



ÁREA: Métodos computacionais e novos temas para transformações catalíticas

Uso de Redes Neurais Artificiais para a Modelagem Cinética da Hidrogenação do CO₂ para Produção de Metanol

Diego B. Souza¹; Fabio M. Cavalcanti¹

¹ Universidade Católica de Pernambuco (Unicap), Recife-PE, 50.050-900, Brasil

*E-mail: diego.souza.j2021@gmail.com ; fabio.cavalcanti@unicap.br

Resumo - Abstract

A produção de metanol a partir da hidrogenação do CO₂ envolve as seguintes reações, conforme Portha et al. (2017):



Este estudo tem como objetivo utilizar redes neurais artificiais para a modelagem cinética da produção de metanol utilizando a linguagem de programação *Python* 3.10.12 no ambiente de notebook Google Colab 7.34.0. A metodologia empregada no desenvolvimento das redes neurais foi sistemática, seguindo as etapas de seleção de bibliotecas (*pandas* 2.2.2; *tensorflow* 2.17.0; *sklearn* 1.5.2; *matplotlib* 3.7.1; *numpy* 1.26.4; *keras* 3.4.1), preparação dos dados, definição da arquitetura da rede, treinamento e avaliação do modelo. Os dados foram coletados a partir de fontes científicas, passando por um processo de tratamento, normalização e divisão em conjuntos de treinamento e teste, utilizando a função *train_test_split* do *scikit-learn*. Foi definida uma rede *feedforward* com camadas densas, usando a *API* do *Keras*. A configuração incluiu uma camada de entrada, camadas ocultas totalmente conectadas, e uma camada de saída, com a arquitetura ajustada para garantir a otimização dos parâmetros do modelo. O treinamento foi realizado utilizando o otimizador *Adam*. A busca por hiperparâmetros foi feita com técnicas de busca em grade, e ajustes adicionais foram realizados para garantir a máxima eficiência. Os resultados indicaram que o modelo de rede neural, treinado com 90% dos dados, atingiu um coeficiente de determinação (R^2) de 0.976, evidenciando um ajuste robusto durante o treinamento. No conjunto de teste (10% dos dados), o R^2 obtido foi de 0.816, o que, embora inferior ao desempenho no treinamento, ainda sugere uma capacidade adequada de generalização. No entanto, a diferença entre os resultados de treinamento e teste aponta para a possibilidade de *overfitting*, uma situação em que o modelo se ajusta muito bem aos dados de treinamento, mas não generaliza adequadamente para novos dados. A divisão de 90/10 mostrou-se eficaz, indicando a flexibilidade do modelo em se adaptar a diferentes proporções de dados. Durante a preparação dos dados, três das 12 variáveis originais foram excluídas devido à redundância de informações, e uma linha foi removida por ser considerada *outlier*, resultando em um conjunto mais adequado para o treinamento da rede. O ajuste dos hiperparâmetros, como o número de neurônios na camada oculta (20), o tamanho do lote (32) e a taxa de aprendizado (0,01), contribuíram para melhorar o desempenho do modelo, garantindo um equilíbrio entre precisão e velocidade de treinamento. Concluiu-se que a aplicação de redes neurais na análise de dados relacionados à produção sustentável de metanol é uma abordagem eficaz, mesmo com a quantidade reduzida de dados. Com a disponibilização de mais dados para treinamento, espera-se que o modelo possa alcançar um desempenho ainda melhor, proporcionando *insights* mais precisos para a otimização do processo.

Palavras-chave: Rede Neurais Artificiais, Modelagem Cinética, Hidrogenação de CO₂.

Referências

PORTHA, Jean-François et al. Kinetics of methanol synthesis from carbon dioxide hydrogenation over copper–zinc oxide catalysts. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 56, n. 45, p. 13133-13145, 2017.