

MATHEUS VITORASSO ZANETTI

**Implementação de sistemas inteligentes em
simulação computacional de uma célula a
combustível PEM**

São Carlos

Novembro/2016

MATHEUS VITORASSO ZANETTI

Implementação de sistemas inteligentes em simulação computacional de uma célula a combustível PEM

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado
à Escola de Engenharia de São Carlos, da
Universidade de São Paulo

Curso de Engenharia Elétrica com ên-
fase em Sistemas de Energia e Automação.

Orientador: Prof. Dr. Ruy Alberto Corrêa Altafim

São Carlos

Novembro/2016

AUTORIZO A REPRODUÇÃO TOTAL OU PARCIAL DESTE TRABALHO,
POR QUALQUER MEIO CONVENCIONAL OU ELETRÔNICO, PARA FINS
DE ESTUDO E PESQUISA, DESDE QUE CITADA A FONTE.

Zanetti, Matheus Vitorasso
Z28i Implementação de sistemas inteligentes em simulação
computacional de uma célula a combustível PEM / Matheus
Vitorasso Zanetti; orientador Ruy Alberto Corrêa
Altafim. São Carlos, 2016.

Monografia (Graduação em Engenharia Elétrica com
ênfase em Sistemas de Energia e Automação) -- Escola de
Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo,
2016.

1. Célula a combustível. 2. Simulação
computacional. 3. Redes neurais artificiais. 4.
Modelagem. 5. Sistemas inteligentes. 6. Hidrogênio. I.
Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Nome: Matheus Vitorasso Zanetti

Título: “Implantação de sistemas inteligentes em simulação computacional de uma célula a combustível”

Trabalho de Conclusão de Curso defendido e aprovado
em 23 / 11 / 2016,

com NOTA (9,0, note.), pela Comissão Julgadora:

Prof. Titular Ruy Alberto Corrêa Altafim - Orientador - SEL/EESC/USP

Prof. Dr. Manoel Luis de Aguiar - SEL/EESC/USP

Mestre Luís Guilherme Trovó Cassanelli - SEL/EESC/USP

Coordenador da CoC-Engenharia Elétrica - EESC/USP:
Prof. Associado José Carlos de Melo Vieira Júnior

Este trabalho é dedicado aos pesquisadores e cientistas, pelo conhecimentos que agregam à humanidade. E também aos professores, que por vocação, fazem a diferença no futuro de quem quer aprender.

Agradecimentos

Agradeço primeiramente aos meus pais, Cláudia e Egberto. E à minha avó, Margarida. Por lutarem para me proporcionar uma boa educação, e me darem liberdade para graduar em um curso que me faz feliz.

À minha namorada Tatiane Santos, por me apoiar nesses árduos cinco anos de graduação e estar presente sempre nos bons e maus momentos.

Ao meu orientador Ruy Altafim, por me passar ensinamentos em aula, na iniciação científica, e coisas da vida de engenharia. Pelo acolhimento ao laboratório e por confiar em mim.

Ao Aduino Maniezo, que foi mais que um tutor no meu estágio. Pela sua transmissão de conhecimento fabril e de pessoas, que com certeza fez meu estágio valer como uma outra graduação. Não deixarei de esquecer seus trejeitos e suas frases. Foste um exemplar mentor.

Ao Ricardo Gramolini, que foi meu gerente industrial durante o estágio. Por transmitir sua ampla visão de processos e de negócios. Por cobrar de mim a matemática e raciocínio lógico que já sei, mas também incentivar a gestão de pessoas, e outros pontos que me eram fracos antigamente.

Aos meus colegas de classe, Átila Correia, Bruno Oliveira, Dalton Yamamoto, Daniel Kondo, Gustavo Labegallini, Marcelo Alcântara, Marco Aurélio, Murilo Silveira, Rafael Magossi e Rodrigo Lima. Por todas as conversas, aulas em conjunto, discussões e trabalhos realizados juntos.

Ao Pedro Avila, por dividir moradia comigo durante quatro anos e possuir senso de humor bem parecido ao meu, que rendeu boas risadas.

Ao Luís Cassanelli e a todo pessoal do Laboratório de Alta Tensão, pelo apoio durante minha Iniciação Científica.

Ao Paulo Miranda Nascimento, por transmitir de forma clara e concisa o intuito do método científico, e por me fomentar a ser mais questionador.

Ao professor Ivan Nunes da Silva, que me ministrou o curso de Sistemas Inteligentes, ensinando-me sobre redes neurais, sistemas *Fuzzy* e algoritmos genéticos. Seu livro e aulas foram imprescindíveis para a realização deste trabalho.

Ao Valdecir Antonio Paganin, por gentilmente me conceder permissão para utilizar dados de seu artigo, referenciado na bibliografia, para que pudesse realizar parte deste trabalho.

À secretária do departamento de engenharia elétrica, Jussara Ramos. Por sempre estar disposta a ajudar os alunos, sempre mantendo sua simpatia e solicitude.

À Universidade de São Paulo, por proporcionar recursos para uma formação ímpar.

A todos os funcionários da EESC e do departamento de engenharia elétrica.

A todos que com frequência me ajudaram em momentos de tensão. Contribuindo de forma direta ou indireta para que eu conseguisse concluir essa fase na minha vida.

*“Quase todos os homens são capazes de suportar adversidades,
mas se quiser pôr à prova o caráter de um homem,
dê-lhe poder.”
(Abraham Lincoln)*

Resumo

Este trabalho de conclusão de curso visa caracterizar a modelagem matemática básica de uma célula a combustível de membrana polimérica, e realizar simulações em ambiente computacional Matlab-Simulink. O objetivo da simulação é de conhecer a influência dos parâmetros empíricos, inerentes à fabricação da célula, na curva de polarização (tensão versus corrente) de uma célula a combustível de membrana polimérica genérica. Ao obter-se um ambiente de simulação com dados representativos, foi possível utilizá-los em treinamento e validação de redes neurais artificiais. As redes neurais artificiais utilizadas neste trabalho, visam generalizar o modelo matemático proposto, de forma simples, para aplicações que focam em baixo custo e rápido processamento de dados.

Palavras-chave: Célula a combustível; hidrogênio; modelagem; simulação computacional; sistemas inteligentes; redes neurais artificiais.

Abstract

This term paper aims to characterize the mathematical modeling of a polymeric membrane fuel cell, and perform simulations using computing environments on Matlab-Simulink. The simulation's objective is to know the influence of empirical parameters, related to the fabrication of the cell, on a generic polymeric membrane fuel cell polarization curve (voltage versus current). Achieving a simulation environment with representative data, it was possible to use them on artificial neural networks training and validation. The neural networks that were used on this term paper, aim to generalize the proposed mathematical model, in a simple way, for applications that focus in low costs and fast data processing.

Key-words: Fuel cell; hydrogen; modelling; computacional simulation; intelligent systems; artificial neural networks.

Lista de ilustrações

Figura 1 – Célula a combustível presente no laboratório	26
Figura 2 – Célula a combustível presente no laboratório - Perfil para visualização de entrada de ar na placa de difusão de gases	26
Figura 3 – Funcionamento básico de uma célula a combustível	28
Figura 4 – Bloco calculador da tensão de Nernst	42
Figura 5 – Visão geral do bloco da célula no simulink	43
Figura 6 – Visão geral do bloco de funcionamento da célula no simulink	44
Figura 7 – Influência do coeficiente de transferência de carga na tensão de saída .	45
Figura 8 – Influência da corrente de troca na tensão de saída	46
Figura 9 – Influência da resistência interna na tensão de saída	47
Figura 10 – Influência da corrente limitante na tensão de saída	48
Figura 11 – Influência da temperatura na tensão de saída	49
Figura 12 – Influência da pressão do combustível na tensão de saída	50
Figura 13 – Influência do uso de oxigênio puro na tensão de saída	51
Figura 14 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 3)	52
Figura 15 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 4)	53
Figura 16 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 5)	53
Figura 17 – Ilustração de um neurônio	55
Figura 18 – Ilustração de uma rede Perceptron	56
Figura 19 – Gráficos ilustrativos das funções degrau e degrau bipolar	57
Figura 20 – Ilustração do processo de convergência	59
Figura 21 – Ilustração da região de separabilidade	59
Figura 22 – Generalização de uma rede Perceptron multi camadas	60
Figura 23 – Gráfico da função tangente hiperbólica	61
Figura 24 – Denominação de parâmetros para treinamento de uma rede PMC . . .	62
Figura 25 – Visualização dos pontos de máxima potência calculados frente à simula- ção (pontos em asterisco advêm da resolução numérica)	63
Figura 26 – Ilustração do treinamento de uma rede neural via Matlab	66
Figura 27 – Influência do coeficiente de transferência de carga na tensão de saída .	79
Figura 28 – Influência do coeficiente de transferência de carga na potência de saída	80
Figura 29 – Influência do coeficiente de transferência de carga na eficiência	80
Figura 30 – Influência da corrente de troca na tensão de saída	81
Figura 31 – Influência da corrente de troca na potência de saída	81
Figura 32 – Influência da corrente de troca na eficiência	82
Figura 33 – Influência da resistência interna na tensão de saída	82
Figura 34 – Influência da resistência interna na potência de saída	83

Figura 35 – Influência da resistência interna na eficiência	83
Figura 36 – Influência da corrente limitante na tensão de saída	84
Figura 37 – Influência da corrente limitante na potência de saída	84
Figura 38 – Influência da corrente limitante na eficiência	85
Figura 39 – Influência da temperatura na tensão de saída	85
Figura 40 – Influência da temperatura na potência de saída	86
Figura 41 – Influência da temperatura na eficiência	86
Figura 42 – Influência da pressão do combustível na tensão de saída	87
Figura 43 – Influência da pressão do combustível na potência de saída	87
Figura 44 – Influência da pressão do combustível na eficiência	88
Figura 45 – Influência do uso de oxigênio puro na tensão de saída	88
Figura 46 – Influência do uso de oxigênio puro na potência de saída	89
Figura 47 – Influência do uso de oxigênio puro na eficiência	89

Lista de tabelas

Tabela 1	–	Tabela de constantes usadas no trabalho	29
Tabela 2	–	Tabela de dados de ajuste de curva referentes às figuras do artigo	53
Tabela 3	–	Parâmetros constantes na simulação	64
Tabela 4	–	Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro α . .	67
Tabela 5	–	Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro R_i .	67
Tabela 6	–	Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro I_{th} .	67

Lista de abreviaturas e siglas

PEMFC	<i>Proton Exchange Membrane Fuel Cell</i> - Célula a combustível de membrana de troca de prótons
PEM	<i>Proton Exchange Membrane</i> - Membrana de troca de prótons
CC	Corrente Contínua
RNA	Rede Neural Artificial
PMC	Perceptron Multi Camadas
MPPT	<i>Maximum Power Point Tracking</i> - Rastreamento de ponto de máxima potência

Lista de símbolos

$H_{f_{H_2O}}$	Entalpia de formação da água
$H_{f_{H_2}}$	Entalpia de formação do gás hidrogênio
$H_{f_{O_2}}$	Entalpia de formação do gás oxigênio
e^-	Um elétron
q_{e^-}	Carga elementar de um elétron
ΔH	Variação da entalpia da reação global
ΔS	Variação da entropia da reação global
n	Número de elétrons participantes da reação
F	Constante de Faraday
R	Constante universal dos gases
M_{H_2}	Massa molar do gás hidrogênio
M_{O_2}	Massa molar do gás oxigênio
M_{H_2O}	Massa molar da água
T	Temperatura do ambiente
P_o	Pressão de referência
P_{H_2}	Pressão relativa do combustível hidrogênio
P_{O_2}	Pressão relativa do oxigênio
V_o	Tensão padrão da equação de Nernst
V_{Nernst}	Tensão de saída da célula (Equação de Nernst completa)
$V_{saída}$	Tensão de saída da célula considerando perdas
η_{cell}	Rendimento da célula
I	Corrente de saída da célula/ Corrente de carga
α	Coeficiente de transferência de carga

I_o	Corrente de troca
R_i	Resistência interna
I_{th}	Corrente limitante (<i>threshold</i>)
H_2	Quantidade de hidrogênio (mol)
ρ_{H_2}	Densidade do gás hidrogênio
δ_{H_2}	Taxa de consumo de hidrogênio
δ_{O_2}	Taxa de consumo de oxigênio
δ_{Ar}	Taxa de consumo de ar ambiente
δ_{H_2O}	Taxa de geração de água
$P_{\acute{u}til}$	Potência elétrica útil de saída da célula
x_n	n-ésima entrada de um neurônio
w_n	n-ésimo peso sináptico de um neurônio
θ	Limiar de ativação de um neurônio
$g(.)$	Função de ativação da saída de um neurônio
η	Taxa de aprendizagem

Sumário

1	INTRODUÇÃO	25
1.1	Funcionamento da célula a combustível	26
1.2	Características elétricas da célula	27
1.3	Utilização de redes neurais artificiais	29
2	DESENVOLVIMENTO TEÓRICO	31
2.1	Energia do hidrogênio	31
2.2	Energia livre de Gibbs	32
2.3	Energia livre de Gibbs para representar o trabalho útil	32
2.4	Efeito da temperatura	33
2.5	Efeito da pressão	33
2.6	Equação de Nernst	34
2.7	Eficiência da célula	35
2.8	Perdas na célula	35
2.9	Consumo de gases	36
2.9.1	Consumo de hidrogênio	36
2.9.2	Consumo de oxigênio	37
2.9.3	Produção de água	38
2.10	Ponto de máxima potência	38
3	SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL	41
3.1	Considerações para modelagem	41
3.2	Uso do Simulink	41
3.3	Influência do coeficiente de transferência de carga (α)	45
3.4	Influência da corrente de troca (I_o)	46
3.5	Influência da resistência interna (R_i)	47
3.6	Influência da corrente limitante (I_{th})	48
3.7	Influência da temperatura (T)	49
3.8	Influência da pressão do combustível (P_{H_2})	50
3.9	Influência do uso de oxigênio puro (P_{O_2})	51
3.10	Uso de <i>curve fitting</i>	51
4	REDES NEURAIS ARTIFICIAIS	55
4.1	Motivação histórica para o desenvolvimento de RNAs	55
4.2	Rede Perceptron	55
4.2.1	Treinamento da rede Perceptron	57

4.3	Rede Perceptron multi camadas utilizada no projeto	60
5	RESULTADOS	63
5.1	Confirmação do ponto de máxima potência	63
5.2	Treinamento das redes	64
5.3	Estudo de topologia de rede com menor erro	66
5.4	Melhores redes e topologias encontradas	68
6	CONCLUSÃO	69
	REFERÊNCIAS	71
	APÊNDICES	73
	APÊNDICE A – CÓDIGO DO BLOCO DE NERNST	75
	APÊNDICE B – CÓDIGO PARA REALIZAR TREINAMENTO DA REDE PMC	77
	APÊNDICE C – GRÁFICOS OBTIDOS EM SIMULAÇÃO	79

1 Introdução

No Brasil, o sistema elétrico é gerenciado em grandes blocos de energia, seja na geração, transmissão ou na distribuição de energia elétrica. São geradas enormes quantidades de energia elétrica para atender a demanda do país, e a distribuição dessa energia tem caráter de ser centralizada, devido à maioria da geração advir de hidrelétricas. Isto é, poucos pontos de geração para uma potência elevada. O trabalho aborda células combustíveis de baixa potência e temperatura de operação, o que justifica a pesquisa de células com tais características, para que elas possam ser introduzidas de forma eficiente e facilitada no cotidiano da população. As células a combustível podem ser bastante propensas para o uso domiciliar. Outro fator benéfico para o uso doméstico é de que as células são silenciosas, e diferentemente de geradores à combustão, o processo de conversão de energia da célula converte energia química em energia elétrica.

Pode-se notar que cada vez mais o número de aparelhos eletrônicos aumenta, por exemplo *smartphones*, *tablets*, *notebooks* e etc. Pode-se então fazer uso dessas células para geração distribuída, que é caracterizada por ser a distribuição de energia gerada próxima ao local de consumo, com vários blocos de geração de pequenas potências, com característica de geração descentralizada, antagonizando o cenário atual. Em um caso mais específico, um usuário pode gerar sua própria energia, de forma independente da rede, e pode vender sua energia se quiser, por exemplo. Dessa forma, uma maior implantação de células a combustível adiaria investimentos de grande porte em energia elétrica, além de propiciar maior economia, uma vez que não seria necessária a construção de linhas de transmissão.

Uma célula a combustível é um elemento que converte energia química em elétrica. Seu combustível na maioria dos casos é o hidrogênio, mas há aplicações que usam metanol, hidrocarbonetos, e outros compostos que possuam hidrogênio em sua composição. A célula a combustível pode ser utilizada em centrais de fornecimento, instalações remotas, energia distribuída, propulsão de veículos e unidades de serviço auxiliar, de forma eficiente e com a vantagem da co-geração (aproveitamento térmico) (ALDABO, 2004).

Neste trabalho, será utilizado como modelo de referência uma célula a combustível de membrana de troca de prótons, conhecida pela sua sigla em inglês, *PEMFC* (Protons exchange membrane fuel cell). A célula presente no laboratório (figura 1), foi gentilmente doada ao LAT (Laboratório de Alta Tensão) por um grupo de pesquisa do departamento de química da universidade (IQSC). Trata-se de uma PEMFC que não precisa de adução forçada de ar oxigênio, pois o ar entra por suas laterais através de pequenas vilosidades presentes na placa de difusão de gases, como é possível verificar na figura 2.



Figura 1 – Célula a combustível presente no laboratório

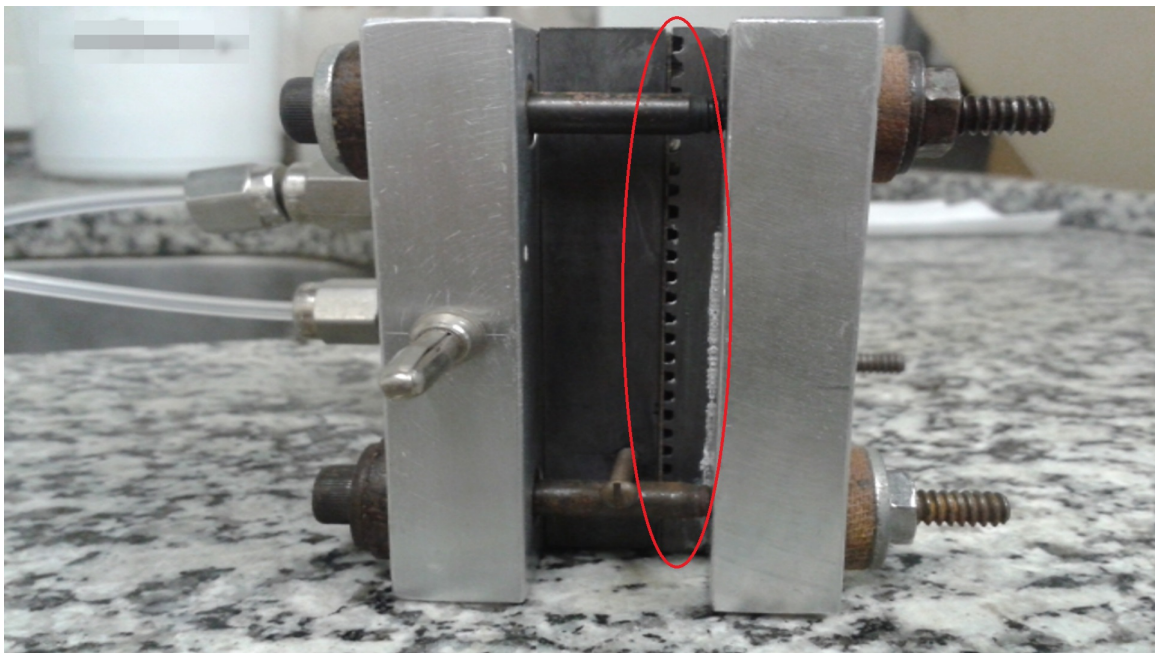


Figura 2 – Célula a combustível presente no laboratório - Perfil para visualização de entrada de ar na placa de difusão de gases

1.1 Funcionamento da célula a combustível

As células a combustível são equipamentos eletroquímicos que convertem energia química em energia elétrica, água e calor. Possuem características inerentes aos motores,

pois funcionam enquanto há combustível para alimentá-las e também relativas às baterias, pois produzem eletricidade a partir de um combustível, sem, no entanto, haver combustão ou geração de ruídos (ALI; SALMAN, 2006). Os principais combustíveis utilizados pela célula, hidrogênio e oxigênio, são abundantes na natureza. O oxigênio pode ser retirado diretamente do ar. O hidrogênio pode ser obtido de diversas fontes: eletrólise da água, gás natural, propano, metanol ou derivados do petróleo.

Existem diversos tipos de células a combustível, todas contendo uma membrana ou eletrólito, que é colocado entre dois eletrodos. As células podem ser classificadas quanto ao tipo de aplicações, eletrólito ou temperatura que utilizam em seu funcionamento. As células de carbonato fundido e de óxido sólido são células de altas temperaturas, e são utilizadas em estações estacionárias de geração de energia. Já as células alcalinas e as de membrana polimérica (PEMFC), são células de baixas temperaturas de operação (CELE et al., 2010) e usadas em aplicações domiciliares, laboratoriais e automotivas. A célula de membrana polimérica (PEMFC), que será abordada neste trabalho, utiliza uma membrana de Nafion como eletrólito, que possibilita a interação entre as moléculas de hidrogênio e de oxigênio. Utiliza ainda um catalizador de platina, que acelera a reação química do processo de geração de eletricidade.

Um problema característico deste tipo de tecnologia é a obtenção e o armazenamento do hidrogênio. Naturalmente, o hidrogênio se encontra combinado com outros elementos químicos, e faz-se necessário separá-lo para a utilização na célula. Pode-se usar então o metanol (rico em hidrogênio) como combustível da célula, reduzindo assim a complexidade do sistema como um todo. Nesta modelagem, no entanto, serão considerados apenas o hidrogênio puro e o oxigênio como combustíveis.

O rendimento de uma PEMFC chega a 80%, se o calor gerado pela célula puder ser utilizado (CELE et al., 2010). As restrições das aplicações práticas destas células concentram-se no elevado custo de produção, na obtenção e armazenamento do gás hidrogênio e na influência da temperatura na condutividade iônica e na estabilidade mecânica da célula. Apesar destes inconvenientes, a célula combustível tem um futuro muito promissor, uma vez que poderá suprir demandas locais de energia elétrica (baixas potências), bem como pode ser utilizada em automóveis e aparelhos portáteis.

1.2 Características elétricas da célula

A tensão elétrica de saída da célula é contínua, e depende da quantidade de corrente de carga e do fluxo de combustível que lhe atravessa na reação. Portanto, é necessário um sistema de gerenciamento e controle, para que se tenha funcionalidade do fornecimento de energia elétrica. A curva do gráfico tensão vs. densidade de corrente é denominada curva de polarização, que fornece a característica típica do comportamento da célula. Quando

esta se encontra em circuito aberto, apresenta uma tensão elétrica em seus terminais, que é denominada tensão elétrica de Nernst. Ao se conectar uma carga na célula, a tensão elétrica produzida assume valores diferentes da tensão de Nernst, e torna-se cada vez menor com o aumento da corrente de carga. Esta diferença entre a tensão real de saída da célula e a tensão de Nernst é devida às perdas do sistema, como a resistência elétrica própria da célula. Há as perdas ôhmicas, as perdas de ativação (que ocorre para baixas densidades de corrente) e as perdas por concentração (caracterizadas por diferentes concentrações dos reagentes ao longo dos canais que os conduzem) (LARMINIE; DICKS, 2003).

Basicamente, a célula a combustível de membrana polimérica opera da seguinte forma, didaticamente. Ao adentrar no ânodo, os átomos de hidrogênio, compostos de um elétron e um próton, se dividem. A membrana polimérica aceita somente passagem de prótons, que tomam rumo ao cátodo. Os elétrons, são obrigados a passar por um circuito externo (carga elétrica da célula) para chegarem ao cátodo. No cátodo, com a admissão de prótons (íons H^+), elétrons pelo circuito e gás oxigênio, ocorre a formação de água. A movimentação de elétrons por um circuito externo é o que resulta na transferência de potência elétrica pela célula. A figura 3 ilustra a descrição feita anteriormente.

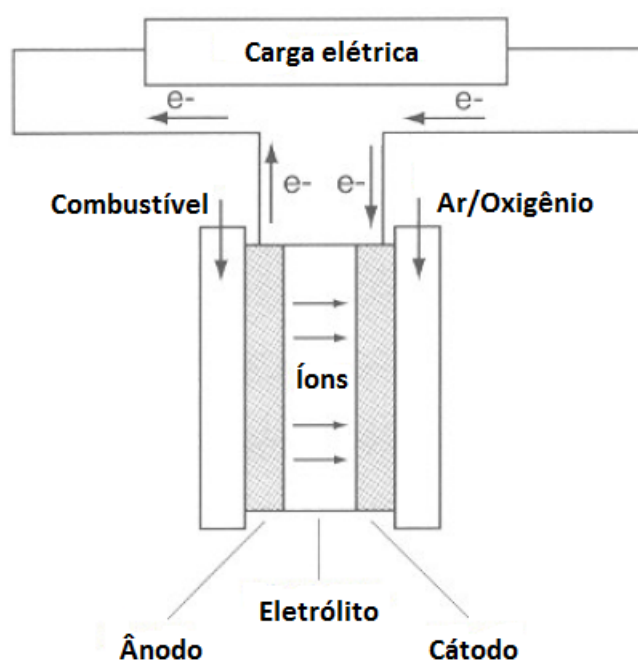


Figura 3 – Funcionamento básico de uma célula a combustível
(Adaptado de <http://www.ipv.pt/millennium/Millennium29/21.pdf>) - Acessada em 28/08/2016

Neste trabalho serão utilizadas algumas constantes, de conhecimento geral. A tabela 1, exprime os valores das constantes universais utilizadas.

Tabela 1 – Tabela de constantes usadas no trabalho

Parâmetro	Valor
ΔH	$-285,8 \text{ kJ/mol}$
ΔS	$-0,16328 \text{ kJ/mol.K}$
n	2 elétrons
F	$96485,3365 \text{ Coulumb/mol}$
R	$8.3144621 \text{ J/mol.K}$
M_{H_2}	$2,02 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$
M_{O_2}	$32 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$
M_{H_2O}	$18,02 \cdot 10^{-3} \text{ kg/mol}$
ρ_{H_2}	$0,08235 \text{ kg/m}^3$

1.3 Utilização de redes neurais artificiais

Uma rede neural artificial (RNA) é uma ferramenta de um conjunto de artifícios computacionais denominados sistemas inteligentes, que utilizam recursos de computação e programação para simular a resolução de problemas tal qual o cérebro humano faz. Avanços científicos na área de neurologia, fizeram a humanidade conhecer melhor a composição celular e o trânsito de impulsos no cérebro humano. Isso motivou o desenvolvimento de pesquisas relacionadas a conceber um método para simular o funcionamento do cérebro humano, iniciadas em meados do século XX por Hebb (1949)

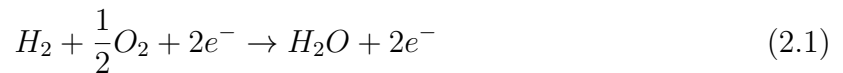
O objetivo deste trabalho é utilizar os dados da simulação computacional do modelo da célula para treinar redes neurais. Os dados de entrada da rede são diversos pontos de tensão e de corrente, referentes à operação da célula e sua curva de polarização. As saídas são os parâmetros empíricos da célula, descritos na modelagem. Com um modelo correto de funcionamento, e com dados para simulação e treinamento da rede, pode-se determinar parâmetros de células reais, com base nos dados de bancada. Isto possibilita, por exemplo, um consumidor aferir os dados de um determinado fabricante de células a combustível, ou um grupo de pesquisa conhecer de fato os parâmetros de uma célula experimental recém montada.

O resultado após treinamento e validação de uma rede neural é uma matriz de pesos sinápticos e os vetores de limiares de ativação. Simplesmente matrizes e vetores apenas. A vantagem da abordagem deste trabalho ser focada em redes neurais, é diminuir o custo, seja ele financeiro ou de processamento. Certamente foi necessário o uso de Matlab para simular o modelo e treinar a rede, mas após essas etapas, pode-se tomar as matrizes obtidas e descarregá-las na memória de algum microcontrolador, que por exemplo execute um algoritmo que controle a malha de saída de potência de uma célula a combustível. Monitorar o comportamento da célula e prever seus parâmetros enquanto a mesma opera, pode ser de grande valia para futuras aplicações, inclusive para monitorar se existe a

necessidade de uma futura manutenção no sistema da célula. O microcontrolador teria em sua memória as matrizes, e faria operações básicas de multiplicação e adição para obter os parâmetros empíricos por exemplo. Comparado à solução por ajuste de curvas, economiza-se financeiramente e em velocidade na obtenção de resultados utilizar uma abordagem de programar as matrizes das redes neurais em microcontroladores.

2 Desenvolvimento teórico

Células a combustível, conceitualmente operam de forma simples. Uma célula a combustível converte de energia eletroquímica presente em algum tipo de combustível em energia elétrica na forma de corrente contínua (CC). O combustível de operação é o gás hidrogênio, que será uma entrada do sistema. A célula também necessita de gás oxigênio para funcionar. De forma básica, o hidrogênio se combina com o oxigênio formando água, e energia é produzida no processo, tanto térmica (perdas), como elétrica. Pode-se notar que o processo de conversão de energia, é justamente o inverso da eletrólise. Será dado a seguir o embasamento teórico necessário, que justifica o uso da equação de Nernst, para o estudo em específico. A equação da reação química global é denotada a seguir:

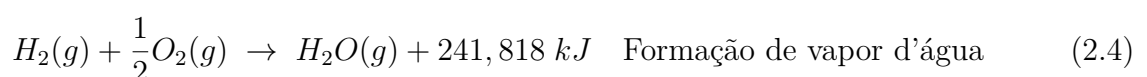
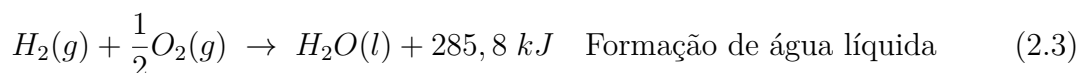


2.1 Energia do hidrogênio

A reação química da célula libera energia porque os estados energéticos anteriores eram maiores. Pode-se notar que a molécula de hidrogênio é altamente energética em relação a seu peso (ALDABO, 2004). A energia liberada pela reação química relaciona-se à variação da entalpia (ΔH). Quimicamente, a variação da entalpia depende dos coeficientes estequiométricos da reação, e da entalpia de formação dos reagentes e produtos. Por definição, a entalpia de formação de espécies elementares é igual a zero, e como os reagentes são gases elementares, a variação da entalpia da reação dependerá apenas da entalpia de formação da água

$$\Delta H = H_{f_{H_2O}} - H_{f_{H_2}} - \frac{1}{2} \cdot H_{f_{O_2}} \Rightarrow \Delta H = H_{f_{H_2O}} \quad (2.2)$$

Se o produto da reação for vapor de água, parte da energia disponível será usada para a vaporização da água. As equações químicas seguintes mostram a energia da reação, para cada caso. Foi fixada uma temperatura de reação de $25^\circ C$.



2.2 Energia livre de Gibbs

Para entender sobre o funcionamento da Célula, e sobre a espontaneidade da reação, faz-se uso do conceito da energia livre de Gibbs.

A energia livre de Gibbs é uma grandeza que define o total de energia associada a um sistema termodinâmico disponível para realizar trabalho útil. A variação da energia livre também diz se a reação ocorrerá de forma natural (espontânea) ou forçada. Se a variação da energia for positiva, o processo não é espontâneo. Porém, se a variação for negativa, o processo será espontâneo, que é o caso do funcionamento da célula combustível. As moléculas de hidrogênio possuem um alto estado energético, e ao entrarem em contato com o oxigênio, se combinam, estabelecendo um menor estado de energia. A variação da energia livre depende apenas dos estados iniciais e finais, portanto define-se a variação da energia livre de Gibbs.

$$\Delta G = G_f - G_i \quad (2.5)$$

Onde G_f é a energia final, e G_i é a energia inicial. Analisando a variação da energia é possível saber mais sobre o processo.

$$\begin{cases} \Delta G < 0 & \text{Espontâneo} \\ \Delta G > 0 & \text{Não Espontâneo} \end{cases} \quad (2.6)$$

2.3 Energia livre de Gibbs para representar o trabalho útil

Sabe-se que a energia livre de Gibbs está relacionada ao trabalho útil possível de ser realizado pelo sistema (no caso trabalho elétrico W_{EL}), portanto

$$W_{EL} = -\Delta G \quad (2.7)$$

A carga que passa durante a reação é o número de mols de elétrons vezes a carga do elétron

$$q = n \cdot N_{Avogadro} \cdot q_{e^-} \Rightarrow q = nF \quad (2.8)$$

Onde F é a constante de Faraday e n é o número de elétrons envolvidos na equação química global (no caso, são 2). Sabe-se que o trabalho elétrico se relaciona à carga da seguinte forma

$$W_{EL} = qV_o \quad (2.9)$$

É importante ressaltar que V_o é denotação de tensão elétrica. Com as três equações acima descritas, consegue-se obter, após feitas as substituições, que

$$\Delta G = -nF.V_o. \quad (2.10)$$

A forma útil da equação que será usada é

$$V_o = \frac{-\Delta G}{nF}. \quad (2.11)$$

Que representa a tensão de saída em função da variação da Energia Livre de Gibbs. Usando somente (2.11) obtém-se $V_o = 1,482 \text{ V}$ teóricos. Esse potencial é conhecido como potencial *termoneutro* (BARBIR, 2013). Ele é o máximo de tensão elétrica teórica possível de se obter da reação com o hidrogênio. Porém nesse estudo, serão imputadas as diversas perdas do processo, que são necessárias para a modelagem. A temperatura afeta consideravelmente o ponto de operação da célula.

2.4 Efeito da temperatura

A energia livre de Gibbs está muito relacionada à temperatura, de fato nessa abordagem ela depende da entalpia e da entropia da reação também. Pois de acordo com a entropia, um aumento na temperatura aumenta o nível de desordem da reação, fazendo com que parte da energia seja utilizada neste processo. A equação com o efeito da temperatura é deduzida abaixo.

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S \quad (2.12)$$

$$\Rightarrow V_o = - \left(\frac{\Delta H}{nF} - \frac{T\Delta S}{nF} \right) \quad (2.13)$$

Por exemplo, à 25°C a variação da entropia é de $-0,16328 \text{ kJ}/(\text{mol} \cdot \text{K})$. Isso implica em ΔG útil de $-237,34 \text{ kJ/mol}$, e portanto a tensão de saída será $1,23\text{V}$, para estas condições.

2.5 Efeito da pressão

A pressão das espécies da reação tem efeito na tensão de saída. Utilizando conceitos de termodinâmica, sabe-se que:

$$dG = V_m \cdot dP. \quad (2.14)$$

Onde V_m é o volume molar de uma dada amostra, assim como P é a pressão e G é a energia livre de Gibbs. Será feita recorrência da fórmula universal dos gases:

$$PV_m = RT. \quad (2.15)$$

Manipulando a equação(2.15) pode-se obter(2.14) escrita de outra forma:

$$dG = RT \frac{dP}{P} \Rightarrow G = G_o + RT \ln \frac{P}{P_o}. \quad (2.16)$$

A equação(2.16) descrita acima poderia ser melhor aproveitada se fosse descrita de forma variável, pois a análise é feita para a variação da Energia Livre de Gibbs. Para isso serão usados os coeficientes estequiométricos da equação química global (BARBIR, 2013). Será apresentada uma equação de uma reação química genérica, e efeito dos coeficientes estequiométricos sobre a energia livre de Gibbs:



$$\Rightarrow \Delta G = \Delta G_o + RT \ln \left[\frac{\left(\frac{P_C}{P_o}\right)^m \cdot \left(\frac{P_D}{P_o}\right)^n}{\left(\frac{P_A}{P_o}\right)^j \cdot \left(\frac{P_B}{P_o}\right)^k} \right]. \quad (2.18)$$

As pressões que são argumento do logarítmo natural na equação(2.18) são descritas na forma de pressão parcial, isto é, a pressão absoluta dividida por uma pressão de referência P_o (geralmente 1 atm). A partir deste ponto, todas as pressões presentes nas seguinte equações e os parâmetros de pressão serão dados em termos de pressões parciais. Em termos da PEMFC:

$$\Delta G = \Delta G_o + RT \cdot \ln \left[\frac{P_{H_2o}}{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{\frac{1}{2}}} \right]. \quad (2.19)$$

2.6 Equação de Nernst

Utilizando as equações de potencial padrão, de efeito da temperatura e de efeito da pressão, obtém-se a Equação de Nernst. Ela será a base do modelo utilizado, e representa fielmente os parâmetros básicos de entrada e saída de uma célula convencional

$$V_{nernst} = V_o + \frac{RT}{nF} \cdot \ln \left(\frac{P_{H_2} \cdot P_{O_2}^{\frac{1}{2}}}{P_{H_2o}} \right) \quad (2.20)$$

É importante notar que o argumento do logarítmo da equação(2.19) inverteu na Equação de Nernst devido ao sinal negativo presente em (2.11).

2.7 Eficiência da célula

A eficiência termodinâmica pode ser calculada da seguinte forma:

$$\eta_{cell} = \frac{\Delta G}{\Delta H} \quad (2.21)$$

Em teoria, a eficiência é de 83 % à 25 °C. Não consegue se atingir esta eficiência na prática, pois há perdas no sistema, que serão discutidas. Uma abordagem para o cálculo da célula em questão é utilizar a tensão de saída em circuito aberto e dividi-la pelo potencial termoneutro. O erro passível de ser cometido nessa aproximação é devido à precisão de casas decimais utilizadas e à temperatura padrão utilizada para determinar a variação da entalpia.

$$\eta_{cell} = \frac{V_{aberto}}{1,4812 V} \quad (2.22)$$

2.8 Perdas na célula

Sabe-se que a célula a combustível fornecerá uma tensão de saída segundo a equação de Nernst (2.20). Essa tensão contudo é somente para circuito aberto, e não representa de forma fidedigna a realidade da célula em operação, quando é drenada corrente elétrica da mesma. As perdas de tensão da célula podem ser modeladas de acordo com o ponto de operação de corrente da mesma, como feito em (BARBIR, 2013; NEHRIR; WANG, 2009).

As perdas que serão consideradas são perdas por ativação, ôhmicas e por concentração. Essas perdas podem ser modeladas como quedas de tensão presentes na célula de tal forma:

$$V_{saída} = V_{Nernst} - V_{act} - V_{ohm} - V_{conc}. \quad (2.23)$$

As perdas por ativação ocorrem devido à inércia dos reagentes no sistema da célula, e portanto afetam bastante o desempenho da célula para correntes pequenas, inerentes ao início do funcionamento da célula. Elas têm valor considerável para pequenos valores de corrente, mas com correntes maiores essas perdas diminuem, em proporção. Sua modelagem proposta é descrita abaixo pela equação (2.24). Seus parâmetros empíricos são: α , denominado coeficiente de transferência de carga; e I_o , denominada corrente de troca.

$$V_{act} = \frac{RT}{\alpha n F} \cdot \ln \left(\frac{I}{I_o} \right) \quad (2.24)$$

As perdas ôhmicas ocorrem devido à resistência elétrica que a célula oferece ao elétrons. São perdas de resistência intrínseca à célula e também devido à resistência do

cátodo do ânodo e dos elementos de conexão do circuito. Seu parâmetro empírico pode ser sintetizado apenas por R_i , que representa a contribuição de todos os elementos resistivos de perda. As perdas dependem da corrente que flui pela célula, e da própria resistência da mesma, logo:

$$V_{ohm} = R_i \cdot I \quad (2.25)$$

As perdas por concentração ocorrem devido à lentidão do sistema em repor os reagentes da reação. Isso pois quanto maior a corrente drenada, maior é a quantidade de fluxo de hidrogênio demandada, e para a concepção estrutural da célula há um limite do quanto a mesma pode transportar e repor o hidrogênio demandado. Seu parâmetro empírico de modelagem é a corrente de corte ou limitante (ou *threshold* do inglês): I_{th} . Esse tipo de perda é característico de altos valores de corrente, sendo um fator limitante superior para condução de corrente e portanto transferência de energia.

$$V_{conc} = \frac{RT}{nF} \cdot \ln \left(\frac{I_{th}}{I_{th} - I} \right) \quad (2.26)$$

Portanto, através das equações de perdas modeladas acima, pode-se obter uma boa estimativa da tensão de saída da célula de acordo com parâmetros de entrada e corrente de carga, conforme descrito pela equação (2.23).

2.9 Consumo de gases

É de extrema importância aos grupos de pesquisa conhecer o consumo dos gases, principalmente do hidrogênio, o combustível, assim como apresentado por Larminie e Dicks (2003). Conhecer o consumo de hidrogênio poderá dizer se haverá desperdício de hidrogênio em ensaios futuros de grupos de pesquisa, pois se o fluxo de hidrogênio for muito maior do que o hidrogênio demandado, o seu excesso será ejetado pela saída do ânodo da célula. Se a célula a combustível não possuir um sistema de readmissão do hidrogênio excedente, o mesmo será desperdiçado.

2.9.1 Consumo de hidrogênio

A corrente drenada da célula está intimamente ligada ao consumo de hidrogênio pois ele é a única fonte de elétrons livres do sistema. A carga elétrica total transferida pela reação química é dada pelo coeficiente estequiométrico dos elétrons da reação global (n), pela carga de um mol de elétrons dada pela constante de Faraday (Coulomb/mol)

multiplicada por um mol de hidrogênio (denotado por H_2):

$$Q_{el} = 2F.H_2. \quad (2.27)$$

Na forma diferencial, (2.27) se torna:

$$dQ_{el} = 2F.dH_2. \quad (2.28)$$

Derivando a equação acima no tempo, obtemos uma equação que relaciona corrente (carga pelo tempo) com hidrogênio:

$$I = 2F.\delta_{H_2}, \quad (2.29)$$

ou simplesmente

$$\delta_{H_2} = \frac{I}{2F} \quad mol/s. \quad (2.30)$$

Onde δ_{H_2} é a taxa de consumo de hidrogênio, em mols por segundo. Porém deseja-se adequar a equação (2.30) para obter-se dimensões de consumo mais palpáveis. Para isso, multiplica-se a equação (2.30) pela massa molar do gás hidrogênio (M_{H_2}) que é conhecida e representada na tabela 1:

$$\delta_{H_2} = \frac{M_{H_2}I}{2F} \quad kg/s. \quad (2.31)$$

A equação (2.31) representa, de forma aceitável, a taxa de consumo do combustível da célula do tipo PEM.

2.9.2 Consumo de oxigênio

De forma análoga ao consumo de hidrogênio, o consumo de oxigênio pode ser descrito através da constante de Faraday, da corrente de carga e da massa molar do oxigênio, salvo uma alteração estequiométrica:

$$\delta_{O_2} = \frac{M_{O_2}I}{4F} \quad kg/s. \quad (2.32)$$

Caso se utilize o ar ambiente ao invés de oxigênio puro, aplica-se uma constante de proporcionalidade, que representa a porcentagem da contribuição do oxigênio no ar atmosférico:

$$\delta_{Ar} = \frac{M_{O_2}I}{4F} \cdot \frac{1}{0,21} \quad kg/s. \quad (2.33)$$

2.9.3 Produção de água

Sabe-se que um produto da reação química da célula é a água, e ela possui o mesmo coeficiente estequiométrico que o hidrogênio na reação química (2.1). Portanto a equação de produção de água será similar, ponderada pela massa molecular da água:

$$\delta_{H_2O} = \frac{M_{H_2O}I}{2F} \quad kg/s. \quad (2.34)$$

Um exemplo prático é feito em (LARMINIE; DICKS, 2003), onde mostra-se que um conjunto de células de 1 *kW* operando com tensão de 0,7 *V* produz 0,48 *kg* de água em uma hora, praticamente meio litro.

2.10 Ponto de máxima potência

Dependendo da aplicação, é de interesse conhecer-se o ponto máximo de potência da célula. Antes desse ponto, a potência é menor devido a uma corrente baixa, e após esse ponto a potência é menor também pois a potência dissipada pelas perdas supera a potência útil do circuito externo. Para encontrar este ponto, toma-se a equação (2.23) e ela é multiplicada pela corrente, conseguindo assim potência:

$$P_{\text{útil}} = I \cdot V_{\text{saída}} = I \cdot (V_{\text{Nernst}} - V_{\text{act}} - V_{\text{ohm}} - V_{\text{conc}}). \quad (2.35)$$

Para se encontrar o ponto de máxima potência, basta derivar (2.35) em relação à corrente, e igualar a expressão a zero:

$$\frac{dP_{\text{útil}}}{dI} = 0. \quad (2.36)$$

Com auxílio das equações (2.24), (2.25) e (2.26) de perdas já exibidas, resolve-se a derivada de (2.36). O resultado que se obtém é o máximo ponto de potência:

$$\frac{\Delta H - T\Delta S}{RT} = \ln(P_{H_2}P_{O_2}^{\frac{1}{2}}) - \frac{1}{\alpha} \left[\ln\left(\frac{I}{I_o}\right) + 1 \right] - \frac{2nR_iIF}{RT} - \ln\left(1 - \frac{I}{I_{th}}\right) + \frac{I}{I - I_{th}}. \quad (2.37)$$

Por fim, resolve-se a equação (2.37) utilizando um método numérico para resolução de equações não lineares. Dadas as condições de operação e os parâmetros empíricos, determina-se com precisão o ponto de máxima potência. Os resultados desta manipulação matemática são apresentados no capítulo 5 deste trabalho.

Derivar a equação de potência da célula e igualar a zero, matematicamente expressa a possibilidade de encontrar-se um ponto de máximo ou de mínimo local. Isto não é suficiente para afirmar-se que o resultado da equação (2.37) resultará em um ponto de

máxima potência, pois pode acusar um ponto mínimo. Para isso, é necessário derivar novamente a equação (2.35) em relação à corrente, e analisar se o resultado é negativo ou positivo. Se a segunda derivada for negativa, pode-se concluir que o ponto encontrado é um ponto de máximo, pois indica a tendência da taxa de crescimento da curva, que em um ponto de máximo, é decair. Com base em (2.37), sabe-se que:

$$\frac{dP_{\text{útil}}}{dI} = -\frac{\Delta H - T\Delta S}{RT} + \ln(P_{H_2}P_{O_2}^{\frac{1}{2}}) - \frac{1}{\alpha} \left[\ln\left(\frac{I}{I_o}\right) + 1 \right] - \frac{2nR_iIF}{RT} - \ln\left(1 - \frac{I}{I_{th}}\right) + \frac{I}{I - I_{th}}. \quad (2.38)$$

Derivando-se novamente a equação acima, em relação à corrente, encontra-se:

$$\frac{d^2P_{\text{útil}}}{dI^2} = 0 - \frac{1}{\alpha I} - \frac{2nR_iF}{RT} - \frac{1}{I_{th}} \cdot \frac{I_{th}}{I_{th} - I} + \frac{(I - I_{th}) - I}{(I - I_{th})^2}, \quad (2.39)$$

que simplifica-se da seguinte forma

$$\frac{d^2P_{\text{útil}}}{dI^2} = -\frac{1}{\alpha I} - \frac{2nR_iF}{RT} - \frac{1}{I_{th} - I} - \frac{I_{th}}{(I - I_{th})^2}. \quad (2.40)$$

A equação (2.40) terá sempre resultado negativo. Todos os seus termos têm índice negativo, e dependem apenas de constantes que são sempre positivas, ou da corrente, que pela definição de sinal e modelagem, vai ser sempre positiva pois seu sentido de condução não mudará. Há um termo onde há a presença de $I_{th} - I$. Este termo sempre será positivo, pois o universo de discurso da variável de corrente, I , é definido de 0 até I_{th} . Desta forma a corrente nunca ultrapassará um valor maior que o limiar de corrente, pois até conforme o modelo descreve, este é um valor de máxima condução de corrente da célula. Portanto, é plausível afirmar que

$$\frac{d^2P_{\text{útil}}}{dI^2} < 0, \quad (2.41)$$

ou seja, o ponto encontrado pela equação (2.37) sempre será um ponto de máximo, para valores de corrente dentro dos limites de operação.

3 Simulação computacional

Neste capítulo será introduzido o método utilizado para realizar a simulação, tal como os meios utilizados, as considerações feitas e o método de operação da célula. Na maioria das modelagens de diversos sistemas, é comum se partir de um modelo ideal e simples, e após isso são caracterizadas e modeladas as imperfeições e características específicas do sistema, a fim de se obter o melhor custo benefício da aproximação.

3.1 Considerações para modelagem

Para o uso de um modelo mais simplificado em simulação computacional, serão reputados alguns tópicos acerca do modelo e do funcionamento da PEMFC, conforme proposto por NEHRIR e WANG (2009).

- a) Tratamento unidimensional do fluxo de gases da célula
- b) Gases são ideais e têm distribuição uniforme
- c) Pressão é constante nos canais de fluxo de gás
- d) Tanto H_2 como O_2 são umidificados
- e) A célula opera em temperaturas menores que $100^\circ C$ e o produto da reação sai na forma líquida ($P_{H_2O} = 1$)
- f) As propriedades e cálculos que concernem temperaturas utilizarão a temperatura média da célula (não em um ponto específico). As variações de temperatura dentro da célula serão desconsideradas, e o calor específico médio da célula é tomado como constante
- g) Será utilizado o ar presente na atmosfera como fonte de oxigênio ($P_{O_2} = 0,21$)

3.2 Uso do Simulink

Para criar-se o modelo computacional, foi utilizada a ferramenta de simulações do Matlab, o Simulink. O simulink é útil para a simulação para gerar vetores de dados com facilidade, e também para trabalhos futuros, onde há a possibilidade de se refinar o modelo considerando seus transientes, devido ao efeito capacitivo. Nele foi criado um ambiente de trabalho, um projeto, onde estão contidos os blocos das funções matemáticas e tudo que é necessário para a transformação da teoria em prática. Desta forma, a simulação apenas

trata a célula em regime permanente, e a forma temporal na qual o simulink trabalha entra de acordo com a curva de polarização clássica de células a combustível.

No ambiente, há um bloco de função especial, que calcula a tensão de saída da célula, numericamente, segundo a equação de Nernst, dada as entradas (temperatura e pressões). A figura 4 mostra o bloco em questão, cuja saída é um valor numérico para tensão. O código do cálculo está no apêndice A deste documento para visualização.

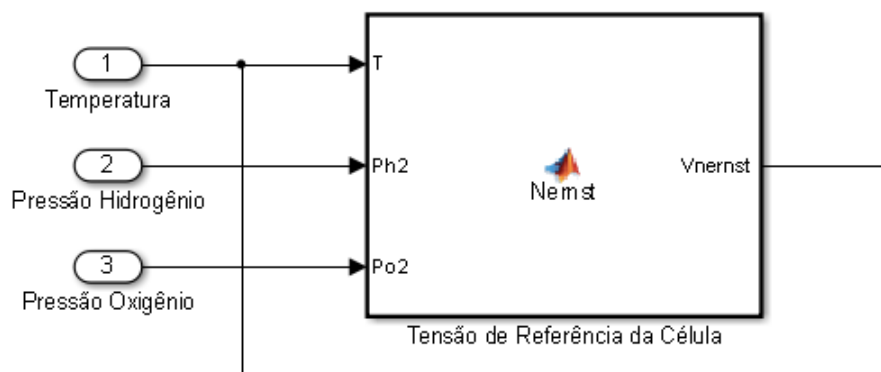


Figura 4 – Bloco calculador da tensão de Nernst

Após o cálculo, o valor da tensão é subtraído das perdas existentes, já explicitadas neste trabalho. Os blocos das perdas estão logo abaixo do bloco de Nernst. O valor final de tensão passa por um bloco de uso elétrico, cuja finalidade é criar uma fonte de tensão controlada, segundo o valor numérico. Essa tensão é a saída final da célula. Por conveniência, colocou-se todos os blocos de cálculo (Nernst, perdas e conversão para tensão no ambiente) em um único bloco. A figura 5 mostra o bloco da célula internamente em sua totalidade.

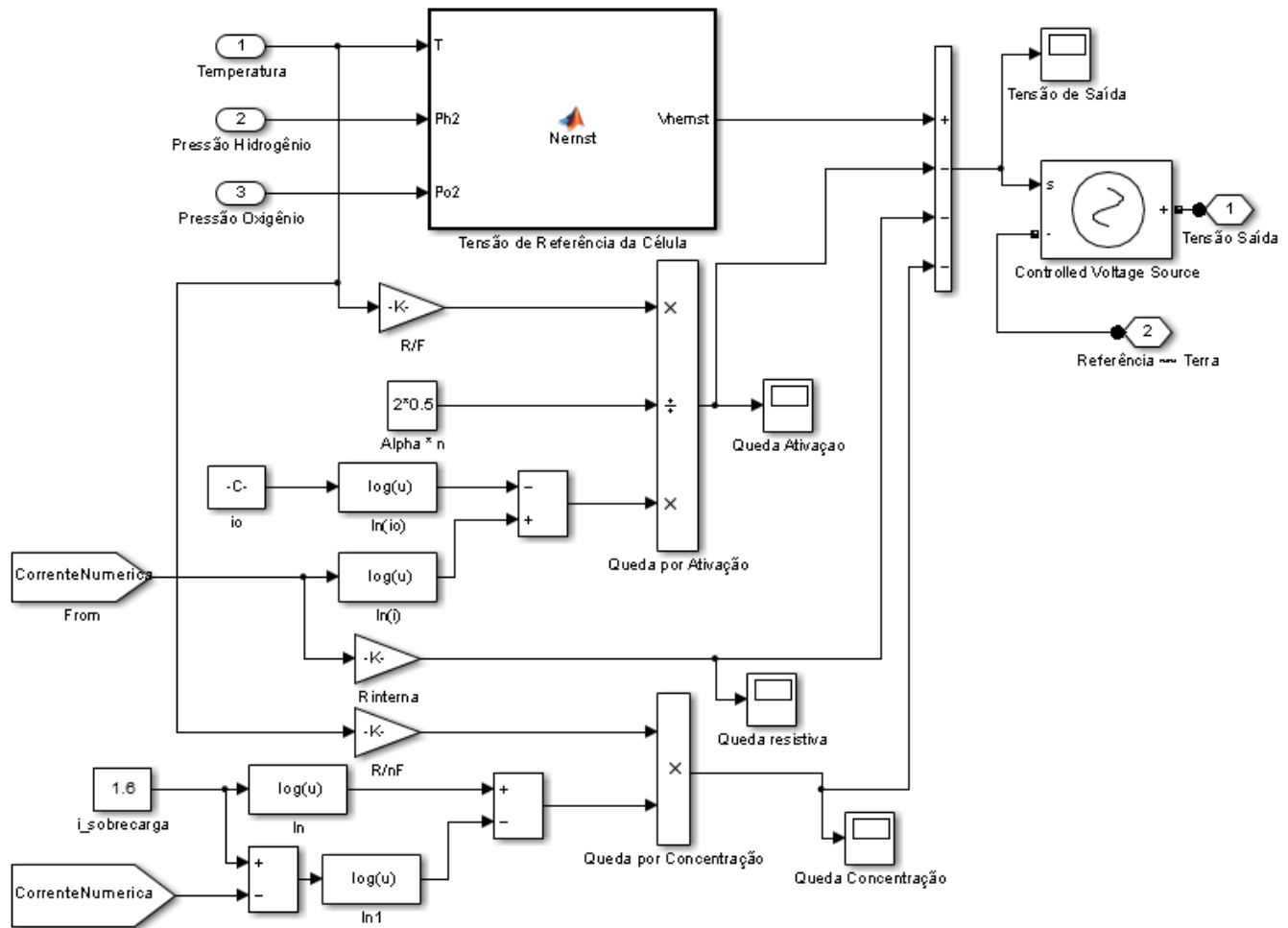


Figura 5 – Visão geral do bloco da célula no simulink

Para simular a célula sob operações de diferentes valores de correntes, foi inserido em seus terminais, uma fonte de corrente controlada variável, que atua como carga na célula, conforme elaborado no trabalho de Smarssaro (2007). O padrão de variação de corrente escolhido foi uma rampa, que faz com que a corrente suba seu valor em um a cada segundo de simulação. Assim com blocos de medição é possível mandar os dados para o espaço de trabalho e traçar gráficos que serão expostos nos resultados e usados nas redes neurais. É importante ressaltar que para uma melhor precisão na análise dos resultados variantes, foi utilizado um tempo de passo de 0,01 segundos, ou seja, passos de 10 *mA* de corrente na curva de polarização da célula. A figura 6 mostra o esquema de ligação da fonte de corrente e seu funcionamento.

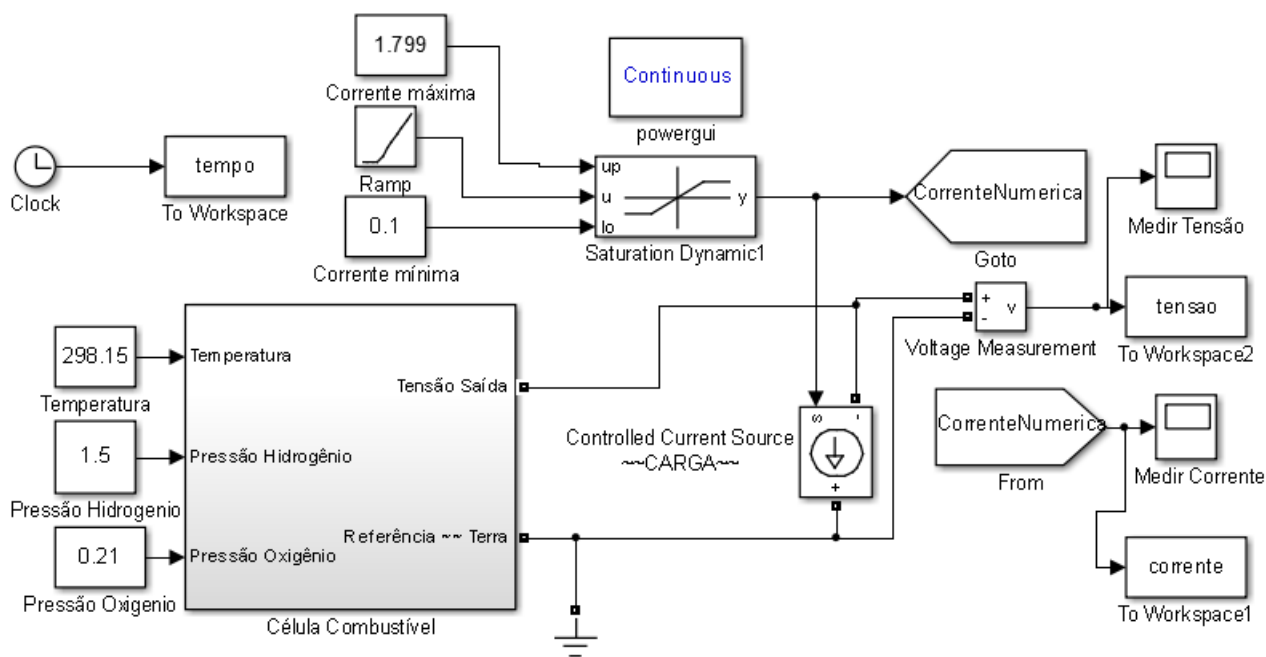


Figura 6 – Visão geral do bloco de funcionamento da célula no simulink

A próxima seção entrará em detalhes dos resultados obtidos em simulação, quanto à variação dos parâmetros empíricos e outros fatores.

3.3 Influência do coeficiente de transferência de carga (α)

A figura 7 mostra a influência do coeficiente de transferência de carga na tensão de saída, que relaciona-se com as perdas por ativação. Nota-se que é desejável que este parâmetro seja o maior possível, melhorando a eficiência e diminuindo as perdas de tensão. Este parâmetro varia de 0 a 1, indicando a eficiência na troca de carga elétrica no cátodo e no ânodo. Pode-se observar que o parâmetro afeta a curva de polarização principalmente no valor de tensão para correntes pequenas. A inclinação da curva praticamente fica constante, tampouco o limiar de condução. Este tipo de perda, conforme comentado anteriormente, é notório para pequenos valores de corrente, como pode-se ver na figura 7. Quanto menor for α , maiores são as perdas no início da condução.

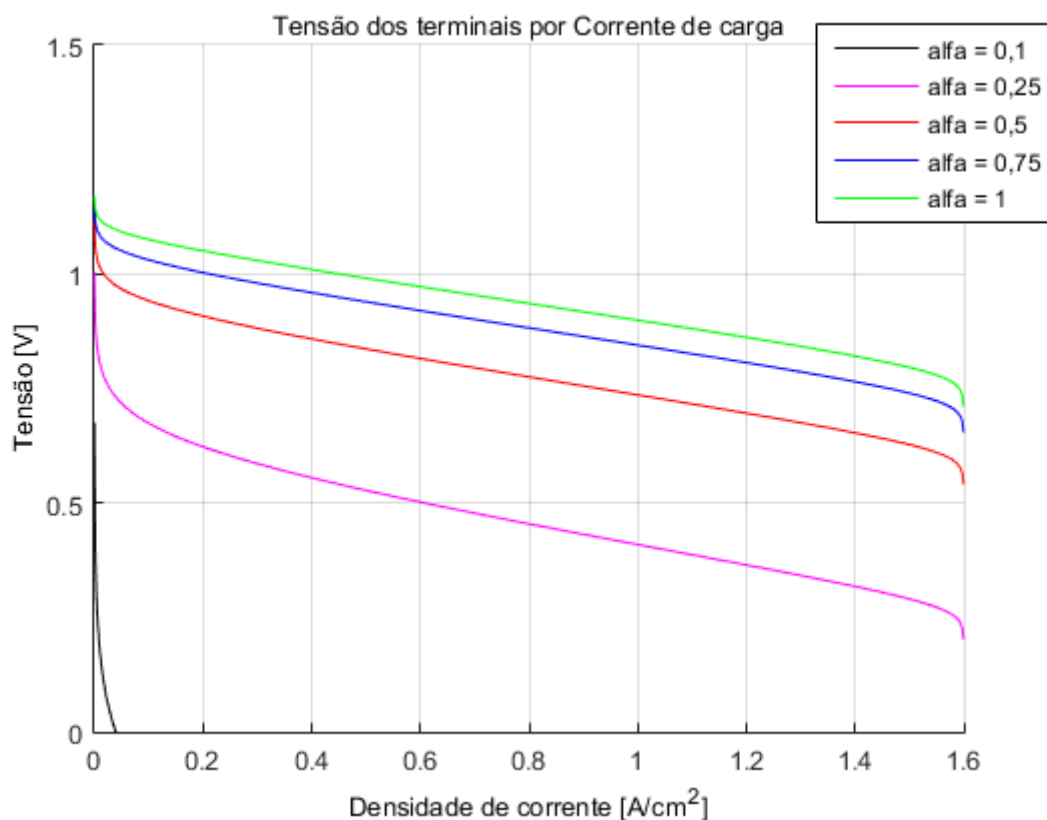


Figura 7 – Influência do coeficiente de transferência de carga na tensão de saída

3.4 Influência da corrente de troca (I_o)

A figura 8 mostra a influência da corrente de troca na tensão de saída. Nota-se que esse parâmetro afeta diretamente a ativação da célula para correntes baixas, como previsto. E com menores correntes de troca, há maiores perdas, perdas estas que não afetam a inclinação da curva. Percebe-se que são somente perdas subtrativas. Esta tendência confirma-se pelo fato desta perda ser modelada pela corrente dividida pela corrente de troca, como argumento de um logaritmo. Diferentemente do coeficiente de transferência de carga, a corrente de troca apresenta uma linearidade com a corrente, pois são argumentos do logaritmo.

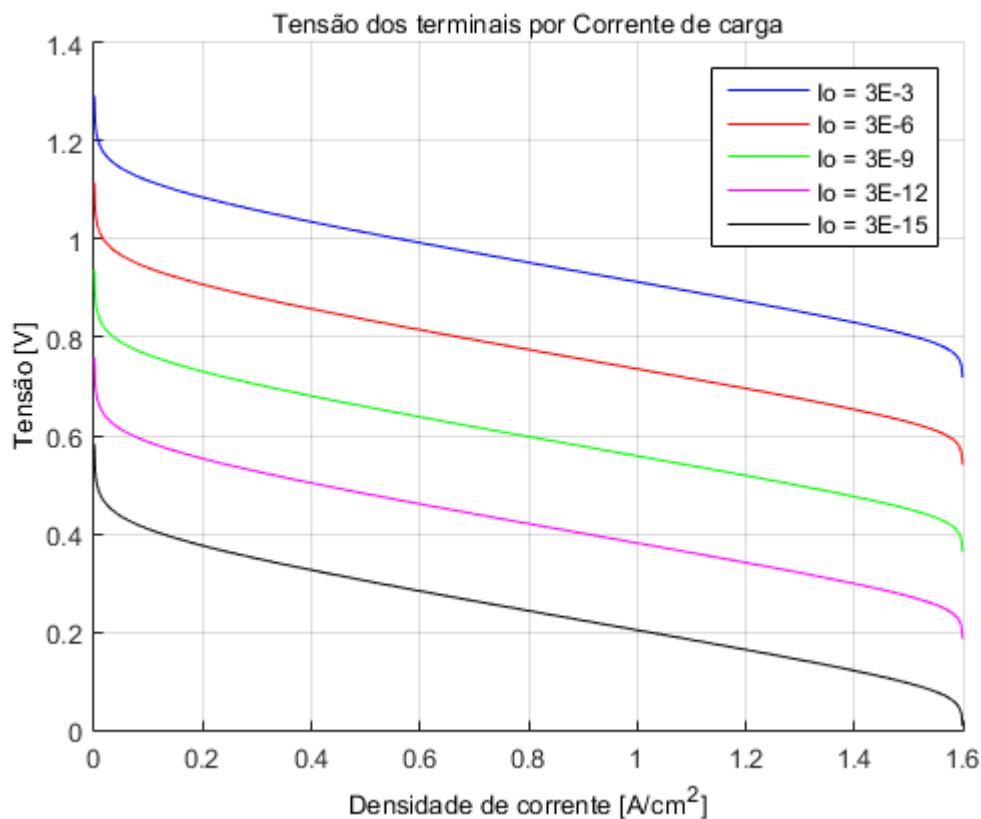


Figura 8 – Influência da corrente de troca na tensão de saída

3.5 Influência da resistência interna (R_i)

A figura 9 mostra a influência da resistência interna na tensão de saída. Pode-se notar que a resistência afeta diretamente com a inclinação das curvas de tensão, que mantêm praticamente o mesmo ponto de partida para corrente nula, e que também são limitadas pela mesma corrente de corte no final. Para menores resistências, menores são as perdas, e melhor eficiência atinge-se no conjunto da célula.

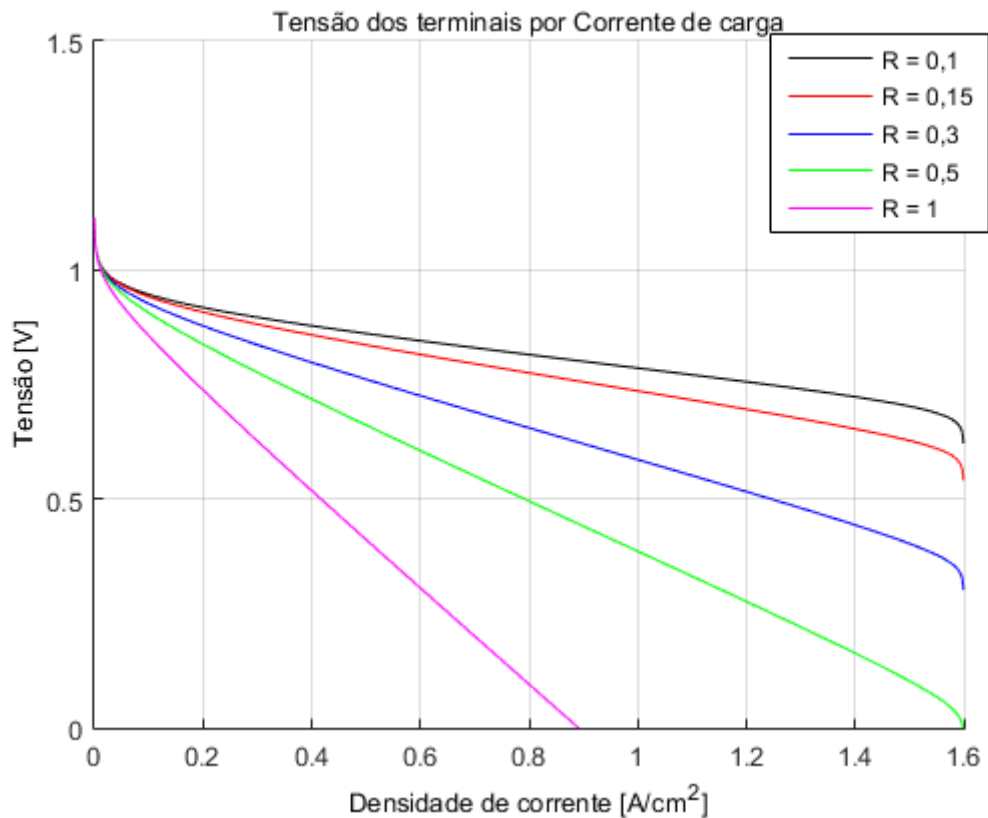


Figura 9 – Influência da resistência interna na tensão de saída

3.6 Influência da corrente limitante (I_{th})

A figura 10 mostra a influência da corrente limitante na tensão de saída. Percebe-se que para o início de condução de corrente e correntes medianas não há muito efeito deste parâmetro. Porém, ele é um fator limitante superior de condução de corrente, como pode-se ver. A tensão efetiva da célula cai abruptamente quando a corrente chega no seu valor de limiar, indicando que não é possível de se conduzir mais corrente. A modelagem consegue representar muito bem este fenômeno, como é apresentado abaixo, graficamente.

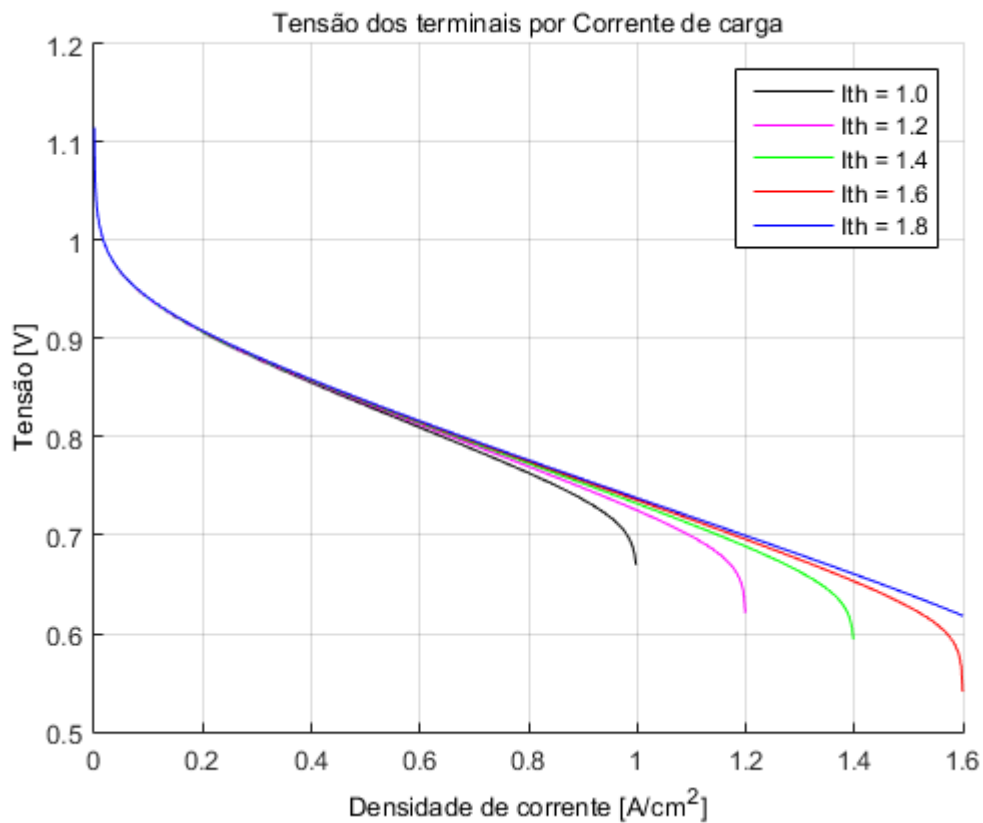


Figura 10 – Influência da corrente limitante na tensão de saída

3.7 Influência da temperatura (T)

A figura 11 mostra a influência da temperatura na tensão de saída. Para valores menores de temperatura, há um maior aproveitamento da célula, característico da célula com membrana de troca de prótons. Nota-se que para altas temperaturas, a utilização da célula é praticamente inviável, e inclusive foge do escopo de modelagem (tensão teórica negativa, caso impossível).

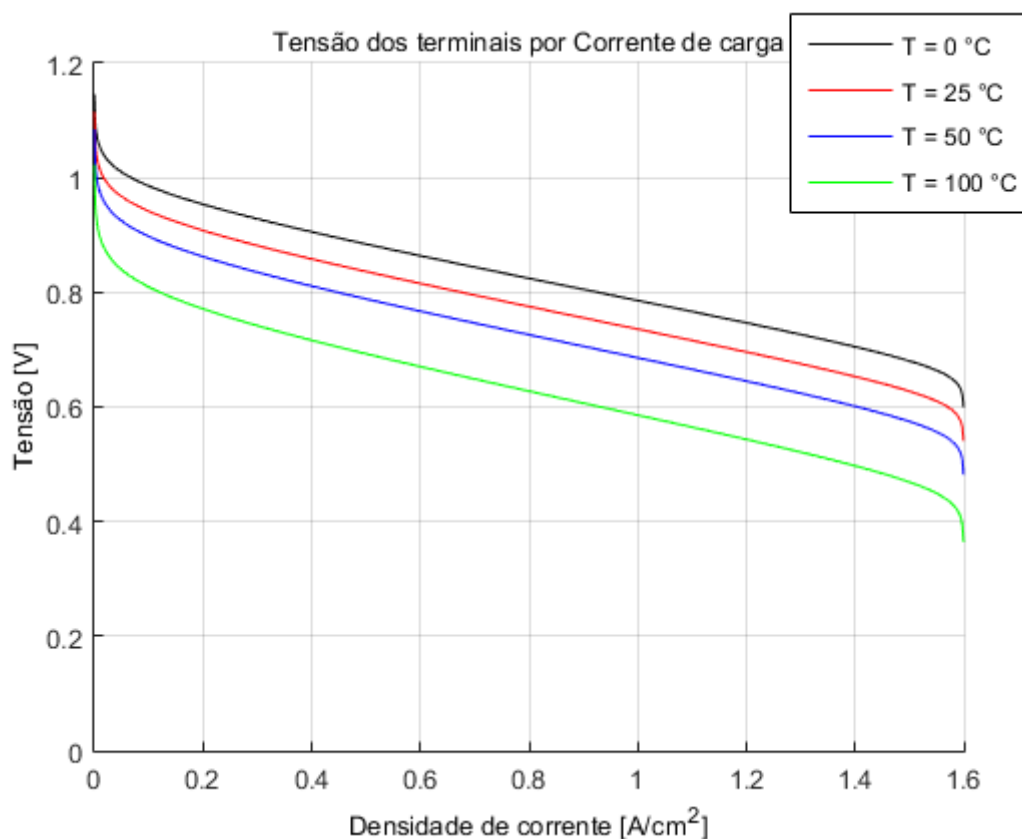


Figura 11 – Influência da temperatura na tensão de saída

3.8 Influência da pressão do combustível (P_{H_2})

A figura 11 mostra a influência da pressão do gás hidrogênio na tensão de saída. Pode-se notar que o aumento da pressão é bom para aumentar-se a tensão de saída, contudo um grande aumento da pressão proporciona uma pequena elevação na tensão. Isso é muito importante para direcionar grupos de pesquisa, quanto ao uso de hidrogênio. Pois dependendo das condições, pode-se gastar mais energia para obter maior pressão do que a energia ganha pela elevação da tensão, tornando menos eficiente o sistema.

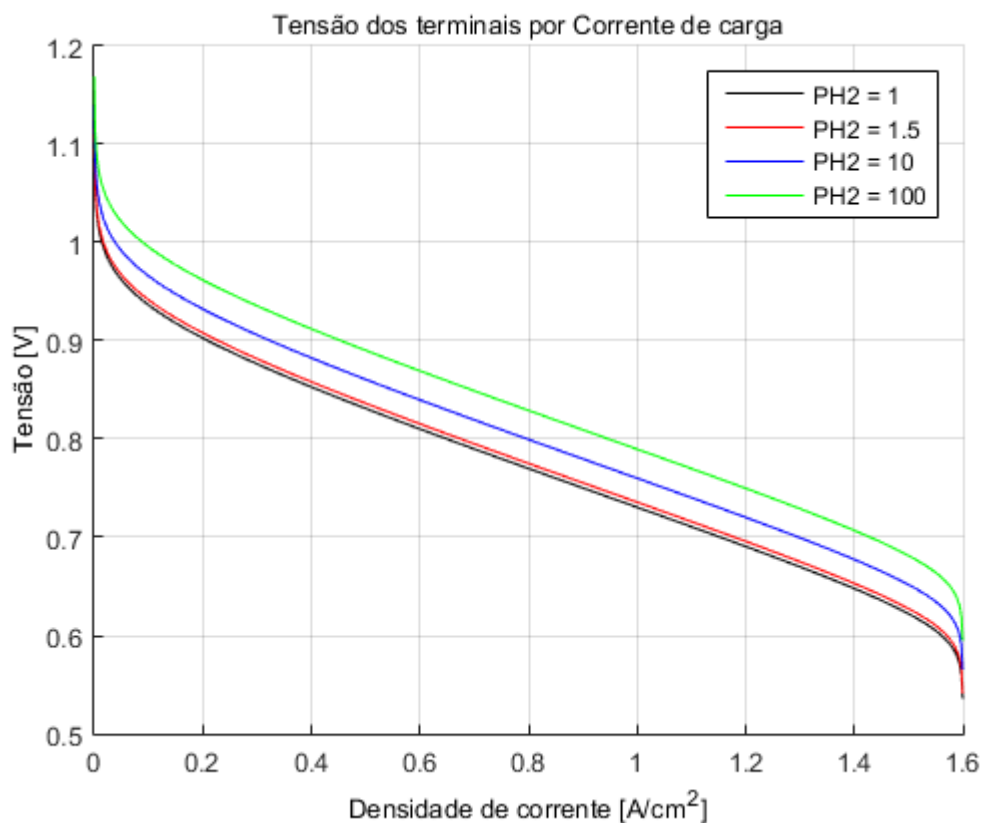


Figura 12 – Influência da pressão do combustível na tensão de saída

3.9 Influência do uso de oxigênio puro (P_{O_2})

A figura 11 mostra a influência do uso de oxigênio puro na tensão de saída, em comparação com o uso de ar ambiente. Percebe-se que a diferença é muito pequena. A aplicação de oxigênio puro seria viável somente para células com alta potência, isto é, um conjunto (*stack*) de células, ou se a célula em questão fosse sensível ao ponto de demandar oxigênio puro para operar. Conclui-se que usar o ar ambiente é a melhor alternativa, para uma única célula. Todavia é importante observar que ao usar-se ar ambiente para alimentação a vazão mássica há de ser maior, para suprir o oxigênio demandado, conforme demonstrado no capítulo anterior. Isto resulta na necessidade de maiores tubulações de admissão de ar, ou na diminuição da corrente limiar de condução, de forma equivalente.

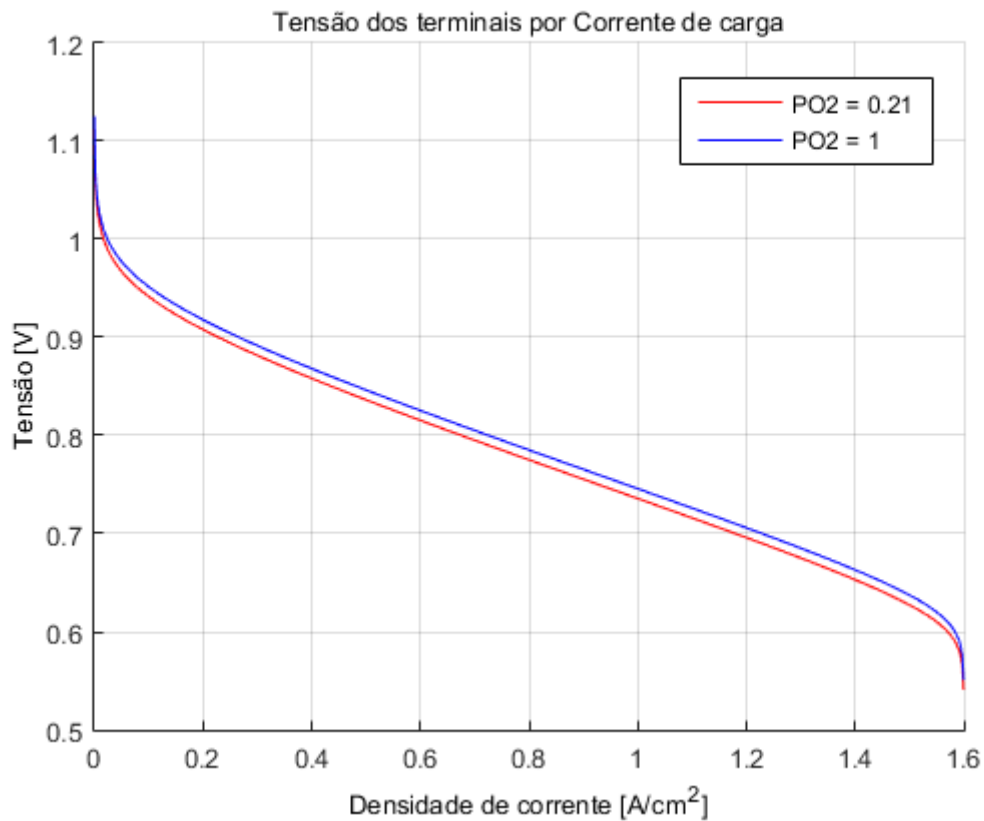


Figura 13 – Influência do uso de oxigênio puro na tensão de saída

3.10 Uso de *curve fitting*

Utilizou-se a ferramenta de ajuste de curvas do Matlab, em conjunto com os dados de figuras do artigo de Paganin, Ticianelli e Gonzalez (1996), como uma forma de encontrar-se os valores dos parâmetros empíricos de uma célula a combustível, porém ainda utilizando ferramentas matemáticas para o mesmo. A ferramenta permite o usuário digitar uma expressão matemática, dar os pontos x e y, no caso bidimensional, e inserir

na equação coeficientes para serem determinados. O programa executa um algoritmo, e retorna, se possível, os parâmetros da equação de entrada da melhor curva que passa pelos pontos dados, com erro quadrático mínimo. O intuito dessa abordagem é mostrar a facilidade em estimar os parâmetros, mas sob as desvantagens de usar algoritmos de alto processamento e softwares pagos.

No trabalho de Paganin, Ticianelli e Gonzalez (1996), foi feito um modelo similar da célula, porém sem a presença da corrente de limiar I_{th} , responsável pelas perdas por concentração. Na modelagem utilizada há a presença de um termo denominado "curva de tafel", que basicamente é um parâmetro que generaliza todas as constantes do modelo em uma só (constante de Faraday, α , constante dos gases, etc...). Resumidamente, o modelo em seu artigo exprime um modelo que considera: o potencial sem perdas; as perdas ôhmicas; e as de ativação. Sendo assim utilizou-se somente o modelo com tais perdas para o ajuste de curvas. A equação (3.1) abaixo, que foi utilizada no programa, utiliza o potencial padrão (com temperatura e pressões da tabela 1), e as perdas por ativação e ôhmicas. Para tratamento do programa, titulou-se a corrente como sendo a variável x , enquanto a tensão de saída como a variável y .

$$y(x) = 1,2288 - R_i \cdot x - 0,012846288 \cdot \frac{1}{\alpha} \cdot \log\left(\frac{x}{I_o}\right) \quad (3.1)$$

Foi feito ajuste de curva em dados das figuras 3, 4 e 5 do artigo de Paganin, Ticianelli e Gonzalez (1996), e seus resultados são apresentados respectivamente pelas figuras 14, 15 e 16. E os resultados encontrados são apresentados na tabela 2 abaixo.

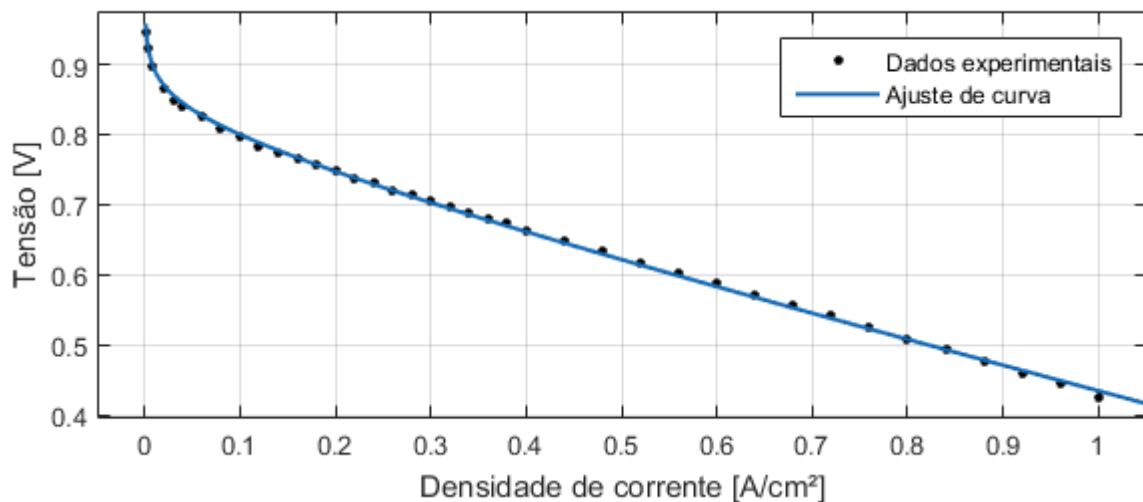


Figura 14 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 3)

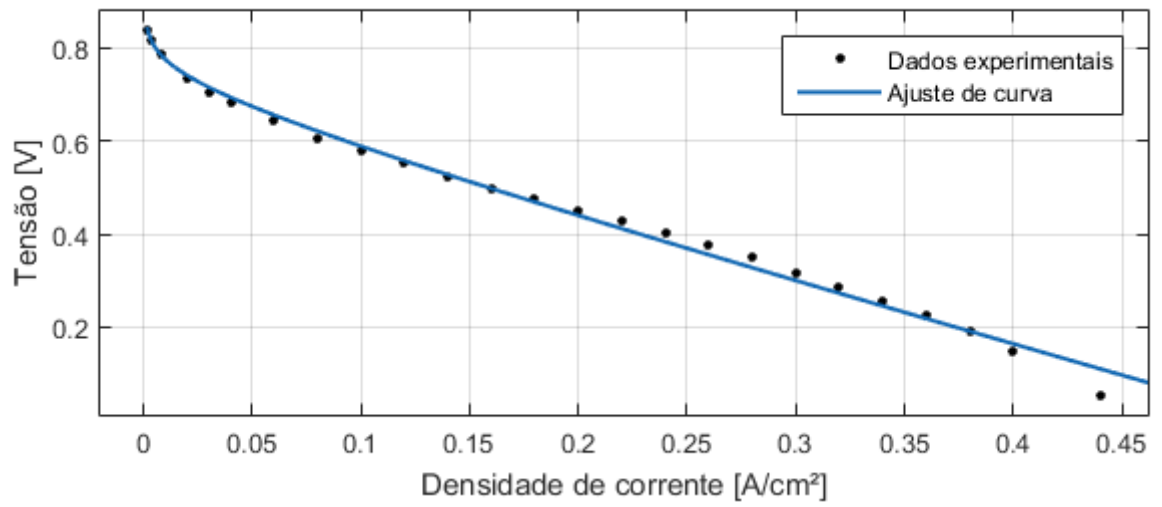


Figura 15 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 4)

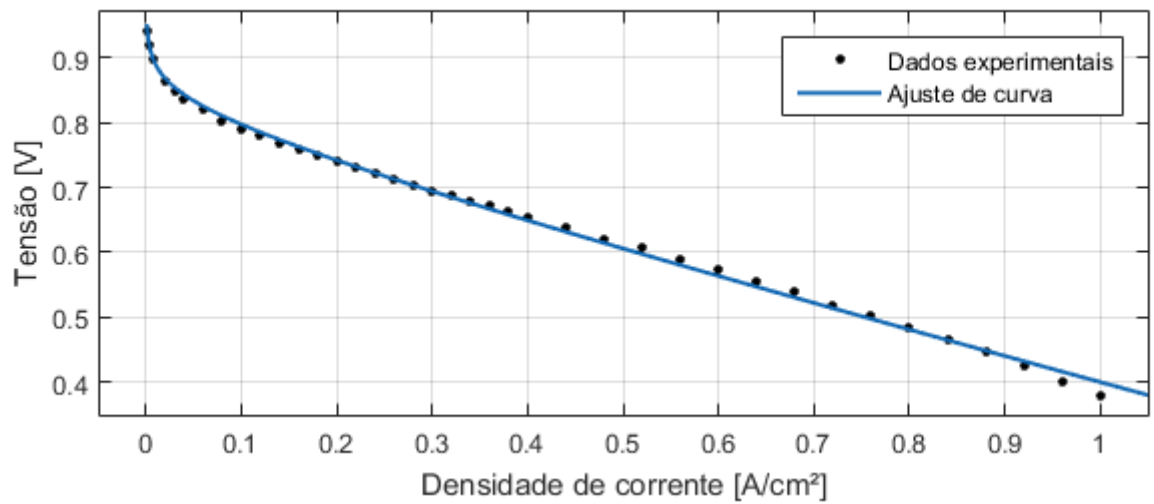


Figura 16 – Ajuste de curva realizado em dados do artigo (fig. 5)

Tabela 2 – Tabela de dados de ajuste de curva referentes às figuras do artigo

Figura do artigo	α	$I_o [A/cm^2]$	$R_i [\Omega/cm^2]$
3	0,476	4,373e-8	0,3368
4	0,4142	6,493e-9	1,269
5	0,5075	1,7481e-8	0,3763

4 Redes neurais artificiais

Neste capítulo será introduzido o funcionamento de uma rede neural básica, e será feita explicação de uma rede neural mais complexa, que foi utilizada neste trabalho. Serão comentados também diversos aspectos referentes à topologia, e treinamento.

4.1 Motivação histórica para o desenvolvimento de RNAs

De forma similar ao funcionamento biológico do cérebro, uma rede neural artificial tenta simular o funcionamento dos neurônios e suas conexões sinápticas. Um neurônio basicamente é uma célula capaz de mandar impulsos elétricos a outros neurônios, se este for devidamente estimulado. No cérebro, os neurônios estão dispostos em rede, na forma de uma malha. Um neurônio se conecta com vários outros para transmitir impulsos e o mesmo recebe conexões para recebê-los. Essas conexões denominam-se sinapses. Diz-se que um neurônio é ativado se o mesmo recebe impulsos de entrada suficientes para atingir seu limiar de ativação. Dependendo da combinação de neurônios ativos que estão transmitindo sinal a um neurônio específico, o mesmo pode se ativar ou não, dependendo da configuração de suas sinapses. A figura 17 mostra como é um neurônio. Destaque aos dendritos, que recebem os impulsos e aos axônios, que transmitem a resposta do neurônio.

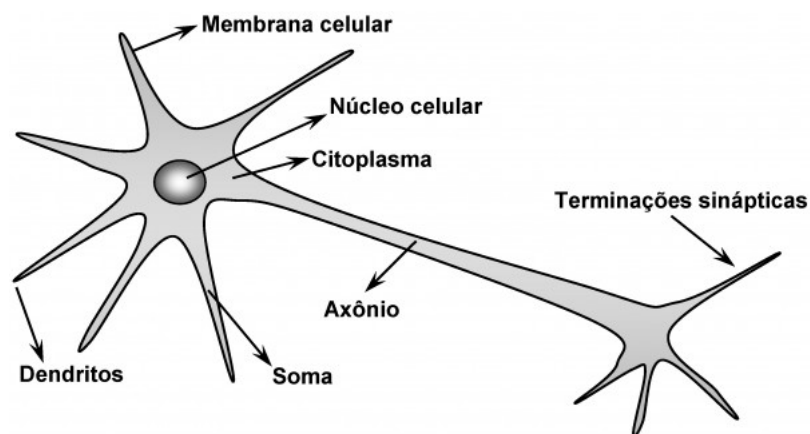


Figura 17 – Ilustração de um neurônio (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

4.2 Rede Perceptron

Para fins de introdução ao tema, será explicitada a arquitetura e funcionamento do tipo de rede neural mais básico, uma rede Perceptron. Em uma RNA, o neurônio faz o papel de um combinador linear. As sinapses biológicas se transformam em pesos sinápticos,

que são simplesmente fatores multiplicativos, de ganho, dos sinais de entrada do neurônio. O limiar de ativação é um valor numérico, no qual a combinação linear dos sinais de entrada é suficiente para ativar o neurônio. Define-se por função de ativação, como sendo uma função matemática aplicada ao resultado da combinação linear do neurônio. No caso da rede Perceptron simples, utilizam-se funções degrau, por possuírem característica binária. A figura 18 ilustra como é o funcionamento da rede Perceptron.

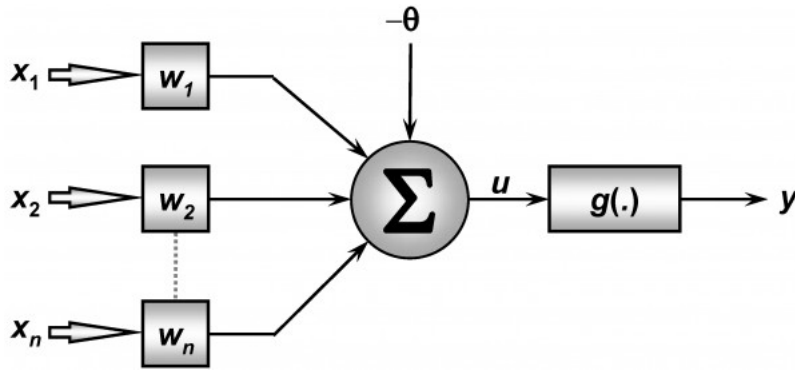


Figura 18 – Ilustração de uma rede Perceptron (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Conforme descrito por SILVA, SPATTI e FLAUZINO (2010), para se obter a saída da rede, primeiramente apresentam-se um conjunto de valores que representam as variáveis de entrada do neurônio. Cada entrada $(x_1, x_2 \dots x_n)$ então é multiplicada pelo seu respectivo peso sináptico $(w_1, w_2 \dots w_n)$, que varia de 0 a 1. Obtém-se o potencial de ativação (u) , produzido pela soma ponderada dos sinais de entrada, somando-se o limiar de ativação (θ) . Por fim, aplica-se a função de ativação desejada " $g(\cdot)$ ", que define a resposta do neurônio e atua como um limitador da saída do neurônio.

Costuma-se utilizar a função degrau como função de ativação da rede Perceptron, descrita pela equação (4.1):

$$g(u) = \begin{cases} 1, & \text{se } u \geq 0 \\ 0, & \text{se } u < 0 \end{cases} . \quad (4.1)$$

É comum utilizar-se também a função degrau bipolar, descrita pela equação 4.2:

$$g(u) = \begin{cases} 1, & \text{se } u \geq 0 \\ -1, & \text{se } u < 0 \end{cases} . \quad (4.2)$$

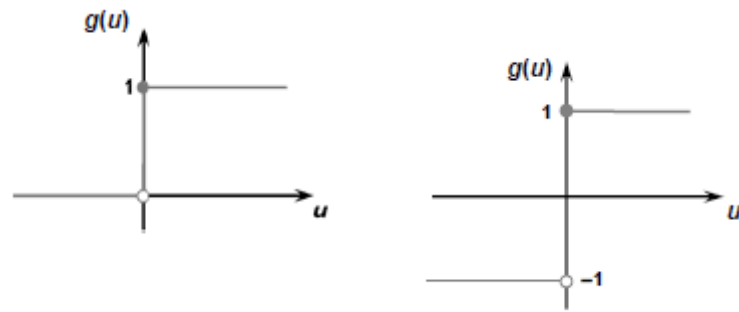


Figura 19 – Gráficos ilustrativos das funções degrau e degrau bipolar (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Desta forma, pode-se definir matematicamente a saída da combinação linear da rede e sua saída de resposta da seguinte forma:

$$\begin{cases} u = \sum_{i=1}^n w_i \cdot x_i - \theta \\ y = g(u) \end{cases} \quad (4.3)$$

4.2.1 Treinamento da rede Perceptron

Para a rede funcionar devidamente, é necessário treiná-la. Para isto é necessário coletar dados de entrada que se julguem interessantes para a tomada de decisão da rede. São coletados os dados de entrada do determinado processo, e a saída de resposta desta entrada. É necessário reproduzir diferentes pontos de operação, e eventos do processo que deseja-se mapear. Nesta coleta de dados deve tentar contemplar ao máximo todas as possibilidades do processo, para que a célula consiga uma boa generalização dos resultados.

Para o treinamento computacional, os pesos sinápticos da rede são inicializados aleatoriamente, para mitigar as chances de um viés no resultado do treinamento (por exemplo uma solução que busca o mínimo de uma função retornar sempre um mínimo local, não o mínimo global). Costuma-se inicializar o limiar de ativação no valor de uma unidade negativa, isso porque o limiar é somado às entradas ponderadas, o que justifica ele ser iniciado com um valor negativo, pois comumente após o treinamento seu valor é negativo. Se ele fosse positivo, para qualquer entrada, a combinação linear seria positiva (entrada sempre positiva). Isto faria com que a rede sempre resultasse na mesma saída, utilizando-se funções de ativação binárias. Todavia pode-se inicializar o limiar com valores positivos. O algoritmo de treinamento irá justamente ajustar os limiares e os pesos sinápticos. Porém quanto mais longe os pesos e o limiares forem inicializados do resultado de ajuste, que inicialmente é desconhecido, serão necessárias mais iterações do algoritmo para ajuste.

É comum tratar os dados de entrada como um vetor, e os pesos sinápticos também (em redes mais complexas são matrizes). É comum tratar o limiar de ativação como uma

entrada também, junto com os dados de entrada, pois o mesmo é somado na combinação linear dos pesos sinápticos. A ilustração da figura 18 mostra o limiar sendo adicionado ao fim, apenas por motivos didáticos.

Conforme descrito por SILVA, SPATTI e FLAUZINO (2010), o processo de treinamento de uma rede Perceptron simples segue a regra de aprendizado de Hebb. Com a rede inicializada com parâmetros aleatórios, inserem-se as entradas do treinamento, e compara-se a saída obtida com a saída desejada. Quanto mais divergente a saída da rede for do esperado maior vai ser o ajuste na fase de treinamento. O que se ajusta são os pesos sinápticos e os limiares do neurônio. Trata-se de um processo que será repetido sequencialmente, para todas as amostras de treinamento, até que a saída da rede Perceptron atinja um erro pequeno satisfatório perante as saídas desejadas. Cada iteração do algoritmo com todas as entradas é denominada de época. Matematicamente, o ajuste nos pesos e limiares se dá de forma iterativa, na seguinte maneira:

$$\begin{cases} w_i^{atual} = w_i^{anterior} + \eta \cdot (d^{(k)} - y) \cdot x^{(k)} \\ \theta_i^{atual} = \theta_i^{anterior} + \eta \cdot (d^{(k)} - y) \cdot x^{(k)} \end{cases} \quad (4.4)$$

Sendo w_i os pesos sinápticos, θ_i o limiar do neurônio, $x^{(k)}$ o vetor contendo a k-ésima amostra de treinamento, $d^{(k)}$ a saída desejada para a k-ésima amostra de treinamento, y a saída da rede e η a taxa de aprendizagem da rede.

De acordo com a equação (4.4), nota-se que o procedimento da rede Perceptron se dá de forma sucessiva, e depende do fator de aprendizagem da rede. Quanto maior este parâmetro for, maior será o ajuste nos pesos sinápticos. A escolha do valor numérico para aprendizagem é arbitrária, e depende muito da experiência do projetista da rede e das definições do treinamento da rede.

No caso da rede simples Perceptron, que funciona comumente como um classificador, sabe-se que sua resolução de respostas é apenas válida para problemas linearmente separáveis, devido à presença de somente um neurônio, que no caso planar, irá definir uma reta que separa duas regiões de respostas. Ainda no caso planar (duas entradas), pode-se mostrar o processo de convergência da rede, da primeira época de treinamento, com erro alto, até a última, com baixo erro, conforme figura 20

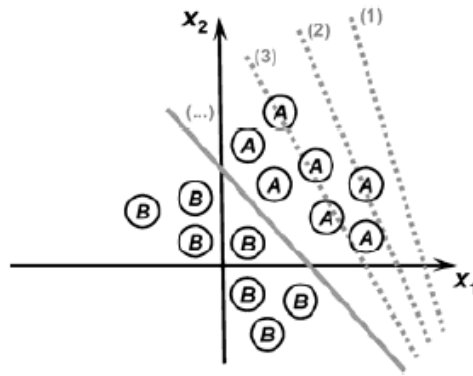


Figura 20 – Ilustração do processo de convergência (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Outro aspecto interessante do processo de treinamento, mediante diferentes topologias de rede e inicialização aleatória dos parâmetros, é que podem existir infinitas soluções aceitáveis, muito próximas umas das outras. Portanto cada treinamento feito com a rede, mesmo atingindo o mesmo critério de erro, não possuirá os mesmos pesos sinápticos que algum outro. A figura 21 ilustra um exemplo onde há uma região de separabilidade das soluções que aceita mais de uma resposta plausível.

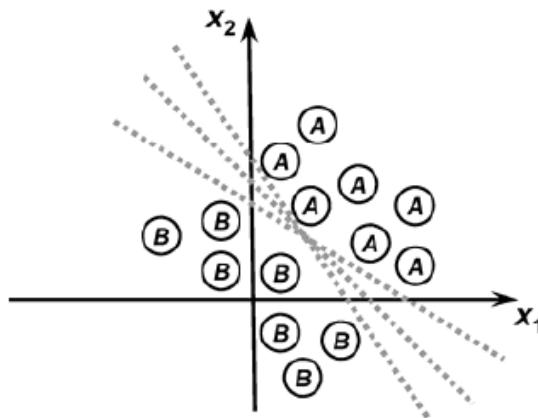


Figura 21 – Ilustração da região de separabilidade (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Parte dos dados coletados para o treinamento, irão ser utilizados para efetivamente treinar a célula, enquanto outra parte, uma porcentagem menor, será utilizada para validar o treinamento. Isto é necessário pois caso a rede seja testada com dados que foram usados em seu treinamento, a mesma irá acertar muito bem, pois foi treinada para atingir um erro ínfimo com tais dados. É parte da escolha do projetista da rede, além de testar a topologia de rede mais viável, escolher também se optará por possuir um treinamento mais assertivo, com menor validação de dados, ou de possuir um treinamento mais pobre, com melhoria na validação da generalização da rede. Isto também depende da quantidade

de amostras. Um número alto de amostras tende a dar mais confiança para aumentar-se a proporção de dados selecionados para validação, em alguns casos.

4.3 Rede Perceptron multi camadas utilizada no projeto

Na seção anterior foi mostrado o funcionamento de uma rede Perceptron simples, e o processo de treinamento supervisionado, a caráter de simples introdução de redes neurais. Entretanto, conforme a modelagem é proposta, o equacionamento da célula a combustível possui suas não linearidades, dessa forma é necessário utilizar-se de uma rede com mais recursos, no caso, uma Perceptron multi camadas (PMC). Esta topologia de rede introduz mais neurônios, em camadas intermediárias, denominadas camadas ocultas, situadas entre a camada de entrada e a de saída. Esta será a topologia utilizada com os dados de simulação, pois este tipo de rede é muito versátil. Em questão de funcionamento, uma rede PMC atua com o mesmo princípio da rede Perceptron simples, com pesos sinápticos limiares e neurônios agregadores. Porém uma PMC conterá mais camadas de neurônios que gerarão mais conexões sinápticas entre outros neurônios, assimilando-se mais ainda com conexões de uma rede no cérebro. Todo neurônio possui uma conexão com outro neurônio de uma camada posterior.

O fluxo de informações em uma rede PMC inicia-se nas camadas de entrada, seguindo para as intermediárias, até as de saída. Sendo assim, a saída de uma camada anterior de neurônios será a entrada de sua camada posterior de neurônios, e assim por diante. As camadas escondidas assim como as de saída podem possuir mais de um neurônio. A figura 22 ilustra uma rede PMC, com duas camadas escondidas e mais de uma saída.

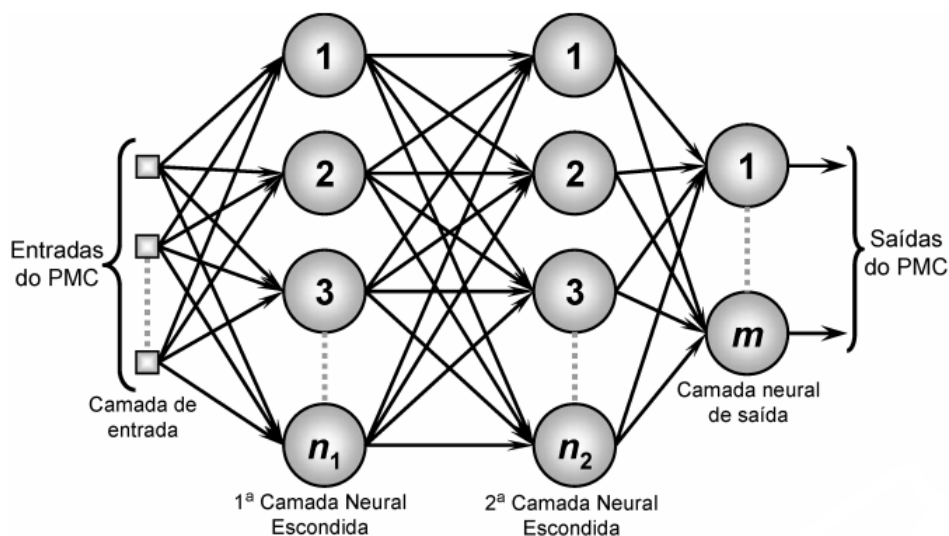


Figura 22 – Generalização de uma rede Perceptron multi camadas (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

O processo de treinamento de uma rede PMC utiliza um algoritmo denominado *backpropagation*. Com uma fase de geração de saída da rede propagando suas entradas (*forward*), e uma propagação reversa, ajustando os limiares segundo o erro encontrado (*backward*). Para este processo de treinamento será necessário derivar alguns termos, que dependem das funções de ativação. Para isso é necessário utilizar funções de ativação contínuas e diferenciáveis em todo o seu domínio. Uma função escolhida neste trabalho para ser utilizada é a função tangente hiperbólica, que assemelha-se à função degrau bipolar. Esta função é a função de ativação escolhida para todos os neurônios de todo tipo de rede neste trabalho, com exceção da função de ativação do neurônio de saída. É comum utilizar na camada de saída, uma função do tipo rampa, apenas para combinar as saídas da camada neural anterior, o que ocorreu, no caso.

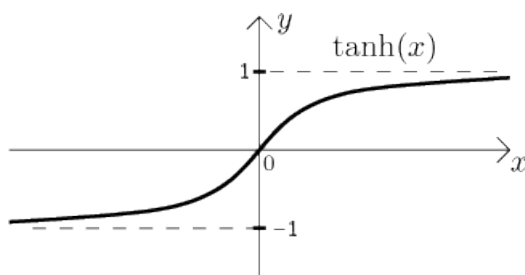


Figura 23 – Gráfico da função tangente hiperbólica

(Fonte: <http://math.feld.cvut.cz/mt/txtb/4/txe3ba4f.htm> - Acessada em 28/08/2016)

O desenvolvimento matemático do algoritmo de treinamento da rede PMC utiliza uma extensa e complexa série de equações a fim de se minimizar o erro da rede. De forma resumida, a equação (4.5) sintetiza o processo de treinamento de uma rede PMC, ilustrada pela figura 24.

$$W_{ji}^{(k)} = W_{ji}^{(k)} + \eta \cdot \delta_j^{(k)} \cdot Y_i^{(k-1)} \quad (4.5)$$

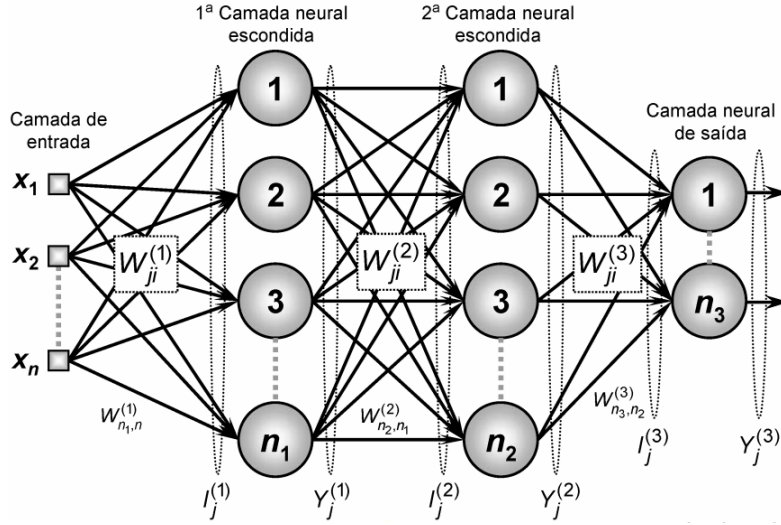


Figura 24 – Denominação de parâmetros para treinamento de uma rede PMC (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2010)

Onde $W_{ji}^{(k)}$ é a matriz de pesos sinápticos que antecede a k -ésima camada de neurônios; η é a taxa de aprendizagem da rede; $Y_i^{(k-1)}$ é a saída da camada de neurônios anterior à k -ésima camada; e $\delta_j^{(k)}$ é o gradiente local aplicado em relação ao j -ésimo neurônio da camada de neurônios posterior. Trata-se de um desenvolvimento muito complexo, que será poupado. A demonstração e equacionamento completos podem ser verificados na obra de SILVA, SPATTI e FLAUZINO (2010). O Matlab possui um ambiente para treinamento de redes neurais de diversas topologias e diversos algoritmos para melhorar a rapidez. Basta preparar as amostras e utilizar alguns comandos específicos. A preparação e execução do treinamento da rede serão mostrados no capítulo seguinte.

5 Resultados

Neste capítulo serão apresentados os resultados do trabalho apresentado, e a validação das propostas feitas. Será primeiramente mostrada a eficácia do equacionamento do ponto de máxima potência, e logo em seguida serão mostrados os resultados obtidos realizando treinamentos em redes neurais de diversas topologias.

5.1 Confirmação do ponto de máxima potência

Conforme mostrado na seção 2.10, é possível encontrar um ponto de máxima operação de potência da célula a combustível. Pode-se encontrar diversos tipos de curva de potência da célula no apêndice C. Porém para demonstração gráfica, utiliza-se uma curva de potência onde é notória a presença de um máximo local, para validar a eficácia da equação (2.37), na qual foi possível de se comparar o resultado da equação resolvida numericamente com a simulação no simulink. Os resultados foram muito precisos, conforme mostrado pela figura 25. Pode-se ver que o erro é muito pequeno, apenas devido à aproximação de ponto flutuante. Estes resultados são fidedignos e portanto muito úteis para trabalhos futuros.

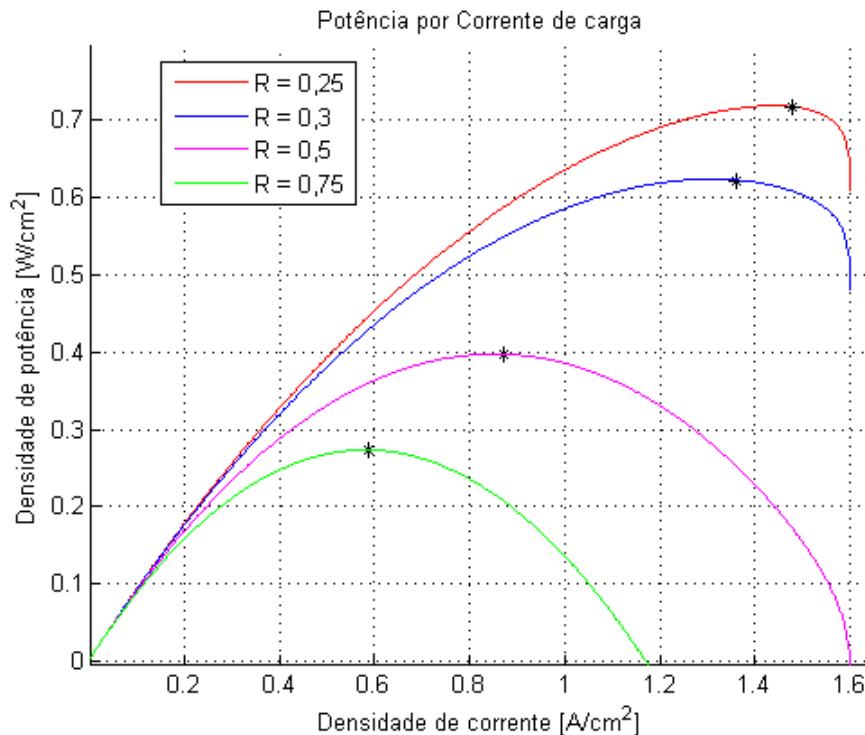


Figura 25 – Visualização dos pontos de máxima potência calculados frente à simulação (pontos em asterisco advêm da resolução numérica)

5.2 Treinamento das redes

Utilizou-se a simulação do ambiente Simulink para gerar os dados de treinamento e de validação para a rede neural. Foram mudados os parâmetros empíricos da célula, para gerar os dados. Utilizou-se uma rede para cada tipo de parâmetro empírico (α , R_{in} e I_{th}). Não conseguiu-se uma boa generalização para o parâmetro I_o . Contudo, este parâmetro pode ser encontrado com programas de ajuste de curva, conforme mostrado anteriormente.

A generalização que pretende-se obter com a rede neural é uma generalização simples, apenas para indicar a possibilidade de um futuro refinamento na topologia da rede e na geração de dados para treinamento. Sendo assim, criou-se uma rede PMC para cada parâmetro a ser mapeado, com uma única saída. E ao gerar os dados de treinamento para cada parâmetro, os outros parâmetros foram afixados em valores arbitrários, conforme apresentado na tabela 3.

Tabela 3 – Parâmetros constantes na simulação

Parâmetro	Valor
T	298,15 K
P_{H_2}	1,5
P_{O_2}	0,21
α	0,5
I_o	$3,10^{-6} A/cm^2$
R_i	$0,15 \Omega.cm^2$
I_{th}	$1,6 A/cm^2$

Ou seja, por exemplo, ao serem simuladas diferentes topologias de funcionamento da célula, com apenas o parâmetro α variando, fixou-se a temperatura em 298,15 K, a resistência em $0,15 \Omega.cm^2$, e etc...

Serão apresentados abaixo os valores dos parâmetros escolhidos para gerar os dados de simulação e validação de dados abaixo, denotados em forma vetorial.

$$\begin{aligned}\alpha_{treinamento} &= [0,10 \ 0,20 \ 0,30 \ 0,40 \ 0,50 \ 0,60 \ 0,70 \ 0,80 \ 0,90 \ 1]^T \\ \alpha_{teste} &= [0,15 \ 0,25 \ 0,35 \ 0,45 \ 0,55 \ 0,65 \ 0,75 \ 0,85 \ 0,95]^T\end{aligned}\tag{5.1}$$

$$\begin{aligned}R_{i\ treinamento} &= [0,10 \ 0,15 \ 0,30 \ 0,50 \ 0,70 \ 0,80 \ 0,90 \ 1,00 \ 2,00 \ 5,00]^T \\ R_{i\ teste} &= [0,20 \ 0,45 \ 0,65 \ 0,85 \ 1,50 \ 2,50 \ 4,00]^T\end{aligned}\tag{5.2}$$

$$\begin{aligned}I_{th\ treinamento} &= [0,3 \ 0,5 \ 0,8 \ 1,0 \ 1,2 \ 1,4 \ 1,6 \ 1,8]^T \\ I_{th\ teste} &= [0,4 \ 0,6 \ 0,9 \ 1,1 \ 1,3 \ 1,5 \ 1,7]^T\end{aligned}\tag{5.3}$$

Simulando estas diferentes topologias, foram salvos os dados da curva de polarização da célula a combustível, para cada caso. Devido à corrente mínima ($0,001 \text{ mA/cm}^2$) estipulada, ao limite de corrente definido ($1,799 \text{ mA/cm}^2$) e aos passos de tempo ($0,01 \text{ s}$), os dados salvos apresentam sempre a mesma quantidade de pontos, 187 pontos de entrada (contendo informações de temperatura de operação e pressão também). Por motivos de viabilidade de implementação de uma rede neural, optou-se por utilizar cada ponto da amostragem como sendo uma entrada específica da célula. Trata-se de um número grande de entradas em uma rede neural, o que justifica certa demora para o algoritmo de treinamento completar, contudo os resultados obtidos tendem a generalizar os parâmetros necessários. Nos primeiros testes, tentou-se optar por introduzir apenas uma entrada de tensão na rede neural, que, para representar uma curva de polarização, era necessário entrar ponto a ponto e manter a mesma saída, para um conjunto de treinamento. Tal abordagem não resultou em generalizações por parte da rede, portanto foi abdicada.

O programa Matlab utilizado para treinamento das redes neurais se encontra anexo no apêndice B. Para o trabalho ficar enxuto, neste apêndice há apenas o código que treina a rede do parâmetro α . Os outros códigos são muito idênticos, apenas diferindo na coleta de dados do vetor geral com todos dados. Neste programa há um processo de alinhamento dos vetores de entrada e saída e de teste, assim como obtenção de seus valores máximos e mínimos para escalonamento. O programa encontra-se comentado, explicando seus trechos para melhor reprodutibilidade dos resultados. Durante o treinamento utilizou-se por conveniência a taxa de aprendizagem como 10, e o número máximo tolerável de épocas para treinamento como 100 épocas. A figura 26 mostra a *toolbox* do Matlab treinando uma rede. Destaca-se a topologia de redes no topo, o número de épocas, o tempo decorrido, e o erro quadrático da atual topologia da rede. Ao finalizar o treinamento (seja por número máximo de épocas, erro quadrático atingido ou outro fator) o programa dá sequência e utiliza a rede para inserir o vetor de teste. O programador após executar o algoritmo, pode visualizar e comparar os resultados obtidos.

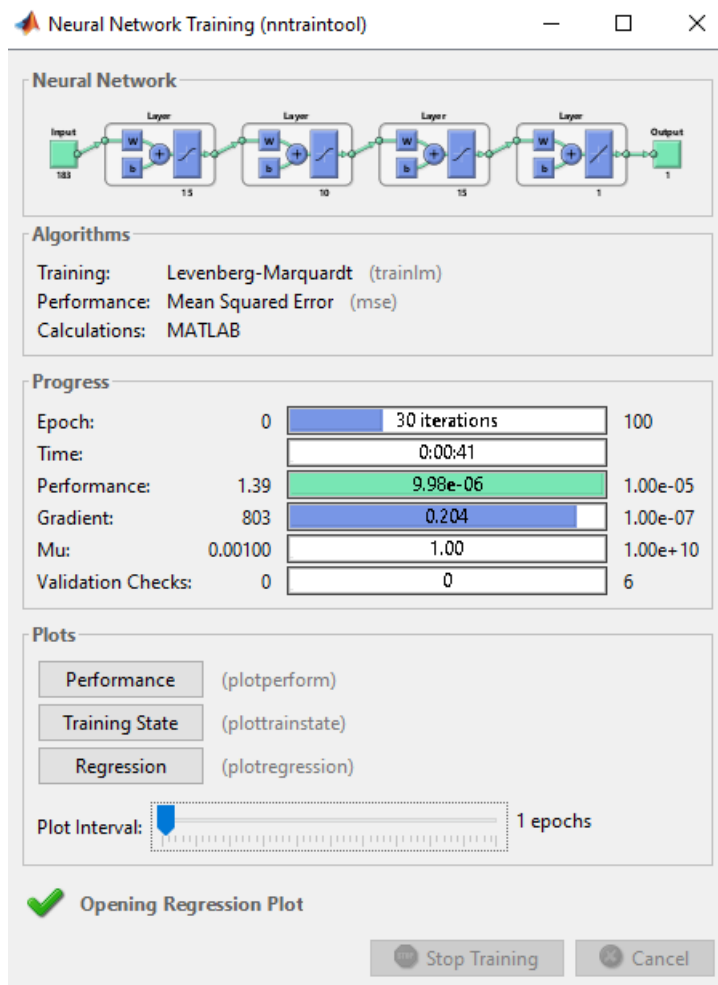


Figura 26 – Ilustração do treinamento de uma rede neural via Matlab

5.3 Estudo de topologia de rede com menor erro

É uma boa prática realizar diversos treinamentos em uma rede com determinada topologia, devido à inicialização aleatória dos parâmetros. Outro fator que agrega valor ao treinamento, é mapear a melhor topologia de rede. Demonstrar isto em forma de tabela é muito útil pois desta forma consegue-se decidir a melhor topologia. Às vezes opta-se por uma topologia que realize treinamento mais rápido, outra vezes por uma topologia com menor erro relativo, ou seja, uma melhor generalização. Escolheu-se para este trabalho como melhor resultado de topologia de rede, as redes de cada parâmetro que apresentaram o menor erro médio relativo.

O erro médio relativo das amostras de teste frente às de saída da rede é calculado da seguinte forma: toma-se o valor absoluto da subtração entre um valor de validação e um valor de saída da rede. Feito isto, divide-se o resultado pelo valor de validação e multiplica-se por 100, para obter-se a porcentagem. O processo é repetido para os outros valores de validação e seus respectivos valores de saída. No final, tira-se a média deste

conjunto de dados para obter-se o erro médio relativo. A equação abaixo mostra tal processo em notação de programação Matlab.

$$erro = mean2(100 * abs((Vetor_{Teste} - Vetor_{Saída}) ./ Vetor_{Teste})) \quad (5.4)$$

Abaixo há as tabelas que auxiliaram na escolha da melhor topologia de rede.

Tabela 4 – Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro α

Parâmetro desejado	Topologia de rede	Taxa de aprendizagem	Épocas de treinamento	Tempo de treinamento [mm:ss]	Erro médio quadrático realizando treinamento[%]	Erro médio relativo das amostras de treinamento [%]
α	15-10-15	10	100	02:15	4,52e-5	0,9039
α	10-10-15	10	100	00:56	4,92e-7	0,2499
α	10-10-10	10	92	00:49	8,06e-8	0,1406
α	10-10	10	100	00:45	2,05e-5	0,5545
α	20-20	10	100	04:48	7,15e-4	3,3657

Tabela 5 – Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro R_i

Parâmetro desejado	Topologia de rede	Taxa de aprendizagem	Épocas de treinamento	Tempo de treinamento [mm:ss]	Erro médio quadrático realizando treinamento[%]	Erro médio relativo das amostras de treinamento [%]
R_i	15-10-15	10	100	02:13	1,18	60,8389
R_i	10-10-15	10	100	00:56	6,02e-4	14,4168
R_i	10-10-10	10	19	00:08	3,58e-11	15,8983
R_i	10-10	10	75	00:32	8,85e-8	33,9327
R_i	20-20	10	100	04:36	4,19e-2	6,0121
R_i	10-15	10	48	00:22	1,94e-8	12,6954

Tabela 6 – Estudo de melhor topologia de treinamento da rede do parâmetro I_{th}

Parâmetro desejado	Topologia de rede	Taxa de aprendizagem	Épocas de treinamento	Tempo de treinamento [mm:ss]	Erro médio quadrático realizando treinamento[%]	Erro médio relativo das amostras de treinamento [%]
I_{th}	10-15-15	10	11	00:06	1,59e-17	7,5168
I_{th}	15-10-15	10	20	00:28	9,2e-3	9,4037
I_{th}	10-10-10	10	66	00:33	9,84e-4	5,0611
I_{th}	10-10	10	5	00:01	5,05e-3	13,7596
I_{th}	20-20	10	2	00:03	9,41e-3	12,8372

5.4 Melhores redes e topologias encontradas

Serão apresentadas as redes que obtiveram o melhor desempenho, segundo critério estabelecido previamente.

Para a rede do parâmetro α , obteve-se o menor erro relativo, frente as outras redes dos outros parâmetros. A rede escolhida possui erro relativo de apenas 0,14 % aproximadamente. Sua topologia possui três camadas neurais escondidas, com dez neurônios cada. Conforme mostrado na equação (5.1), foram usados dados escolhidos arbitrariamente para validar a rede. Abaixo há os mesmos dados, em conjunto com os dados de resultado da rede, para comparação e validação da eficácia da rede.

$$\begin{aligned}\alpha_{teste} &= [0,1500 \ 0,2500 \ 0,3500 \ 0,4500 \ 0,5500 \ 0,6500 \ 0,7500 \ 0,8500 \ 0,9500]^T \\ \alpha_{rede} &= [0,1257 \ 0,2505 \ 0,3502 \ 0,4499 \ 0,5498 \ 0,6498 \ 0,7500 \ 0,8504 \ 0,9502]^T\end{aligned}\quad (5.5)$$

Para a rede do parâmetro R_i , obteve-se o maior erro relativo, frente as outras redes dos outros parâmetros. A rede escolhida possui erro relativo de 6,01 % aproximadamente. Ainda assim é um erro baixo, porém não tão baixo quanto o atingido pela rede acima. Sua topologia possui apenas duas camadas neurais escondidas, com vinte neurônios cada. Supõe-se que esta topologia de rede foi a melhor para o caso da resistência pois o efeito da resistência é puramente linear. Desta forma não são necessários muitos neurônios para mapear um ganho multiplicativo básico. De forma similar ao que foi feito na rede anterior, mostram-se os resultados para comparação e validação.

$$\begin{aligned}R_{i\ teste} &= [0,2000 \ 0,4500 \ 0,6500 \ 0,8500 \ 1,500 \ 2,5000 \ 4,0000]^T \\ R_{i\ rede} &= [0,1550 \ 0,5027 \ 0,6507 \ 0,8209 \ 1,6310 \ 2,8070 \ 4,1337]^T\end{aligned}\quad (5.6)$$

Para a rede do parâmetro I_{th} , obteve-se erro relativo mediano, comparado às outras redes dos outros parâmetros. A rede escolhida possui erro relativo de 5,06 % aproximadamente. Um valor de erro similar ao da resistência da célula. Sua topologia possui três camadas neurais escondidas, com dez neurônios cada. Estima-se que esta topologia de rede foi a melhor para o caso da corrente limitante pois de acordo a modelagem, este parâmetro influi na tensão de forma não linear, segundo o logaritmo. Desta forma foram necessárias mais camadas para mapear as nuances do modelo matemático. De forma similar ao que foi feito na rede anterior, mostram-se os resultados para comparação e validação.

$$\begin{aligned}I_{th\ teste} &= [0,4000 \ 0,6000 \ 0,9000 \ 1,1000 \ 1,3000 \ 1,5000 \ 1,7000]^T \\ I_{th\ rede} &= [0,3229 \ 0,6248 \ 0,8247 \ 0,9975 \ 1,3195 \ 1,5473 \ 1,7893]^T\end{aligned}\quad (5.7)$$

6 Conclusão

Os resultados obtidos na simulação foram de encontro com o comportamento que esperava-se atingir, segundo a bibliografia estudada de células a combustível. Isso valida a modelagem realizada, principalmente para a curva de polarização da célula. Pode-se notar também que os dados obtidos na simulação conseguiram treinar as redes neurais com erros aceitáveis, seguindo as considerações de modelagem e geração de dados para treinamento.

O Matlab foi uma ferramenta importante neste trabalho. Começando pelo seu uso em simulações simplórias, até obter-se o modelo usado (mais refinado), e finalmente partindo para utilizá-lo para executar o algoritmo de treinamento de redes neurais.

Quanto ao resultado final e principal, a generalização e validação das redes neurais, pode-se dizer que o trabalho atingiu seu objetivo de forma egrégia. Apesar de não conseguir uma topologia que generalizasse a corrente de troca da célula, conseguiu-se uma boa generalização para os outros parâmetros, principalmente para o coeficiente de troca de carga. Acredita-se que as topologias de rede treinadas para a corrente de troca não representavam fielmente a magnitude do universo de discurso da variável nos dados de treinamento. Foram feitas tentativas de treinamento com o parâmetro variando de $3 \cdot 10^{-12}$ até $3 \cdot 10^{-3} \text{ mA/cm}^2$. A rede pode ainda ter realizado o fenômeno de *overfitting*, onde ocorre um treinamento excessivo, fazendo com que a rede acerte muito bem nos dados de treinamento, mas perca totalmente generalização para outros dados (rede "viciada"). Essa possibilidade foi mitigada, ao diminuir-se a tolerância de erro durante o treinamento da rede durante a fase de testes, porém o erro alto ainda persistia.

Pode-se notar que as topologias mais extensas e complexas de redes neurais (mais camadas, mais neurônios) foram necessárias para mapear com baixo erro parâmetros empíricos com caráter não linear. Enquanto para uma perda linear, resistiva, a rede com menor erro relativo foi uma rede simples, com duas camadas escondidas.

Há o destaque à dedução matemática do ponto de máxima potência da célula. Foi realizada uma derivação simples, porém poderosa para aplicações futuras, principalmente para plantas de controladores e algoritmos de rastreamento de máximo ponto de potência (MPPT). Nos testes realizados no Matlab, o equacionamento encontrado apontou com acurácia o ponto de máxima potência. É importante ressaltar que a equação (2.37) representa o ponto de máxima potência referente à modelagem proposta neste trabalho. Para diferentes tipos de modelos, recomenda-se realizar a primeira derivada para obter a equação, e a segunda derivada para validação.

Para trabalhos futuros propõe-se refinar o modelo da simulação no Matlab, incluindo efeitos transitórios, devido à capacitância da célula. Também há a possibilidade de mapear

os parâmetros de uma célula a combustível, e criar um controlador de tensão de saída com base nos parâmetros da célula (visando eficiência ou máxima potência). Há também a proposta de melhoria no tratamento de dados para treinamento de futuras redes, com diferentes topologias.

Referências

- ALDABO, R. *Célula Combustível a Hidrogênio: Fonte de Energia da Nova Era*. [S.l.]: Artliber, 2004. ISBN 9788588098220. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 31.
- ALI, D. M.; SALMAN, S. K. Investigation into modelling of a fuel cell stack system. In: *Proceedings of the 41st International Universities Power Engineering Conference*. [S.l.: s.n.], 2006. v. 1, p. 137–141. Citado na página 27.
- BARBIR, F. *PEM Fuel Cells: Theory and Practice*. [S.l.]: Academic Press, 2013. ISBN 9780123877109. Citado 3 vezes nas páginas 33, 34 e 35.
- CELE, N. P. et al. The state of the art proton exchange membrane fuel cells for clean energy. In: *Energy Conference and Exhibition (EnergyCon), 2010 IEEE International*. [S.l.: s.n.], 2010. p. 865–869. Citado na página 27.
- HEBB, D. O. *The Organization of Behavior*. New York: John Wiley, 1949. Citado na página 29.
- LARMINIE, J.; DICKS, A. *Fuel Cell Systems Explained*. [S.l.]: J. Wiley, 2003. ISBN 9780768012590. Citado 3 vezes nas páginas 28, 36 e 38.
- NEHRIR, H.; WANG, C. *Modeling and Control of Fuel Cells: Distributed Generation Applications*. [S.l.]: Wiley, 2009. ISBN 9780470233283. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 41.
- PAGANIN, V. A.; TICIANELLI, E. A.; GONZALEZ, E. R. Development and electrochemical studies of gas diffusion electrodes for polymer electrolyte fuel cells. *Journal of Applied Electrochemistry*, v. 26, n. 3, p. 297–304, 1996. ISSN 1572-8838. Citado 2 vezes nas páginas 51 e 52.
- SILVA, I. N. D.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. *Redes neurais artificiais para engenharia e ciências aplicadas - Curso prático*. [S.l.]: ARTLIBER, 2010. ISBN 9788588098534. Citado 7 vezes nas páginas 55, 56, 57, 58, 59, 60 e 62.
- SMARSSARO, T. R. *Simulação de células a combustível em matlab/simulink®*. Dissertação (Trabalho de Conclusão de Curso) — Universidade federal do Espírito Santo, 2007. Citado na página 43.

Apêndices

APÊNDICE A – Código do bloco de Nernst

```
function Vnernst = Nernst(T,Ph2,Po2)

%#codegen

%Constantes

R = 8.3144621; %Constante Universal dos Gases

H = -286.02e3; % Entalpia da reacao do hidrogenio

S = -0.16328e3; % Entropia do hidrogenio

F = 96485.3365; % Constante de Faraday

n = 2; % Numero de eletrons envolvidos na reacao

Vnernst = -((H-T*S)/(n*F)) + ((R*T)/(n*F))*log(Ph2*sqrt(Po2));

end
```


APÊNDICE B – Código para realizar treinamento da rede PMC

```

clc % Preambulo para limpeza da area de trabalho e da tela
clear all
close all

%Definicoes

load('treinamentoalpha.mat'); % Arquivo de dados do Matlab que contem os
%pontos de treinamento e de teste obtidos no simulink
W = vetor_entrada; % vetor_entrada e o nome da matriz contendo os pontos de
    polarizacao da curva
W(isnan(W)) = 0 ; % Devido ao uso do simulink e de condicoes de corrente de
    simulacao maiores que a
%conducao possivel o vetor de entrada pode conter valores nao numericos.
%Esta linha de codigo limpa tais valores
clear vetor_entrada %Limpa-se da memoria o vetor de entrada, pois ele sera
    utilizado no fim do programa
vet_entrada = W(:,1:183)'; % O vetor de entrada da celula, recebe os dados
    da matriz geral,
%de acordo com o estipulado na simulacao
vet_desejado = W(:,184)'; % O vetor desejado, utilizado no treinamento
    recebe o vetor de dados
%conforme descrito no trabalho

xmin = min(vet_entrada'); %Definem-se os maximos e minimos para a rede
xmax = max(vet_entrada');

%Inicializar a rede

net = newff( [xmin' xmax'],... % Comando para setup da rede. Ver
    documentacao Matlab
    %para maiores detalhes
        [20 20 1],...
        {'tansig' 'tansig' 'purelin'},...
        'trainlm');

%Parametros internos

net.trainParam.epochs = 100;
net.trainParam.goal = 1e-7;

```

```
net.trainParam.lr = 10;
net.trainParam.show = 5;

%Treinamento da rede

net = train(net, vet_entrada, vet_desejado);

%Teste e validacao

load('testealpha.mat'); %Carrega os dados de teste
V = vetor_entrada; %Processo similar ao de dados de entrada da rede
V(isnan(V)) = 0 ;
clear vetor_entrada
vet_teste_entrada = V(:,1:183)';
vet_teste_desejado = V(:,184)';

vet_saida = sim(net, vet_teste_entrada); % Comando que usa como input as
    entradas de teste
%e recebe a saida da rede
```


APÊNDICE C – Gráficos obtidos em simulação

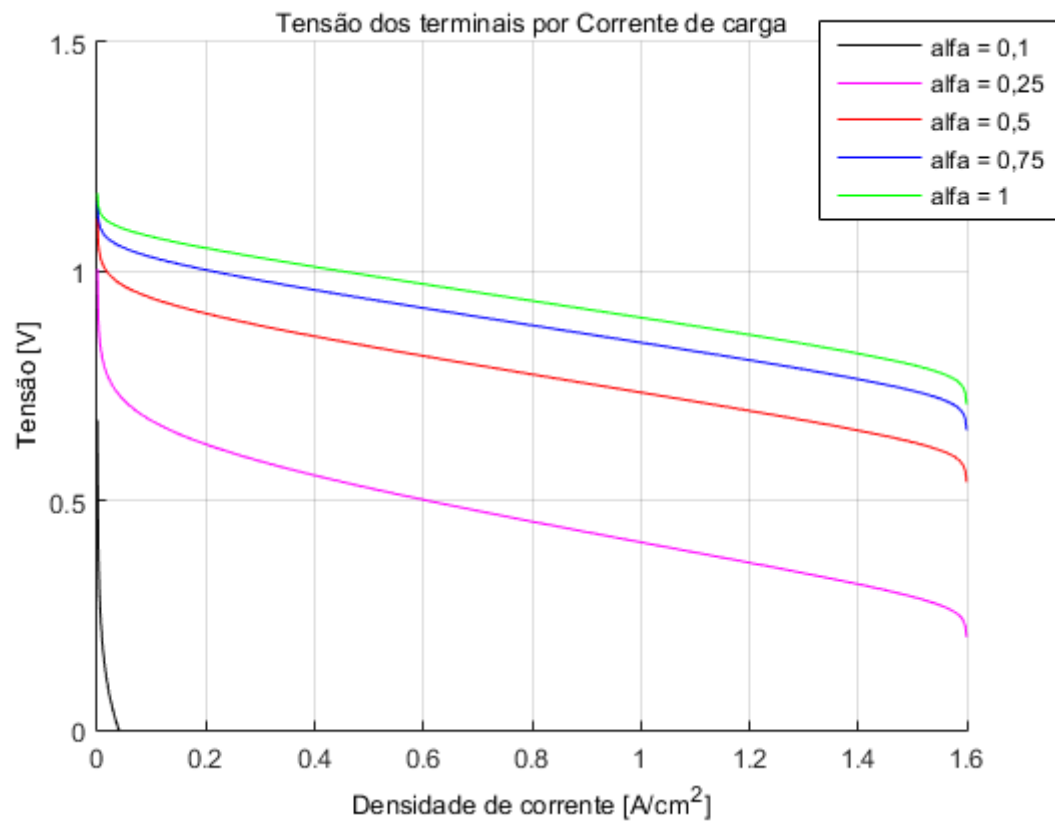


Figura 27 – Influência do coeficiente de transferência de carga na tensão de saída

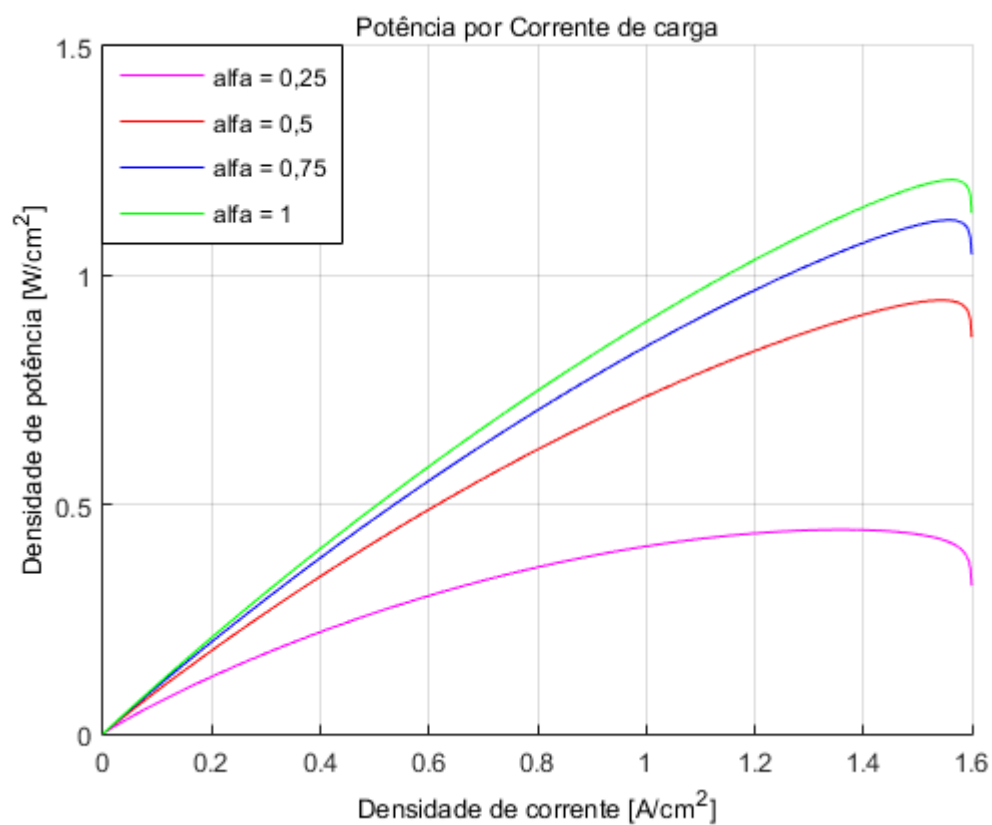


Figura 28 – Influência do coeficiente de transferência de carga na potência de saída

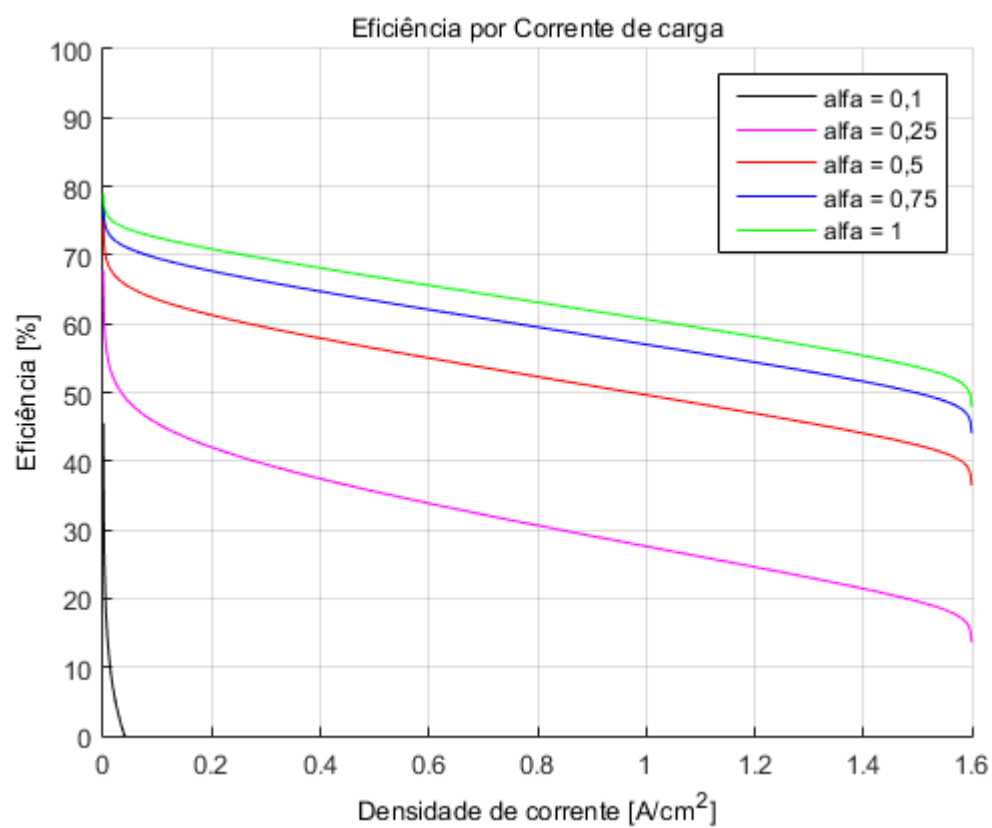


Figura 29 – Influência do coeficiente de transferência de carga na eficiência

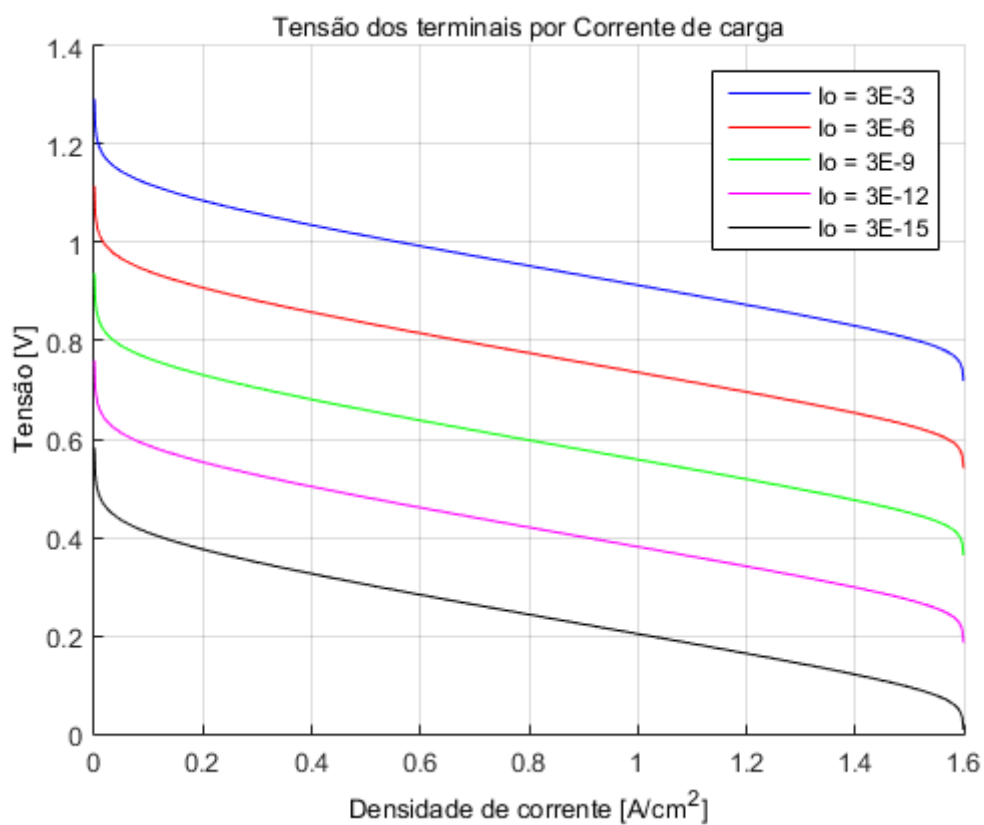


Figura 30 – Influência da corrente de troca na tensão de saída

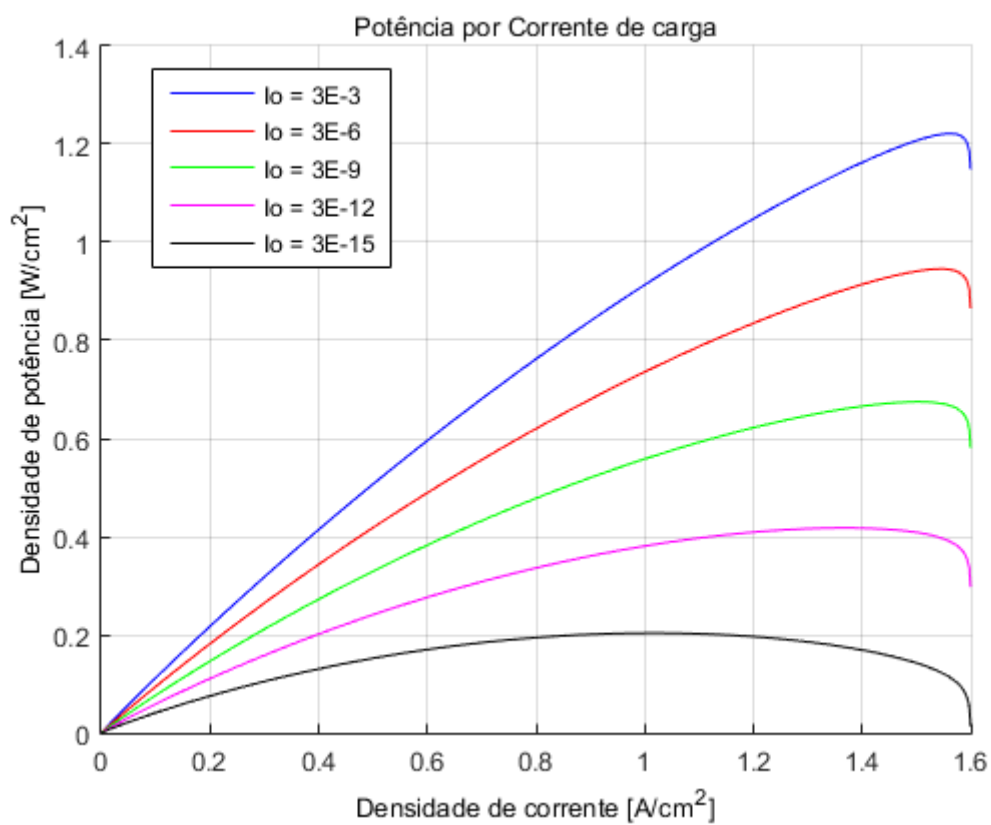


Figura 31 – Influência da corrente de troca na potência de saída

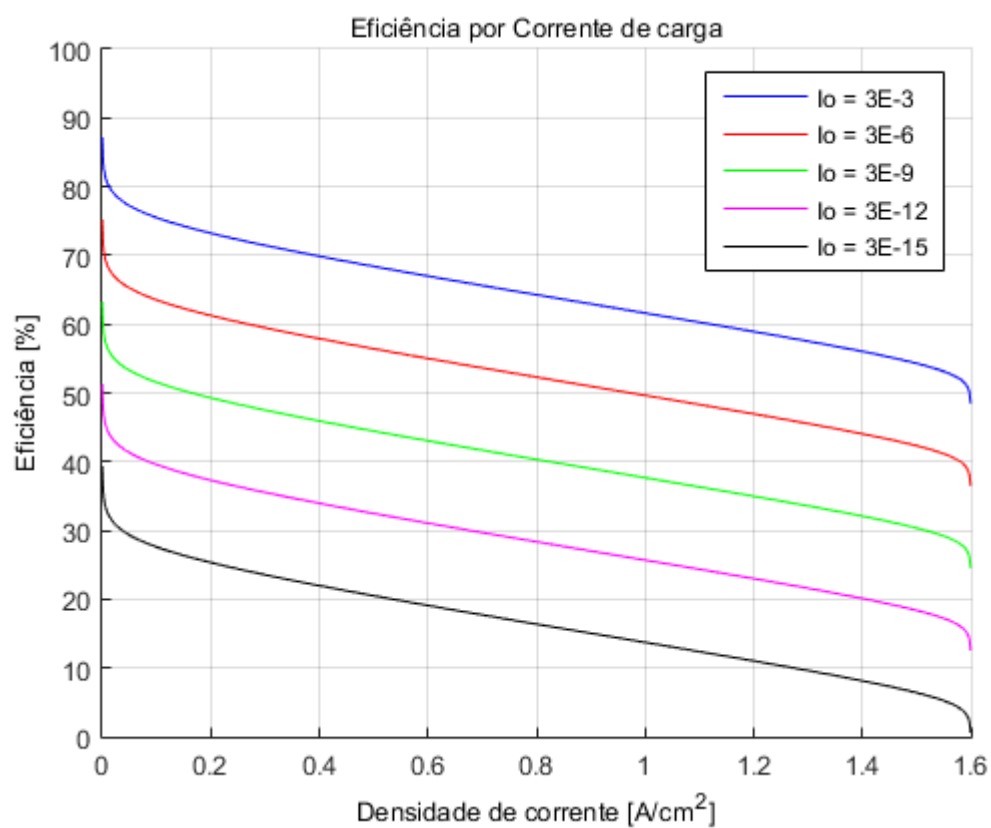


Figura 32 – Influência da corrente de troca na eficiência

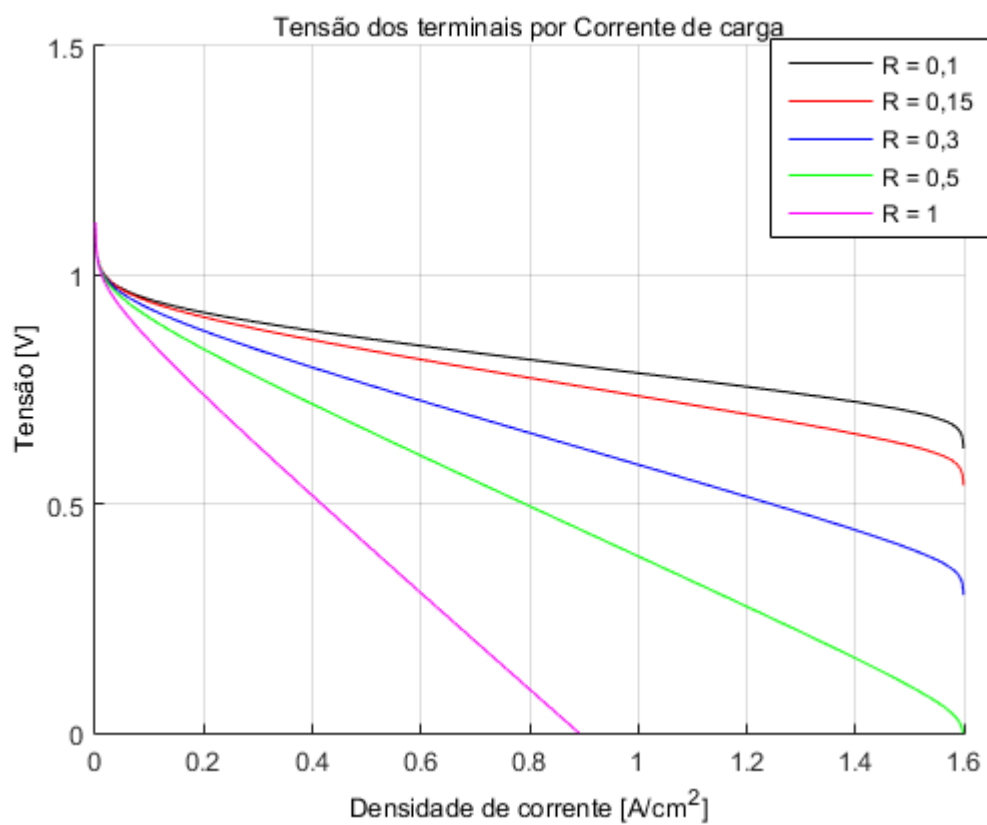


Figura 33 – Influência da resistência interna na tensão de saída

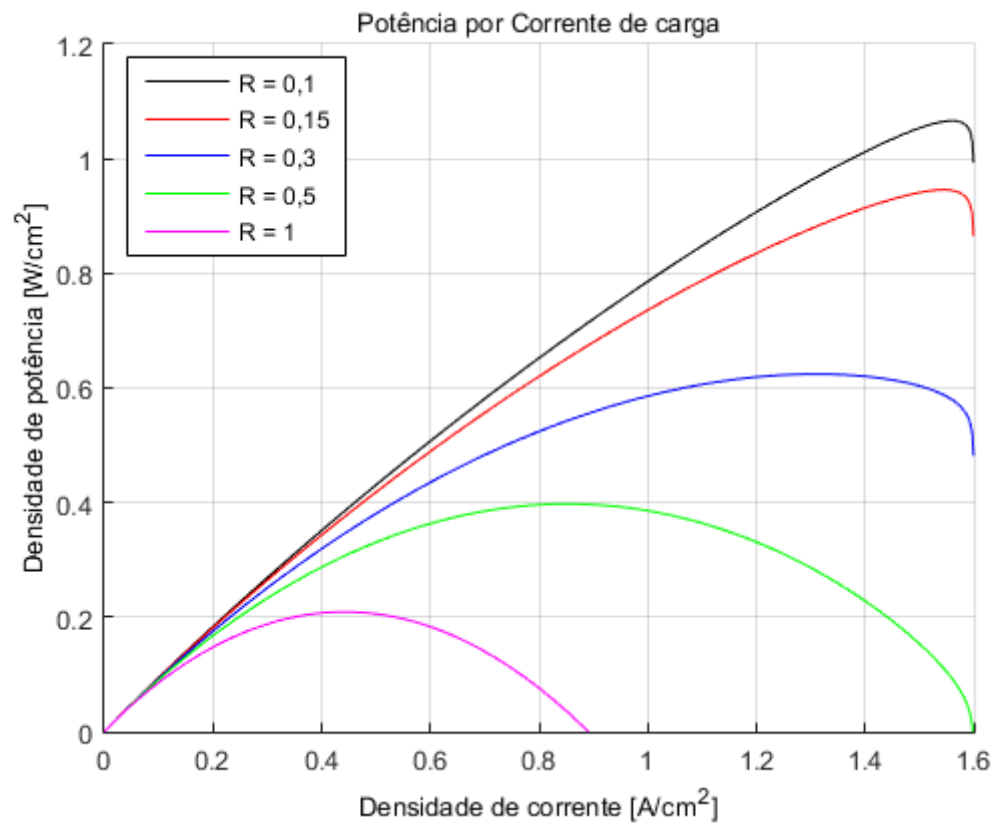


Figura 34 – Influência da resistência interna na potência de saída

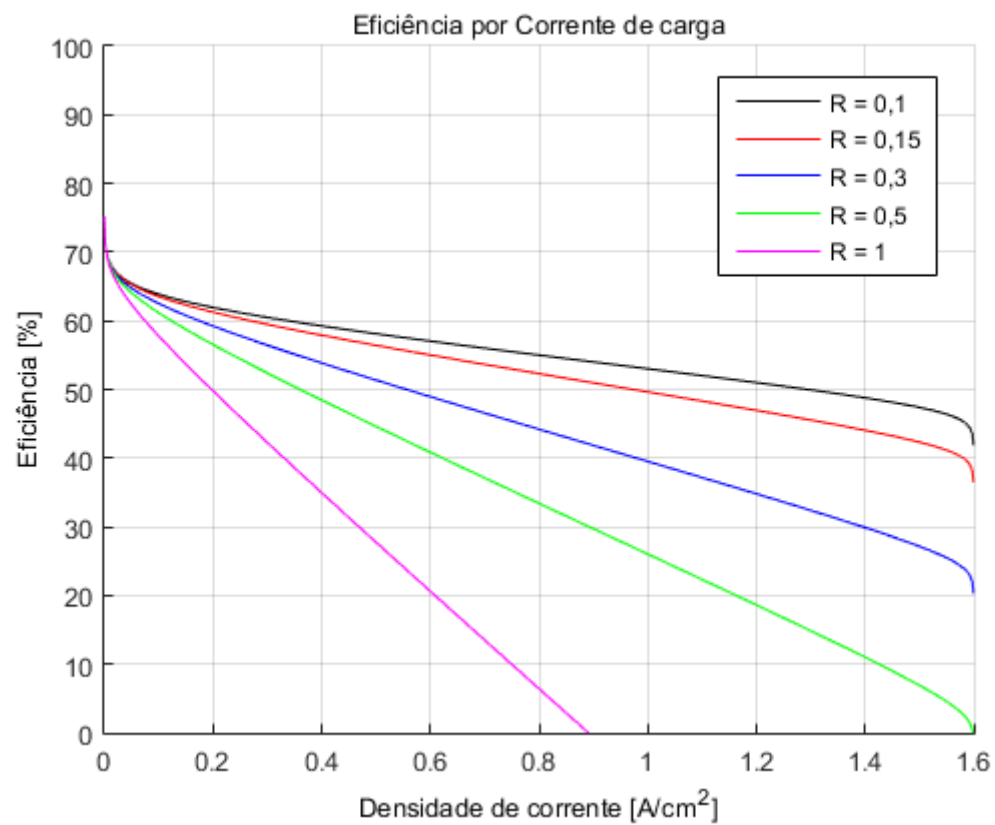


Figura 35 – Influência da resistência interna na eficiência

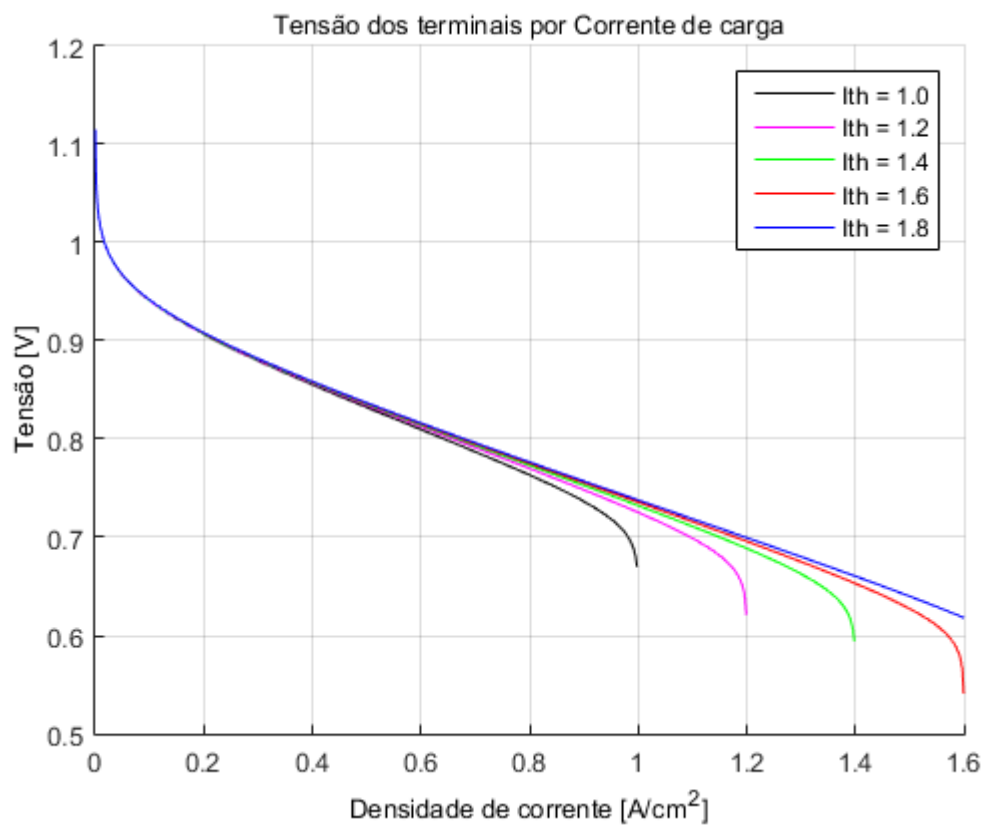


Figura 36 – Influência da corrente limitante na tensão de saída

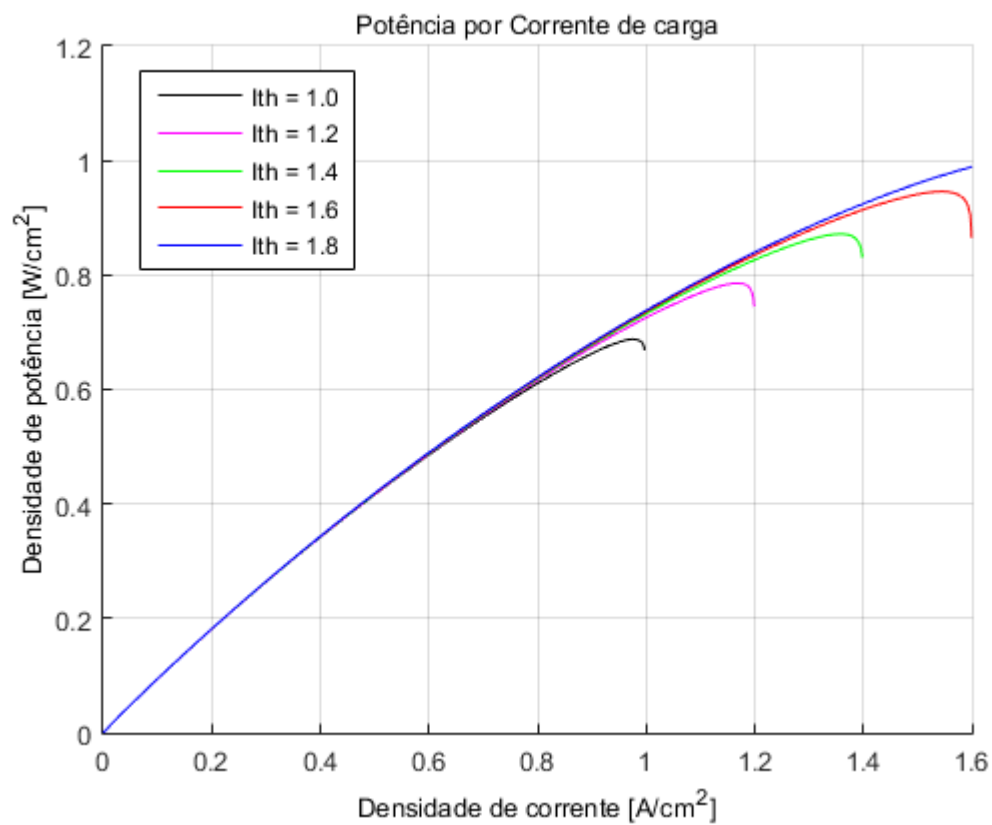


Figura 37 – Influência da corrente limitante na potência de saída

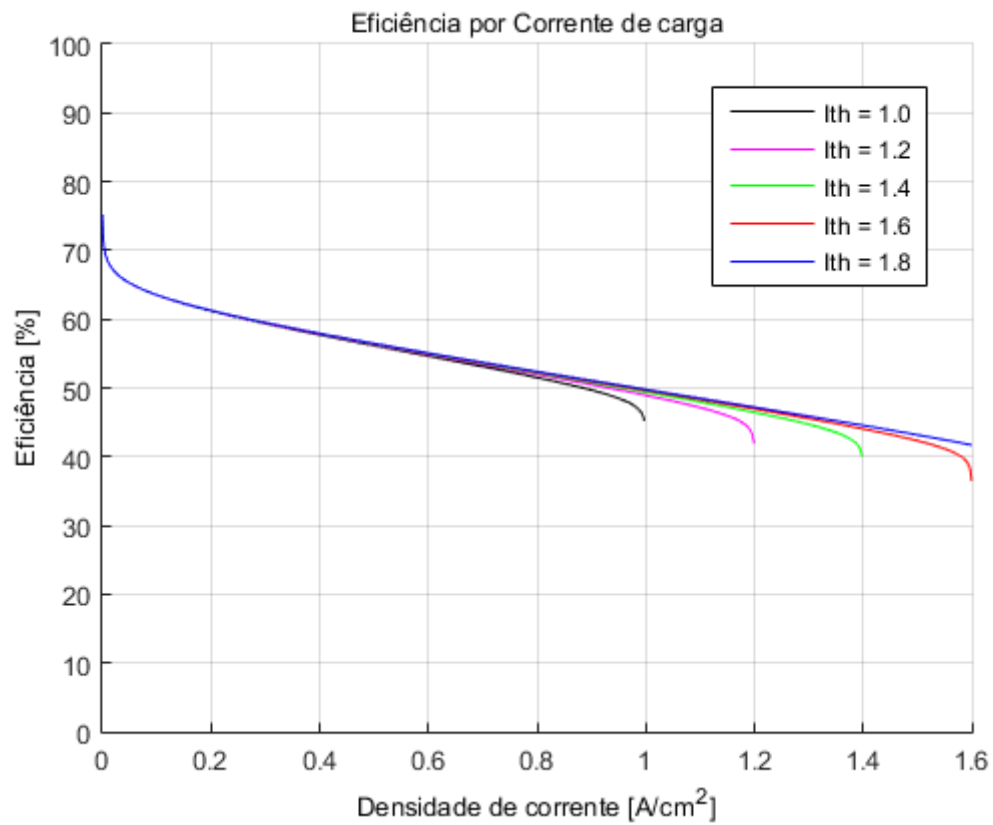


Figura 38 – Influência da corrente limitante na eficiência

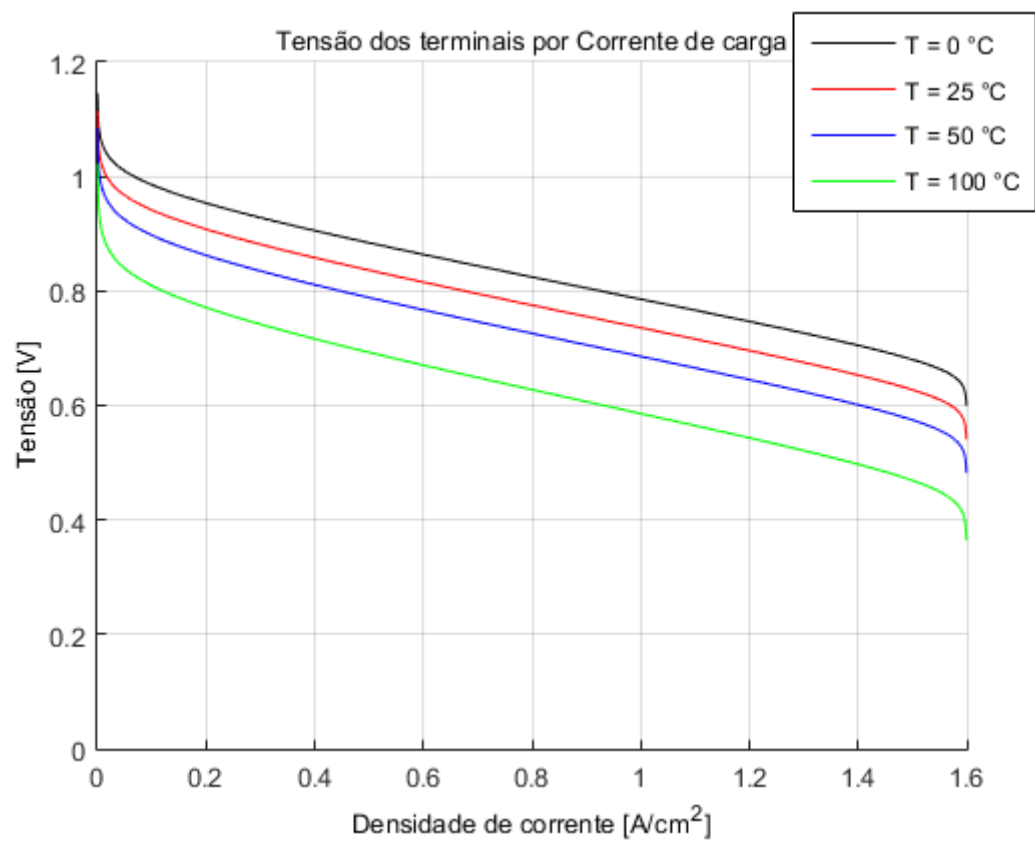


Figura 39 – Influência da temperatura na tensão de saída

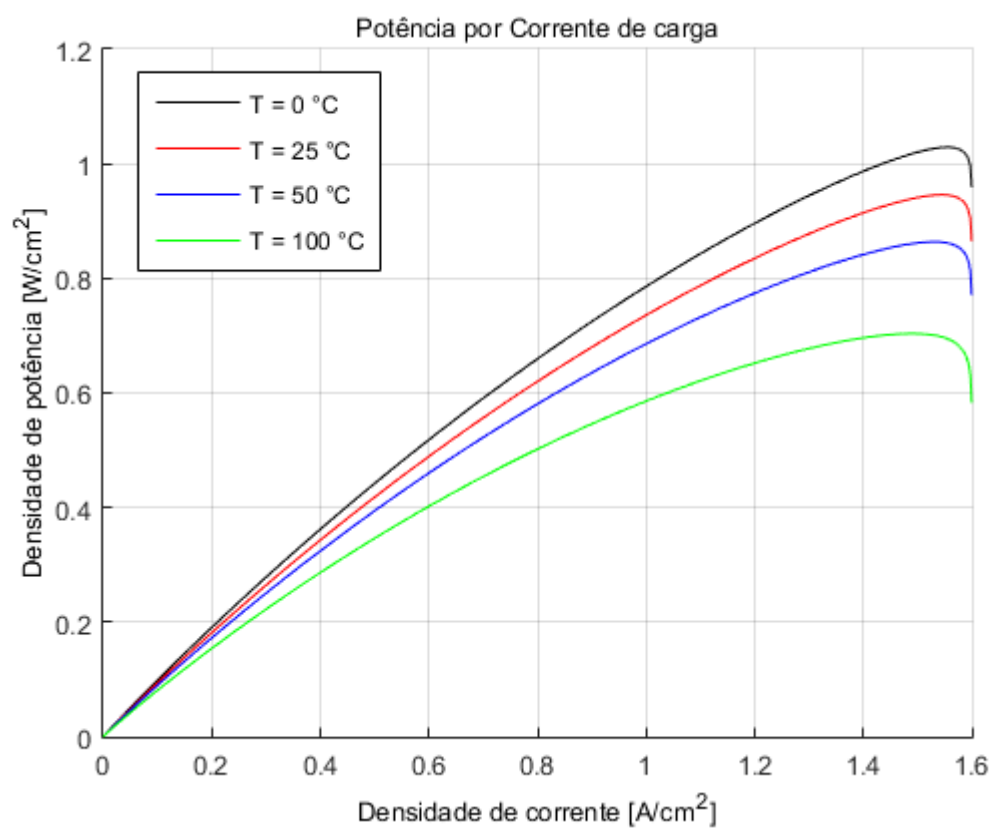


Figura 40 – Influência da temperatura na potência de saída

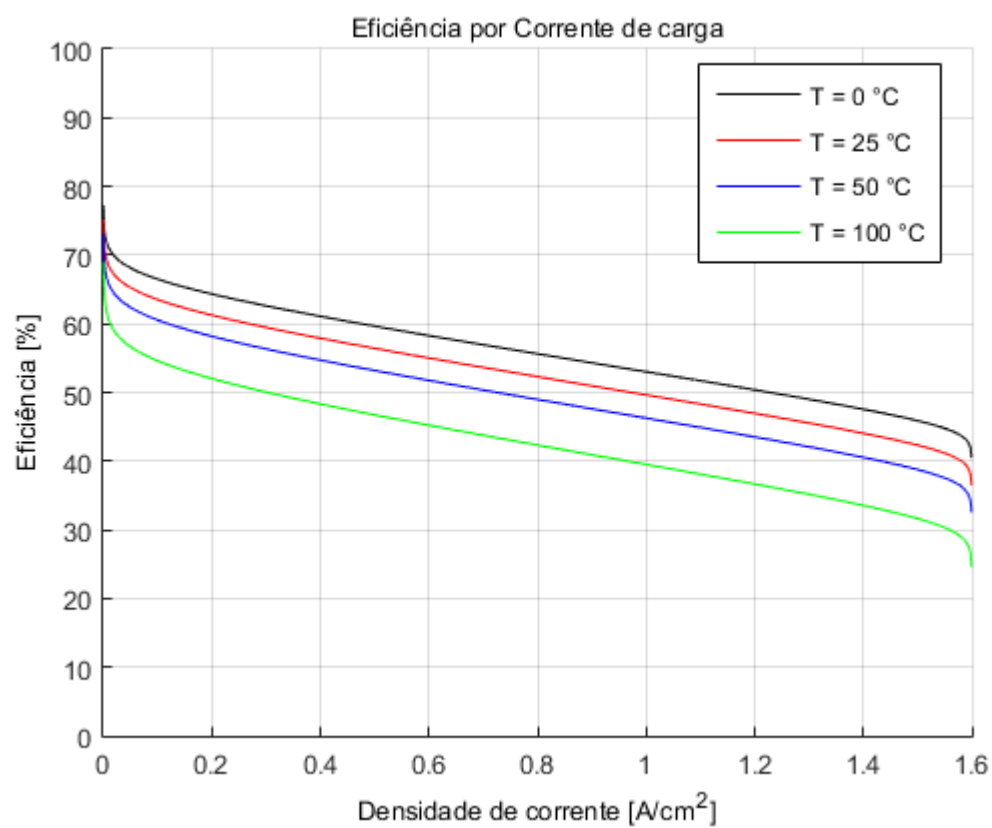


Figura 41 – Influência da temperatura na eficiência

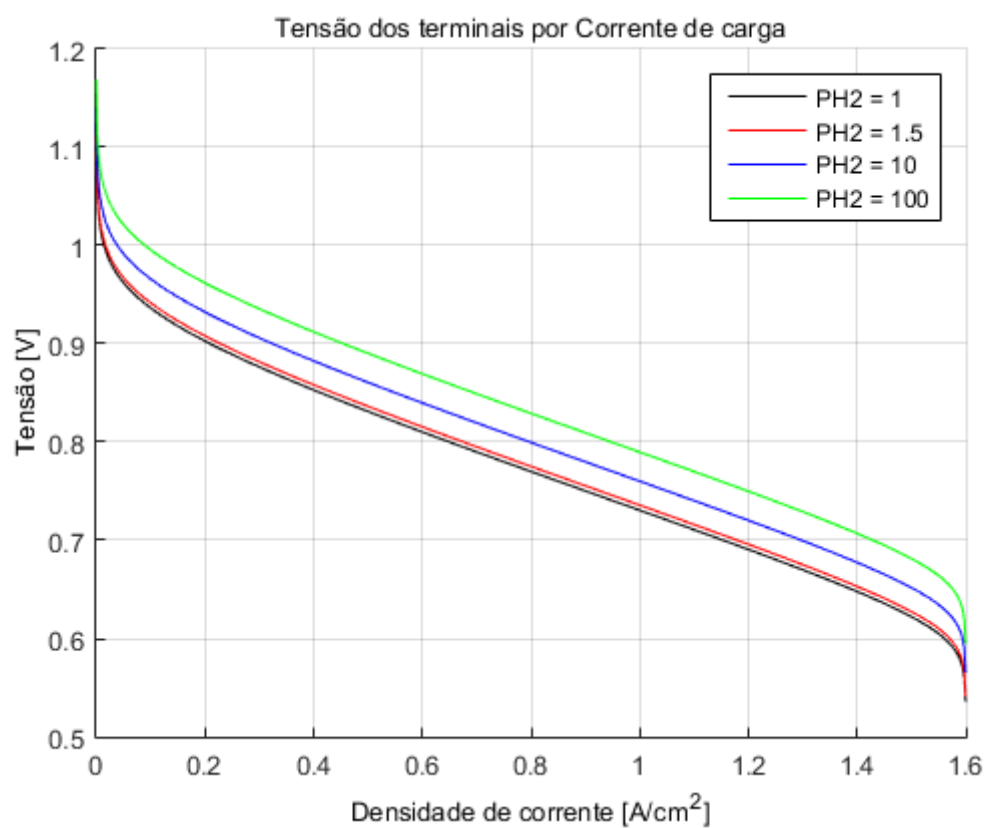


Figura 42 – Influência da pressão do combustível na tensão de saída

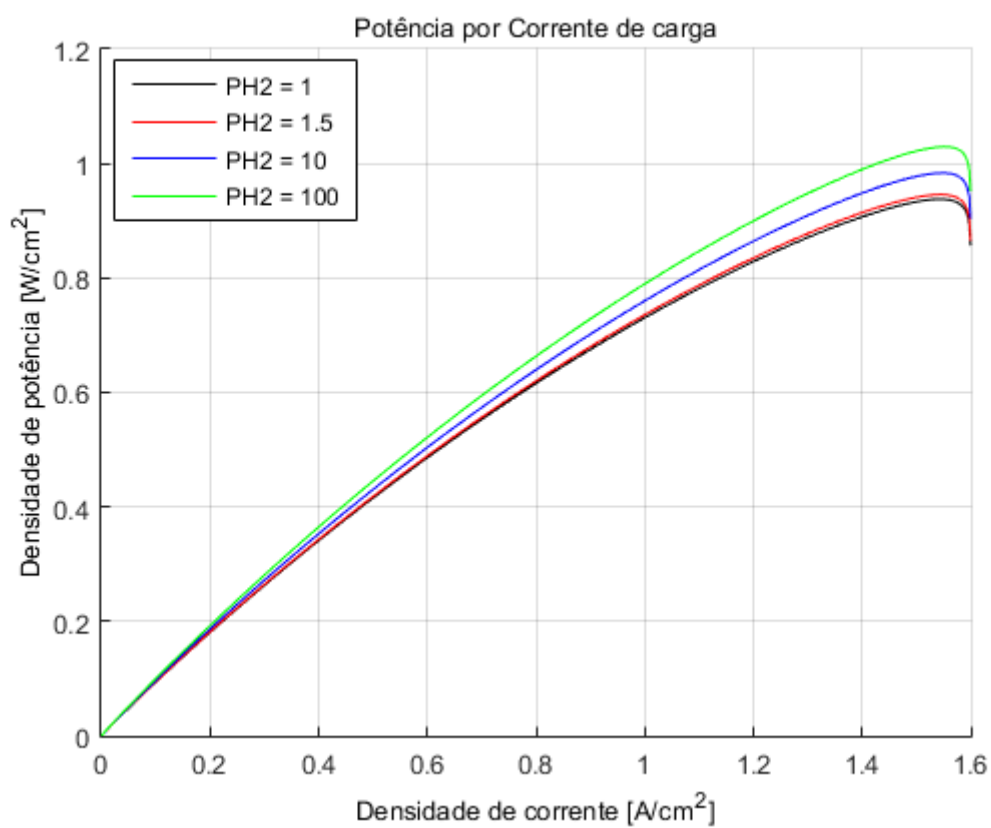


Figura 43 – Influência da pressão do combustível na potência de saída

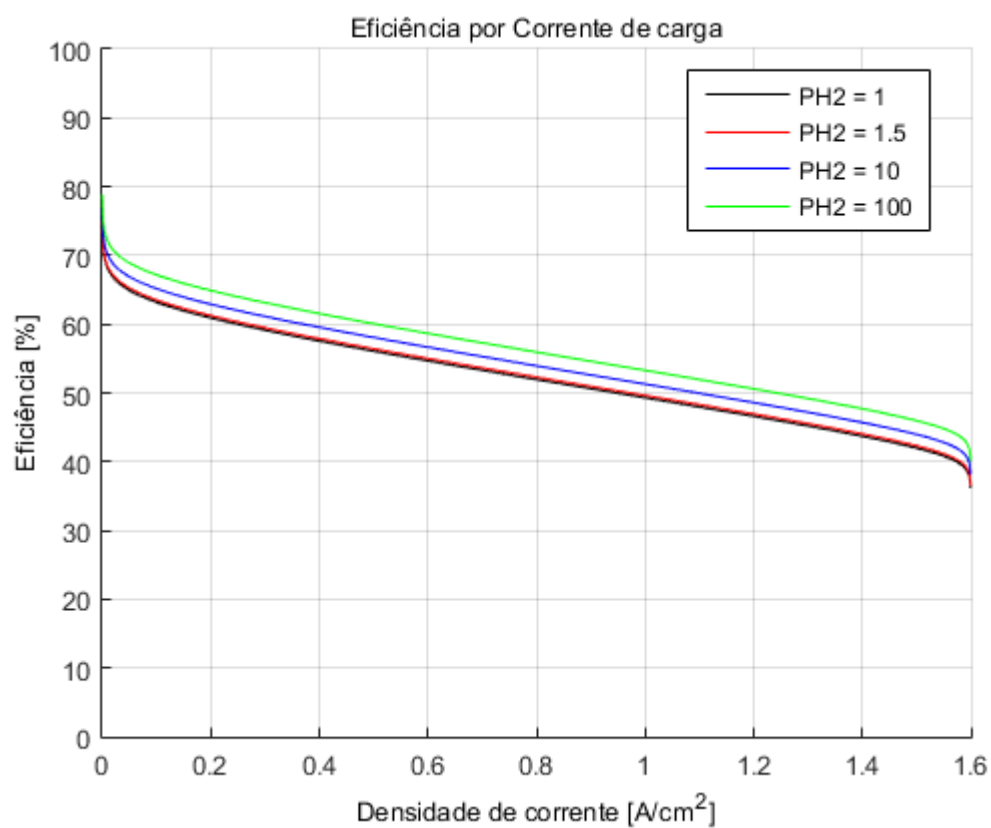


Figura 44 – Influência da pressão do combustível na eficiência

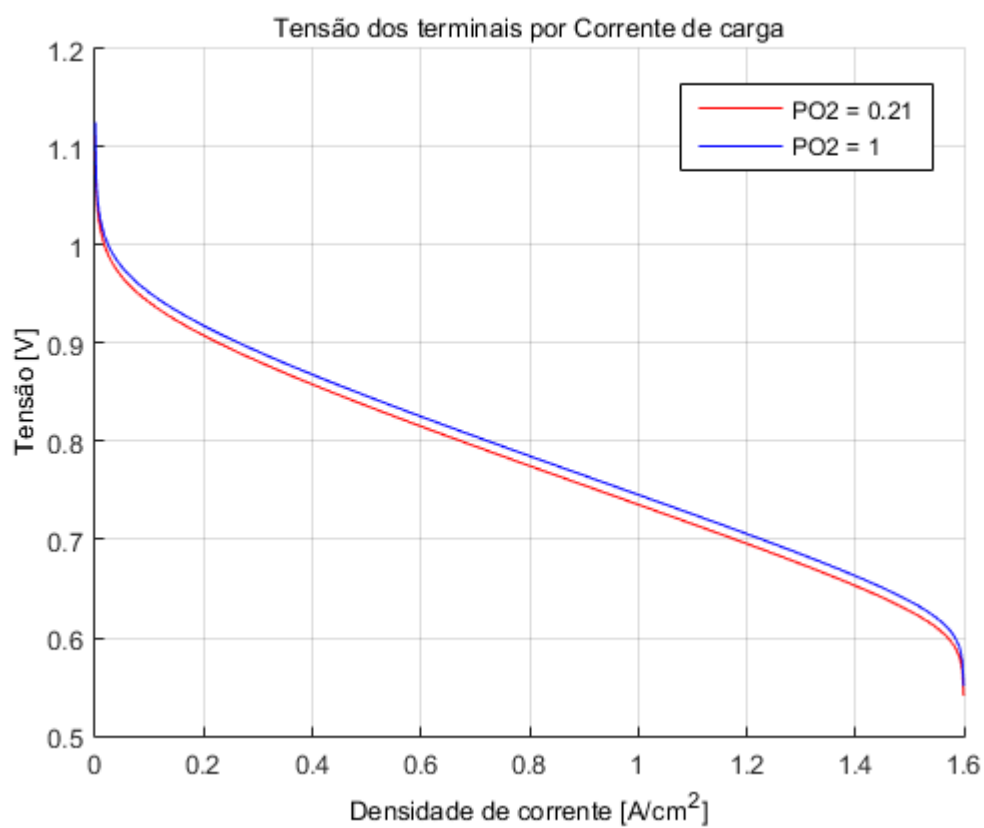


Figura 45 – Influência do uso de oxigênio puro na tensão de saída

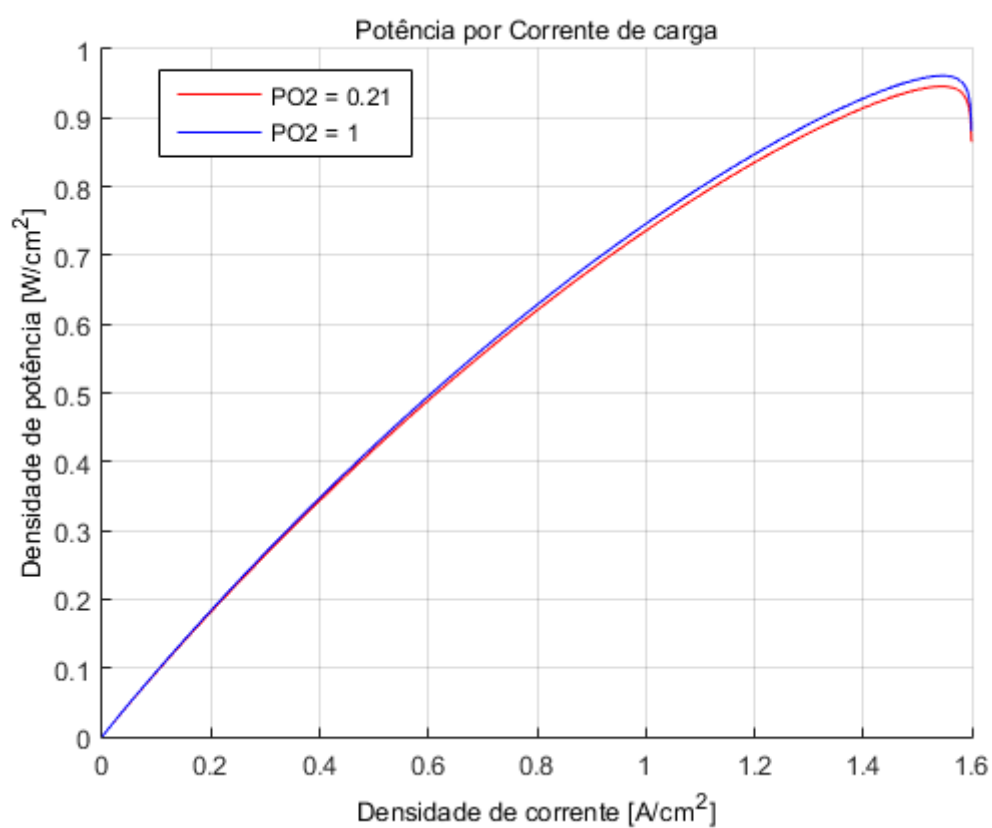


Figura 46 – Influência do uso de oxigênio puro na potência de saída

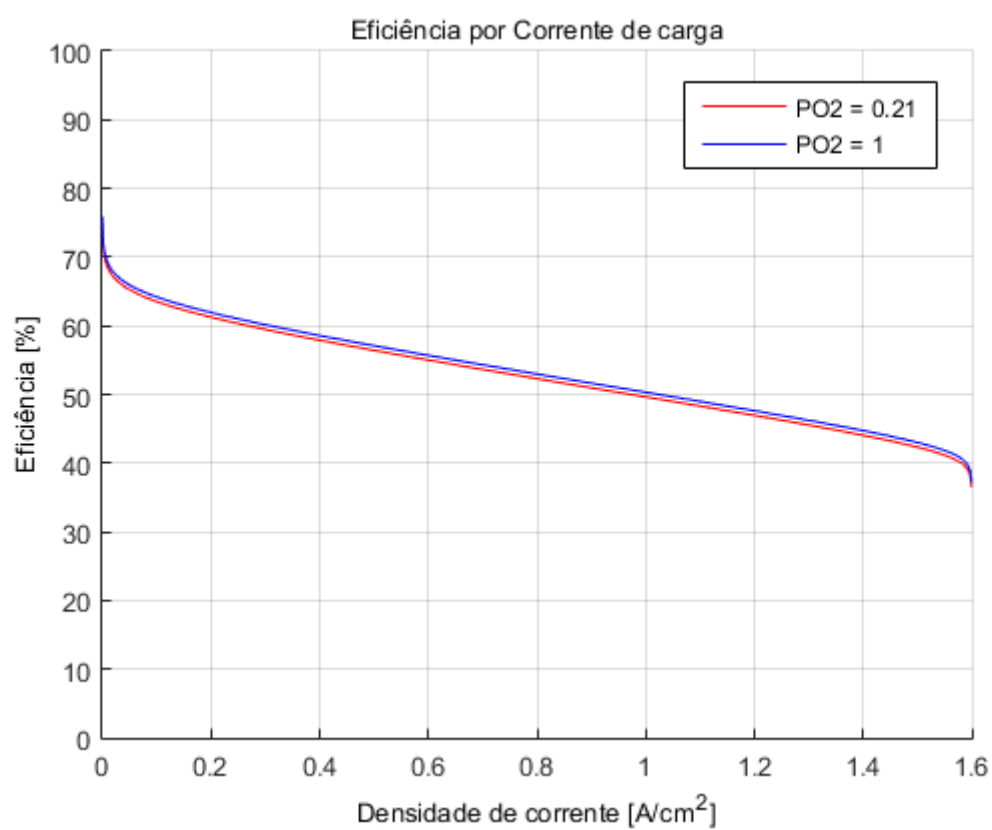


Figura 47 – Influência do uso de oxigênio puro na eficiência