

Modelo de *Machine learning* para mapear condições de reação e eficiência catalítica na síntese de metanol a partir da hidrogenação de CO₂

Hezrom S. Nascimento¹, Fábio M. Cavalcanti¹, Celmy M.B.M. Barbosa¹, Jose G. A. Pacheco^{1,*}

¹ Departamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Instituto de Pesquisa em Petróleo e Energia (iLITPEG), Laboratório de Refino e Tecnologias Limpas (LabRefino/Lateclim), Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE, 50740-540, Brasil. *jose.pacheco@ufpe.br

Resumo/Abstract

RESUMO - A reação de conversão de CO₂ a metanol tem ganhado crescente relevância considerando as atuais demandas por mitigação de gases de efeito estufa, impulsionadas pela crise climática. Uma etapa importante no design de catalisadores para essa reação é a revisão bibliográfica, visando identificar as principais tendências e avanços reportados na literatura. Diante da grande quantidade dos dados disponíveis, destaca-se a aplicação de redes neurais artificiais como ferramenta de *machine learning* promissora para a modelagem e análise de múltiplas variáveis interrelacionadas. Neste trabalho, foi desenvolvida uma rede neural do tipo *feedforward*, composta por 3 camadas, utilizando-se o pacote *TensorFlow.Keras* do *Python*. A base de dados foi construída a partir da análise de 65 artigos de alta relevância, totalizando 251 dados experimentais. A arquitetura da rede contou com 62 neurônios na camada de entrada, 60 neurônios na camada oculta e 2 neurônios na camada de saída. O modelo apresentou erro quadrado médio (MSE) de 0,002 e um coeficiente de determinação (R²) de 0,96 para o conjunto de treinamento, indicando boa capacidade de aprendizado. Para o conjunto de teste, os valores de MSE e R² foram 0,023 e 0,61. Os resultados são promissores e indicam que a rede foi capaz de extrair padrões relevantes nos dados, o que poderá propiciar informações relevantes em futuras análises de sensibilidade do modelo.

Palavras-chave: rede neural artificial, conversão CO₂, metanol, aprendizado de máquina

ABSTRACT - The conversion of CO₂ to methanol reaction has been gaining increasing relevance in light of the current demands for greenhouse gas mitigation, driven by the climate crisis. An important step in the design of catalysts for this reaction is the literature review, aimed at identifying the main trends and advances reported in the scientific literature. Given the large amount of available data, the application of artificial neural networks stands out as a promising machine learning tool for modeling and analyzing multiple interrelated variables. In this work, a three-layer feedforward neural network was developed using the Python TensorFlow.Keras package. The database was built based on the analysis of 65 highly relevant papers, totaling 251 experimental data points. The network architecture consisted of 62 neurons in the input layer, 60 neurons in the hidden layer, and 2 neurons in the output layer. The model achieved a mean squared error (MSE) of 0.002 and a coefficient of determination (R²) of 0.96 for the training set, indicating good learning capacity. For the test set, the MSE and R² were 0.023 and 0.61, respectively. The results are promising and indicate that the network was able to extract relevant patterns from the data, which could provide valuable insights in future sensitivity analyses of the model.

Keywords: artificial neural network, CO₂ conversion, methanol, machine learning

Introdução

A crise climática impõe uma mudança no modo de produção de energia com um foco na redução de gases de efeito estufa, como o gás carbônico (CO₂). Como consequência, tem havido o desenvolvimento de tecnologias de captura e utilização deste poluente, sendo a conversão de CO₂ em metanol uma alternativa (1).

A reação de hidrogenação do CO₂ a metanol é desafiadora devido à alta estabilidade desse gás, o que demanda temperatura e pressão moderadas e a presença de um catalisador que precisa ser seletivo à produção de metanol (2).

No projeto de um novo catalisador, uma etapa essencial consiste na compreensão das tentativas previamente realizadas e documentadas na literatura. As redes neurais artificiais (RNAs), uma classe de modelos de *machine learning*, têm surgido como uma alternativa promissora para o tratamento de grandes volumes de dados, possibilitando a extração de conhecimento estatístico a partir de relações não-lineares complexas. (3).

Nesse trabalho, objetivou-se construir um modelo a partir da revisão bibliográfica de trabalhos relevantes relacionados à catálise da reação de conversão de CO₂ em metanol, utilizando uma rede neural artificial.

Experimental

Seleção de dados

Os dados foram adquiridos de 65 artigos com alta relevância em termos de número de citações, obtendo-se 251 pontos experimentais a partir de tabelas e gráficos fornecidos por esses estudos. Na pesquisa desses artigos, foram utilizadas as palavras-chave: Conversion CO₂ +methanol+catalyst. Como variáveis de entrada foram consideradas condições de reação, como temperatura e pressão, algumas condições de preparo ou caracterização dos catalisadores, como temperatura de calcinação e área superficial específica, e por fim, também foi considerada a composição do catalisador em termos de fase ativa (Cu, Pt, In₂O₃...), suporte (Al₂O₃, SiO₂, CeO₂...) e promotores (Y, Zn, Mg...).

Rede neural artificial

A rede neural artificial utilizada foi do tipo feedforward, composta de três camadas neurais, sendo a primeira camada constituída de 62 variáveis de entrada, a segunda de 60 neurônios (camada oculta), e a última de 2 variáveis de saída (Conversão de CO₂ e seletividade de Metanol), como mostrado na Figura 1. Para o treinamento da rede, foi utilizado o pacote *TensorFlow*. *Keras* incluso no *Python*. Os dados foram divididos em dois grupos, em que 80% deles foram destinados ao treinamento e 20% para o teste de validação. Na camada oculta e na de saída, foram utilizadas as funções de ativação ReLU e sigmóide, respectivamente. A função de perda utilizada foi o erro quadrado médio (MSE) e como otimizador o algoritmo Adam.

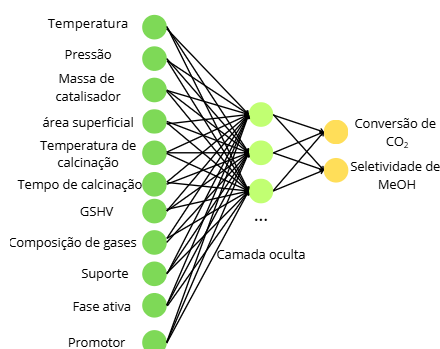


Figura 1. Diagrama da rede neural construída neste estudo

Resultados e Discussão

O treinamento da rede resultou em erro quadrado médio (MSE) de 0,002, enquanto o valor obtido para o conjunto de teste foi de 0,023. Ambos os valores permaneceram praticamente constante após 200 épocas, o que indica que a rede foi capaz de aprender os padrões presentes nos dados. Os valores do coeficiente de determinação (R^2) para os grupos de treinamento e teste

foram, respectivamente, de 0,96 e 0,61, como mostrado nos gráficos de paridade entre os valores preditos e reais nas Figuras 1 e 2.

O valor de R^2 para o grupo de treino é elevado, evidenciando uma relação consistente entre as variáveis de entrada e saída. O grupo de teste apresentou um fator de correlação inferior, mas ainda mostra uma razoável tendência nos dados. Essa redução na capacidade de predição no grupo teste pode estar associada a erros experimentais ou a variabilidades não capturadas nos dados extraídos dos artigos analisados. Entretanto, os resultados preliminares são promissores e indicam que a próxima etapa de análise de sensibilidade poderá revelar correlações relevantes e fornecer conhecimento estatístico sobre o sistema investigado.

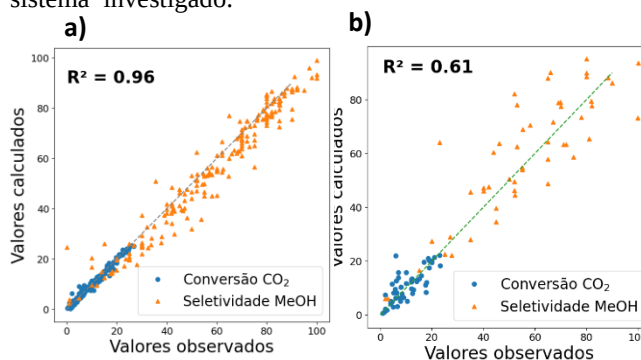


Figura 2. Gráfico de paridade entre os valores observados e calculados pelo modelo no conjunto de treinamento(a) e de teste (b).

Conclusões

Foi possível construir a rede neural artificial para o conjunto de artigos selecionados nesse trabalho, com a construção de um modelo com baixo erro quadrado médio e coeficientes de correlação R^2 razoáveis, o que indica que a próxima etapa de análise de sensibilidade poderá trazer importantes correlações. Em uma análise exploratória dos dados, verificou-se que os melhores catalisadores do banco de dados têm Cu como fase ativa, combinado com Zn. Os melhores suportes foram Al₂O₃, ZrO₂, CeO₂ e WO₃ e os promotores foram Pd, Mn, Mg e La.

Agradecimentos

À Fundação de Amparo à Ciência e Tecnologia do Estado de Pernambuco – FACEPE pelo apoio financeiro (Processo nº APQ-2274-3.14/24).

Referências

1. S. Sajani *et al*, *Processes*. **2025**, 13,304, 1-28.
2. A. Saravanan *et al*, *Chemical Engineering Science*, **2021**, 236,1-16.
3. F.M. Cavalcanti *et al*. *Journal of Environmental Management*. **2019**, 237, 595-594.