UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
CAMPUS UNIVERSITÁRIO DE TUCURUÍ
FACULDADE DE ENGENHARIA MECÂNICA

RYÃ HÁLEF DOS SANTOS SOUZA

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA DE PEQUENA ESCALA UTILIZANDO BIOMASSAS DE CACAU E DENDÊ

TUCURUÍ-PA
2025

RYÃ HÁLEF DOS SANTOS SOUZA

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA DE PEQUENA ESCALA UTILIZANDO BIOMASSAS DE CACAU E DENDÊ

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia Mecânica do Campus Universitário de Tucuruí, como parte dos requisitos para obtenção do título de bacharel em Engenharia Mecânica.

Orientador: Prof. Dr. Jessé Luís Padilha

TUCURUÍ-PA
2025

RYÃ HÁLEF DOS SANTOS SOUZA

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA DE PEQUENA ESCALA UTILIZANDO BIOMASSAS DE CACAU E DENDÊ

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Faculdade de Engenharia Mecânica do Campus Universitário de Tucuruí, como parte dos requisitos para obtenção do título de bacharel em Engenharia Mecânica.

BANCA EXAMINADORA

gov.br Documento assinado digitalmente
JESSE LUIS PADILHA
Data: 22/09/2025 09:25:46-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Orientador: Prof. Dr. Jessé Luís Padilha
FEM/CAMTUC/UFPA

gov.br Documento assinado digitalmente
WASSIM RAJA EL BANNA
Data: 22/09/2025 09:57:25-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br

Membro Interno: Prof. Dr. Wassim Raja El Banna
FEM/CAMTUC/UFPA

Membro Externo: Prof. Dr. Arthur dos Reis Lemos Fontana

Conceito: Exc

Tucuruí, 16 de setembro de 2025.

MODELAGEM MATEMÁTICA DE UM GASEIFICADOR DE BIOMASSA DE PEQUENA ESCALA UTILIZANDO BIOMASSAS DE CACAU E DENDÊ

Ryã Hálef dos Santos Souza

RESUMO

Este trabalho explora a modelagem de um gaseificador de pequena escala que utiliza biomassa derivada de resíduos de cacau e dendê como matéria-prima. Este estudo faz parte da busca por alternativas energéticas mais limpas e sustentáveis, onde a gaseificação de biomassa surge como um processo promissor para o aproveitamento de resíduos orgânicos da região amazônica. A modelagem do equilíbrio químico foi realizada utilizando um modelo matemático implementado em python para um gaseificador do tipo downdraft, onde, para uma faixa de valores de temperatura de gaseificação e razão estequiométrica de ar, os valores de 800 °C e 0,25, respectivamente, influenciaran a obtenção de concentrações superiores a 25% de hidrogênio na fração volumétrica do gás de síntese. Em seguida, foram obtidos gráficos que permitiram descrever o proceso de gaseificação. O modelo permitiu estimar os parâmetros do proceso de gaseificação, tais como o poder calorífico inferior, a eficiencia de conversão de massa, a entalpia de formação do gás seco e a massa do gás seco. Em resumo, este trabalho contribuiu para o campo da bioenergia, oferecendo uma análise detalhada e um modelo adaptado para a gaseificação de biomassa em pequena escala, com foco em resíduos de cacau e dendê, propondo uma solução viável e sustentável para a geração de energia limpa.

Palavras chave: combustível; energia sustentável; gaseificação; meio ambiente; simulação

ABSTRACT

This work explores the modeling of a small-scale gasifier that uses biomass derived from cocoa and palm oil waste as raw material. This study is part of the search for cleaner and more sustainable energy alternatives, where biomass gasification emerges as a promising process for the use of organic waste from the Amazon region. Chemical equilibrium modeling was performed using a mathematical model implemented in Python for a downdraft gasifier, where, for a range of gasification temperature values and stoichiometric air ratio, values of 800 °C and 0.25, respectively, will influence the achievement of concentrations greater than 25% hydrogen in the volumetric fraction of the synthesis gas. Next, graphs were obtained that allowed the gasification process to be described. The model allowed the estimation of gasification process parameters, such as lower heating value, mass conversion efficiency, dry gas formation enthalpy, and dry gas mass. In summary, this work contributed to the field of bioenergy by offering a detailed analysis and a model adapted for small-scale biomass gasification, focusing on cocoa and palm oil residues, proposing a viable and sustainable solution for clean energy generation.

Keywords: fuel; sustainable energy; gasification; environment; simulation

1. INTRODUÇÃO

Nos últimos anos, as alterações climáticas e ambientais causadas pelo uso de fontes de energia poluentes não renováveis tem gerado grande preocupação, onde o uso destas contribuem de forma significante para a emissão de gases de efeito estufa, contribuindo para o aquecimento global e formação de chuvas ácidas, neste contexto a busca por fontes alternativas de energia limpa e amigáveis ao meio ambiente como a biomassa, eólica, solar e geotérmica é uma forte tendência (LUO & CHEN, 2024).

Dentre as citadas a biomassa é uma promissoras fonte de energia, ela pode ser obtida a partir de resíduos orgânicos de atividades agrícolas, resíduos indústrias e domésticos, etc (EMINE et al, 2024). De acordo com Erdiwansyah et al, (2023) a biomassa também é uma fonte neutra em carbono. Como a quantidade de CO_2 liberada durante a decomposição ou a combustão da biomassa já foi previamente absorvida enquanto os organismos estavam vivos, considera-se que a combustão da biomassa não aumenta a quantidade total de CO_2 na Terra, ao contrário do carvão. Devido a esses fatores (a capacidade de se renovar) e (de não liberar mais CO_2 do que foi absorvido) a biomassa torna-se uma fonte atrativa tanto para a produção de energia (gás de síntese) quanto para a obtenção de compostos químicos básicos (FANGFANG et al, 2024). Ela é utilizada em processos de fabricação de biocombustíveis como o bio-óleo e em processos termoquímicos como a gaseificação e a pirólise (MARCELINO, 2017).

De acordo com Bandeira et al. (2023) a gaseificação de biomassa consiste em um processo termoquímico onde é realizada a queima incompleta dos resíduos no reator, gerando gases de grande aproveitamento como CH_4, H_2, CO_2, CO e N_2 que podem ser armazenados ou utilizados diretamente em motores de combustão interna ou em turbinas a gás para a geração de energia elétrica. Além disso a gaseificação é um processo eficaz para a produção de hidrogênio verde, um combustível que será amplamente utilizado nos próximos anos. Existem dos mais variados tipos de reatores para a gaseificação, com diferentes formas construtivas, reatores downdraft, updraft e de leito fluidizado são comumente empregados. Na Europa, América e Canadá, são utilizadas diferentes configurações de reatores nas técnicas de gaseificação. Esses reatores, tanto de leito fluidizado quanto de leito fixo, mostram vantagens em comparação com os gaseificadores de leito fixo convencionais (ERDIWANSYAH et al, 2023).

A modelagem matemática das reações que ocorrem na gaseificação ainda possui problemas em aberto e alguns autores já apresentaram trabalhos bastante inovadores. Basicamente os métodos conhecidos para a modelagem matemática da gaseificação são os seguintes: Via equilíbrio químico, Modelo cinético, dinâmica dos fluidos computacional (CFD) e por redes neurais (MORETTI et al., 2021). O modelo de equilíbrio químico e

termodinâmico prevê o máximo rendimento que um combustível pode fornecer, independente da forma construtiva do gaseificador utilizado, e admite que o sistema se encontra em regime permanente durante seu funcionamento. Mesmo que esta condição não seja alcançada na prática, ela apresenta uma boa aproximação com as condições de operação de um gaseificador do tipo downdraft que opera em regime permanente durante a maior parte de seu funcionamento (DAMIANI e TRUCCO, 2010).

O presente trabalho apresenta a modelagem matemática por equilíbrio químico de um gaseificador de biomassa de pequena escala do tipo downdraft, para a queima de resíduos da casca de cacau e do cacho sem fruto do dendê, visando estimar a composição química do gás de síntese, seu poder calorífico e a influência dos parâmetros: temperatura, teor de umidade e relação ar-combustível na obtenção de um gás de síntese. Com estas informações é possível a determinação da energia disponibilizada pelo reator, energia utilizada no processo de conversão e energia perdida ao longo do processo.

2. METODOLOGIA DE SIMULAÇÃO

O modelo de equilíbrio aplicado foi baseado no trabalho de Marcelino (2017), onde foi realizada uma simulação para a biomassa da casca do coco. O modelo foi implementado na linguagem de programação Python e validado utilizando os parâmetros de entrada para a casca do coco, onde os resultados obtidos foram comparados com os valores de Marcelino (2017). Em seguida foi implementado para as biomassas da casca do cacau e do cacho sem fruto do dendê, à uma taxa de alimentação de $50\,kg/h$ e utilizando parâmetros típicos de temperatura de 800°C e razão de ar combustível de 0,25 para o processo de gaseificação ($Req = 0{,}25$ e $T = 800\,°C$).

Algumas premissas são adotadas neste tipo de modelagem:

- O sistema opera de maneira ideal;
- Assume-se que a biomassa seca é composta exclusivamente por quatro elementos: carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio;
- A gaseificação é descrita por meio de uma única reação global;
- O modelo é considerado adimensional e em estado estacionário;
- Todo o oxigênio disponível é consumido e o carbono presente na biomassa é completamente convertido em gases, desconsiderando-se a formação de resíduos sólidos de carbono;
- As cinzas não participam de reações químicas nem atuam como catalisadores, sendo tratadas como substâncias inertes;
- Os alcatrões não são considerados na modelagem;
- Supõe-se uma mistura completamente homogênea, com temperatura uniforme em todo o gaseificador;

- Consideram-se reações muito rápidas e tempo de residência suficiente para que o sistema atinja o equilíbrio químico.

Com as considerações para o modelo estabelecidas foi avaliada a composição do gás de síntese para uma ampla faixa de valores de umidade, razão de ar combustível e temperatura, buscando os parâmetros que gerem o gás com maior qualidade possível. Foi admitido que a biomassa é composta por quatro elementos: C, H, O e N e realizou-se os balanços de massa e energia para a equação que descreve a reação global de gaseificação, conforme mostrado na Eq. (1) (Marcelino, 2017):

$$C_c H_h O_o N_n + w H_2O + v H_2O + \beta\left(O_2 + 3{,}76\, N_2\right) \leftrightarrow a_1 C O_2 + a_2 CO + a_3 H_2 + a_4 H_2O + a_5 C H_4 + a_6 N_2 \quad (1)$$

Onde w representa a fração de umidade contida na biomassa, v é o teor de vapor no processo, β é o teor de ar atmosférico e os coeficientes a_1, a_2, a_3, a_4, a_5 e a_6 são as concentrações molares dos gases obtidos.

Os índices que acompanham os elementos $C_c, H_h, O_{o,} N_n$ foram determinados a partir das equações (2 à 5) (Marcelino, 2017):

$$c = \frac{c_{\%}}{M_{ac}} \quad (2)$$

$$h = \frac{h_{\%}}{M_{ah}} \quad (3)$$

$$o = \frac{o_{\%}}{M_{ao}} \quad (4)$$

$$n = \frac{n_{\%}}{M_{an}} \quad (5)$$

Em que $c_{\%}$, $h_{\%}$, $o_{\%}$, $n_{\%}$ representam a composição elementar da biomassa e M_{ac}, M_{ah}, M_{ao}, M_{an} são as massas atômicas dos elementos carbono, hidrogênio, oxigênio e nitrogênio.

Logo em sequência as constantes de equilíbrio químico K_1 e K_2 foram determinadas através do modelo adotado por Marcelino (2017), onde são expressas em função da temperatura de gaseificação.

Os valores utilizados para um a faixa de temperatura entre 600 °C a 1000 °C são mostrados a seguir de acordo com o quadro 1:

Quadro 1: Tabela de constantes de equilíbrio em função da temperatura

T (°C)	K1	K2
600	0,434	2,694
700	0,125	1,636
800	0,045	1,108
900	0,019	0,797
1000	0,009	0,615

Fonte: Marcelino (2017)

2.1 Balanço de massa

Os balanços de massa para cada um dos participantes da reação global são descritos pelas equações a seguir, a partir deles foi possível resolver numericamente o sistema de equações para cada uma das incógnitas a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6. Em python utilizou-se a função fsolve contida na biblioteca scipy, que combina aspectos do método de Newton-Raphson com o método de busca linear e o método de inversão da matriz jacobiana para a determinação das incógnitas.

O balanço para o carbono é dado pela Eq. (6) equações (6 à 9) (Marcelino, 2017):

$$a_1+a_2+a_5=1 \tag{6}$$

O balanço de hidrogênio é dado pela Eq. (7):

$$h+2(w+v)+a_5=2a_3+2a_4+4a_5 \tag{7}$$

O balanço de oxigênio é dado por Eq. (8):

$$w+v+o+2\beta=2a_1+a_2+a_4 \tag{8}$$

E o balanço para o nitrogênio é dado pela Eq. (9):

$$n+7{,}52\beta=a_6 \tag{9}$$

2.2 Balanço de energía

O balanço de energia para a gaseificação foi feito assumindo que o processo que ocorre dentro do reator é adiabático, ou seja, não há trocas de calor entre o meio interno e o meio externo do gaseificador e é descrito pela Eq. (10) (Marcelino, 2017):

$$\Delta h_{fbiomassa}+(w+v)\Delta h_{fH2O}+c_{pH2O}(298\,k-T_{vapor})=\sum_{a=1}^{i} a_i\Delta h_{fi}+(T_2-T_1)\sum_{a=1}^{i} a_i c_{pi} \tag{10}$$

Onde Δh_{fi} é a entalpia de formação dos produtos gasosos (KJ/kg), Δh_{fH2O} é a entalpia de formação da água, $\Delta h_{fbiomassa}$ é a entalpia de formação da biomassa, c_{pH2O} é o calor específico da água, T_{vapor} é a temperatura do vapor quando este for utilizado e c_{pi} é o calor específico dos produtos gasosos gerados.

A partir disto foi possível determinar o poder calorífico inferior do gás produzido, de acordo com Lora e Nogueira (2003) dado por $PCI_g=0{,}126\,C_{co}+0.358\,C_{cH4}+0{,}108\,C_{H2}$

Em seguida foi determinada a eficiência energética do processo de gaseificação para o gás a frio e a quente, a entalpia de formação do gás e a eficiência de conversão em massa.

3 RESULTADOS

A simulação do modelo de equilíbrio químico foi seguida em etapas. Para as biomassas da casca do cacau e do cacho sem fruto do dendê.

3.1 Validação dos resultados

Os resultados apresentados se mostraram idênticos aos resultados obtidos no trabalho de Marcelino (2017), tornando o modelo válido para representar o processo de gaseificação para as biomasas da casca do cacau e do cacho sem fruto do dendê. Onde o trabalho de Marcelino (2017) apresentou os seguintes resultados para a composição e poder calorífico inferior do gás síntese: H_2=23,97%, CO=28,82%, CO_2=11,75%, CH_4=0,63%, N_2=34,84% e PCI=6,44 MJ/kg.

3.2 Biomassa da casca do cacau

A composição volumétrica do gás obtido para a gaseificação da casca do cacau a uma temperatura de 800°C e razão estequiométrica de ar de 0,25 foi obtida, sendo estas concentrações: H2=25,07%, CO=23,33%, CO2=12,33%, CH4=2,46%, e N2=36,80%.

Os demais resultados da simulação, a uma temperatura de gaseificação de 800° C e razão estequiométrica de ar de 0,25 são listados de acordo com o Quadro 2:

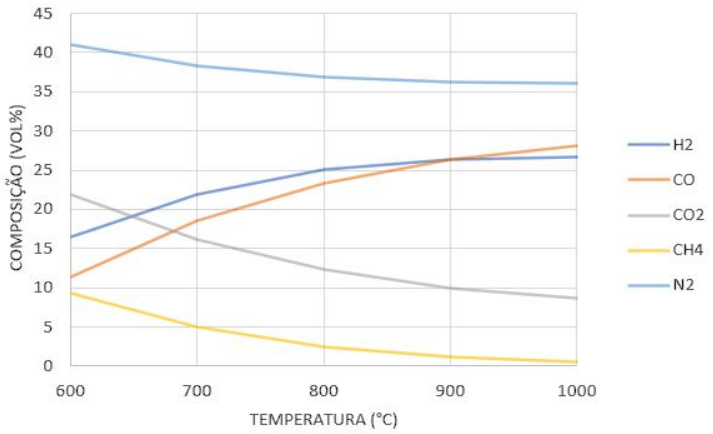
Quadro 2: Tabela de resultados para a casca do cacau

Massa do gás seco	$201{,}6\ g/mol$
Entalpia de formação	$-76{,}17\ Kj/mol$
Eficiência do gás frio	0,8668
Eficiência do gás quente	0,7868
Eficiência de conversão em massa	0,1593
PCI	$6{,}5282\ MJ/kg$

Fonte: autoria propria (2025)

Os gráficos obtidos apresentam a composição do gás de síntese em função de uma faixa de valores de temperatura entre 600 °C a 1000 °C, razão estequiométrica de ar entre 20% a 35% e teor de umidade variando entre 0% a 25%. A partir desta análise foi possível observar os pontos ótimos de operação para a geração do gás de síntese com a melhor qualidade possível. De acordo com a Figura 3:

Figura 3: Variação da composição em função da temperatura para uma razão estequiométrica de 25%

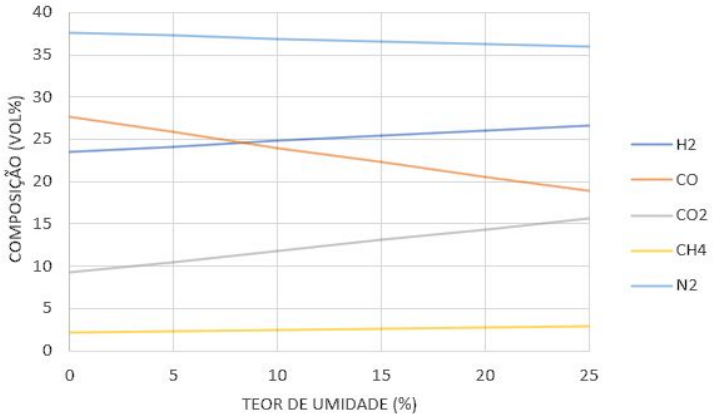


Fonte: autoria propria (2025)

Observa-se que o aumento da temperatura influencia positivamente na geração de hidrogênio e monóxido de carbono.

A figura 4 apresenta a variação da composição do gás em função do teor de umidade da biomassa, para uma temperatura de 800 °C e fração de ar de 25%, onde observou-se o aumento da geração de H_2 e CO_2 em função da umidade e a diminuição na geração de N_2 e CO em concordância com o apresentado por demais autores. Isto se deve ao fato de que a temperatura de gaseificação reduzida favorece a produção de CO_2 em vez de CO (LISBOA, 2016).

Figura 4: Variação da composição volumétrica em função do teor de umidade.

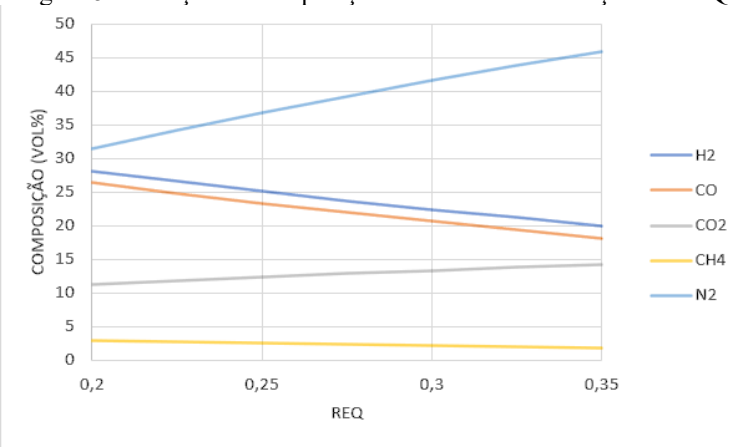


Fonte: autoría propria (2025)

A figura 5 nos mostra a variação da composição do gás de síntese em função do REQ (Razão de equivalência ou razão estequiométrica). Onde o estudo apontou para a diminuição da produção de H_2, CO e CH_4, e o aumento da produção de N_2 e CO_2 conforme o aumento da quantidade de ar no processo. Para razões inferiores a 15% a quantidade de ar no processo torna-se insuficiente para a gaseificação, já em razões superiores a 30% ocorre a transição

para o processo de combustão, consequentemente diminuindo a quantidade de gases produzidos (Marcelino, 2017).

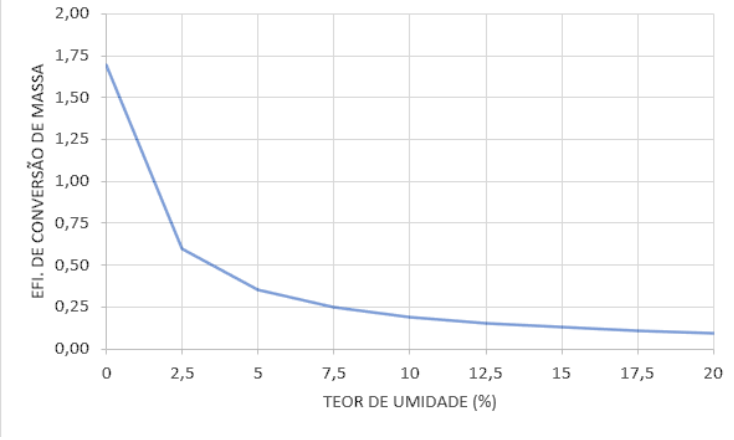
Figura 5: Variação da composição volumétrica em função do REQ.



Fonte: autoria propria (2025)

A simulação também permitiu estudar a influência do teor de umidade na eficiência de conversão de massa em biogás, onde foi observado que o gráfico de eficiência decresce em função da umidade. Isto ocorre devido ao gasto de energia na vaporização da água contida na biomassa, diminuindo a temperatura do processo e consequentemente as velocidades das reações de gaseificação. Observe a figura 6:

Figura 6: Eficiência de conversão de massa em função do teor de umidade



Fonte: autoria própria (2025)

3.3 Biomassa do cacho sem fruto do dendê

A composição volumétrica do gás obtido para a gaseificação do cacho sem fruto da palm a uma temperatura de 800°C e razão estequiométrica de ar de 0,25 foi obtida: H2= 25,18%, CO= 23,17%, CO2= 11,63%, CH4= 2,67%, e N2= 37,36%.

A tabela a seguir apresenta os demais resultados da simulação, a uma temperatura de gaseificação de 800° C e razão estequiométrica de ar de 0,25 listados no Quadro 7 a seguir:

Quadro 7: tabela de resultados para o cacho sem fruto do dendê

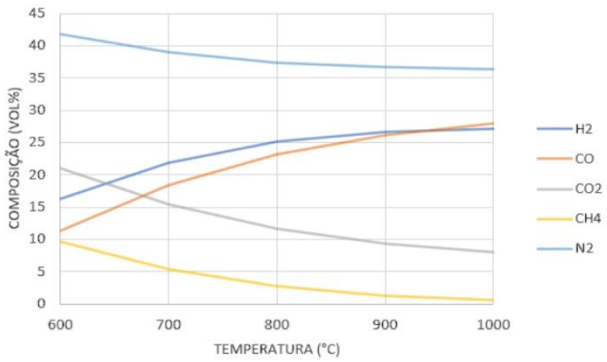
Massa do gás seco	$214{,}98\ g/mol$
Entalpia de formação	$-73{,}36\ Kj/mol$
Eficiência do gás frio	1,7256

Eficiência do gás quente	0,8685
Eficiência de conversão em massa	0,2319
PCI	6,5932 MJ/kg

Fonte: autoria propria (2025)

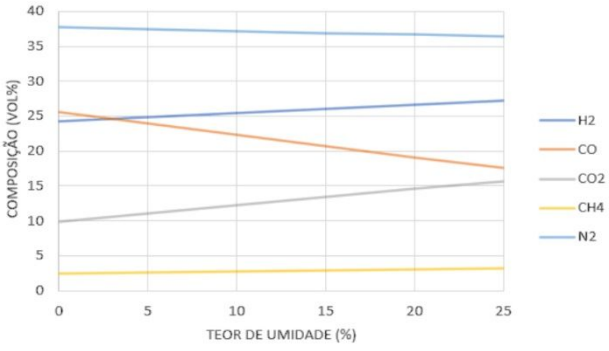
A biomassa oriunda do dendê apresentou comportamento similar ao da casca do cacau, onde foi realizada a análise da composição do gás de síntese em função de uma faixa de valores de temperatura entre 600 °C a 1000 °C conforme a Fig. 8 e teor de umidade variando entre 0% a 25% conforme a Fig. 9; e razão estequiométrica de ar entre 20% a 35% e eficiência de conversão de massa em função do teor de umidade, conforme a Fig. 10 e Fig. 11. Onde foi possível observar que o aumento da temperatura e do teor de umidade influenciaram positivamente na geração de H_2 e CO, entretanto o aumento da razão estequiométrica de ar influenciou negativamente na geração de hidrogênio. Portanto foi observado que a biomassa oriunda do dendê é ligeiramente superior à do cacau para a geração de energia e quantidade de hidrogênio produzido.

Figura 8: Composição em função da temperatura.



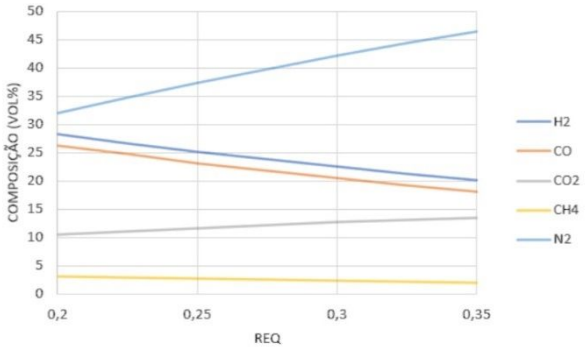
Fonte: autoria própria (2025)

Figura 9: composição em função do teor de umidade



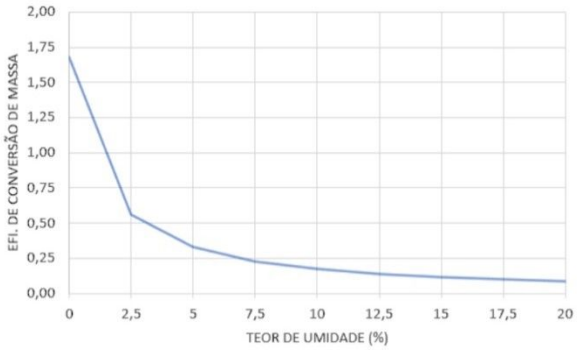
Fonte: autoria própria (2025)

Figura 10: composição em função da razão ar combustível



Fonte: autoria própria (2025)

Figura 11: eficiência de conversão de massa em função do teor de umidade.



Fonte: autoria própria (2025)

4 CONCLUSÃO

Foi possível avaliar o potencial dos resíduos da casca de cacau e do cacho sem fruto do dendê para a geração de energia através do processo de gaseificação, contribuindo significativamente para o aproveitamento adequado destes resíduos que seriam descartados no meio ambiente e impulsionando a economia em torno das culturas do cacau e do dendê. A etapa de modelagem via equilíbrio químico para os parâmetros típicos do processo de gaseificação, sendo a razão estequiométrica de ar de 0,25, a temperatura de gaseificação de 800°C e o teor de umidade correspondente a cada uma das biomassas, mostraram resultados condizentes com a literatura.

A composição do gás em relação as alterações da umidade, temperatura de gaseificação e relação ar combustível também apresentaram valores próximos aos contidos na literatura com valores de umidade estimados de 25% para maior produção de metano e hidrogênio, valores de temperatura estimados de 600°C para maior produçao de metano e 1000°C para produção de hidrogênio e valores estequiométricos estimados de 0,2 para maior produçao de metano e hidriogenio.

Foi observado que o aumento da temperatura da reação e do teor de umidade da biomassa elevaram a produção de H_2 e CO, porém a produção destes gases decresce em função da razão estequiométrica de ar com valores máximos de H_2=30,18 e CO=31,19. O aumento do teor de umidade também impactou negativamente na eficiência de conversão de biomassa em gás de síntese com valores minimos de 0,0838, Isso ocorre devido ao gasto de

energia durante a vaporização da água, o que posteriormente diminui a temperatura com valores minimos de 600°C, com a consequente redução das velocidades de reação e eficiência.

Conclui-se que as biomassas da casca do cacau e do cacho sem fruto do dendê apresentaram potencial satisfatório para a geração de energia, viabilizando a construção de plantas piloto para a gaseificação de biomassa de pequena escala.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS:

Hongyu Liu, Yuting Tang, Xiaoqian Ma, et al. Biomass gasification based on sorption-enhanced hydrogen production coupled with carbon utilization to produce tunable syngas for methanol synthesis. Energy Conversion and Management 2024;309;118428. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118428.

Erdiwansyah , Asri Gani, M. Zaki, Rizalman Mamat, et al. Analysis of technological developments and potential of biomass gasification as a viable industrial process: A review. Case Studies in Chemical and Environmental Engineering 2023;8;100439. https://doi.org/10.1016/j.cscee.2023.100439.

Fangfang Li a, Yangshuo Li, Jian Cao, Lara Carvalho, et al. Combination of CO2 electrochemical reduction and biomass gasification for producing methanol: A techno-economic assessment. Energy Conversion and Management 2024;7;118380. https://doi.org/10.1016/j.enconman.2024.118380.

L. Damiani, A. Trucco. An Experimental Data Based Correction Method of Biomass Gasification Equilibrium Modeling. *J. Sol. Energy Eng*. 2010;132(3);031011 https://doi-org.ez3.periodicos.capes.gov.br/10.1115/1.4001463.

ITAI, Y. Simulação numérica da gaseificação de biomassa em leito fixo. Dissertação (Mestrado em engenharia mecânica). Universidade Federal do Pará. Belém, 2011.

MARCELINO, Marcela Magalhães. Biomassa Residual Do Coco Para Obtenção de Energia e Intermediários Químicos via Gaseificação: Caracterização, Modelagem e Simulação. Universidade Federal da Bahia. Salvador, 2017.

LISBOA, F. C. D. CARBONIZAÇÃO E GASEIFICAÇÃO DE RESÍDUOS DA MACAÚBA, TUCUMÃ E CUPUAÇU PARA GERAÇÃO DE ELETRICIDADE. Tese de Doutorado em Ciências Mecânicas, 2016. Programa de pós-graduação em Ciências Mecânicas, Universidade de Brasília UnB, Brasília DF, 120p.

Moretti, L.; Arpino, F.; Cortellessa, G.; Di Fraia, S.; Di Palma, M.; Vanoli, L. Reliability of Equilibrium Gasification Models for Selected Biomass Types and Compositions: An Overview. Energies 2022;15;61 https://doi.org/ 10.3390/en15010061.

Yun Luo, Juan Chen. Hydrogen production from biomass steam gasification: Experiment and simulation. Chemical Engineering Science 2024;292;120011 https://doi.org/10.1016/j.ces.2024.120011.

Francisco J. S. Bandeira, José A. S. Ribeiro Junior, Alexandre L. A. Mesquita, et al. Potential use of Palm oil and Cocoa waste Biomasses as Sources of Energy Generation by Gasification System in the State of Pará, Brazil. Engenharia Agrícola 2023; 20220151. https://doi.org/10.1590/1809-4430-Eng.Agric.v43nepe20220151/2023.

ECHEGARAY, M; RODRÍGUEZ, R; CASTRO, M.R. Equilibrium model of the gasification processo agro-industrial wastes for energy production. International Journal of Engineering Science and Innovative Technology (IJESIT) Volume 3, Issue 3, 2014.

Emine Elmaslar Ozbas, Dogukan Aksu, Atakan Ongen. Hydrogen production via biomass gasification, and modeling by supervised machine learning algorithms. international journal of hydrogen energy 2019;44;17260 e17268 https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2019.02.108.

Sahar Safarian, Runar Unnthorsson, Christiaan Richter. The equivalence of stoichiometric and non-stoichiometric methods for modeling gasification and other reaction equilibria. Renewable and Sustainable Energy Reviews 2020; 131;109982. https://doi.org/10.1016/j.rser.2020.109982.

ZAINAL, Z.A; ALI, R. LEAN, C.H; SEETHARAMU, K.N. Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for diferente biomass materials. Energy Conversion & Management. v.42, 2001.

APÊNDICE

Modelo matemático de equilibrio químico em python para a gaseificação de biomassa

'Simulação da gaseificação para o cacho sem fruto do dendê'

```
from scipy.optimize import fsolve

# Aqui são fornecidos as informações a respeito da composição química da biomassa e parâmetros do processo de gaseificação

Cof_c = 42.08/12.017                                    # Coeficiente de carbono na biomassa
Cof_h = 7.00/1.00794                                    # Coeficiente de hidrogênio
Cof_o = 49.93/15.9994                                   # Coeficiente de oxigênio
Cof_n = 0.99/14.00674                                   # Coeficiente de nitrogênio
REQ = 0.35                                              # Razão estequiométrica de ar necessária
MMbio = Cof_c*12 + Cof_h*1 + Cof_o*16 + Cof_n*14        # Massa molecular da biomassa [g/mol]

# Massas moleculares
MolecO = 16
MolecH = 1.01
MolecN = 14
MolecS = 32
MolecH2 = 2.02
MolecCO = 28
MolecCO2 = 44
MolecCH4 = 16
MolecN2 = 28
MolecAr = 28.85
MolecH2O = 18

# Quantidade molar de água: Ajustar para o cacho sem fruto do dendê

U = 0.0743                                              # Fração de umidade
w = (U * MMbio) / (MolecH2O * (1 - U))                  # Quantidade molar de água por mol de biomassa

# Calculo do Número de moles de ar
BESTEQ = Cof_c + (Cof_h / 4) - (Cof_o / 2)
BETA = REQ * BESTEQ

# Entalpias de formação a 298K [kJ/mol]
DH_fCO = -110.541
DH_fCO2 = -393.546
DH_fH2O = -241.845
DH_fCH4 = -74.831
DH_fH2 = 0
DH_fN2 = 0

# Constantes de equilíbrio químico
k1 = 0.045
k2 = 1.108

# Aqui é determinada a composição química do gás de síntese através da solução de um sistema de equações não linear

def equations(vars):
    a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6 = vars

    eq1 = Cof_c - (a_1 + a_2 + a_5)
    eq2 = Cof_h + 2*w - (2*a_3 + 2*a_4 + 4*a_5)
    eq3 = Cof_o + w + 2*BETA - (2*a_1 + a_2 + a_4)
```

```
    eq4 = Cof_n + 7.52*BETA - 2*a_6
    eq5 = k1 - (a_5 / a_3**2)
    eq6 = k2 - ((a_1 * a_3) / (a_2 * a_4))

    return [eq1, eq2, eq3, eq4, eq5, eq6]

# Chute inicial para as variáveis [a1, a2, a3, a4, a5, a6]
chute_inicial = [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6]

# Resolvendo o sistema de equações
solution = fsolve(equations, chute_inicial)

a_1 = solution[0]
a_2 = solution[1]
a_3 = solution[2]
a_4 = solution[3]
a_5 = solution[4]
a_6 = solution[5]

# Cálculos para base seca
ntotalseco = a_1 + a_2 + a_3 + a_5 + a_6
vol_H2seco = (a_3 / ntotalseco) * 100
vol_COseco = (a_2 / ntotalseco) * 100
vol_CO2seco = (a_1 / ntotalseco) * 100
vol_CH4seco = (a_5 / ntotalseco) * 100
vol_N2seco = (a_6 / ntotalseco) * 100

# Fracões molares composição seca
sXi_H2 = a_3 / ntotalseco
sXi_CO = a_2 / ntotalseco
sXi_CO2 = a_1 / ntotalseco
sXi_CH4 = a_5 / ntotalseco
sXi_N2 = a_6 / ntotalseco

# Massa molecular do gás seco
m_gass = a_1 * MolecCO2 + a_2 * MolecCO + a_3 * MolecH2 + a_5 * MolecCH4 + a_6 * MolecN2

# Entalpia de formação do gás seco
h_gass = (sXi_CO2 * DH_fCO2 + sXi_CO * DH_fCO + sXi_H2 * DH_fH2 + sXi_CH4 * DH_fCH4 +
sXi_N2 * DH_fN2)

# Massa do ar e da água
m_ar = 4.76 * BETA * MolecAr
m_H2Ou = w * MolecH2O
m_biou = MMbio * m_H2Ou
m_R = m_biou + m_ar

# Poder calorífico inferior do gás (PCIgas) e eficiência
PCIb = 16  # [MJ/kg]
Vg = ntotalseco * 22.4  # [Nm3/h]
FMb = 50  # Fluxo mássico de biomassa [kg/h]
PCIgas = 0.126 * vol_COseco + 0.358 * vol_CH4seco + 0.108 * vol_H2seco

Ef = ((PCIgas * Vg) / (PCIb * FMb))
DeltaHgas = ntotalseco * h_gass
Eq = (PCIgas * Vg + DeltaHgas) / (PCIb * FMb)
Em = m_gass / m_R

# Exibindo resultados
print(f"Composição do gás seco (vol%): H2={vol_H2seco:.2f}, CO={vol_COseco:.2f},
CO2={vol_CO2seco:.2f}, CH4={vol_CH4seco:.2f}, N2={vol_N2seco:.2f}")
```

```
print(f"Massa do gás seco: {m_gass:.2f} g/mol")
print(f"Entalpia de formação do gás seco: {h_gass:.2f} kJ/mol")
print(f"Eficiência gás frio: {Ef:.4f}")
print(f"Eficiência gás quente: {Eq:.4f}")
print(f"Eficiência de conversão de massa: {Em:.4f}")
print(f"Poder Calorífico Inferior: {PCIgas:.4f}")
```

#Simulação para o cacau
'Simulação da Gaseificação da biomassa da casca de cacau'

```
from scipy.optimize import fsolve

# Aqui são fornecidos as informações a respeito da composição química da biomassa e parâmetros do processo de gaseificação

Cof_c = 39.87/12.017                                    # Coeficiente de carbono na biomassa
Cof_h = 5.96/1.00794                                    # Coeficiente de hidrogênio
Cof_o = 45.33/15.9994                                   # Coeficiente de oxigênio
Cof_n = 0.74/14.00674                                   # Coeficiente de nitrogênio
REQ = 0.25                                              # Razão estequiométrica de ar necessária
MMbio = Cof_c*12 + Cof_h*1 + Cof_o*16 + Cof_n*14        # Massa molecular da biomassa [g/mol]

# Massas moleculares
MolecO = 16
MolecH = 1.01
MolecN = 14
MolecS = 32
MolecH2 = 2.02
MolecCO = 28
MolecCO2 = 44
MolecCH4 = 16
MolecN2 = 28
MolecAr = 28.85
MolecH2O = 18

# Quantidade molar de água contida na casca de cacau
U = 0.12                                                # Fração de umidade
w = (U * MMbio) / (MolecH2O * (1 - U))                  # Quantidade molar de água por mol de biomassa

# Calculo do Número de moles de ar
BESTEQ = Cof_c + (Cof_h / 4) - (Cof_o / 2)
BETA = REQ * BESTEQ

# Entalpias de formação a 298K [kJ/mol]
DH_fCO = -110.541
DH_fCO2 = -393.546
DH_fH2O = -241.845
DH_fCH4 = -74.831
DH_fH2 = 0
DH_fN2 = 0

# Constantes de equilíbrio químico
k1 = 0.045
k2 = 1.108

# Aqui é determinada a composição química do gás de síntese através da solução de um sistema de equações não linear

def equations(vars):
    a_1, a_2, a_3, a_4, a_5, a_6 = vars
```

```
    eq1 = Cof_c - (a_1 + a_2 + a_5)
    eq2 = Cof_h + 2*w - (2*a_3 + 2*a_4 + 4*a_5)
    eq3 = Cof_o + w + 2*BETA - (2*a_1 + a_2 + a_4)
    eq4 = Cof_n + 7.52*BETA - 2*a_6
    eq5 = k1 - (a_5 / a_3**2)
    eq6 = k2 - ((a_1 * a_3) / (a_2 * a_4))

    return [eq1, eq2, eq3, eq4, eq5, eq6]

# Chute inicial para as variáveis [a1, a2, a3, a4, a5, a6]
chute_inicial = [0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6]

# Resolvendo o sistema de equações
solution = fsolve(equations, chute_inicial)

a_1 = solution[0]
a_2 = solution[1]
a_3 =solution[2]
a_4 = solution[3]
a_5 = solution[4]
a_6 = solution[5]

# Cálculos para base seca
ntotalseco = a_1 + a_2 + a_3 + a_5 + a_6
vol_H2seco = (a_3 / ntotalseco) * 100
vol_COseco = (a_2 / ntotalseco) * 100
vol_CO2seco = (a_1 / ntotalseco) * 100
vol_CH4seco = (a_5 / ntotalseco) * 100
vol_N2seco = (a_6 / ntotalseco) * 100

# Fracões molares composição seca
sXi_H2 = a_3 / ntotalseco
sXi_CO = a_2 / ntotalseco
sXi_CO2 = a_1 / ntotalseco
sXi_CH4 = a_5 / ntotalseco
sXi_N2 = a_6 / ntotalseco

# Massa molecular do gás seco
m_gass = a_1 * MolecCO2 + a_2 * MolecCO + a_3 * MolecH2 + a_5 * MolecCH4 + a_6 * MolecN2

# Entalpia de formação do gás seco
h_gass = (sXi_CO2 * DH_fCO2 + sXi_CO * DH_fCO + sXi_H2 * DH_fH2 + sXi_CH4 * DH_fCH4 +
sXi_N2 * DH_fN2)

# Massa do ar e da água
m_ar = 4.76 * BETA * MolecAr
m_H2Ou = w * MolecH2O
m_biou = MMbio * m_H2Ou
m_R = m_biou + m_ar

# Poder calorífico inferior do gás (PCIgas) e eficiência
PCIb = 15.5  # [MJ/kg]
Vg = ntotalseco * 22.4  # [Nm3/h]
FMb = 50  # Fluxo mássico de biomassa [kg/h]
PCIgas = 0.126 * vol_COseco + 0.358 * vol_CH4seco + 0.108 * vol_H2seco

Ef = ((PCIgas * Vg) / (PCIb * FMb))
DeltaHgas = ntotalseco * h_gass
Eq = (PCIgas * Vg + DeltaHgas) / (PCIb * FMb)
Em = m_gass / m_R
```

```
# Exibindo resultados
print(f"Composição do gás seco (vol%): H2={vol_H2seco:.2f}, CO={vol_COseco:.2f},
CO2={vol_CO2seco:.2f}, CH4={vol_CH4seco:.2f}, N2={vol_N2seco:.2f}")
print(f"Massa do gás seco: {m_gass:.2f} g/mol")
print(f"Entalpia de formação do gás seco: {h_gass:.2f} kJ/mol")
print(f"Eficiência gás frio: {Ef:.4f}")
print(f"Eficiência gás quente: {Eq:.4f}")
print(f"Eficiência de conversão de massa: {Em:.4f}")
print(f"Poder Calorífico Inferior: {PCIgas:.4f}")
```

Documento assinado digitalmente
gov.br
ARTHUR DOS REIS LEMOS FONTANA
Data: 22/09/2025 14:33:30-0300
Verifique em https://validar.iti.gov.br