

## SIMULAÇÃO DE PROPRIEDADES TERMOFÍSICAS DE CO<sub>2</sub> + IMPUREZAS USANDO MACHINE LEARNING<sup>1</sup>

Bernardo Skovronski Woitas<sup>2</sup>, Antonio Marinho Barbosa Neto<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Vinculado ao projeto “Análise Integrada de Sistemas de Produção de Petróleo”

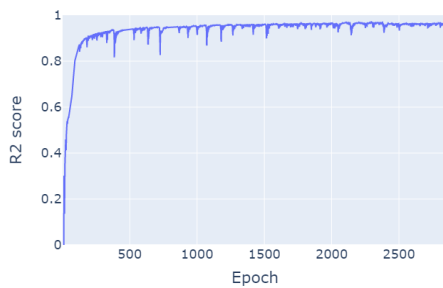
<sup>2</sup> Acadêmico do Curso de Engenharia de Petróleo – CESFI – Bolsista PROBIC/UDESC

<sup>3</sup> Orientador, Departamento de Engenharia de Petróleo – CESFI – [antonio.marinho@udesc.br](mailto:antonio.marinho@udesc.br)

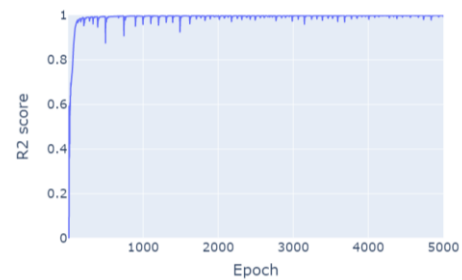
A crescente demanda por tecnologias que promovam a captura e armazenamento de carbono (CCS, do inglês *Carbon Capture and Storage*), aliada à necessidade de processos industriais mais eficientes, tem impulsionado o desenvolvimento de modelos precisos para prever propriedades termofísicas de misturas ricas em dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) com a presença de impurezas tais como o monóxido de carbono (CO) e o argônio (Ar). A precisão na previsão da densidade dessas misturas, por exemplo, é crucial para a otimização de processos industriais, tais como o transporte em dutos e a injeção de fluidos em reservatórios de petróleo e aquíferos. Diante deste contexto, o presente trabalho tem como objetivo desenvolver um modelo preditivo baseado em Redes Neurais Artificiais (RNAs) para estimar a densidade de misturas de CO<sub>2</sub>, CO e Ar, utilizando um banco de dados experimentais de propriedades termofísicas.

A metodologia empregada envolve o tratamento de um banco de dados experimental contendo medições de densidade em função da temperatura, pressão e composição das misturas de CO<sub>2</sub>, CO e Ar. Um modelo de rede neural personalizado foi implementado em Python usando a biblioteca PyTorch para realizar a regressão não linear da densidade da mistura, com sua arquitetura possuindo 3 camadas ocultas, cada uma com 64 neurônios e utilizando a função de ativação ReLU para introduzir não-linearidades no modelo. O processo de otimização dos hiperparâmetros, do número de neurônios, a taxa de aprendizado e o número de épocas, foi realizado através da técnica de busca aleatória de hiperparâmetros (Randomized Search CV).

As variáveis de entrada (input) do modelo são temperatura, pressão e as composições molares das misturas (CO<sub>2</sub>, CO, Ar), enquanto a variável de saída (output) é a densidade da mistura. O conjunto de dados foi dividido em 80% para treinamento e 20% para validação, com a normalização das variáveis de entrada para garantir uma convergência eficiente e estabilidade durante o treinamento. O desempenho foi avaliado por meio de métricas como o coeficiente de determinação (R<sup>2</sup>) e a função de perda de erro quadrático médio (MSE), cuja evolução ao longo das épocas de treinamento foi visualizada em gráficos de evolução observados como aqueles mostrados na Figura 1. O item *i* da Figura 1 apresenta o desempenho para a predição da densidade de CO<sub>2</sub>/Ar, enquanto no item *ii* mostra para a mistura CO<sub>2</sub>/CO. Esses resultados são cruciais para avaliar a precisão do modelo em prever a densidade em diferentes condições.



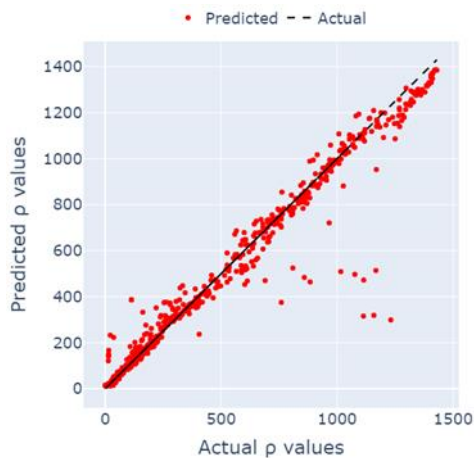
*i* – Mistura CO<sub>2</sub>/Ar



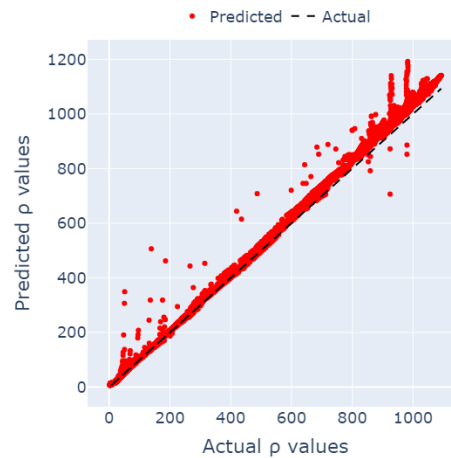
*ii* – Mistura CO<sub>2</sub>/CO

**Figura 1.** Gráficos de Desempenho para o Coeficiente de Determinação R<sup>2</sup>

Os resultados obtidos indicam que o modelo de RNA desenvolvido apresentou um desempenho robusto na previsão da densidade das misturas gasosas, com coeficientes de determinação (R<sup>2</sup>) superiores a 0,98 para as misturas de CO<sub>2</sub>/Ar e CO<sub>2</sub>/CO, validando a precisão do modelo. A Figura 2 ilustra a convergência das métricas de desempenho ao longo das épocas de treinamento, com o item *i* apresentando os resultados para a mistura CO<sub>2</sub>/Ar e o item *ii* para a mistura CO<sub>2</sub>/CO. A função de perda quadrática média (MSE) demonstrou uma queda significativa nas primeiras épocas, estabilizando-se em valores baixos após o treinamento, o que reflete a capacidade do modelo de aprender as relações entre as variáveis de entrada e saída. Comparações entre os valores experimentais e preditos confirmam a eficácia do modelo em capturar as complexidades termodinâmicas dessas misturas, tornando-o uma ferramenta valiosa para a otimização de processos industriais que envolvem o manuseio desses gases.



*i* – Mistura CO<sub>2</sub>/Ar



*ii* – Mistura CO<sub>2</sub>/CO

**Figura 2.** Densidades previstas pelo modelo de RNAs versus densidades experimentais

Esses resultados podem fornecer insights valiosos sobre as condições operacionais ideais para maximizar a eficiência em processos industriais relacionados ao manejo de CO<sub>2</sub>. Conclui-se que a aplicação de RNAs para a previsão de propriedades termodinâmicas de misturas gasosas apresenta-se como uma ferramenta promissora na otimização de processos industriais, contribuindo para o avanço das tecnologias de captura e armazenamento de carbono.

**Palavras-chave:** CCS. CO<sub>2</sub>. Impurezas. Densidade. Redes Neurais Artificiais.