

MODELAGEM DE UMA REDE NEURAL ARTIFICIAL PARA A PREVISÃO DA PURIFICAÇÃO DE HIDROGÊNIO VIA ADSORÇÃO POR VARIAÇÃO DE PRESSÃO

Rodrigo Norio Ito (CNPq /UEM), Diego Rafael Mágero Elihimas (Coorientador),
Caliane Bastos Borba Costa (Orientadora). E-mail: cbbcosta@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia (CTC), Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Engenharia Química / Processos Industriais de Engenharia Química.

Palavras-chave: Purificação de hidrogênio; Metamodelos; Rede neural artificial.

RESUMO

Este trabalho investigou a purificação de hidrogênio via adsorção por variação de pressão (PSA) para a obtenção de uma rede neural artificial, modelada a partir dos dados provenientes do simulador Aspen Adsorption®. O processo avaliou a purificação de uma corrente oriunda da reforma do biogás, com composição molar de 0,3% CO, 30,4% CO₂, 61,5% H₂ e 7,8% CH₄. A rede neural, treinada em linguagem Python, obteve um coeficiente de correlação de 0,997 e 0,980 para a pureza e recuperação respectivamente, indicando elevada capacidade preditiva do modelo substituto desenvolvido e a possibilidade de utilização em estudo de otimização para a determinação das variáveis ótimas de operação.

INTRODUÇÃO

Diante da crescente demanda energética e dos impactos ambientais causados pelos combustíveis fósseis, o hidrogênio surge como uma alternativa promissora devido a sua combustão limpa, gerando apenas água e calor. No entanto, apenas 1% da produção mundial do hidrogênio é considerada verde, sendo a maior parte ainda derivada de fontes fósseis (IEA, 2024).

Para atender às exigências de pureza em aplicações industriais, como produção de amônia, metanol e uso em células a combustível, a purificação do hidrogênio é essencial. Entre as tecnologias disponíveis, a adsorção por variação de pressão (*Pressure Swing Adsorption* - PSA) se destaca pela eficiência, simplicidade e capacidade de alcançar purezas acima de 99,9% (Du *et al.*, 2021).

Por outro lado, a utilização de métodos baseados em inteligência artificial, e por sua vez, aprendizado de máquina, para a representação de processos químicos apresentam grande potencial, pois permitem o desenvolvimento de modelos computacionalmente acessíveis e práticos (Tapeh e Naser, 2023).

Desse modo, neste estudo foi proposta a modelagem de uma rede neural artificial para representar o desempenho de um sistema PSA, visando reduzir o custo

computacional e viabilizar sua aplicação em futuras etapas de otimização de processos.

MATERIAIS E MÉTODOS

A simulação do processo de purificação de hidrogênio foi realizada no Aspen Adsorption®, avaliando-se a eficiência por meio da pureza e recuperação do hidrogênio. A alimentação, proveniente da reforma do biogás do estudo realizado por Elihimas *et al* (2024), apresentou composição molar de 0,3% CO, 30,4% CO₂, 61,5% H₂ e 7,8% CH₄. A configuração do processo inclui duas colunas de adsorção operando alternadamente, como apresentado na Figura 1. O ciclo operacional compreende as etapas de adsorção (200 s), depressurização (15 s), dessorção (200 s) e pressurização (15 s).

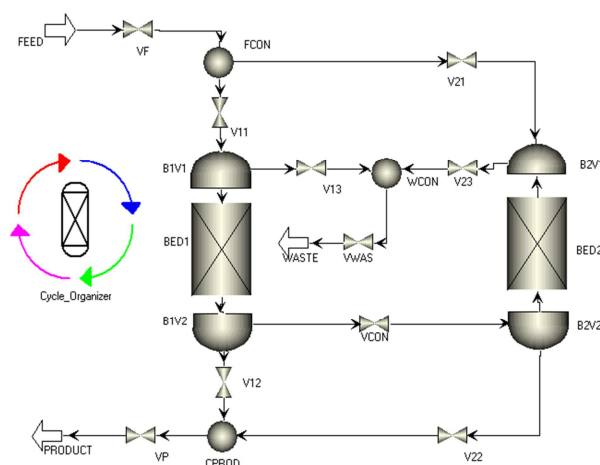


Figura 1 – Configuração do ciclo operacional.

O modelo matemático e a configuração das colunas foram descritos por Xiao *et al.* (2016). Desse modo, a purificação do hidrogênio foi realizada em um leito de 1 m de comprimento e 0,037 m de diâmetro interno, contendo carvão ativado PCB (Calgon Co.) em partículas esféricas de raio $1,5 \times 10^{-3}$ m e densidade de 850 kg/m³. Além disso, o comportamento dos gases foi descrito pelo modelo de Peng–Robinson; a adsorção, pela isoterma estendida de Langmuir; a cinética, pelo modelo de Força Motriz Linear; e o escoamento isotérmico, pela Equação de Ergun.

A rede neural de propagação direta (*feedforward*) foi desenvolvida em linguagem Python, utilizando a biblioteca Scikit-learn com 70% do banco de dados para treinamento e 30% para teste, possuindo cinco camadas: entrada (pressão, tempo de adsorção e dessorção e vazão de produto), três camadas internas ocultas e saída (pureza e recuperação). A quantidade de neurônios nas camadas internas, a taxa de aprendizado inicial, a função de ativação e o *solver* foram otimizados com a biblioteca Optuna a partir da média aritmética dos coeficientes de correlação da pureza e recuperação. O banco de dados foi obtido variando individualmente a

pressão de adsorção (2–20 bar), a pressão de dessorção (1–9 bar), a vazão de produto ($8,79 \times 10^{-4}$ – $264,63 \times 10^{-4}$ mol/s) e o tempo de adsorção e dessorção (60–400 s), resultando em 262 amostras.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

A rede neural foi treinada com base nos dados obtidos a partir das análises de sensibilidade mencionadas. Obteve-se um coeficiente de correlação superior a 0,980 tanto para os dados de teste, quanto para os de treino, como apontado nas Figuras 2 e 3.

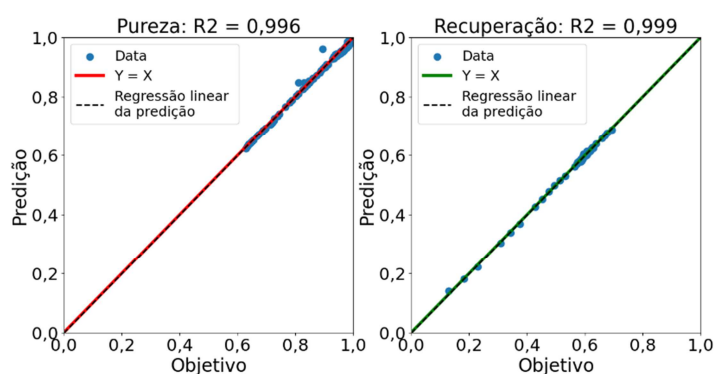


Figura 2 – Gráfico de correlação para os dados de treino da rede neural.

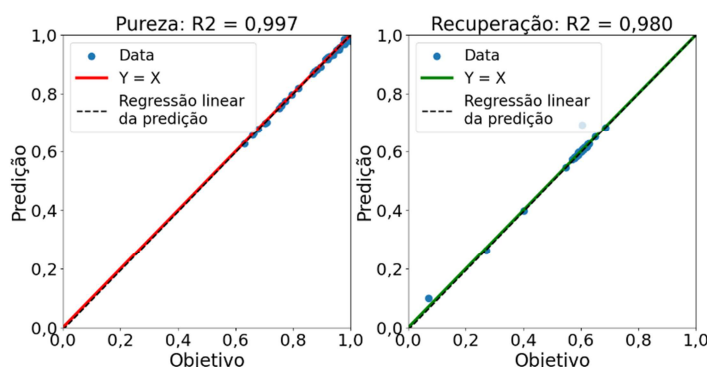


Figura 3 – Gráfico de correlação para os dados de teste da rede neural.

Tais resultados foram obtidos a partir de uma taxa de aprendizado inicial de 0,090, utilizando 20 neurônios na primeira camada oculta e 12 nas duas seguintes. A função de ativação empregada foi a unidade linear retificada (ReLU), e o *solver* utilizado foi o estimador adaptativo de momentos (Adam). Os resultados encontrados indicam que o modelo substituto é capaz de prever com precisão a eficiência do PSA, devido aos seus coeficientes de correlação. Outro aspecto observado foi a redução considerável do tempo de computação, sendo de 1,4 min no simulador tradicional e $1,27 \times 10^{-3}$ s para a rede neural.

CONCLUSÕES

O modelo de rede neural desenvolvido foi capaz de representar satisfatoriamente o processo de purificação de hidrogênio por PSA, obtendo coeficientes de correlação de 0,997 e 0,980 para a pureza e recuperação respectivamente. Além disso, reduziu o tempo de processamento de 1,4 minutos para a ordem de milissegundos, evidenciando o potencial do modelo para aplicações que demandem múltiplas simulações, como a otimização de processos. Portanto, espera-se, em trabalhos futuros, ampliar o estudo para outros metamodelos e implementar técnicas de otimização de processos, visando à determinação das variáveis operacionais ótimas.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – Brasil (CAPES) – Código de Financiamento 001, a Origem Energia S.A e o Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico - CNPq (Brasil) – Processos: 141891/2023-8, 307705/2025-0 e 155277/2024-3, pelo financiamento do trabalho.

REFERÊNCIAS

- DU, Z. *et al.* A review of hydrogen purification technologies for fuel cell vehicles. **Catalysts**, v. 11, n. 3, p. 393, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/catal110-30393>. Acesso em: 10 ago. 2025.
- ELIHIMAS, D. R. M. *et al.* Hydrogen production via steam reforming of biogas derived from sugarcane vinasse. **XXI Convención Científica De Ingeniería Y Arquitectura (CCIA 21)**, 2024, Havana. Memorias CCIA 2024, 2024. p. 953. Disponível em: https://ccia.cujae.edu.cu/public/ProgramaGeneral_y_Memorias_CCI-A_2024.pdf. Acesso em: 10 ago. 2025.
- INTERNATIONAL ENERGY AGENCY (IEA). *Global Hydrogen Review 2024*. 2024. Disponível em: <https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2024>. Acesso em: 10 ago. 2025.
- TAPEH, A. T. G.; NASER, M. Z. Artificial intelligence, machine learning, and deep learning in structural engineering: a scientometrics review of trends and best practices. **Arch. Comput. Methods Eng.**, v. 30, n. 1, p. 115-159, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11831-022-09793-w>. Acesso em: 11 ago. 2025.
- XIAO, J. *et al.* Thermal effects on breakthrough curves of pressure swing adsorption for hydrogen purification. **Int. J. Energy Res**, v. 41, n. 19, p. 8236–8245, 2016. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2015.11.126>. Acesso em: 10 ago. 2025.