

USO DE REDES NEURAI ARTIFICIAIS PARA PREDIÇÃO DE ISOTERMAS DE ADSORÇÃO DE CO₂ EM SÍLICAS MESOPOROSAS SBA-15 MODIFICADAS

C. L. Valotto, T. D. Martins

Universidade Federal de São Paulo, Diadema, Brasil (c.valoto@unifesp.br)

A mitigação de CO₂ é um desafio ambiental, sendo a captura em sílicas SBA-15 funcionalizadas bastante promissora. Este estudo usou Redes Neurais Artificiais para prever a adsorção de CO₂ integrando variáveis operacionais e texturais. A arquitetura ideal (7-17-1), otimizada via Levenberg-Marquardt, atingiu erro de simulação de 2,51% em dados inéditos. Isso atesta a precisão preditiva do modelo, superando as restrições teóricas das isotermas empíricas tradicionais.

Palavras-chave: inteligência artificial; tratamento de efluentes gasosos, modelagem preditiva, captura de carbono.

INTRODUÇÃO

A mitigação das mudanças climáticas, impulsionada pelo aumento substancial das emissões de dióxido de carbono (CO₂) derivadas da queima de combustíveis fósseis, tornou-se o maior desafio ambiental do século XXI. A concentração desse gás de efeito estufa na atmosfera atingiu níveis críticos, demandando o desenvolvimento de tecnologias de captura e armazenamento de carbono (CCS) (KUMAR et al., 2015; RAJENDRAN et al., 2023).

Embora o processo de absorção química utilizando aminas aquosas seja o método mais difundido industrialmente, ele é acompanhado de várias desvantagens, incluindo alta demanda energética para a regeneração do solvente, taxas de corrosão nos equipamentos e degradação térmica (UNVEREN et al., 2017; PANDA; KULKARNI; SINGH, 2023). Nesse contexto, a adsorção utilizando materiais sólidos secos porosos emerge como uma alternativa tecnológica promissora, oferecendo menor consumo energético e mitigação dos riscos ambientais (LEE; PARK, 2015). Avanços recentes nesta área têm focado não apenas na síntese de novos materiais, mas também na aplicação de ferramentas computacionais avançadas para otimizar a triagem e o desempenho destes adsorventes (KHOSROWSHAHI et al., 2024).

Dentre os adsorventes sólidos, uma vasta gama de materiais tem sido estudada, incluindo zeólitas, estruturas metal-orgânicas (MOFs), polímeros porosos e carvões ativados (LEE; PARK, 2015; SINGH et al., 2018; OMODARA et al., 2023). Contudo, os materiais mesoporosos à base de sílica inorgânica recebem destaque especial devido à sua elevada estabilidade térmica e mecânica, além de

uma porosidade ajustável (UNVEREN et al., 2017; ZHANG et al., 2018).

A sílica SBA-15 (Santa Barbara Amorphous-15) é reconhecida como um dos suportes mais promissores para a captura de gases por adsorção devido à sua arquitetura (UNVEREN et al., 2017). Sintetizada em meio ácido com o auxílio do copolímero tribloco P₁₂₃ e TEOS (Tetraetil ortossilicato), que atuam como direcionador de estrutura e fonte de sílica, respectivamente, a SBA-15 exibe uma rede de canais mesoporosos hexagonais altamente ordenados (Figura 1), elevada área superficial específica e estabilidade hidrotérmica (ZHANG et al., 2018).

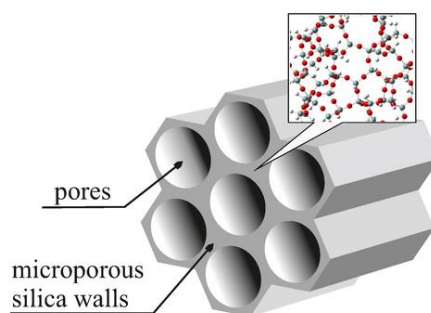


Figura 1. Representação esquemática da SBA-15.

Fonte: LASKOWSKI et al. (2019)

Apesar de sua excelente estrutura, a sílica SBA-15 pura possui baixa afinidade pelo CO₂, uma vez que interage com o gás apenas por meio de forças fracas com os grupos silanóis superficiais. Para viabilizar uma captura eficiente, a funcionalização da superfície é necessária, sendo a modificação com óxido de magnésio (MgO) e carbonato de potássio (K₂CO₃) uma estratégia promissora (ZUKAL et al., 2013).

Avanços recentes reforçam que esses suportes silicosos continuam em destaque, devido à facilidade de modificação de sua superfície para aplicações em larga escala (RAJENDRAN et al., 2023). Estudos comparativos entre diferentes arquiteturas de sílica (como SBA-15, SBA-16 e MCM-48) indicam que a morfologia do suporte desempenha um papel crucial na dispersão dos modificadores químicos. A SBA-15, especificamente, destaca-se por sua rede de canais mesoporosos unidimensionais e hexagonais, que favorecem a acomodação das partículas de MgO e K₂CO₃ sem obstruir significativamente os poros. Essa configuração resulta em uma interação química com o adsorvato e capacidades de captura superiores às de suportes com poros menores ou geometrias complexas (ZUKAL et al., 2013).

Para transferir esse adsorvente da bancada de laboratório para colunas industriais, é indispensável conhecer o seu comportamento termodinâmico de equilíbrio, o qual é descrito pelas isotermas de adsorção, que correlacionam a quantidade de gás retida no sólido com a pressão do sistema, mantendo a temperatura constante (AL-GHOUTI; DA'ANA, 2020). Modelar essas isotermas com precisão é o passo fundamental para compreender a afinidade adsorvente-adsorvato e os mecanismos de interação envolvidos (WANG; GUO, 2020), além de fornecer a base para o cálculo de parâmetros termodinâmicos essenciais (SINGH et al., 2018).

A seleção e o aprimoramento de adsorventes sólidos para a captura de CO₂ dependem de uma descrição matemática rigorosa do equilíbrio de adsorção. Tradicionalmente, a engenharia utiliza modelos fenomenológicos ou semi-empíricos, como as isotermas de Langmuir, Freundlich e Sips, para correlacionar dados experimentais (WANG; GUO, 2020). No entanto, a aplicação dessas equações a sistemas complexos, como as sílicas mesoporosas funcionalizadas, apresenta limitações teóricas significativas.

O modelo de Langmuir, por exemplo, fundamenta-se na premissa de uma superfície energeticamente homogênea e na ausência de interações entre as moléculas adsorvidas, condições raramente encontradas em adsorventes quimiossorventes (AL-GHOUTI; DA'ANA, 2020). Já o modelo de Freundlich, embora contemple a heterogeneidade da superfície, carece de suporte termodinâmico para prever o comportamento de saturação em pressões elevadas (WANG; GUO, 2020). Uma restrição metodológica comum a esses modelos clássicos é que não incorporam as propriedades físicas e texturais do sólido como variáveis independentes, impedindo a extrapolação do modelo (ZHANG et al., 2018; KHOSROWSHAHI et al., 2024).

Avanços recentes na ciência de dados introduziram o uso de *machine learning* como uma ferramenta inovadora na área de processos químicos, com destaque na aplicação de Redes Neurais Artificiais (RNAs). As RNAs são modelos matemáticos e computacionais inspirados no funcionamento do cérebro humano, capazes de atuar como aproximadores de funções altamente complexas, não-lineares e generalizar o comportamento do processo (SILVA; SPATTI; FLAUZINO, 2016; JAMES et al., 2023; MARTINS, 2018).

Sob essa perspectiva, a predição de dados de equilíbrio de adsorção pode ser tratada como um problema de aprendizado supervisionado focado em regressão (JAMES et al., 2023). Para essa finalidade, a arquitetura *feedforward* do tipo *Multilayer Perceptron* (MLP) pode ser utilizada. Ela é caracterizada pelo fluxo de informações em um único sentido: da camada de entrada (*inputs*), passando pelas camadas intermediárias, onde ocorre o processamento neural, por meio de funções de ativação não-lineares, até a camada de saída (*outputs*), que fornece a resposta obtida pelo modelo.

O processo de aprendizado da rede consiste no ajuste iterativo de seus pesos sinápticos e dos limiares (*bias*). A operação fundamental de cada neurônio é descrita pela Equação 1, que detalha como as variáveis de entrada são ponderadas por pesos sinápticos e somadas a um termo de viés, viabilizando o ajuste e a determinação precisa da propriedade estudada.

$$y_1 = f \left(\sum_{i=1}^n w_{i1} * x_{i1} + b_{i1} \right) \quad (1)$$

sendo: y_1 = saída numérica do neurônio 1, f = função de ativação, w_{i1} = peso sináptico de cada entrada i conectada ao neurônio 1; x_{i1} = entrada numérica i ; b_{i1} = bias do neurônio 1; n = número total de entradas recebidas pelo neurônio.

Essa dinâmica computacional confere ao algoritmo a capacidade de mapear fenômenos altamente não-lineares e complexos. Notadamente, esses modelos têm se mostrado eficazes na predição de isotermas de adsorção de CO₂ em diversos materiais porosos, superando as limitações dos modelos tradicionais de isotermas (ROSTAMI et al., 2018; ZHANG et al., 2019).

Dado o exposto, a finalidade deste trabalho foi desenvolver e validar um modelo de Redes Neurais Artificiais capaz de prever a capacidade de adsorção de CO₂ em sílicas mesoporosas SBA-15 funcionalizadas (utilizando os dados de ZUKAL et al., 2013), a partir de seus descritores físicos, atuando como uma ferramenta preditiva orientada a dados

para otimizar a triagem de novos adsorventes, reduzir a dependência de testes físicos e contribuir para o avanço computacional das tecnologias de captura e armazenamento de carbono.

MATERIAL E MÉTODOS

Aquisição, variáveis e tratamento dos dados

A modelagem adotada é de natureza computacional (*in silico*). Os dados brutos de equilíbrio termodinâmico foram extraídos do banco de dados *NIST/ARPA-E Database of Novel and Emerging Adsorbent Materials* (SRD 205) (Siderius, 2016), correspondentes às isotermas de adsorção do estudo de Zukal et al. (2013) para a sílica SBA-15 pura e funcionalizada com MgO e K₂CO₃, cujas propriedades texturais encontram-se na tabela 1.

Tabela 1. Propriedades texturais das sílicas.

	MgO (mg/g)	K ₂ CO ₃ (mg/g)	S _{BET} (m ² /g)	V _{me} (cm ³ /g)	D _{me} (nm)
SBA-15	0	0	660	1,03	10,2
Mg-SBA-15	38	0	464	0,65	9,2
Mg-K-SBA-15	38	43	257	0,49	8,7

Sob a ótica do aprendizado estatístico, a modelagem da adsorção de CO₂ foi tratada como um problema de aprendizado supervisionado focado em regressão, utilizando sete preditores (*inputs*) principais para o treinamento da RNA: temperatura (T), pressão (P); e descritores texturais intrínsecos: área superficial BET (S_{BET}), volume (V_{me}) diâmetro de mesoporos (D_{me}) e as frações mássicas dos modificadores MgO e K₂CO₃.

A variável de resposta (*output*) do modelo foi a capacidade adsorativa de CO₂ (Q_{ads}). Devido à disparidade entre as ordens de grandeza física dos parâmetros, aplicou-se o pré-processamento via normalização linear, reescalando o dataset para o intervalo de [-1,1]. Este reescalamento é mandatório para evitar a saturação prematura das funções de ativação, garantindo que cada preditor contribua equitativamente para o ajuste dos pesos sinápticos e para a convergência matemática do gradiente de erro (Silva et al., 2016; James et al., 2023).

Estruturação da arquitetura e particionamento

A arquitetura computacional baseada em Redes do tipo MLP foi programada e simulada no ambiente MATLAB (R2025a), conforme Figura 2.

Para garantir uma avaliação rigorosa da capacidade preditiva do modelo e extinguir qualquer risco de vazamento de dados, o particionamento ocorreu em duas fases estritas. Inicialmente, conjuntos correspondentes a duas isotermas integrais foram

intencionalmente separados do *dataset* global, formando um conjunto de simulação cega.

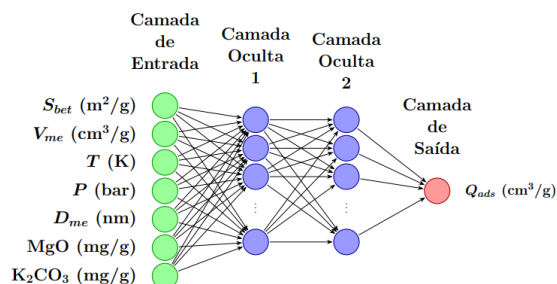


Figura 2. Representação esquemática da Rede Neural Artificial experimental

A exclusão de curvas inteiras, e não de pontos aleatórios, assegura que a rede não tenha qualquer acesso prévio ao comportamento termodinâmico daquelas condições específicas durante o ajuste de pesos. Posteriormente, o restante dos dados foi particionado aleatoriamente em subconjuntos de treinamento (70%), validação (15%) e teste (15%). A avaliação final de acurácia foi executada exclusivamente contra o conjunto cego, atestando o real poder de generalização interpolativa do modelo.

Otimização topológica e algoritmos de treinamento

A metodologia consistiu em testar diversas topologias distintas, variando o número de neurônios na camada intermediária de 1 a 30 neurônios. Nas camadas intermediárias, foram avaliadas 5 funções de ativação diferentes, como a tangente hiperbólica (tansig) (Equação 2), log-sigmoide (logsig) (Equação 3), saturação linear simétrica (satlins) (Equação 4), base radial (radbas) (Equação 5) e linear (purelin) (Equação 6), enquanto a camada de saída utilizou a função tansig e purelin, que são adequadas para problemas de regressão contínua.

$$\text{tansig}(n) = \frac{2}{1 + e^{-2n}} \quad (2)$$

$$\text{logsig}(n) = \frac{1}{1 + e^{-n}} \quad (3)$$

$$\text{satlins}(n) = \begin{cases} -1, & \text{se } x \leq -1 \\ x, & \text{se } -1 < x < 1 \\ 1, & \text{se } x \geq 1 \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{radbas}(n) = e^{-n^2} \quad (5)$$

$$\text{purelin}(n) = n \quad (6)$$

Para o ajuste iterativo, foram confrontados 6 algoritmos de treino: conjugado com reinícios de Powell-Beale (traincgb), Levenberg-Marquardt (trainlm), Levenberg-Marquardt com regularização Bayesiana (trainbr), retropropagação por gradiente

descendente com momento e taxa de aprendizado adaptativo (*traingdx*), retropropagação resiliente (*trainrp*) e gradiente conjulgado escalonado (*trainscg*).

O desempenho e o erro de simulação das topologias geradas foram medidos prioritariamente através da minimização da Função Objetivo (F_{obj}), conforme Equação 7, representada pelo Erro Quadrático Médio (MSE). A avaliação da acurácia e do desvio do modelo foi mensurada por meio do Erro Percentual Absoluto Médio (MAPE), expresso pela Equação 8.

$$F_{obj} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_{RNA} - y_{exp})^2 \quad (7)$$

sendo, n = número total de observações; y_{RNA} = valor previsto; y_{exp} = valor experimental.

$$MAPE (\%) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{y_{exp} - y_{RNA}}{y_{exp}} \right| \times 100 \quad (8)$$

A validação final e a escolha do melhor modelo neural basearam-se na média aritmética (Equação 9) entre os erros percentuais das diferentes etapas de treino, validação, teste e de simulação. Essa estratégia foi adotada visando minimizar a variação do erro entre as etapas.

$$\bar{E} = \frac{1}{m} \sum_{j=1}^m MAPE_j \quad (9)$$

sendo, $\bar{E}$ a média dos erros médios; m o número de etapas avaliadas ($m = 4$), e $MAPE_j$ o erro percentual da etapa i .

Para complementar a análise de desempenho, realizou-se uma contagem em relação a todos os treinamentos executados. O objetivo foi avaliar a influência das configurações topológicas nos resultados e investigar a capacidade de aprendizado da rede (baseada no valor global de $\bar{E}$) em relação ao algoritmo de treinamento, à quantidade de neurônios e às funções de ativação das camadas intermediária e de saída.

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Análise do desempenho das RNAs

Neste trabalho, testou-se um conjunto de 1800 configurações de RNAs para correlacionar as variáveis operacionais (temperatura e pressão) e os descritores texturais intrínsecos (S_{BET} , V_{me} , D_{me} , massa de MgO e K_2CO_3) com a capacidade de adsorção de CO_2 . Para garantir robustez na obtenção da melhor configuração, cada rede foi treinada 10 vezes, somando um total de 18000 treinamentos.

A partir disso, foi possível analisar quais parâmetros mais contribuíram para que a rede apresentasse um desempenho preditivo satisfatório. As Tabelas 2 a 5 apresentam a contagem de RNAs em função dos algoritmos de treinamento, funções de ativação e número de neurônios, categorizadas por diferentes faixas de erro.

Tabela 2. Contagem de RNAs em função do algoritmo de treinamento em diferentes intervalos de erro.

Algoritmo de treinamento	E(%)				
	1-2	2-3	3-4	4-5	>5
<i>trainbr</i>	2	436	594	298	1670
<i>traincgb</i>	-	5	111	292	2592
<i>traingdx</i>	-	-	2	17	2981
<i>trainlm</i>	79	718	480	218	1505
<i>trainrp</i>	-	-	31	134	2835
<i>trainscg</i>	-	7	100	250	2643

A partir da Tabela 2, observa-se a distribuição dos erros em função dos algoritmos de otimização. O algoritmo *trainlm* apresentou o melhor desempenho preditivo, sendo o único capaz de gerar 79 estruturas na menor faixa de erro (1-2%), além de concentrar 718 redes na faixa de 2-3%. O algoritmo *trainbr* também demonstrou consistência metodológica, com 2 redes no intervalo de 1-2% e 436 na faixa de 2-3%.

Esse comportamento corrobora os dados da literatura que apontam a eficiência de ambos os algoritmos no tratamento de dados termodinâmicos (MASHHADIMOSLEM; GHAEMI, 2023). Em contrapartida, algoritmos como *traingdx* e *trainrp* não convergiram para erros abaixo de 3% neste domínio.

Tabela 3. Contagem de RNAs em função da função de ativação da camada intermediária em diferentes intervalos de erro.

E(%)	logsig	Purelin	radbas	satlins	tansig
1-2	31	-	19	-	31
2-3	409	-	316	31	410
3-4	396	-	445	96	381
4-5	309	-	447	115	338
>5	2455	3600	2373	3358	2440

Na Tabela 3, evidencia-se o desempenho das funções de ativação na camada intermediária. As funções *logsig* e *tansig* apresentaram as maiores frequências

de sucesso, concentrando 31 estruturas cada no intervalo de menor erro (1-2%), seguidas de perto pela função *radbas*, com 19 estruturas. As demais funções avaliadas não geraram redes com desvios inferiores a 2%.

Tabela 4. Contagem de RNAs em função da função de ativação na camada de saída em diferentes intervalos de erro.

E(%)	purelin	tansig
1-2	81	-
2-3	900	266
3-4	719	599
4-5	828	381
>5	6472	7754

A Tabela 4 destaca a influência da camada de saída. A aplicação da função *purelin* demonstrou ser fundamental para o alcance da alta precisão, contabilizando 81 redes com erro entre 1-2% e 900 redes entre 2-3%. Por outro lado, o uso da função *tansig* na camada de saída limitou a convergência, não gerando nenhuma estrutura na faixa de erro inferior a 2%.

A partir dos resultados apresentados na Tabela 5, é possível visualizar a tendência do aumento da precisão da rede conforme o aumento do número de neurônios na camada oculta. Observando as contagens de erro, nota-se que estruturas muito simples, contendo de 1 a 3 neurônios, apresentam baixo desempenho, concentrando todos os seus resultados na faixa de erro mais alta (> 5%). Erros intermediários começam a aparecer a partir de 4 neurônios, no entanto, as redes com a mais alta precisão, alcançando erros na faixa de 1% a 2%, são evidenciadas apenas a partir de 9 neurônios na camada intermediária. As maiores incidências de sucesso nessa menor faixa de erro ocorreram em topologias maiores, como as de 14, 20, 21 e 27 neurônios. Portanto, em geral, a relação observada mostra que, para mapear a complexidade da adsorção de CO₂ com alta fidelidade, é necessário o uso de uma rede com uma quantidade maior de neurônios em sua camada oculta.

Seleção da melhor arquitetura

A partir do cálculo da média aritmética dos erros nas etapas de treino, teste e validação, foram estabelecidas as quatro melhores RNAs do estudo, apresentadas na Tabela 6.

A arquitetura ótima eleita neste trabalho (RNA 1) apresentou topologia 7-17-1, treinada via *trainlm* com a mescla de funções *radbas* e *purelin*. Esta

topologia obteve um MAPE de simulação de 2,51%, aliado a uma função objetivo de treinamento de $2,42 \times 10^{-2}$. A alta aderência desta rede aos dados experimentais, evidenciada na Figura 3, atesta que o modelo é capaz de reproduzir o comportamento termodinâmico da captura de CO₂ nas sílicas avaliadas.

Tabela 5. Contagem de RNAs em função do número de neurônios em diferentes intervalos de erro.

Nº Neurônios	Erro (%)				
	1-2	2-3	3-4	4-5	>5
1	-	-	-	-	600
2	-	-	-	-	600
3	-	-	-	-	600
4	-	-	1	4	595
5	-	1	19	30	550
6	-	15	31	38	516
7	-	27	38	33	502
8	-	43	46	33	478
9	1	45	44	30	480
10	1	53	51	31	464
11	1	55	46	34	464
12	2	45	60	38	455
13	1	39	50	58	452
14	5	58	40	40	457
15	2	47	47	45	459
16	5	44	49	48	454
17	1	58	46	42	453
18	5	49	54	43	449
19	4	47	58	51	440
20	5	48	60	53	434
21	5	53	56	44	442
22	6	47	61	42	444
23	5	49	61	50	435
24	2	46	50	66	436
25	5	49	60	50	436
26	3	49	67	60	421
27	8	49	59	51	433
28	2	46	62	66	424
29	6	50	53	59	432
30	6	54	49	70	421

Para além da precisão numérica alcançada (MAPE de 2,51%), o diferencial metodológico da arquitetura 7-17-1 reside na sua formulação estrutural. Ao contrário dos modelos empíricos clássicos de isotermas, a RNA desenvolvida incorpora diretamente as características texturais do sólido

(S_{BET} , V_{me} , D_{me}) e a fração dos modificadores (MgO, K_2CO_3) como variáveis independentes. Essa capacidade de aprendizado unificado permite modelar o fenômeno adsorptivo de forma integrada, correlacionando a física do material com as condições operacionais em um único espaço latente.

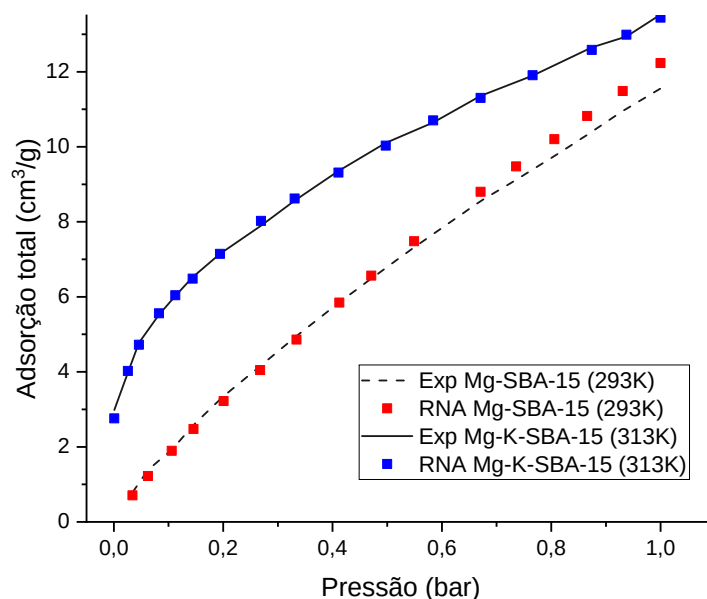


Figura 3. Comportamento preditivo das duas melhores RNAs treinadas.

Tabela 6. Resultados obtidos para as 4 melhores RNAs

	Algoritmo de Otimização	Funções de ativação Intermediária - Saída	Estrutura RNA	E(%) Simulação	F _{obj} Treino	Média dos Erros ($\bar{E}$)
1	trainlm	radbas-purelin	7-17-1	2,51	$2,42 \times 10^{-2}$	1,73
2	trainlm	logsig-purelin	7-16-1	2,97	$2,18 \times 10^{-2}$	1,76
3	trainlm	radbas-purelin	7-26-1	2,93	$2,73 \times 10^{-2}$	1,81
4	trainlm	tansig-purelin	7-28-1	2,92	$2,87 \times 10^{-2}$	1,96

CONCLUSÃO

O uso de Redes Neurais Artificiais provou ser uma metodologia eficiente, não linear e de precisão elevada para prever a capacidade de adsorção de CO_2 em sílicas mesoporosas SBA-15 modificadas. A avaliação topológica determinou que a arquitetura ideal (7-17-1), acoplada ao algoritmo de Levenberg-Marquardt e ao uso integrado das funções de ativação de *radbas* em sua camada intermediária e *purelin* na camada de saída, atinge desvios preditivos de 2,51%. A unificação de preditores texturais com as variáveis de estado supera uma limitação estrutural crônica dos modelos clássicos de isotermas, que são incapazes de utilizar as propriedades intrínsecas do sólido como variáveis de entrada e exigem parametrizações individuais para cada adsorvente. Dessa forma,

consolida-se a rede *feedforward* como uma ferramenta computacional robusta e confiável. A capacidade de incorporar as características do material diretamente na modelagem permite mapear o envelope termodinâmico operacional de forma integrada, mitigando a dependência empírica e viabilizando simulações precisas para processos de captura de carbono.

REFERENCIAS

- AL-GHOUTI, M. A.; DA'ANA, D. A. Guidelines for the use and interpretation of adsorption isotherm models: A review. **Journal of Hazardous Materials**, [S.l.], v. 393, p. 122383, 2020.
- JAMES, G. et al. **An Introduction to Statistical Learning: with Applications in Python**. [S.l.]: Springer Nature, 2023.

- KHOSROWSHAHI, M. S. et al. Recent progress on advanced solid adsorbents for CO₂ capture: From mechanism to machine learning. **Materials Today Sustainability**, [S.l.], v. 27, p. 100900, 2024.
- KUMAR, A.; MADDEN, D. G.; LUSI, M.; CHEN, K. J.; DANIELS, E. A.; CURTIN, T.; PERRY, J. J.; ZAWOROTKO, M. J. Direct air capture of CO₂ by physisorbent materials. **Angewandte Chemie International Edition**, [S.l.], v. 54, p. 14372–14377, 2015.
- LASKOWSKI, Ł.; LASKOWSKA, M.; VILA, N.; SCHABIKOWSKI, M.; WALCARIUS, A. Mesoporous Silica-Based Materials for Electronics-Oriented Applications. **Molecules**, [S.l.], v. 24, p. 2395, 2019.
- LEE, S.-Y.; PARK, S.-J. A review on solid adsorbents for carbon dioxide capture. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, [S.l.], v. 23, p. 1-11, 2015.
- MARTINS, T. D. **Predição da recorrência de tromboembolismo venoso via redes neurais artificiais**. 2018. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2018.
- MASHHADIMOSLEM, H.; GHAEMI, A. Machine Learning Analysis and Prediction of N₂, N₂O, and O₂ Adsorption on Activated Carbon and Carbon Molecular Sieve. **Environmental Science and Pollution Research**, [S.l.], v. 30, p. 4166–4186, 2023.
- OMODARA, L. et al. CO₂ capture using solid sorbents: Fundamental aspects, mechanistic insights and recent advances. **Journal of Environmental Management**, [S.l.], v. 345, p. 118490, 2023.
- PANDA, D.; KULKARNI, V.; SINGH, S. K. Evaluation of amine-based solid adsorbents for direct air capture: a critical review. **Reaction Chemistry & Engineering**, [S.l.], v. 8, p. 10-35, 2023.
- RAJENDRAN, A. et al. How Can (or Why Should) Process Engineering Aid the Screening and Discovery of Solid Sorbents for CO₂ Capture? **Accounts of Chemical Research**, [S.l.], v. 56, p. 2354-2365, 2023.
- ROSTAMI, A.; MALEKI, M.; KHAZOEI, K.; HAGHIGHI, M. Accurate estimation of CO₂ adsorption on activated carbon with multi-layer feed-forward neural network (MLFNN) algorithm. **Egyptian Journal of Petroleum**, [S.l.], v. 27, p. 65-73, 2018.
- SIDERIUS, D. W. NIST/ARPA-E Database of Novel and Emerging Adsorbent Materials. **NIST Standard Reference Database 205**, [S.l.], 2016.
- SILVA, I. N.; SPATTI, D. H.; FLAUZINO, R. A. **Redes Neurais Artificiais para engenharia e ciências aplicadas**. 2. ed. São Paulo: Artliber Editora, 2016.
- SINGH, J.; BHUNIA, H.; BASU, S. CO₂ adsorption on oxygen enriched porous carbon monoliths: kinetics, isotherm and thermodynamic studies. **Journal of Industrial and Engineering Chemistry**, [S.l.], v. 60, p. 321-332, 2018.
- UNVEREN, E. E.; MONKUL, B. O.; SARIOGLAN, S.; KARADEMIR, N.; ALPER, E. Solid Amine Sorbents for CO₂ capture by chemical adsorption: A review. **Petroleum**, [S.l.], v. 3, p. 37-50, 2017.
- WANG, J.; GUO, X. Adsorption Isotherm Models: Classification, Physical Meaning, Application and Solving Method. **Chemosphere**, [S.l.], v. 258, 2020.
- ZHANG, G.; ZHAO, P.; XU, Y.; LV, Y. Amine-modified SBA-15(P): A promising adsorbent for CO₂ capture. **Journal of CO₂ Utilization**, [S.l.], v. 24, p. 22-33, 2018.
- ZHANG, Z.; SCHOTT, J. A.; LIU, M.; CHEN, H.; LU, X.; SUMPTER, B. G.; FU, J.; DAI, S. Prediction of Carbon Dioxide Adsorption via Deep Learning. **Angewandte Chemie International Edition**, [S.l.], v. 58, n. 1, p. 265-269, 2019.
- ZUKAL, A.; PASTVA, J.; ČEJKA, J. MgO-modified mesoporous silicas impregnated by potassium carbonate for carbon dioxide adsorption. **Microporous and Mesoporous Materials**, [S.l.], v. 167, p. 44-50, 2013.