

REDES NEURAIS ARTIFICIAIS (RNA) APLICADOS NA PREDIÇÃO DE ESPECTROS UV-VIS VIA ALGORITMO DE RETROPROPAGAÇÃO DE ERROS

Carlos Henrique Moreira Lima (IC), Lucas Nonato de Oliveira (PQ)

PIBIC

IFG – Campus Goiânia

chmlima201@gmail.com, lucas.oliveira@ifg.edu.br

Palavras-Chave: Redes Neurais Artificiais, espectroscopia UV-vis, absorvância, retro propagação de erros.

Introdução

O método de reconhecimento de padrões por meio de redes neurais artificiais (RNA) possibilita acelerar as tomadas de decisões, sendo aplicadas em diversas áreas. O objetivo deste trabalho, é a viabilidade de pesquisa das RNA's na predição de espectros de soluções químicas sendo modificadas suas concentrações associadas as absorvâncias, estas sendo avaliadas através da espectroscopia UV-Vis.

Metodologia

Com um espectrofotômetro UV-Vis, foi realizada a coleta dos dados para validação e treinamento da RNA. Para a criação, execução do algoritmo, foi utilizado o software MATLAB 2020a, e o backpropagation foi o método escolhido para a análise dos padrões.

Resultados e Discussão

Os resultados nos espectros de UV-Vis para amostras FXL-mblue, absorvância versus comprimento de onda, com doses de 2,40 kJ / cm² a 21,6 kJ / cm² (fonte de LED vermelho) são mostrados na figura 1. Após a irradiação das amostras FXL-mblue, três picos característicos foram estabelecidos, em comprimentos de onda de 430 nm, 560 nm e 665 nm. Este último pico é novo para detectores que apresentam laranja de xilenol e sulfato ferroso em suas soluções, como Fricke Xylenol Gel (FXG); esta adição de azul de metileno fornece outra região que pode ser explorada e pesquisada por sua linearidade e fontes de irradiação como a lâmpada LED vermelha aplicada neste trabalho. O azul de metileno aplicado à solução Fricke Xylenol Liquid (FXL) apresentou três características muito interessantes: i) a mudança de cor de verde escuro para verde cada vez mais claro com a dose; ii) pico de absorção em 665 nm, indicando a possibilidade de regiões lineares próximas a este pico; iii) por ser um

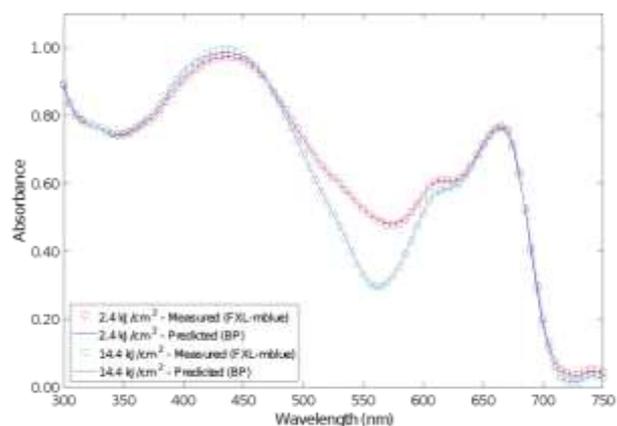


Figura 1. Curva de aprendizado da rede neural, para doses de 2.4 kJ/cm² e 14.4 kJ/cm²

fotossensibilizador, era essencial para a solução FXL criar sensibilidade à luz do LED vermelho. Tanto nesses picos quanto em regiões próximas pode-se inferir que a dose pode estar matematicamente relacionada à absorvância desse detector.

Conclusões

Para as amostras de FXL-mblue, como estudo preliminar, foram observados os seguintes aspectos finais: espectrofotometria UV-Vis é uma técnica adequada, pois além de determinar quantitativamente as trocas de colocações de FXL-mblue, é considerada uma técnica de baixo custo e não destrutiva; pode ser usado em medições de amostras irradiadas de FXL-mblue.

Referências

- FAUSETT, Laurene. Fundamentals of Neural Networks: Architectures, Algorithms, and Applications. Prentice-Hall, 1994.
- SILVA, Ivan Nunes Da; SPATTI, Danilo Hernane; FLAUZINO, Rogério Andrade. "Redes Neurais Artificiais para engenharia e ciência aplicadas". Artliber, p., 2019.
- BISHOP, Christopher M. et al; Neural networks for pattern recognition; Oxford university press, 1995.