

Modelagem Preditiva do Processo de Armazenamento Adsorptivo de Gás Natural utilizando Machine Learning

Predictive Modeling of the Natural Gas Adsorptive Storage Process using Machine Learning

Emanuel Albuquerque¹

 orcid.org/0009-0006-6759-4343

Lorena Guimarães²

 orcid.org/0000-0001-5753-8678

Deivson Sales³

 orcid.org/0000-0001-7879-0370

¹Escola Escola Politécnica de Pernambuco, Universidade de Pernambuco, Recife, Brasil. E-mail: ersa1@poli.br

² Escola Escola Politécnica de Pernambuco, Universidade de Pernambuco, Recife, Brasil.

³ Escola Escola Politécnica de Pernambuco, Universidade de Pernambuco, Recife, Brasil.

DOI: 10.25286/rep.v11i4.3976

Esta obra apresenta Licença Creative Commons Atribuição-Não Comercial 4.0 Internacional.

RESUMO

Entre as abordagens para aprimorar a segurança no armazenamento de gases, destaca-se a técnica adsorptiva. Esta envolve a introdução de um adsorvente no cilindro, que provoca a liquefação do gás em sua superfície, resultando na diminuição da pressão interna e, conseqüentemente, no aumento da segurança do sistema. Dados experimentais obtidos do armazenamento adsorptivo de metano forneceram informações cruciais sobre as variações comportamentais da pressão, temperatura e adsorvidade. Estes dados viabilizaram a elaboração de modelos e algoritmos capazes de prever o comportamento do gás natural (GN) durante o processo. Quanto à modelagem preditiva, uma técnica destacada é a regressão, que será comparada a modelagens analíticas previamente validadas pela comunidade científica. Assim, o presente estudo desenvolveu um algoritmo para definir a melhor técnica de *Machine Learning* aplicável ao processo de Armazenamento Adsorptivo de Gás Natural (GNA).

PALAVRAS-CHAVE: Armazenamento adsorptivo; Gás natural; Regressão; *Machine Learning*; Modelagem preditiva;

ABSTRACT

Among the approaches to improve safety in gas storage, the adsorptive technique stands out. This involves introducing an adsorbent into the cylinder, which causes the gas to liquefy on its surface, resulting in a decrease in internal pressure and, consequently, an increase in system safety. Experimental data obtained from the adsorptive storage of methane provided crucial information on the behavioral variations of pressure, temperature, and adsorbency. This data enabled the development of models and algorithms capable of predicting the behavior of natural gas (NG) during the process. Regarding predictive modeling, a prominent technique is regression, which will be compared to analytical models previously validated by the scientific community. Thus, this study developed an algorithm to define the best Machine Learning technique applicable to the Adsorptive Storage of Natural Gas (NGA) process.

KEYWORDS: Adsorptive storage; Natural gas; Regression; Machine learning; Predictive modeling;

1 INTRODUÇÃO

1.1 CONTEXTUALIZAÇÃO

O crescimento contínuo da demanda nacional por gás natural (GN) tem impulsionado a necessidade de aprimorar as técnicas tradicionais de armazenamento e transporte, como o Gás Natural Comprimido (GNC), o Gás Natural Liquefeito (GNL), os gasodutos e os caminhões-tanque [1]. Apesar de amplamente utilizados, esses métodos operam sob condições extremas de temperatura e pressão, o que resulta em elevados custos operacionais e limitações para a ampla adoção do GN como fonte energética em maior escala.

Nesse contexto, o armazenamento adsorativo de gás natural (Adsorbed Natural Gas – ANG) surge como uma alternativa viável e promissora. Essa tecnologia permite armazenar o gás em pressões moderadas (30–45 bar), com menor consumo energético e maior segurança. O processo baseia-se na adsorção física das moléculas de gás em materiais porosos, possibilitando a compactação do GN sem a necessidade de compressão extrema. Ainda assim, o desempenho do ANG depende de fatores interligados, como as condições térmicas e os mecanismos de transporte de massa no interior do leito adsorvente [2].

Dado o caráter multifatorial e dinâmico do processo, torna-se necessária a construção de modelos que consigam representar com precisão a interação entre as variáveis envolvidas. Modelos matemáticos convencionais, ainda que úteis, frequentemente falham em lidar com a complexidade real do sistema, o que abre espaço para o uso de novas abordagens baseadas em dados e inteligência artificial. A modelagem preditiva utilizando *Machine Learning* se apresenta como uma ferramenta poderosa nesse cenário, especialmente ao lidar com a variabilidade dos dados experimentais e ao evitar suposições simplificadoras.

1.2 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

As abordagens clássicas de modelagem do processo ANG, baseadas em equações diferenciais e balanços de massa e energia, como o modelo de Thomas [3], apresentam limitações importantes, como a dependência de parâmetros difíceis de determinar experimentalmente (ex.: difusividade efetiva) e o uso de suposições simplificadoras que

nem sempre representam a complexidade real dos sistemas [4]. Além disso, esses modelos tendem a ser rígidos e pouco adaptáveis à variabilidade dos dados experimentais, o que compromete sua capacidade de generalização.

Nesse cenário, técnicas de Aprendizado de Máquina (ML) surgem como alternativas mais flexíveis, com destaque para a regressão, capaz de capturar padrões não lineares (Regressão Polinomial) como platôs, inflexões e transições suaves [5]. Tais comportamentos são especialmente relevantes na presença da dessorção, fenômeno que altera a dinâmica de variáveis como pressão, temperatura e adsorvidade ao longo do tempo [6]. A adoção de modelos preditivos ajustados diretamente aos dados experimentais permite contornar essas limitações, oferecendo maior flexibilidade e aderência ao comportamento real.

1.3 OBJETIVO

O presente trabalho tem como objetivo desenvolver e avaliar um modelo preditivo baseado em regressão linear e polinomial para o processo de armazenamento adsorativo de gás natural (ANG), com foco na previsão da evolução das variáveis ao longo do tempo: pressão (em bar), temperatura (em Kelvin) e capacidade adsorativa (em Kg/Kg). Para isso, foram utilizados dados experimentais obtidos em laboratório com o uso de metano puro e dois tipos distintos de carvão ativado, que chamaremos de CAQ 1 e CAQ 2, como materiais adsorventes. O desempenho do modelo desenvolvido nesse estudo será comparado com o de modelagens fenomenológicas tradicionais, de forma a demonstrar a viabilidade e as vantagens da abordagem preditiva baseada em aprendizado de máquina.

2 MACHINE LEARNING E MÉTODOS TRADICIONAIS

2.1 TÉCNICA DE MACHINE LEARNING: REGRESSÃO LINEAR E POLINOMIAL

A Regressão é uma técnica de aprendizado supervisionado amplamente utilizada para prever valores contínuos com base em variáveis de entrada [7]. Seu objetivo é ajustar uma equação que represente a relação entre entradas e saídas, minimizando o erro entre os valores previstos e os

reais, geralmente por meio da função de custo do erro quadrático médio (MSE) [8].

Nesse trabalho, utilizou-se tanto a forma linear quanto a polinomial da técnica. A Regressão Polinomial estende a capacidade do modelo ao incluir potências das variáveis de entrada, permitindo capturar relações não lineares sem deixar de ser linear nos coeficientes [9]. O ajuste dos parâmetros foi feito por métodos analíticos, mas existe a técnica iterativa, que busca minimizar a função de custo ao longo das iterações [8].

A seguir as principais fórmulas do método usado:

$$\hat{y} = a \cdot x + b \quad (1)$$

$$J(a, b) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2)$$

$$a = \frac{n \sum xy - \sum x \sum y}{n \sum x^2 - (\sum x)^2} \quad (3)$$

$$b = \frac{\sum y - a \sum x}{n} \quad (4)$$

$$a \leftarrow a - \alpha \cdot \frac{\partial J}{\partial a} \quad (5)$$

$$b \leftarrow b - \alpha \cdot \frac{\partial J}{\partial b} \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_j} J(\theta) = \frac{2}{m} \sum_{i=1}^m (h_{\theta}(x_i) - y_i) \cdot x_i^j \quad (7)$$

As equações apresentadas na Tabela X sintetizam os principais elementos matemáticos utilizados na construção dos modelos de regressão deste trabalho. A equação (1) representa a forma básica da regressão linear simples, enquanto a equação (2) define a função de custo do erro quadrático médio (MSE), usada para quantificar o desvio entre as previsões e os valores observados. As equações (3) e (4) fornecem uma solução analítica para os coeficientes da reta de regressão, adequada para conjuntos de dados menores. Já as equações (5) e (6) representam o processo iterativo de ajuste dos parâmetros por Gradiente Descendente, útil em bases mais amplas. Por fim, a equação (7) expressa a derivada parcial do custo em relação a cada coeficiente na regressão polinomial, possibilitando a extensão do modelo a relações não lineares.

2.2 MODELOS DE COMPARAÇÃO

Para o presente estudo, são utilizados como referência modelos fenomenológicos que

apresentam métricas de alta precisão na avaliação das variáveis investigadas. Esses modelos, selecionados pela sua capacidade de representar adequadamente o comportamento observado nos experimentos, servem como base para análises comparativas e validações posteriores. O Quadro 1 apresenta um resumo conciso dos mecanismos e focos principais dos modelos Wakao-Smith (W-S), Johnson-Stewart (J-S), Clássico (M-C) e Difusão com Adsorção (D-A).

Quadro 1 - Resumo dos Modelos Clássicos Fenomenológicos Avaliados.

Modelo	Mecanismo e Foco Principal
Wakao-Smith (W-S)	Descreve a transferência de massa considerando a difusão interna e a resistência externa na interface gás-partícula [10]. Foco em sistemas com controle misto.
Johnson-Stewart (J-S)	Voltado para materiais porosos com distribuição heterogênea de poros (ex: carvões ativados) [11]. Considera múltiplas faixas de porosidade simultaneamente.
Clássico (M-C)	Considera exclusivamente a difusão efetiva no interior dos poros [12]. Desconsidera qualquer resistência externa. Foco em sistemas dominados pela difusão interna.
Difusão c/ Adsorção (D-A)	Combina a difusão do gás pelos poros com o processo de adsorção simultânea nas superfícies internas do material. Formulado para refletir a dinâmica real de sistemas altamente adsorventes.

Fonte: O autor, 2025.

3 METODOLOGIA

3.1 INSTRUMENTAÇÃO E METODOLOGIA DE AQUISIÇÃO DE DADOS

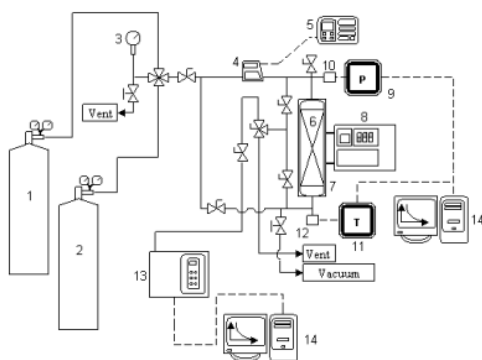
Os dados experimentais utilizados neste estudo foram baseados nos trabalhos de Sales (2009) [2], realizados nos laboratórios da UFPE e UFPB. O sistema experimental consistia em um reservatório adsorvivo com sensores e instrumentação automatizada, permitindo o monitoramento contínuo de variáveis como tempo, pressão, temperatura e adsorvidade. Os testes foram conduzidos com metano a uma vazão de 10 L/min sob três pressões distintas (30, 35 e 40 bar), totalizando 78 observações experimentais (12, 13

e 14 leituras, respectivamente) como mostrado na figura 1.

Como os dados não estavam tabulados no artigo original, utilizaram-se os gráficos publicados por Sales [2] com auxílio da ferramenta WebPlotDigitizer para extrair os pontos experimentais. Esses dados serviram de base para o treinamento dos modelos preditivos e para a comparação com os modelos fenomenológicos clássicos. A abordagem adotada permitiu a aplicação de métricas estatísticas e a realização de uma análise robusta do desempenho de cada modelo no contexto da adsorção de metano.

Figura 1 – Esquema da unidade semi-piloto de armazenamento de gás natural por adsorção.

(1) cilindro de gás hélio; (2) cilindro de gás metano; (3) manômetro; (4) medidor e controlador de vazão mássica a alta pressão; (5) unidade controladora do medidor e controlador de vazão; (6) cilindro de armazenamento; (7) camisa externa; (8) banho ultra-termoestático; (9) indicador de pressão; (10) transdutor de pressão; (11) indicador de temperatura; (12) termopares; (13) microcomputador.



Fonte: [2]

3.2 TECNOLOGIAS AUXILIARES

A modelagem computacional dos dados foi realizada em Python, escolhida por sua ampla aplicação em ciência de dados e engenharia [13]. Foram utilizadas as bibliotecas *Scikit-learn*, para implementação dos algoritmos de aprendizado de máquina [14], e *Matplotlib*, para visualização gráfica dos resultados [15]. A extração dos dados experimentais dos gráficos do artigo de Sales (2009) [2] foi feita com a ferramenta online WebPlotDigitizer, essencial para a comparação entre os modelos clássicos e os desenvolvidos neste trabalho.

As simulações foram conduzidas no ambiente Google *Colaboratory* (Colab), que permitiu a execução interativa dos códigos, facilitando ajustes progressivos nos modelos sem necessidade de reprocessamento completo. A infraestrutura em nuvem também eliminou etapas de configuração local, otimizando o fluxo de trabalho computacional.

3.3 PROCESSAMENTO DE DADOS

A análise exploratória revelou comportamentos distintos entre as variáveis: a temperatura apresentou tendência aproximadamente linear, enquanto pressão e adsorvidade seguiram curvas sigmóides. No entanto, identificou-se um intervalo inicial com comportamento linear, até 0,7 minutos para o adsorvente CAQ1 e 0,3 minutos para o CAQ2, em que a temperatura se manteve constante e as demais variáveis também exibiram padrões lineares.

Considerando essa segmentação temporal, foram testadas diferentes abordagens de modelagem. Devido ao número limitado de observações experimentais, os modelos mais simples tiveram melhor desempenho. Assim, adotou-se a divisão em regimes, aplicando-se regressão linear no início e regressão polinomial de segundo grau nas fases posteriores, para capturar a não linearidade.

3.4 CONSTRUÇÃO DOS MODELOS PREDITIVOS

A construção dos modelos preditivos baseou-se em tabelas experimentais organizadas por tipo de carvão ativado (CAQ1 e CAQ2) e por pressões aplicadas (30, 35 e 40 bar). Os dados de entrada incluíram o tempo, e as variáveis de saída (temperatura, pressão e adsorvidade) foram modeladas separadamente, descartando-se a vazão por ser constante. Para cada combinação de adsorvente e pressão, foram criados três modelos distintos. Em seguida, a média aritmética desses resultados foi calculada para cada variável, totalizando dezoito modelos preditivos. Essa abordagem foi adotada para reduzir o risco de *overfitting* e garantir previsões mais robustas e generalizadas.

A estratégia de modelagem envolveu a separação entre os regimes lineares e não lineares, identificada por meio de uma análise gráfica dos pontos de inflexão das curvas. O regime linear

inicial, associado à adsorção, foi modelado utilizando regressão linear. Já os trechos posteriores, que apresentam comportamento mais curvo devido à dessorção, foram modelados por regressão polinomial de segundo grau. A implementação desta segmentação foi realizada com os métodos polyfit e polyval da biblioteca NumPy, demonstrando-se eficaz na representação precisa dos diferentes regimes dinâmicos observados no processo adsorativo.

3.5 PROCESSO DE VALIDAÇÃO DO MODELO

A performance dos modelos foi avaliada por meio de métricas estatísticas consolidadas na literatura: MAE, RMSE, R^2 e MAPE. A implementação foi realizada com funções da biblioteca Scikit-learn, complementadas por rotinas próprias em Python.

Além dos modelos preditivos desenvolvidos, foram incluídos na análise os modelos fenomenológicos clássicos (W-S, J-S, M-C e D-A). Isso possibilitou uma comparação direta entre abordagens preditivas e tradicionais, com base nas mesmas métricas.

Para complementar a avaliação, foram construídos gráficos e tabelas comparando os valores previstos e observados para cada variável, bem como faixas de erro tecnicamente aceitáveis para o contexto do armazenamento adsorativo.

4 RESULTADOS

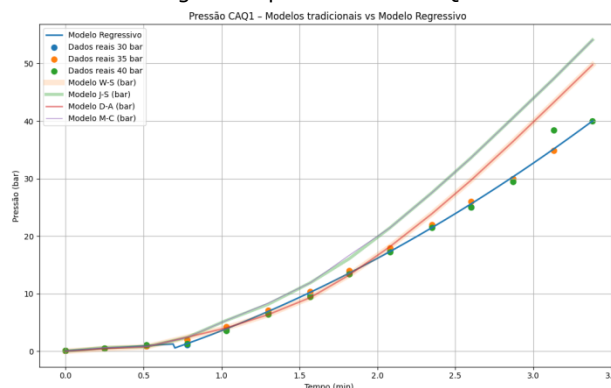
Esta seção apresenta a análise comparativa entre o modelo preditivo desenvolvido por Machine Learning (ML), neste caso, Regressão, e os modelos fenomenológicos tradicionais. O objetivo central é validar o modelo de ML, demonstrando sua superioridade na modelagem do processo de armazenamento adsorativo de gás natural, sob as condições estabelecidas (30, 35 e 40 bar) para os adsorventes CAQ1 e CAQ2.

4.1 Adsorvente CAQ1

A avaliação do carvão ativado CAQ1 começou com a extração dos dados de Pressão e Temperatura em função do tempo, gerados pelos modelos tradicionais de comparação (W-S, J-S, M-C e D-A). Este procedimento estabeleceu a base para as análises subsequentes.

O CAQ1 foi avaliado com foco na previsão das variáveis Pressão e Temperatura em função do tempo. O desempenho preditivo é visualmente comparado na Figura 2, que consolida as curvas de previsão para Pressão, sobrepondo a resposta do Modelo de Machine Learning (ML) à dos modelos fenomenológicos, juntamente aos dados experimentais.

Figura 2 – Modelos Fenomenológicos vs. Modelo de Regressão para Pressão CAQ1.



Fonte: O autor, 2025.

A análise visual da Figura 2 evidencia que o Modelo ML apresenta uma aderência significativamente superior à curva de Pressão e Temperatura real em comparação com os modelos fenomenológicos, independentemente da condição de pressão testada. Para quantificar e confirmar essa superioridade, a Tabela 1 consolida as métricas estatísticas médias (MAE, RMSE, R^2 e MAPE) para Pressão, abrangendo o Modelo ML e os quatro modelos tradicionais avaliados.

Tabela 1 – Métricas médias de cada modelo em relação à pressão

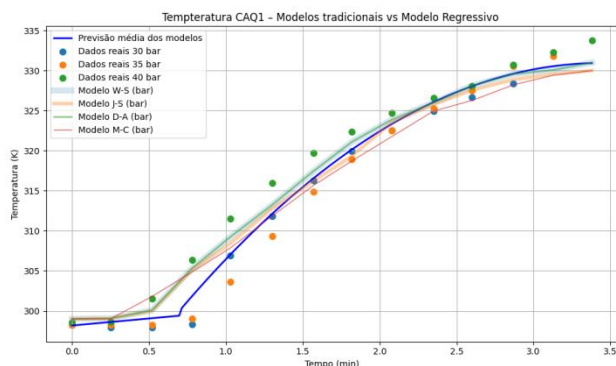
Modelo	MAE(bar)	RMSE(bar)	R^2	MAPE
Regressão	0,55	0,76	0,997	6,2%
W-S	3,12	3,90	0,995	28,5%
J-S	3,70	4,57	0,993	33,2%
D-A	3,12	3,90	0,995	28,5%
M-C	3,70	4,57	0,993	33,2%

Fonte: O autor, 2025.

A eficiência do modelo regressivo também foi demonstrada para o CAQ1 no que se refere à Temperatura, conforme ilustrado na Figura 3. Tal resultado reafirma a robustez do método proposto.

Figura 3 – Modelos Fenomenológicos vs. Modelo de Regressão para Temperatura CAQ1.

Modelagem Preditiva do Processo de Armazenamento Adsorativo de Gás Natural utilizando Machine Learning



Fonte: O autor, 2025.

Assim como na análise da pressão, a eficácia do modelo para a temperatura é confirmada pelas mesmas métricas estatísticas. Portanto, a Tabela 2 apresenta esses dados de forma consolidada.

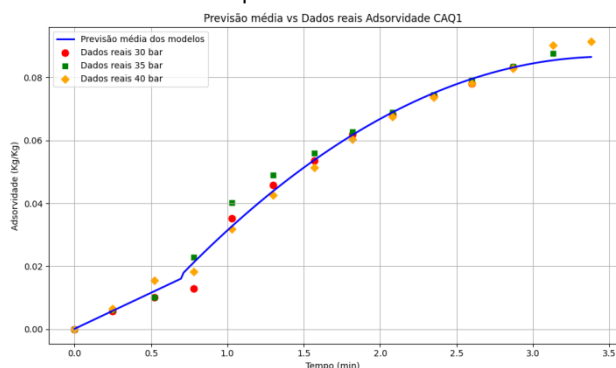
Tabela 2 – Métricas médias de cada modelo em relação à temperatura

Modelo	MAE(K)	RMSE(K)	R ²	MAPE
Regressão	0,97	1,28	0,972	0,33%
W-S	2,16	2,65	0,971	0,73%
J-S	2,30	2,80	0,966	0,78%
D-A	2,16	2,65	0,971	0,73%
M-C	2,32	2,82	0,965	0,79%

Fonte: O autor, 2025.

A Adsorvidade também foi modelada, embora não existam dados dos modelos tradicionais para comparação. Mesmo assim, a Figura 4 mostra que o Modelo ML apresentou um bom desempenho nessa variável.

Figura 4 – Comportamento do modelo em relação aos dados reais usados para treinamento na adsorvidade



Fonte: O autor, 2025

As métricas para a Adsorvidade podem ser consideradas satisfatórias, e elas fornecem forte evidência da precisão do modelo. As métricas indicam que o modelo apresenta alta precisão, com

erro absoluto médio de 0,004 kg/kg, erro quadrático médio de 0,005 kg/kg, apenas 5,5% de erro percentual, e um coeficiente de determinação (R^2) de 0,990, explicando praticamente toda a variabilidade da adsorvidade experimental.

Enquanto os modelos tradicionais W-S e D-A demonstraram o melhor ajuste entre seus pares, o Modelo ML conseguiu capturar com maior precisão o regime inicial e as não linearidades observadas nas faixas de transição, minimizando o desvio em condições de alta pressão. Dessa forma, essa fidelidade à curva real é crucial para a aplicação prática do modelo.

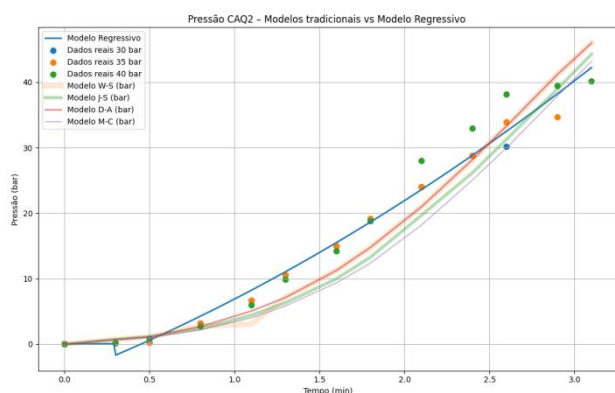
Os resultados numéricos da Tabela 4 confirmam que o Modelo ML registrou os valores mais baixos em todas as métricas de erro (MAE, RMSE e MAPE), traduzindo-se no menor desvio entre os valores previstos e os reais. Além disso, seu Coeficiente de Determinação (R^2), com valores próximos a 0,9998 para Pressão e 0,9999 para Temperatura, demonstrou um ajuste estatístico superior aos modelos tradicionais, cujo R^2 máximo foi de 0,995 (Pressão) e 0,971 (Temperatura). Essa diferença numérica é a prova da maior robustez do Modelo ML, especialmente em baixas pressões, onde os modelos W-S e D-A apresentaram um Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE) elevado (acima de 25%).

4.2 Adsorvente CAQ2

A análise para o adsorvente CAQ2 seguiu a mesma metodologia comparativa do CAQ1. Este material apresentou uma maior dispersão de dados, impondo um desafio de modelagem superior aos modelos testados (W-S, J-S, M-C e D-A).

Posteriormente, a Figura 5 apresenta a plotagem agregada dos resultados. Ela mostra a performance do Modelo de Machine Learning (ML) em contraste com os modelos fenomenológicos para as curvas de Pressão.

Figura 5 – Modelos Fenomenológicos vs. Modelo de Regressão para Pressão CAQ2.



Fonte: O autor, 2025.

A análise visual na Figura 5 demonstra que, mesmo com a maior complexidade e dispersão dos dados do CAQ2, o Modelo ML manteve a capacidade de seguir o comportamento das curvas de forma mais fiel do que os modelos tradicionais. Por outro lado, o Modelo Clássico (M-C) demonstrou os maiores desvios, com clara tendência de superestimação, conforme o esperado. A Tabela 3 apresenta a consolidação final das métricas estatísticas médias para o adsorvente CAQ2.

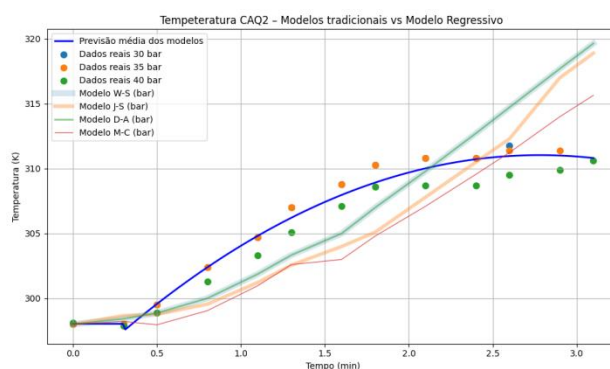
Tabela 3 – Métricas médias de cada modelo em relação à pressão

Modelo	MAE (bar)	RMSE (bar)	R ²	MAPE
Regressão	1,08	1,38	0,979	20,3%
W-S	3,47	4,44	0,988	21,5%
J-S	3,82	4,87	0,983	25,4%
D-A	3,50	4,47	0,987	21,7%
M-C	3,96	4,96	0,980	26,2%

Fonte: O autor, 2025.

A eficiência do modelo regressivo também foi demonstrada para o CAQ2 no que se refere à Temperatura, conforme ilustrado na Figura 6. Tal resultado reafirma a robustez do método proposto também para tal adsorvente.

Figura 6 – Modelos Fenomenológicos vs. Modelo de Regressão para Temperatura CAQ1.



Fonte: O autor, 2025.

O conjunto de métricas reitera a conclusão estabelecida com o adsorvente CAQ1. O Modelo ML se estabeleceu como o mais preciso, pois registrou o menor RMSE e o maior R² para ambas as variáveis (Pressão e Temperatura) em comparação com o conjunto de modelos tradicionais. A Tabela 4 apresenta as métricas estatísticas médias para o adsorvente CAQ2 em relação à temperatura.

Tabela 4 – Métricas médias de cada modelo em relação à temperatura

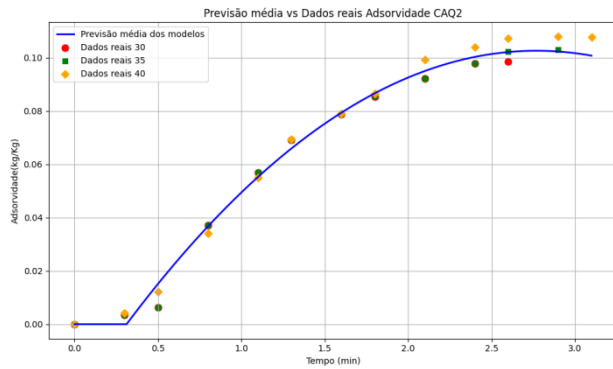
Modelo	MAE (bar)	RMSE (bar)	R ²	MAPE
Regressão	2,20	2,69	0,953	0,72%
W-S	2,44	2,97	0,941	0,80%
J-S	2,20	2,69	0,953	0,72%
D-A	2,79	3,43	0,924	0,92%
M-C	2,79	3,43	0,924	0,92%

Fonte: O autor, 2025.

Os modelos W-S e D-A, apesar de serem os melhores entre os tradicionais, registraram erros consistentemente superiores aos do modelo preditivo de Machine Learning. A Figura 7 ilustra o comportamento da Adsorvidade em função do tempo para o adsorvente CAQ2.

Figura 7 – Comportamento do modelo em relação aos dados reais usados para treinamento na adsorvidade

Modelagem Preditiva do Processo de Armazenamento Adsorptivo de Gás Natural utilizando Machine Learning



Fonte: O autor, 2025

As métricas mostram que o modelo apresenta boa capacidade de previsão da adsorvidade, e os erros em termos absolutos são considerados baixos. O MAE de 0,007 kg/kg e o RMSE de 0,009 kg/kg indicam baixos desvios, enquanto o R^2 de 0,970 revela que o modelo explica 97% da variabilidade observada nos dados experimentais. O MAPE de 9,7% confirma uma precisão razoável, sugerindo que, embora existam desvios percentuais moderados, o desempenho geral permanece consistente e adequado para fins preditivos.

5 CONCLUSÕES

Os resultados obtidos demonstram que o modelo de *Machine Learning* estudado apresenta desempenho superior aos métodos tradicionais na predição das variáveis de interesse, com destaque para a estimativa de pressão. A comparação direta utilizando dados do adsorvente CAQ1 (sob 30 bar) revelou que o modelo alcançou MAE (0,45 bar) e RMSE (0,67 bar) inferiores, além de um coeficiente de determinação (R^2) superior a 0,998, superando até os melhores modelos tradicionais (W-S/D-A). A consistência desses resultados em diferentes condições experimentais reforça a robustez do modelo e sua capacidade de capturar regimes não lineares. No entanto, é fundamental reconhecer limitações como o tamanho reduzido da base de dados e a necessidade de validação em outros adsorventes e condições operacionais, mitigando riscos de sobreajuste.

Para ampliar a generalização e a robustez do modelo, propõe-se a implementação de uma arquitetura de pré-processamento inteligente baseada em *Machine Learning*, focada na identificação do adsorvente e na classificação do estado operacional. Como extensão natural, sugere-se a incorporação de parâmetros dinâmicos que influenciam o desempenho, como a natureza do gás

e as condições ambientais. A concretização destas propostas requer o desenvolvimento de uma base de dados experimental mais abrangente para viabilizar a exploração de técnicas avançadas de aprendizado de máquina. Essa evolução representará um avanço significativo na modelagem preditiva, proporcionando maior precisão e adaptabilidade em condições operacionais variáveis.

REFERÊNCIAS

- [1] SOUSA, Brenda Beatriz; OLIVEIRA, Heleno do Carmo; REIS, Lara Moscardo. **Os desafios do mercado de gás natural no Brasil: panorama atual e perspectivas.** *Tempo do Mundo*, Brasília, v. 32, p. 111-142, 2023. Disponível em: https://repositorio.ipea.gov.br/bitstream/11058/13401/5/Tempo_Mundo_32_artigo3_os_desafo_do_mercado_de_gas.pdf. Acesso em: 26 fev. 2025.
- [2] SALES, D. C. S. **Adsorção e Transferência de Massa em Carvões Ativados utilizados para Armazenamento de Metano em Reservatório**, Tese de Mestrado, Universidade Federal de Pernambuco, Recife, 2009.
- [3] Foo, K.Y., & Hameed, B.H. (2010). **Insights into the modeling of adsorption isotherm systems.** *Chemical Engineering Journal*, 156(1), 2–10. DOI: 10.1016/j.cej.2009.09.013
- [4] SHARMA, Y. C.; GOPALAKRISHNAN, R.; MISHRA, S. **Fixed-bed column adsorption study: a comprehensive review.** *Applied Water Science*, v. 9, n. 3, p. 1–17, 2019. DOI: 10.1007/s13201-019-0927-7.
- [5] ZHANG, Y. et al. **A systematic and critical review on development of machine learning models for adsorption processes.** *Journal of Cleaner Production*, v. 377, p. 132937, 2022. DOI: 10.1016/j.jclepro.2022.132937.
- [6] KUMAR, S. et al. **Machine learning frameworks to accurately estimate the adsorption of organic pollutants.** *Scientific*

Reports, v. 15, n. 1, p. 99759, 2025. DOI: 10.1038/s41598-025-99759-2.

Engineering, v. 9, n. 3, p. 90–95, 2007. DOI: 10.1109/MCSE.2007.55.

- [7] JAMES, Gareth et al. **An Introduction to Statistical Learning: with Applications in R**. New York: Springer, 2013.
- [8] HASTIE, Trevor; TIBSHIRANI, Robert; FRIEDMAN, Jerome. **The Elements of Statistical Learning: Data Mining, Inference, and Prediction**. Springer Series in Statistics, 2009.
- [9] KANG, Jin-Kyu; LEE, Youn-Jun; SON, Chae-Young; PARK, Seong-Jik; LEE, Chang-Gu. **Alternative assessment of machine learning to polynomial regression in response surface methodology for predicting decolorization efficiency in textile wastewater treatment**. *Chemosphere*, v. 370, p. 143996, 2025. ISSN 0045-6535. DOI: 10.1016/j.chemosphere.2024.143996.
- [10] SUN, Wei et al. **A model for transient diffusion in bidisperse pore structures**. *Petroleum Science*, v. 16, p. 1455–1470, 2019. DOI: 10.1007/s12182-019-0338-2.
- [11] CUI, J. et al. **Effect of the Intra-Particle Diffusion and Porous Structure on Models for Effective Diffusivity in Porous Media**. *Transport in Porous Media*, v. 30, n. 8-9, p. 729–737, 1998. DOI: 10.1260/0263-6174.30.8-9.729.
- [12] LANGMUIR, Irving. **The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica and platinum**. *Journal of the American Chemical Society*, v. 40, n. 9, p. 1361–1403, 1918. DOI: 10.1021/ja02242a004.
- [13] VANDERPLAS, Jake. **Python Data Science Handbook: essential tools for working with data**. Sebastopol: O'Reilly Media, 2016. ISBN 978-1-4919-0142-7. Disponível em: <https://jakevdp.github.io/PythonDataScienceHandbook/>. Acesso em: 26 maio 2025.
- [14] PEDREGOSA, F. et al. **Scikit-learn: Machine learning in Python**. *Journal of Machine Learning Research*, v. 12, p. 2825–2830, 2011. Disponível em: <https://www.jmlr.org/papers/v12/pedregosa11a.html>. Acesso em: 26 maio 2025.
- [15] HUNTER, J. D. **Matplotlib: A 2D graphics environment**. *Computing in Science &*