

Modelagem empírica de um processo de fermentação para produção de etanol utilizando sistema de inferência adaptativa neuro-fuzzy (ANFIS)

Palavras-Chave: ANFIS, Etanol, Sistemas Inteligentes

Autores/as:

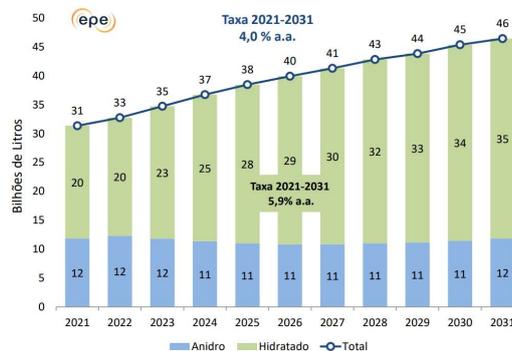
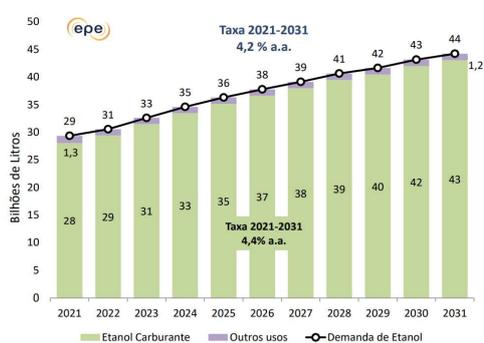
Vinicius Mello e Muller - FEQ

Prof.^a Dr.^a Flávio Vasconcelos da Silva - DESQ/FEQ

INTRODUÇÃO:

A crescente tendência na busca de melhores alternativas aos combustíveis fósseis é justificada pela maior preocupação da população global com possíveis danos ao meio ambiente e opções mais econômicas. No Brasil, a lei 13.576/17 - Política Nacional de Biocombustíveis (RenovaBio) mostrou comprometimento em incentivar o crescimento da participação dos biocombustíveis como alternativa ao uso de derivados do petróleo, os resultados posteriores à aprovação dessa lei foram positivos e uma pesquisa feita pelo Ministério de Minas e Energia (MME) prevê um crescimento considerável tanto na oferta quanto na demanda de biocombustíveis até o ano de 2031 (MME, 2021).

Figura 1 - Gráficos que prevêm a crescente oferta e demanda de etanol



Fonte: (MME, 2021)

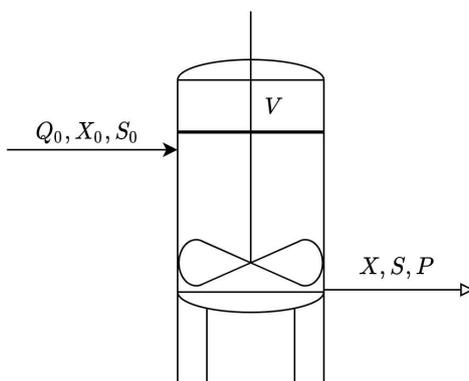
O etanol é obtido através de substratos contendo açúcares, como produtos da agricultura ou dejetos alimentares. no Brasil, as principais matérias-primas para a produção de etanol são: cana-de-açúcar e o milho (MME, 2021).

Com isso, surge a necessidade de desenvolver métodos e tecnologias cada vez mais eficientes no controle, otimização e entendimento da produção de etanol. Dentre as diversas maneiras de se realizar tal estudo, a utilização de artifícios de aprendizado de máquina têm chamado muita atenção pela capacidade de aproximação universal de funções e sistemas dinâmicos. Nesta pesquisa, será estudada a capacidade de modelagem de um processo contínuo de fermentação alcoólica utilizando Redes neurais e redes neuro-fuzzy.

METODOLOGIA:

Para o estudo da modelagem empírica do processo, simulou-se os dados a partir de um modelo cinético desenvolvido por (GHALY; EL-TAWEEL, 1997) e adaptado por (SOUSA; FONSECA; DA SILVA, 2021), que descreve o comportamento dinâmico das concentrações (g/L) de: Massa celular X , substrato S , produto P e do volume do tanque V (L) considerando um reator perfeitamente agitado (CSTR) com área seccional constante e temperatura constante durante todo o processo.

Figura 2 - Desenho representativo de um reator contínuo de produção de etanol



Considerando massa específica constante durante todo o processo, o balanço de massa geral fornece a equação diferencial 1, em termos do coeficiente de fluxo da válvula C_v , área da secção A_t e aceleração da gravidade g :

$$\frac{dV}{dt} = Q_0 - C_v \sqrt{(2gV)/A_t} \quad (1)$$

O balanço de massa para o conteúdo celular X é descrito pela equação 2, em termos da taxa de crescimento celular r_x e morte r_d :

$$\frac{dX}{dt} = \frac{(X_0 - X)Q_0}{V} + r_x - r_d \quad (2)$$

A taxa de crescimento celular r_x representa o aumento do número de células viáveis presentes no meio, sendo matematicamente calculada como o produto da taxa específica de crescimento das células μ e da concentração celular:

$$r_x = \mu X \quad (3)$$

sendo a taxa específica como indicada abaixo em termos da: velocidade máxima de crescimento μ_{max} , constante de saturação K_S , constante de inibição por etanol K_P e constante de inibição por substrato K_S' :

$$\mu = \mu_{max} \frac{S}{K_S + S} \frac{K_P}{K_P + P} \frac{K_S'}{K_S' + S} \quad (4)$$

Similar à equação 3, a taxa de morte celular pode ser descrita através do produto da taxa específica de morte celular K_d e da concentração celular:

$$r_d = K_d X \quad (5)$$

O balanço de massa para o etanol fornece:

$$\frac{dP}{dt} = -\frac{Q_0 P}{V} + \frac{Y_{P/S}}{Y_{X/S}} r_x + m_S Y_{P/S} X \quad (6)$$

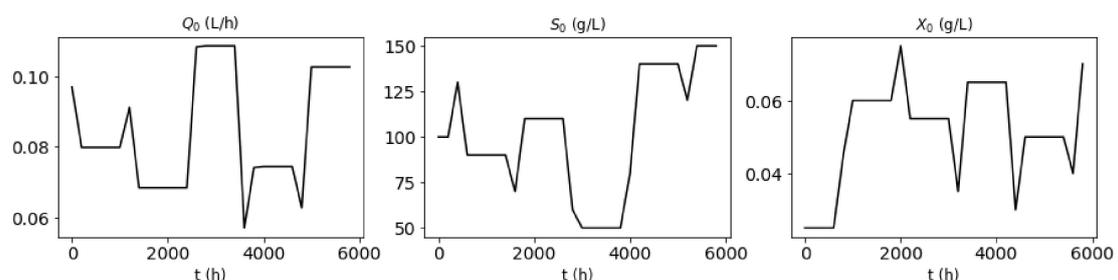
Em que os parâmetros cinéticos $Y_{P/S}$, $Y_{X/S}$, m_S correspondem respectivamente ao coeficiente de rendimento de produto, coeficiente de rendimento de células e de manutenção celular.

Para o balanço material do substrato, tem-se:

$$\frac{dS}{dt} = \frac{(S_0 - S)Q_0}{V} - \frac{r_x}{Y_{X/S}} - m_S X - \frac{r_p}{Y_{P/S}} \quad (7)$$

Para uma efetiva modelagem empírica, o modelo matemático descrito pelas equações 1-7 foi submetido à 6000h hipotéticas de simulação, considerando um intervalo de 1h para a resolução numérica do sistema utilizando método de Runge Kutta de quarta ordem, além disso, as variáveis exógenas Q_0 , S_0 , X_0 foram perturbadas tal como mostra a figura 3, dessa forma o modelo empírico pode aprender o comportamento dinâmico sobre diferentes condições operacionais.

Figura 3 - Perturbações nas variáveis exógenas



Por fim, para se aproximar mais do comportamento real de um sensor, foi adicionado ruído gaussiano aleatório aos valores simulados, obtendo o comportamento dinâmico mostrado em preto na figura 4:

Para o conjunto de dados criado, foram utilizados os primeiros 70% para treino, desses e o restante para teste. No treinamento, o objetivo foi minimizar a função de erro escolhida, o erro médio quadrático (MSE) dado pela equação 8:

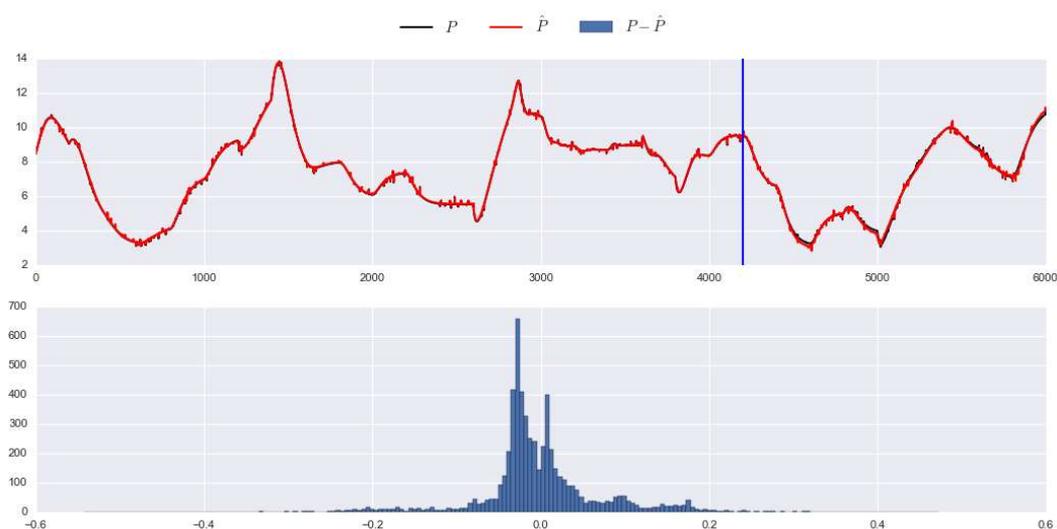
$$MSE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (8)$$

Sendo y_i o valor real, \hat{y}_i o valor predito na observação i , e n o número total de observações.

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

Primeiramente, para fins de estudo e posterior comparação, foi implementado um modelo de rede neural recorrente simples (ZHANG et al., 2021;) utilizando a biblioteca Keras (CHOLLET, 2015) da linguagem Python. Então, foi implementado o ANFIS (JANG, 1993) também usando o Python, com auxílio da biblioteca SANFIS (LENHARD; MARINGER, 2022).

Figura 4 - Comportamento dinâmico simulado e resultado do ajuste pelo ANFIS



CONCLUSÕES E PRÓXIMOS PASSOS:

Com os resultados obtidos até então, pode-se dizer que a modelagem empírica é uma ferramenta efetiva na identificação de dinâmicas não lineares, chegando em erros muito pequenos para dados nunca vistos, isso permite aplicar com segurança os modelos empíricos para estratégias de controle, pesquisa operacional e otimização de processos. Para a reta final do projeto, busca-se

melhorar o ajuste através do ANFIS e comparar os resultados com os de uma rede neural recorrente simples em um sistema nunca visto antes.

BIBLIOGRAFIA:

CHOLLET, F. **Keras**. Disponível em: <<https://github.com/fchollet/keras>>.

GHALY, A. E.; EL-TAWEEL, A. A. Kinetic Modelling of Continuous Production of Ethanol from Cheese Whey. **Biomass and Bioenergy**, v. 12, n. 6, p. 461–472, jan. 1997.

JANG, J.-S. .R. ANFIS: adaptive-network-based Fuzzy Inference System. **IEEE Transactions on Systems, Man, and Cybernetics**, v. 23, n. 3, p. 665–685, 1993.

LENHARD, G.; MARINGER, D. State-ANFIS: A Generalized Regime-Switching Model for Financial Modeling. **2022 IEEE Symposium on Computational Intelligence for Financial Engineering and Economics (CIFEr)**, maio 2022.

MME. **MME e EPE divulgam estudo sobre oferta de biocombustíveis**. Disponível em: <<https://www.gov.br/mme/pt-br/assuntos/noticias/mme-e-epe-divulgam-estudo-sobre-oferta-de-biocombustivei>>. Acesso em: 28 jan. 2022.

SIMÕES, M. G.; SHAW, I. S. **Controle e modelagem fuzzy**. [s.l.] Editora Blucher, 2007.

SOUSA, F. M. M.; FONSECA, R. R.; DA SILVA, F. V. Empirical modeling of ethanol production dynamics using long short-term memory recurrent neural networks. **Bioresource Technology Reports**, v. 15, p. 100724, set. 2021.

VIRTANEN, P. et al. SciPy 1.0: Fundamental algorithms for scientific computing in python. **Nature Methods**, v. 17, p. 261–272, 2020.

ZHANG, A. et al. **Dive into Deep Learning** arXiv preprint arXiv:2106.11342. [s.l: s.n.].