



Modelagem Preditiva do Processo de Captura de CO₂ por Amina Terciária Utilizando Redes Neurais Artificiais

Predictive Modeling of the CO₂ Capture Process Using Tertiary Amine with Artificial Neural Networks

Gustavo Anthunes Albuquerque da Silva

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

Laíse Silvia da Silva Pinto

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

Ranna Theresa dos Santos Cajá

Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Paraíba, Brasil.

Resumo: Este trabalho apresenta o desenvolvimento e a validação de um modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais (RNA) aplicado ao processo de captura de dióxido de carbono (CO₂) por solução de amina terciária. Os dados utilizados no estudo foram gerados a partir de simulações rigorosas realizadas no software Aspen Plus, considerando uma coluna de absorção operando em contracorrente sob condições representativas de aplicações industriais. O modelo de RNA foi treinado para estimar variáveis operacionais de interesse, incluindo a vazão de CO₂ capturado e o consumo de energia do processo. O desempenho preditivo do modelo foi avaliado por meio de métricas estatísticas e análises gráficas de paridade, apresentando coeficientes de determinação (R²) superiores a 0,91 para ambas as variáveis analisadas. Os resultados obtidos indicam boa acurácia e capacidade de generalização do modelo, evidenciando seu potencial como soft sensor para suporte ao monitoramento e à análise do desempenho operacional de unidades de captura de carbono. Dessa forma, a abordagem proposta demonstra que a integração entre simulação de processos e técnicas de inteligência artificial constitui uma estratégia promissora para a modelagem preditiva de sistemas complexos de captura de CO₂, contribuindo para uma operação mais eficiente, sustentável e economicamente fundamentada.

Palavras-chave: carbono; geração de energia; combustão.

Abstract: This study presents the development and validation of a predictive model based on Artificial Neural Networks (ANN) applied to the carbon dioxide (CO₂) capture process using a tertiary amine solution. The data used in the study were generated from rigorous simulations performed in Aspen Plus software, considering a countercurrent absorption column operating under conditions representative of industrial applications. The ANN model was trained to estimate operational variables of interest, including the captured CO₂ flow rate and the energy consumption of the process. The predictive performance of the model was evaluated using statistical metrics and graphical parity analyses, showing coefficients of determination (R²) higher than 0.91 for both analyzed variables. The results indicate good accuracy and generalization capability of the model, highlighting its potential as a soft sensor to support monitoring and performance analysis of carbon capture units. Thus, the proposed approach demonstrates that the integration of process simulation and artificial intelligence techniques is a promising strategy for the predictive modeling of complex CO₂ capture systems, contributing to more efficient, sustainable, and economically grounded operation.

Keywords: carbon; power generation; combustion.

INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, o aumento expressivo das emissões de dióxido de carbono (CO_2) provenientes de atividades industriais e da geração de energia tem intensificado os impactos das mudanças climáticas, consolidando a captura de carbono como uma estratégia fundamental para a mitigação desses efeitos e para a transição rumo a uma economia de baixo carbono (D'Alessandro *et al.*, 2010; Loachamin *et al.*, 2024). Nesse contexto, tecnologias de captura pós-combustão têm recebido atenção significativa devido à sua aplicabilidade em unidades industriais existentes.

Entre essas tecnologias, os processos de absorção química com aminas destacam-se pela elevada eficiência e maturidade tecnológica. Tradicionalmente, aminas primárias como a monoetanolamina (MEA) são amplamente empregadas; contudo, apresentam limitações relevantes, como elevado consumo energético durante a regeneração do solvente, degradação química e corrosão dos equipamentos. Em contraposição, aminas terciárias, como a trietanolamina (TEA), têm-se mostrado alternativas promissoras, uma vez que apresentam maior estabilidade química e menor demanda energética, mantendo desempenho satisfatório na captura de CO_2 (Loachamin *et al.*, 2024).

Apesar dessas vantagens, o desempenho global dos sistemas de captura por aminas é fortemente dependente de um conjunto de variáveis operacionais interdependentes, incluindo vazões, temperaturas, pressões e concentrações do solvente. A natureza não linear dessas interações, aliada à dinâmica do processo, dificulta a análise e a previsão do comportamento do sistema por meio de abordagens tradicionais baseadas exclusivamente em modelos fenomenológicos ou correlações empíricas (Liang & Zhang, 2021).

Nesse cenário, técnicas de inteligência artificial têm se consolidado como ferramentas eficazes para a modelagem e previsão de processos industriais complexos. Em particular, as Redes Neurais Artificiais (RNA) destacam-se pela capacidade de aprender relações não lineares a partir de dados, permitindo a construção de modelos preditivos robustos mesmo em sistemas altamente acoplados e de difícil descrição analítica (Ayodele *et al.*, 2012; Cavalcanti *et al.*, 2021). Essas características tornam as RNA especialmente adequadas para aplicações em processos de captura de CO_2 , nos quais múltiplas variáveis influenciam simultaneamente os indicadores de desempenho (Liang & Zhang, 2021).

Dessa forma, o presente trabalho tem como objetivo o desenvolvimento de um modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais para estimar variáveis operacionais críticas do processo de captura de CO_2 por solução de amina terciária. O modelo é construído a partir de dados gerados por simulações rigorosas no software Aspen Plus, permitindo a criação de um soft sensor capaz de prever indicadores como a vazão de CO_2 capturado e o consumo energético do processo.

A abordagem proposta visa fornecer uma ferramenta confiável de suporte à análise operacional e ao monitoramento do desempenho do sistema, contribuindo

para tomadas de decisão mais rápidas e fundamentadas. Assim, o uso de modelos preditivos baseados em RNA apresenta-se como uma estratégia promissora para aprimorar a eficiência e a sustentabilidade de unidades industriais de captura de carbono (Cavalcanti *et al.*, 2021; Loachamin *et al.*, 2024).

METODOLOGIA

Processo de Captura de CO₂ no Aspen Plus

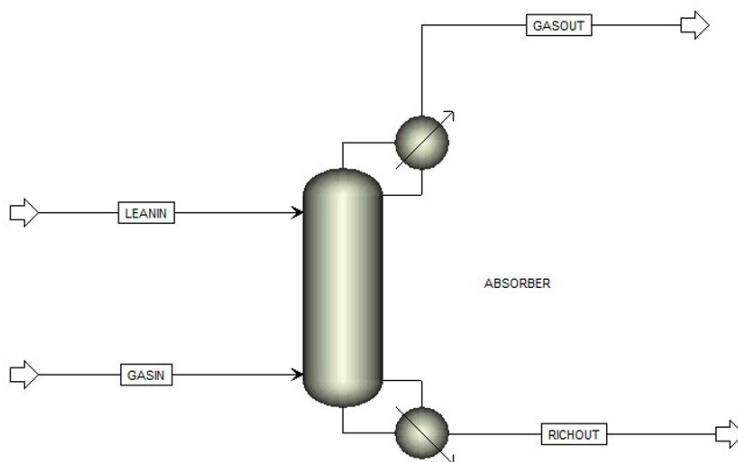
A modelagem e a simulação do processo de captura de dióxido de carbono (CO₂) foram realizadas no software Aspen Plus, considerando uma unidade de absorção química baseada em solução de amina terciária. O sistema é modelado de forma a representar uma coluna de absorção operando em regime contínuo e em contracorrente, na qual uma corrente gasosa contendo CO₂ é colocada em contato direto com a fase líquida absorvente, promovendo a transferência de massa entre as fases.

A coluna de absorção é implementada no Aspen Plus por meio de um modelo rigoroso, capaz de representar os balanços de massa e energia do sistema, bem como as interações termodinâmicas entre as fases gasosa e líquida. A solução absorvente é especificada com base em uma composição definida de amina terciária em água, sendo adotadas propriedades físico-químicas compatíveis com sistemas de captura de CO₂.

São estabelecidas condições operacionais representativas de aplicações industriais, incluindo faixas de temperatura, pressão, vazões das correntes de alimentação e concentração da amina na solução absorvente. Esses parâmetros são sistematicamente variados dentro de intervalos previamente definidos, com o objetivo de gerar um conjunto de dados abrangente e consistente, capaz de capturar o comportamento do processo sob diferentes regimes operacionais.

Os resultados obtidos a partir das simulações no Aspen Plus incluem variáveis de interesse associadas ao desempenho do processo, como a vazão de CO₂ capturado e a eficiência de remoção. Esses dados simulados são posteriormente utilizados como base para o desenvolvimento, treinamento e validação do modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais, assegurando coerência entre a modelagem fenomenológica e a abordagem orientada por dados.

Figura 1 - Coluna de absorção para captura de CO₂ no Aspen Plus.



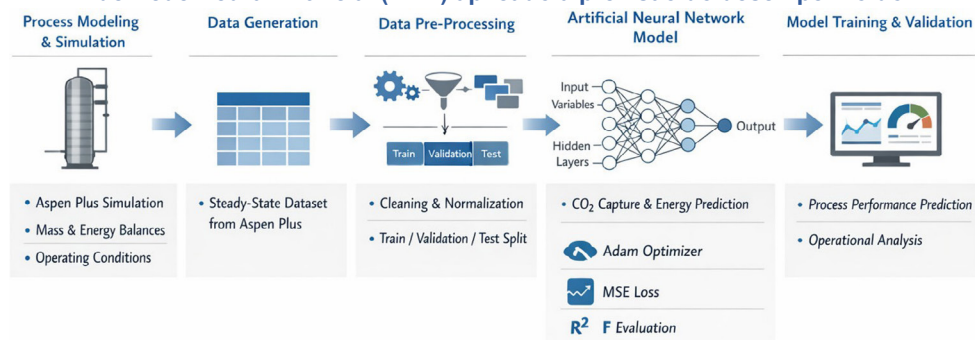
Fonte: autoria própria.

Os dados gerados a partir do simulador servem como base para o desenvolvimento e treinamento do modelo de rede neural artificial, possibilitando a análise preditiva e a otimização do desempenho do sistema de captura.

Desenvolvimento da Rede Neural Artificial

O modelo de Rede Neural Artificial (RNA) é desenvolvido com o objetivo de prever o desempenho do processo de captura de CO₂ a partir de um conjunto de variáveis operacionais selecionadas. Conforme ilustrado na figura 2, a metodologia adotada compreende as etapas de geração dos dados por meio de simulações no software Aspen Plus, seguida pelo pré-processamento dos dados e pelo treinamento do modelo de RNA.

Figura 2 - Framework para desenvolvimento e treinamento do modelo de Rede Neural Artificial (RNA) aplicado à previsão do desempenho do



Fonte: autoria própria.

Os dados simulados são inicialmente submetidos a procedimentos de tratamento e normalização, de modo a garantir a adequação das escalas das variáveis de entrada e a estabilidade do processo de treinamento. Em seguida, o modelo de RNA é estruturado com camadas totalmente conectadas, empregando a função de ativação ReLU nas camadas ocultas, o otimizador Adam para atualização dos pesos sinápticos e a função de custo do erro quadrático médio (MSE) como critério de minimização durante o treinamento.

Após o ajuste dos parâmetros da rede, o modelo treinado é submetido à uma etapa de validação utilizando um conjunto de dados independente, com o objetivo de avaliar sua capacidade de generalização. O modelo validado é então aplicado na previsão dos indicadores de desempenho do processo, tais como a vazão de CO₂ capturado e o consumo energético, caracterizando sua utilização como um modelo preditivo e ferramenta de suporte à análise operacional.

Validação do Modelo e Análise de Desempenho

A validação do modelo de Rede Neural Artificial (RNA) é realizada utilizando um conjunto de dados independente, previamente separado e não empregado durante a etapa de treinamento. Essa abordagem tem como finalidade avaliar o desempenho do modelo em condições não observadas, assegurando uma análise adequada de sua capacidade de generalização.

O desempenho preditivo da RNA é quantificado por meio de métricas estatísticas, com destaque para o coeficiente de determinação (R^2). Adicionalmente, são realizadas análises gráficas de correlação entre os valores preditos pelo modelo e os valores obtidos a partir das simulações no Aspen Plus, por meio de gráficos de dispersão e de paridade.

Essa etapa metodológica permite verificar a acurácia do modelo e sua capacidade de reproduzir o comportamento do processo sob diferentes condições operacionais, validando sua aplicação como ferramenta preditiva para análise do desempenho do sistema de captura de CO₂.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

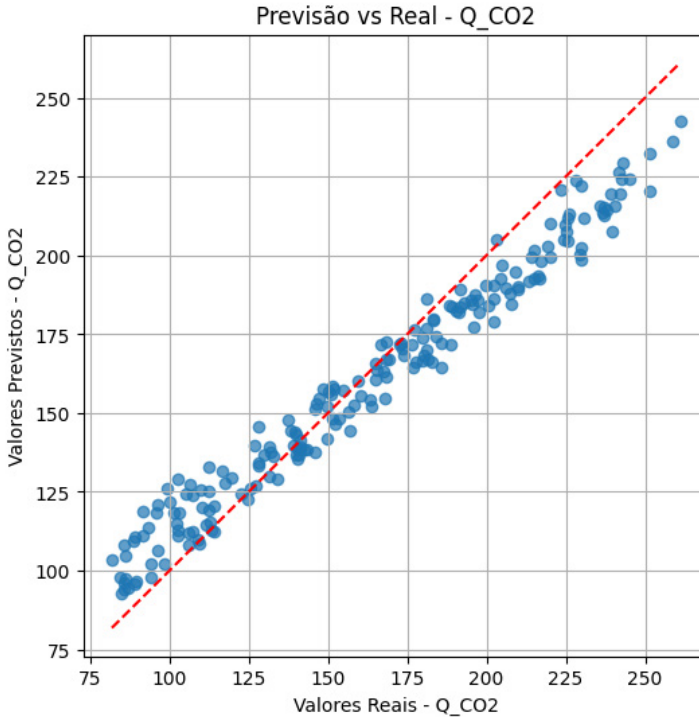
Validação do Modelo de Rede Neural Artificial

A figura 3 apresenta o gráfico de dispersão entre os valores previstos pelo modelo de Rede Neural Artificial (RNA) e os valores obtidos a partir das simulações para a variável vazão de CO₂ capturado (Q_CO₂). Observa-se que o modelo apresenta bom desempenho preditivo, com coeficiente de determinação $R^2 = 0,9198$, indicando elevada correlação entre os valores estimados e os valores de referência.

A distribuição dos pontos ao longo da linha de identidade evidencia a capacidade da RNA em reproduzir adequadamente o comportamento do processo,

com desvios relativamente reduzidos ao longo da faixa operacional analisada, confirmando a consistência do modelo para a previsão dessa variável de interesse.

Figura 3 - Gráfico de dispersão entre os valores previstos pela RNA e os valores simulados para a vazão de CO₂ capturado (Q_CO₂).

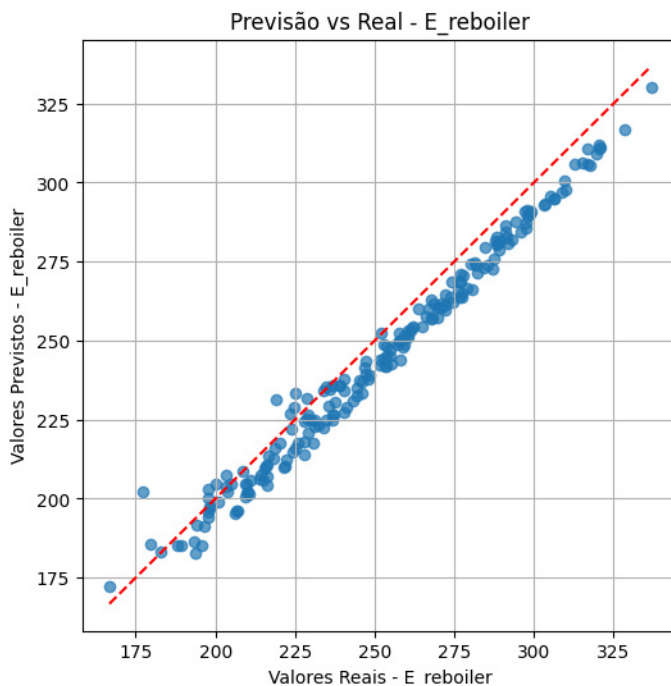


Fonte: autoria própria.

Observa-se que a tendência linear entre os valores preditos e simulados encontra-se bem definida, com a maior parte dos pontos concentrada nas proximidades da linha de identidade ($y = x$). No entanto, verifica-se uma leve tendência de subestimação para valores mais elevados da vazão de CO₂ capturado, o que indica oportunidades de aprimoramento do modelo por meio de ajustes na arquitetura da rede neural, aplicação de transformações nas variáveis de saída ou adoção de técnicas de regularização durante o treinamento.

A figura 4 apresenta o desempenho do modelo de RNA na previsão do consumo de energia no refeedor (E_reboiler). Para essa variável, o modelo demonstra desempenho excelente, com coeficiente de determinação $R^2 = 0,9430$. A distribuição dos pontos evidencia elevada aderência à linha de identidade, não sendo observada a presença de padrões sistemáticos de erro. Os desvios pontuais identificados permanecem dentro de limites aceitáveis e não comprometem a acurácia global do modelo, confirmando sua robustez para a previsão dessa variável operacional.

Figura 4 - Gráfico de dispersão entre os valores previstos pela RNA e os valores simulados para o consumo de energia no refeedor (E_reboiler).



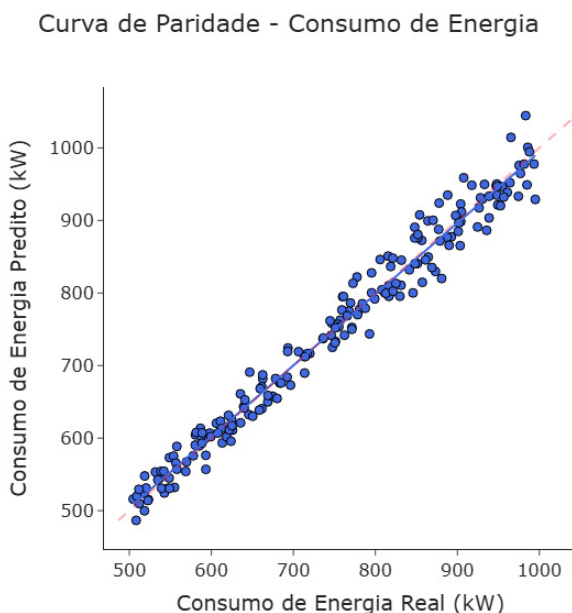
Fonte: autoria própria.

Análise de Desempenho do Processo

Além da etapa de validação, o modelo de Rede Neural Artificial (RNA) é aplicado à previsão do consumo de energia na coluna, variável de elevada relevância para a avaliação da eficiência econômica do processo de captura de CO₂. O gráfico de paridade associado a essa variável, apresentado na figura 5, evidencia uma forte correlação entre os valores preditos pelo modelo e os valores de referência, com a maior parte dos pontos concentrada nas proximidades da linha de paridade.

Esse comportamento indica elevada acurácia e bom desempenho preditivo do modelo para a estimativa do consumo energético, reforçando sua aplicabilidade como ferramenta de apoio à análise do desempenho operacional do processo de captura de CO₂.

Figura 5 - Gráfico de paridade entre valores reais e preditos para o consumo de energia do processo.



Fonte: autoria própria.

Essa capacidade preditiva possibilita a avaliação rápida do impacto de diferentes condições operacionais sobre a demanda energética do processo, permitindo analisar a relação entre a vazão de CO_2 capturado e o consumo de energia de forma eficiente. Dessa maneira, o modelo fornece suporte à análise comparativa de cenários operacionais, contribuindo para tomadas de decisão mais ágeis e tecnicamente fundamentadas.

Consequentemente, a aplicação do modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais apresenta potencial para auxiliar na operação mais sustentável e economicamente eficiente de sistemas de captura de CO_2 , ao oferecer informações confiáveis sobre o desempenho energético do processo.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Este trabalho apresentou o desenvolvimento, treinamento e validação de um modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais aplicado a um processo de captura de dióxido de carbono (CO_2) por solução de amina terciária. A partir de dados gerados por simulações rigorosas no Aspen Plus, foi possível construir um modelo orientado por dados capaz de estimar, de forma precisa, variáveis operacionais de elevada relevância para o desempenho do processo.

Os resultados obtidos indicaram elevada capacidade preditiva, com coeficientes de determinação (R^2) superiores a 0,91 para a vazão de CO_2 capturado e para o consumo de energia, demonstrando a habilidade da RNA em capturar as relações não lineares entre as variáveis operacionais do sistema. A análise dos gráficos de paridade e dispersão confirmou a boa acurácia e a capacidade de generalização do modelo, evidenciando sua robustez frente a dados não utilizados no treinamento.

A abordagem proposta caracteriza-se como uma estratégia eficaz de modelagem preditiva, com potencial aplicação como soft sensor para suporte ao monitoramento e à análise do desempenho operacional de unidades de captura de CO_2 . Nesse contexto, o modelo desenvolvido pode auxiliar a avaliação comparativa de diferentes condições operacionais, contribuindo para tomadas de decisão mais rápidas e tecnicamente fundamentadas.

Por fim, os resultados deste estudo indicam que a integração entre simulação de processos e técnicas de inteligência artificial constitui uma alternativa promissora para a análise de sistemas complexos de captura de carbono, favorecendo a operação mais eficiente, sustentável e economicamente viável dessas unidades. Estudos futuros podem explorar a expansão do modelo para condições dinâmicas e sua integração com estratégias de controle e otimização baseadas em dados.

REFERÊNCIAS

- LOACHAMIN D., CASIERRA J., CALVA V., PALMA-CANDO A., ÁVILA E.E., RICAURTE M., **Amine-Based Solvents and Additives to Improve the CO_2 Capture Processes: A Review**. ChemEngineering, v. 8, n. 6, p. 129, 2024.
- D'ALESSANDRO D.M., SMIT B., LONG J.R., **Carbon Dioxide Capture: Prospects for New Materials**. Angew. Chem. Int. Ed., v. 49, n. 35, p. 6058–6082, 2010.
- AYODELE O.B., AUTA H.S., MD NOR N., **Artificial Neural Networks, Optimization and Kinetic Modeling of Amoxicillin Degradation in Photo-Fenton Process Using Aluminum Pillared Montmorillonite-Supported Ferrioxalate Catalyst**. Ind. Eng. Chem. Res., v. 51, n. 50, p. 16311–16319, 2012.
- CAVALCANTI F.M., KOZONOE C.E., PACHECO K.A., ALVES R.M.B., **Application of Artificial Neural Networks to Chemical and Process Engineering**. In: Deep Learning Applications. IntechOpen, 2021.
- LIANG F., ZHANG T., **Research on Chemical Process Optimization Based on Artificial Neural Network Algorithm**. Asian Journal of Research in Computer Science, v. 12, n. 4, p. 12–24, 2021.
- WANG L., KANG J., **A Review of Artificial Neural Networks for Chemical Process Optimization and Compound Property Prediction**. Asian Journal of Advanced Research and Reports, v. 16, n. 12, p. 100–108, 2022.