Reunião de Acompanhamento e Avaliação - RAA 2026

MODELAGEM DA DECOMPOSIÇÃO TÉRMICA DE BIOMASSA LIGNOCELULÓSICA: COMPARAÇÃO DE CINÉTICAS COM ABORDAGEM MODEL-FREE, MODEL-BASED E MACHINE LEARNING

Davi Soares de Lima[1]; Celmy Maria Bezerra de Menezes Barbosa[2]; Fábio Machado Cavalcanti[3]. [1]Bolsista do PRH 30/UFPE, curso de Engenharia Química, Recife – PE. E-mail: davi.soareslima@ufpe.br [2]Docente do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE. E-mail: celmy@ufpe.br [3]Docente do Departamento de Engenharia Química da Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE. E-mail: fabio.mcavalcanti@ufpe.br

INTRODUÇÃO

A pirólise de biomassa lignocelulósica apresenta potencial para o aproveitamento energético de resíduos e a produção de bio-óleo, biocarvão e gases. Entretanto, a presença de hemicelulose, celulose e lignina, com diferentes faixas de decomposição e eventos térmicos sobrepostos, dificulta a descrição do comportamento térmico da biomassa. Nesse contexto, diferentes abordagens de modelagem podem ser empregadas para interpretar e representar esse processo, desde métodos model-free e model-based, voltados à determinação de parâmetros cinéticos e mecanismos reacionais, até técnicas de machine learning, direcionadas à predição da conversão.

METODOLOGIA

Foram utilizados dados de TGA/DTG da casca de acácia-negra exaurida após a extração de tanino, obtidos sob atmosfera de N_2 e taxas de aquecimento de 5–25 °C min^{-1}. As curvas foram deconvoluídas e submetidas às abordagens model-free, model-based e machine learning para avaliação da decomposição térmica.



β = 5 °C/min
β = 10 °C/min
β = 15 °C/min
β = 20 °C/min
β = 25 °C/min

DECONVOLUÇÃO

Asym2Sig

$$\frac{d\alpha}{dT} = c_i \cdot \left[\frac{\theta_i}{1+e^{-\frac{T-T_{P,i}+\frac{w_{1,i}}{2}}{w_{2,i}}}}\right] \cdot \left[1-\frac{1}{1+e^{-\frac{T-T_{P,i}+\frac{w_{1,i}}{2}}{w_{3,i}}}}\right]$$

Bi-Gaussiana

$$DTG = \begin{cases} y_0 + H \cdot exp\left[-0,5 \cdot \left(\frac{T-T_C}{w_1}\right)\right], T < T_C \\ y_0 + H \cdot exp\left[-0,5 \cdot \left(\frac{T-T_C}{w_2}\right)\right], T \geq T_C \end{cases}$$

MODELAGEM ISCONVERSIONAL

FWO: $\log(\beta) = \log\left(\frac{A \cdot E_a}{R \cdot g(x)}\right) - 2,315 - \frac{0,4567 \cdot E_a}{R \cdot T}$

STK: $\ln\left(\frac{\beta}{T^{1,92}}\right) = -1,0008 \cdot \frac{E_a}{R \cdot T} + \text{Constante}$

KAS: $\ln\left(\frac{\beta}{T^2}\right) = \ln\left(\frac{A \cdot R}{E_a \cdot g(x)}\right) - \frac{E_a}{R \cdot T}$

FR: $\ln\left(\frac{d\alpha}{dt}\right) = \ln[A \cdot f(\alpha)] - \frac{E_a}{R \cdot T}$

MÉTODO DE COMPENSAÇÃO CINÉTICA

$$\ln(A) = a_i \cdot E_a + b_i$$

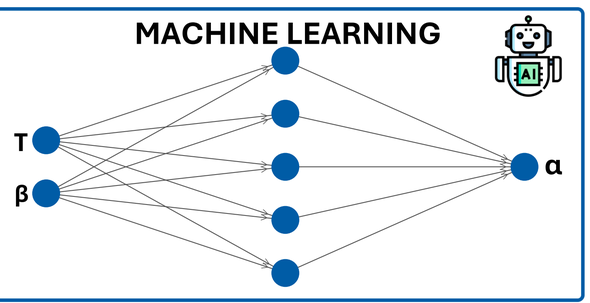
MASTERPLOT

$$\frac{g(\alpha)}{g(0,5)} = \frac{p(X)}{p(X_{0,5})}$$

$$p(x) = e^{(-,1,0008x - 0312)x^{1,92}}$$

$$X = \frac{E}{R \cdot T}$$

MACHINE LEARNING



RESULTADOS

Deconvolução

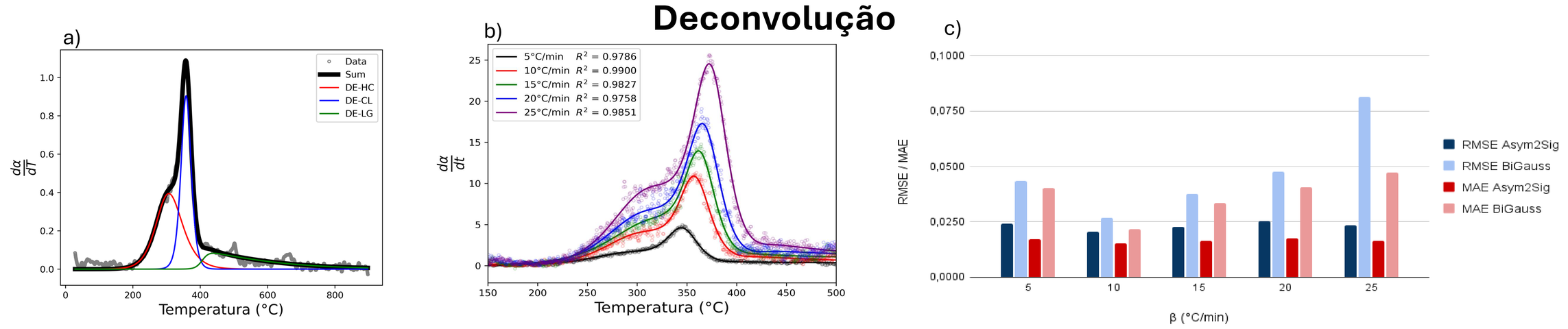


Figura 1 – Deconvolução e avaliação do ajuste das curvas DTG pela função Asym2Sig: (a) deconvolução a 10 °C/min; (b) dados experimentais e simulados em diferentes taxas de aquecimento; e (c) erros RMSE e MAE para as funções Asym2Sig e Bi-Gaussiana.

Modelagem isoconversional + Masterplots

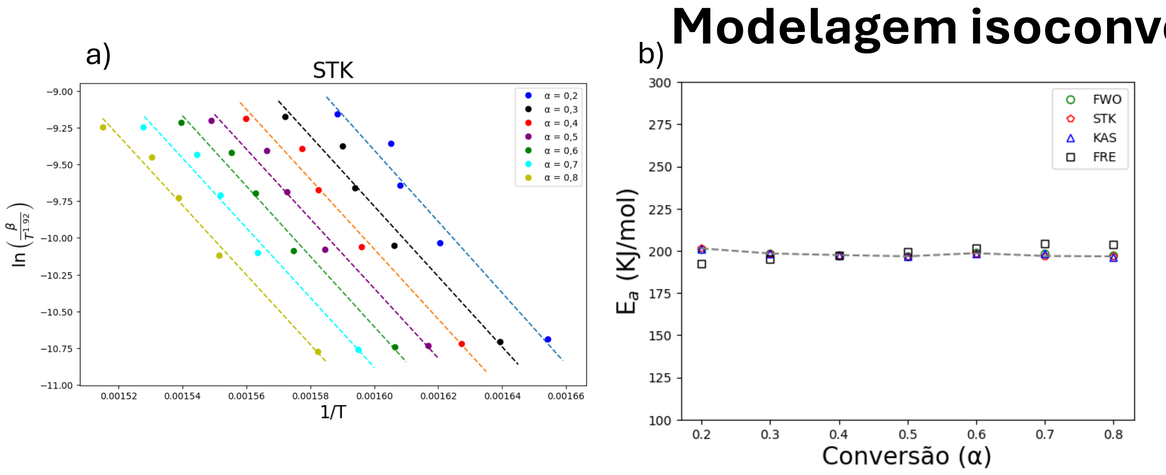


Figura 2 – (a) Retas isoconversionais obtidas pelo método de Starink para a fração celulósica; e (b) variação da energia de ativação com a conversão para os métodos FWO, STK, KAS e Friedman.

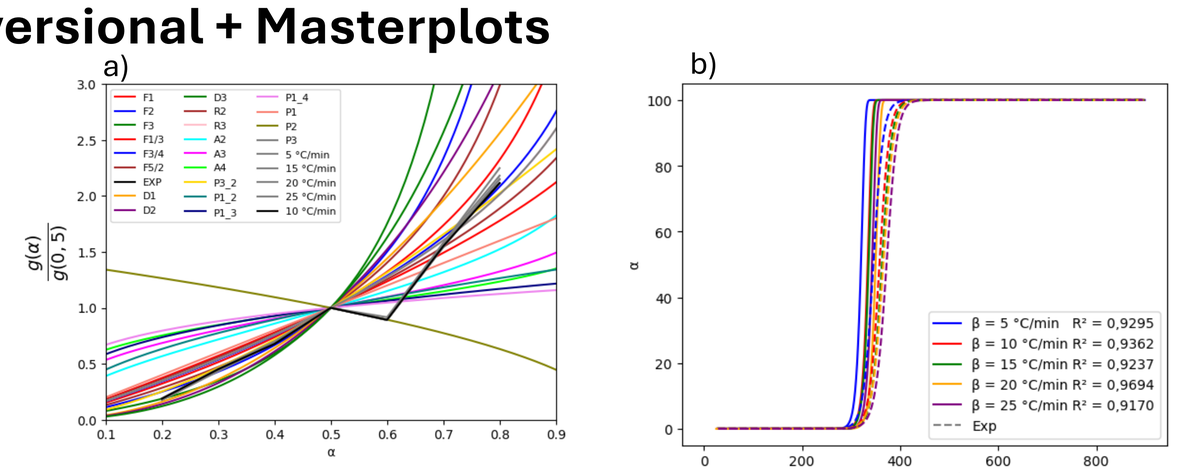


Figura 3 – (a) Masterplot integral da fração celulósica; e (b) conversão da biomassa prevista pelo modelo em comparação com os valores experimentais.

Machine Learning

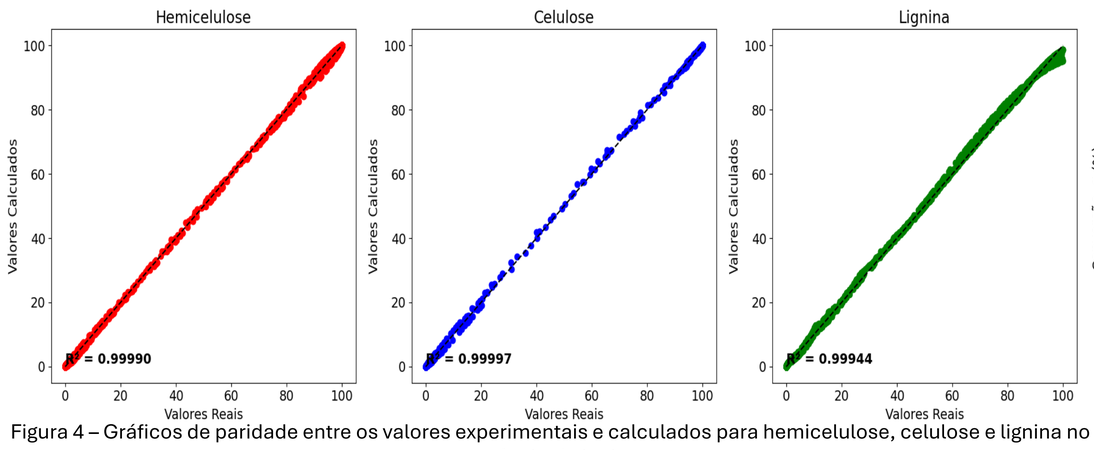


Figura 4 – Gráficos de paridade entre os valores experimentais e calculados para hemicelulose, celulose e lignina no conjunto de teste.

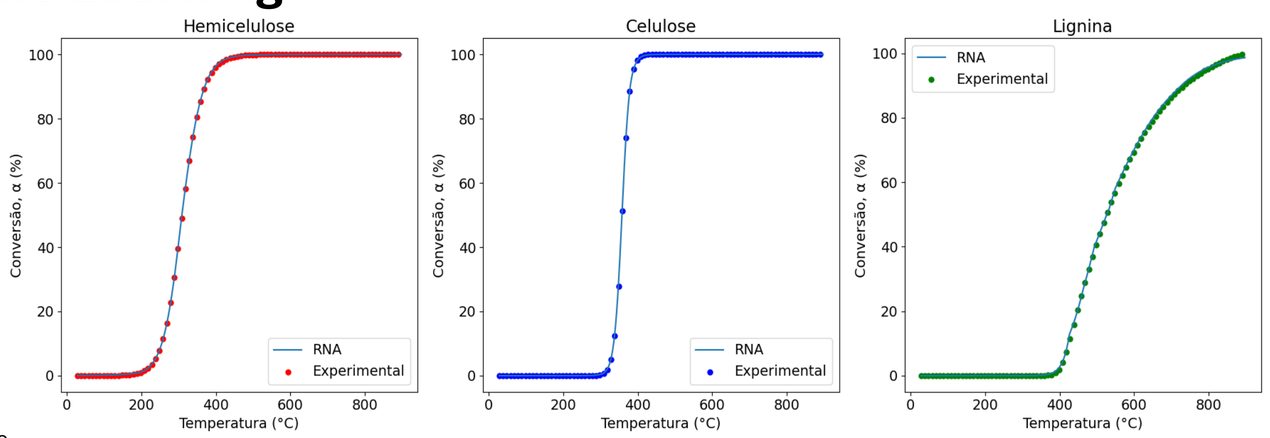


Figura 5 -Curvas de conversão das pseudocomponentes em função da temperatura para β = 10°C/min.

CONCLUSÕES

A deconvolução permitiu separar os eventos térmicos, enquanto a abordagem isoconversional + Masterplot determinou parâmetros cinéticos e mecanismo reacional, e o Machine Learning apresentou elevada capacidade preditiva, mapeando a complexidade do processo com menor custo computacional.

AGRADECIMENTOS

REFERÊNCIAS