

OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS TERMOQUÍMICOS DE CONVERSÃO DE BIOMASSAS LIGNOCELULÓSICAS

Palavras-Chave: BIOMASSA, OTIMIZAÇÃO MULTI OBJETIVO, GASEIFICAÇÃO

Autores(as):

FELIPE GONÇALVES DOS SANTOS, FEM – UNICAMP

Prof^(a). Dr^(a). YULLE G. F. BORGERS, FEM - UNICAMP

Prof^(a). Dr^(a). INGRID LOPES MOTTA, FEM - UNICAMP

INTRODUÇÃO:

Biocombustíveis são uma ótima alternativa aos combustíveis fósseis para combater os fenômenos nocivos da mudança climática (Intergovernmental Panel on Climate Change (IPCC), 2023). Eles podem ser produzidos por processos termoquímicos como a gaseificação, processo no qual uma biomassa pode ser degradada em compostos químicos menores capazes de produzir diferentes produtos de alta energia, sendo o principal deles o gás de síntese, composto principalmente por H_2 , CO_2 , CH_4 e CO (Griffin; Schultz, 2012).

Há, porém, dificuldades no projeto de um gaseificador ideal para produção de biocombustível, visto que a composição do gás de síntese é sensível aos parâmetros de operação. Por exemplo, para obter uma maior composição de H_2 é necessário a injeção de vapor d'água, o que por sua vez diminui a eficiência do gás frio (Motta et al., 2019). Desse modo, o gaseificador não pode ser projetado com base em uma otimização com apenas um objetivo como foco, necessitando da análise de múltiplos objetivos simultaneamente.

Assim, esse trabalho tem como foco desenvolver uma otimização multiobjetivo de um processo de gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar a fim de encontrar parâmetros operacionais ideais para obter correntes de gás de síntese adequadas para produção de biocombustíveis, focando principalmente na maximização da composição de H_2 e eficiência do gás frio (CGE), bem como minimização da composição de CO_2 , para a produção de biocombustíveis por meio de processo de Fischer-Tropsch.

METODOLOGIA:

- Simulação de Gaseificação

A simulação de gaseificação foi reproduzida no software Aspen Plus™ v.10 com base no trabalho de Motta et al., (2022). Nela, o gaseificador é modelado como um leito fluidizado seguindo o método de minimização da energia livre de Gibbs e adoção de restrições ao restrito. A Figura 1 representa o fluxograma do processo, em que o bagaço é injetado a 25°C, seco e por fim gaseificado a altas temperaturas na presença de uma mistura de vapor d'água injetado em proporções baseadas na injeção de biomassa.

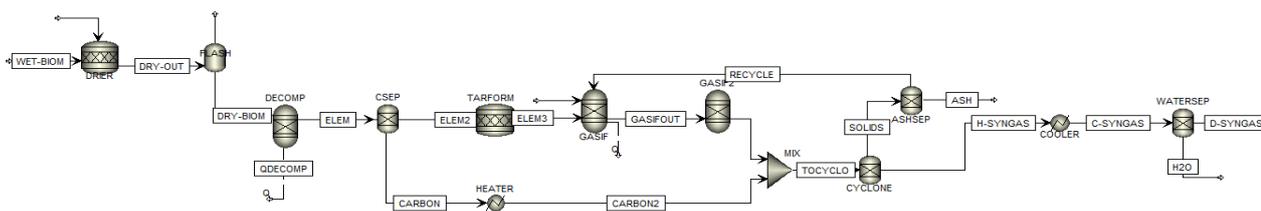


Figura 1: Fluxograma da simulação no Aspen Plus™

- Otimização multiobjetivo

A otimização multiobjetivo foi implementada em Python 3.2, usando o algoritmo NSGA-II (“pymoo - NSGA-II: Non-dominated Sorting Genetic Algorithm”, [S.d.]) do pacote open-source pymoo 0.6.1.3 (“pymoo: Multi-objective Optimization in Python”, [S.d.]). No código, foram escritos modelos matemáticos que representam a composição de H₂ e CO₂ em volume do gás de síntese, bem como CGE com base nos parâmetros de operação de temperatura (T) e razão de vapor biomassa (SB). Esses modelos foram obtidos por meio da técnica de planejamento experimental e utilizando método de mínimos quadrados, conforme trabalho de Motta et al. (2022).

O foco da otimização foi maximizar os valores de H₂ e CGE, e minimizar os valores de CO₂ restritos a dois intervalos diferentes de H₂/CO. O primeiro intervalo varia de 2,0 até 2,3, escolhido com base no processo real em que há flexibilidade para essarazão, enquanto o segundo intervalo varia de 2,149 até 2,151 a fim de aproximar as soluções encontradas para uma razão próxima de 2,15. Ademais, os intervalos de operação para T e SB variam de 750°C a 950°C e 0,5 até 1,5, respectivamente. Os problemas são formulados matematicamente conforme:

Intervalo maior

$$\max \quad H_2 = -111.682 + 0.146T + 14.676SB$$

$$CGE = 79.369 + 0.004T - 9.513SB$$

$$\min \quad CO_2 = 116.661 - 0.099T + 0.232SB$$

$$s. t. \quad 2.0 \leq H_2/CO \leq 2.3$$

$$750 \leq T \leq 950$$

$$0.5 \leq SB \leq 1.5$$

Intervalo menor

$$\max \quad H_2 = -111.682 + 0.146T + 14.676SB$$

$$CGE = 79.369 + 0.004T - 9.513SB$$

$$\min \quad CO_2 = 116.661 - 0.099T + 0.232SB$$

$$s. t. \quad 2.149 \leq H_2/CO \leq 2.151$$

$$750 \leq T \leq 950$$

$$0.5 \leq SB \leq 1.$$

- Multi-Criteria Decision Making (MCDM)

Com os resultados da otimização obtidos foi implementado um algoritmo de MCDM no código para determinar a solução ideal para ambos os problemas (“pymoo - Multi-Criteria Decision Making (MCDM)”, [S.d.]). O método escolhido foi o compromisso programming, em que diferentes pesos são atribuídos para cada objetivo. Assim, três casos foram criados: o primeiro com foco no hidrogênio, aplicando o peso 2 a ele; o segundo com foco tanto no hidrogênio quanto no CGE aplicando pesos 2 a ambos; e por fim um último caso com foco apenas no CGE, aplicando também um peso 2.

Tabela 1: Casos de MCDM

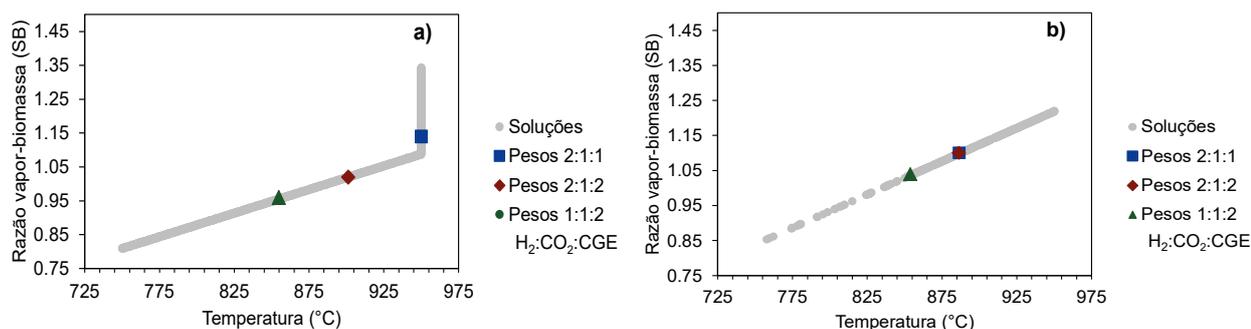
Objetivos	Pesos		
	Caso 1	Caso 2	Caso 3
H ₂	2	2	1
CO ₂	1	1	1
CGE	1	2	2

RESULTADOS E DISCUSSÃO:

A Figura 2 apresenta as soluções obtidas da otimização multiobjetivo para os dois intervalos de H₂/CO, o maior à esquerda de 2,0-2,3 e o menor à direita de 2,149-2,151. Apesar das soluções aparecerem em gráficos de linhas elas não são de fato linhas, mas sim as várias soluções encontradas próximas umas das outras. As soluções do MCDM também estão destacadas, em que o azul escuro apresenta a solução do primeiro caso (proporções 2:1:1 para H₂:CO₂:CGE), o vermelho escuro o segundo (2:1:2), e o verde escuro o terceiro caso (1:1:2).

Comparando os dois intervalos, nota-se que as soluções do intervalo maior são diferentes das soluções obtidas para o intervalo menor, tanto em valor quanto em formato obtido nos gráficos. Apesar de possuírem soluções nos mesmos intervalos, as soluções do intervalo menor estão concentradas para valores maiores de H₂ e T, e valores menores para CO₂ e CGE. Além disso, o MCDM para o intervalo menor indicou os mesmos valores para os casos 1 e 2, devido ao fato que as soluções de CGE variam em um intervalo muito menor para essa restrição.

Em geral, ambos os casos mostram que são necessários altas temperaturas e injeção de vapor d’água para maximizar H₂, e que isso já implica em minimizar CO₂, o que torna desnecessário a atribuição de pesos para o CO₂ no MCDM. Em contrapartida, para maximizar CGE são necessárias baixas temperaturas e baixa injeção de vapor, o que conseqüentemente resulta em menos H₂ e mais CO₂. Porém, maximizar H₂ não possui impactos tão negativos para o CGE, visto que sua variação é muito pequena.



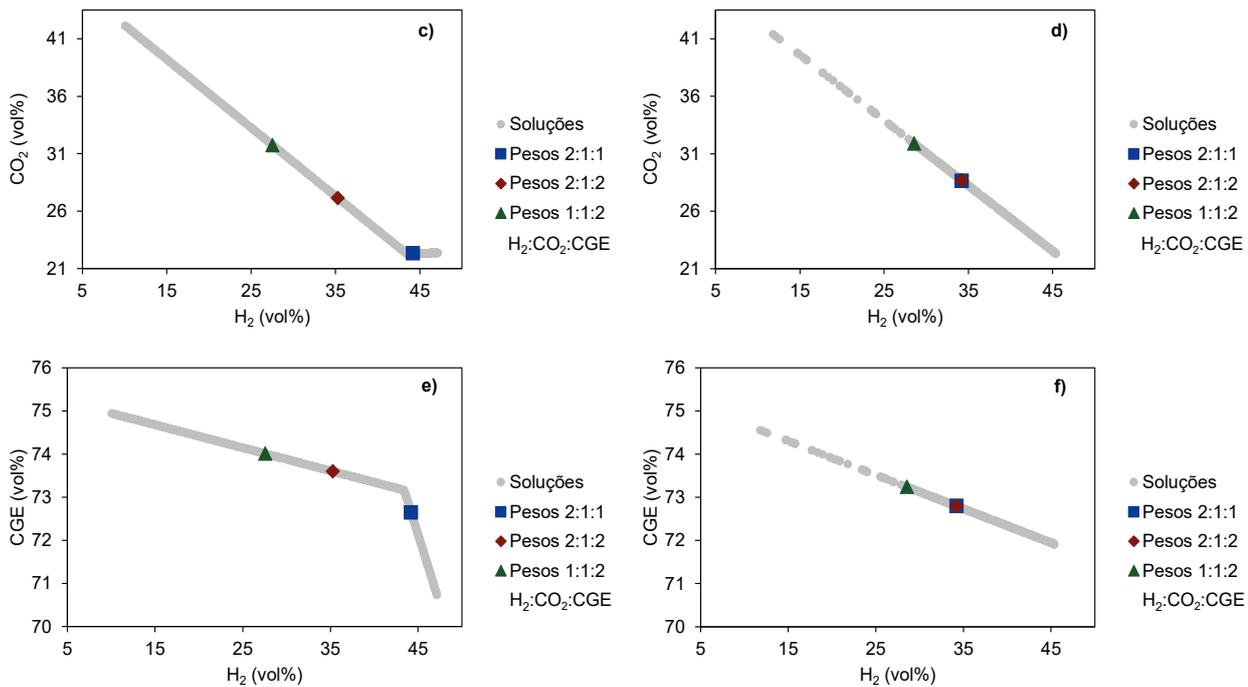


Figura 2: Soluções da otimização para os intervalos de H_2/CO , com o maior (2,0-2,3) à esquerda, e o menor (2,149-2,151) à direita

A Tabela 2 mostra as melhores soluções obtidas pelo MCDM para os dois intervalos. Nota-se que em ambos, tanto H_2 quanto CO_2 possuem variações maiores em seus valores do que CGE. Ademais, a maioria dos casos aproxima-se ao limite do intervalo de restrição de H_2/CO , exceto o primeiro caso do intervalo maior, em que a razão é igual a 2,06 devido ao foco em uma produção maior de H_2 . A diferença entre os intervalos, além das soluções diferentes, é que as soluções do intervalo maior variam mais quando comparados às soluções do intervalo menor, como o H_2 que varia de 44,22 até 27,56% no intervalo maior, enquanto H_2 do intervalo menor varia de 34,25 até 28,56%. O mesmo comportamento se observa para os resultados de CO_2 e CGE, e dos parâmetros de T e SB.

Tabela 2: Parâmetros operacionais e conteúdo de gás de síntese obtidos para cada cenário de ambos os intervalos analisados

Parâmetros	Intervalo maior			Intervalo menor		
	Caso 1 2:1:1	Caso 2 2:1:2	Caso 3 1:1:2	Caso 1 2:1:1	Caso 2 2:1:2	Caso 3 1:1:2
T (°C)	950,00	901,17	854,87	886,43	886,06	853,73
SB	1,14	1,02	0,96	1,10	1,10	1,04
H_2 (vol%)	44,22	35,27	27,56	34,25	34,19	28,56
CO_2 (vol%)	22,33	27,16	31,75	28,65	28,69	31,89
CGE (%)	72,64	73,60	74,01	72,79	72,79	73,24
H_2/CO	2,06	2,00	2,00	2,15	2,15	2,15

CONCLUSÕES:

A pesquisa resultou em uma otimização multiobjetivo de um processo de gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar para achar os parâmetros de operação ideais para obter uma corrente de gás de síntese adequada para a produção de biocombustíveis. A otimização consistiu em maximizar H_2 da corrente de gás de síntese e sua eficiência de gás frio (CGE), e minimizar CO_2 da mesma corrente, restritos a dois diferentes intervalos de H_2/CO , um maior (2,0-2,3) que replica uma flutuação de um cenário real, e outro menor (2,149-2,151) para aplicações mais controladas. Além disso, foi implementada uma análise de *multi-criteria decision making* (MCDM) para selecionar as melhores soluções com base em diferentes pesos atribuídos aos objetivos.

Assim, foi encontrado que uma maior produção de H_2 e menores emissões de CO_2 necessitam de altas temperaturas e maiores injeções de vapor d'água, enquanto maior CGE requer o oposto. Entretanto, apesar de H_2 e CGE seguirem direções opostas, a variação de CGE acaba sendo muito pequena em comparação à dos outros objetivos. A análise do MCDM comprova essas observações, visto que quando os pesos são atribuídos de modo a focar em hidrogênio, a temperatura e a injeção de vapor são maiores, enquanto em casos de foco em CGE, os parâmetros são menores. Vale ressaltar que as soluções encontradas para o maior intervalo de H_2/CO são diferentes das soluções do menor intervalo dessa razão.

BIBLIOGRAFIA

GRIFFIN, Derek W.; SCHULTZ, Michael A. Fuel and Chemical Products from Biomass Syngas: A Comparison of Gas Fermentation to Thermochemical Conversion Routes. 2012.

INTERGOVERNMENTAL PANEL ON CLIMATE CHANGE (IPCC). Key Risks across Sectors and Regions. **Climate Change 2022 – Impacts, Adaptation and Vulnerability**, p. 2411–2538, 29 jun. 2023.

MOTTA, Ingrid Lopes *et al.* Sugarcane bagasse gasification: Simulation and analysis of different operating parameters, fluidizing media, and gasifier types. **Biomass and Bioenergy**, v. 122, p. 433–445, 1 mar. 2019.

MOTTA, Ingrid Lopes *et al.* Correlating biomass properties, gasification performance, and syngas applications of Brazilian feedstocks via simulation and multivariate analysis. **Industrial Crops and Products**, v. 181, 1 jul. 2022.

pymoo - Multi-Criteria Decision Making (MCDM). Disponível em: <<https://pymoo.org/mcdm/index.html>>. Acesso em: 1 jun. 2025.

pymoo - NSGA-II: Non-dominated Sorting Genetic Algorithm. Disponível em: <<https://pymoo.org/algorithms/moo/nsga2.html>>. Acesso em: 1 jun. 2025.

pymoo: Multi-objective Optimization in Python. Disponível em: <<https://pymoo.org/index.html>>. Acesso em: 1 jun. 2025.