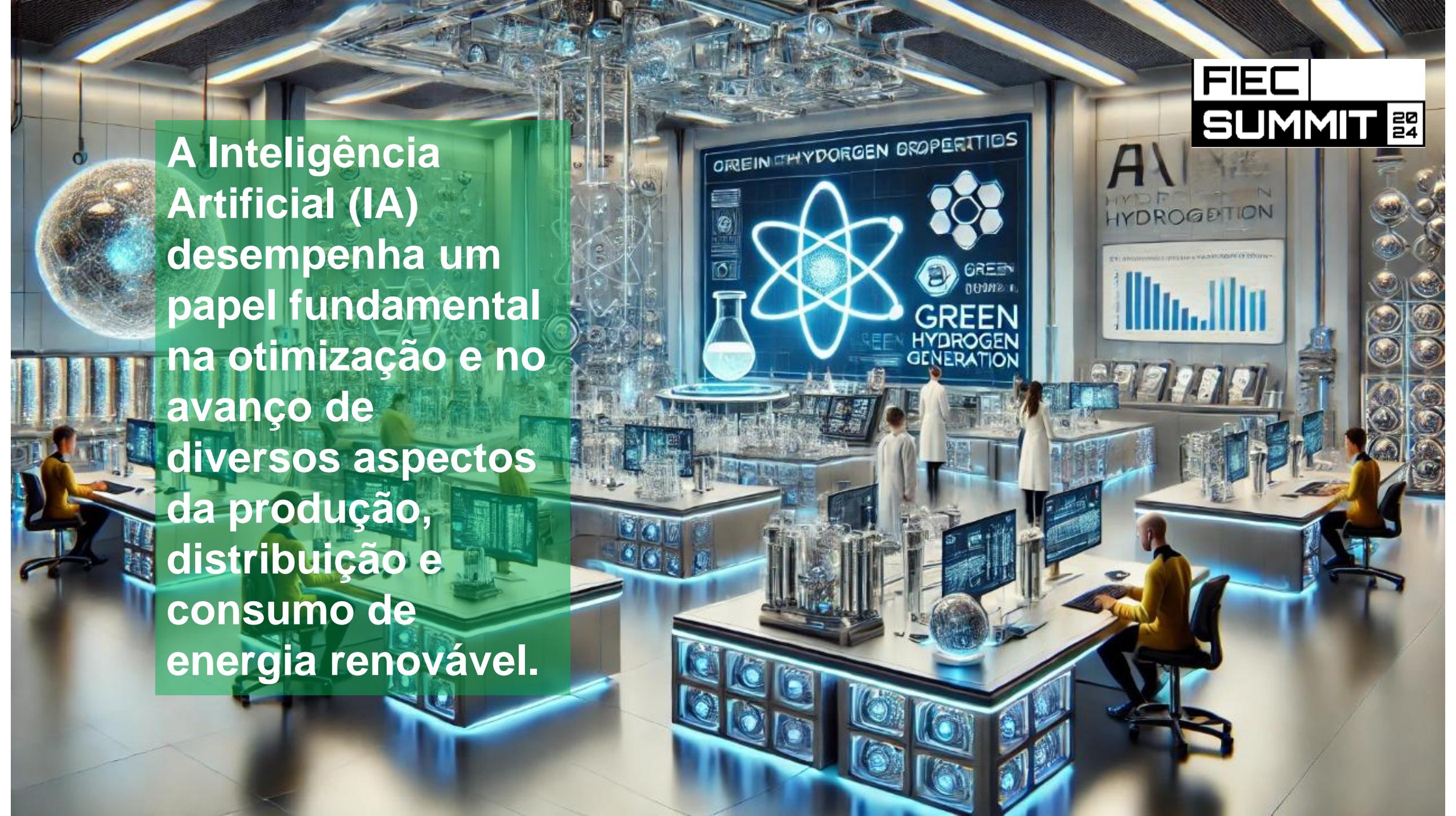


Inteligência Artificial e os Materiais para Hidrogênio Verde

Enio Pontes de Deus



A Inteligência Artificial (IA) desempenha um papel fundamental na otimização e no avanço de diversos aspectos da produção, distribuição e consumo de energia renovável.



Previsão de Energia e Gerenciamento de Rede

FIEC
SUMMIT 2024

- 1 Previsão de Energia Renovável:** Modelos de IA analisam dados históricos e em tempo real, incluindo padrões climáticos e registros de produção de energia, para prever a geração de energia renovável. Isso auxilia no gerenciamento mais eficaz da variabilidade de fontes como solar e eólica.
- 2 Redes Inteligentes:** A IA otimiza a operação de redes inteligentes, prevendo a demanda de energia, gerenciando a integração de fontes de energia renovável e equilibrando a rede, a fim de melhorar a estabilidade e a confiabilidade.



Otimização da Energia Solar

Orientação de Painéis Solares:

Algoritmos de IA otimizam a orientação e a inclinação dos painéis solares com base nas condições de luz solar, garantindo a captação máxima de energia ao longo do dia.

Detecção de Falhas: A IA identifica e analisa problemas com os painéis solares, como defeitos ou mau funcionamento, permitindo uma manutenção oportuna e uma maior eficiência geral do sistema.



Otimização da Energia Eólica



1 Controle de Turbinas: A IA é usada para ajustar a operação de turbinas eólicas em tempo real com base nas condições climáticas. Isso maximiza a produção de energia, minimizando o desgaste dos equipamentos.

2 Projeto de Layout de Parques Eólicos: A IA ajuda a projetar layouts eficientes para parques eólicos, levando em consideração fatores como velocidade do vento, turbulência e efeitos de esteira, a fim de otimizar a captação de energia.



Desenvolvimento de Novos Materiais para Energia Renovável

A IA é usada para acelerar o desenvolvimento e a otimização de novos materiais, como células solares de **perovskita** e eletrólisadores mais eficientes, que podem melhorar a eficiência e reduzir os custos das tecnologias de energia renovável.



Principais Características dos Materiais

- **Condutividade Elétrica:** Essencial para os eletrodos e condutores em células a combustível.
- **Estabilidade Térmica:** Importante para materiais que operam em altas temperaturas.
- **Capacidade de Armazenamento:** Crucial para materiais usados no armazenamento de hidrogênio.
- **Atividade Catalítica:** Necessária para catalisadores que promovem as reações químicas de produção e conversão de hidrogênio.
- **Biodegradabilidade:** Para materiais que necessitam de sustentabilidade ambiental.



Materiais para Membranas PEM

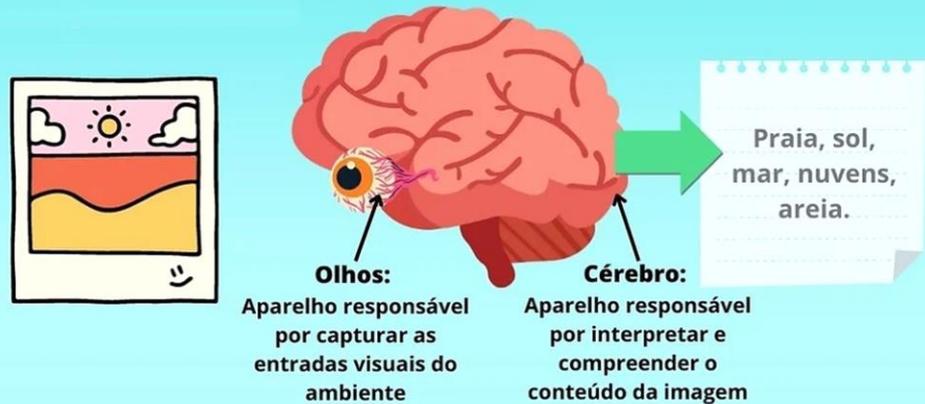
Quitosana:

- **Características:** Biopolímero derivado da quitina, reforçado com nanocelulose e óxido de grafeno.
- **Vantagens:** Baixo custo, biodegradabilidade, alto desempenho mecânico.
- **Otimizações Possíveis:** Análise microestrutural e melhorias nas propriedades mecânicas e eletroquímicas através de IA e MEF.

Nafion™ (PFSA):

- **Características:** Excelente condutividade iônica, estabilidade química e térmica.
- **Desvantagens:** Alta permeabilidade ao combustível, custo elevado.
- **Otimizações Possíveis:** Redução da permeabilidade e custo através de aditivos inorgânicos e dopagem ácida.

Sistema de Visão Humano



Sistema de Visão Computacional



Aplicação de IA

- O avanço da tecnologia permite a inovação de métodos e técnicas já consagrados.
- A análise computacional de materiais é amplamente conhecida, porém a possibilidade de **análise de um elemento real a partir de uma imagem é inovadora.**
- A pesquisa baseia-se na aplicação de um conjunto de técnicas de segmentação de imagem (Visão Computacional) e discretização do material para a análise em Elementos Finitos.

- Utilização de técnicas segmentação de imagem, por meio de redes neurais convolucionais, para extrair as fibras do biocompósito.
- Discretização as fibras em comprimento e diâmetro para análises junto ao compósito.
- Analise, por meio de elementos finitos, o comportamento do compósito juntos às fibras quando sujeito à tensões, forças ou deslocamentos

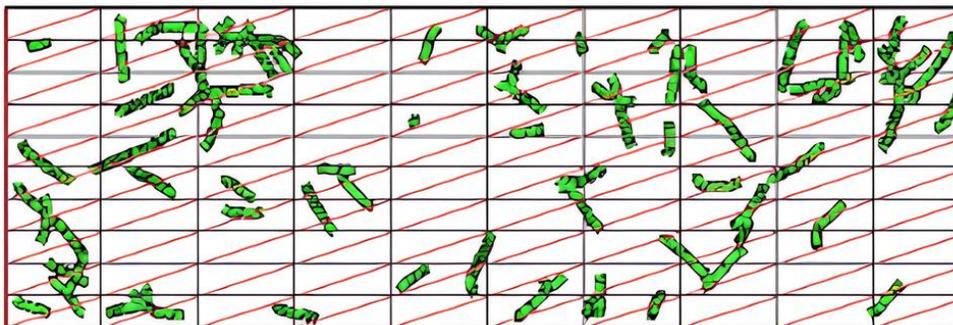
- Imagem real:



- Imagem segmentada:

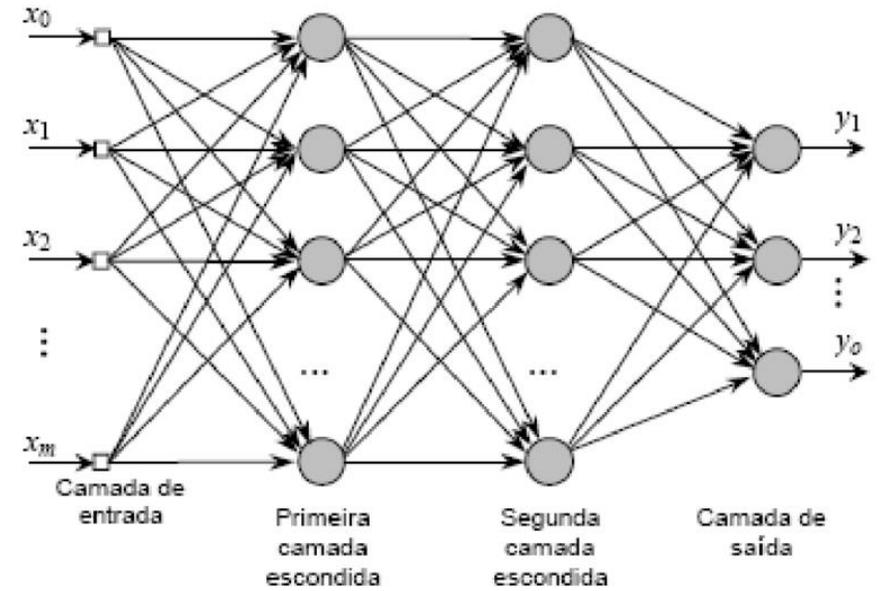
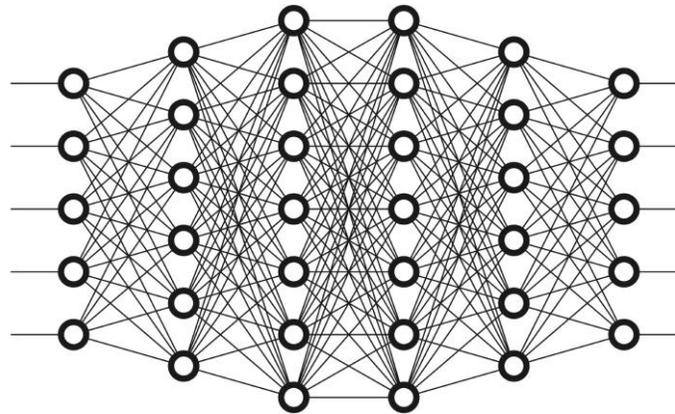
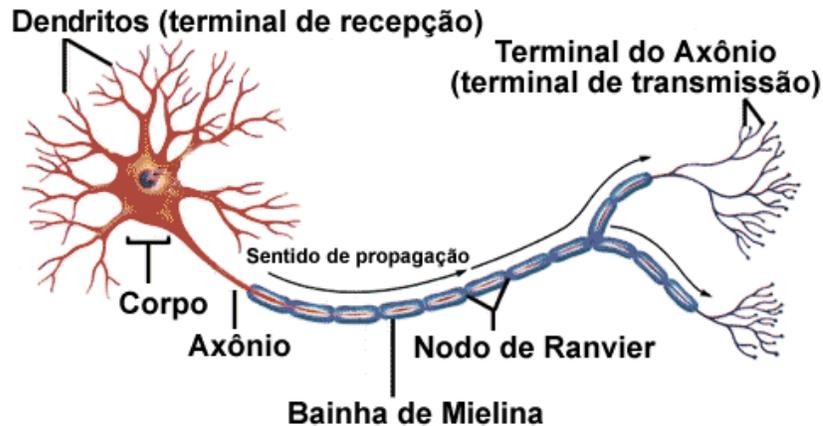


- Imagem discretizada:



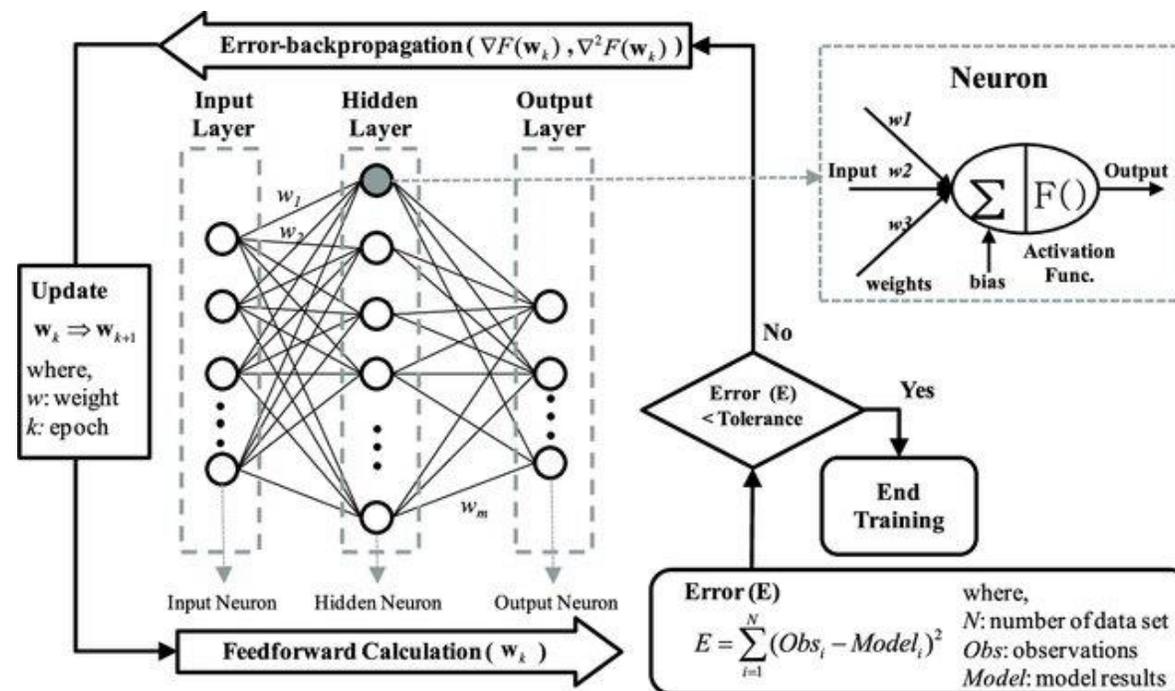
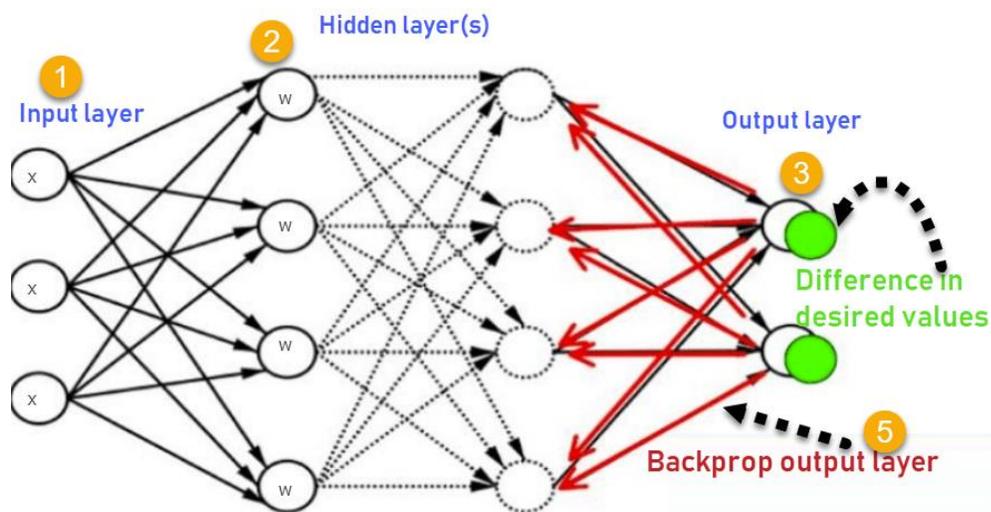
Rede neural artificial

- Fundamenta-se no funcionamento do sistema nervoso humano.
- Camada de entrada Camadas ocultas Camada de saída.
- Pesos e Funções de Ativação.
- Predição de Resultados.
- Deep Learning.



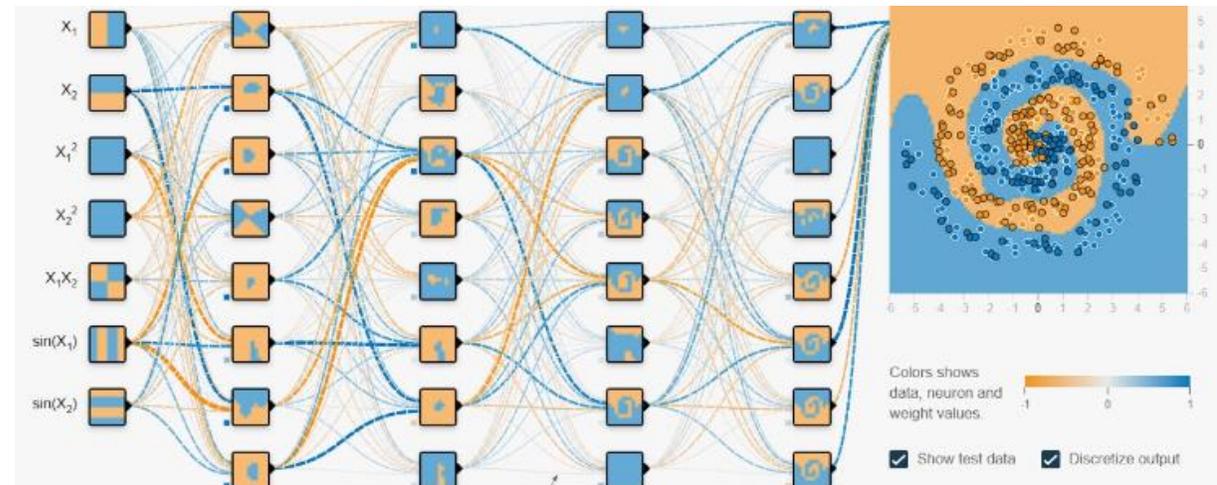
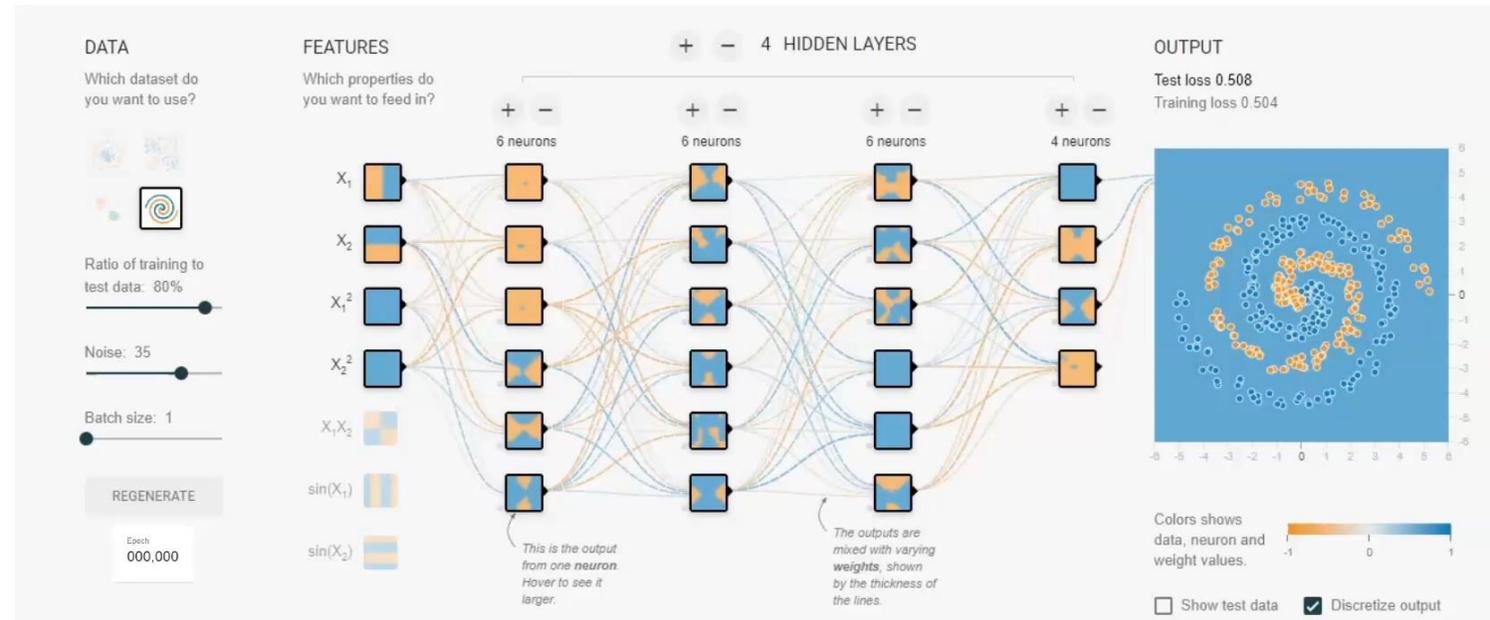
Rede neural artificial

- **Feedforward:** Conexão e cálculo das funções de soma e ativação em um único sentido, da camada de entrada para a camada de saída.
- **Backpropagation:** Algoritmo de ajuste dos pesos, no sentido contrário ao feedforward, responsável por minimizar o erro entre a saída esperada e a saída real da rede.
- **Função de erro:** Função responsável por parametrizar a diferença entre a saída esperada e a saída real da rede.



Rede neural artificial

- As funções de ativação são responsáveis pelas transformações lineares ou não lineares no sistema.



Rede neural artificial

• Exemplos de funções:

• Função linear: $y = xA^T + b$.

• Funções não Lineares:

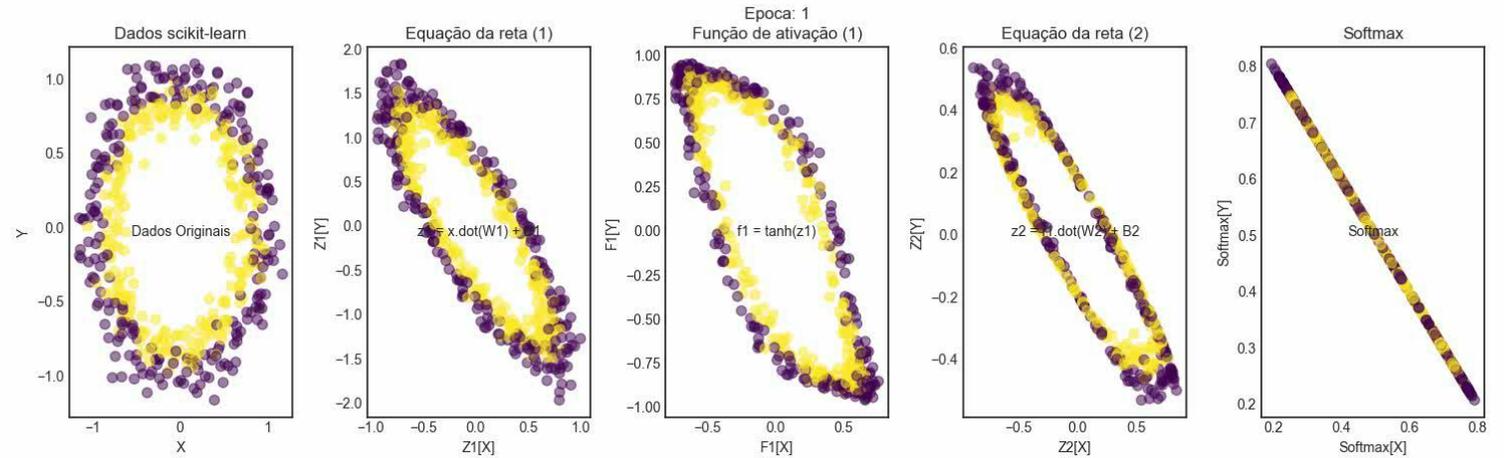
• Tanh

• Sigmoid

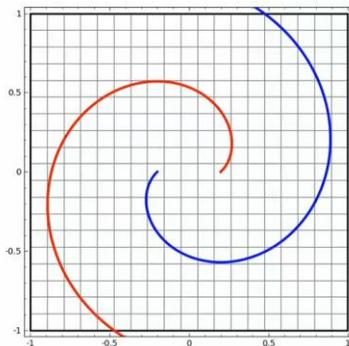
• Step

• Relu

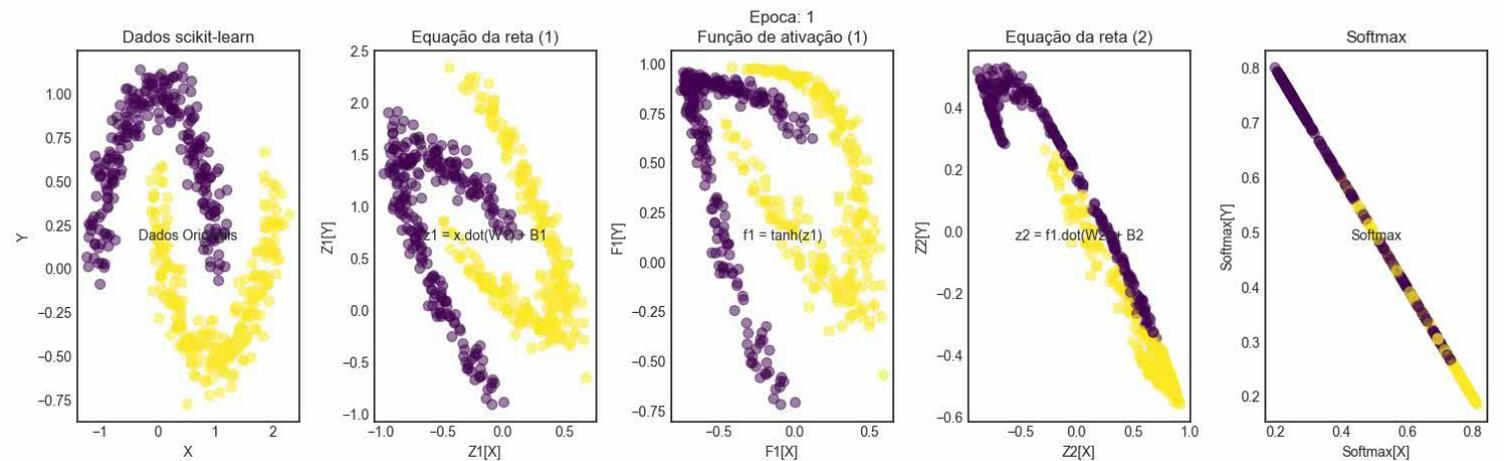
• Softmax



Fonte: Autor

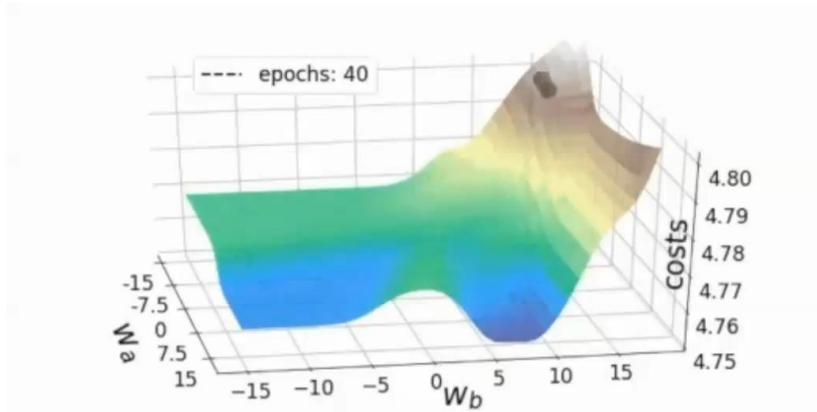


Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=r0G8axEHpLI>



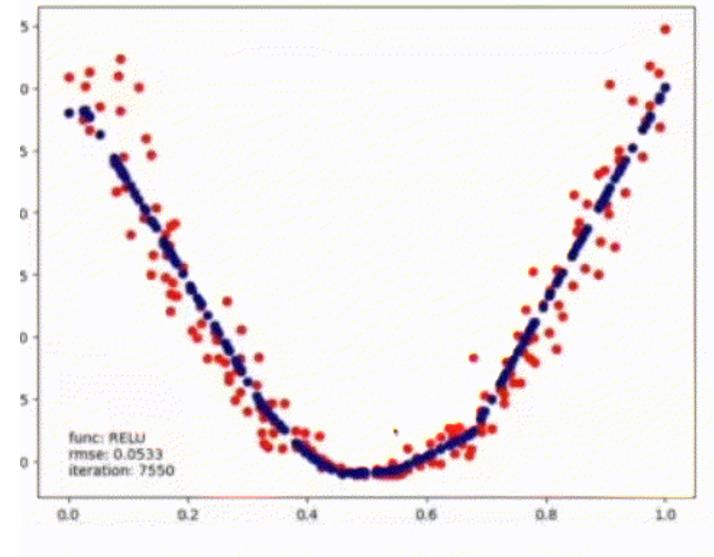
- **Descida Gradiente Estocástica:** É um método de otimização que visa reduzir os erros de uma função custo $Q(w)$ da rede neural na etapa de back propagation atualizando os pesos em função do gradiente e de um parâmetro denominado taxa de aprendizado η .
- Uma opção lógica comumente utilizada é o erro quadrado médio

Loss Functions



$$\text{MSE} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2$$

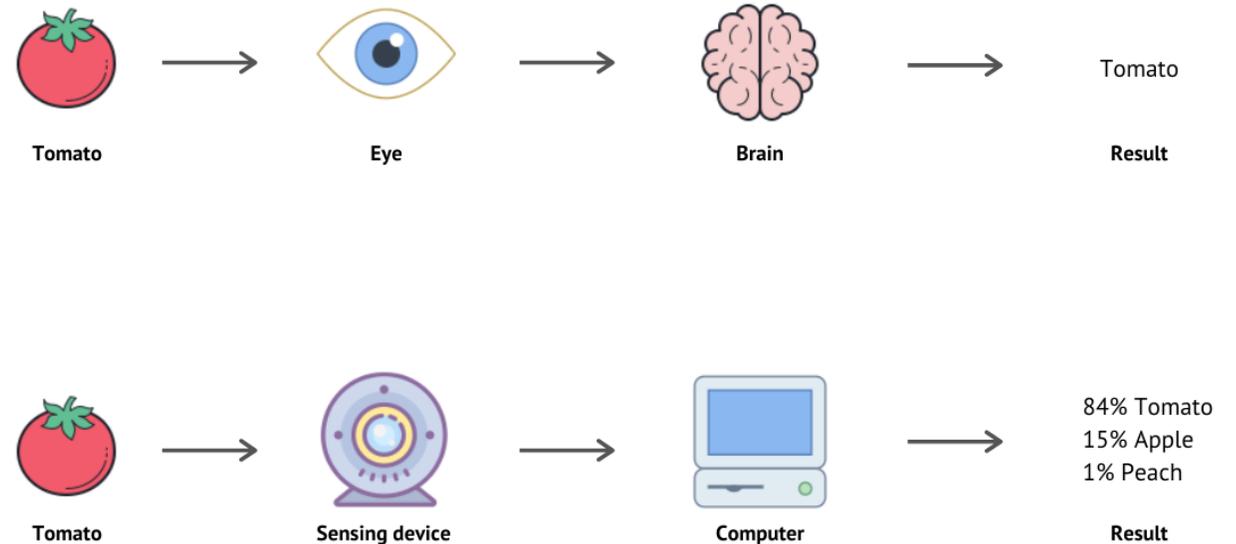
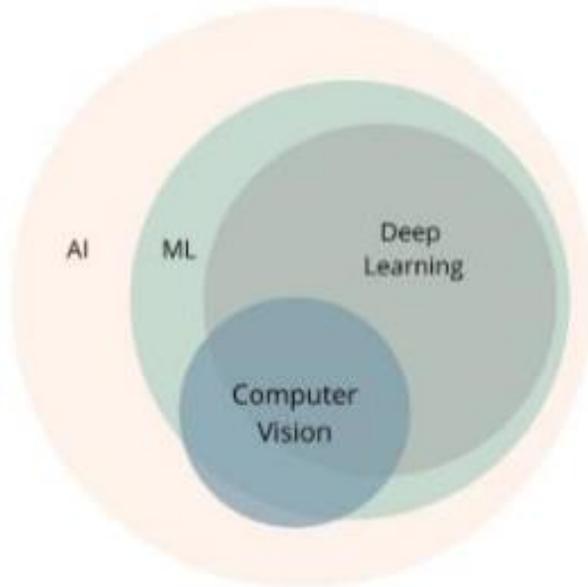
Mean Square Error
(MSE) loss function



Visão computacional

- A visão computacional é uma tecnologia que as máquinas usam para reconhecer imagens automaticamente e descrevê-las com precisão e eficiência.
- Os sistemas de visão computacional usam a tecnologia de inteligência artificial (IA) para imitar as capacidades do cérebro humano que são responsáveis pelo reconhecimento e classificação de objetos.
- A meta da pesquisa em visão computacional é demonstrar uma capacidade visual semelhante a do ser humano.

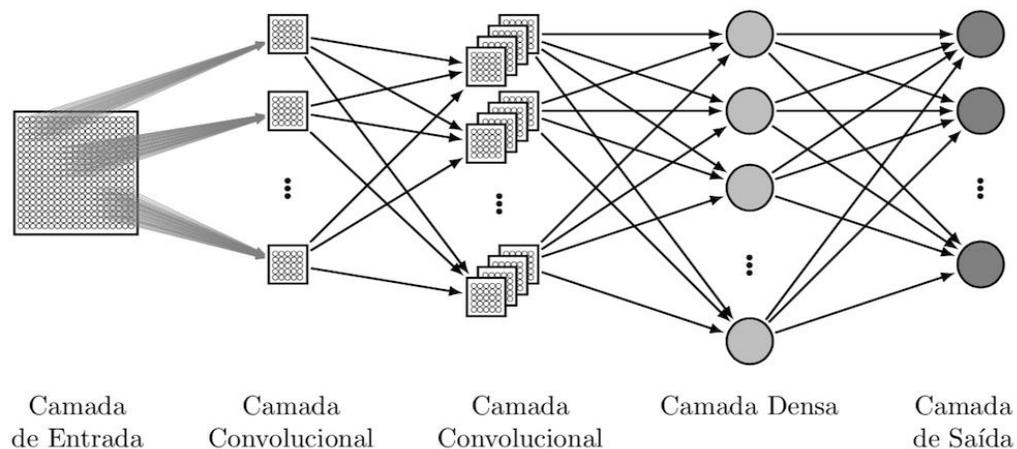
Human Vision vs Computer Vision



Redes neurais convolucionais



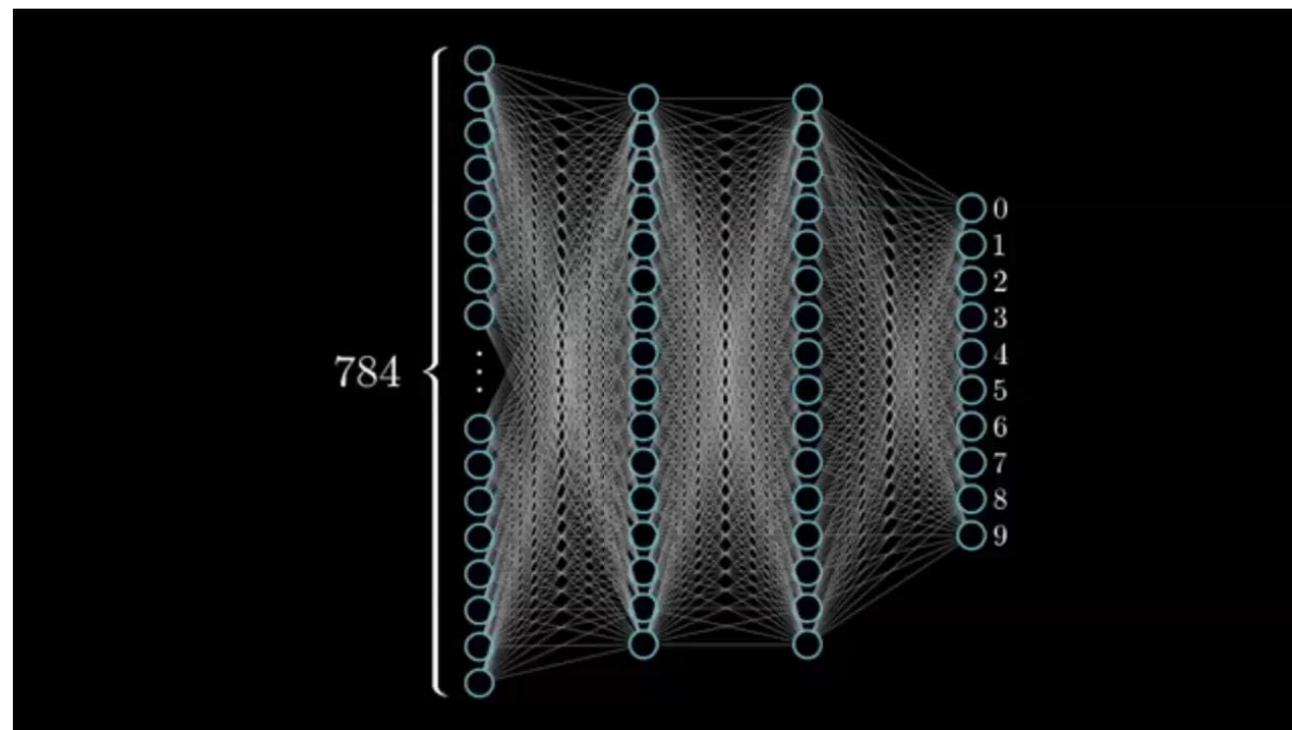
- As redes neurais convolucionais distinguem-se de outras redes neurais por seu desempenho superior com estradas de imagem, potencializando o reconhecimento de imagens.
- Camada Convolutiva → Camada de Agrupamento → Camada Totalmente Conectada



Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=pj9-rr1wDhM>

Redes neurais convolucionais

- Camada Totalmente Conectada:
- Todos os neurônios da camada anterior são conectados com os neurônios da camada posterior.
- Possibilita a captura de relações complexas da camada de entrada com a camada de saída.

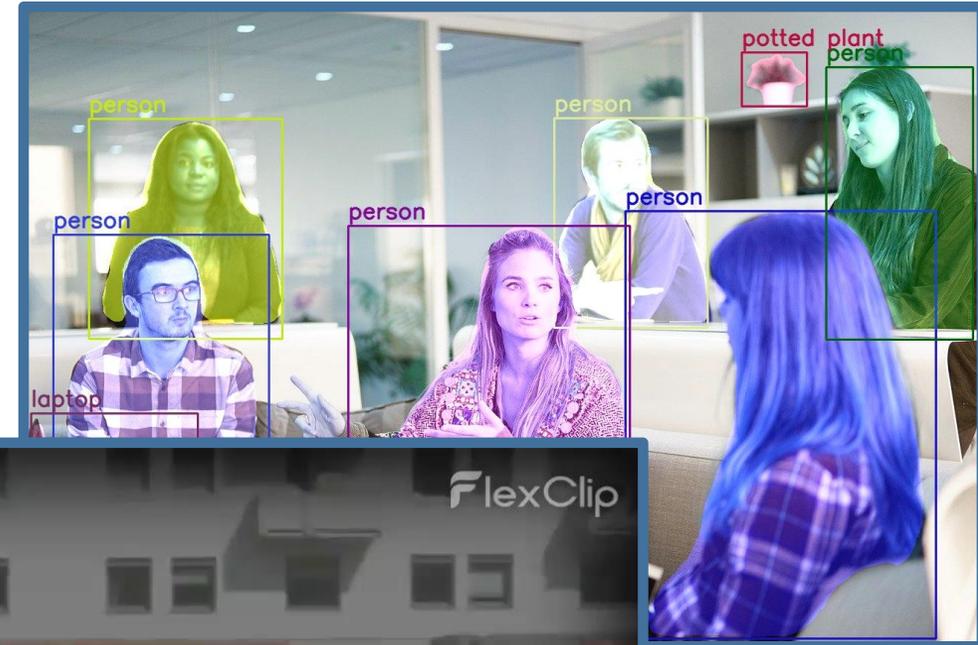
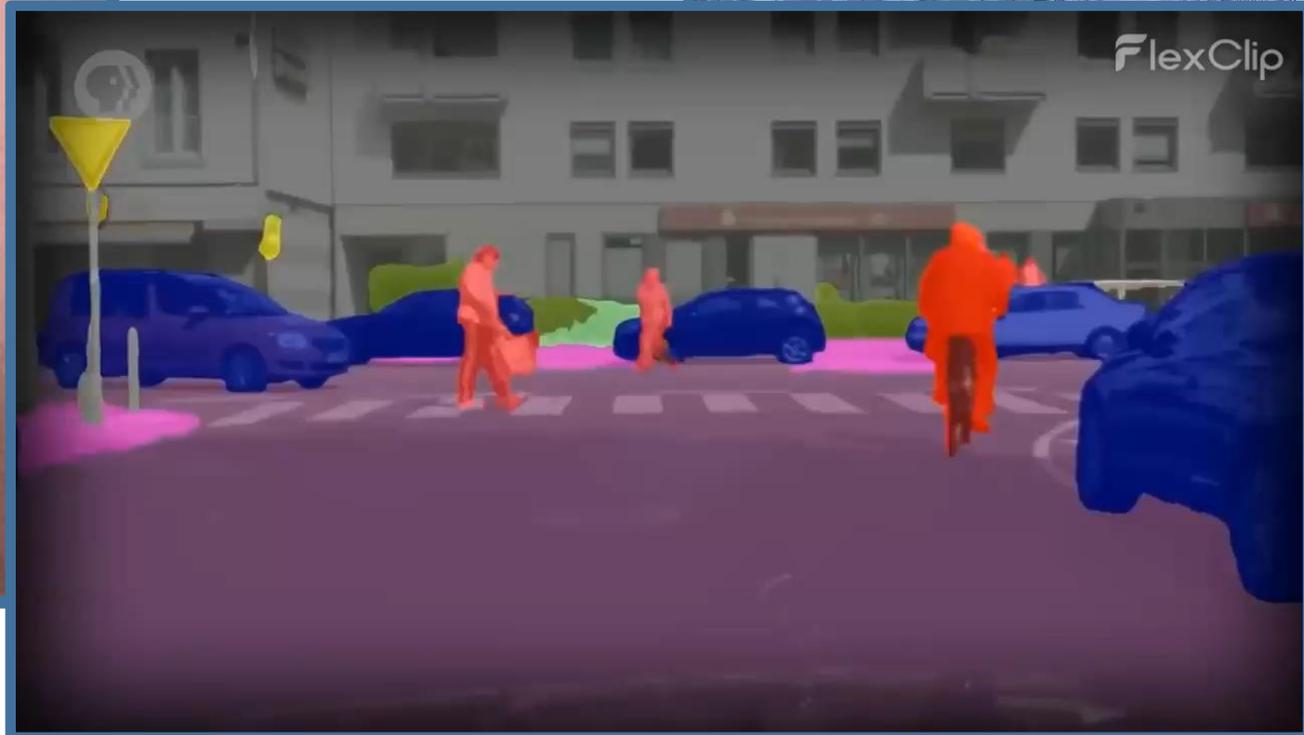


Fonte: <https://www.youtube.com/watch?v=aircAruvnKk>

Técnicas de segmentação

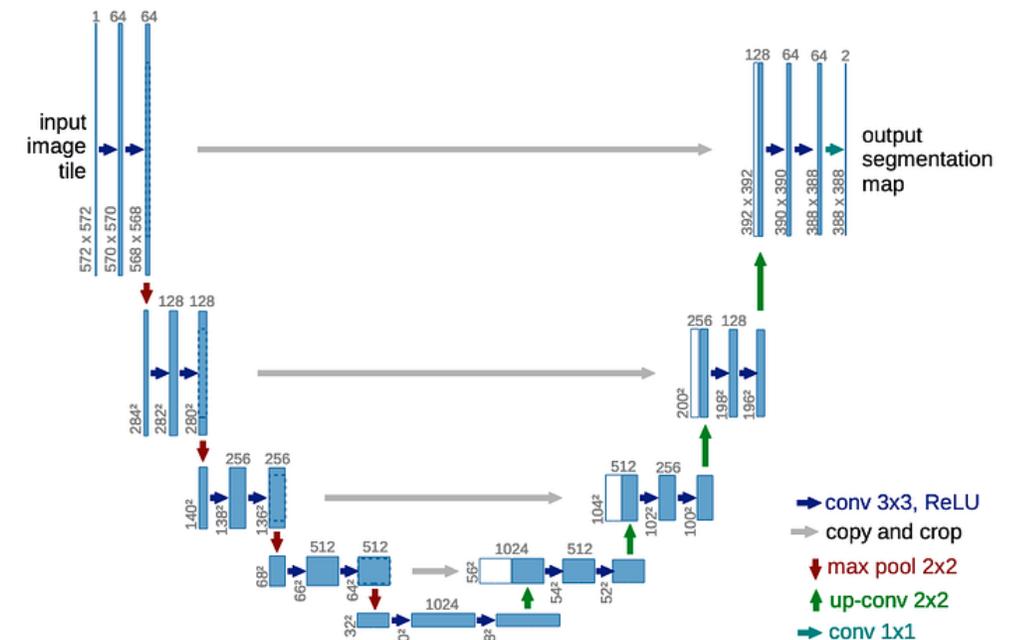
Utilizou-se 3 técnicas de segmentação no projeto

- K-Means
- U-Net
- Mask-rcnn

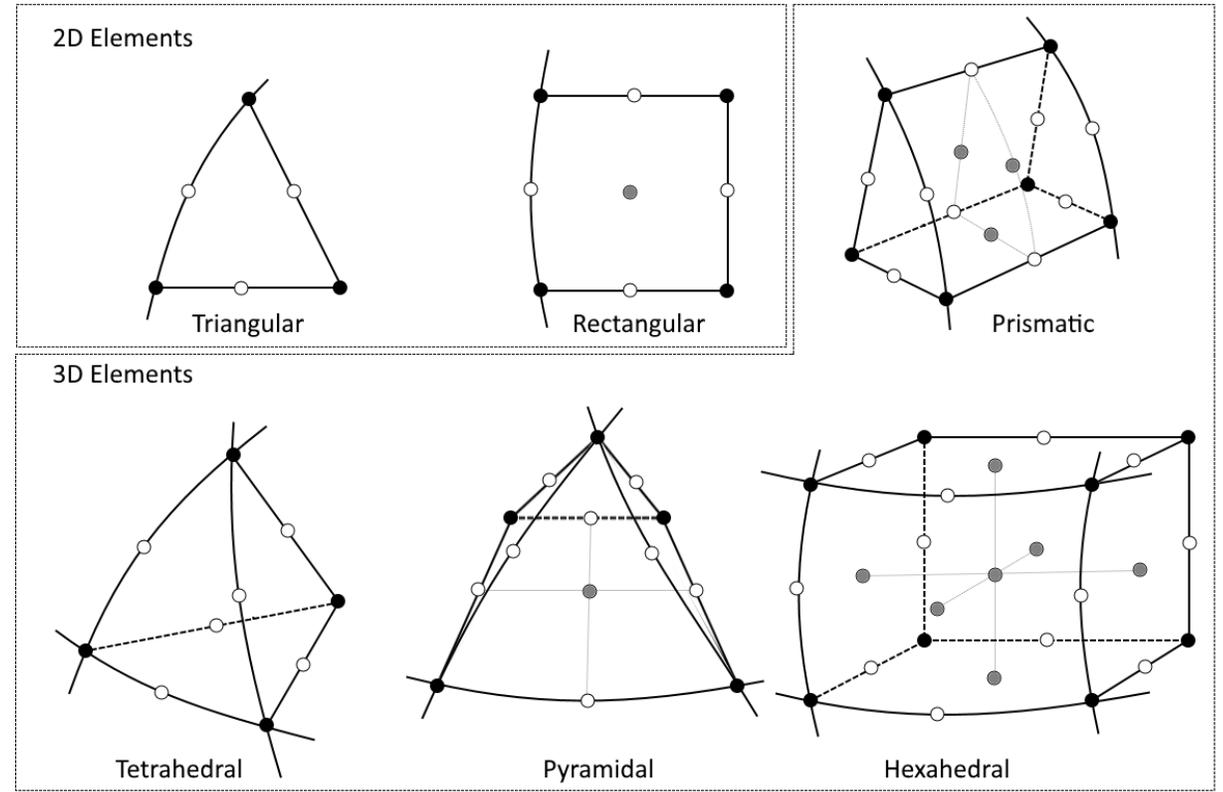


U-Net

- A U-Net, também conhecida como Rede U-Net, é uma arquitetura de rede neural convolucional (CNN) amplamente utilizada em tarefas de segmentação de imagens.
- U-Net consiste em três componentes principais: o bloco convolucional, o bloco codificador e o bloco decodificador:
 - O bloco convolucional realiza uma multiplicação com uma matriz (kernel) com valores aleatórios que gera n imagens diferentes.
 - O codificador aplica o pooling máximo para um determinado kernel. Em cada iteração, apenas o valor máximo da matriz é armazenado em uma nova matriz.
 - O bloco decodificador reverte o processo de pooling máximo que reduziu a imagem proporcionalmente ao tamanho do kernel.



Discretização do compósito por meio da técnica Skeletonize e análise em elemento finitos

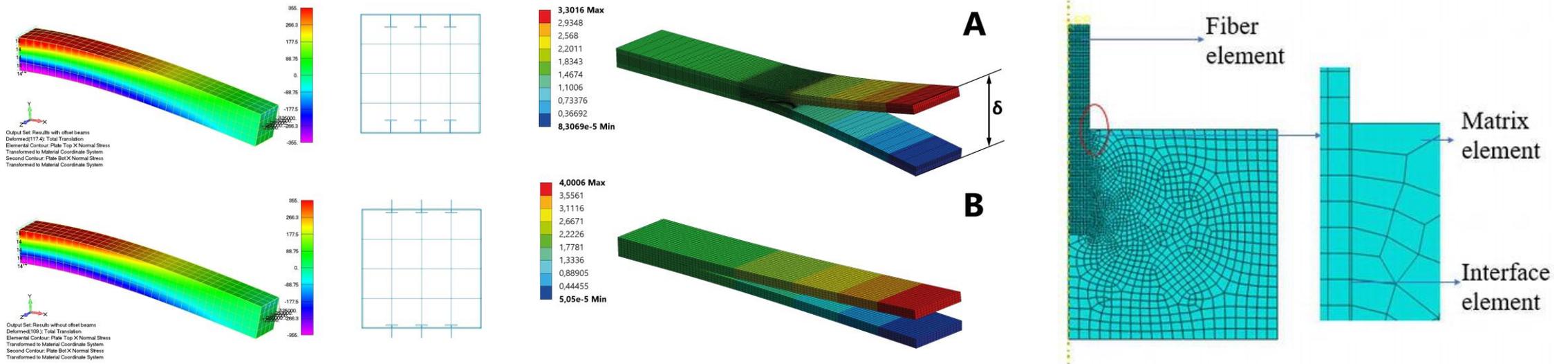


- Ao sobrepor as posições do esqueleto com os respectivos valores da matriz distância, é possível obter o diâmetro das fibras por pixel ao longo da dimensão da amostra.
- Além disso, também é possível quantificar o comprimento total das amostras com base na quantidade de pixels do esqueleto.
- Sendo assim, a predição da máscara desempenha um fator decisivo para a qualidade dos resultados pois o cálculo das dimensões trata-se de um processo determinístico fundamentado em regiões.



Método dos elementos finitos

- É um procedimento numérico para determinar soluções de tensões e deformações aproximadas através da discretização do contínuo.
- O método subdivide o domínio de um problema em partes menores, denominadas elementos finitos, afim de encontrar a solução em qualquer ponto proposto.



- A indústria em geral procura cada vez mais novos materiais que sejam menos nocivos ao meio ambiente, amplamente disponíveis na natureza e com propriedades equivalentes ou superiores às existentes.
- Portanto, esses motivos incentivaram o uso do polímero compósito de filme de quitosana reforçado com fibra para aprimorar a caracterização de materiais utilizando as técnicas mencionadas.

Biocompósito de quitosana reforçado com fibras naturais



Treinamento da rede

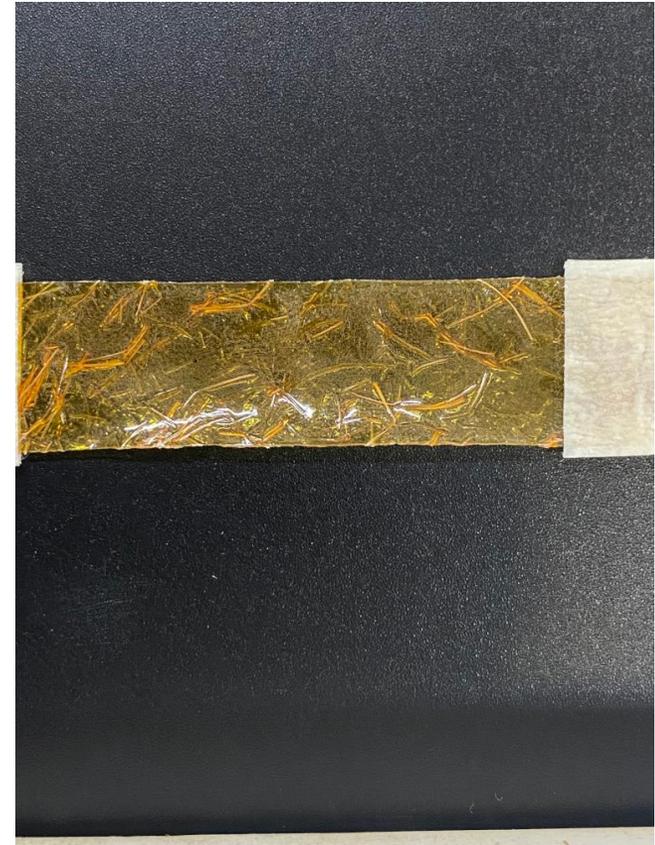
- Para que a rede de segmentação de imagem possa ser treinada é necessário que haja uma base de dados, dataset, que possa ser utilizado para treiná-la. Essa base de dados são as imagens do biocompósito. São um total de 15 imagens.
- Seguem algumas imagens do dataset:



Imagem_7441



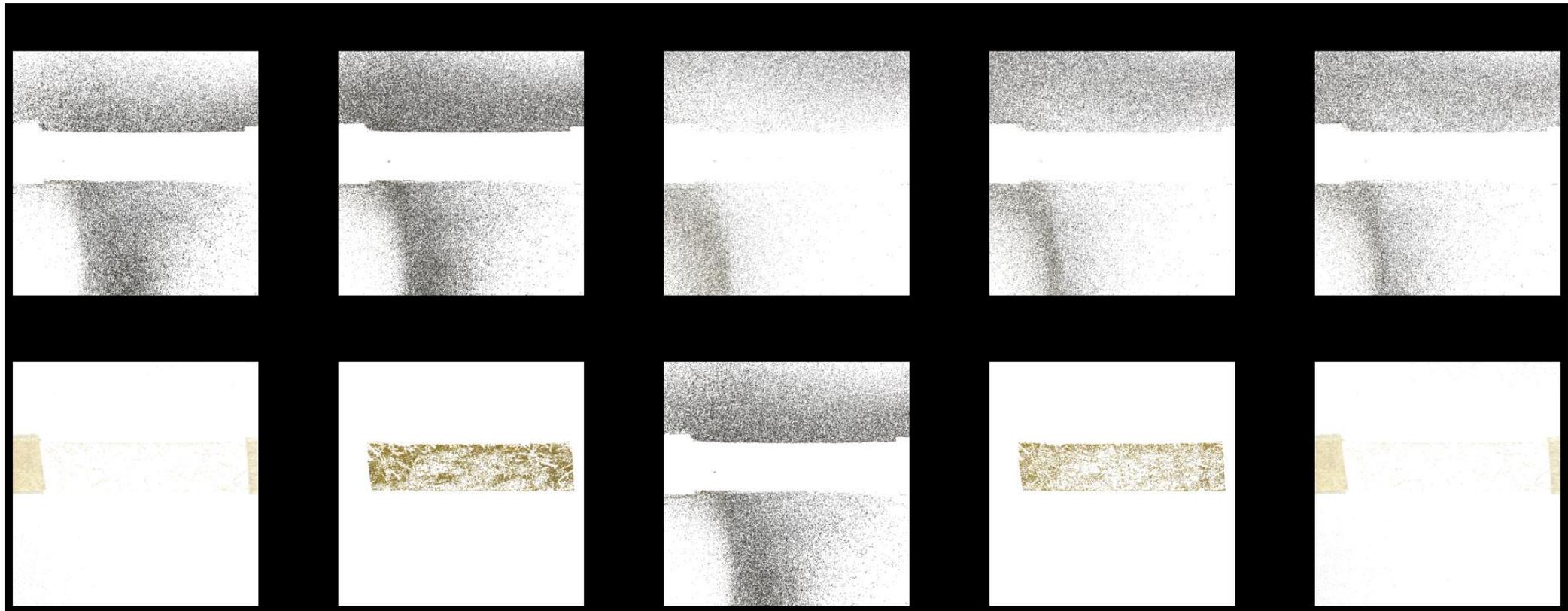
Imagem_7452



Imagem_7461

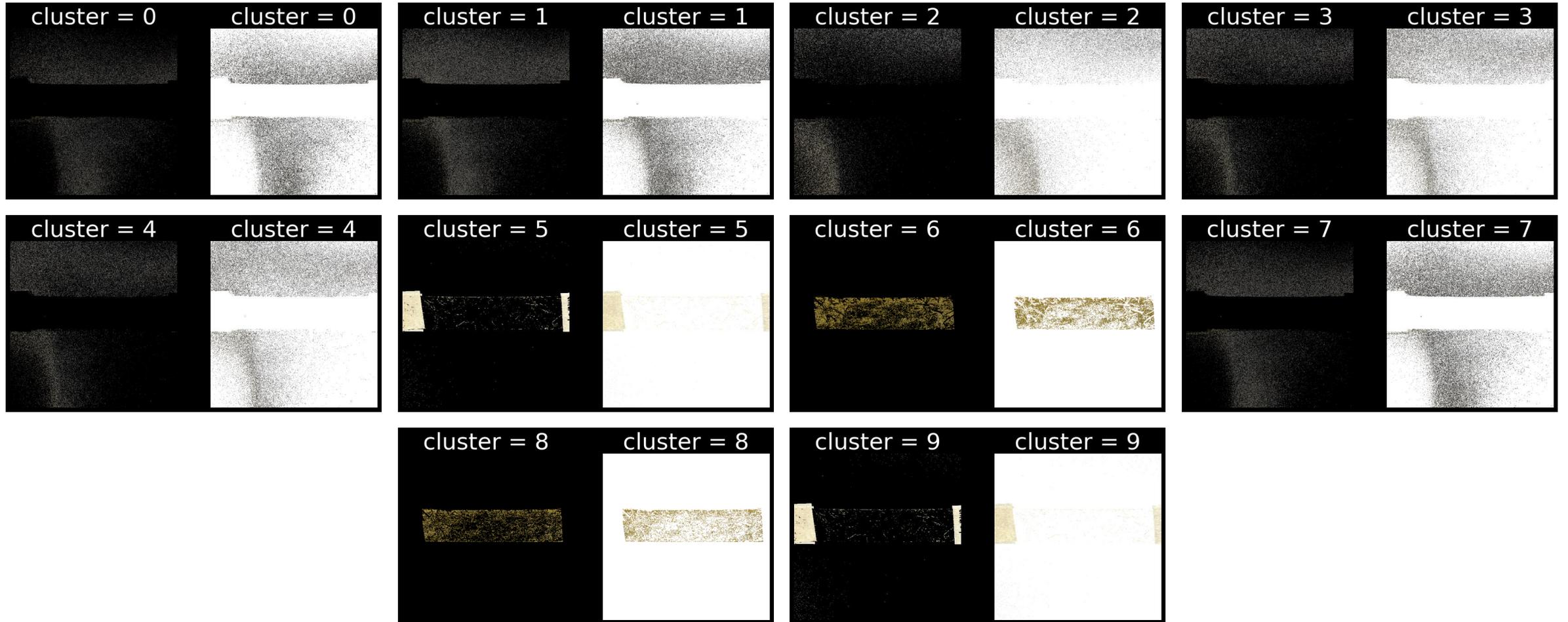
K-MEANS

- Uma das técnicas de segmentação utilizada foi o K-MEANS, já explicado anteriormente. Sua implementação se dá na utilização dos n cluster que particionam a imagem.



K-MEANS

- Representação da obtenção dos clusters



K-MEANS

- Resultados da segmentação:

Original



Mask



Prediction iou=0.54



Original



Mask

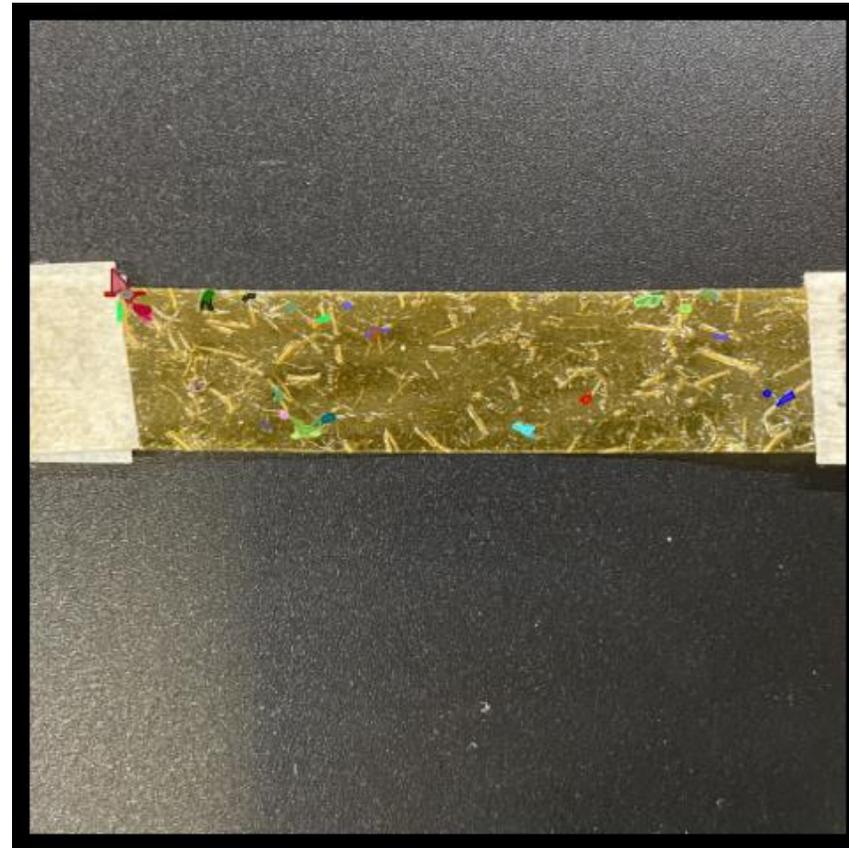


Prediction iou=0.54



MASK-RCNN

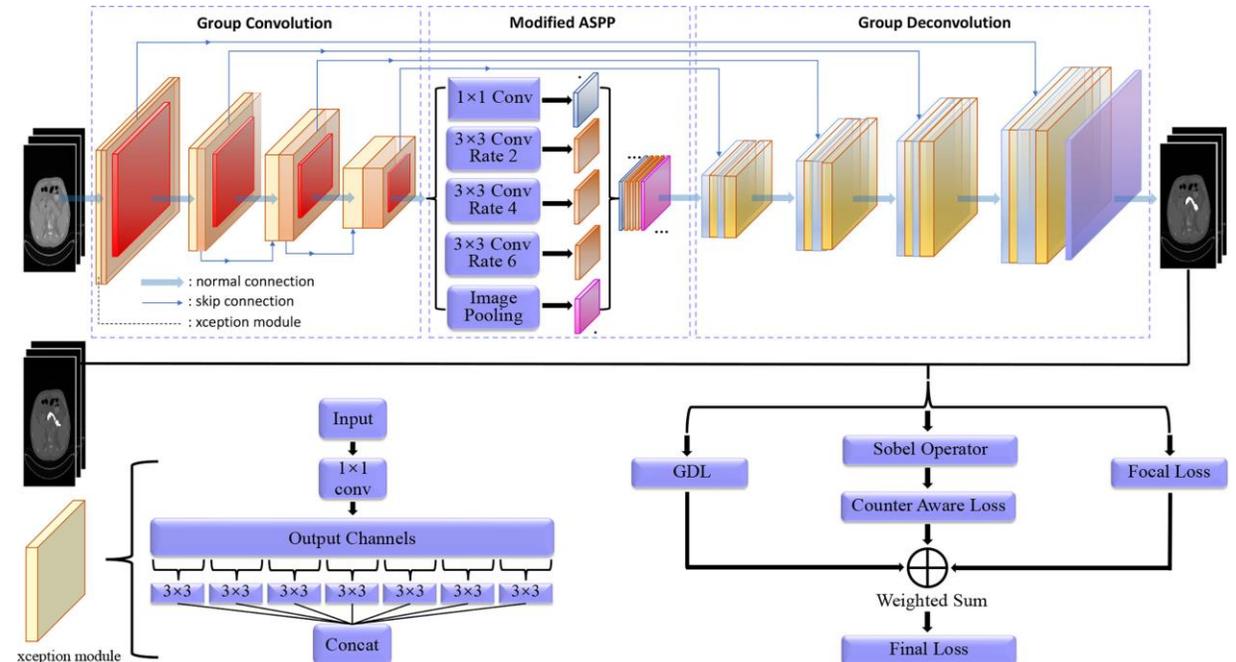
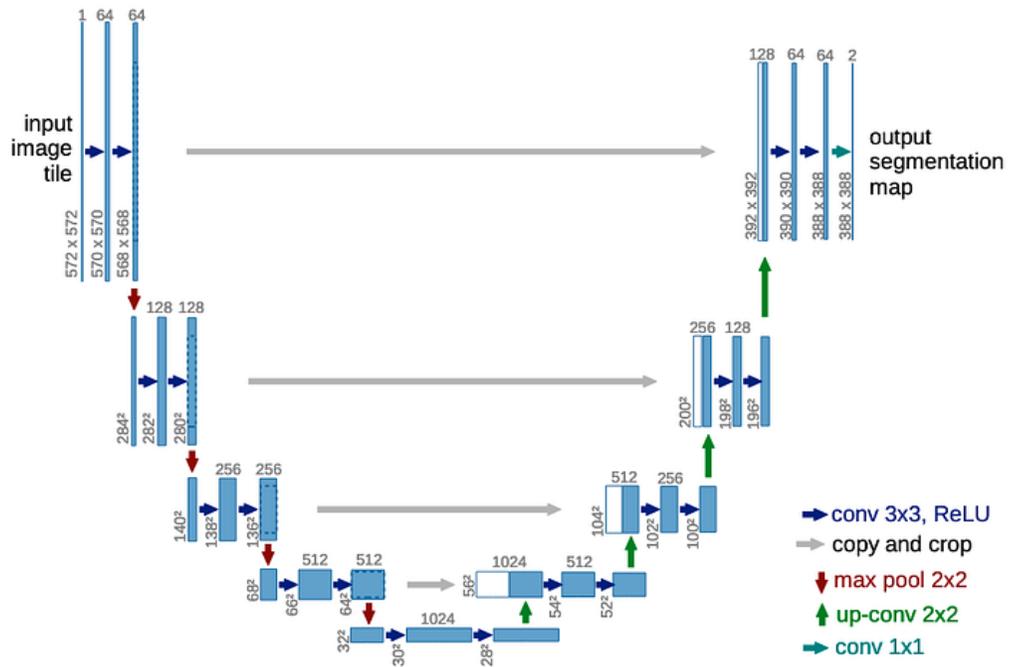
- Técnica que tem como objetivo a segmentação e identificação do objeto. Além de distinguir a fibra de sisal da malha, essa técnica busca também identificar cada fibra unitária.



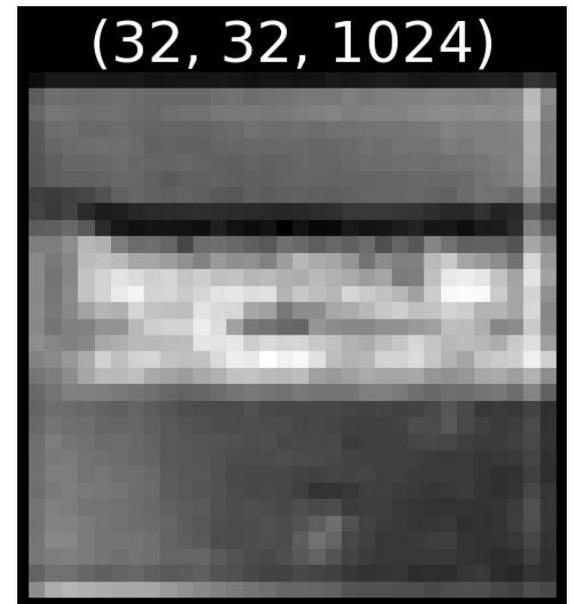
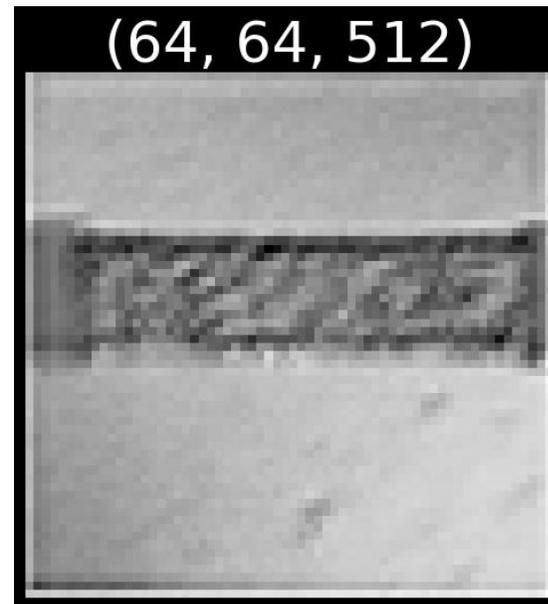
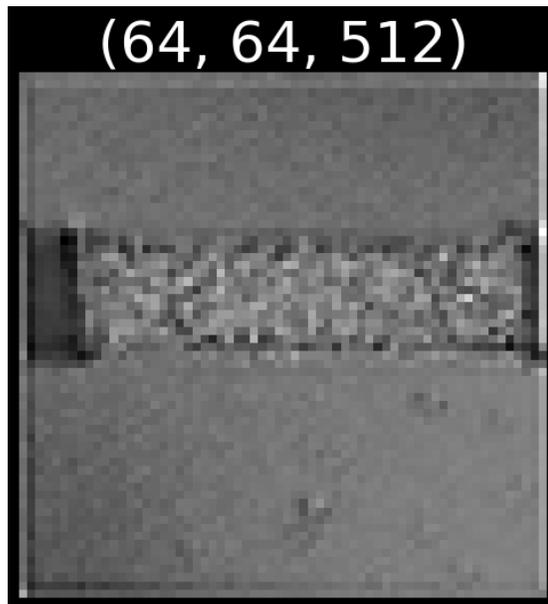
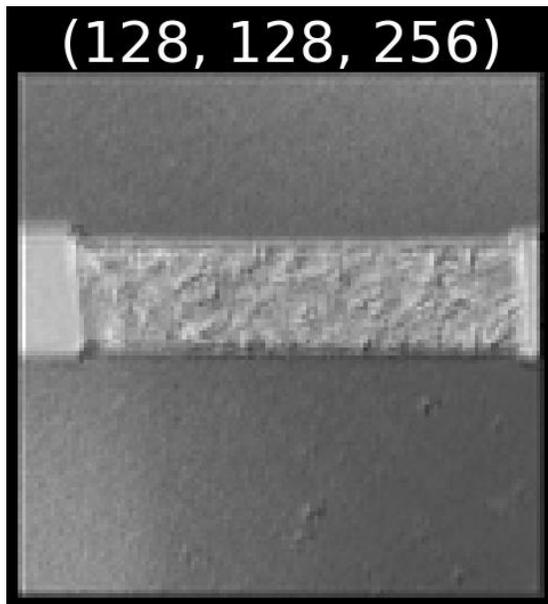
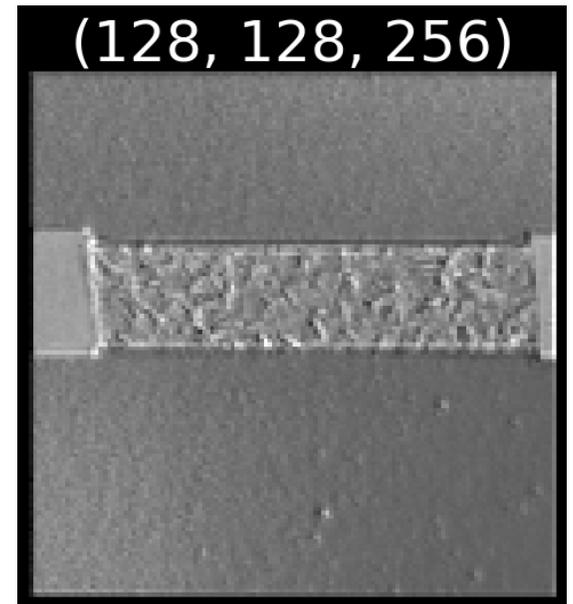
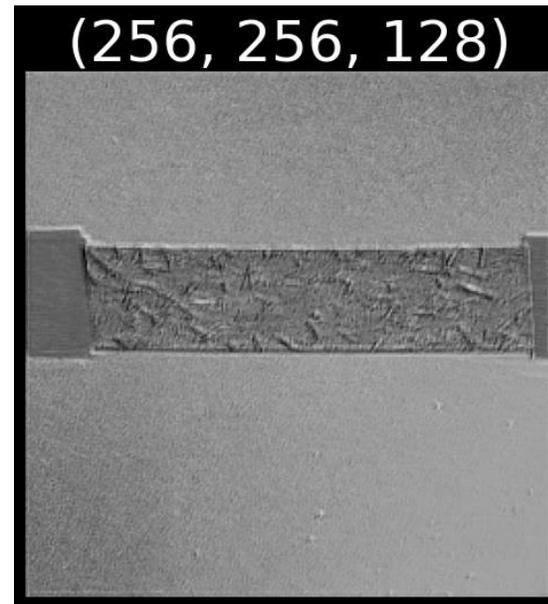
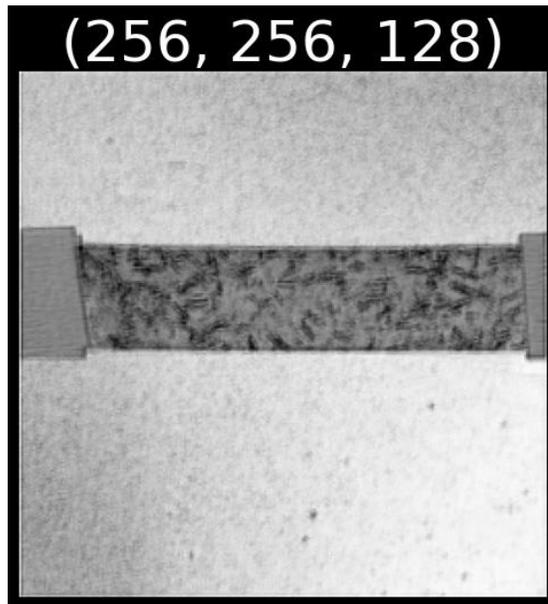
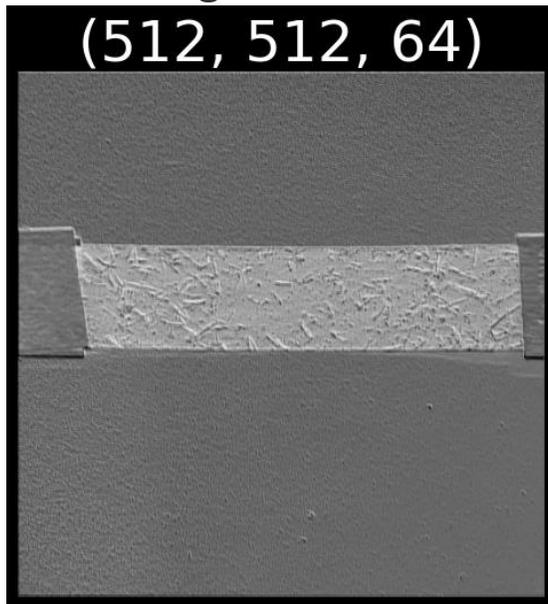
Predição obtida pela técnica.

U-NET

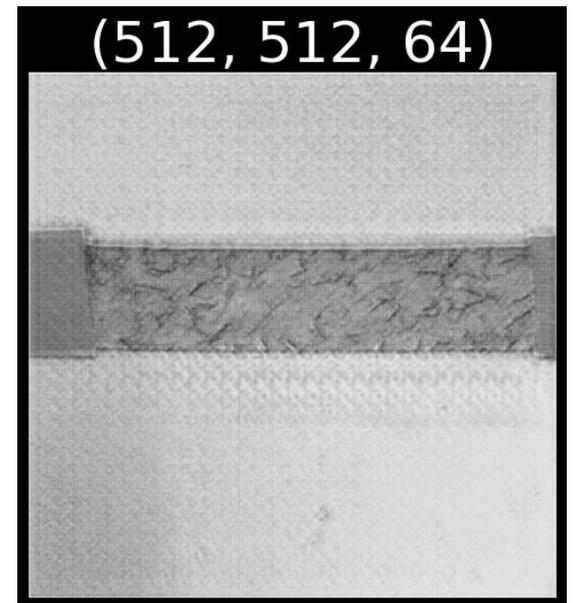
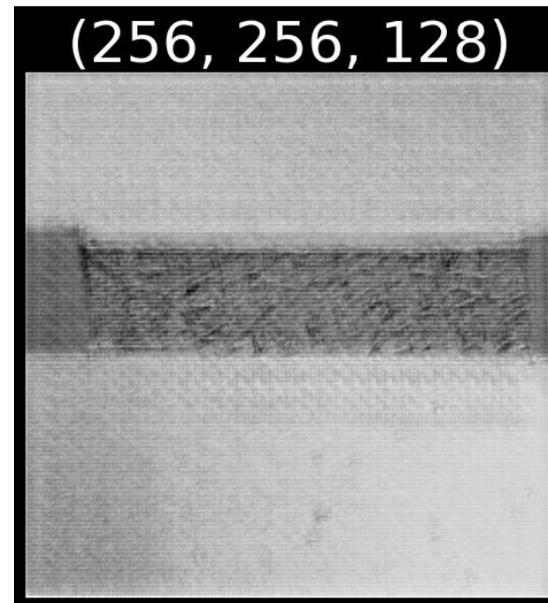
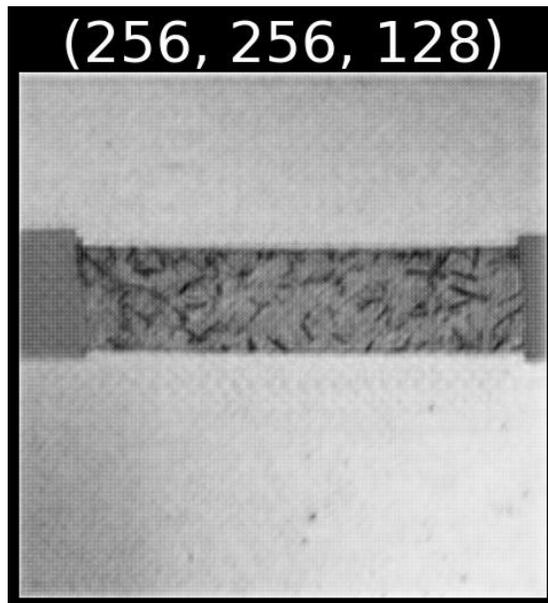
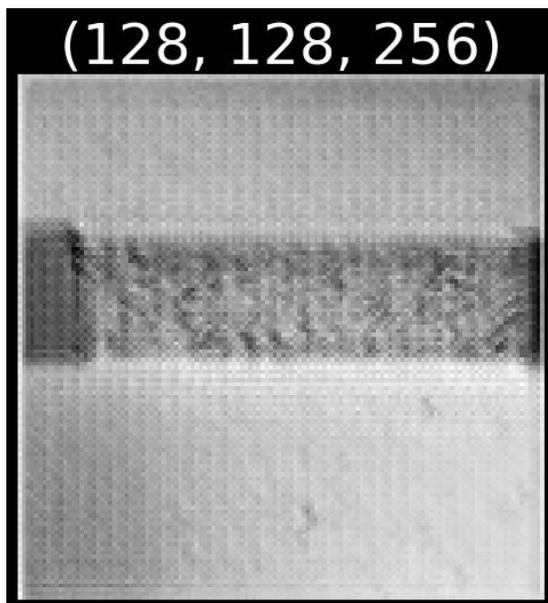
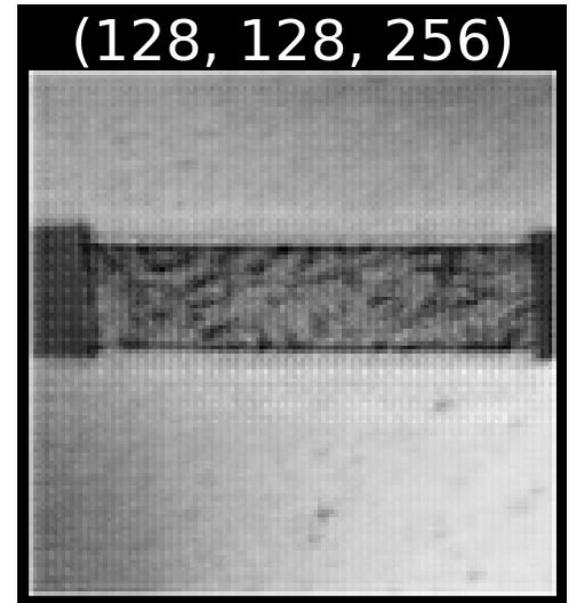
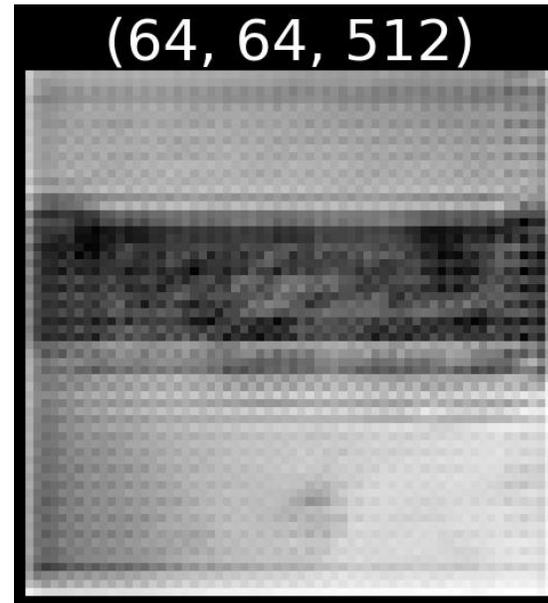
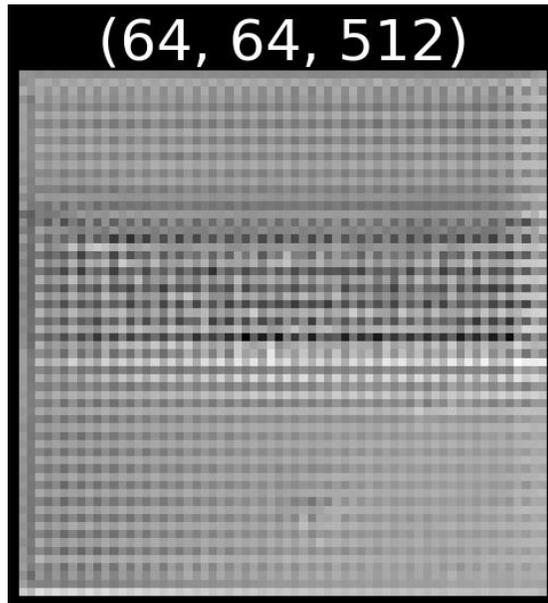
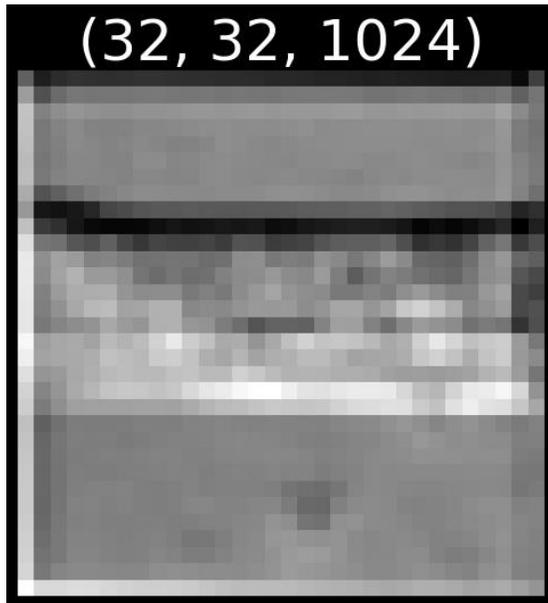
- A arquitetura U-Net consiste em três componentes principais: o bloco convolucional, o bloco codificador e o bloco decodificador. Seguem exemplos da aplicação da arquitetura no biocompósito.



- A quantidade de pixels da imagem diminui à medida que a quantidade de imagens de um mesmo frame aumenta



- Conforme a quantidade de imagens volta à original, o bloco dos dados de saída acessa o bloco dos dados de entrada correspondentes para manter as informações da imagem.



U-NET

- Predição da técnica

Imagem original



Máscara real (ground truth)



Predição (U-Net)



U-NET

- Resultados da segmentação

Original



Mask



Prediction iou=0.75



Original



Mask



Prediction iou=0.74



RESULTADOS DA SEGMENTAÇÃO

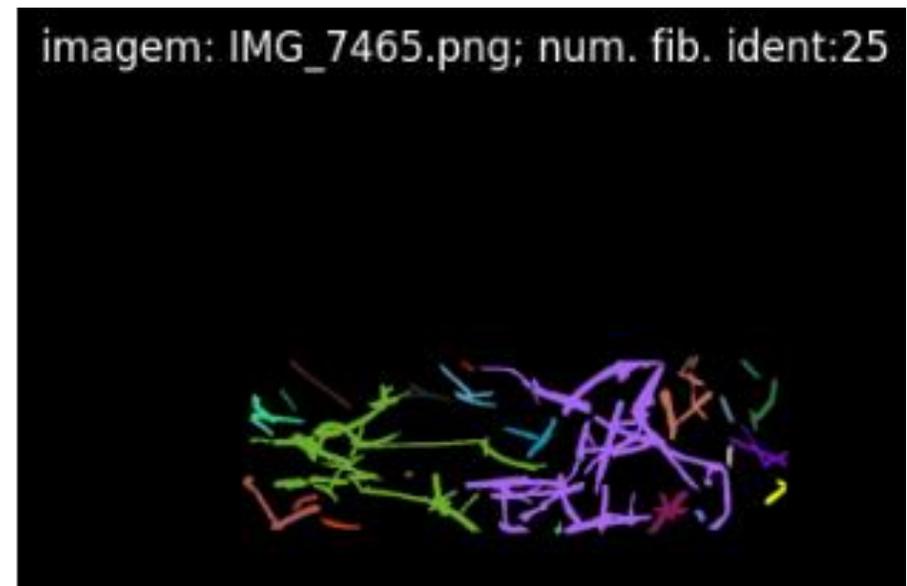
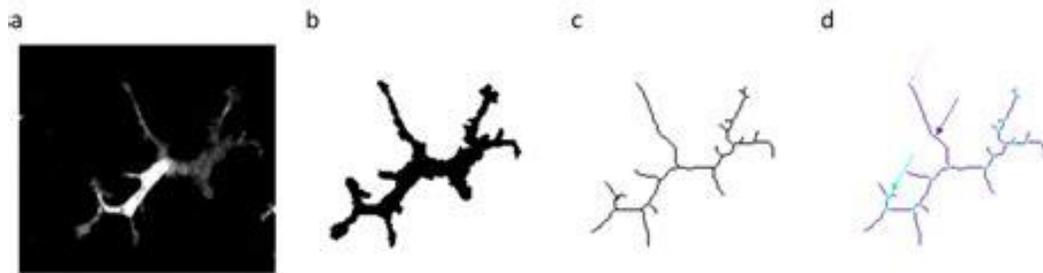
- Verifica-se que a técnica de segmentação de imagem que obteve os melhores resultados foi a U-NET.
- A técnica MASK-RCNN não convergiu.
- A técnica K-MEANS também não trouxe resultados satisfatórios, apesar de ter sido implementada com todos seus processos.

Comparação dos Resultados

	PA	IOU	DC	Error
K-Means	0.96	0.55	0.32	0.19
Mask-RCNN	0.00	0.00	0.00	0.00
U-Net	0.98	0.75	0.69	0.09

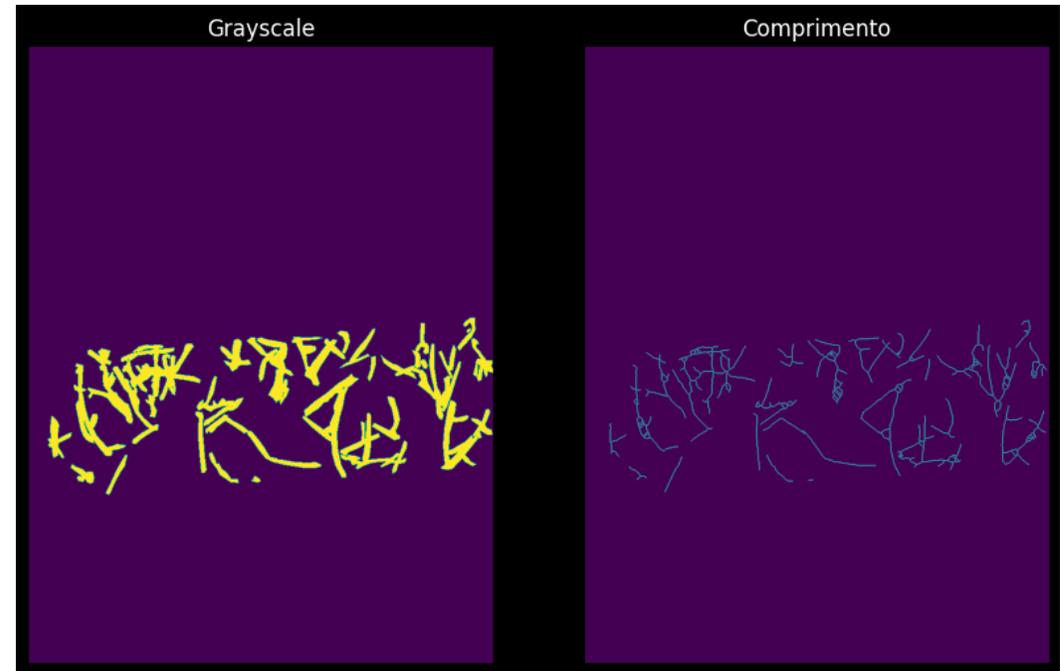
PROCESSAMENTO DAS IMAGENS SEGMENTADAS

- Cada técnica usada tem suas características próprias que influenciam no resultado esperado.
- A técnica gera um impacto para a discretização das fibras:
 - K-Means: Técnica de segmentação mais simples e rápida, porém com pouca precisão.
 - U_Net: Técnica de segmentação que classifica as fibras, porém não distingue cada fibra.
 - Mask-RCNN: Técnica de segmentação que classifica e distingue as fibras de forma individual.
- O resultado esperado para discretizar a fibra, em comprimento e diâmetro, varia de acordo com a técnica utilizada.



SKELETONIZE

- O processo de esqueletização das fibras é necessário, pois reduz a fibra a 1 pixel de espessura ao longo do seu comprimento, tornando possível a obtenção do diâmetro, associando a fibra com 1 pixel de espessura com a fibra com a espessura segmentada, podendo também chegar aos resultados de comprimento das fibras.
- Além disso, a esqueletização da fibra permite a importação da segmentação em softwares de análise, que costumam ter parâmetros de entrada baseados na linha neutra do elemento, que é análogo à fibra esqueletizada.

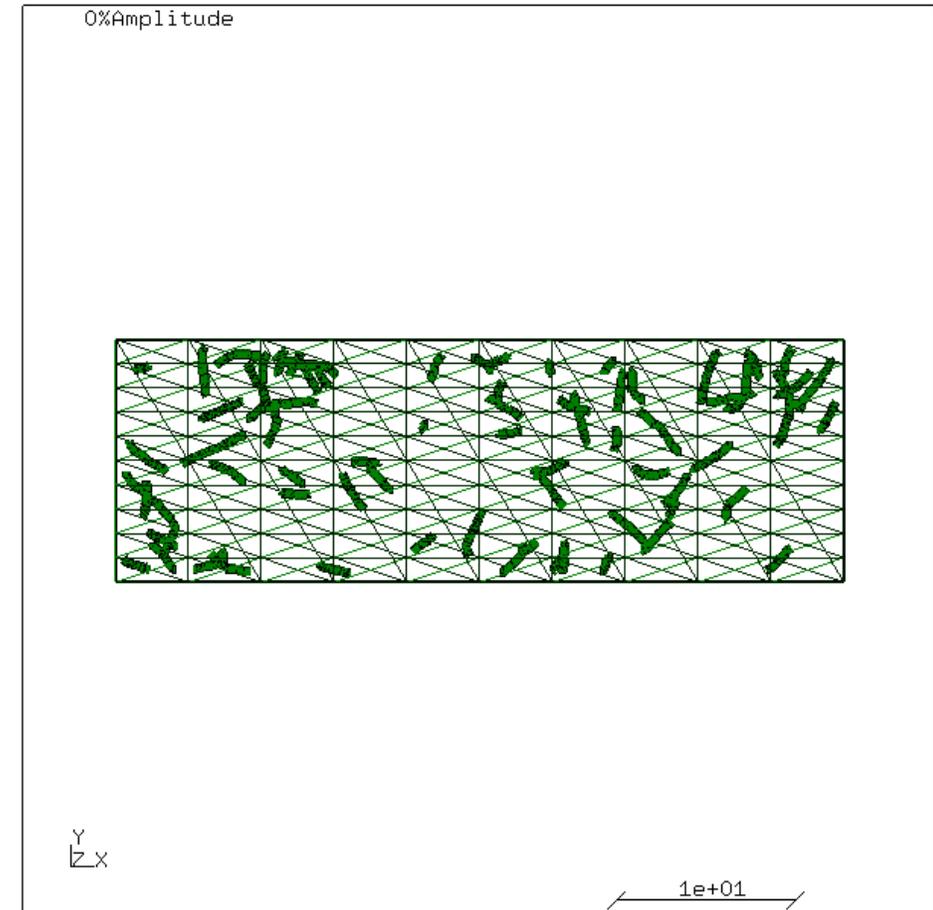
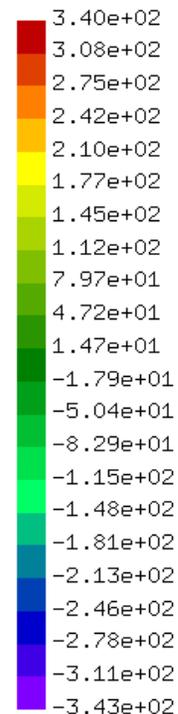


MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

- No âmbito da Engenharia, o Método dos Elementos Finitos (MEF) tem como objetivo a determinação do estado de tensão e de deformação de um sólido de geometria arbitrária sujeito a ações exteriores.
- Para o biocompósito apresentado, busca-se entender as deformações e tensões geradas por forças arbitradas de maneira a não precisar de ensaios destrutivos.

1/1:DISP
Time: 1.000000000
Entity:D1

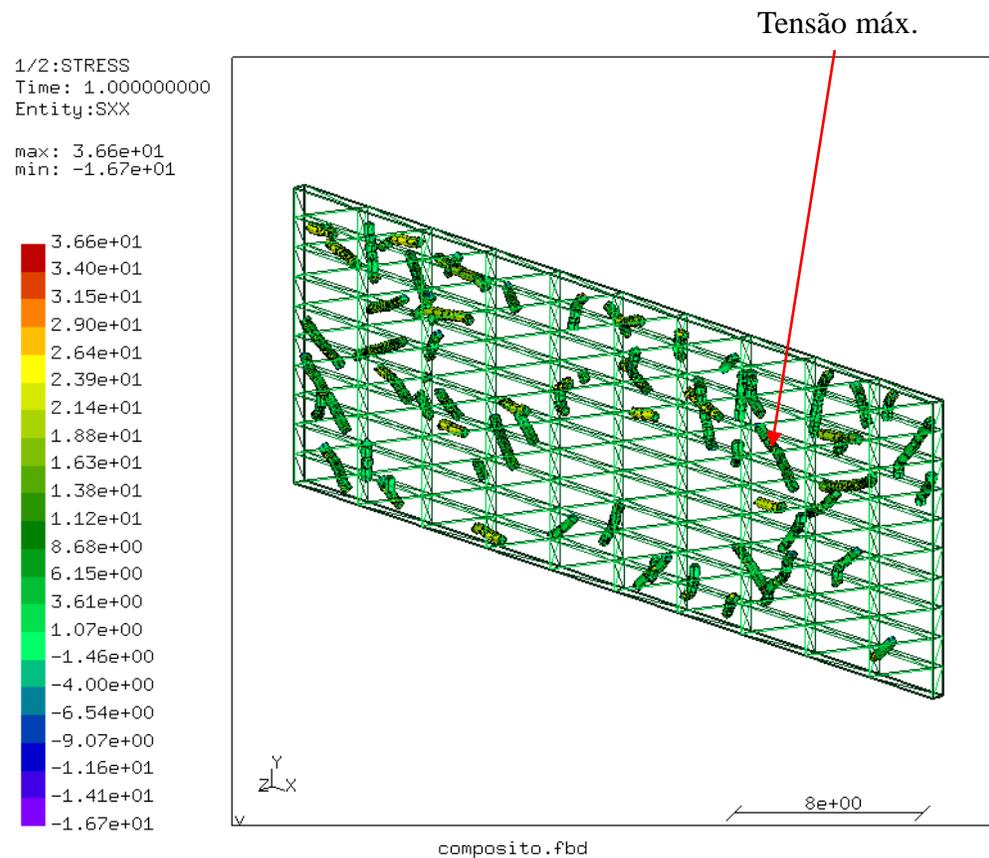
max: 3.40e+02
min: -1.60e+00



composito.fbd

MÉTODOS DE ANÁLISE

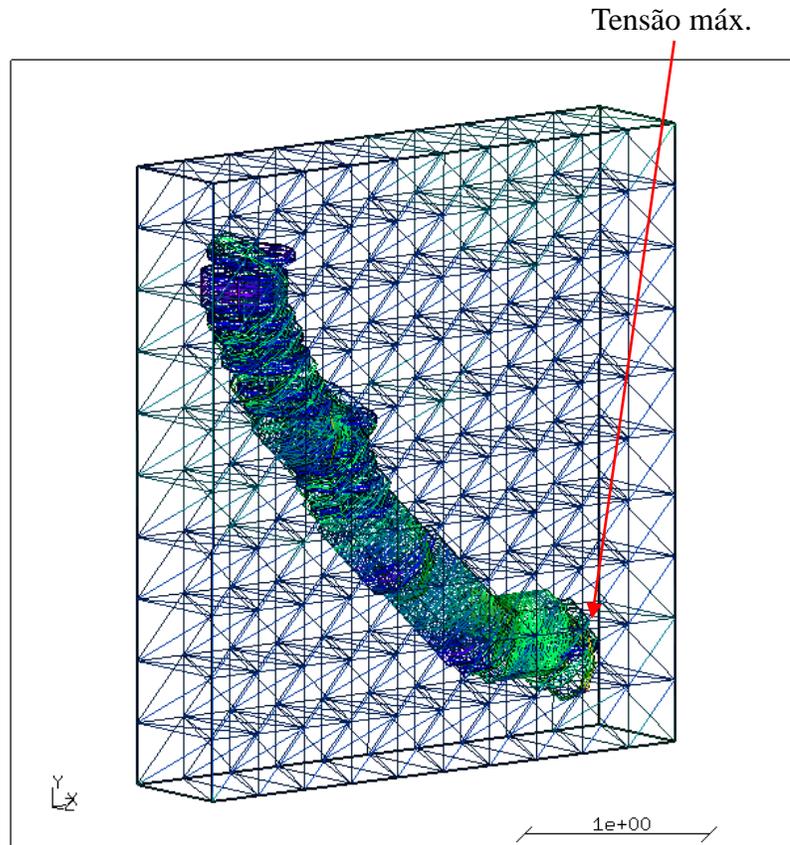
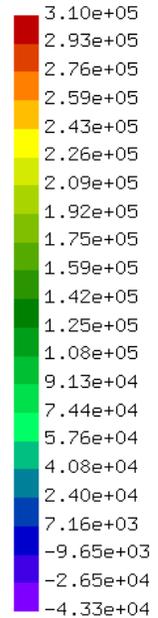
- Full Scale: Análise das tensões e deformações da matriz com todas as fibras presentes:



MÉTODOS DE ANÁLISE

- Meso Scale: Análise somente da fibra com as maiores tensões atuantes:

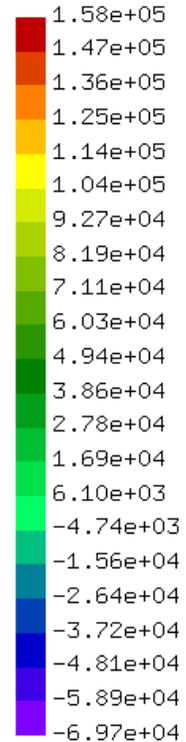
1/2:STRESS
Time: 1.000000000
Entity:SXX
max: 3.10e+05
min: -4.33e+04



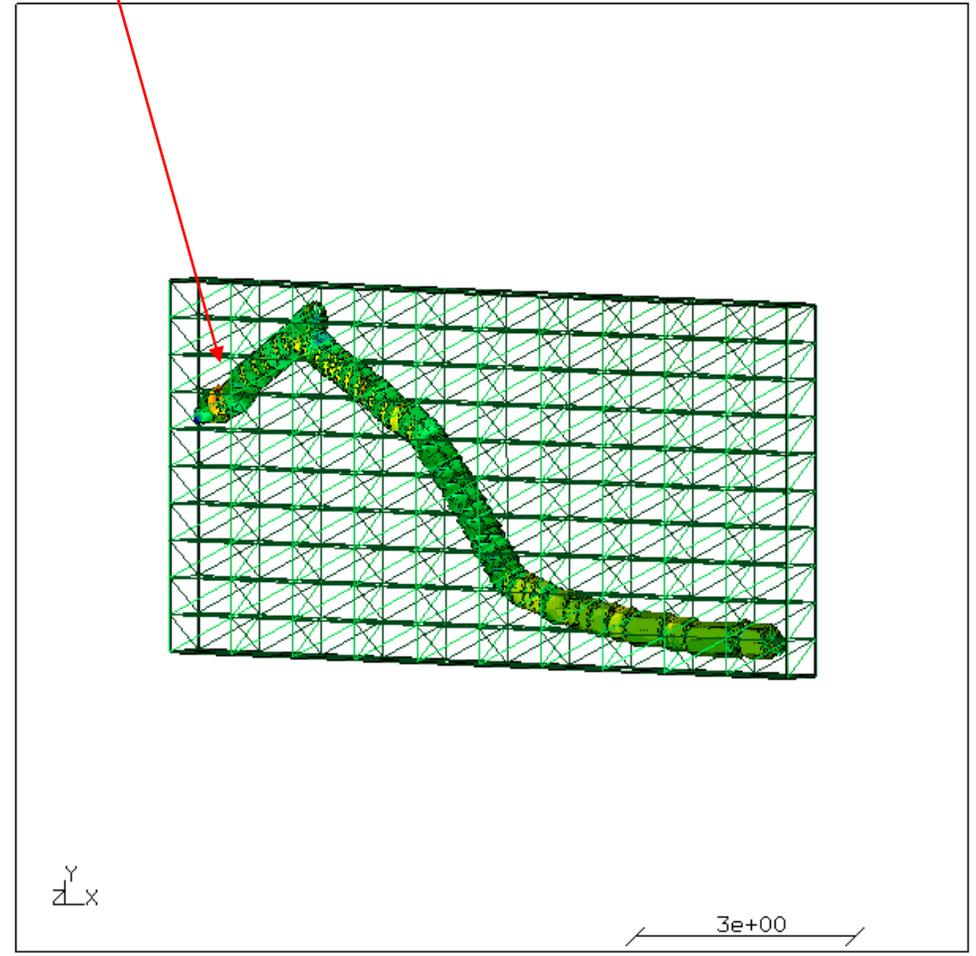
composito.fbd

1/2:STRESS
Time: 1.000000000
Entity:SXX

max: 1.58e+05
min: -6.97e+04



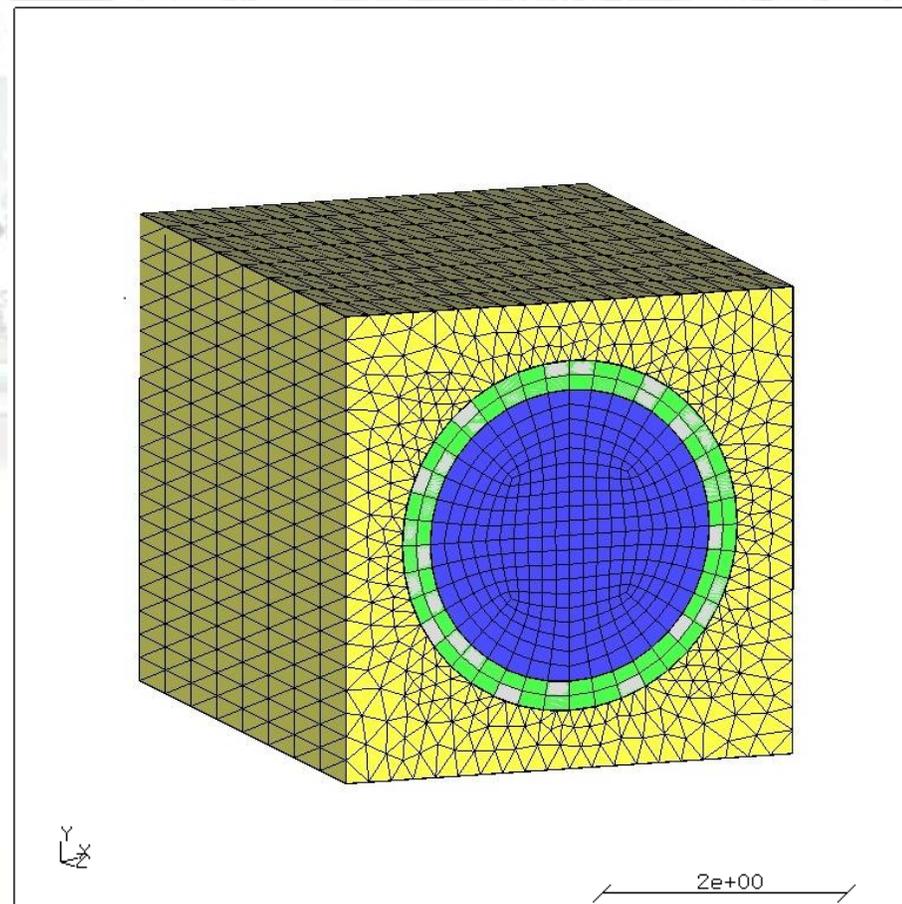
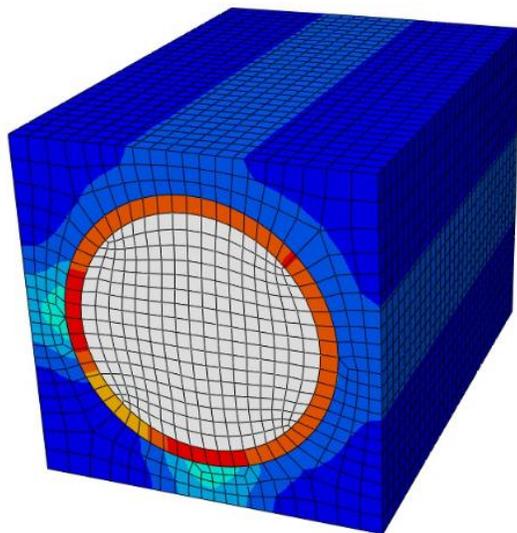
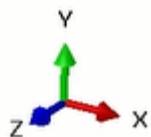
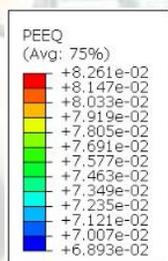
Tensão máx.



composito.fbd

MÉTODOS DE ANÁLISE

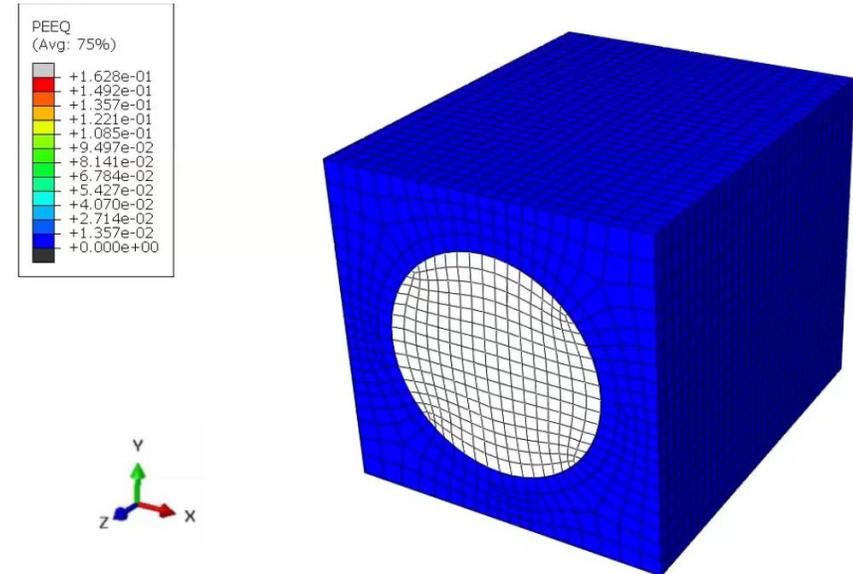
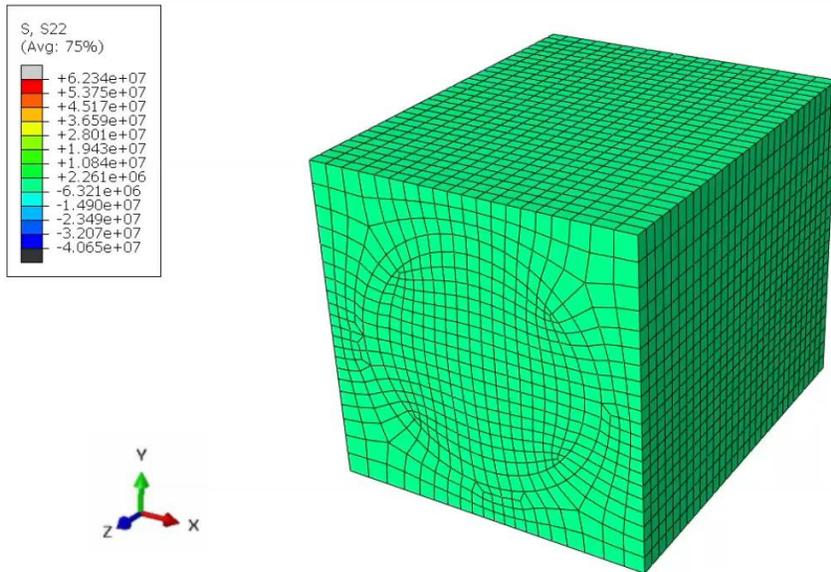
- Micro Scale: Análise do ponto de maior tensão da fibra com as maiores tensões atuantes.
- É o método de maior refino, pois analisa não somente a fibra e o seu comportamento, mas também a região de contato entre a fibra e a matriz.
- Forças atuantes no eixo Z:



MicroScale.fbd

Métodos de análise

- Micro Scale: Forças atuantes no eixo X.



LAMEFF

Artificial Intelligence
Group

FRIGIDE AND
FRACTURE OF METALS
METALS

LAMEFF



Prof. E. P. de Deus
& Doutorando Audelis
O. Marcelo JR –
Programa de Pós
Graduação Enga.
Ciência dos Materiais
UFC



FIEC |
SUMMIT 20
24



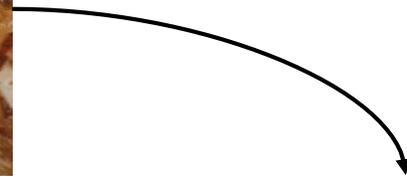
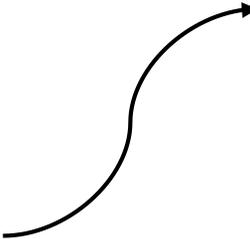
Our own PEM membrane

(Proton Exchange Membrane) from Chitosan!





Membrana	Condutividade (S.cm-1)	Espessura (μm)
Quitosana	$8.5 \cdot 10^{-4}$	112



“Utilization of the crustacean economy in our state for the development of a genuinely regional product!”





Products and Processes under development for Decentralized Production of Green Hydrogen with PEM electrolysis

LAMEFF - Laboratory of Fracture Mechanics and Fatigue

Federal University of Ceará

Coordinator: Professor Dr. Enio Pontes de Deus



Conclusão

A Inteligência Artificial oferece uma abordagem sistemática e eficaz para caracterizar e otimizar materiais utilizados na produção de **hidrogênio verde**. A utilização de técnicas avançadas de IA permite uma análise detalhada das propriedades dos materiais, promovendo melhorias significativas em eficiência, durabilidade e custo.

Benefícios: Maior precisão e eficiência na produção de hidrogênio verde, inovação tecnológica e contribuição para a sustentabilidade energética.



Enio Pontes de Deus

Prof. Titular UFC

Coordenador do LAMEFF/UFC

Conselho Consultivo FINEP

epontes@ufc.br

