



USO DE MODELAGEM COMPUTACIONAL APLICADA A INDUSTRIA DE BIOMASSA

¹ Jorge Lepikson Neto (Instituto Senai de inovação em Biomassa) – jlepikson@ms.senai.br; ² José Paulo Castilho (Instituto Senai de Inovação em Biomassa) – jpcosta@ms.senai.br; ³ Carolina Maria Machado de Carvalho Andrade (Instituto Senai de Inovação em Biomassa) – candrade@ms.senai.br

Resumo: O presente trabalho contém exemplos de modelagem matemática utilizados para avaliação de processos na Indústria de Biomassa, modelos teóricos e/ou validados com dados de unidades operacionais, contribuindo para o estudo de viabilidade técnico-econômica de processos químicos e bioquímicos. Foram utilizados softwares “simples” (planilha eletrônica) ou específicos.

Palavras-Chaves: Biomassa; Madeira; Lignina; Combustão; Pirólise

USE OF COMPUTATIONAL MODELING APPLIED TO THE BIOMASS INDUSTRY

Abstract: The present work contains examples of mathematical modeling used to evaluate processes in the Biomass Industry, theoretical models and / or validated with data from operational units, contributing to the study of the technical and economic feasibility of chemical and biochemical processes. "Simple" (spreadsheet) or specific softwares were used.

Keywords: Biomass; Wood; Lignin; Combustion; Pyrolysis



1. INTRODUÇÃO

Por muitos anos, a utilização do petróleo parecia ser uma solução segura para suprir a demanda de energia. No entanto, fatores como o rápido crescimento industrial e econômico da sociedade, aliados aos impactos ambientais dos combustíveis fósseis, impulsionaram a busca por energia mais limpa e sustentável. Deste modo, países concentram maiores esforços para desenvolvimento de energias alternativas [1].

Na 21ª Conferência das Partes (COP21) para a UNFCCC (*United Nations Framework Convention on Climate Change*) em Paris, foi adotado um novo acordo com o objetivo principal de fortalecer a resposta global à ameaça das mudanças climáticas e fortalecer a capacidade dos países para lidar com os impactos de tais mudanças. O Brasil comprometeu-se a reduzir os níveis de emissões de gases de efeito estufa em 37% em 2025, com um contributo indicativo subsequente de redução de 43% em 2030. Portanto, o Brasil está pressionado para aumentar sua participação de bioenergia sustentável, aumentando a matriz de energia para aproximar 18% em 2030 [2].

O uso dos biocombustíveis tem papel central na redução da utilização dos combustíveis fósseis [3]. A produção de biocombustíveis a partir de biomassa lignocelulósica (celulose, hemicelulose e lignina), tem sido uma alternativa de grande interesse, não apenas ambiental, mas também econômico. Um dos grandes interesses no etanol de segunda geração, por exemplo, está conectado com o fato de que a matéria prima utilizada, não concorre com a produção e demanda alimentícia [4].

A biomassa lignocelulósica varia em composição, dependendo da sua composição, localidade, condições climáticas e do solo onde cresce. Esta matéria prima geralmente é composta de 35-55% de celulose, 20-40% de hemicelulose e 10-25% de lignina. A composição de açúcar (pentose e hexose) determina o rendimento teórico na produção de etanol [5]. No entanto, a complexidade da estrutura dessas moléculas é um dos principais desafios na sua utilização. A dificuldade no processamento da biomassa está relacionada à recalcitrância à degradação, devido à lignificação da parede celular vegetal [6]. As interações entre todos esses parâmetros permitem que esta possa ser considerada um recurso energético economicamente eficiente [7].

A partir de dados da composição da biomassa (% de celulose, % de hemicelulose) pode-se avaliar o rendimento da etapa de desconstituição da biomassa e obtenção de açúcares (C5 e C6) em função de variáveis como pH, temperatura (T), pressão (p) e tempo de digestão (t). É igualmente importante a determinação da concentração de inibidores do processo de fermentação formados nesta etapa. Um critério para a definição da melhor condição da etapa de desconstituição da biomassa é o rendimento da etapa de fermentação dos açúcares para obtenção do(s) produto (s) de interesse.



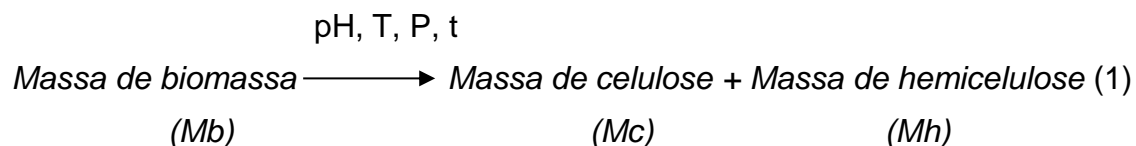
Há no mercado vários softwares para simulação de processos. Em alguns casos, para avaliações iniciais, planilhas eletrônicas podem ser o suficiente para cálculo de rendimentos e avaliação preliminar da viabilidade técnico econômica.

2. METODOLOGIA

O modelo matemático abaixo ilustra o uso de balanço de massa para avaliar os rendimentos e produtividades.

Simplificadamente, tem-se:

1. Na hidrólise:



Rendimentos:

$$\eta = Mc \text{ obtido} / Mc \text{ teórico}$$

$$\eta = Mh \text{ obtido} / Mh \text{ teórico}$$

$$\eta = C6 \text{ obtido} / C6 \text{ teórico}$$

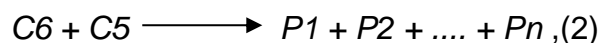
$$\eta = C5 \text{ obtido} / C5 \text{ teórico}$$

Produtividade:

$$\text{Prod celulose} = Mc/t$$

$$\text{Prod hemicelulose} = Mh/t$$

2. Na fermentação



sendo P o(s) produto(s) de interesse

Rendimentos:

$$\eta = P1/Mb, P2/Mb, \dots, Pn/Mb \quad (3)$$



Produtividade:

$$Prod Pi = Pi/\theta, (4)$$

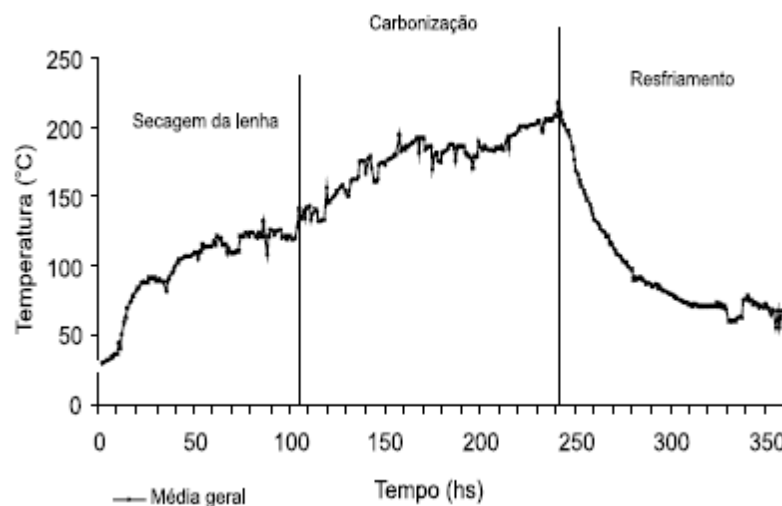
sendo θ o tempo de fermentação

Com base nestas informações é possível uma avaliação preliminar do custo de produção dos produtos e de parte das instalações industriais. O projeto tem prosseguimento com a obtenção de dados cinéticos, modelos de $Mc = Mc(t)$, $Mh = Mh(t)$ e $Pi = Pi(\theta)$, avaliando-se as etapas de purificação (duração e rendimentos), se os resultados forem promissores.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO (TIMES NEW ROMAN / ARIAL 12)

O processo de carbonização pode ser resumido em três fases, a de secagem, a de carbonização e a de resfriamento, sendo o perfil da temperatura de operação do forno ilustrado na figura 1.

Figura 1. Perfil térmico de um forno de carbonização [8].



Na fase de secagem ocorre a desidratação da madeira, com liberação de água.

Durante a carbonização ocorrem diferentes reações que podem ser divididas de acordo com a temperatura de operação do forno:



- 150oC < temperatura < 275 oC: degradação da hemicelulose; eliminação de gases (fase endotérmica)

- 275oC < temperatura < 400 oC: degradação da celulose; grande produção de gases; formação do carvão vegetal (fase exotérmica)

- 400oC < temperatura < 470 oC: redução da emissão de gases; aumento do teor de carbono no carvão vegetal (fase endotérmica)

Na fase de resfriamento o forno é isolado e a temperatura cai lentamente até atingir cerca de 60oC, permitindo a abertura e descarga do mesmo.

Portanto, durante o processo são formados gases em concentrações e proporções diferentes ao longo do tempo. Importante observar que há a formação de compostos condensáveis (alcatrão). Estes compostos poderão se separar da fase gasosa em função da temperatura ambiente e da existência de separadores (ciclones ou outros dispositivos).

Na fase de combustão, os gases produzidos durante a carbonização reagem com oxigênio. Se a combustão for completa, considerando-se a presença de CO, CO₂, CH₄, H₂, H₂O e C_xH_yO_z nos gases, então serão formados CO₂ e H₂O.

Para uma boa combustão, algumas condições devem ser observadas:

Temperatura igual ou superior à temperatura de ignição. A câmara de combustão deve propiciar condições adequadas para que o combustível atinja a temperatura de ignição e para que a combustão seja autossustentada (quando o calor gerado nas reações de oxidação é superior às perdas no processo). Isto é particularmente importante em um processo onde a composição do gás a ser queimado não é constante.

Mistura ou turbulência adequada do ar com o combustível. É necessário que o comburente e o combustível sejam colocados em contato íntimo.

Tempo e espaço suficientes para que ocorra a reação de combustão.

Fornecimento de oxigênio para que ocorra a combustão completa.

Modelo Matemático Carbonização

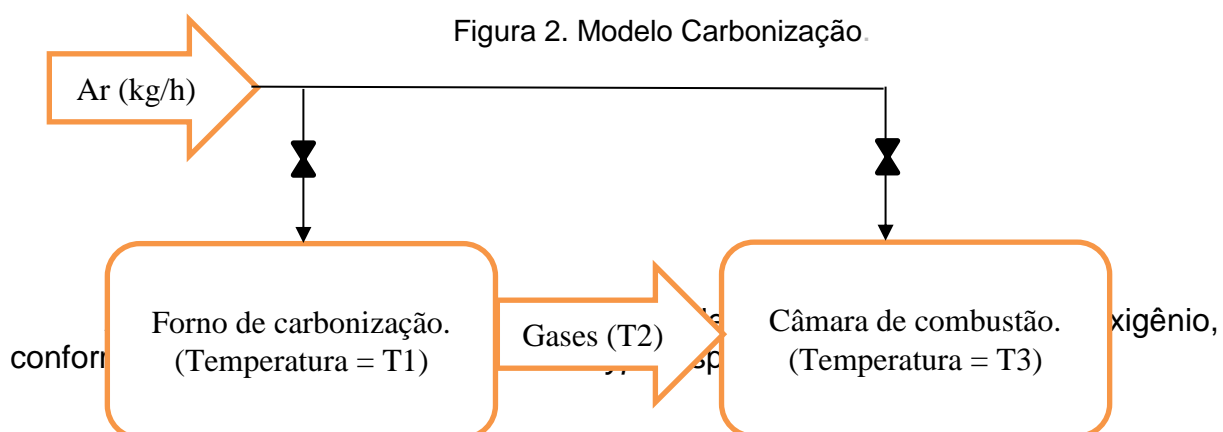


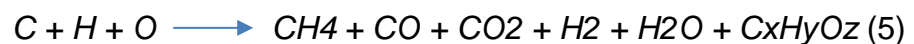


Tabela 1. Análise elementar da madeira de Eucalipto

| | C % | H% | O% | Inorgânicos |
|----------------|------|-----|------|-------------|
| 12 anos | 48,3 | 5,8 | 45,2 | 0,52 |
| 9 anos | 48,4 | 6,5 | 44,8 | 0,31 |
| 7 anos | 48,4 | 5,8 | 45,1 | 0,41 |
| 5 anos | 49,6 | 6,2 | 43,4 | 0,50 |

Portanto os principais produtos gasosos da carbonização são CO, CO₂, CH₄, H₂ e H₂O. A fase condensável será referida como de composição C_xH_yO_z, onde x, y e z variam em função do tempo.

Reação simplificada:



Balanço mássico geral:

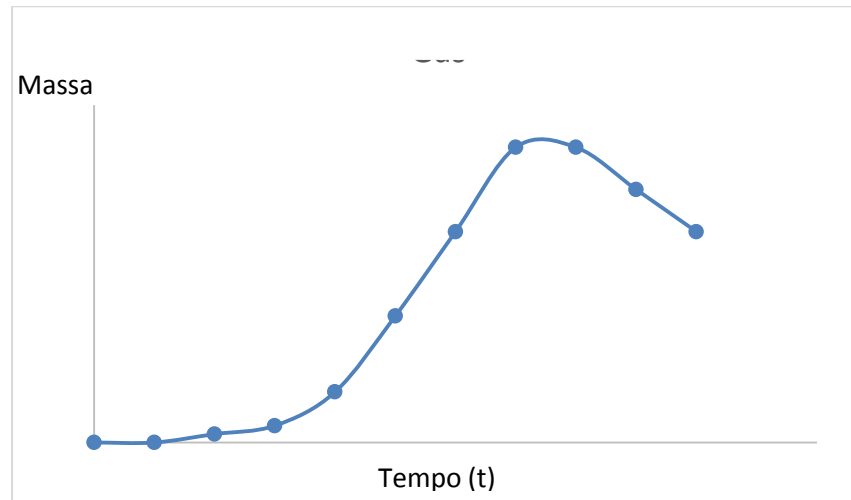
$$-\frac{dC}{dt} - \frac{dH}{dt} - \frac{dO}{dt} = \frac{dCH_4}{dt} + \frac{dCO}{dt} + \frac{dCO_2}{dt} + \frac{dH_2}{dt} + \frac{dH_2O}{dt} + \frac{dC_xH_yO_z}{dt} \quad (6)$$

onde:

- C, H e O é a massa destes elementos presentes na madeira
- CH₄, CO, CO₂, H₂ e H₂O a massa destes compostos (fase gasosa)
- C_xH_yO_z são os condensáveis

A figura 3 ilustra o perfil teórico da porcentagem de um gás durante o processo de carbonização:

Figura 3. Evolução da porcentagem de um componente da fase gasosa ao longo do tempo em um processo de carbonização

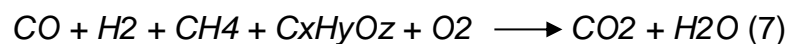


Modelo Matemático Combustão

Balanço de massa:

Matérias primas: CO, H₂, CH₄ e C_xH_yO_z

Reação:



Balanço de energia:

Será calculado por:

$$E = \sum PCI_i * M_i \quad (8)$$

Onde:

E é a energia obtida pela queima dos "i" componentes

PCI_i é o poder calorífico inferior do componente "i"

M é a massa do componente "i"

Rotina de cálculo:

- Determinação da composição dos gases de saída do processo de carbonização e sua temperatura,
- Determinação da massa de cada componente que chega à câmara de combustão e sua temperatura,
- Cálculo da energia teoricamente produzida assumindo-se a queima total de todos os componentes da mistura gasosa,
- Comparação com a energia produzida na unidade em operação.



4. CONCLUSÃO

Os resultados demonstram exemplos de como uma abordagem multidisciplinar abrangente, incluindo a avaliação da matéria prima, cadeia de suprimentos, otimização e engenharia de sistemas de processo, podem ser usados para estimar o custo total de produção de energia, combustível e produtos químicos a partir de vários recursos renováveis.

5. REFERÊNCIAS (ARIAL 12)

¹ KUMAR, P. et al. Recent updates on lignocellulosic biomass derived ethanol - A review. **Biofuel Research journal**, v.3, p. 347-356, 2016.

² VAN SOEST, H. et al. Low-emission pathway in 11 major economies: comparison of cost-optimal pathways and Paris climate proposals. **Climate Change**, v. 142, p. 491-504, 2017.

³ MIZRACHI, E.; MANSFIELD, S. D.; MYBURG, A. A. Cellulose factories: advancing bioenergy production from forest trees. **New Phytologist**, v. 194, n. 1, p. 54-62, 29 abr. 2012.

⁴ SINGH Y.D.; MAHANTA, P.; BORA, U. Comprehensive characterization of lignocellulosic biomass through proximate, ultimate and compositional analysis for bioenergy production. **Renewabl Energy**, v. 103, p. 490-500, 2017.

⁵ IQBAL; I. AHMED, M.A; ZIA, M. IRFAN. Purification and characterization of the kinetic parameters of cellulase produced from wheat straw by *Trichoderma viride* under SSF and its detergent compatibility. **Advances in Bioscience and Biotechnology**, v.2, p. 149-156, 2011.

⁶ SÉGUIN A. How could forest trees play a important role as feedstock for bioenergy production? **Current opinion in Environmental Sustentability**, v. 3, p. 90-94 2011.

⁷ Sumesh Sukumara et al A multidisciplinary decision support tool for evaluating multiple biorefinery conversion technologies and supply chain performance. **Clean Tech Envi. Police**, 2013.

⁸ Tatiana Paula Marques de Arruda , Alexandre Santos Pimenta , Benedito Rocha Vital , Ricardo Marius Della Lucia e Fidel Candano Acosta. **Avaliação de duas rotinas de carbonização em fornos retangulares**. Revista Árvore, Viçosa-MG, v.35, n.4, p.949-955, 2011

⁹ GOMIDE, J. L.; COLODETTE, J. L. Qualidade da madeira. In: BOREM, A. (Ed.) **Biotecnologia florestal**. Viçosa, MG: Universidade Federal de Viçosa, 2007. p.25-54.