

Modelagem da pirólise de biomassa lignocelulósica via redes neurais artificiais: predição do grau de conversão com base em dados termogravimétricos

Davi Soares de Lima^a, Celmy Maria Bezerra de Menezes Barbosa^a, Fábio Machado Cavalcanti^a

^aDepartamento de Engenharia Química, Centro de Tecnologia e Geociências, Instituto de Pesquisa em Petróleo e Energia (i-LITPEG), Laboratório de Refino e Tecnologias Limpas (LabRefino/LATECLIM), Universidade Federal de Pernambuco (UFPE), Recife – PE, Brasil

*davi.soareslima@ufpe.br

RESUMO

A modelagem cinética da pirólise de biomassa lignocelulósica apresenta elevada complexidade em razão de sua natureza multicomponente e do comportamento não linear do processo. Neste trabalho, desenvolveu-se um modelo baseado em redes neurais artificiais para prever o grau de conversão (α) em função da temperatura (T) e da taxa de aquecimento (β), utilizando dados experimentais obtidos por análise termogravimétrica (TGA). A modelagem foi conduzida por meio de uma rede do tipo *Multilayer Perceptron* com única camada oculta, cuja arquitetura foi otimizada via busca bayesiana associada à validação cruzada. O modelo final, composto por 15 neurônios e 61 parâmetros treináveis, apresentou elevado desempenho preditivo, com coeficiente de determinação (R^2) global de 0,9988 e erro quadrático médio da ordem de 10^{-4} , além de adequada capacidade de generalização. Os resultados demonstraram que a rede reproduziu satisfatoriamente o comportamento físico do processo, incluindo o deslocamento das curvas de conversão em função da taxa de aquecimento. A abordagem proposta mostra-se promissora como alternativa eficiente para modelagem, simulação e otimização de processos termoquímicos complexos.

Palavras-chave: Modelagem cinética, Pirólise de biomassa, *Machine learning*, Biocombustíveis.

1. Introdução

A dependência de combustíveis fósseis, como petróleo, carvão e gás natural, tem contribuído para o aumento das emissões de CO₂ e para a intensificação das mudanças climáticas (Manisalidis et al., 2020; Qazi et al., 2019). Nesse cenário, a biomassa lignocelulósica surge como uma alternativa renovável com potencial para produção de biocombustíveis e outros produtos de valor agregado (Liborio et al., 2024). Entre as rotas de conversão, a pirólise se destaca por promover a decomposição térmica do material na ausência de oxigênio. No entanto, a modelagem cinética desse processo é desafiadora devido à natureza multicomponente da biomassa, que é composta por hemicelulose, celulose, lignina, e extrativos cujas decomposições ocorrem em faixas de temperatura distintas e de forma parcialmente sobreposta (Mahmood et al., 2021).

A análise termogravimétrica (TGA) é amplamente empregada para investigar a decomposição térmica de biomassas, permitindo a obtenção de dados experimentais fundamentais para a modelagem cinética. A partir desses dados, diferentes metodologias têm sido utilizadas, como os métodos isoconversionais livre de cinética (*model-free*), que possibilitam a estimativa da energia de ativação sem a necessidade de assumir previamente um modelo reacional (Vyazovkin et al., 2011). Por outro lado, abordagens *model-based* utilizam modelos cinéticos específicos para descrever o mecanismo de reação, permitindo a estimação do chamado triplete cinético (energia de ativação, fator pré-exponencial e modelo reacional) (Criado et al., 1989).

Entretanto, ambas as abordagens apresentam limitações quando aplicadas a sistemas complexos como a biomassa lignocelulósica. Métodos *model-free*, embora não dependam da definição prévia de mecanismos, apresentam restrições na interpretação físico-química completa do processo, manipulações e transformações extravagantes de medidas experimentais, estimação de parâmetros cinéticos fortemente correlacionados, e dificuldades no ajuste simultâneo dos diferentes componentes da biomassa, especialmente da lignina, cuja decomposição ocorre de forma mais distribuída ao longo da temperatura, dificultando sua representação adequada

(Mahmood et al., 2021). Por outro lado, métodos *model-based* dependem da escolha prévia de um modelo reacional, o que pode introduzir erros significativos caso esse modelo não represente corretamente o comportamento do sistema. Além disso, a natureza não linear e multivariável da decomposição térmica dificulta a descrição precisa do grau de conversão por meio de modelos tradicionais.

Diante dessas limitações, abordagens baseadas em *machine learning* têm emergido como alternativas promissoras para a modelagem de processos complexos. Diferentemente dos modelos cinéticos convencionais, técnicas de aprendizado de máquina não requerem a definição prévia de mecanismos reacionais, sendo capazes de aprender diretamente a partir de dados experimentais e capturar relações não lineares entre variáveis do sistema. Estudos recentes demonstram o potencial de redes neurais artificiais na modelagem de processos de pirólise, evidenciando sua capacidade de representar adequadamente o comportamento térmico de materiais lignocelulósicos e superar limitações dos modelos tradicionais (Hidayat et al., 2021).

Apesar dos avanços, ainda são limitados os trabalhos que exploram a predição direta do grau de conversão (α) a partir de variáveis operacionais simples, como temperatura (T) e taxa de aquecimento (β), especialmente com foco em aplicações práticas e modelos de fácil implementação. Nesse sentido, o desenvolvimento de abordagens *data-driven* que utilizem essas variáveis como entrada pode contribuir significativamente para a modelagem, simulação e otimização de processos de pirólise.

Dessa forma, o presente trabalho teve como objetivo desenvolver um modelo baseado em redes neurais artificiais para prever o grau de conversão (α) em função da temperatura (T) e da taxa de aquecimento (β), a partir de dados experimentais de análise termogravimétrica, buscando oferecer uma alternativa robusta e eficiente aos métodos cinéticos tradicionais.

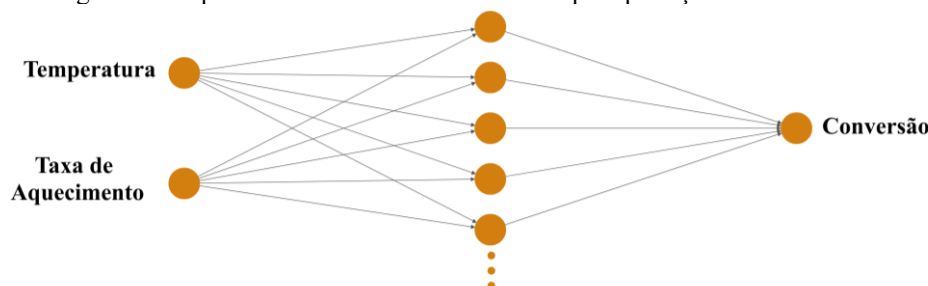
2. Metodologia

Os dados utilizados neste trabalho foram provenientes de Liborio et al. (2024), que empregaram casca exaurida de acácia-negra após extração de taninos. As análises foram conduzidas em um equipamento STA 449 Jupiter (Netzsch, Alemanha) sob atmosfera inerte de nitrogênio. As amostras de biomassa lignocelulósica foram aquecidas a partir da temperatura ambiente até 900°C utilizando diferentes taxas de aquecimento ($\beta = 5, 10, 15, 20$ e 25°C/min). Durante os ensaios, foi registrada a variação de massa em função da temperatura, gerando curvas termogravimétricas (TG), que serviram como base para a construção do conjunto de dados empregado na modelagem. A partir das curvas TG, o grau de conversão (α) foi calculado como uma variável representativa do avanço da decomposição térmica, utilizando a relação entre a perda de massa em uma determinada temperatura (w_l) e a perda de massa final do experimento (w_{lf}) como representado na Equação 1.

$$\alpha = \frac{1-w_l}{1-w_{lf}} \quad (1)$$

A modelagem foi realizada por meio de uma rede neural artificial do tipo *Multilayer Perceptron* (MLP), implementada em linguagem *Python*, utilizando as bibliotecas *TensorFlow* e *Keras*. O modelo (Figura 1) utilizou como variáveis de entrada a temperatura (T) e a taxa de aquecimento (β), tendo o grau de conversão (α) como variável de saída. Adotou-se uma arquitetura com uma única camada oculta, fundamentada no Teorema da Aproximação Universal. A camada oculta utilizou a função de ativação ReLU, enquanto na camada de saída empregou-se a função Sigmoide, garantindo que os valores preditos de α permanecessem no intervalo físico entre 0 e 1.

Figura 1 - Arquitetura da Rede Neural Artificial para predição de conversão térmica.



Para garantir a robustez do modelo, o conjunto de dados foi dividido em 80% para treinamento e 20% para teste. Em seguida, foi realizada a normalização das variáveis com o objetivo de melhorar a estabilidade numérica e o desempenho do modelo durante o treinamento. A arquitetura da rede, especificamente o número de neurônios na camada oculta, foi otimizada por meio de uma busca Bayesiana utilizando o framework *Optuna* com o algoritmo

Realização:

Tree-structured Parzen Estimator (TPE). O espaço de busca para o número de neurônios foi definido entre 4 e 22, visando a obtenção de um modelo de baixa complexidade com baixo número de parâmetros.

Durante a fase de ajuste, implementou-se a técnica de validação cruzada *k-fold* ($k=5$) para mitigar o *overfitting* e assegurar a capacidade de generalização do modelo em diferentes conjuntos de dados. O treinamento utilizou o otimizador Adam com uma taxa de aprendizado de 0,001 e a técnica de *Early Stopping* (com paciência de 5 épocas na validação cruzada e 10 épocas no treinamento final) para interromper o processo assim que a perda de validação parasse de decrescer.

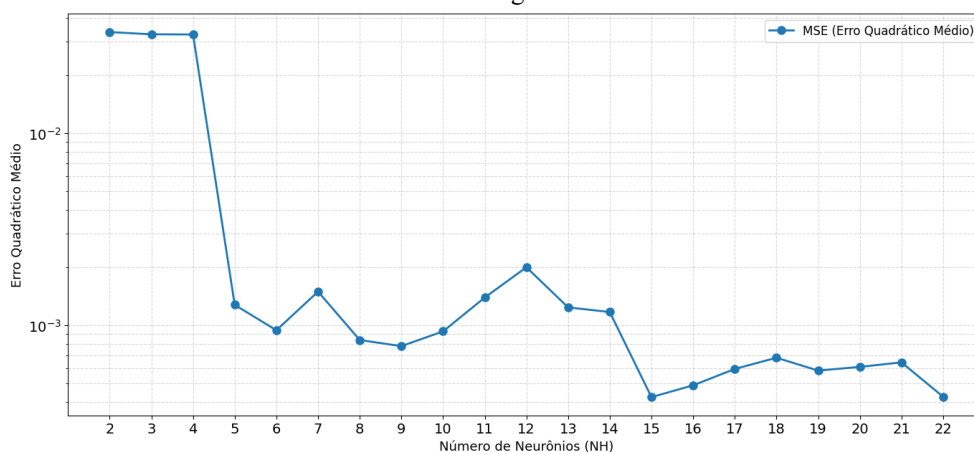
O desempenho do modelo final foi quantificado por meio do Erro Quadrático Médio (MSE) e do Coeficiente de Determinação (R^2). Adicionalmente, foram gerados gráficos de paridade para os conjuntos de treino e de teste, bem como curvas e superfícies de sensibilidade para avaliar a capacidade da rede em reproduzir o comportamento cinético da biomassa sob diferentes condições operacionais.

3. Resultados e discussão

A definição da arquitetura da rede neural foi realizada por meio da análise do número de neurônios na camada oculta, considerando configurações entre 2 e 22 neurônios, conforme apresentado na Figura 2. Observou-se que modelos mais simples (2 a 4 neurônios) apresentaram maiores valores de erro, indicando baixa capacidade de representação do sistema. A partir de 5 neurônios ocorreu redução expressiva do MSE, mantendo-se baixos valores nas configurações subsequentes, com pequenas oscilações ao longo do intervalo avaliado. Os menores erros foram obtidos para 15 e 22 neurônios, evidenciando melhor desempenho preditivo. Entretanto, considerando a pequena diferença entre as arquiteturas mais complexas, a adoção de uma configuração intermediária mostra-se mais adequada por aliar boa precisão e menor complexidade estrutural.

Nesse contexto, a arquitetura com 15 neurônios foi selecionada por apresentar elevado desempenho preditivo aliado a menor complexidade estrutural, uma vez que configurações mais complexas não proporcionaram ganhos expressivos de desempenho. A rede final apresentou 61 parâmetros treináveis, o que a caracteriza como um modelo computacionalmente simples e eficiente.

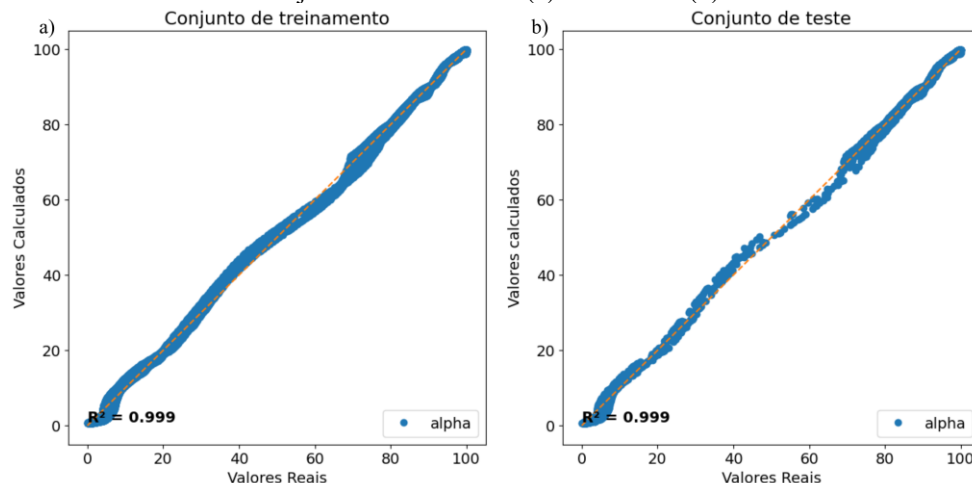
Figura 2 - Influência do número de neurônios na camada oculta sobre o erro quadrático médio do modelo, em escala logarítmica.



O desempenho do modelo foi avaliado por meio do coeficiente de determinação (R^2) e do erro quadrático médio (MSE). Os coeficientes de determinação obtidos foram de 0,9988 para o conjunto de treinamento e 0,9988 para o conjunto de teste, com valor global de 0,9988. A elevada proximidade entre os resultados de treino e teste indica boa capacidade de generalização, sem evidências de sobreajuste significativo. Os valores de MSE, da ordem de 10^{-4} , reforçam a alta precisão das predições realizadas pela rede neural.

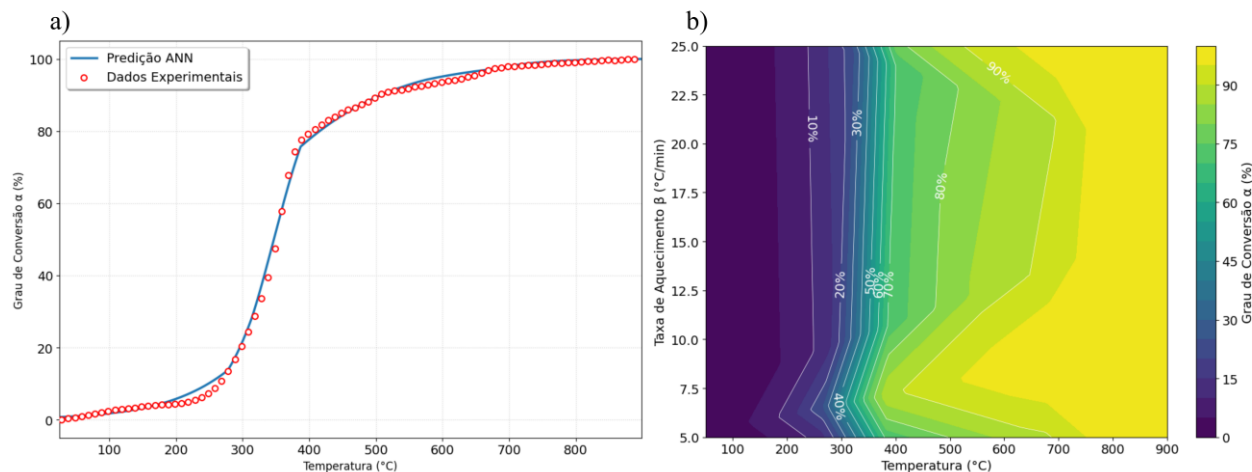
A análise de paridade entre os valores experimentais e preditos é apresentada na Figura 3, por meio de um gráfico de dispersão em que os valores estimados pelo modelo são comparados diretamente aos dados experimentais. Observa-se que os pontos se concentram próximos à linha de identidade, evidenciando elevada concordância entre valores observados e preditos. A reduzida dispersão ao longo de toda a faixa de conversão indica que a rede neural manteve desempenho consistente tanto nas regiões iniciais do processo, associadas a baixos valores de α , quanto nas regiões de maior decomposição térmica.

Figura 3 – Comparação entre os valores experimentais e preditos do grau de conversão (α) para o conjunto de treinamento (a) e o de teste (b).



Para validar a fidelidade fenomenológica do modelo desenvolvido, é apresentado na Figura 4a a comparação entre os dados experimentais e a predição da rede neural (curva de performance) para o ensaio com taxa de aquecimento igual a $10^{\circ}\text{C}/\text{min}$. Observa-se que a curva predita pela rede proposta se sobrepõe aos pontos experimentais em toda a extensão da escala térmica. Este resultado é particularmente relevante, pois demonstra que o modelo foi capaz de capturar a característica sigmoidal do grau de conversão sem a necessidade de assumir modelos reacionais pré-determinados ou parâmetros de Arrhenius, e de realizar manipulações e transformações nos dados experimentais inconsistentes com a prática adequada de estimação de parâmetros.

Figura 4 – Desempenho e análise de sensibilidade da rede neural artificial: (a) comparação entre dados experimentais e preditos para $\beta = 10^{\circ}\text{C}/\text{min}$; (b) mapa de isoconversão predito em função da temperatura e taxa de aquecimento.



A capacidade do modelo em reproduzir o comportamento físico do processo foi analisada por meio do mapa de calor de superfície de resposta do grau de conversão em função da temperatura e da taxa de aquecimento, apresentada na Figura 4b. Observou-se que o aumento da taxa de aquecimento deslocou as regiões de maior conversão para temperaturas mais elevadas, comportamento característico do efeito de atraso térmico em processos de pirólise.

Além disso, a superfície permitiu identificar, de forma contínua, a evolução do grau de conversão ao longo da temperatura, evidenciando a predominância dessa variável na condução do processo de decomposição térmica. De forma complementar, verificou-se que a temperatura atua como principal variável de controle do processo, enquanto a taxa de aquecimento influencia o posicionamento das curvas ao longo da escala térmica.

4. Conclusão

A modelagem da pirólise de biomassa por meio de redes neurais artificiais mostrou-se capaz de representar com elevada precisão a relação não linear entre temperatura, taxa de aquecimento e grau de conversão. A arquitetura adotada, com uma única camada oculta e 15 neurônios, apresentou bom equilíbrio entre desempenho e simplicidade, resultando em baixos erros e elevada capacidade preditiva.

O modelo foi capaz de reproduzir características físicas relevantes do processo, como a evolução do grau de conversão e o deslocamento das curvas em função da taxa de aquecimento, indicando que a abordagem captura, de forma implícita, aspectos cinéticos importantes sem a necessidade de formulações mecanísticas explícitas.

Os resultados reforçam o potencial de técnicas de *machine learning* como alternativa eficiente e de baixo custo computacional para a modelagem, simulação e otimização de processos termoquímicos complexos.

Agradecimentos: Agradecemos apoio financeiro do Programa de Formação de Recursos Humanos da Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis - PRH-ANP, gerido pela Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP), Brasil. Processo nº N. 2025/03493-5, Em especial ao PRH30/UFPE.

Referências

CRIADO, J. M. et al. Applicability of the master plots in kinetic analysis of non-isothermal data. *Thermochimica Acta*, [S.l.], v. 147, n. 2, p. 377-385, 1989. DOI: [https://doi.org/10.1016/0040-6031\(89\)85192-5](https://doi.org/10.1016/0040-6031(89)85192-5).

HIDAYAT, S. et al. Comprehensive kinetic study of Imperata cylindrica pyrolysis via Asym2sig deconvolution and combined kinetics. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, [S.l.], v. 156, p. 105133, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2021.105133>.

LIBÓRIO, D. O. et al. Evaluating black wattle bark industrial residue as a new feedstock for bioenergy via pyrolysis and multicomponent kinetic modeling. *Renewable Energy*, [S.l.], v. 228, p. 120693, 2024. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.renene.2024.120693>.

MAHMOOD, H. et al. A comparative study on suitability of model-free and model-fitting kinetic methods to non-isothermal degradation of lignocellulosic materials. *Polymers*, [S.l.], v. 13, n. 15, p. 2504, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/polym13152504>.

MANISALIDIS, I. et al. Environmental and health impacts of air pollution: a review. *Frontiers in Public Health*, [S.l.], v. 8, p. 14, 2020. DOI: <https://doi.org/10.3389/fpubh.2020.00014>.

QAZI, A. et al. Towards sustainable energy: a systematic review of renewable energy sources, technologies, and public opinions. *IEEE Access*, [S.l.], v. 7, p. 63837-63851, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1109/ACCESS.2019.2906402>.

VYAZOVKIN, S. et al. ICTAC Kinetics Committee recommendations for performing kinetic computations on thermal analysis data. *Thermochimica Acta*, [S.l.], v. 520, n. 1-2, p. 1-19, 2011. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.tca.2011.03.034>