

Desenvolvimento de Metamodelo baseado em Redes Neurais Artificiais para descrição da cinética de produção de e-metanol

Giulia Torres Silveira^{a*}, Fábio Machado Cavalcanti^a

^aDepartamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Instituto de Pesquisa em Petróleo e Energia (i-LITPEG), Laboratório de Refino e Tecnologias Limpas (LabRefino/LATECLIM), Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE, Brasil

*giulia.silveira@ufpe.br

RESUMO

A crescente demanda por combustíveis sustentáveis impulsiona o desenvolvimento de rotas para a produção de e-metanol via hidrogenação de CO₂ com hidrogênio verde, destacando a necessidade de ferramentas eficientes de modelagem. Nesse contexto, este trabalho teve como objetivo desenvolver um metamodelo baseado em redes neurais artificiais para estimar o desempenho da produção de e-metanol em condições industriais. A metodologia utilizou uma base de dados de experimentos em reator de leito fixo (Portha *et al.*, 2017), com 16 corridas e 6 variáveis de entrada (GHSV (h⁻¹); P (bar); T (°C); Pressão Parcial (bar) do H₂, CO₂, inerte (N₂ + Ar)) e 2 de saída (conversão do CO₂ (X_{CO₂}) e seletividade do MeOH (S_{MeOH})). Os dados foram normalizados e divididos em treinamento (80%) e teste (20%), e o modelo foi desenvolvido com uma rede neural perceptron multicamada, contendo 20 neurônios na camada oculta, função ReLU e algoritmo Adam, utilizando o erro quadrático médio como função de perda. Os resultados indicaram alto desempenho no treinamento (MSE $\approx 1,13 \times 10^{-3}$; R² > 0,98), enquanto no teste houve aumento do erro (MSE $\approx 5,4 \times 10^{-2}$) e redução do R² ($\approx 0,36$), evidenciando limitações de generalização, possivelmente devido ao pequeno tamanho da base de dados. Para potencial aplicação na modelagem da produção de e-metanol, são recomendadas a ampliação da base de dados e ajustes na arquitetura para melhorar a robustez e a capacidade preditiva.

Palavras-chave: e-metanol; redes neurais artificiais; modelagem de processos; aprendizado de máquina.

Agradecimentos: Agradecimento à Pró-Reitoria de Pesquisa e Inovação (Propesqi) da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE) pela concessão da bolsa de Iniciação Científica (PIBIC).

Referências

J.-F. Portha, K. Parkhomenko, K. Kobl, A.-C. Roger, S. Arab, J.-M. Commenge e L. Falk: Kinetics of Methanol Synthesis from Carbon Dioxide Hydrogenation over Copper–Zinc Oxide Catalysts, *Ind. Eng. Chem. Res.* (56), 13133–13145, 2017.