



## Utilização de redes neurais artificiais para determinação de parâmetros cinéticos de gaseificação de biomassa

### Artificial neural network model for the prediction of kinetic parameters of biomass gasification

Thais Coffani Costa<sup>1</sup>, Claiton Zanini Brusamarello<sup>2</sup>

#### RESUMO

Este trabalho trata da aplicação de redes neurais artificiais (RNAs) na previsão da energia de ativação da gaseificação de biomassa. A gaseificação de biomassa é uma alternativa crucial para diversificar a matriz energética, reduzir as emissões de CO<sub>2</sub> e promover a sustentabilidade. A pesquisa envolveu a coleta de dados de várias fontes de biomassa, incluindo aquelas da região sul do Brasil, que incluem o bagaço de cana de açúcar, madeira pinus e casca de arroz. Foram conduzidos dois testes, um com os dados das biomassas da região sul e outro com um dataset mais abrangente. Os resultados obtidos revelaram valores do coeficiente de determinação (R<sup>2</sup>) superiores a 0,90 em ambos os conjuntos de testes. Esses resultados indicam a viabilidade de empregar as RNAs na previsão dos parâmetros cinéticos da gaseificação da biomassa, o que, por sua vez, possibilita o dimensionamento apropriado dos equipamentos e a otimização do processo químico associado. Este avanço impulsiona fontes de energia limpa, contribuindo para a sustentabilidade ambiental. **PALAVRAS-CHAVE:** biomassa; energia de ativação; gaseificação; previsão; redes neurais artificiais.

#### ABSTRACT

This work addresses the application of artificial neural networks (ANNs) in predicting the activation energy of biomass gasification. Biomass gasification is a crucial alternative for diversifying the energy matrix, reducing CO<sub>2</sub> emissions, and promoting sustainability. The research involved collecting data from various biomass sources, including those from the southern region of Brazil, such as sugarcane bagasse, pine wood, and rice husks. Two tests were conducted, one using data from the biomass of the southern region and another with a more comprehensive dataset. The results obtained revealed coefficient of determination (R<sup>2</sup>) values above 0.90 in both test sets. These results indicate the feasibility of employing ANNs in predicting the kinetic parameters of biomass gasification, which, in turn, enables proper equipment sizing and optimization of the associated chemical process. This advancement propels clean energy sources, contributing to environmental sustainability.

**KEYWORDS:** biomass; activation energy; gasification; prediction; artificial neural networks.

## INTRODUÇÃO

Atualmente, a crescente preocupação com as mudanças climáticas destaca a necessidade de diversificar a matriz energética, reduzindo a dependência histórica de combustíveis fósseis. A biomassa emerge como uma alternativa promissora, sendo uma fonte abundante e eficaz para impulsionar a transição para fontes de energia renovável. A gaseificação de biomassa oferece uma opção mais eficiente e ecologicamente amigável. Durante a fotossíntese, a biomassa absorve CO<sub>2</sub>, resultando em baixas emissões líquidas de carbono. Além disso, a cogeração de energia a partir da biomassa pode melhorar a eficiência industrial e reduzir custos (NEMER, 2010).

<sup>1</sup> Voluntária. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão, Paraná, Brasil. E-mail: thaiscoffani@alunos.utfpr.edu.br. ID Lattes: 9135794867513268

<sup>2</sup> Docente no Curso de Engenharia Química. Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Francisco Beltrão, Paraná, Brasil. E-mail: claitonz@utfpr.edu.br. ID Lattes: 9115740329749856



De acordo com Van loo e Koppejan (2008), a utilização de biomassa na gaseificação oferece vantagens não apenas ambientais, mas também sociais e econômicas. Os autores afirmam que a biomassa tem o potencial de gerar mais empregos em comparação com o carvão mineral. Além disso, o uso de biomassa contribui para reduzir a dependência de combustíveis importados, o que pode trazer benefícios econômicos, como a diminuição dos gastos com importação de energia.

Os estudos de cinética de gaseificação têm como objetivo principal a criação de modelos precisos que incluam os parâmetros dinâmicos do processo. Esses modelos desempenham um papel importante nas fases posteriores do projeto de gaseificadores industriais, permitindo o dimensionamento adequado dos equipamentos e a otimização do processo químico (FELIX et al., 2022).

Com o objetivo de aprimorar as estimativas e reduzir tanto o tempo quanto os custos associados à coleta de dados, a utilização de redes neurais artificiais (RNAs) tem se destacado como uma alternativa promissora em comparação aos métodos tradicionais, como destacado por Da Silva Binoti et al. (2015). Além disso, a previsão desempenha um papel fundamental na antecipação de eventos futuros, sendo amplamente aplicada para fins de planejamento e tomada de decisão, de acordo com Krajewski et al. (2009), ao fornecer uma visão do que está por vir, a previsão aumenta as chances de sucesso e permite a adoção de medidas adequadas para garantir resultados positivos. Nesse contexto, as redes neurais artificiais surgem como ferramentas valiosas, oferecendo diferentes abordagens para auxiliar na tomada de decisões informadas e embasadas.

Este trabalho tem como objetivo desenvolver uma rede neural artificial (RNA) do tipo feedforward capaz de prever com precisão a energia de ativação em um processo de gaseificação de biomassa. Para essa finalidade, foram utilizados dois conjuntos de dados: um contendo informações sobre biomassas predominantes na região sul do Brasil, como bagaço de cana-de-açúcar, casca de arroz e madeira pinus, e um segundo conjunto mais abrangente com biomassas diversas. A RNA será alimentada com múltiplas variáveis de entrada, como percentagens de carbono, hidrogênio, nitrogênio e enxofre, bem como níveis de umidade, matéria volátil, cinzas, temperatura e carbono fixado, visando prever a energia de ativação. A avaliação da RNA será realizada com base nos parâmetros RMSE (Erro Quadrático Médio) e  $R^2$  (Coeficiente de Determinação) para garantir a precisão e a qualidade das previsões.

## DESENVOLVIMENTO

### BASE DE DADOS

Foi realizada uma pesquisa bibliográfica nas fontes SCOPUS, Science Direct e Google Acadêmico, com o objetivo de selecionar artigos relevantes que abordassem a análise imediata, elementar e cinética da gaseificação de biomassa. Os artigos selecionados foram avaliados para garantir a qualidade e a relevância dos dados coletados. Esses dados foram então armazenados em uma planilha para passar pelo processo de pré-processamento.

Como parte desse processo, foram criados dois conjuntos distintos de dados. O primeiro conjunto reúne informações específicas sobre as biomassas mais amplamente utilizadas na região sul do Brasil, que incluem a madeira pinus, casca de arroz e bagaço de cana de açúcar. O segundo conjunto engloba dados relacionados a biomassas de diversas



origens, selecionadas de forma aleatória a partir da literatura científica juntamente com o primeiro conjunto, formando uma base de dados ainda mais abrangente e diversificada.

## PRÉ-PROCESSAMENTO DOS DADOS

Durante a etapa de pré-processamento dos dados, foram adotadas algumas técnicas para garantir a qualidade e a uniformidade dos dados coletados. Para lidar com valores ausentes, optou-se por substituí-los pela média dos valores disponíveis. Também foi realizada uma normalização dos dados seguindo o modelo z-score. Com todos esses procedimentos realizados, os dados ficaram prontos para serem utilizados no desenvolvimento da rede neural artificial.

## REDE NEURAL ARTIFICIAL

Para a criação desse trabalho, a plataforma Google Colab foi selecionada como ambiente computacional. O código foi desenvolvido utilizando a linguagem de programação Python. A primeira tarefa consistiu na importação da base de dados coletada e na definição dos dados a serem usados como entrada e saída. A opção recaiu sobre a utilização das análises imediata e elementar da biomassa como dados de entrada, abrangendo a porcentagem de material volátil, cinzas, umidade, carbono fixo, carbono, oxigênio, hidrogênio, nitrogênio e enxofre. Quanto aos dados de saída, foi especificada somente a energia de ativação, que faz parte da análise cinética da gaseificação da biomassa.

Foi empregada uma rede neural de regressão, um tipo de modelo estatístico adequado para fazer previsões de valores que variam de forma contínua, como a energia de ativação. Os dados foram divididos em conjuntos de treinamento e validação, sendo 80% treinamento e 20% validação, utilizando a função da biblioteca scikit-learn. A RNA foi desenvolvida com foco em maximizar o coeficiente de determinação ( $R^2$ ) na previsão da energia de ativação, que constitui a saída do modelo. Todos os parâmetros, incluindo o tamanho das camadas ocultas, as taxas de aprendizado, o número de épocas, o tamanho dos lotes (grupos de dados processados juntos) e as diferentes funções de ativação nos neurônios da rede, como degrau, linear por partes, sigmoide, tangente hiperbólica e unidade linear retificada, foram ajustados e refinados em busca da otimização do funcionamento da rede neural.

## RESULTADOS E DISCUSSÕES

### PREDIÇÃO DE ENERGIA DE ATIVAÇÃO COM DADOS DE BIOMASSAS DO SUL DO BRASIL

No primeiro teste, foi utilizado um conjunto de 33 dados contendo informações das principais biomassas encontradas na região sul do Brasil. Através da construção de uma rede neural, foi previsto a energia de ativação para essas biomassas.

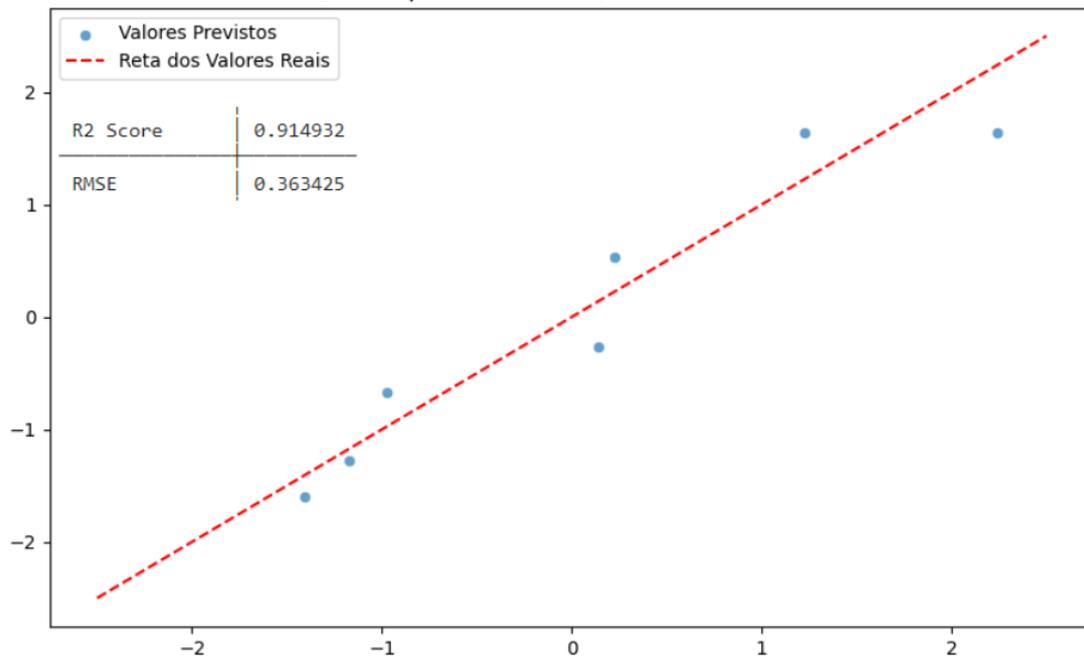
Das correlações analisadas entre os componentes da biomassa, algumas se destacam por suas implicações cruciais no processo de gaseificação. A correlação negativa significativa entre o carbono e as cinzas (-0.52) revela uma relação inversa entre esses dois elementos. Isso sugere que à medida que o teor de carbono aumenta na biomassa, a quantidade de cinzas tende a diminuir. Além disso, a correlação negativa entre o carbono



fixado e as cinzas (-0.42) reforça a tendência de menor presença de cinzas em biomassas com maior teor de carbono fixado. A correlação negativa entre oxigênio e nitrogênio (-0.51) indica uma associação inversa entre esses elementos, o que pode afetar diretamente as reações químicas durante a gaseificação. A relação positiva entre matéria volátil e carbono (0.42) sugere que à medida que o teor de carbono aumenta, a quantidade de matéria volátil também tende a aumentar, possivelmente influenciando a volatilidade da biomassa durante o processo de gaseificação. Adicionalmente, a correlação positiva entre enxofre e oxigênio (0.45) bem como entre umidade e hidrogênio (0.45) pode apontar para interações químicas relevantes entre esses elementos durante a gaseificação. A correlação positiva entre temperatura e cinzas (0.41) sugere que um aumento na temperatura pode estar associado a um aumento na quantidade de cinzas resultante do processo.

A figura abaixo é possível observar o gráfico de dispersão dos valores reais versus os valores previstos pela rede.

Figura 1 – Gráfico de dispersão do teste 1



Fonte: Autoria própria

Os resultados alcançados por meio desse método exibiram um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) de 0.915, enquanto o erro quadrático médio (RMSE) permaneceu em um valor de 0.363.

## PREDIÇÃO DE ENERGIA DE ATIVAÇÃO COM DADOS MAIS ABRANGENTES DE BIOMASSAS

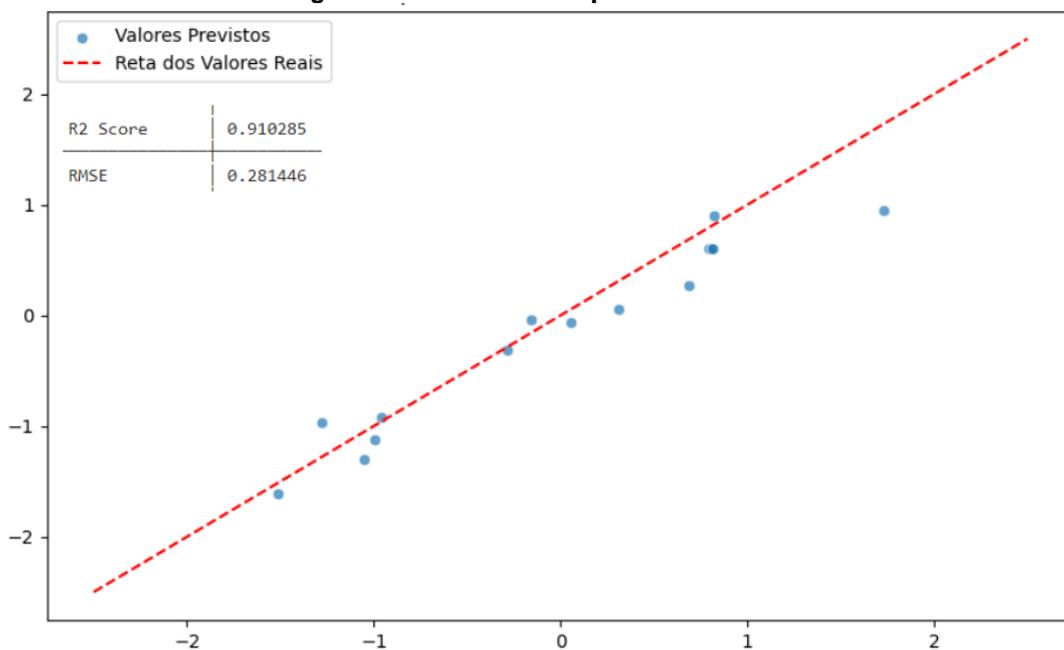
No segundo teste, criamos uma base de 71 dados combinados, contendo informações tanto das biomassas do sul do Brasil quanto das biomassas aleatórias. Dividimos aleatoriamente os dados em conjuntos de treinamento e teste, e empregamos a rede neural para prever as energias de ativação.



Na matriz de correlação destacam-se as correlações positivas observadas entre o teor de carbono na biomassa e o carbono fixado (0.39), bem como entre carbono e hidrogênio (0.39). Tais relações indicam que à medida que a biomassa apresenta maior teor de carbono, há uma tendência correspondente de aumento na quantidade de carbono fixado e hidrogênio. Além disso, as correlações negativas entre oxigênio e carbono fixado (-0.40), e matéria volátil e carbono fixado (-0.47) são notáveis, sugerindo que à medida que o teor de carbono aumenta, os teores de oxigênio e matéria volátil tendem a diminuir.

A figura 2 o gráfico de dispersão dos valores reais versus os valores previstos pela rede.

Figura 2 – Gráfico de dispersão do teste 2



Fonte: Autoria própria

Essa abordagem provou ser levemente mais eficaz na previsão das energias de ativação do que o teste 1. Embora o coeficiente de determinação ( $R^2$ ) tenha apresentado uma ligeira redução no teste 2 em comparação ao teste 1, com um valor de 0.910 em relação a 0.915, destaca-se a significativa melhoria no erro quadrático médio (RMSE) no teste 2, onde o RMSE alcançou um valor de 0.281, ao passo que no teste 1, registrou 0.363.

O RMSE é uma métrica para avaliar a precisão das previsões de um modelo, calculando a média das diferenças entre as previsões do modelo e os valores observados. Portanto, um RMSE menor indica maior precisão nas previsões, sugerindo que as previsões estão mais próximas dos dados reais. Apesar da redução no  $R^2$  no teste 2 em comparação com o teste 1, a melhoria no RMSE indica que a abordagem de combinar dados de biomassas do sul do Brasil e amostras aleatórias foi mais eficaz na previsão das energias de ativação.

## CONCLUSÃO

Este estudo focou na previsão da energia de ativação na gaseificação de biomassa usando redes neurais artificiais (RNAs). A gaseificação de biomassa é uma alternativa



promissora aos combustíveis fósseis devido à sua eficiência e impacto ambiental reduzido, exigindo modelos de previsão precisos para otimização do processo.

No primeiro teste, foram utilizados dados de biomassa do sul do Brasil, incluindo madeira pinus, casca de arroz e bagaço de cana-de-açúcar. Isso revelou correlações significativas entre os componentes da biomassa e os parâmetros cinéticos de gaseificação. A RNA aplicada a esses dados obteve um coeficiente de determinação ( $R^2$ ) de 0,915 e um erro quadrático médio (RMSE) de 0,363. Já no segundo teste, ao combinar dados de biomassa do sul do Brasil com amostras aleatórias, alcançamos um  $R^2$  de 0,910 e RMSE de 0,281. Observamos correlações tanto positivas quanto negativas entre os componentes da biomassa.

Esta pesquisa destaca o valor das redes neurais artificiais na previsão de parâmetros cinéticos de processos complexos, como a gaseificação de biomassa. Suas descobertas podem beneficiar a indústria de gaseificação, proporcionando insights para dimensionamento de equipamentos e otimização de processos.

Futuros testes incluirão dados mais diversificados de biomassa e otimização dos parâmetros da RNA para melhorar a precisão do modelo.

## Agradecimentos

Gostaria de expressar meu agradecimento às instituições e às pessoas que apoiaram este trabalho. Um agradecimento especial a CNPq pela bolsa concedida.

## Disponibilidade de código

O código desenvolvido está disponível mediante solicitação no e-mail do autor.

## Conflito de interesse

Não há conflito de interesse.

## REFERÊNCIAS

DA SILVA BINOTI, M; et al. **Prognose Em Nível De Povoamento De Clones De Eucalipto Empregando Redes Neurais Artificiais**. Cerne, [S. l.], v. 21, n. 1, p. 97–105, 2015. DOI: 10.1590/01047760201521011153.

FELIX, C. B. et al. **A comprehensive review of thermogravimetric analysis in lignocellulosic and algal biomass gasification**. Chemical Engineering Journal, v. 445, n. May, p. 136730, 2022.

KRAJEWSKI, L; et al. **Administração de Produção e Operações**. 8° ed. Pearson, 2009.

NEMER, L. C. **Modelagem do processo de gaseificação de biomassa empregando redes neuronais**. TCC (Graduação)-Curso de Engenharia Química ..., 2010.

S.; KOPPEJAN, J. **The Handbook of Biomass Combustion and Co-firing**. Ed. Earthscan. Londres, Reino Unido. 465 p. 2008.