

**Aplicação de *multi-layer perceptron* para previsão de emissão de gases derivados de veículos a diesel**  
***Multi-layer perceptron application for the prediction of gases emission derived from diesel vehicles***

Luis Otávio Rigo Jr.<sup>1\*</sup>, Jesuína Cássia Santiago de Araújo<sup>2</sup>, Leandro Nogueira dos Santos<sup>3</sup>, Mona Lisa Moura de Oliveira<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Professor do Depto.de Computação e Eletrônica, Universidade Federal do Espírito Santo – UFES, Campus São Mateus, ES.

<sup>2</sup>Professora do Depto.de Engenharias e Tecnologia, Universidade Federal do Espírito Santo – UFES, Campus São Mateus, ES.

<sup>3</sup>Aluno do curso de Bach. em Ciência da Computação, Universidade Federal do Espírito Santo – UFES, Campus São Mateus, ES.

<sup>4</sup>Professora do Depto. de Física, Universidade Estadual do Ceará – UECE, CE.

\*Autor para correspondência, E-mail: [luis.rigo@ufes.br](mailto:luis.rigo@ufes.br)

*Article history*

*Received: 23 April 2017*

*Accepted: 07 June 2017*

*Available online: 25 June 2017*

**Resumo:** Fontes veiculares movidos a Diesel têm contribuído significativamente para o aumento da poluição atmosférica, devido a desvantagem de emitir materiais particulados e, especialmente, NO<sub>x</sub>. A solução proposta para reduzir essas emissões tem sido a incorporação de um sistema catalítico nos veículos Diesel, ao qual injeta uréia nos gases de escape. Tal processo, conhecido como SCR (*Selective Catalytic Reduction*), tem por finalidade transformar NO<sub>x</sub> em N<sub>2</sub> e H<sub>2</sub>O. Órgãos governamentais têm exigido dos fabricantes de motores soluções tecnológicas capazes de reduzir as emissões destes poluentes. Essas soluções estão atreladas a uma série de testes experimentais onerosos. Tendo-se em vista que as taxas de emissão de NO<sub>x</sub> dependem de fatores que se correlacionam de forma complexa, faz-se necessário à utilização de ferramentas de simulação para prever tais taxas. Neste trabalho, foi utilizada uma Rede Neural Artificial, denominada *Multi-Layer Perceptron*, com algoritmo de aprendizado supervisionado *Back Propagation*, para estimar as taxas de emissão dos gases NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub> e N<sub>2</sub>O em veículos a Diesel. Os resultados mostraram que parâmetros de entrada (velocidade espacial, temperatura, concentração de NO<sub>x</sub>, de NH<sub>3</sub>, de O<sub>2</sub>, de SO<sub>2</sub> e de H<sub>2</sub>O) se correlacionam fortemente com as taxas de emissão de NO<sub>x</sub> e NH<sub>3</sub> na saída. Este fator foi comprovado pela grande capacidade de aprendizado das redes testadas. Para avaliar o desempenho da rede na previsão das taxas de emissão foram avaliadas três métricas: REMQ, EMABS e R<sup>2</sup>. Os melhores resultados de REMQ foram 0,018 para NO<sub>x</sub>, 0,019 para NH<sub>3</sub> e 0,041 para N<sub>2</sub>O. Para EMABS foram encontrados valores de 0,9% para NO<sub>x</sub>, de 1,0% NH<sub>3</sub> e 1,7% de N<sub>2</sub>O. Além disso, o modelo de RNA proposto apresentou coeficiente de determinação (R<sup>2</sup>) de 0,994 para NO<sub>x</sub> e 0,996 para NH<sub>3</sub>. Estes resultados revelam que a RNA demonstrou ser um método eficiente para prever as taxas de emissão de poluentes em perímetro urbano e rodovias.

Palavras chave: emissão de NO<sub>x</sub>, motor diesel, redução catalítica seletiva (SCR), previsão, *multi-layer perceptron*.

**Abstract:** Government agencies have been demanded from engine manufacturers technological solutions capable of reducing emissions of air pollutants. Vehicular sources have a huge impact in air pollution because they emit particulate materials, especially NO<sub>x</sub>. Currently, to reduce these emissions, catalytic systems are incorporated in diesel vehicles. For instance, the Selective Catalytic Reduction (SCR) system injects urea for transforming NO<sub>x</sub> into N<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O. However, emission rates of NO<sub>x</sub> follows a complex way demanding the development of simulation tools instead of performing onerous experimental tests. In the present work, the emission rates of NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub> and N<sub>2</sub>O gases in diesel vehicles are estimated using Artificial Neural Networks (ANN). In particular, a Multilayer Perceptron with Back-propagation algorithm. The algorithm inputs are the spatial velocity, the temperature, NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub>, O<sub>2</sub>, SO<sub>2</sub> and H<sub>2</sub>O concentration. The algorithms results showed that the outputs, NO<sub>x</sub> and NH<sub>3</sub> emission rates, were strongly correlated with the inputs. This fact evidences the high learning capacity of the ANN. REMQ, EMABS and R<sup>2</sup> metrics were used to evaluate the prediction. In the case of REMQ, they found values of 0.018, 0.019 and 0.041 for NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub>, and 0.041; respectively. In the case of EMABS, they found values of 0.9%, 1.0% and 1.7% for NO<sub>x</sub>, NH<sub>3</sub> and N<sub>2</sub>O; respectively. In addition, the proposed ANN model

presented a coefficient of determination ( $R^2$ ) of 0.994 for  $NO_x$  and 0.996 for  $NH_3$ . These results reveal the high efficiency of the ANN to predict the emission rates of particulate materials in urban perimeters and roads.

*Keywords:*  $NO_x$  emissions, diesel engine, selective catalytic reduction, prediction, multi-layer perceptron.

## 1. Introdução

Os veículos automotores têm uma participação expressiva no aumento da poluição do ar, principalmente nos grandes centros urbanos. A presença de poluentes atmosféricos, sobretudo oriundos da combustão veicular, em concentrações superiores às recomendadas pelos órgãos ambientais e pela Organização Mundial da Saúde (OMS), pode causar efeitos nocivos à saúde da população e ao meio ambiente.

De acordo com os dados do Departamento Nacional de Trânsito (DENATRAN, 2011), houve aumento significativo na motorização no Brasil nas últimas décadas. Em 2011, o país possuía uma frota de 70,5 milhões de veículos, entre automóveis, comerciais leves, caminhões, ônibus, carretas e motocicletas. Isto representa um aumento aproximado de 121% quando comparado com a frota de 2001 (32 milhões de veículos).

Apesar da variedade de combustíveis disponíveis para aplicação automobilística, o uso do diesel merece ser destacado. Em 2015, a frota de veículos movidos a Diesel em circulação no país totalizou 6.898.542 unidades (DENATRAN, 2016). A tendência mundial de utilizar o motor Diesel se deve principalmente ao rendimento real alcançado por esses motores (~34%), quando comparada com motores Otto (~26%). Do ponto de vista ambiental, o ciclo Diesel apresenta vantagem uma vez que é regulado apenas pela vazão de combustível, mantendo a vazão de ar constante ao longo do processo. Isto faz com que as emissões de hidrocarbonetos e monóxido de carbono sejam minimizadas, já que estes motores trabalham com excesso de oxigênio (Grigórios *et al.*, 1999). Em contrapartida, a câmara de combustão do motor diesel opera em alta temperatura, devido à necessidade de atingir o ponto de ebulição das frações mais pesadas de hidrocarbonetos presentes neste combustível. Estas condições propiciam a formação de óxidos de nitrogênio ( $NO_x$ ) pela reação térmica do  $O_2$  com o  $N_2$  do ar (Loureiro, 2005). Outra desvantagem apresentada pelo motor Diesel é o fato deste emitir elevada quantidade de material particulado (MP) (Shahir *et al.*, 2015). Assim, reduzir as emissões de  $NO_x$  e MP em motores Diesel tem sido um dos principais objetivos das tecnologias de controle pós-combustão, sobretudo na necessidade de atender os padrões legislados, cada vez mais restritos.

Em 1986, a adaptação das diretivas europeias e americanas pelo governo brasileiro propiciou a elaboração da Resolução CONAMA n° 18/1986 e a criação do Programa de Controle de Poluição do Ar por Veículos Automotores - PROCONVE (MMA, 1986). O programa tornou-se mais restritivo ao longo dos anos, estando vigente até hoje. Desde 2012, os veículos pesados a Diesel seguem a norma PROCONVE P7 do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), visando reduzir significativamente as emissões de  $NO_x$  e MP, notadamente: 60% para  $NO_x$  (redução de 5 g/kWh para 2 g/kWh) e de 80% para o MP (redução de 0,10 g/kWh para 0,02 g/kWh) (IBAMA, 2016; DieselNet, 2017).

As tecnologias de controle pós-combustão são essenciais para a redução das emissões de  $NO_x$ , uma vez que transformam esses poluentes em nitrogênio e oxigênio. A decomposição do NO em  $N_2$  e  $O_2$  é uma reação termodinamicamente favorável a baixas temperaturas, no entanto sua cinética é muito lenta (BUSCA *et al.*, 1998). Assim, o uso da catálise apresenta-se como a solução mais viável para acelerar essa reação e controlar as emissões de  $NO_x$  após os processos de combustão (Guan *et al.*, 2014).

Desta maneira, com fins de atender a legislação, tem sido incorporado aos veículos a Diesel um sistema catalítico de pós-tratamento, que injeta uma solução à base de uréia (conhecida no Brasil como ARLA 32®) nos gases de escape. Este processo é conhecido como SCR (do inglês, *Selective Catalytic Reduction*), que tem por finalidade transformar o  $NO_x$  em gases menos nocivos (Guan *et al.*, 2014). Em geral, os catalisadores comerciais empregados neste processo são constituídos por monólitos metálicos/cerâmico à base de óxidos de vanádio e titânio (Oliveira, 2009a).

No sistema SCR ocorre a decomposição térmica da uréia, aproximadamente a 120 °C como apresentada na Eq. (1), que fornece a amônia necessária para redução catalítica do NO. A amônia reduz o NO na presença de oxigênio, gerando nitrogênio ( $N_2$ ) e vapor d'água (Ciambelli, 2000). A principal rota de conversão de NO em um sistema catalítico típico usando amônia como agente redutor está descrita na Eq. (2).

*Hidrólise da Uréia**SCR*

É importante ressaltar que quando se refere à emissão de poluentes atmosféricos, a preocupação concentra-se, sobretudo, na taxa de NO<sub>x</sub> (Ford e Weckler, 2005). Assim, os órgãos governamentais têm atuado como agentes controladores, tomando como base normas estabelecidas (PROCONVE, EPA2010) e obrigando os fabricantes de motores a procurar soluções tecnológicas, capazes de reduzir os níveis de emissões destes poluentes. Essas soluções estão muitas vezes atreladas a uma série de testes experimentais laboriosos e onerosos, tornando-os de difícil implementação em curto prazo do ponto de vista industrial. A Tabela 1 relaciona os parâmetros típicos da corrente de gases de escape de um veículo Diesel.

Tabela 1. Características típicas dos gases de exaustão de veículos a Diesel (Gabrielsson, 2004; Durán *et al.*, 2005; Guan *et al.*, 2014; Shahir *et al.*, 2015).

Parâmetros	
Velocidade espacial (h <sup>-1</sup> )	30.000 – 300.000
Temperatura (°C)	40 – 580
O <sub>2</sub> (%v/v)	3-18
H <sub>2</sub> O (%v/v)	1-15
NO (ppm)	50 – 2.000
SO <sub>2</sub> (ppm)	0 – 100

É fato que para estimar as taxas de emissões de poluentes são necessários diferentes dados de entrada. Isto se deve ao fato que a queima de combustíveis nos motores de combustão interna dependem de fatores como: tipo ou tecnologia da fabricação do veículo, idade ou quilometragem, temperatura do ambiente, altitude e ciclo de operação (partidas a frio, paradas, mudanças de velocidade e velocidade média) (Cassiano *et al.*, 2016). A quantidade de variáveis torna inviável a realização de testes experimentais. Assim, tendo-se em vista que esses fatores devem ser levados em consideração e que os mesmos se correlacionam de forma complexa, contribuindo de forma diferenciada na taxa de emissões, faz-se necessário à utilização de ferramentas de simulação para estimar esses valores (Serra *et al.*, 2003; Oliveira *et al.*, 2011).

A aplicação de métodos de Inteligência Artificial (IA) em cenários onde existe a impossibilidade prática de testar todas as variáveis envolvidas no problema tem se tornado comum em várias áreas da ciência. Inspiradas em ambientes biológicos, estas técnicas apresentam desempenho robusto e consistente para os mais variados problemas. As RNAs são métodos de IA inspirados no processo de nas redes de neurônios biológicos (Russel, 2013). Esses métodos possuem a capacidade de aprender a partir dos seus ambientes e de melhorar o seu desempenho através do treinamento (Serra *et al.*, 2003).

A abordagem de RNA (Redes Neurais Artificiais), em especial a rede *Multi-Layer Perceptron* (MLP), tem sido aplicada para simular sistemas catalíticos, em especial sistemas SCR (Oliveira *et al.*, 2009a; 2009b e 2011). Em geral, os autores avaliaram a atividade dos catalisadores, sobretudo em função do metal que compensa cargas no suporte utilizado, da composição da mistura gasosa poluente e das condições experimentais (temperatura, velocidade espacial). Usando RNA observaram que as previsões no estado inicial dos processos de combustão de veículos Diesel são razoavelmente precisas, sendo a previsão de NO<sub>x</sub> com menores erros relativos. Desta forma, estudos dessa natureza tem sido ampliado para prever a eficiência de conversão de NO<sub>x</sub> (%), concentração de NH<sub>3</sub> de fuga ou *slip* (que não reagiu no sistema) e emissões de N<sub>2</sub>O, compostos indesejáveis para várias condições de condução.

Encontrar a melhor RNA e/ou a melhor condição de predição de fatores de emissão oriundos de veículos automotores tem sido objeto de estudo de vários pesquisadores. No trabalho realizado por Mohammadhassani *et al.* (2012), a previsão da emissão de NO<sub>x</sub> foi feita utilizando uma rede MLP de três camadas com algoritmo de aprendizado *Levenberg Marquardt* (LM). Os dados previstos pela rede apresentaram erro médio quadrático de 10%. Krijnsen *et al.* (2000) utilizaram a rede MLP com algoritmo de aprendizado *Back-Propagation* para estimar as emissões de NO<sub>x</sub> de um motor diesel operando em regime transiente. O erro médio absoluto entre a emissão prevista e a medida experimentalmente foi de

6,7%. Oliveira e colaboradores (2009b e 2011) testaram diversas RNA em seus estudos, contudo a melhor RNA (menor erros médios quadrático) escolhida foi aplicada, sendo constituída por uma única camada oculta contendo 3 neurônios que provou ser a melhor solução para integrar a função de correlação resultante para aplicação em um veículo rodoviário a Diesel. Estes autores aplicaram uma RNA com 7 entradas e 1 saída, utilizando o algoritmo LM no treinamento da rede, apresentando erros médios quadrático de 7% nos testes realizados.

Assim, o presente trabalho tem como objetivo a utilização de uma rede MLP com *Back-Propagation*, para prever as taxas de emissões de NO<sub>x</sub> (ppm e/ou g/kWh) de veículos movidos a diesel, operando em perímetro urbano e rodovias. A viabilidade da aplicação destas técnicas permitirá o desenvolvimento de ferramentas de suporte à tomada de decisões para sugerir projetos de políticas públicas e decisões empresariais que promovam ações mais eficientes para redução da emissão destes poluentes.

## 2. Metodologia

### 2.1 Aquisição dos dados

O banco de dados utilizado neste estudo foi obtido por Oliveira *et al.* (2009a), mediante as seguintes etapas: (i) Aquisição de dados de emissão de NO<sub>x</sub> a partir de bancada experimental, utilizando catalisadores SCR sintetizados e um catalisador comercial; (ii) Utilização dos dados de bancada na geração de um modelo matemático e (iii) Integração do modelo gerado a partir dos dados experimentais ao simulador ADvanced VehIcle SimulatOR (ADVISOR).

A eficiência dos catalisadores na conversão de NO<sub>x</sub> e NH<sub>3</sub>, bem como a formação de N<sub>2</sub>O foram avaliadas por meio da variação de parâmetros como: velocidade espacial (SV h<sup>-1</sup>), temperatura gás de escape (T °C), concentração de oxigênio (O<sub>2</sub> v/v%), concentração do vapor d'água (H<sub>2</sub>O v/v%), concentração de dióxido de enxofre (SO<sub>2</sub> ppm), concentração de óxido de nitrogênio (NO ppm) e concentração de amônia (NH<sub>3</sub> ppm).

As etapas (ii) e (iii) são fundamentais, uma vez que o simulador ADVISOR não abrange o processo SCR (OLIVEIRA *et al.*, 2011). Assim, uma vez integrado ao modelo matemático gerado na etapa (ii), o ADVISOR foi utilizado na aquisição de 2136 situações experimentais simuladas (ciclos de condução, motorização). Nesta etapa foi selecionado um veículo Diesel com 18.000 kg, equipado com um motor pré-Euro, apresentando potência máxima de 173 kW e catalisador SCR de 15 litros. Os circuitos de condução contemplaram uma velocidade média de 60 km/h no perímetro urbano e 78 km/h em rodovias, com distância de 12 km e 17 km, respectivamente. As temperaturas médias na saída da exaustão foram aproximadamente de 270 °C para o perímetro urbano e 376 °C para o rodoviário.

Foram obtidos 1370 dados de motorização (casos) em perímetro urbano e 766 em rodovias. Para cada caso, foram extraídas 7 (sete) características (parâmetros) de entrada e 3 (três) de saída, selecionadas no estudo prévio realizado por Oliveira *et al.* (2011) e mantidas no presente trabalho. Na Tabela 2 estão sumarizadas as características, bem como os valores máximos e mínimos para perímetro urbano e rodovia.

Tabela 2. Descrição das informações coletadas pelo sistema.

Tipo	Característica (parâmetro)	Unid.	Perímetro urbano		Rodovias	
			min.	max.	min.	max.
Entradas	Velocidade	h <sup>-1</sup>	41.802,367	723.361,875	45.000,566	757.374,063
	Temperatura	°C	126,040	542,630	126,040	542,450
	O <sub>2</sub>	%	4,700	17,200	5,000	17,200
	NO <sub>x</sub>	ppm	63,900	1.858,500	52,500	1.521,900
	H <sub>2</sub> O	%	2,200	9,400	2,200	9,200
	SO <sub>2</sub>	ppm	3,780	16,270	3,780	16,010
Saídas	NH <sub>3</sub>	ppm	63,900	1.858,50	52,500	1.521,900
	NO <sub>x</sub> saída	ppm	6,095	484,763	3,236	387,991
	NH <sub>3</sub> saída	ppm	0,000	358,120	0,000	321,632
	N <sub>2</sub> O saída	ppm	0,013	44,388	0,097	0,097

## 2.2 Pré-processamento dos dados

Uma vez coletado o conjunto de casos do simulador, representado pela matriz  $L[N \times M]$ , onde  $N$  é o número casos e  $M = 9$ , foi realizado o processo de normalização dos dados, conforme Eq. (3)

$$L'(:, j) = \frac{L(:, j) - \min(L(:, j))}{\max(L(:, j)) - \min(L(:, j))}, \forall j = 1, 2, \dots, 9, \quad (3)$$

de modo que cada coluna de  $L'$  contém valores reais entre 0 e 1, sendo 0 o menor valor da coluna de característica e 1 o maior valor.

Após o processo de normalização, foi efetuado o cálculo da média e variância dos mesmos. A Fig. 1 apresenta a relação gráfica dos valores de cada parâmetro para o conjunto de dados coletados no perímetro urbano. Como pode ser observado, o gráfico à esquerda relaciona os valores médios de cada parâmetro, enquanto que o gráfico à direita demonstra que os valores reais estão bem próximos do valor médio. A baixa variância dos dados é um fator que dificulta o processo de aprendizado da técnica de IA.

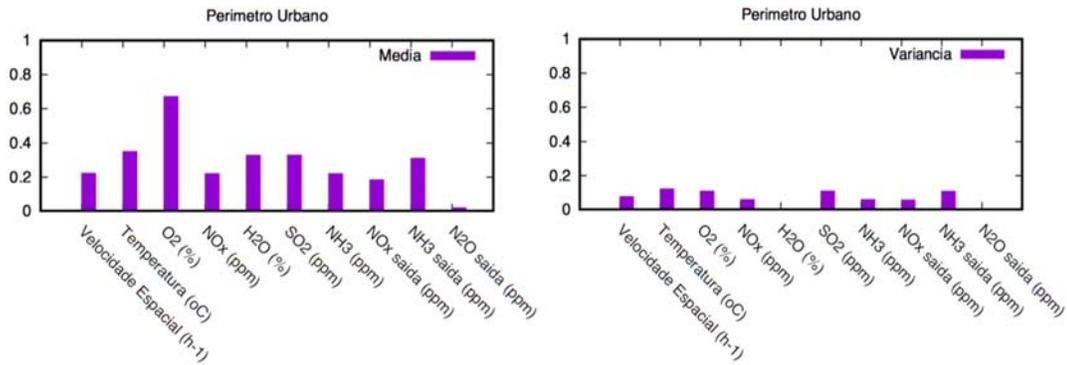


Figura 1. Média e variância nos dados experimentais coletados em perímetro urbano.

Adicionalmente, foi realizada a análise de correlação das características com a saída esperada. Constatou-se que os valores de emissão de  $\text{NO}_x$  e  $\text{NH}_3$  crescem proporcionalmente com o aumento da velocidade espacial, temperatura do motor,  $\text{NO}_x$  injetado,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{SO}_2$  e  $\text{NH}_3$  (conforme gráfico da Fig. 2 - à esquerda) e crescem de maneira inversamente proporcional a injeção de  $\text{O}_2$  (conforme gráfico da Fig. 2 - à direita). A Fig. 2 apresenta exemplos desta correlação. Foi possível constatar, também, que os valores de emissão de  $\text{N}_2\text{O}$  não possuem correlação individual com as entradas, o que pode dificultar o aprendizado.

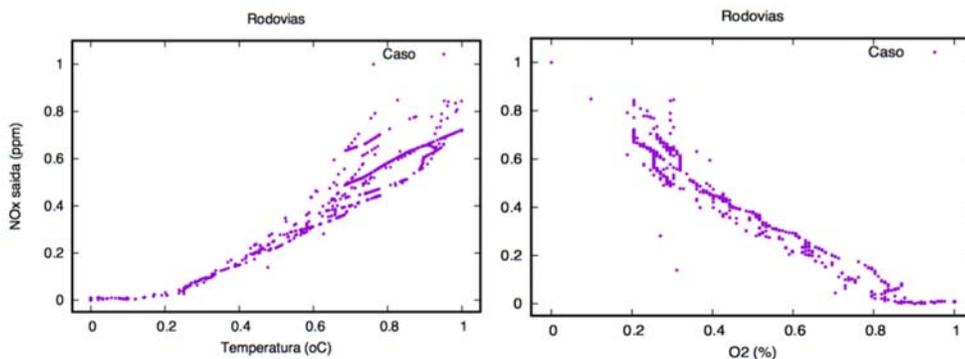


Figura 2. Correlação da Temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) e  $\text{O}_2$  (%) com emissão de  $\text{NO}_x$  (ppm) para o conjunto de dados sobre rodovias.

## 2.3 Método de aprendizado

Com o objetivo de realizar o processo de previsão da concentração de poluentes emitidos pelo motor a partir das informações apresentadas na Subseção 2.1, foi utilizado uma Rede Neural Artificial (RNA) denominada *Multi-Layer Perceptron* (MLP). O processo de treinamento da rede foi realizado com algoritmo de aprendizado supervisionado *Back Propagation* (BP) (Rumelhart *et al.*, 1986).

O MLP é uma rede neural com uma camada de entrada, uma camada de saída e uma ou mais camadas escondidas, onde os neurônios de uma camada estão conectados com todos os neurônios das camadas adjacentes (Fig. 3).

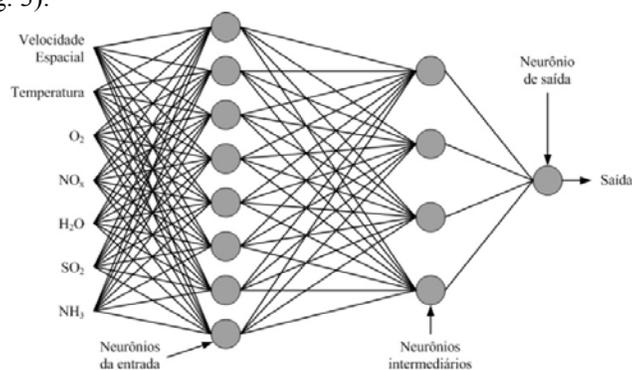


Figura 3. Ilustração da rede neural MLP utilizada neste trabalho.

O processo de escolha dos parâmetros da rede foi realizado empiricamente e, no presente trabalho, foram testadas 4 configurações distintas para desses parâmetros. Estas configurações são apresentadas na Tabela 3.

Tabela 3. Parâmetros das 4 configurações de RNA utilizadas nos experimentos preliminares.

Parâmetro	RNA 1	RNA 2	RNA 3	RNA 4
Neurônios na camada de entrada	8	8	10	10
Neurônios na camada escondida	4	4	6	6
Neurônios na camada de saída	1	1	1	1
Função de ativação	sigmóide	sigmóide	sigmóide	sigmóide
Taxa de aprendizado	25%	50%	25%	50%
Critério de parada: variância mínima no erro	0,00001	0,00001	0,00001	0,00001
Critério de parada: máximo de ciclos	10.000	10.000	10.000	10.000

Como pode ser observado (Tabela 3), as RNAs foram configuradas com um único neurônio na camada de saída. Assim, elas foram capazes de prever um único valor de saída, ou seja, um único tipo de poluente. Desta maneira, foi criada uma rede neural distinta para o cálculo de cada poluente e em cada situação de uso do motor (perímetro urbano ou rodovia). Por apresentarem uma única saída, as redes aprendem mais rapidamente o conjunto de dados.

O algoritmo *Back Propagation* foi responsável pelo treinamento da rede neural. Nele os neurônios da camada de entrada receberam as informações de um caso (7 valores de entrada), propagaram o sinal para as camadas adjacentes até a última camada (camada de saída), que continham a concentração normalizada do poluente. Em seguida, fez-se a retro propagação do erro e ajuste dos pesos da rede. O erro foi determinado pela diferença entre a saída esperada e a saída encontrada pela rede. O ajuste dos pesos foi determinado por meio da regra delta generalizada (Rumelhart *et al.*, 1986). Este procedimento foi feito para todos os casos presentes na matriz  $L'$  e, repetido, iterativamente, por vários ciclos. Cada ciclo corresponde a uma passagem completa da matriz  $L'$ . O aprendizado termina quando não houver melhora no aprendizado (ausência de variância mínima no erro médio quadrático dos últimos ciclos) ou quando completar um número máximo de ciclos, valendo o que ocorrer primeiro.

Durante a execução desse algoritmo de aprendizado, a RNA adquire conhecimento através das características ou padrões contidos no conjunto de casos.

## 2.4 Análise de desempenho

Para avaliar o desempenho das RNA, optou-se por utilizar o método de validação cruzada (*cross-validation*), com a seleção aleatória de 10% dos casos contidos em  $L'$  (vide Subseção 2.2) para o conjunto de testes e os demais casos divididos em 10 conjuntos de treinamento e validação. A validação cruzada com 10 conjuntos é um método robusto para análise de desempenho de classificadores inteligentes aplicados a problemas reais (Kohavi, 1995). Justifica-se a escolha do referido método de validação por ser um método consagrado na literatura e que permite que os resultados aqui apresentados possam servir de

base para comparação com trabalhos futuros que se utilizem de outros métodos de classificação como, Raciocínio Baseado em Casos (Kolodner, 1993).

### 3. Resultados e discussões

Foram realizados experimentos computacionais com as 4 configurações de RNA (Tabela 3), para os três tipos de poluente ( $\text{NO}_x$ ,  $\text{NH}_3$  e  $\text{N}_2\text{O}$ ), nas duas situações de operação: perímetro urbano e rodovias. Em todos os casos, a RNA demonstrou grande capacidade de aprendizado, apresentando erro médio quadrático final próximo de 0,01. A Fig. 4 apresenta a evolução do erro médio das redes durante o treinamento no perímetro urbano e rodovia para as taxas de emissão de  $\text{NO}_x$ . Conforme observado, o erro médio quadrático final verificado para todas as redes aproxima-se de 0,01 e 0,02, respectivamente, para perímetro urbano e rodovia.

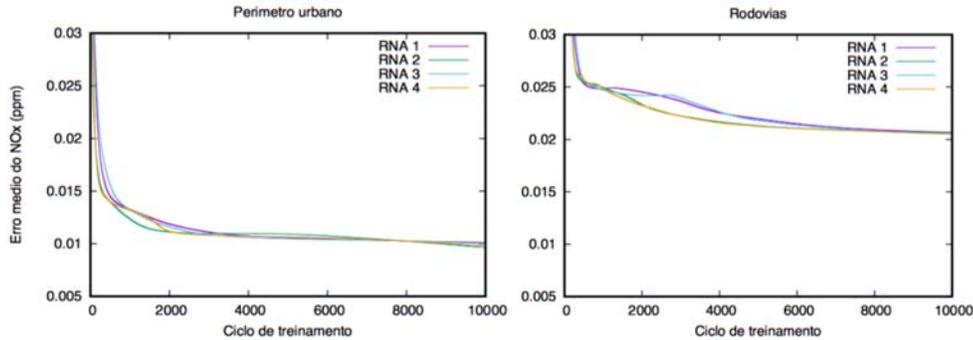


Figura 4. Gráficos de evolução do erro médio no aprendizado das redes neurais para emissões de  $\text{NO}_x$ .

Do mesmo modo, a Fig. 5 apresenta a evolução do erro médio das redes durante o treinamento no perímetro urbano e rodovia para as taxas de emissão de  $\text{NH}_3$ . Conforme observado, o erro final verificado para todas as redes aproxima-se de 0,013 e 0,014, respectivamente, para perímetro urbano e rodovia.

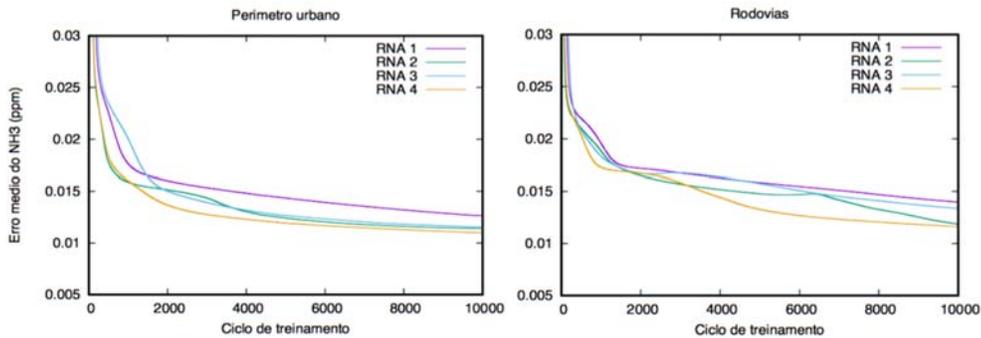


Figura 5. Gráficos de evolução do erro médio no aprendizado das redes neurais para emissões de  $\text{NH}_3$ .

Uma vez concluído o aprendizado, foram realizados experimentos com dados não utilizados, com o intuito de avaliar a capacidade da rede em prever as taxas de emissão para entradas desconhecidas. O desempenho da rede foi avaliado por meio da raiz quadrada do erro médio quadrático ( $REM_Q$ ), calculada pela Eq. (4), e pelo coeficiente de determinação ( $R^2$ ), calculado pela Eq. (5).

$$REM_Q = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (s_i - y_i)^2}, \quad (4)$$

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (s_i - y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (s_i - \bar{s}_i)^2}, \quad (5)$$

onde  $n$  corresponde ao tamanho do conjunto de teste ( $L_{teste}$ ),  $s_i$  corresponde ao valor de emissão esperado,  $\bar{s}_i$  corresponde a média do valor esperado e  $y_i$  corresponde ao valor de emissão determinado pela rede, para o caso  $i$ .

Na Tabela 4 estão sumarizados os valores de  $REM_Q$  e  $R^2$  obtidos durante os experimentos, para os conjuntos de validação e de teste. Os melhores resultados encontrados no conjunto de teste estão apresentados em negrito.

Tabela 4. Valores do  $REM_Q$  na previsão das RNA testadas sobre os conjuntos de dados, nas fases de treinamento e teste.

Emissões	Conj.	RNA 1		RNA 2		RNA 3		RNA 4		
		$REM_Q$	$R^2$	$REM_Q$	$R^2$	$REM_Q$	$R^2$	$REM_Q$	$R^2$	
Per. Urbano	NO <sub>x</sub>	Valid.	0,021	0,992	0,020	0,992	0,021	0,992	0,020	0,992
		Teste	0,020	0,992	0,019	0,993	0,019	0,992	<b>0,018</b>	<b>0,994</b>
	NH <sub>3</sub>	Valid.	0,025	0,994	0,024	0,994	0,024	0,994	0,024	0,995
		Teste	0,022	<b>0,996</b>	0,020	<b>0,996</b>	0,020	<b>0,996</b>	<b>0,019</b>	<b>0,996</b>
	N <sub>2</sub> O	Valid.	0,055	0,105	0,053	0,154	0,055	0,101	0,054	0,144
		Teste	<b>0,041</b>	0,173	0,042	0,138	<b>0,041</b>	0,152	<b>0,041</b>	<b>0,187</b>
Rodovias	NO <sub>x</sub>	Valid.	0,033	0,978	0,033	0,979	0,033	0,978	0,033	0,979
		Teste	0,034	0,981	0,033	0,982	<b>0,032</b>	<b>0,983</b>	0,033	0,982
	NH <sub>3</sub>	Valid.	0,023	0,993	0,019	0,995	0,021	0,994	0,019	0,995
		Teste	0,070	0,937	0,029	0,989	0,038	0,981	<b>0,022</b>	<b>0,994</b>

Observa-se que os valores medidos entre validação e teste são muito próximos, o que indica a representatividade dos dois conjuntos e a robustez do treinamento realizado pelas redes. Comparando as quatro configurações das RNA's observa-se que aquela que apresentou o melhor resultado foi a RNA 4, devido a maior quantidade de neurônios presentes em suas camadas e maior taxa de aprendizado.

Em relação a  $REM_Q$ , os melhores resultados foram 0,018 para NO<sub>x</sub>, 0,019 para NH<sub>3</sub> e 0,041 para N<sub>2</sub>O (Tabela 4). Os dados de  $REM_Q$  para as emissões de NO<sub>x</sub> deste estudo são compatíveis com os obtidos por Obodeh e Ajuwa (2009), que apresentaram valores entre 0,016 e 0,034. Na análise do  $R^2$ , observa-se que os valores calculados estão muito próximos de 1, com exceção daqueles obtidos para N<sub>2</sub>O, demonstrando o quão difícil é prever esta taxa de emissão. Isto pode ser explicado pelo fato do N<sub>2</sub>O ser apenas um resíduo.

O erro médio absoluto ( $EMABS$ ) das redes descritas também foi calculado para as emissões de NO<sub>x</sub> (Tabela 5), com o objetivo de comparar com dados da literatura. Para o conjunto de casos do perímetro urbano, o  $EMABS$  calculado foi de 1,1% e 0,9%, para o conjunto de validação e teste, respectivamente. Para o conjunto de casos de rodovias, o  $EMABS$  calculado foi de 2,2% no conjunto de validação e 2,1%, no teste. Observa-se que os erros médios absolutos obtidos neste estudo são menores que os publicados por Mohammadhassani *et al.* (2012) e Krijnsen *et al.* (2000).

Tabela 5. Desempenho de RNAs na previsão de emissões de NO<sub>x</sub>. a- Simulação em perímetro urbano e b- em rodovias.

Tipo de RNA	Neurônios nas camadas escondidas	Nº de Entradas	$REM_Q$		$EMABS$		$R^2$		Autores
			Valid.	Teste	Valid (%)	Teste (%)	Valid.	Teste	
<i>MLP-BP</i>	30	4	-	-	6,7	14,2	-	-	Krijnsen <i>et al.</i> (2000)
<i>MLP-LM</i>	11	2	-	0,016 - 0,034	-	-	-	0,997	Obodeh <i>et al.</i> (2009)
<i>MLP-LM</i>	3	7	-	-	-	-	0,800	0,730	Oliveira <i>et al.</i> (2011)
<i>MLP-LM</i>	19	3	-	-	-	10	0,982	0,891	Mohammadhassani <i>et al.</i> (2012)
<i>MLP-BP</i>	10 e 6	7	0,018 <sup>a</sup> 0,033 <sup>b</sup>	0,018 <sup>a</sup> 0,033 <sup>b</sup>	1,1 <sup>a</sup> 2,2 <sup>b</sup>	0,9 <sup>a</sup> 2,1 <sup>b</sup>	0,992 <sup>a</sup> 0,979 <sup>b</sup>	0,994 <sup>a</sup> 0,982 <sup>b</sup>	Neste estudo

As Fig.6 e 7 mostram os valores de emissão esperados e encontrados pela RNA 4 para  $\text{NO}_x$  e  $\text{NH}_3$ , respectivamente. O comportamento observado em ambas as figuras revelam que nos casos em que a RNA não encontrou o valor real, o valor previsto encontra-se próximo ao esperado. Em todos os casos, as variações foram inferiores a 16 ppm de  $\text{NO}_x$ , o que corresponde a valores menores do que 0,001g/kWh.

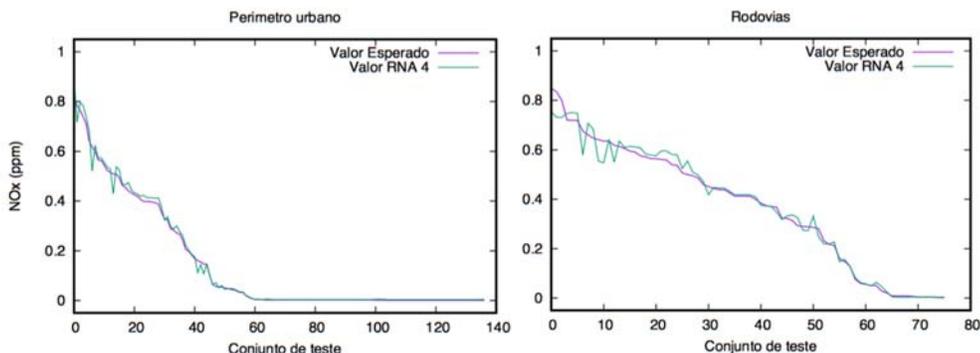


Figura 6. Gráfico de relação entre o valor de emissão de  $\text{NO}_x$  esperado e encontrado pela RNA 4.

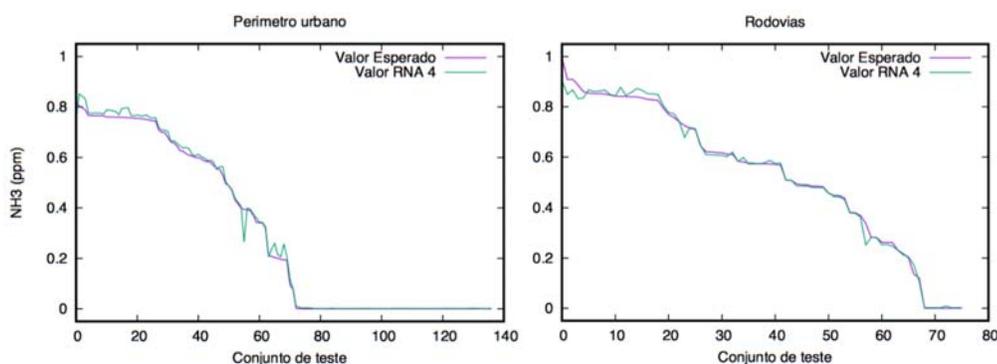


Figura 7. Gráfico de relação entre o valor de emissão de  $\text{NH}_3$  esperado e encontrado pela RNA 4.

Adicionalmente, as taxas de emissão de  $\text{NO}_x$  encontradas ficaram abaixo do limite estabelecido pelo PROCONVE P7 (2g/kWh). Os resultados encontrados neste estudo de caso, com aplicação da RNA supracitada, corroboram com os dados encontrados por OLIVEIRA *et al.*, 2011.

#### 4. Considerações finais

No presente trabalho, técnicas de IA foram utilizadas para prever as taxas de emissões de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{NH}_3$ -*slip* oriundos de veículo a Diesel. O conjunto de dados reais utilizados neste estudo foi obtido por meio de uma bancada catalítica SCR, integrada a uma ferramenta de desempenho para modelar veículos conceituais. A previsão das taxas de  $\text{NO}_x$ ,  $\text{NH}_3$  e  $\text{N}_2\text{O}$  foi obtida por uma RNA do tipo MLP com algoritmo *Back Propagation* de aprendizado, pelo fato de ser um método robusto e amplamente utilizado na literatura.

Os experimentos computacionais mostraram que o método proposto atingiu resultados consistentes, corroborando com resultados publicados na literatura. Os melhores resultados de *RMQ* foram 0,018 para  $\text{NO}_x$ , 0,019 para  $\text{NH}_3$  e 0,041 para  $\text{N}_2\text{O}$ . O erro médio absoluto para emissões de  $\text{NO}_x$  em perímetro urbano e rodovias foi 0,9% (teste) e 2,1% (teste), respectivamente. Além disso, o modelo de RNA proposto apresentou fatores de correlação de 0,994 em perímetro urbano e 0,982 em rodovias, para o conjunto de teste de emissões de  $\text{NO}_x$ . Os valores simulados previstos pelas RNAs variaram 0,001g/kWh, confirmando a correlação dos dados reais com aqueles encontrados pela RNAs testadas. Apesar dos bons resultados, poucas configurações de parâmetros para as redes foram testadas. A execução das redes neurais foi interrompida em todos os casos pelo critério de parada de número máximo de ciclos, não por esgotar a capacidade de aprendizado da rede. Desta maneira, experimentos com maior número de neurônios e mais ciclos de aprendizado devem ser realizados com o objetivo de explorar melhor estes fatores e, por consequência, atingir resultados ainda melhores. Outro fator a ser explorado em trabalhos

futuros é o processo de escolha automática de características, pois elas apresentam forte correlação com  $\text{NO}_x$  e  $\text{NH}_3$ .

## Agradecimentos

O(s) autor(es) agradece(m) ao CNPQ, FUNCAP e CAPES. Agradecimentos especiais a Profa. Dra. Carla Silva da Universidade de Lisboa e ao Laboratório de Tecnologia Química do IFCE-CE.

## Referências bibliográficas

Busca, G.; Lietti, L.; Ramis, G.; Berti, F. *Chemical and mechanistic aspects of the selective catalytic reduction of  $\text{NO}_x$  by ammonia over oxide catalysts: a review*. *Applied Catalysis B: Environmental*, v. 18, p.1-36, 1998.

Cassiano, D. R.; Azevedo, J. A. H.; Araújo, R. S.; Dias, H. L. F.; Policarpo, N.; Cavalcante, F. S. A.; Bertoncini, B. V.; Oliveira, M. L. M. *MAMUTE: Monitoring AutoMotive Unit Transit Emissions - Development and Application for Flex-fuel and Diesel Vehicles*. In: 2nd International Conference on Vehicle Technology and Intelligent Transport Systems (VEHITS). (Org.). Proceedings of VEHITS: Simulation of flex fuel engines and alternative biofuel vehicles – SFEEV, 2016.

Ciambelli, P.; Corbo, P.; Migliardini, F. *Potentialities and limitations of lean de- $\text{NO}_x$  catalysts in reducing automotive exhaust emissions*. *Catalysis Today* v.59, p. 279–286, 2000.

DENATRAN - Departamento Nacional de Transito. *Frota 2011*. Disponível em: <[www.denatran.gov.br/frota.htm](http://www.denatran.gov.br/frota.htm)> Acesso em: 14 jan. 2013.

DENATRAN - Departamento Nacional de Transito. *Frota 2015: quantidade de Veículos por UF Município e Combustível (dezembro 2015)*, 2016. Disponível em: <[http://www.detran.pr.gov.br/arquivos/File/estatisticasdetransito/frotadeveiculoscadastradospr/2015/FROTA\\_DEZEMBRO\\_2015.pdf](http://www.detran.pr.gov.br/arquivos/File/estatisticasdetransito/frotadeveiculoscadastradospr/2015/FROTA_DEZEMBRO_2015.pdf)> Acesso em: 12 fev. 2016.

DieselNet Emission Standards, *Diesel emission standards and test cycles*. Disponível em: <http://www.dieselnet.com>. Acesso em: Janeiro de 2017.

Durán A.; Lapuerta M.; Rodríguez-Fernández J. *Neural networks estimation of diesel particulate matter composition from transesterified waste oils blends*. *Fuel*, v.84, p. 2080–2085, 2005.

Ford, P. C.; Weckler, S. *Photochemical reactions leadings to  $\text{NO}$  and  $\text{NO}_x$  generation*. *Coordination Chemistry Reviews*, v. 249, p. 1382-1395, 2005.

Gabrielsson, P.L.T. *Urea-SCR in automotive applications*. *Topics in Catalysis*, v. 28, p. 177–184, 2004.

Guan, B.; Zhan, R.; Lin, H.; Huang, Z. *Review of state of the art technologies of selective catalytic reduction of  $\text{NO}_x$  from diesel engine exhaust*. *Applied Thermal Engineering*, v. 66, p. 395-414, 2014.

Grigorios, C.; Koltsakis, A.; Stamatelos, M. *Modeling dynamic phenomena in 3-way catalytic converters*. *Chemical Engineering Science*, v.54, p. 4567-4578, 1999.

Instituto Brasileiro do Meio Ambiente e dos Recursos Naturais Renováveis (IBAMA). *Programas de controle de emissões veiculares*. 2016. Disponível em: <<http://www.ibama.gov.br/emissoes/veiculos-automotores/programa-de-controle-de-emissoes-veiculares-proconve>> Acesso em 10 abr. 2017.

Kohavi, R. *A study of cross-validation and bootstrap for accuracy estimation and model selection*. In International Joint Conference on Artificial Intelligence, v. 14, p. 1137–1145, 1995.

Kolodner, J. L. *Case-Based Reasoning*. Morgan Kaufmann Series in Representation Reasoning. Morgan Kaufmann Pub, September 1993.

Krijnsen, H.C.; Van Kooten, W.E.J.; Calis, H.P.A.; Verbeek, R.P.; Van Den Bleek, C.M. *Evaluation of an Artificial Neural Network for  $\text{NO}_x$  Emission Prediction from a Transient Diesel Engine as a Base for  $\text{NO}_x$  Control*. *The Canadian Journal of Chemical Engineering*, v. 78, p. 408-417, 2000.

Loureiro L. N. *Panorâmica sobre emissões atmosféricas estudo de caso: avaliação do inventário emissões atmosféricas da região metropolitana do Rio de Janeiro para fontes móveis*. Tese Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2005.

MMA - Ministério do Meio Ambiente, Conselho Nacional do Meio Ambiente, CONAMA. Resolução CONAMA nº 18/86, 1986. Disponível em: <<http://www.mma.gov.br>> Acesso em: 07 nov. 2014.

Mohammadhassani, J.; Khalilarya, S.H.; Solimanpur, M.; Dadvand, A. *Prediction of NO<sub>x</sub> Emissions from a Direct Injection Diesel Engine Using Artificial Neural Network*. Modelling and Simulation in Engineering, Article ID 830365, p.1-8, 2012.

Obodeh, O.; Ajuwa, C. I. *Evaluation of Artificial Neural Network Performance in Predicting Diesel Engine NO<sub>x</sub> Emissions*. European Journal of Scientific Research. v.33, p. 642-653, 2009.

Oliveira, M. L. M.; Silva, C. M.; Moreno-Tost, R.; Farias, T. L.; Jiménez-López, A.; Rodríguez-Castellón, E. *A study of copper-exchanged mordenite natural and ZSM-5 catalysts for diesel road vehicles: simulation by neural networks approach*. Applied Catalysis B: Environmental, v. 88, p. 420-429, 2009a.

Oliveira, M. L. M.; Silva, C. M.; Moreno-Tost, R.; Faria, T.L.; Jiménez-López, A.; Rodríguez-Castellon, E. *Simulation Vehicles Equipped with SCR using Iron Zeolite Catalysts*. Applied Catalysis. A, General, v. 366, p. 13-21, 2009b.

Oliveira, M. L. M.; Silva, C. M.; Moreno-Tost, R. ; Farias, T.L.; Jiménez-López, A. ; Rodríguez-Castellón, E. *Modeling of NO<sub>x</sub> emission factors from heavy and light-duty vehicles equipped with advanced after treatment systems*. Energy Conversion and Management, v. 52, p. 2945-2951, 2011.

Rumelhart, D. E.; Hinton, G. E.; Williams, R. J. *Learning representations by back-propagating errors*. Nature, v. 323(6088), p. 533-536, 1986.

Russel, S.; Norvig, P. *Inteligência Artificial*. 3ª Edição. Elsevier, 2013.

Serra, J. M.; Corma, A.; Chica, A.; Argente, E.; Botti, V. *Can artificial neural networks help the experimentation in catalyst?* Catalysis Today, v. 83, p. 393-403, 2003.

Shahir, V. K.; Jawahar, C. P.; Suresh, P. R. *C Comparative study of diesel and biodiesel on CI engine with emphasis to emissions—A review*. Renewable and Sustainable Energy Reviews, v. 45, p.686-697, 2015.