

Redes Neurais artificiais aplicadas a processos químicos

Otimização preditiva de adsorventes para a captura de CO₂

Um estudo de modelagem com Multilayer Perceptron (MLP) aplicado a sílicas mesoporosas do tipo SBA-15

Discente: Cauã Lourenço Valotto

Docente: Dr. Tiago Dias Martins

Diadema - 2025

Introdução

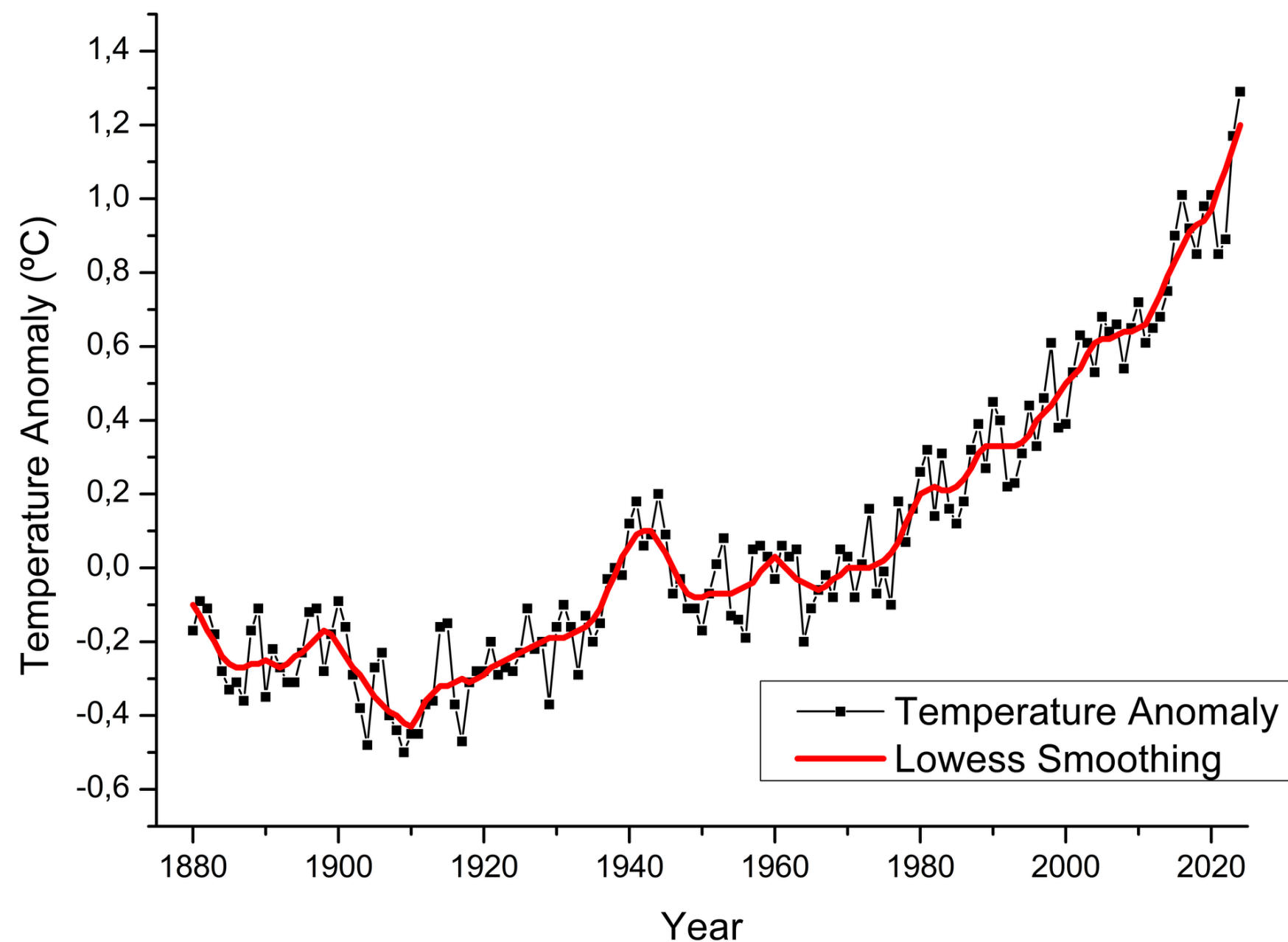


VS



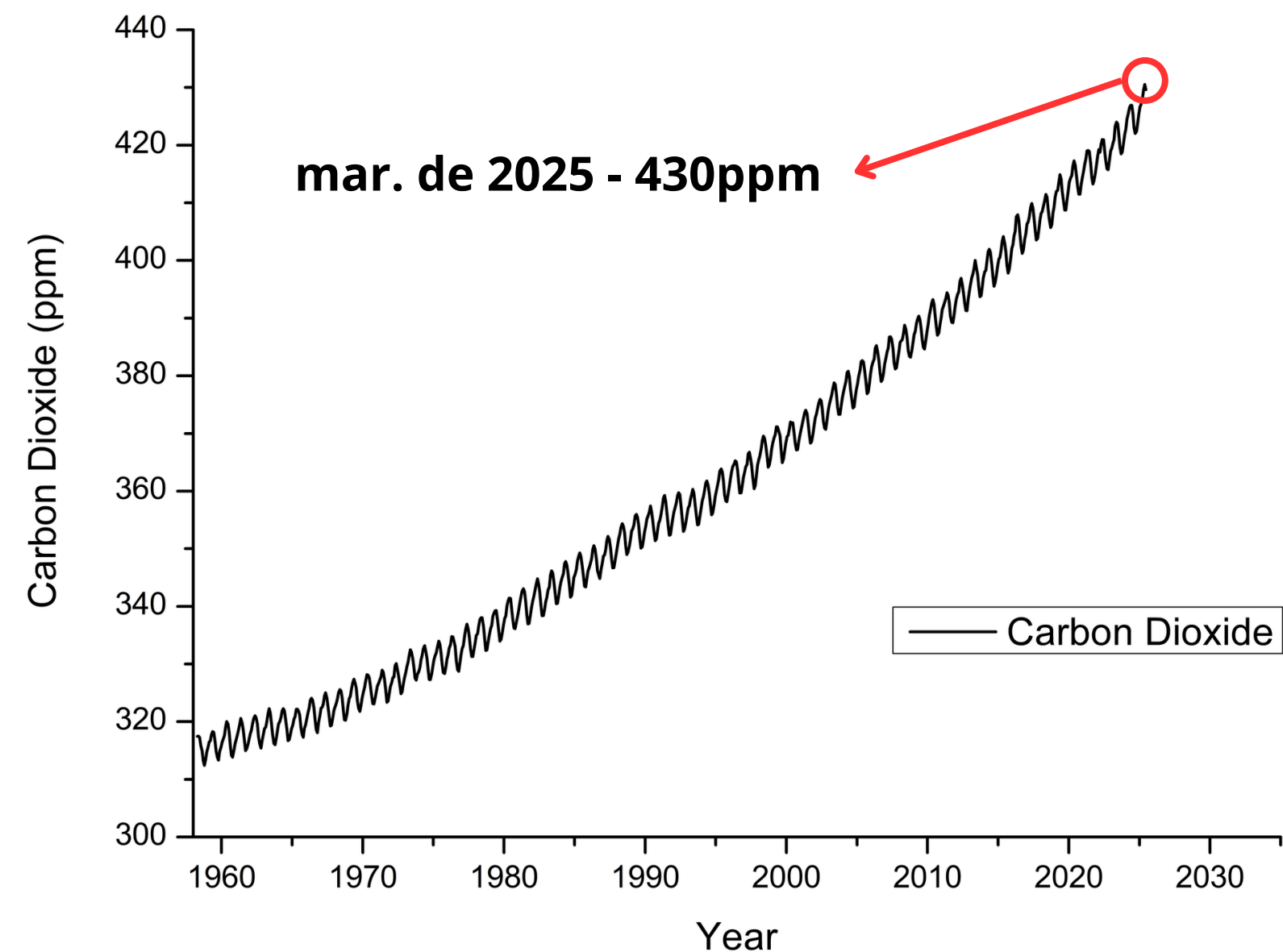
Introdução

Variação da temperatura da superfície global



Fonte: Adaptado de NASA. Global Temperature. [S. l.], [2024?].
Disponível em: <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide/>.
Acesso em: 24 jul. 2025. Acesso em: 24 jul. 2025.

Concentração de CO₂ na atmosfera



Fonte: Adaptado de NASA. Carbon Dioxide. [S. l.], [2024]. Disponível em: <https://climate.nasa.gov/vital-signs/carbon-dioxide/>. Acesso em: 24 jul. 2025.

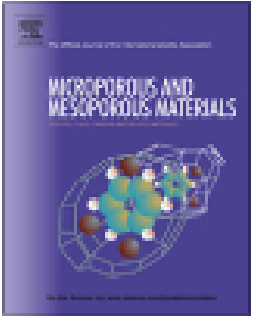
Introdução



Contents lists available at SciVerse ScienceDirect

Microporous and Mesoporous Materials

journal homepage: www.elsevier.com/locate/micromeso

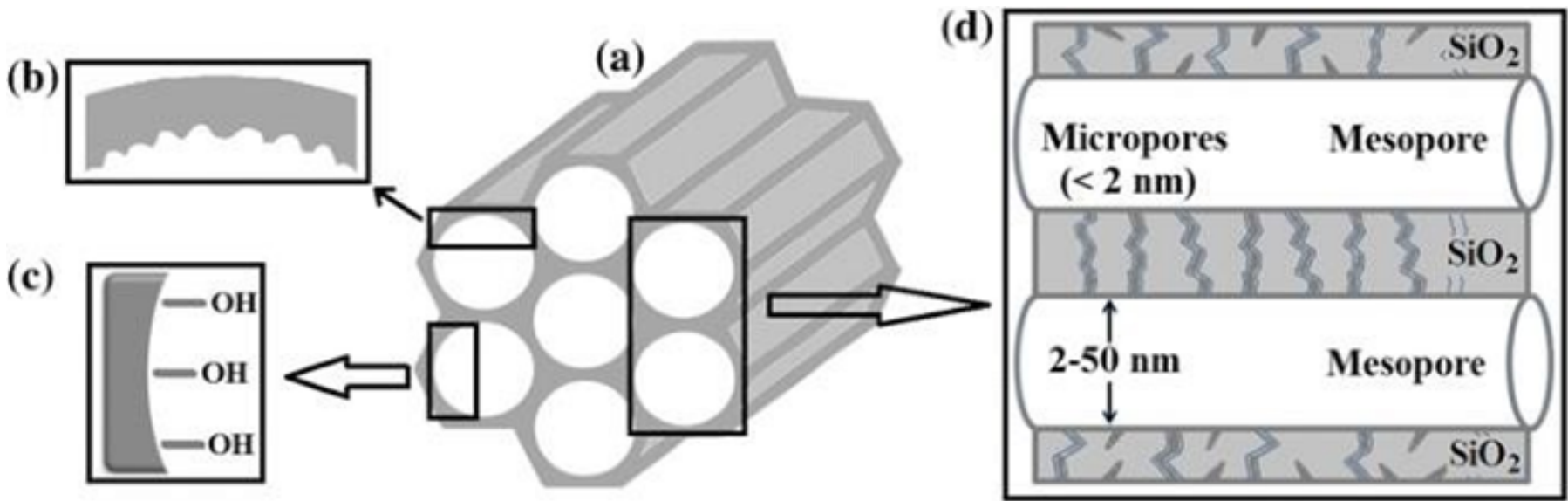


MgO-modified mesoporous silicas impregnated by potassium carbonate for carbon dioxide adsorption

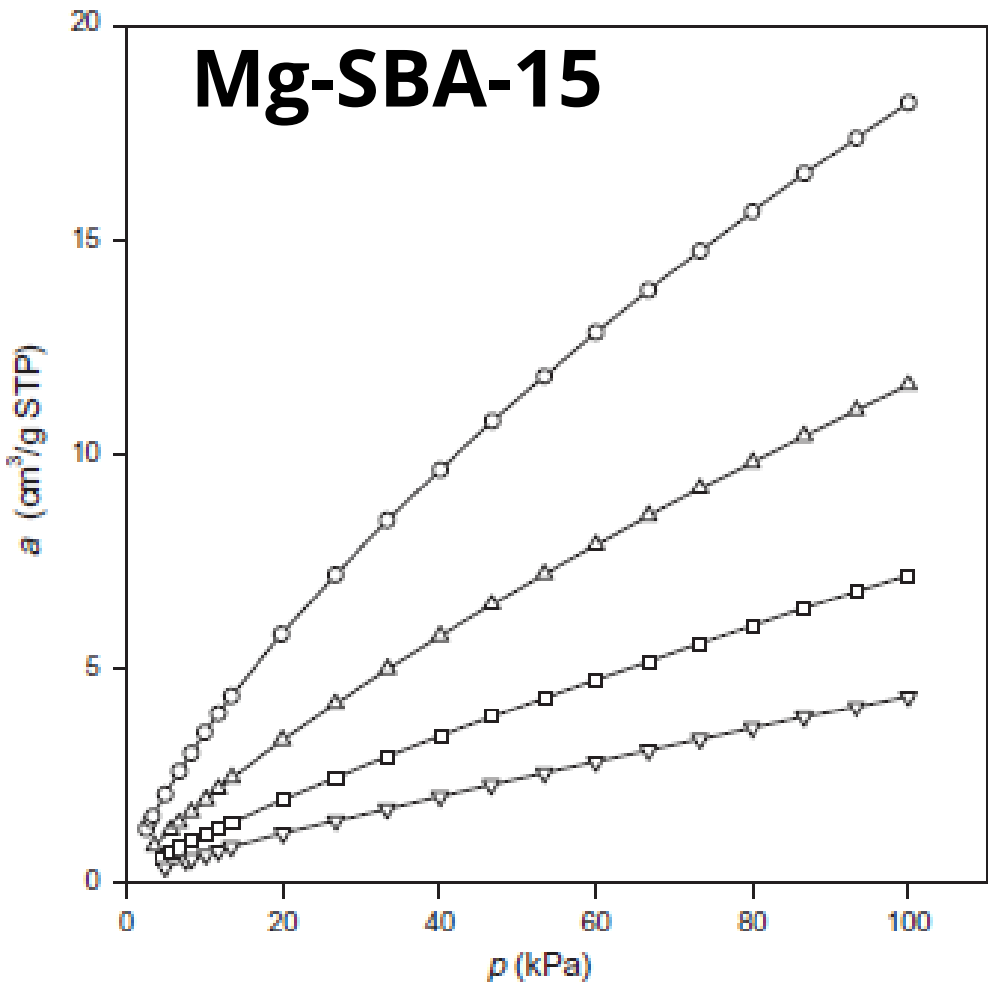
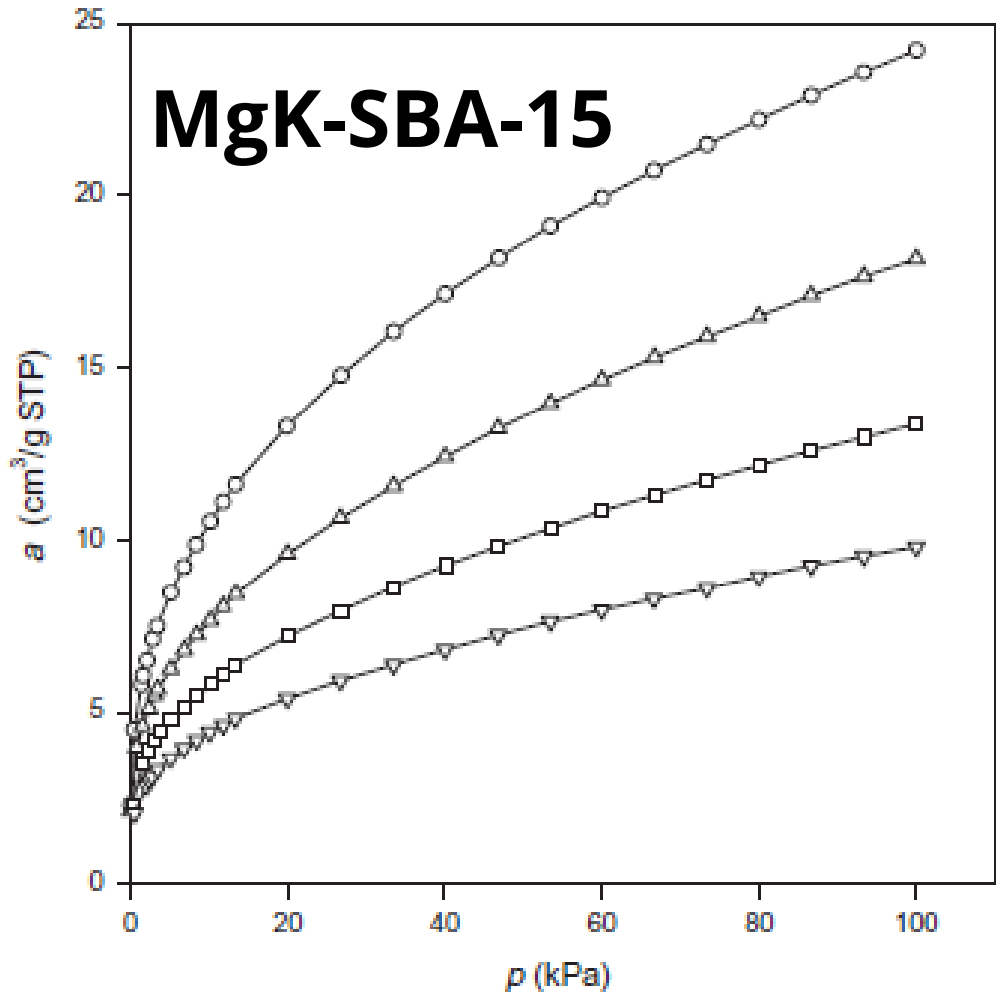
Arnošt Zukal, Jakub Pastva, Jiří Čejka *

J. Heyrovský Institute of Physical Chemistry, Academy of Sciences of the Czech Republic, v.v.i., Dolejškova 3, 18223 Prague 8, Czech Republic

Fonte: ZUKAL, Arnošt; PASTVA, Jakub; ČEJKA, Jiří. 2013.



Fonte: OJEDA-LÓPEZ et al. (2015).



Fonte: ZUKAL, Arnošt; PASTVA, Jakub; ČEJKA, Jiří. 2013.

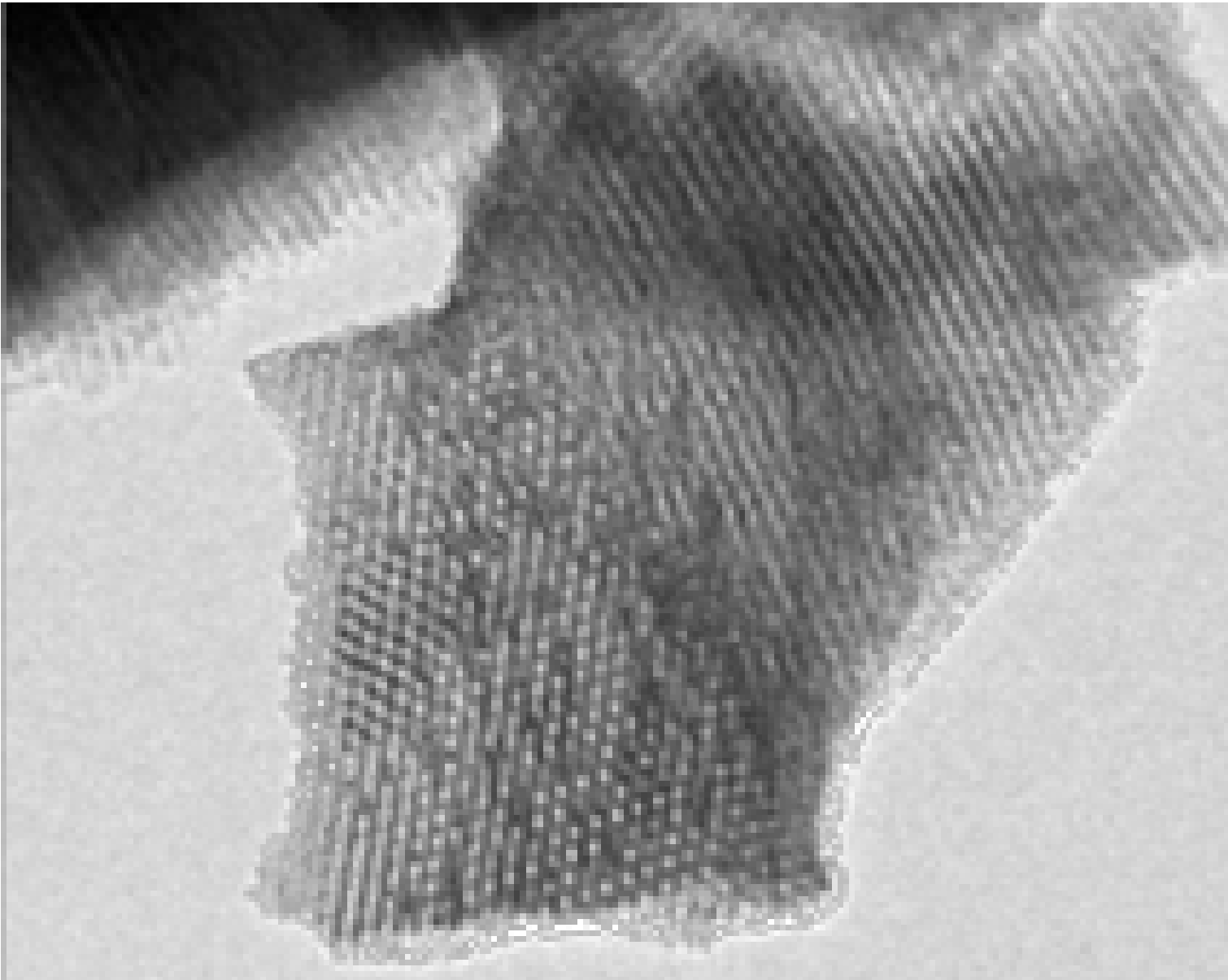
Introdução

Propriedades fisico-quimicas dos adsorventes de CO2					
Sample code	MgO (mg/g)	K2CO3(mg/g)	Sbet (m2/g)	Vme (cm3/g)	Dme(nm)
SBA-15	0	0	660	1,03	10,2
Mg-SBA-15	38	0	464	0,65	9,2
Mg/K-SBA-15	38	43	257	0,49	8,7

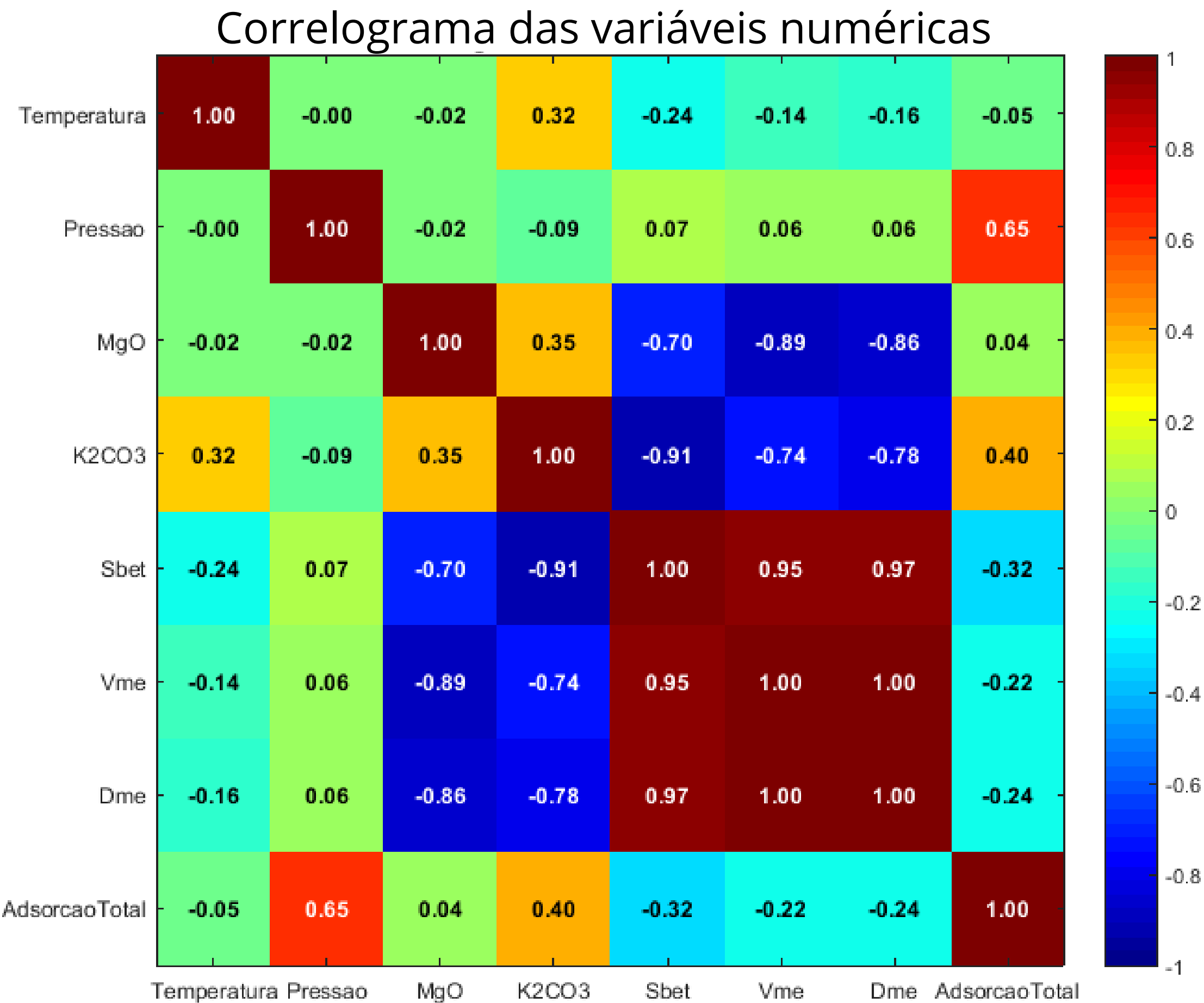
Adsorção de CO2 - Isotermas				
Material	Adсорvato	Temperatura	Finalidade	
Mg-SBA-15	Carbon Dioxide	213	Treino	
Mg-SBA-15	Carbon Dioxide	273		
MgK-SBA-15	Carbon Dioxide	273		
MgK-SBA-15	Carbon Dioxide	293		
SBA-15	Carbon Dioxide	293		
Mg-SBA-15	Carbon Dioxide	293		
Mg-SBA-15	Carbon Dioxide	293	Simulação	
MgK-SBA-15	Carbon Dioxide	293	Treino	
MgK-SBA-15	Carbon Dioxide	313	Simulação	
Mg-SBA-15	Carbon Dioxide	333	Treino	
MgK-SBA-15	Carbon Dioxide	333	Treino	

Correlograma

met SBA-15

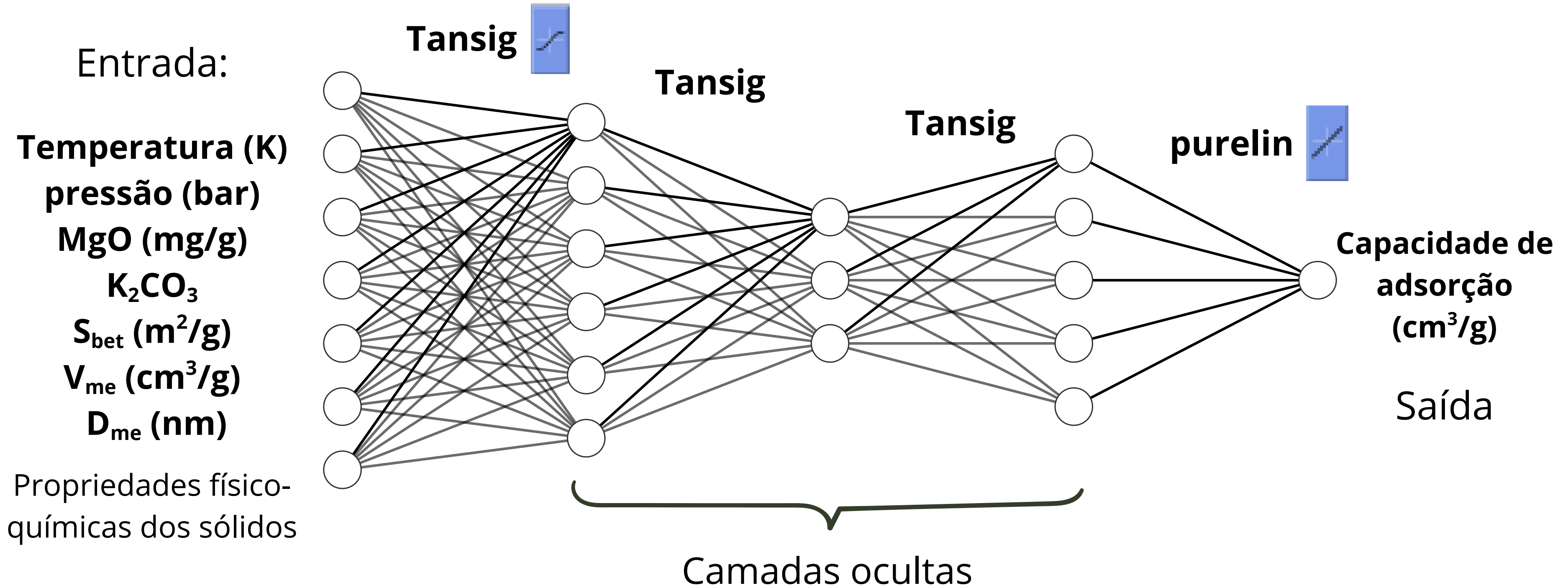


Fonte: VIRGINIO, S. A. (2020)



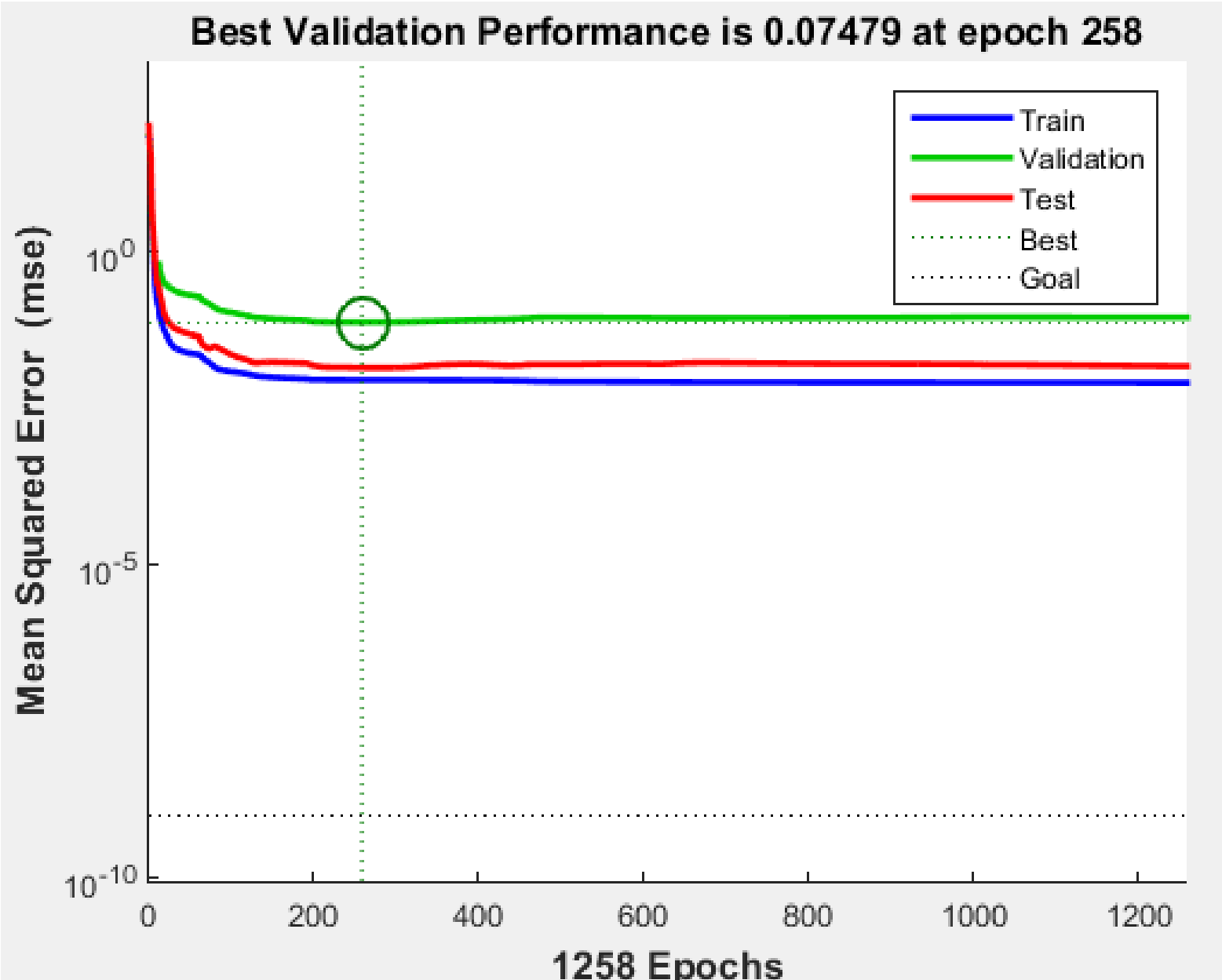
Fonte: Do autor, 2025.

Modelo



Resultados: 6-3-5-1

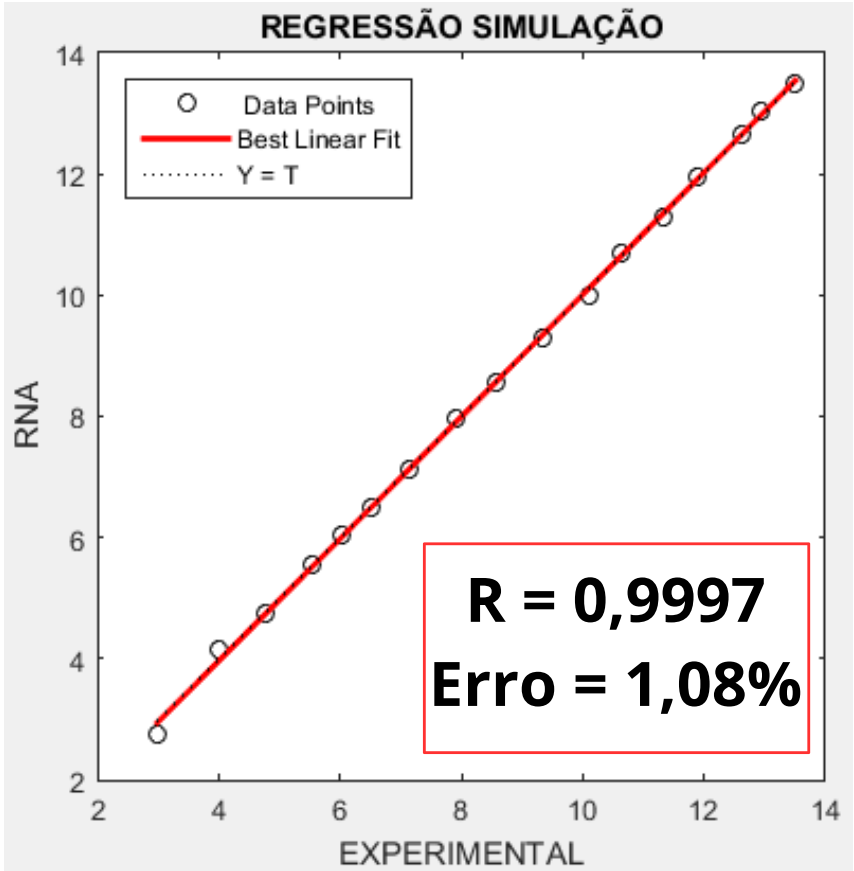
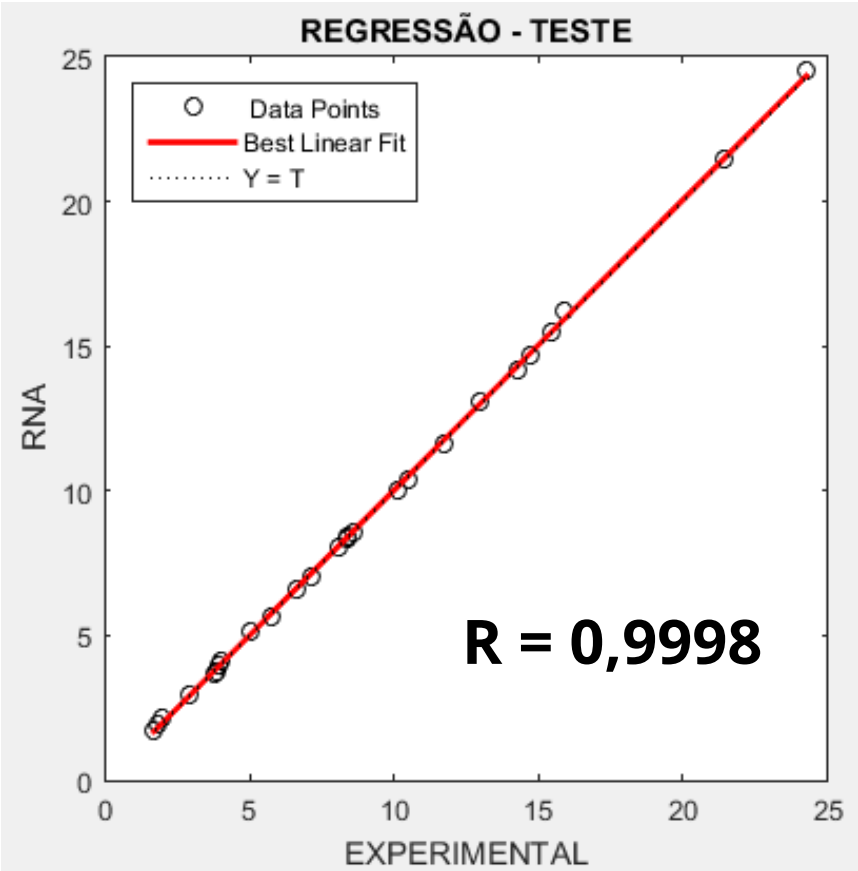
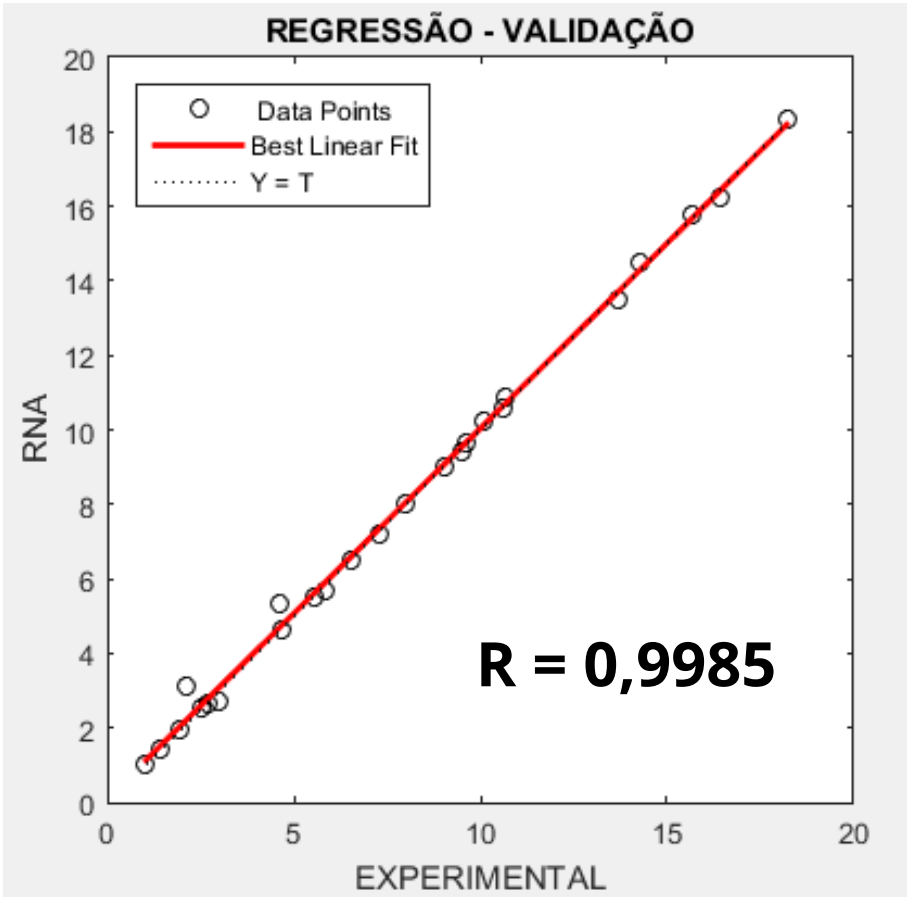
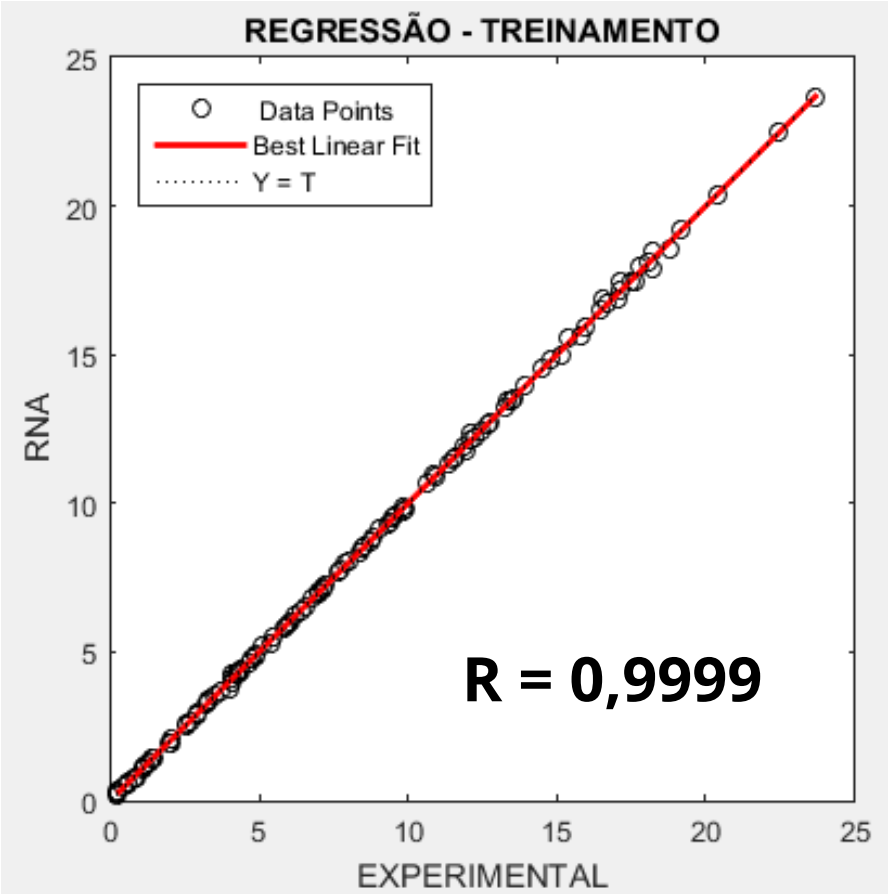
Mg-SBA-15-293K



Métricas do modelo

	MAPE(%)	MSE	Correlação (R)
Teste	1,73	0,0141	0,9998
Treino	1,37	0,0089	0,9999
Validação	3,64	0,0748	0,9985

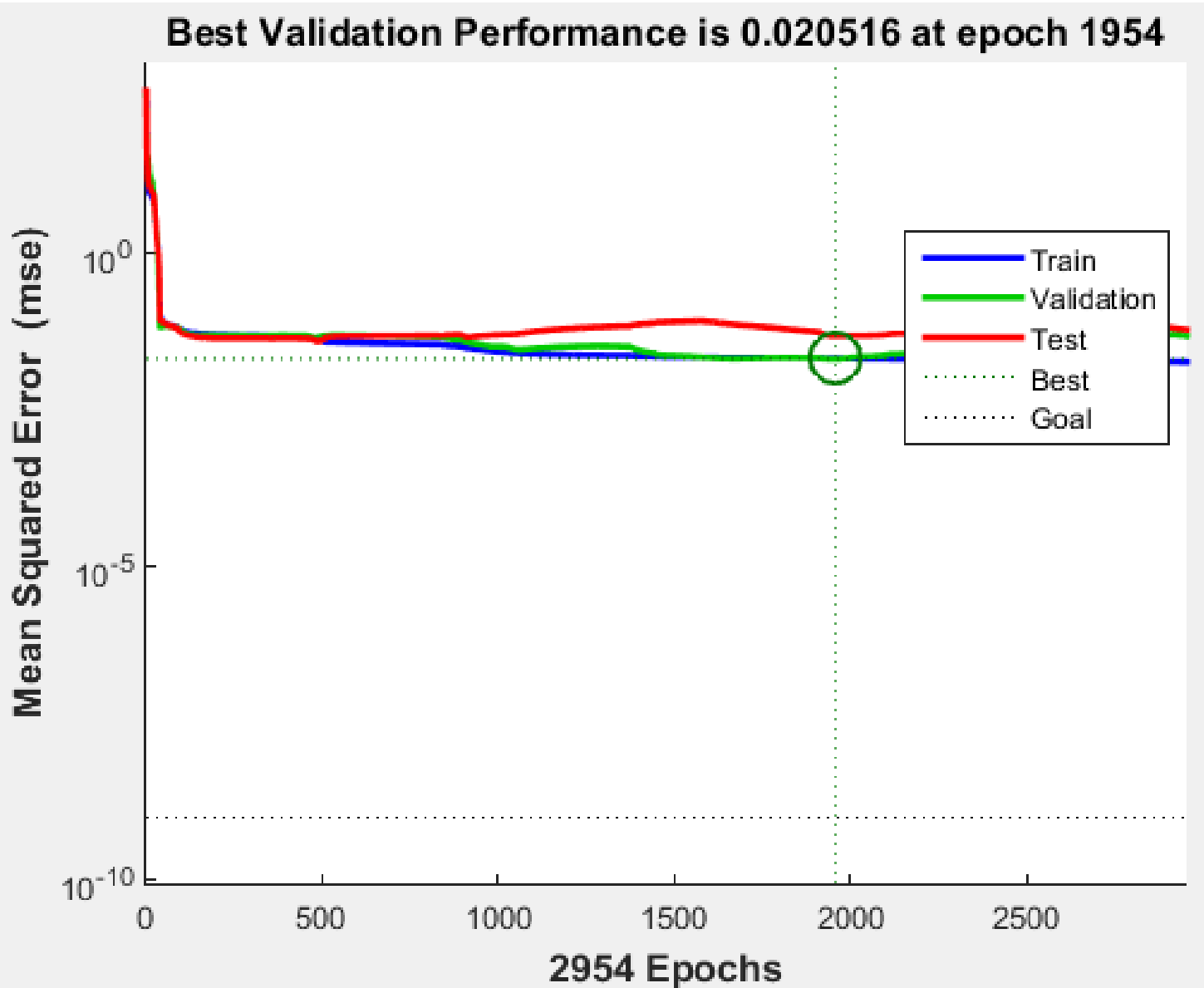
Fonte: Do autor, 2025.



Fonte: Do autor, 2025.

Resultados: 6-3-5-1

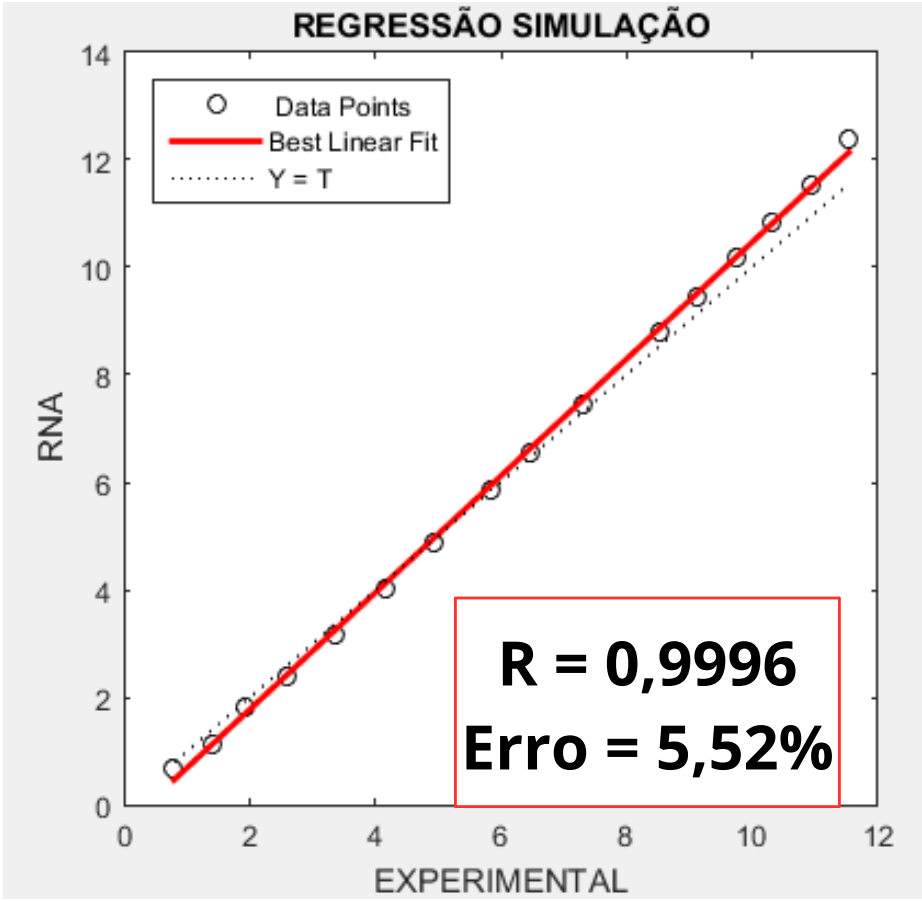
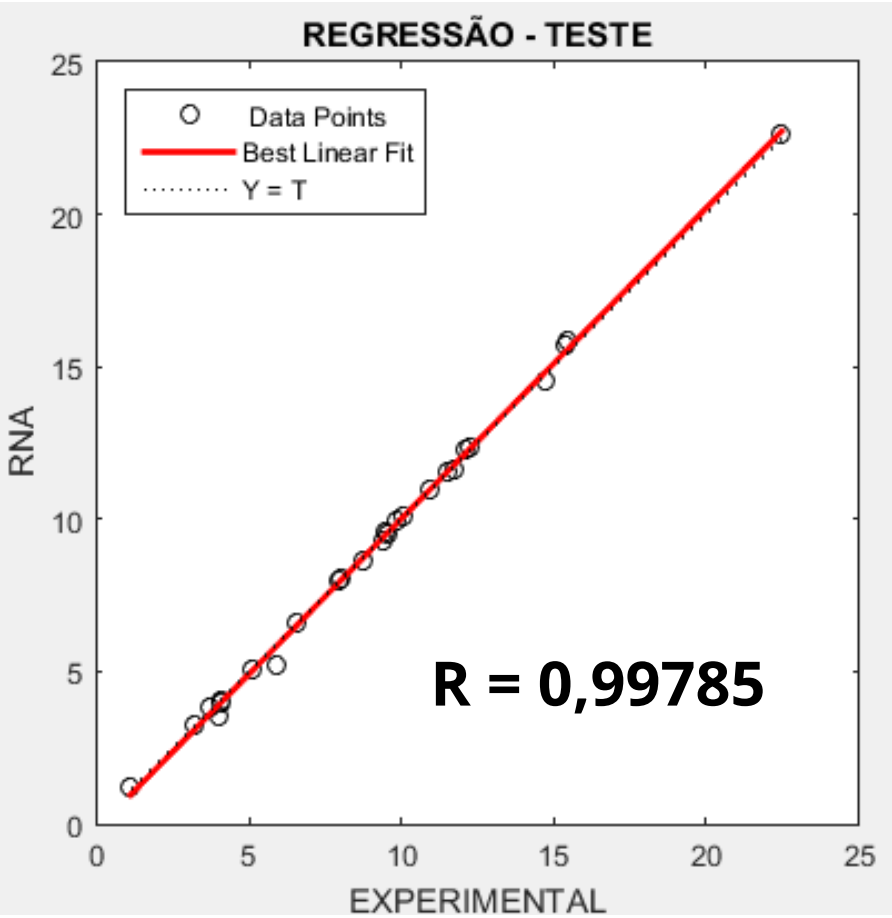
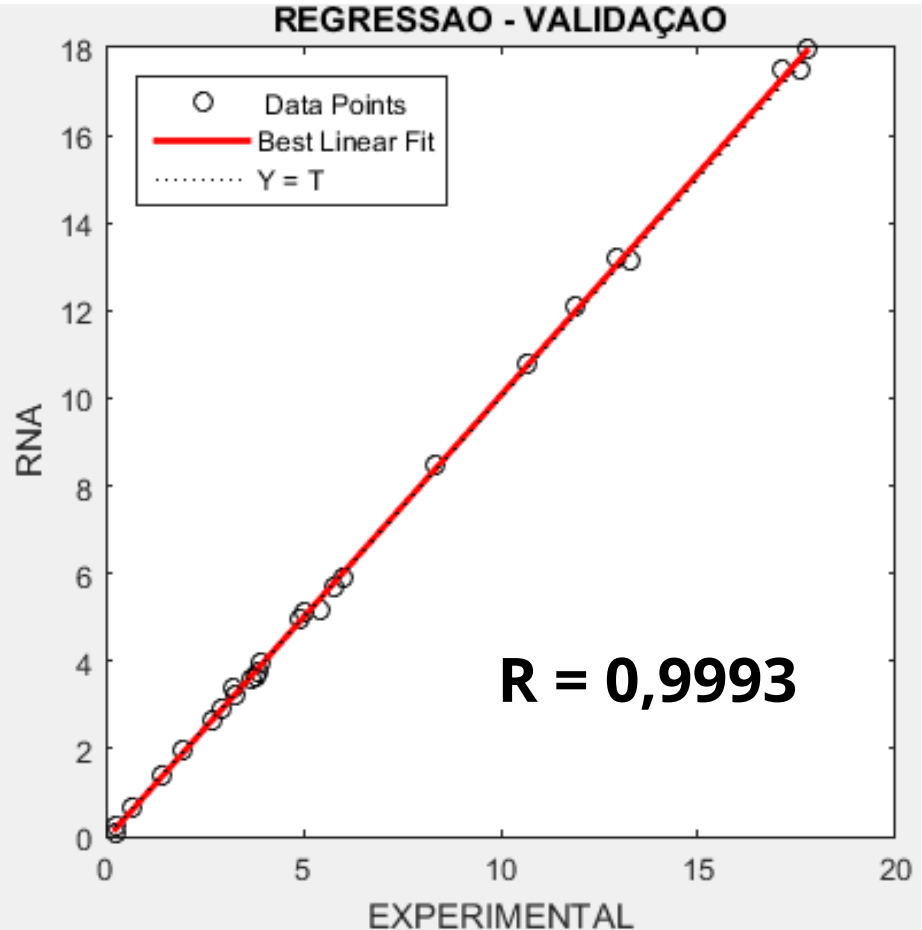
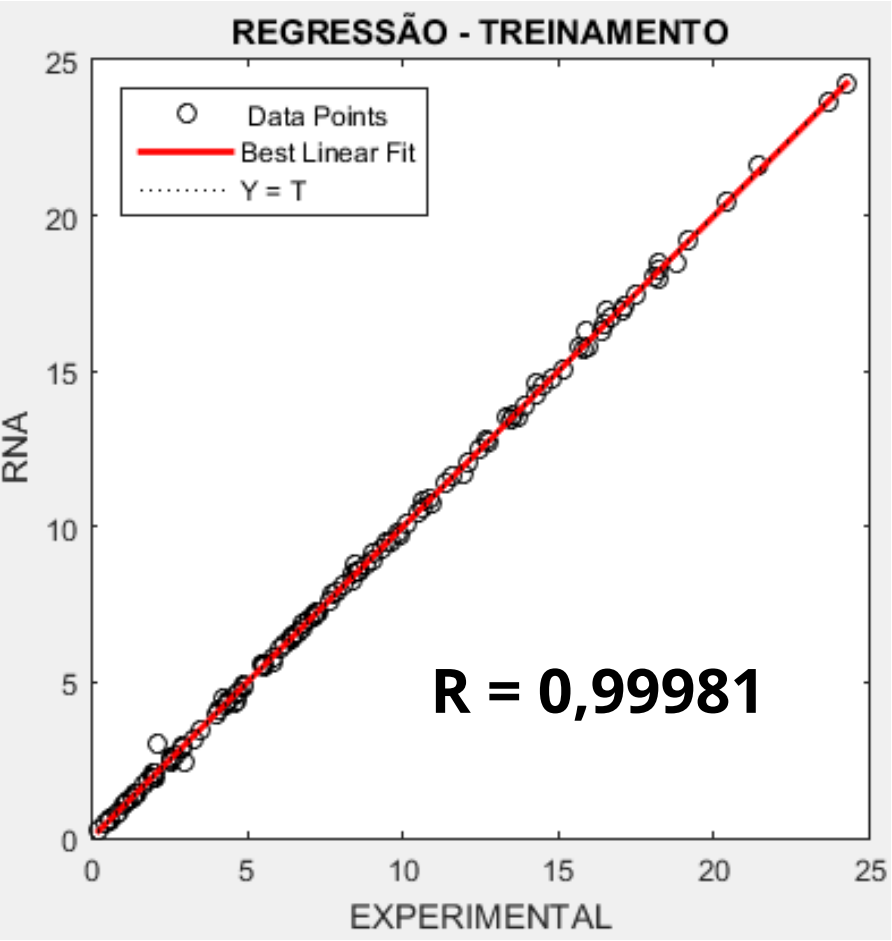
MgK-SBA-15 -313K



Métricas do modelo

	MAPE(%)	MSE	Correlação (R)
Teste	2,23	0,00478	0,9991
Treino	1,53	0,0212	0,9997
Validação	4,74	0,0205	0,9997

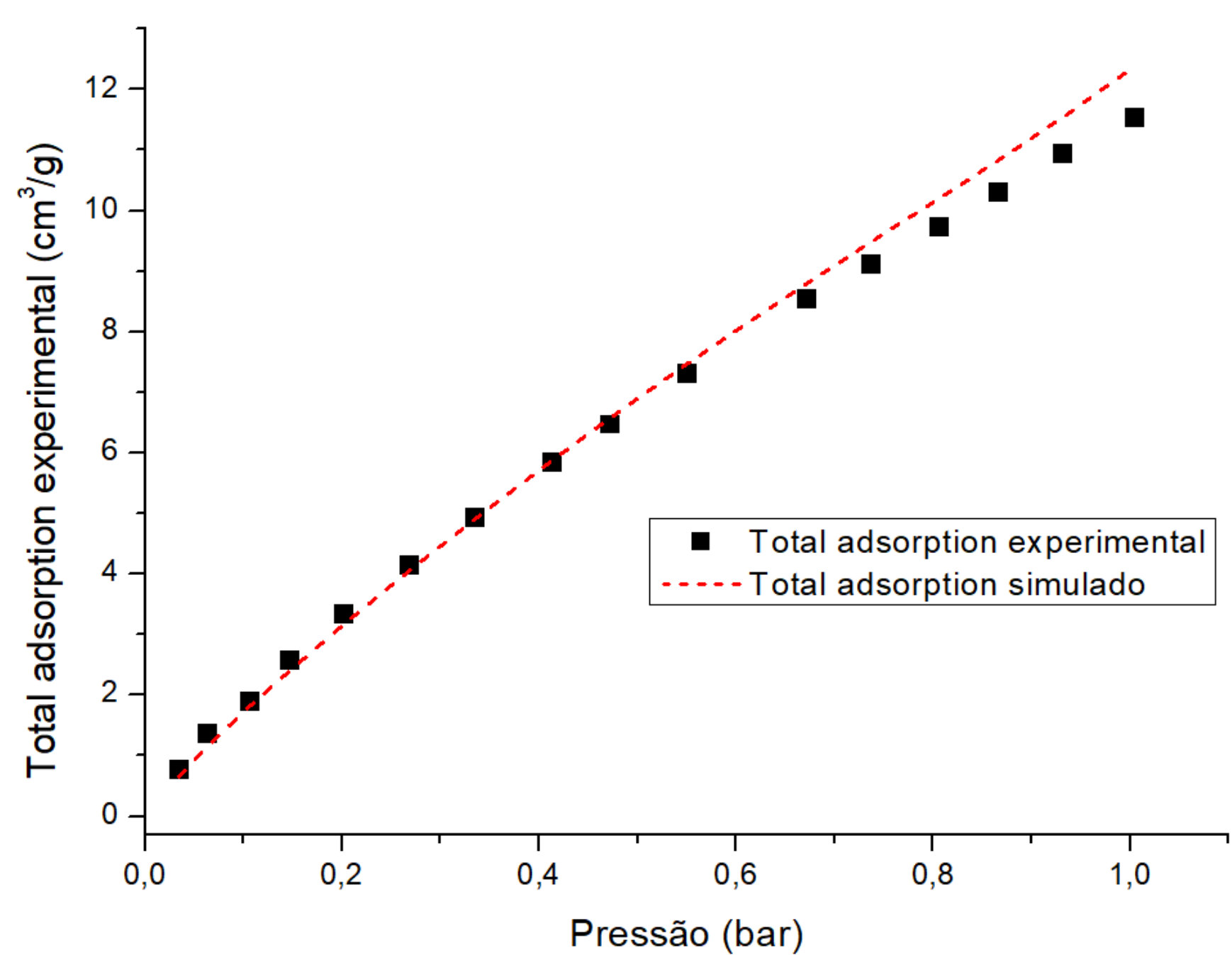
Fonte: Do autor, 2025.



Fonte: Do autor, 2025.

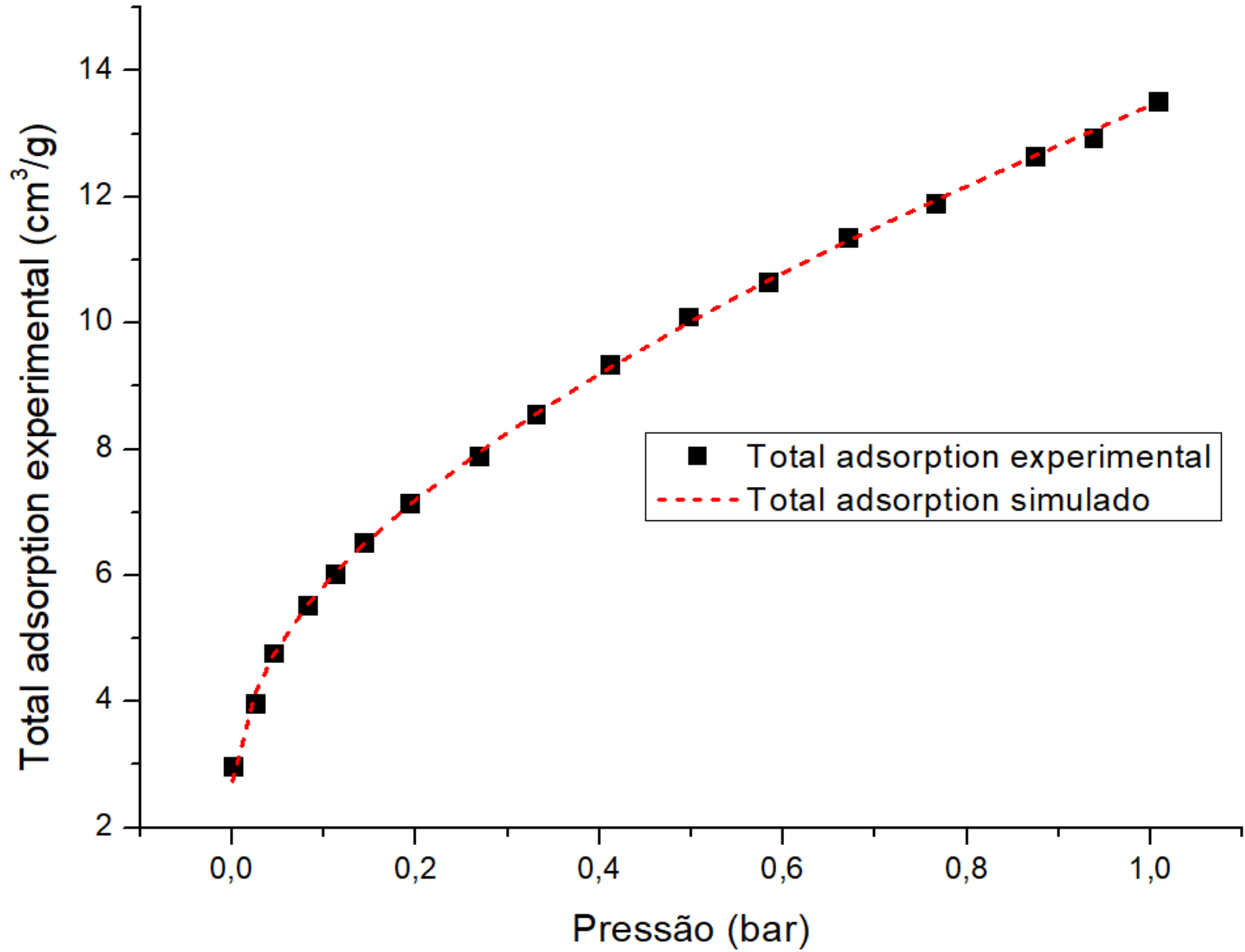
Resultados: Predição sólido

Simulação vs Experimental (Mg-SBA-15) - 293K



Fonte: Do autor, 2025.

Simulação vs Experimental (MgK-SBA-15) - 313K



Fonte: Do autor, 2025.

Conclusão



O modelo MLP foi desenvolvido com êxito para prever a adsorção de CO₂ em sílicas SBA-15.



O modelo demonstrou altíssima precisão, validada com erros de simulação (MAPE) de apenas 1.08% e 5.52% para isotermas não vistas no treinamento.



Capacidade de Generalização

A validação com dados de simulação provou que o modelo aprendeu as relações físico-químicas do processo, prevendo isotermas com alta fidelidade.



Ferramenta para Inovação

O modelo pode ser utilizado como uma ferramenta de triagem virtual, acelerando a descoberta de novos materiais e otimizando a pesquisa experimental.

Trabalhos Futuros

Expandir o dataset para incluir outras famílias de sílicas (SBA-16, MCM-48) e aplicar algoritmos de otimização sobre o modelo para encontrar a composição ideal do material de forma automática.

Referências

ZUKAL, Arnošt; PASTVA, Jakub; ČEJKA, Jiří. MgO-modified mesoporous silicas impregnated by potassium carbonate for carbon dioxide adsorption. *Microporous and Mesoporous Materials*, [S. l.], v. 167, p. 44–50, 2013. Disponível em: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S1387181112003561>. Acesso em: 26 jul. 2025.

VIRGINIO, Sueli de Andrade. Sílica do tipo SBA-15 sintetizada por radiação gama e sua aplicação em compósitos de resina epóxi. 2020. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear – Aplicações) – Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2020.

OJEDA-LÓPEZ, Reyna et al. SBA-15 materials: calcination temperature influence on textural properties and total silanol ratio. [S. l.]: Springer Science+Business Media New York, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s10934-015-9942-z>. Acesso em: 26 jul. 2025.