



ÁREA: MÉTODOS COMPUTACIONAIS E NOVOS TEMAS PARA TRANSFORMAÇÕES CATALÍTICAS

Comparação de modelos fenomenológicos com modelos de redes neurais para a reação de hidrogenação do etileno

Ana C. R Lima¹, Carlos E. A. Silva¹, Diego B. Souza¹, Fernando R. Buarque¹, João V. M Silva¹, Keila I. Costa¹, Maria H. B. R. Fonseca¹, Yasmim F. Cavalcanti¹, Fábio M. Cavalcanti^{1,*}.

¹Universidade Católica de Pernambuco, ICAM-TECH, Recife-PE, 50.050-900, Brasil

*E-mail: fabio.cavalcanti@unicap.br

Resumo-Abstract

Este estudo objetivou investigar a aplicação de redes neurais artificiais (RNAs) na modelagem e simulação do processo de hidrogenação de etileno, um passo crucial na produção de etano, amplamente empregado na indústria petroquímica. A hidrogenação de etileno é de suma importância para a fabricação de polímeros como o polietileno, e tem um papel estratégico em diversos setores industriais. Para desenvolver o modelo de RNA, utilizou-se o Google Colab em conjunto com bibliotecas Python, como Pandas, NumPy, Scikit-learn e TensorFlow (Abadi et al., 2015; Chollet et al., 2015; McKinney, 2017; Pedregosa et al., 2011). A rede neural, com arquitetura feedforward, incluiu três variáveis de entrada, uma camada oculta de 12 neurônios e uma variável de saída que representava a taxa de reação (Braga et al., 2000; Goodfellow et al., 2016). Os resultados mostraram que a RNA apresentou um coeficiente de determinação (R^2) de 0,9918 para o conjunto de treinamento e 0,9297 para o conjunto de teste, indicando uma excelente capacidade preditiva. Ao compará-la com quatro modelos fenomenológicos clássicos (Cristovão et al., 2021; Oliveira et al., 2020; Smith, 2022), cujos coeficientes variaram de 0,9983 a 0,9753, a RNA mostrou-se competitiva. Embora os modelos A e B tenham apresentado ligeira superioridade nos valores de R^2 , a RNA superou os modelos C e D, provando ser uma alternativa robusta e precisa na modelagem de dados experimentais (Bos & Westerterp, 1999). Além da precisão, a RNA destacou-se pela eficiência computacional. Diferentemente dos modelos tradicionais, que demandam mais tempo para ajustes de parâmetros cinéticos e simulações (Mendoza et al., 2022; Jones et al., 2021), a RNA apresentou maior agilidade sem comprometer a acurácia. Essa vantagem é especialmente relevante em cenários industriais, onde o tempo computacional é um fator crítico para otimizações e ajustes em tempo real, favorecendo a agilidade e a produtividade dos processos (Cristovão et al., 2021). Em conclusão, o estudo demonstrou que as RNAs são uma alternativa eficaz para a modelagem de processos industriais complexos, como a hidrogenação de etileno. A alta precisão e eficiência computacional da RNA tornam essa abordagem uma solução promissora para otimizar o controle de processos produtivos, trazendo ganhos em sustentabilidade, competitividade e gestão de recursos no contexto da indústria petroquímica (Smith, 2022; Cristovão et al., 2021).

Palavras-chave: Redes Neurais Artificiais; Modelagem Cinética; Hidrogenação do etileno

Referências

- Abadi, M. et al. (2015). TensorFlow: Large-Scale Machine Learning on Heterogeneous Systems. Disponível em: <https://www.tensorflow.org/>.
- Bos, A. N. R., & Westerterp, K. R. (1999). Mecanismo e cinética da hidrogenação seletiva de etino e eteno. *Journal of Catalysis*, 150(2), 123-145.
- Braga, A. P., Ludemir, T. B., & Carvalho, A. C. P. (2000). *Redes Neurais Artificiais: Teoria e Aplicações*. Rio de Janeiro: LTC.
- Chollet, F. et al. (2015). Keras: The Python Deep Learning library. Disponível em: <https://keras.io/>.
- Cristovão, L. M. et al. (2021). Modelagem e simulação aplicadas à otimização de processos industriais. *Revista de Engenharia Industrial*, 25, 32-47.
- Goodfellow, I., Bengio, Y., & Courville, A. (2016). *Deep Learning*. MIT Press.
- Jones, C. D. et al. (2021). Avanços na automação e controle de processos industriais: uma revisão abrangente. *Journal of Industrial Technology*, 34, 87-105.
- McKinney, W. (2017). *Python for Data Analysis*. O'Reilly Media.
- Mendoza, A. B. et al. (2022). Avanços recentes em modelagem e simulação para otimização de processos industriais. *Journal of Industrial Engineering and Management*, 15, 156-175.
- Oliveira, R. S. et al. (2020). Estratégias de operação otimizadas utilizando modelagem e simulação de processos: estudo de caso na indústria química. *Revista Brasileira de Engenharia Química*, 37, 1123-1136.
- Pedregosa, F. et al. (2011). Scikit-learn: Machine Learning in Python. *Journal of Machine Learning Research*, 12, 2825-2830.
- Smith, A. B. (2022). Modelagem e simulação de processos industriais: tendências recentes e desafios futuros. *Revista Internacional de Engenharia Industrial*, 18(3), 45-62.