenciação, foi observado que algumas séries temporais apresentavam valores discrepantes que prejudicavam a regressão das variáveis de processo.

Portanto, esses foram substituídos pela média móvel de valores vizinhos antes da identificação. A função `replace_outliers()` retorna a série temporal já modificada. Essa recebe o argumento `std`, referente ao número de desvios padrão que compreende as amostras não discrepantes. Valores que (cuja posições na distribuição) excedem esse argumento foram substituídos.

```
def replace_outliers(x, std):
    x_n = x.copy()
    z_scores = np.abs(zscore(x))

    for i in range(1, x.size - 1):
        if(z_scores[i] > std):
            x_n[i] = (x_n[i + 1] + x_n[i - 1])/2

    return x_n
```

As linhas de código a seguir apresentam a diferenciação de ordem sazonal  $s = 92$  (de uma série temporal do processo I) e a substituição de valores discrepantes. Um intervalo de mais ou menos quatro desvios padrão a partir da média compreende 99,99% das amostras. Assim, a substituição não tem efeitos sobre a maioria das amostras agindo apenas sobre aquelas com comportamento anômalo.

```
s = 92

y = difference(x, s)
y = replace_outliers(y, 4)
```

As séries temporais diferenciadas também foram segmentadas de modo a destinar apenas parte das amostras ao treinamento dos modelos. Como pode ser visto, os dois últimos intervalos sazonais foram excluídos do conjunto de treinamento:

```
training_size = y.size - 2*s
y_train = y[0:training_size]
```

As funções de autocorrelação da amostra e autocorrelação parcial foram obtidas através das funções `plot_acf()` e `plot_pacf()` na biblioteca `statsmodels.graphics`:

```
fig1 = sm.graphics.tsa.plot_acf(y_train, lags = 2*s,
                                title = 'Autocorrelação da amostra')

fig2 = sm.graphics.tsa.plot_pacf(y_train, lags = 2*s,
                                  title = 'Autocorrelação parcial',
                                  method = 'yw')
```

As ordens  $(p, d, q) \times (P, D, Q)_s$  do processo foram determinadas através do exame visual dessas funções. A exemplo, as linhas de código abaixo mostram as ordens dos operadores lineares (respectivos a temperatura medida pelo termopar 1 no processo I) sendo atribuídas aos *arrays* *order* e *seasonal\_order*:

```
(p, q, P, Q) = (3, 0, 2, 0)

order = np.array([p, q])
seasonal_order = np.array([P, Q, s])
```

A identificação do processo envolve a estimativa de  $p + q + P + Q + 2$  parâmetros<sup>36</sup>. Esses foram inicializados com valores aleatórios no *array* *theta*:

```
theta = np.random.rand(p + q + P + Q + 2)
```

e utilizados como parâmetros das funções *operator()* e *sarima\_operators()*:

```
def operator(theta, order, interval = 1):
    if(order > 0):
        coef = np.zeros(interval*order + 1)
        coef[0] = 1

        for i in range(1, theta.size + 1):
            coef[i*interval] = theta[i - 1]
    else:
        coef = 1

    return Polynomial(coef)

def sarima_operators(theta, order, seasonal_order):
    tmp = order[0]

    ar = operator(theta[0:tmp], order[0])
    ma = operator(theta[tmp:(tmp + order[1])], order[1])
    tmp += order[1]

    sar = operator(theta[tmp:(tmp + seasonal_order[0])],
                    seasonal_order[0], interval = seasonal_order[-1])
```

<sup>36</sup> Os dois parâmetros adicionais correspondem ao termo constante do modelo SARIMA  $\theta_0$  e ao desvio padrão dos resíduos  $\sigma_a$ .

```

tmp = tmp + seasonal_order[0]
sma = operator(theta[tmp:(tmp + seasonal_order[1])],
               seasonal_order[1], interval = seasonal_order[-1])

return ar, ma, sar, sma

```

que retornam objetos instanciados da classe *Polynomial* com os coeficientes dos operadores lineares.

A função *sarima\_operators* é chamada dentro da função *sarima\_est()*, que recebe o conjunto de parâmetros e as ordens do modelo e a série temporal diferenciada da variável de processo:

```

def sarima_est(theta, order, seasonal_order, y):
    intercept = theta[-2]

    ar, ma, sar, sma = sarima_operators(theta, order, seasonal_order)

    AR = ar*sar
    MA = ma*sma

    ar_index = np.nonzero(AR.coef)[0]
    ar_coef = AR.coef[AR.coef != 0]

    ma_index = np.nonzero(MA.coef)[0]
    ma_coef = MA.coef[np.abs(MA.coef) > 0]

    r = np.max([np.max(ar_index), np.max(ma_index)])

    y_est = y.copy()
    a = np.zeros(y.size)

    for i in range(r, y.size):
        y_est[i] = intercept

        if(ar_index.size > 1):
            for j in range(1, ar_index.size):
                y_est[i] += -ar_coef[j]*y[i - ar_index[j]]

        if(ma_index.size > 1):
            for j in range(1, ma_index.size):

```

```

        y_est[i] += ma_coef[j]*a[i - ma_index[j]]

    a[i] = y[i] - y_est[i]

    return y_est[r:y_est.size], a[r:a.size], r

```

Essa função calcula os polinômios dos operadores autorregressivos e de médias móveis e os utiliza para estimar os valores da série temporal diferenciada. Os valores de retorno incluem os *arrays* *y\_est* e *a*, com as estimativas e os resíduos, e o número inteiro *r*, igual ao número de valores iniciais exigidos pelo modelo.

Para maximizar a função de verossimilhança através do método de Nelder-Mead, o negativo do logaritmo da função de verossimilhança foi empregado como função de custo. Como discutido na Seção 3.3.3, o uso do logaritmo da função de verossimilhança evita a ocorrência de instabilidades numéricas nos resultados. Essa função de custo é implementada na função *mlp\_regression*:

```

def mlp_regression(theta, order, seasonal_order, y):
    y_est, a, r = sarima_est(theta, order, seasonal_order, y)
    std = theta[-1]
    negLL = -np.sum(norm.logpdf(y[r:y.size], loc = y_est,
                               scale = std))

    return negLL

```

e minimizada através da função *minimize()* (da biblioteca *scipy.optimize*):

```

res = minimize(mlp_regression, theta,
               args = (order, seasonal_order, y_train),
               method = 'Nelder-Mead',
               options={'xtol': 1e-10, 'disp': True, 'maxiter': 1e5})
theta = res.x

```

O novo *array* *theta*, dado pelo atributo *res.x* contém os parâmetros que maximizam a função de verossimilhança. Logo, esses são aproximações do verdadeiro conjunto de parâmetros do modelo.

Os diagnósticos dos resíduos pode ser feito com base na estimativa da série temporal de resíduos fornecida pela função *sarima\_est()*:

```

y_est, a, r = sarima_est(theta, order, seasonal_order, y_train)

```

Estes procedimentos incluem a visualização da autocorrelação da amostra, o teste de Ljung-Box, o teste de Jarque-Bera e a estimativa da dispersão dos resíduos (baseada na amplitude interquartil). As linhas de código a seguir exemplificam os mesmos:

```
fig3 = sm.graphics.tsa.plot_acf(a, lags = 2*s,  
                                title = 'Autocorrelação da amostra')  
  
lb_test = sm.stats.acorr_ljungbox(a, lags = 2*s)  
jb_test = jarque_bera(a)  
  
Q1 = np.quantile(a, .25)  
Q3 = np.quantile(a, .75)  
IQR = Q3 - Q1
```

As probabilidades dos testes de Ljung-Box e Jarque-Bera podem ser encontradas no atributo `lb_test.lb_pvalue` e na posição 1 do `array jb_test` (i. e., `jb_test[1]`).

Os modelos foram validados para segmentos das séries temporais fora dos conjuntos de treinamento. Essa sequência de linhas de código retorna as estimativas e os resíduos dos dois últimos intervalos sazonais:

```
y_est, a, r = sarima_est(theta, order, seasonal_order, y)  
y_est = np.append(y[0:r], y_est)  
x_est = i_difference(x, y_est)  
  
x_est = x_est[(x_est.size - 2*s):x_est.size]  
a = a[(a.size - 2*s):a.size]
```

Os valores discrepantes são dados pela comparação com as medidas de dispersão deduzidas a partir da amplitude interquartil:

```
t = .184*np.arange(a.size)  
  
outliers_a = a[(a > (Q3 + 1.5*IQR)) | (a < (Q1 - 1.5*IQR))]  
outliers_t = t[(a > (Q3 + 1.5*IQR)) | (a < (Q1 - 1.5*IQR))]
```

É possível saber os instantes de ocorrência dos mesmos através do `array outliers_t`.

Assim como apresentado na Seção 3.3.5, a validação comparou os valores esperado e variância dos resíduos no conjunto de treinamento e no conjunto de teste. Esses valores podem ser facilmente obtidos através das funções `numpy.mean()` e `numpy.var()`. A representação gráfica dos resultados pode ser utilizada para avaliar a distribuição dos resíduos. Embora essa abordagem não seja discutida neste apêndice, é relevante mencionar que as figuras apresentadas na seção de resultados foram obtidas por meio de funções da biblioteca `matplotlib.pyplot`.