

Modelagem da Solubilidade de CO₂ e H₂S em Água para Otimização do Processo de Water Scrubbing Aplicado à Produção de Biometano e Integração com Rotas Power-to-Liquid

Marcos Gabriel Lopes¹, Sandra Maria Sarmento¹, Allan de Almeida Albuquerque¹

¹Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Brasil

Resumo

A transição energética global tem impulsionado o desenvolvimento de tecnologias voltadas à produção de combustíveis sustentáveis e à redução de emissões de gases de efeito estufa, com destaque para o biometano e os Combustíveis Sustentáveis de Aviação (SAF). Nesse contexto, o processo de water scrubbing destaca-se como uma rota consolidada para a purificação de biogás, promovendo a remoção eficiente de gases ácidos como CO₂ e H₂S, permitindo a obtenção de biometano de alta pureza e a recuperação de carbono para aplicações de maior valor agregado. Entretanto, a modelagem da solubilidade desses gases em meio aquoso ainda apresenta limitações devido à escassez de dados experimentais em condições de baixa pressão (até 10 bar) e temperaturas entre 20 °C e 40 °C, o que restringe abordagens tradicionais e motiva a aplicação de técnicas de Data Augmentation associadas a modelos de inteligência artificial. Neste trabalho, foi desenvolvida uma abordagem integrada para a modelagem da solubilidade de CO₂ e H₂S em água aplicada à otimização do water scrubbing, combinando expansão de dados experimentais com modelos polinomiais de alta ordem (7º grau) e algoritmos de aprendizado de máquina, incluindo Random Forest e Decision Tree. Os resultados demonstraram elevada precisão preditiva, com coeficiente de determinação (R^2) igual a 1,0000 e erro absoluto médio (MAE) de $3,2 \times 10^{-6}$ para CO₂, além de RMSE da ordem de 10^{-6} para os modelos de inteligência artificial, evidenciando forte capacidade de representação do equilíbrio termodinâmico do sistema. Esses resultados são relevantes para integração com rotas Power-to-Liquid, nas quais o CO₂ biogênico pode ser convertido em gás de síntese via hidrogênio verde e posteriormente em combustíveis líquidos por síntese de Fischer-Tropsch, contribuindo para o fechamento do ciclo do carbono e a descarbonização do setor de aviação.

Palavras-chave: Biometano; Water Scrubbing; Data Augmentation; Inteligência Artificial; Power-to-Liquid.