

APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DE PROPRIEDADES DO BIODIESEL

Francisco Lucas De Souza Magalhães¹

Antônio Alisson Pessoa Guimarães²

Artemis Pessoa Guimarães³

RESUMO

Com a crescente demanda de combustíveis na matriz energética brasileira, o biodiesel se destaca por ser um produto renovável, produzido através de gorduras animais e óleos de oleaginosas. No tocante à comercialização, em geral, os combustíveis devem atender a certas especificações de qualidade. No Brasil, a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP) é responsável por especificar as características físico-químicas dos combustíveis, de maneira que estes tenham a qualidade mínima necessária para o desempenho esperado (LOBO, FERREIRA 2009; SILVA, 2011). A caracterização dos combustíveis, portanto, envolve a realização de experimentos, muitas vezes, onerosos e demorados. Desse modo, uma alternativa viável é a aplicação dos modelos computacionais para estimar a qualidade do mesmo. O presente trabalho tem como objetivo principal avaliar a predição de propriedades do biodiesel, a partir de sua composição química (cadeia carbônica formada pela porcentagem de diferentes tipos de ésteres), utilizando Redes Neurais Artificiais RNA's. As propriedades escolhidas para análise foram: massa específica e viscosidade cinemática. O passo inicial consistiu na coleta de dados sobre a composição do biodiesel e resultados das propriedades analisadas. Após essa etapa, realizou um pré-processamento dos dados, onde foram retiradas colunas de ésteres que tinham pouca informação e sua porcentagem era baixa, para que otimizasse os resultados. O treinamento da rede foi realizado mudando os parâmetros como o critério de parada erro quadrático médio EQM, número de camadas ocultas e neurônios por camada, em seguida a análise dos resultados. O processo de validação do modelo utilizado seguiu as etapas de treinamento e teste, cujos resultados, de maneira geral, podem ser considerados satisfatórios em termos de predição das propriedades avaliadas do biodiesel. Desse modo, o presente estudo destaca-se pela utilização de uma ferramenta computacional para contribuir com processos de caracterização de propriedades do biodiesel.

Palavras-chave: redes neurais artificiais; Parâmetros de qualidade; Biodiesel.

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável, Discente, lucasmagalhaes2000@aluno.unilab.edu.br¹

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável, Docente, alisson@unilab.edu.br²

Universidade da Integração Internacional da Lusofonia Afro-Brasileira, Instituto de Engenharias e Desenvolvimento Sustentável, Docente, artemis@unilab.edu.br³

INTRODUÇÃO

No Brasil, o biodiesel vem se destacando desde o ano 2005, com a criação do Programa Nacional de Produção e Uso de Biodiesel (PNPD), um programa interministerial do Governo Federal, lançado no ano de 2005, tendo como objetivo a implementação de forma sustentável, tanto técnica, como economicamente, da produção e uso do biodiesel, com enfoque na inclusão social e no desenvolvimento regional.

A Lei nº 11.097, de 13 de janeiro de 2005, estabeleceu a obrigatoriedade da adição de um percentual mínimo de biodiesel ao óleo diesel comercializado ao consumidor, em qualquer parte do território nacional. Essa obrigatoriedade teve início em 2008 e o percentual de biodiesel adicionado ao diesel chegou a ser 3% (mistura B3) em todo o diesel nacional (SILVA, 2011).

A ANP utiliza as resoluções das normas da ASTM (American Society of Testing and Materials), que especificam parâmetros de controle do biodiesel para que seja padronizado com as exigências mundial (LOBO, FERREIRA 2009; SILVA, 2011).

A maior produção de biodiesel no Brasil deriva da semente de soja, entretanto a quantidade da oleaginosa cultivada no país não supre a demanda. Para produzir o combustível a partir de novos insumos é necessário saber se o produto atenderá as exigências das normas. Os testes realizados são de custo elevado, onde deve-se levar em consideração um nível de qualidade estimado anteriormente do produto a ser analisado (LOBO, FERREIRA 2009).

Nos últimos anos as ferramentas computacionais estão sendo aplicadas em muitas áreas da engenharia, como a automotiva e a de combustíveis (RAMADHAS et al., 2006). A Rede Neural Artificial, por exemplo, é uma técnica computacional, que tem sua estrutura baseada em modelos matemáticos com inspiração na estrutura neural dos organismos vivos inteligentes e que obtêm o conhecimento através de experiência. Esse sistema trabalha adotando pesos sinápticos que comparam uma informação já existente com a nova informação. A comparação passa por uma equação que determina o erro quadrático médio e conclui a aprendizagem através desses erros e acertos. O treinamento das RNA's ajusta esses pesos, para quando comparados, o erro seja próximo ou menor o suficiente do que o determinado no critério de parada (NASCIMENTO et al., 2000).

Diante do cenário do aumento da demanda de biodiesel no país, bem das vantagens de viabilização de ferramentas computacionais aos processos industriais, o presente trabalho destaca-se pela utilização de Redes Neurais Artificiais para prever propriedades do biodiesel.

METODOLOGIA

2.1 Coleta de dados

A base de dados foi construída a partir de informações sobre a composição química de diferentes amostras de biodiesel, bem como resultados das análises de massa específica e viscosidade cinemática para cada uma das amostras.

2.2 Configuração e processamento da rede

Construiu-se uma RNA supervisionada multicamadas com algoritmo de aprendizagem com característica a função de ativação sigmoide, tendo-se como variáveis de entradas os teores de ésteres que compõem as amostras de biodiesel e como variável de saída, a estimativa de massa específica e viscosidade cinemática.

Para execução do algoritmo, 80% das amostras foram destinadas à fase de treinamento e 20% para a fase de teste cujo desempenho foi avaliado pelo erro quadrático médio. Os parâmetros definidos para o funcionamento da RNA, para a predição de cada uma das propriedades, estão descritos nas Tabelas 1 e 2.

Tabela 1: Parâmetros utilizados na rede para viscosidade cinemática a 40° mm ² .s-1	
Parâmetros	Dados
Erro Quadrático Médio (EQM)	-11
Taxa de aprendizagem	0,01
Números de camadas ocultas	2
Quant. de amostras utilizadas	34
Quant. de neurônio por camada	6 e 6
Quant. de amostras para treinamento	80%
Quant. de amostras para teste	20%
Critério de parada da rede	EQM
Fonte: Autor	

Tabela 2: Parâmetros utilizados na rede para massa específica kg.m-3	
Parâmetros	Dados
Erro Quadrático Médio (EQM)	-11
Taxa de aprendizagem	0,01
Números de camadas ocultas	1
Quant. de amostras utilizadas	38
Quant. de neurônio por camada	8
Quant. de amostras para treinamento	80%
Quant. de amostras para teste	20%
Critério de parada da rede	EQM
Fonte: Autor	

RESULTADOS E DISCUSSÃO

3.1 Predição da Viscosidade Cinemática a 40°C mm².s-1.

A Figura 1 ilustra o comportamento da rede neural durante a fase de treinamento da rede, estabelecendo uma comparação entre a propriedade real (linha azul) e a simulada (linha vermelha). Nessa fase a rede utilizou 28 amostras e os dados foram normalizados automaticamente. É possível observar uma boa adaptação da rede proposta em relação às amostras analisadas. O erro quadrático médio obtido na fase de treinamento da RNA foi de EQM = 0.000251, mostrando um resultado satisfatório de aproximação da resposta da rede.

Figura 1: Fase de treinamento da rede para viscosidade cinemática



Fonte: Autor

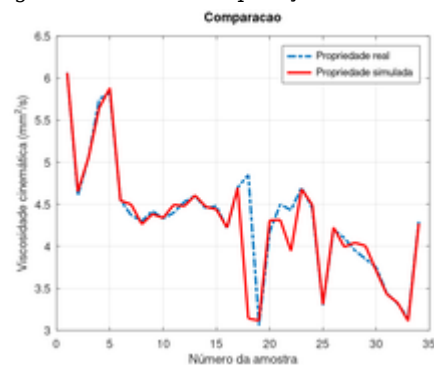
Essa etapa também utiliza dados normalizados. Os dados da fase de teste Figura 2 foram dispostos por seis amostras, onde são escolhidas aleatoriamente pela RNA para a comparação real, que foram as 2, 5, 18, 22, 29 e 33. As amostras 2, 5, 29 e 33 aproximaram os resultados das propriedades reais com os do simulado, na qual podemos observar pelo gráfico de barra na Figura 2, mostrando em parte que a rede aprendeu. Os dados da amostra 18 e 22, teve uma discrepância, onde presume-se que existe algum erro de dados ou a própria rede adotou pesos sinápticos divergente do real. O erro quadrático médio na fase de teste da RNA foi de $EQM = 0.029346$. As análises das fases de comparação são realizadas observando as linhas de tendências das curvas, onde a propriedade real deve tender ao mesmo sentido da simulada, de modo satisfazendo o objetivo da rede.

Figura 2: Fase de teste da rede



Fonte: Autor

Figura 3: Fase de comparação real

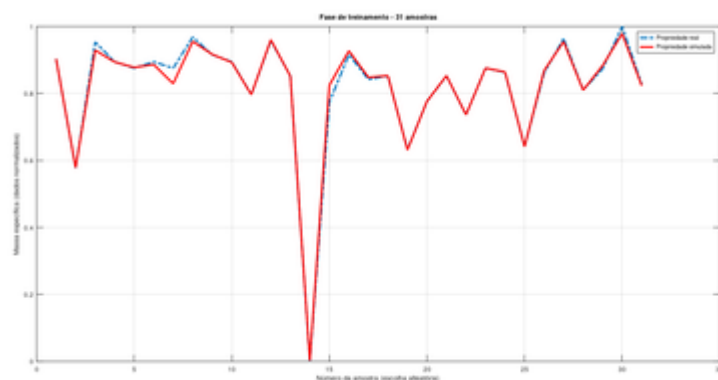


Fonte: Autor

3.2 Predição da massa específica kg.m-3.

A Figura 4 apresenta o comportamento da rede neural durante a fase de treinamento da rede, estabelecendo uma comparação entre a propriedade real (linha azul) e a simulada (linha vermelha). O erro quadrático médio na fase de treinamento da RNA, para esse caso foi de $EQM = 0.000104$.

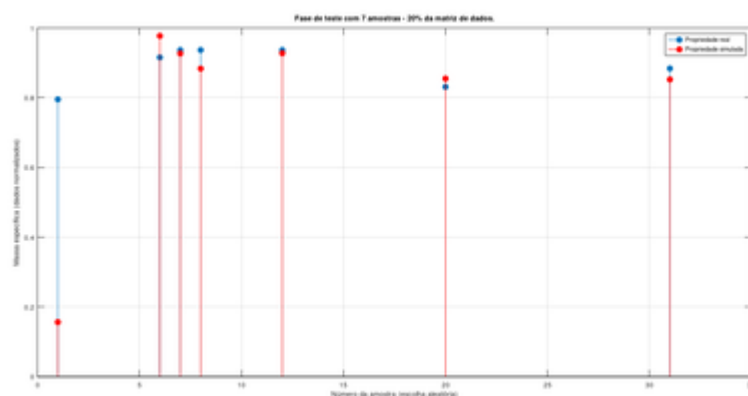
Figura 4: Fase de treinamento da rede massa específica



Fonte: Autor

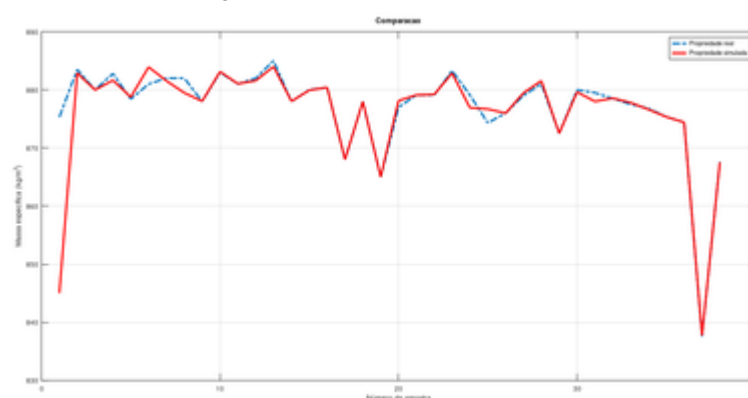
As amostras escolhidas aleatoriamente para a comparação real foram 6, 8, 7, 12, 1, 20, 31. O erro quadrático médio na fase de teste foi de $EQM = 0.029726$. A Figura 5 apresenta uma amostra que não se aproximou do resultado da propriedade simulada com a real. A discrepância observada na amostra 1 é indicativa de algum erro de dados ou a própria rede adotou pesos sinápticos divergente. A Figura 6 compara a propriedade simulada com a real, fornecendo os valores da massa específica de acordo com a disposição das amostras. Os dados são apresentados como os valores da massa específica. O comportamento gráfico da curva simulada é próximo a do resultado real demonstrando um resultado satisfatório.

Figura 5: Fase de teste da rede



Fonte: Autor

Figura 6: Fase de comparação real



Fonte: Autor

CONCLUSÕES

Diante da predição dos valores de massa específica e viscosidade cinemática para diferentes amostras de biodiesel, observou-se que a RNA implementada, apresentou resultados satisfatórios incluindo todo o processo de validação do modelo (definição dos parâmetros de rede e o processo de validação do modelo com as etapas de treinamento e teste). Destaca-se que a predição de propriedades do biodiesel, via ferramentas computacionais, é possível, porém para otimização e melhores resultados é necessário um banco de dados maior com mais de 150 amostras para a alimentação da rede.

AGRADECIMENTOS

Agradeço aos professores(as) Dra. Artemis Pessoa Guimarães e Dr. Antônio Alisson Pessoa Guimarães, meus pais e familiares. Ao PIBIC/CNPq/UNILAB que fomentam as pesquisas na instituição.

REFERÊNCIAS

- LOBO, I. P.; FERREIRA, S. L. C.; CRUZ, R. S. DA. **Biodiesel: Parâmetros de qualidade e métodos analíticos**. Química Nova, v. 32, n. 6, p. 1596-1608, 2009.
- NASCIMENTO, C. A. O. et al. **Neural network based approach for optimization of industrial chemical processes**. Computers and Chemical Engineering, v. 24, n. 9-10, p. 2303-2314, 2000.
- RAMADHAS, A. S. et al. **Artificial neural networks used for the prediction of the cetane number of biodiesel**. Renewable Energy, v. 31, n. 15, p. 2524-2533, 2006.
- SILVA, T. A. R. **BIODIESEL DE ÓLEO RESIDUAL**: produção através de transesterificação por metanólise e etanólise básica, caracterização físico-química e otimização das condições reacionais. 2011. 152 f. Tese (Doutorado) - Curso de Química, Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2011.