

Integração Experimento-Simulação no Desenvolvimento de um Gêmeo Digital para Pirólise Lenta de Biomassa

Russo M. D.^{a*}; Belén F.^a; Pistonesi M.^a; Gutierrez V. S.^a; Volpe M. A.^b; Bispo H.^c

^aDepartamento de Química/Universidad Nacional del Sur, Bahía Blanca-Bs.As., Argentina

^bCyclus S.A., Ciudad de Buenos Aires, Argentina, 1425.

^cDepartamento de Engenharia Química/Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande-PB, Brasil

*damianrusso76@gmail.com

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de um gêmeo digital para um sistema experimental de pirólise lenta de biomassa lignocelulósica. O modelo foi implementado no software AVEVA Process Simulation (APS) utilizando uma abordagem fenomenológica baseada em pseudocomponentes, na qual a biomassa é representada por frações de celulose e lignina. A conversão térmica foi descrita por um conjunto reduzido de reações globais capazes de representar a formação simultânea de biochar, gases leves e vapores orgânicos condensáveis, incluindo uma etapa secundária de craqueamento térmico de frações condensáveis. A operação batch do reator experimental foi representada por meio de uma equivalência batch-pseudo-contínuo, permitindo a simulação em regime estacionário e a análise de condições operacionais. O flowsheet desenvolvido inclui reatores de conversão em série, separação do biochar sólido e condensação parcial dos vapores gerados. O modelo constitui uma plataforma inicial para integração experimento-simulação e futura calibração com dados experimentais de pirólise.

Palavras-chave: Pirólise lenta; Gêmeo digital; Modelagem fenomenológica; Biocarvão; AVEVA Process Simulation.

1. Introdução

A pirólise de biomassa lignocelulósica tem sido amplamente investigada como rota termoquímica para valorização de resíduos e produção de biocarvão com aplicações em energia, adsorção e materiais avançados [Kan et al, 2016]. Além de biomassas convencionais, cresce o interesse na conversão de resíduos provenientes de cadeias agroindustriais e florestais, como frações ricas em lignina remanescente, digestatos, lodos e subprodutos vegetais. O processo envolve um conjunto complexo de reações primárias e secundárias: as primeiras correspondem à desfragmentação da estrutura polimérica da biomassa, formando vapores orgânicos, gases permanentes (CO, CO₂, H₂O e H₂) e biocarvão, enquanto as reações secundárias ocorrem predominantemente na fase vapor, envolvendo o craqueamento de frações condensáveis (bio-óleo) e podendo aumentar a formação de gases leves e a deposição adicional de carbono sólido em condições de maior severidade térmica [Patwardhan et al., 2011].

Em escala laboratorial, a definição das condições operacionais costuma basear-se principalmente em experimentação, o que pode limitar a exploração sistemática de variáveis como temperatura efetiva de reação e tempo de residência. Nesse contexto, a integração entre experimentação e modelagem computacional tem se consolidado como uma abordagem estratégica na Engenharia de Sistemas em Processos. A construção de gêmeos digitais permite representar virtualmente sistemas reais, possibilitando análises paramétricas e avaliações operacionais antes da realização de novos ensaios experimentais [Fuller et al., 2020; Peterson et al., 2025].

Neste trabalho, propõe-se o desenvolvimento de um gêmeo digital para um reator tubular batch de pirólise lenta operando sob atmosfera inerte, utilizando o software AVEVA Process Simulation (APS). O sistema experimental consiste em um tubo de vidro aquecido externamente por resistências elétricas, com controle térmico baseado na temperatura da parede do reator e operação à pressão atmosférica sob fluxo de N₂. Na ausência inicial de parâmetros cinéticos específicos para as biomassas estudadas, adotou-se uma abordagem fenomenológica do tipo lumped [Di Blasi, 2008], estruturada em duas etapas globais: uma etapa primária de conversão da biomassa sólida em biocarvão, vapores condensáveis e gases permanentes, e uma etapa secundária representando o craqueamento parcial das frações condensáveis. A modelagem baseia-se na equivalência entre operação batch e regime pseudo-contínuo, permitindo a implementação do modelo em estado estacionário para análises de sensibilidade em relação à temperatura efetiva e ao tempo de residência equivalente, constituindo uma plataforma inicial de integração experimento-simulação para futura calibração cinética e otimização operacional.

2. Metodologia

2.1. Sistema experimental

O sistema experimental consiste em um reator tubular *batch* horizontal de pirólise lenta, formado por um tubo de vidro inserido em um forno elétrico de resistências com potência nominal de 1,8 kW. O aquecimento ocorre externamente por transferência de calor do forno para o tubo reacional, envolvendo condução no meio sólido e mecanismos combinados de condução e radiação térmica no interior da câmara. O controle de temperatura é realizado por meio de um termopar tipo J instalado externamente na parede do tubo, monitorando a temperatura da superfície do reator. Assim, a temperatura medida pode diferir da temperatura efetiva da biomassa no interior do leito devido a gradientes térmicos radiais e axiais, especialmente em sistemas com preenchimento parcial e aquecimento externo.

O tubo apresenta aproximadamente 60 cm de comprimento, diâmetro externo de 3,7 cm e espessura de parede estimada em 2 mm. A massa de biomassa utilizada varia entre 6 e 20 g por ensaio, correspondendo a um volume aproximado de 40 cm³ considerando densidade aparente média de 0,5 g/cm³. Esse volume é inferior ao volume interno total do tubo, caracterizando operação com preenchimento parcial e presença de espaço livre para circulação dos vapores gerados durante a decomposição térmica.

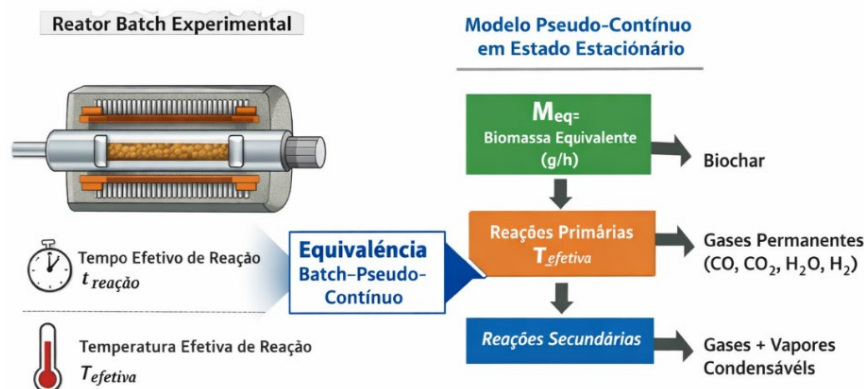
A operação ocorre à pressão atmosférica sob atmosfera inerte de N₂, com vazão típica de 20 mL/min. O procedimento experimental inclui purga inicial com N₂ (5–10 min), aquecimento até a temperatura nominal de reação (tipicamente 450 °C) em cerca de 5–6 min, manutenção quase isotérmica por aproximadamente 10 min e resfriamento natural sob fluxo contínuo de N₂. A combinação entre temperatura nominal e tempo efetivo de residência define a severidade térmica do processo, influenciando tanto as reações primárias de desfragmentação da biomassa quanto as reações secundárias na fase vapor. As biomassas investigadas incluem misturas de celulose e lignina, bem como frações residuais ricas em lignina. O rendimento típico de biocarvão é de cerca de 30% em base seca (20 g de biomassa resultando em aproximadamente 6 g de biocarvão). O sistema inclui ainda módulo de condensação refrigerado para retenção parcial de frações condensáveis, sendo possível a ocorrência de reações secundárias de craqueamento térmico ao longo da zona quente do reator, o que pode influenciar a distribuição final entre produtos sólidos, líquidos e gasosos.

2.2. Estratégia de modelagem

Considerando as características físicas do reator experimental e a ausência inicial de dados cinéticos detalhados para as diferentes biomassas investigadas, adotou-se uma abordagem fenomenológica para a construção do gêmeo digital do processo. A estratégia foi concebida como uma plataforma evolutiva, permitindo que parâmetros globais inicialmente assumidos possam ser progressivamente substituídos por dados experimentais, resultados de análises térmicas e mecanismos globais reportados na literatura.

O reator experimental opera em regime *batch*; entretanto, para possibilitar análises paramétricas em ambiente de simulação em estado estacionário, foi adotada uma equivalência *batch*–pseudo-contínuo. Nesse procedimento, a massa total de biomassa processada em cada ensaio é dividida pelo tempo efetivo de reação, resultando em uma vazão mássica equivalente que representa o sistema em regime estacionário. A Figura 1 apresenta o esquema conceitual dessa conversão, evidenciando a definição da vazão equivalente de biomassa e a introdução da temperatura efetiva de reação como parâmetro de calibração do modelo.

Figura 1. Esquema conceitual da equivalência *batch*–pseudo-contínuo adotada na modelagem



A conversão da biomassa foi representada por meio de uma abordagem *lumped*, na qual a pirólise é descrita por etapas globais capazes de reproduzir a formação das principais frações de produtos: fase sólida

(biochar), vapores condensáveis e gases não condensáveis. Essa representação simplificada permite capturar o comportamento global do processo sem recorrer a mecanismos cinéticos detalhados, mantendo o modelo computacionalmente estável e adequado para análises preliminares.

A diferença potencial entre a temperatura medida na parede do reator e a temperatura efetiva da biomassa em reação foi tratada como um parâmetro ajustável, permitindo futura calibração do modelo com base em dados experimentais. Essa abordagem possibilita a realização de análises iniciais de balanço de massa, avaliação de condições operacionais e exploração do efeito da severidade térmica sobre a distribuição global de produtos.

2.3. Implementação no AVEVA Process Simulation

2.3.1. Definição dos componentes e pacote termodinâmico

A implementação do modelo de pirólise da biomassa em APS iniciou-se com a definição do conjunto de componentes necessários para representar os principais produtos gerados durante o processo. Adotou-se uma abordagem baseada em pseudocomponentes lumped, amplamente utilizada em modelos fenomenológicos simplificados de pirólise.

A biomassa sólida foi representada por dois pseudocomponentes principais: CELL_SOL e LIGN_SOL, correspondentes às frações estruturais dominantes da biomassa lignocelulósica, isto é, celulose e lignina. Essa simplificação permite capturar o comportamento global do processo sem a necessidade de representar explicitamente cada macromolécula ou intermediário químico presente na decomposição térmica da biomassa.

Para possibilitar a formulação das reações químicas de pirólise de forma estequiometricamente consistente, foram atribuídas fórmulas químicas representativas e massas molares aos pseudocomponentes definidos no modelo. Nesse contexto, a celulose foi representada pela fórmula empírica $C_6H_{10}O_5$, amplamente utilizada para descrever a unidade estrutural repetitiva desse polímero. A lignina foi representada por uma fórmula média simplificada $C_9H_{10}O_3$, utilizada como aproximação da composição elementar típica desse biopolímero aromático. O biochar foi representado pelo pseudocomponente CHAR_SOL, cuja composição foi aproximada pela fórmula C, representando uma fase sólida predominantemente carbonosa. A fração orgânica condensável foi representada pelo pseudocomponente TAR_LUMP, ao qual foi atribuída uma fórmula média C_6H_6O , utilizada como representação simplificada de compostos aromáticos oxigenados frequentemente presentes na fração condensável dos vapores de pirólise.

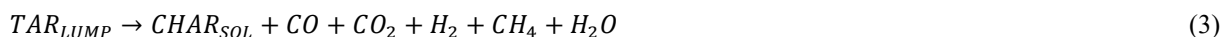
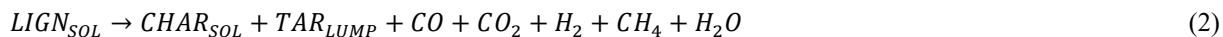
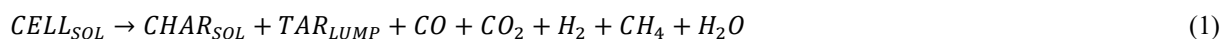
Os produtos voláteis gerados durante a pirólise foram representados por um conjunto reduzido de espécies químicas, incluindo os gases permanentes CO, CO₂, H₂ e CH₄, além de vapor de água (H₂O). O modelo também inclui nitrogênio (N₂), empregado como gás inerte de arraste. Os pseudocomponentes sólidos (CELL_SOL, LIGN_SOL e CHAR_SOL) e o pseudocomponente condensável TAR_LUMP foram definidos manualmente no ambiente de propriedades do simulador. Para esses componentes, foram atribuídos valores estimados de propriedades físico-químicas e propriedades termodinâmicas relevantes. Além disso, foram incorporadas correlações dependentes da temperatura para propriedades termodinâmicas fundamentais, permitindo representar de forma mais realista o comportamento dessas espécies ao longo da faixa de temperaturas característica do processo de pirólise.

No que se refere ao tratamento termodinâmico do sistema, foi selecionado o pacote de propriedades Peng–Robinson (PR), amplamente utilizado na modelagem de misturas contendo gases leves e hidrocarbonetos. Esse modelo permite representar adequadamente o comportamento das correntes gasosas geradas durante a pirólise e avaliar a possibilidade de formação de fases condensadas durante o resfriamento dos vapores. Adicionalmente, foi ativada no simulador a opção “Include non-equilibrium solid components”, permitindo que os componentes sólidos sejam tratados fora do equilíbrio termodinâmico com as fases fluidas. Essa configuração é particularmente importante para a modelagem de processos envolvendo biomassa sólida e formação de char, uma vez que tais fases não participam do equilíbrio vapor-líquido convencional considerado pelo modelo termodinâmico.

2.3.2. Modelagem das reações de pirólise

A conversão térmica da biomassa foi representada no modelo por meio de um conjunto simplificado de reações globais de pirólise, implementadas no simulador utilizando o modelo de reações de conversão. Essa abordagem permite descrever o comportamento global da decomposição térmica da biomassa sem a necessidade de incorporar mecanismos cinéticos detalhados, que normalmente envolvem um grande número de espécies intermediárias e parâmetros cinéticos.

Considerando que a biomassa é composta majoritariamente por celulose e lignina, o modelo assume que a decomposição térmica desses pseudocomponentes gera simultaneamente uma mistura de biochar sólido, vapores orgânicos condensáveis e gases leves. Além disso, parte da fração condensável pode sofrer reações secundárias de craqueamento térmico, contribuindo para a formação adicional de gases e biochar. As reações globais consideradas no modelo são apresentadas a seguir:



Esse conjunto de reações representa de forma simplificada dois fenômenos importantes observados experimentalmente em processos de pirólise: a formação simultânea de biochar, gases leves e vapores orgânicos, bem como a ocorrência de reações secundárias de craqueamento dos vapores condensáveis, que contribuem para o aumento da fração gasosa e da formação de carbono sólido.

2.3.3. Determinação dos coeficientes estequiométricos e parametrização das reações

A determinação dos coeficientes estequiométricos utilizados nas reações de pirólise foi realizada por meio da atribuição de fórmulas químicas representativas e massas molares aos pseudocomponentes definidos no modelo, permitindo formular as reações globais de decomposição térmica de forma elementarmente balanceada em carbono, hidrogênio e oxigênio. Essa abordagem assegura que as reações implementadas no simulador sejam quimicamente consistentes e respeitem os princípios de conservação de massa.

A partir dessas definições, os coeficientes das reações foram determinados considerando simultaneamente diferentes condições impostas ao sistema. Em primeiro lugar, assumiu-se que a biomassa alimentada ao reator é composta por uma mistura de celulose e lignina, representadas pelos pseudocomponentes CELL_SOL e LIGN_SOL, respectivamente. No modelo adotado, a composição da biomassa foi definida considerando 40% em massa de celulose e 60% em massa de lignina na corrente de alimentação.

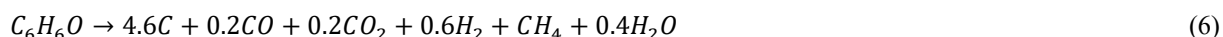
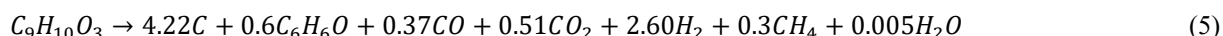
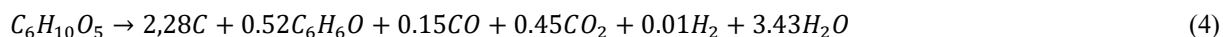
Além da composição da biomassa, foram também especificadas conversões globais das reações de pirólise e rendimentos de produtos, utilizados como restrições adicionais para determinar os coeficientes das reações. Em particular, considerou-se a formação de biochar como um dos produtos principais do processo, assumindo-se um rendimento global de aproximadamente 30% em massa de biochar em relação à biomassa alimentada, valor compatível com faixas típicas reportadas na literatura para processos de pirólise de biomassa lignocelulósica.

Para representar o comportamento do sistema de forma mais realista, esse rendimento global foi distribuído entre duas etapas do modelo reacional. Na primeira etapa, correspondente às reações primárias de pirólise da biomassa, considerou-se que 90% do biochar total é formado diretamente a partir da decomposição de celulose e lignina, correspondendo a aproximadamente 27% da massa total da biomassa alimentada. Na segunda etapa, representada por uma reação adicional no segundo reator do modelo, assumiu-se que uma pequena fração da fase condensável (TAR_LUMP) pode sofrer reações secundárias de decomposição térmica, contribuindo para a formação adicional de biochar e gases leves. Essa etapa foi responsável pelos 10% restantes do biochar produzido, correspondendo a aproximadamente 3% da massa total da biomassa alimentada.

No modelo implementado, as reações primárias associadas à decomposição da celulose e da lignina foram configuradas com conversão de 100%, uma vez que não se espera a presença de biomassa não reagida na corrente de saída do reator de pirólise. Dessa forma, assume-se que toda a biomassa alimentada é completamente convertida em uma mistura de biochar, gases leves e vapores orgânicos durante a etapa primária do processo.

A combinação dessas restrições permite determinar um conjunto consistente de coeficientes estequiométricos capaz de reproduzir simultaneamente a conservação de massa e as distribuições globais de produtos assumidas para o processo de pirólise.

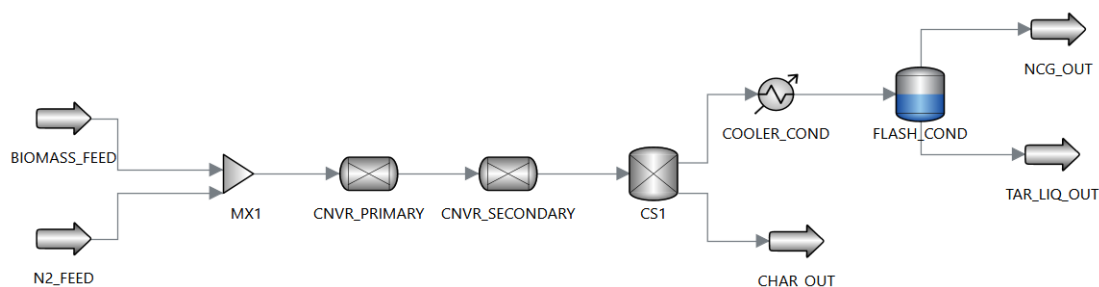
As reações globais finais implementadas no modelo são apresentadas a seguir:



2.3.4. Estrutura do flowsheet e representação do processo

A estrutura do modelo foi implementada no APS por meio de um flowsheet (Figura 2) que representa de forma simplificada as principais etapas do processo de pirólise da biomassa e posterior separação dos produtos formados.

Figura 2. Fluxograma do modelo implementado no AVEVA Process Simulation.



A corrente de alimentação do sistema é composta por biomassa lignocelulósica, representada pelos pseudocomponentes CELL_SOL e LIGN_SOL, juntamente com um fluxo de nitrogênio (N₂) utilizado como gás inerte de arraste. Essas correntes são inicialmente combinadas em um bloco Mixer (MX1), no qual se obtém uma corrente única de alimentação que entra no primeiro reator do sistema.

A conversão térmica da biomassa é representada por dois reatores de conversão dispostos em série. O primeiro reator, CNVR_PRIMARY, representa a etapa de pirólise primária da biomassa, na qual os pseudocomponentes sólidos CELL_SOL e LIGN_SOL são completamente convertidos em uma mistura de biochar, gases leves e vapores orgânicos condensáveis, de acordo com as reações globais definidas no modelo. A corrente resultante segue então para um segundo reator, CNVR_SECONDARY, que representa as reações secundárias de decomposição dos vapores de pirólise. Nessa etapa, parte da fração condensável representada pelo pseudocomponente TAR_LUMP pode sofrer reações adicionais de decomposição térmica, produzindo gases leves adicionais e uma pequena fração adicional de biochar.

Após as etapas reacionais, a corrente de produtos é enviada para um bloco de separação do tipo Component Splitter (CS1), responsável por separar a fração sólida do restante da corrente. Nesse equipamento, o pseudocomponente CHAR_SOL, representando o biochar produzido durante a pirólise, é removido do sistema através de uma corrente dedicada, permitindo sua quantificação como produto sólido do processo.

A corrente gasosa e de vapores resultante dessa separação segue então para uma etapa de resfriamento, representada por um trocador de calor do tipo utilidade (HXU – COOLER_COND). Nesse equipamento, a corrente é resfriada até uma temperatura especificada, promovendo a condensação parcial da fração orgânica pesada representada pelo pseudocomponente TAR_LUMP.

A corrente parcialmente condensada é posteriormente enviada para um separador vapor-líquido (FLASH_COND), modelado como um Drum em equilíbrio, no qual ocorre a separação entre os gases não condensáveis e a fração líquida condensada. Dessa forma, o modelo permite obter três correntes principais de produtos do processo: biochar sólido, gases não condensáveis e uma fração líquida condensável associada ao bio-oil.

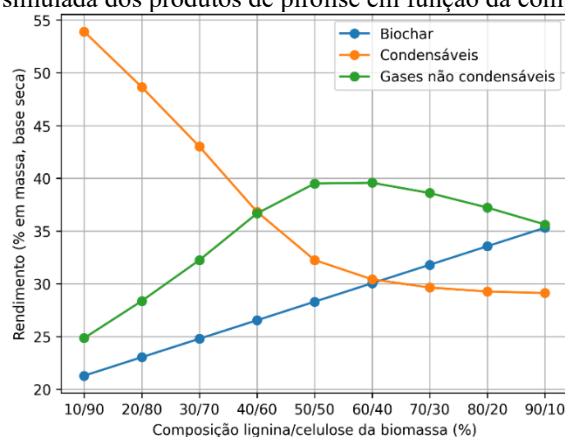
3. Principais resultados

A simulação desenvolvida no APS permitiu representar de forma consistente as principais etapas do processo de pirólise da biomassa, incluindo a conversão térmica dos pseudocomponentes lignocelulósicos, a formação de biochar e a posterior separação das correntes de produtos. O modelo reproduz a conversão completa dos pseudocomponentes da biomassa nas reações primárias e permite avaliar a distribuição de produtos entre biochar, gases leves e fração condensável. Além disso, a estrutura implementada no flowsheet possibilita identificar claramente as três correntes principais de saída do processo: biochar sólido, gases não condensáveis e produtos condensáveis associados ao bio-oil.

Com o objetivo de avaliar a sensibilidade do modelo à composição da biomassa, foi realizada uma análise paramétrica variando a relação lignina/celulose na corrente de alimentação, mantendo constantes as demais condições operacionais do processo. Para cada condição simulada foram calculados os rendimentos de biochar, produtos condensáveis e gases não condensáveis em base mássica seca.

Os resultados obtidos (Figura 3) indicam que o aumento da fração de lignina na biomassa promove um aumento progressivo no rendimento de biochar, enquanto a fração de produtos condensáveis apresenta uma tendência decrescente, comportamento consistente com observações reportadas na literatura para a pirólise de biomassa lignocelulósica (Yang et al., 2007; Yu et al., 2023). Esse comportamento está associado à natureza estrutural da lignina, caracterizada por uma rede aromática mais condensada que favorece a formação de resíduos carbonáceos durante a pirólise. Por outro lado, frações mais elevadas de celulose tendem a favorecer a formação de vapores condensáveis, o que aumenta a produção de compostos associados ao bio-óleo. Enquanto isso, a produção de gases não condensáveis apresenta variação moderada, com valores máximos em composições intermediárias de biomassa.

Figura 3. Distribuição simulada dos produtos de pirólise em função da composição lignina/celulose.



4. Conclusão

Neste trabalho foi desenvolvido um modelo fenomenológico simplificado do processo de pirólise de biomassa utilizando o simulador APS. O modelo foi construído a partir da definição de pseudocomponentes representativos da biomassa e de um conjunto reduzido de reações globais capazes de descrever a conversão térmica da biomassa e a formação de biochar, gases e vapores condensáveis.

A implementação do modelo permitiu representar de forma consistente as principais etapas do processo, incluindo as reações primárias e secundárias de pirólise, a separação do biochar sólido e a condensação parcial dos vapores gerados. A estrutura do flowsheet desenvolvida constitui uma base adequada para futuras extensões do modelo, incluindo a incorporação de dados experimentais, análise de sensibilidade e integração com estratégias de monitoramento e controle de processos.

Agradecimentos: D. M. Russo, F. Belen e V. Gutierrez agradecem ao Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Técnicas (CONICET, Argentina). F. Belén também agradece ao CiMol-CNPq. M.F. Pistonesi agradece à Comisión de Investigaciones Científicas (CIC, Argentina). H. Bispo agradece à Universidade Federal de Campina Grande (UFCG). V. Mara agradece à Cyclus S.A.

Referências

- C. Di Blasi: Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34, 47–90, 2008.
- A. Fuller, Z. Fan, C. Day e C. Barlow: Digital twin: enabling technologies, challenges and open research. *IEEE Access*, 8, 108952–108971, 2020.
- T. Kan, V. Strezov e T.J. Evans: Lignocellulosic biomass pyrolysis: A review of product properties and effects of pyrolysis parameters. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 57, 1126–1140, 2016.
- P. R. Patwardhan, D. L. Dalluge, B. H. Shanks e R. C. Brown: Distinguishing primary and secondary reactions of cellulose pyrolysis. *Bioresource Technology*, 102(8), 5265–5269, 2011.
- L. Peterson, I. V. Gosea, P. Benner e K. Sundmacher: Digital twins in process engineering: An overview on computational and numerical methods. *Computers & Chemical Engineering*, 193, 108917, 2025.
- H. Yang, H. et al. Characteristics of hemicellulose, cellulose and lignin pyrolysis. *Fuel*, 86, 1781–1788, 2007.
- X. Yu, W. Xu, e L. Gan: Study of biochar with different cellulose/lignin ratios for organic pollutant removal in water through Fenton-like catalysis assisted with adsorption. *ACS Omega*, 8, 18756–18766, 2023.