

INTELIGÊNCIA ARTIFICIAL · IFCE · 24 DE MAIO DE 2026

Neural network descriptors for predicting adsorption and deactivation in energy storage tanks

Por Marcos Vinícius Mota Machado, Andréa S. Pereira, Daniel V. Goncalves, José C. A. Oliveira, Hugo R. Peixoto e Sebastião M. P. Lucena

Fonte: OpenAlex · IFCE · [Publicação original](#)

INOVAÇÃO

8/10

APLICABILIDADE

9/10

POTENCIAL
ECONÔMICO

8/10

MATURIDADE

Média

O estudo desenvolve modelos de Inteligência Artificial (Redes Neurais Artificiais otimizadas por PSO) para prever a desativação em tanques de armazenamento de energia baseados em adsorção. Utilizando uma abordagem multiescala, o paper substitui experimentos físicos custosos por simulações moleculares e descritores de distribuição de tamanho de poros (PSD), alcançando alta precisão preditiva (R^2 de até 0,97) e simplificando o desenvolvimento de materiais para armazenamento de gás.

NÚCLEO DA ANÁLISE

Ideia de startup ou produto

Startup de *Materials Informatics* (SaaS/B2B) focada na caracterização virtual e previsão de performance de materiais porosos. A plataforma permitiria que indústrias de gás e química simulassem e selecionassem os melhores adsorventes para seus processos sem a necessidade de testes físicos extensivos, acelerando o time-to-market de novos produtos.

Aplicações práticas

Otimização virtual de materiais adsorventes para tanques de GNV, design acelerado de colunas de separação de gases (PSA) na indústria química e petroquímica, e desenvolvimento de sistemas de armazenamento de energia mais leves e eficientes.

Potencial de mercado

Alto potencial no setor de energia limpa e mobilidade (GNV), bem como na indústria de processos químicos. A capacidade de reduzir custos de experimentação e tempo de desenvolvimento de materiais cria um valor econômico significativo para empresas de energia e química.

FUNDAMENTO CIENTÍFICO

Problema abordado

A escassez de dados experimentais, as incertezas na caracterização de materiais (carbonos ativados) e a dificuldade em prever a curva de desativação (perda de eficiência) ao longo do tempo em tanques de armazenamento de Gás Natural Adsorvido (ANG).

Metodologia

Abordagem multiescala que combina isothermas de adsorção experimental de N, simulação molecular para obter distribuição de tamanho de poros (PSD) e isothermas de componentes (C1-C4), geração de curvas de desativação via modelo termodinâmico de tanque, e treinamento de modelos de RNA usando o algoritmo de Otimização por Enxame de Partículas (PSO).

Principais descobertas

Os modelos desenvolvidos apresentaram alto desempenho preditivo (R^2 entre 0,93 e 0,97). O uso de PSDs como descritores é inédito e eficaz. O modelo B (usando apenas PSD representativo) obteve o melhor resultado, simplificando drasticamente a criação de bancos de dados e reduzindo incertezas. A metodologia é transferível para unidades de PSA industriais.

LEITURA PARA GESTÃO PÚBLICA

Políticas públicas de incentivo à tecnologia GNV (Gás Natural Veicular) de alta eficiência, contribuindo para a transição energética. Além disso, fomento à digitalização da indústria de processos no estado do Ceará, apoiando a adoção de IA no setor produtivo.

PARCERIA UNIVERSIDADE × EMPRESA

Parceria técnico-científica entre o IFCE e empresas do setor de gás (ex: CEGÁS, Petrobras) ou fabricantes de tanques/veículos para validar os modelos em escala piloto e integrar a solução de IA nos processos de desenvolvimento de produtos (R&D).

OPORTUNIDADES DERIVADAS

3 direções estratégicas identificadas

STARTUP · IMPACTO ALTO · CIÊNCIA DE DADOS

Plataforma de Seleção de Materiais Adsorventes via IA

Desenvolvimento de uma solução comercial que utilize os algoritmos de RNA e descritores PSD para ajudar empresas de energia e química a selecionarem ou desenharem materiais porosos ideais para armazenamento e separação de gases.

Validação Industrial de Modelos de Previsão

Projeto de parceria universidade-empresa para aplicar os modelos preditivos na otimização real de tanques de armazenamento ou unidades de PSA existentes na indústria, utilizando dados operacionais para refinar os algoritmos.

Ferramenta de Otimização de Design de Tanques ANG

Incorporação do modelo de RNA como um módulo de software em sistemas de engenharia (CAD/CAE) utilizados por fabricantes de tanques de gás para prever a vida útil e eficiência do armazenamento antes da fabricação física.

ABSTRACT ORIGINAL

To enable energy storage technologies based on adsorption in vehicle tanks, this study presents Artificial Intelligence (AI) models to predict energy deactivation curves, using data from 17 activated carbon samples. A multiscale approach is employed to address known bottlenecks in the application, particularly uncertainties in material characterization and the scarcity of experimental data. These limitations were overcome through the careful selection of experimental N₂ adsorption isotherms at 77 K and the use of molecular simulation to obtain pore size distributions (PSD_{full} and PSD_{rep}) and single-component isotherms for the gases present in natural gas. The PSDs and C1–C4 isotherms were used to generate energy deactivation curves via a thermodynamic model of a storage tank. These deactivation curves served as output data for training the AI models based on artificial neural networks (ANN), optimized using Particle Swarm Optimization (PSO) method. Three models (A, B and C) were developed using PSD_{full}, PSD_{rep}, and C1–C4 isotherms as input descriptors, respectively. All models showed high predictive performance, with R² values ranging from 0.97 to 0.93. To the best of our knowledge, this is the first study to use PSDs as descriptors in AI models. The fact that the use of PSD_{rep} (model B), as the only descriptor, obtained a high R² value (0.97), is particularly significant because it considerably simplifies and reduces uncertainties in the development of databases involving activated carbons. Furthermore, thermodynamic tanks have complexity comparable to PSA units and their variants, indicating that the methodology can be readily transferred to the development of AI models for PSA design in industrial applications.

MATÉRIA PARA LEIGOS

Para leigos: Inteligência Artificial prevê o desempenho de tanques de energia

O cenário atual

O armazenamento de energia em veículos utilizando o processo de adsorção é uma tecnologia em desenvolvimento. No entanto, ela enfrenta desafios práticos, como a dificuldade em caracterizar os materiais utilizados e a falta de dados experimentais suficientes para garantir a eficiência e segurança.

O que os pesquisadores fizeram

Cientistas do IFCE desenvolveram modelos de Inteligência Artificial (IA) para resolver esse problema. Eles criaram sistemas capazes de prever curvas de desativação energética, que indicam como o tanque perde eficiência ao longo do tempo. O estudo utilizou dados de 17 amostras de carvão ativado e uma abordagem multiescala para contornar a escassez de informações.

Como funciona na prática

A pesquisa combinou experimentos com simulações computacionais. Foram utilizadas medições experimentais de adsorção de nitrogênio e simulações moleculares para entender a estrutura dos poros do material (distribuição de tamanho de poros) e o comportamento de gases (C1 a C4) presentes no gás natural. Esses dados alimentaram

um modelo termodinâmico de tanque, gerando curvas de desativação que serviram para treinar redes neurais artificiais. O sistema foi otimizado através de um método chamado Otimização por Enxame de Partículas (PSO).

Resultados e evidência

Três modelos diferentes de IA foram testados, todos apresentando alta precisão. Os índices de desempenho (R^2) variaram de 0,93 a 0,97. Este é o primeiro estudo a utilizar distribuições de tamanho de poros como descritores diretos em modelos de IA.

Implicações práticas

O estudo descobriu que um modelo específico (Modelo B), que utiliza apenas um tipo simplificado de dado sobre os poros do material, obteve a melhor precisão (0,97). Isso é importante porque simplifica muito a criação de bancos de dados para carvões ativados. Além disso, a metodologia pode ser aplicada diretamente no design de unidades industriais de separação de gases (PSA), que possuem funcionamento similar aos tanques estudados.

Limitações e próximos passos

O paper não detalha limitações específicas da metodologia proposta além da superação dos gargalos iniciais de escassez de dados. Também não são explicitados os próximos passos para a continuidade da pesquisa, sugerindo apenas a transferência da tecnologia para aplicações industriais.

QUEM SÃO OS PESQUISADORES

Quem são os pesquisadores

O estudo foi realizado pelos pesquisadores Marcos Vinícius Mota Machado, Andréa S. Pereira, Daniel V. Goncalves, José C. A. Oliveira, Hugo R. Peixoto e Sebastião M. P. Lucena, todos vinculados ao IFCE (Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia). O paper não detalha as formações acadêmicas específicas, papéis hierárquicos na equipe ou trajetórias profissionais anteriores dos autores, limitando-se a informar sua autoria no desenvolvimento dos modelos de IA e na análise dos dados de adsorção.

PALAVRAS-CHAVE

Artificial neural network · Adsorption · Storage tank · Energy (signal processing) · Energy storage