

II-576 - APLICAÇÃO DE REDES NEURAIS ARTIFICIAIS NA MODELAGEM DE REATORES FOTOQUÍMICOS

Clarissa Câmara de Freitas⁽¹⁾

Engenheira Sanitarista e Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba (UEPB). Mestranda em Engenharia Civil e Ambiental pela Universidade Federal de Campina Grande (UFCG).

Fernando Fernandes Vieira

Engenheiro Químico (UFPB, 1986). Mestre em Engenharia Química (UFPB, 1989). Doutor em Engenharia Mecânica (UFPB, 2002). Professor Doutor-D do Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental (DESA) da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB).

Rui de Oliveira

Engenheiro Civil pela Universidade Estadual do Maranhão (UEMA). Mestre em Engenharia Civil pela Universidade Federal da Paraíba (UFPB). PhD em Engenharia Civil pela Universidade de Leeds - Inglaterra. Professor aposentado da Unidade Acadêmica de Engenharia Civil da Universidade Federal de Campina Grande (UFCG). Professor Doutor da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB).

Celeide Maria Belmont Sabino Meira

Possui Graduações em Engenharia Civil e em Arquitetura e Urbanismo pela Universidade Federal da Paraíba (UFPB). Mestre em Engenharia Civil pela Universidade Federal da Paraíba (UFPB). Professora Doutora da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB).

Juscelino Alves Henriques

Engenheiro Sanitarista e Ambiental pela Universidade Estadual da Paraíba (UEPB). Mestrando em Engenharia Civil e Ambiental pela Universidade Federal de Campina Grande (UFCG).

Endereço⁽¹⁾: Rua Pedro Barbosa, 35 – Cruzeiro – Campina Grande – PB – CEP 58.415-660 – e-mail: clarissa-camara@hotmail.com

RESUMO

Redes Neurais Artificiais (RNA's) constituem uma modelagem computacional que busca simular o cérebro humano. A finalidade das RNA's é representar cenários complexos, que requereriam esforços computacionais mais elevados, caso a modelagem mecanicista fosse escolhida. Os Processos Oxidativos Avançados (POA's) consistem numa técnica de tratamento de poluentes resistentes, baseadas na geração de radicais hidroxila. Por possuir muitas variáveis fenomenológicas, a modelagem mecanicista dos POA's torna-se muito complexa, sendo necessário o uso das Redes Neurais para representar o sistema. Os dados utilizados neste trabalho foram publicados por Borges (2009), cuja pesquisa consiste na degradação do fenol por POA's, seguida da modelagem por RNA's. O modelo foi reconstruído à fim de se aperfeiçoar a rede e assim obter melhores resultados para a representação do sistema. Os resultados obtidos demonstraram que as RNA's compõem uma técnica eficaz, com coeficientes de determinação que variam de 98% a 99%, significando que o modelo se ajusta em até 99% ao cenário real.

PALAVRAS-CHAVE: Redes Neurais Artificiais, Modelagem Matemática, Processos Oxidativos Avançados.

INTRODUÇÃO

Redes Neurais Artificiais são um conjunto de procedimentos matemáticos que buscam emular o funcionamento do cérebro humano. Os mecanismos neurais simulados por esta modelagem são o processamento de informações e a aprendizagem. Para poder reproduzir o funcionamento cerebral, é necessário interpretar o cérebro humano como um sistema de informações, com comportamento não linear e altamente complexo. Isto implica que, através de seus constituintes estruturais, os neurônios, torna-se possível processamento de informações complexas.

A partir da aproximação do modelo de RNA's ao funcionamento neurológico humano, problemas que possuem muitas variáveis ou algoritmos de difíceis resoluções, podem ser representados matematicamente e resolvidos de modo a manter resultados desejados. O processo de aprendizagem da rede configura-se do mesmo modo do processo biológico. A informação externa é captada pelos neurônios de entrada, ou como também são

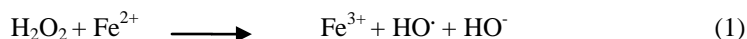
conhecidos, nós de entrada, que transmitem para os neurônios seguintes. Esta informação possui um potencial de ação, que é interpretado com um disparo elétrico. Dependendo do nível deste potencial de ação, a informação é processada e passada adiante. No caso do modelo matemático, o potencial de ação é interpretada por pesos, que ponderam o grau de importância da informação. (HAYKEN, 1994)

O modelo matemático também segue a estrutura de neurônios interconectados e estruturados, caracterizados por pesos ou forças próprias inspirados nas forças sinápticas. Pode-se concluir, portanto, que o processo de aprendizagem nas RNA's ocorre pela ponderação dos pesos das conexões entre os neurônios, buscando o melhor ajuste e, por conseguinte, melhores resultados com menor erro. Este erro pode ser calculado como erro quadrático médio, e representa a capacidade do modelo se aproximar ou não do cenário real. Quanto menor o erro, mais os resultados do modelo se assemelham aos resultados reais.

Fundamentado na sua rapidez e eficácia, a aplicação das RNA's na modelagem dos POA's constituiu de uma ferramenta que, sem a aplicação de leis físicas e químicas, representou o sistema de tratamento fornecendo as saídas esperadas para o modelo, pelo mecanismo da aprendizagem.

Os POA's são definidos como processo de tratamento baseado na geração de radicais livres, por diferentes métodos, que reagem com uma gama de compostos químicos devido à sua alta reatividade.

Uma das técnicas mais conhecidas é o processo foto-Fenton, que consiste na geração de radicais livres pela reação entre H_2O_2 e íons Fe^{2+} em meio ácido, representado pela Equação 1:



O processo pode ser acelerado pela incidência de radiação UV. Neste caso ocorre a regeneração de Fe^{3+} a Fe^{2+} com ocorrência de Fenton, devido à presença de H_2O_2 .

Um dos fatores que inibem a formação dos radicais é a presença de íons que são resultantes da precipitação de ferro ou por sua associação ao Fe(II) formando complexos menos reativos.

MATERIAIS E MÉTODOS

Para a realização deste projeto, as atividades experimentais que serviram de fonte de dados foram realizadas na Universidade de São Paulo pela pesquisadora Fúlvia Jung Borges (2009), cuja tese foi apresentada a Escola politécnica de São Paulo, em parceria com o *Laboratoire de Génie Chimique* de Toulouse, França. Os experimentos realizados no âmbito de Processos Oxidativos Avançados ocorreram em um reator em batelada com volume interno de 1 litro, conectado a um tanque de recirculação de vidro borossilicato, munido de agitador mecânico. A temperatura da solução foi controlada, por meio de banho termostático, a 25 °C. A solução circulou através de um reator numa vazão de aproximadamente 1,5 litros.

Segundo Ludwig e Costa (2007), uma coleta criteriosa dos dados relativos ao problema torna-se a pedra fundamental para o desempenho da rede neural. Portanto, foi realizado um tratamento criterioso dos dados, sendo iniciado pela transmutação de sua forma de gráficos para tabelas.

A extração de dados experimentais teve como início a permuta da forma de gráficos para tabelas numéricas. Através do programa *Engauge 2.0*, os dados foram digitalizados, ponto a ponto, de curvas e convertidas em valores possíveis de serem trabalhados, ou seja tabelas com valores numéricos de modo a representar, através de suas variáveis de entrada, os sistema.

Posteriormente, os dados foram submetidos a uma análise criteriosa com a finalidade de minimizar ambiguidades e erros. Verificou-se o domínio dos dados perante o problema, ou seja, se a coleção é capaz de abranger amplamente as condições do cenário a ser modelado matematicamente, os dados foram, então, divididos em três categorias:

- Dados de treinamento, usados para o treinamento da rede;
- Dados de validação da rede, usados para a verificação do desempenho da rede,e;
- Dados para testes de generalização da rede.

O conjunto foi dividido em 60% dos dados para treinamento, 20% dos dados para validação e 20% dos dados para testes. Os dados foram reordenados aleatoriamente para evitar tendências associadas à ordem de sua coleta.

A rede teve como dados de entrada uma coleção de 110 dados. As variáveis selecionadas foram extraídas de modo a representar melhor o sistema a ser modelado. Portanto muitas outras variáveis poderiam ser usadas, como a intensidade de radiação e o pH, porém as selecionadas para este estudo foram classificadas como variáveis de estado, pois elas caracterizam o sistema em suas diversas variações. Para a caracterização da resposta do sistema delimitado pelo Fenol, foi selecionado o Carbono Orgânico Total (COT), já que se trata de um composto orgânico.

O algoritmo de aprendizagem é ajustado de acordo com o tipo da rede, sendo um processo empírico. O tempo da rede pode ser adotado de acordo com alguns indicadores, porém o tempo de ciclos é adotado tendo como indicador o erro quadrático médio, que para este estudo teve um máximo de 0,001, ou seja, a rede não poderá ultrapassar este valor.

Durante esta fase, o conjunto de dados separados para validação foi utilizado para determinar o desempenho da rede com dados que não foram apresentados à mesma.

RESULTADOS

Pode-se verificar que, a partir da linha de tendência e também da linha que representa o ajuste $Y=T$, as respostas da rede são cada vez mais semelhantes aos dados experimentais, comprovado no ajuste do modelo, que obteve coeficientes de determinação que variam de 98% a 99% conforme exposto na Tabela 1.

Tabela 1 – Coeficientes de determinação para cada etapa do modelo.

R^2				
<i>Arquitetura</i>	<i>Treinamento</i>	<i>Validação</i>	<i>Teste</i>	<i>Total</i>
5	0,99818	0,99766	0,99715	0,99792
10	0,9965	0,98459	0,99139	0,99285
15	0,9994	0,99626	0,99717	0,99866
20	0,9994	0,99768	0,99707	0,99863

A Figura 1 ilustra o desempenho da rede, exprimindo que a mesma obteve melhor ajuste ao executar até a época 6, podendo alcançar o erro quadrático médio entre 10^{-2} e 10^{-3} , intervalo estabelecido para a rede, de modo a alcançar o melhor ajuste. Isto significa que a rede após repetir em 12 épocas o processo de transmissão para frente (*feedforward*) e para trás (*backforward*), na época 6 seu desempenho em validação do modelo foi ultimada.

Todas as representações gráficas foram feitas a partir da constatação de que o modelo de melhor ajuste tem na sua camada oculta 10 neurônios.

Figura 1 - Performance da rede, com melhor validação na época 6.

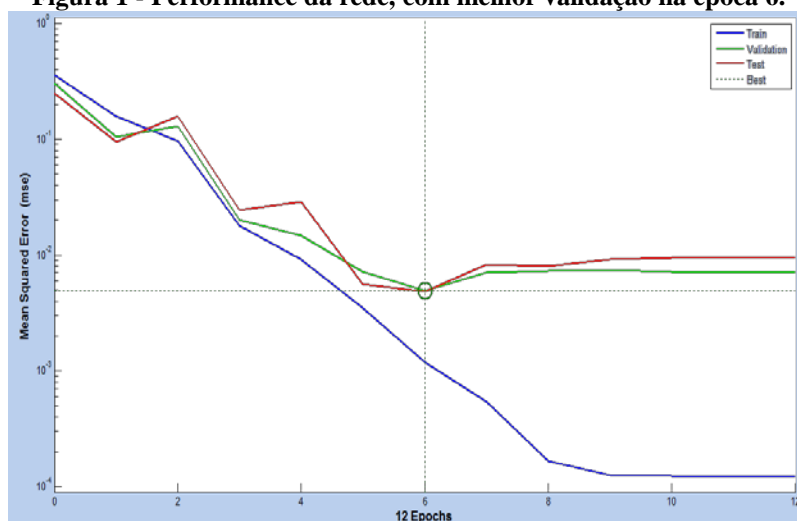
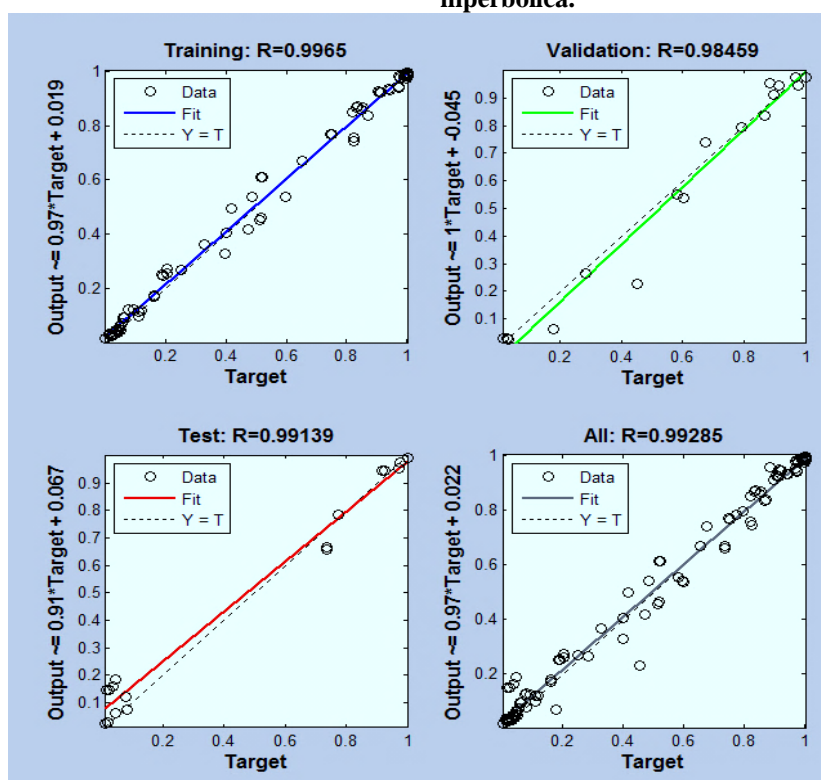


Figura 2 - Comportamento da rede com 10 neurônios e funções de ativação e junção aditiva tangente hiperbólica.

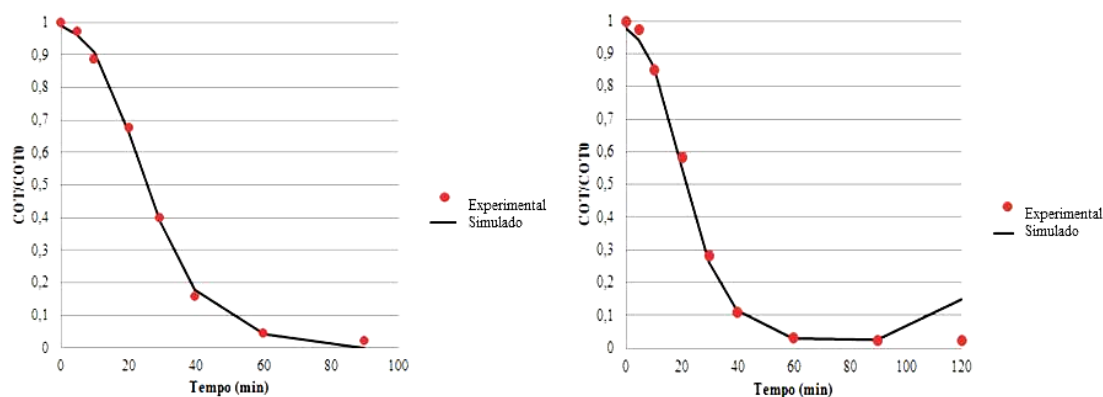


Percebe-se que mesmo a rede tendo alcançado bons ajustes em um número menor de ciclos, a etapa de validação é tida como referencial, já que esta é definida como o processo em que a rede é simulada com um conjunto de dados ainda não apresentados, que serão usados para legitimar o modelo.

A rede conseguiu representar o cenário real de modo que os coeficientes de determinação puderam demonstrar que 99,13% (média de todos os coeficientes para uma simulação com 10 neurônios na camada oculta) dos valores de saída da rede se aproximam dos valores de saída do experimento.

É, portanto, constatado a partir da Figura 2, que a partir da linha de tendência e também da linha que representa o ajuste $Y=T$ que as respostas da rede são, cada vez mais semelhantes aos dados experimentais, o ajuste do modelo em coeficientes que variam de 98% a 99%.

Figura 3 - Gráfico de resultados experimentais versus calculados em função do tempo. (a) 80 mM de peróxido de hidrogênio; 25 g/L de cloreto de sódio e 0,2 mM de Ferro II. (b) 80 mM de peróxido de hidrogênio; 50 g/L de cloreto de sódio e 0,2 mM de Ferro II



A Figura 3 representa o gráfico experimental *versus* rede, em que é possível perceber que a rede se comporta de forma semelhante ao cenário real, de modo que pode-se afirmar que o modelo obteve êxito no processo de aprendizagem.

CONCLUSÕES

Com base nos resultados, pode ser concluído que o modelo de Redes Neurais Artificiais é um excelente método de modelagem para processos de tratamento com reações complexas, verificando-se a possibilidade de ajustes que condizem com o experimento real.

O número de neurônios interfere no desempenho da rede de modo que na camada oculta um número de 10 neurônios foi concebido como uma quantia apropriada para a garantia de um bom ajuste.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. BORGES, F.J. *Integração dos processos de Eletrodiálise e de Degradação Fotoquímica para o Tratamento de Efluentes Salinos contendo Fenol*. Tese de Doutorado. São Paulo, 2009.
2. HAYKIN, S. *Redes neurais: princípios e prática*. Trad. Paulo Martins Engel. 2.ed. Porto Alegre:Bookman., 1994.
3. LUDWIG Jr., O. e COSTA, E.M.M. *Redes Neurais: Fundamentos e Aplicações com Programas em C*. Rio de Janeiro :Ciência Moderna, 2007.