Gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar: modelagem, análise e comparação com sistema real

Alfredo José Alvim de Castro

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – Ipen/CNEN São Paulo – SP [Brasil] ajcastro@ipen.br

Douglas Alves Cassiano

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – Ipen/CNEN São Paulo – SP [Brasil] docass@gmail.com

Newton Libanio Ferreira

Centro Universitário da Fundação Educacional Inaciana – FEI São Bernardo do Campo – SP [Brasil] newton.libanio@uol.com.br

> A modelagem computacional da gaseificação de uma biomassa (bagaço de cana-de-açúcar) para obtenção de uma mistura gasosa rica em hidrogênio foi efetuada com o auxílio do software Aspen Plus®. O modelo construído apresentou média de 74,4% de acurácia – valor considerado satisfatório diante da complexidade do sistema, quando comparado com o resultado de suas simulações com valores reais. Tendo sido o modelo validado e conhecida sua acurácia, foram efetuadas simulações para análise de sensibilidade do sistema de gaseificação, para duas condições distintas de fluxo de alimentação da biomassa, vapor d'água e ar nos equipamentos, no intuito de buscar condições operacionais otimizadas. Pelos resultados dessas análises, observa-se um máximo de 9% em volume de H2, obtido para produtos gasosos em base seca, inferindo-se faixas de condições operacionais recomendáveis para gaseificação do sistema.

Palavras-chave: Aproveitamento de rejeitos industriais. Bagaço de cana-de-açúcar. Gaseificação. Modelagem e simulação de processos. Obtenção de hidrogênio.

1 Introdução

A gaseificação é um processo de conversão termoquímica que ocorre entre o oxigênio e as substâncias que possuam carbono em sua constituição (carvão, madeira etc.), para a obtenção de uma mistura de gases denominada gás de síntese ou syngas (acrônimo de synthesis gas). Nesse processo, o carbono sofre oxidação térmica com o oxigênio utilizado em quantidades inferiores ao estequiometricamente necessário para sua combustão completa. Por esse motivo, o syngas gerado é constituído por componentes gasosos ainda passíveis de combustão, principalmente o hidrogênio (H2) e o monóxido de carbono (CO). As reações químicas descritas, a seguir, ocorrem tipicamente nos processos de gaseificação (REZAIYAN et al., 2005). Além do fornecimento de carbono e ar, pode-se utilizar como matéria-prima o vapor de água (reações de 3 a 5) para o favorecimento da geração de hidrogênio.

$$C + O_2 \rightarrow CO_2 \tag{1}$$

$$C + CO2 \rightarrow 2 CO$$

$$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$$

$$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$$

$$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3 H_2$$

(2)

(3)

(4)

$$C + 2 H_2 \rightarrow CH_4$$
 (6)

Distingue-se a gaseificação da combustão e da pirólise tanto pela quantidade de oxidante utilizada quanto pelos produtos de interesse gerados. Enquanto a pirólise é efetuada sem oxidante, e a combustão, com excesso desse produto, a gaseificação usa quantidades abaixo do estequiometricamente necessário em razão da quantidade de carbono presente nas reações. Como produtos de interesse, a pirólise produz compostos líquidos, já a combustão é efetuada para aproveitamento de calor, gerando subprodutos gasosos, essencialmente gás carbônico (CO2) e vapor de água (H2O), enquanto a gaseificação visa à obtenção de vetores energéticos gasosos, principalmente H2 e CO do syngas.

O *syngas* é utilizado na geração de energia elétrica como combustível para produção de vapor em caldeiras de processos termoelétricos ou na alimentação direta de grupos geradores baseados em motores de combustão interna (CRAIG et al., 1996). É também fonte industrial de hidrogênio e constitui matéria-prima de processos de síntese química. As reações de combustão dos principais componentes do *syngas* estão demonstradas nas reações (7) e (8).

$$2 \text{ CO} + \text{O}_2 \rightarrow 2 \text{ CO}_2 \tag{7}$$

O *syngas* tem sido apontado como uma das mais promissoras fontes de hidrogênio para geração de energia em células a combustível, desde que efetuadas etapas de purificação para minimizar as concentrações de monóxido de carbono e outros gases (STERGARŠEK et al., 2004). Nas células a combustível, há geração de energia, ocorrendo apenas a reação (8) que apresenta como único resíduo a água.

 $2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$

Como virtualmente qualquer composto carbonáceo, sólido ou líquido, pode ser gaseificado, há uma ampla gama de matérias-primas de baixo custo, tais como os rejeitos de origem industrial, agrícola e até esgoto doméstico, que possibilitam a geração de *syngas*, (BAGCHI et al., 2006).

No Brasil, há um crescente interesse no desenvolvimento de processos de gaseificação de biomassas de resíduos agrícolas, em particular aos provenientes do segmento sucroalcooleiro por sua abundância. Somente na safra de 2005, foram colhidos 300 milhões de toneladas de cana-de-açúcar, aproximadamente um quarto da produção mundial. Desse montante, os resíduos representaram 42 milhões de toneladas de matéria seca (HASSUANI et al., 2005).

Os resíduos lignocelulósicos da cana-deaçúcar são classificados, segundo sua origem, em (RÍPOLI et al. 2000):

- bagaço: resíduo sólido obtido no processamento industrial, após operação de moagem;
- palhiço ou palha: denominação genérica dos resíduos gerados na colheita, tais como ponteiros, folhas verdes e palhas propriamente ditas.

Ambos são classificados como sólidos nãoinertes, classe IIA (ABNT, 2004). Isso significa que podem ser aproveitados como biomassa em transformações físicas e/ou químicas, não constituindo rejeitos tóxicos ou que necessitem de disposição controlada.

Apenas um terço da energia total disponível na cana-de-açúcar é aproveitada e convertida em etanol, estando o restante do potencial energético do vegetal presente no bagaço e no palhiço. Entretanto, apesar da possibilidade de uso desses rejeitos, atualmente 93 % do bagaço é utilizado de modo pouco eficiente na queima em caldeiras para geração de vapor (ERLICH et al., 2006). Aproximadamente 85% do palhiço é queimado sem aproveitamento energético durante a colheita, e o restante desses materiais, quando não sofrem queima, é, simplesmente, deixado no próprio campo (HASSUANI et al., 2005).

2 Metodologia

Como ferramenta no auxílio de desenvolvimento de processos de gaseificação para melhor aproveitamento energético de biomassas, destacam-se a modelagem e a análise dos sistemas, utilizando-se o programa Aspen Plus® (PHILIPS, 2007). Esse programa de modelagem é utilizado no desenvolvimento de processos químicos dos mais variados segmentos industriais e possui, além de um vasto banco de dados de propriedades de substâncias químicas, uma interface gráfica que facilita a disposição de sequências de reações e equipamentos, conforme demonstrado na Figura 1.



2.1 Protocolo para a construção do modelo do sistema

Neste trabalho, observou-se as recomendações apresentadas por Panopoulos et al. (2006) na modelagem da gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar como biomassa para geração de

syngas, usando o programa Aspen Plus®. Esses autores apresentaram um protocolo detalhado da utilização do programa na modelagem dos balanços material e energético de sistemas de gaseificação de biomassa, efetuada a partir de dados empíricos da biomassa, como HHV (high heating value) e resultados de análises térmicas (proximate e ultimate analysis). Seu uso é justificado pela acurácia na estimativa das propriedades do sistema para substâncias químicas constantes de seu banco de dados, tais como água, carbono e hidrogênio, pois a modelagem de processos de gaseificação é normalmente efetuada utilizando-se métodos disponíveis no Aspen Plus®, como o de Redlich-Kwong-Soave (9). Entretanto, o bagaço de cana-de-açúcar não consta do banco de dados do programa; portanto, utiliza-se o recurso de criação de dados para uma substância do tipo "sólido não-convencional" na estimativa de suas propriedades no sistema. Para isso, é necessário inserir informações reais sobre o bagaço - por exemplo o valor do poder calorífico (HHV) e dados de composição obtidos em análises térmicas, tais como a composição típica (proximate analysis) e a composição elementar (ultimate analysis).

$$P = \frac{RT}{V - B} - \frac{A}{V(V + B)}$$

(9)

A composição dos produtos finais é determinada pela minimização da energia livre, de Gibbs, do sistema. Com esses parâmetros, os autores demonstraram que é possível efetuar uma modelagem adequada para projeto e construção de um sistema real de gaseificação, trabalhando com biomassas provenientes de resíduos agrícolas.

Foram utilizados dados de um sistema real, constituído por um gaseificador ciclone, operan-

do com bagaço de cana-de-açúcar, reportados por Gabra et al. (2001) para a obtenção dos balanços material, energético e de eficiência de separação dos produtos sólidos. Após a modelagem e validação do sistema com os dados reais, uma análise de sensibilidade foi efetuada para a faixa de gaseificação de tal sistema, variando-se a quantidade alimentada de oxidante.

2.2 Dados do bagaço de canade-açúcar utilizados no recurso "sólido não-convencional"

O bagaço de cana-de-açúcar utilizado apresentava HHV de 18,2 MJ/kg. Nas Tabelas 1 e 2, são apresentados dados das análises de sua composição em percentual de massa.

Tabela 1: Proximate analysis do bagaço

de cuna-de-dçucui	
Proximate A	nalysis (w%)
Carbono fixo	14,0
Matéria volátil	78,6
Umidade	5,9
Cinzas	7,4

Fonte: os autores.

Tabela 2: Ultimate analysis do	bagaço
de cana-de-açúcar	

Ultimate Analysis (w%)	
Carbono	45,15
Hidrogênio	5,40
Oxigênio	41,80
Nitrogênio	0,20
Enxofre	0,02
Cloro	0,03
Cinzas	7,40
Fonte: os autores	

Outro dado utilizado na simulação do gaseificador foi o uso de pastilhas compactadas (*pellets*) de pó de bagaço de cana-de-açúcar, cuja distribuição de tamanho de partículas é apresentada na Tabela 3.

Tabela 3: Distribuição de tamanho de partículas dos *pellets*

Variação (mm)	Percentual (%)
0 - 0,040	3
0,040 - 0,071	5
0,071 - 0,100	2
0,100 - 0,125	2
0,125 - 0,250	16
0,250 - 0,500	26
0,500 - 1,000	23
1,000 - 2,000	23

Fonte: os autores.

2.3 Dados operacionais adotados para simulação do sistema

Ar e bagaço de cana-de-açúcar foram fornecidos ao sistema a 25°C e 700 mmHg. Utilizaramse dois fluxos de alimentação de bagaço, 39 kg/h e 52 kg/h, com os de vapor d'água, respectivamente de 16,4 kg/h (a 382°C e 700 mmHg) e 17,2 kg/h (a 345°C e 700 mmHg).

Para análise de sensibilidade do sistema, utilizaram-se diferentes fluxos de alimentação de ar na faixa operacional de gaseificação. Algumas informações importantes foram obtidas dos dados práticos, tais como a quantidade desprezível de alcatrão formada pelo sistema e a não-ocorrência da gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar em temperaturas abaixo de 600°C.

3 Resultados

3.1 Confronto dos resultados da simulação com dados reais

A Tabela 4 apresenta os resultados da simulação do sistema, comparativamente aos dados reais, para a operação do gaseificador alimentado com 39 kg/h de bagaço de cana-de-açúcar. A eficiência de separação de produtos sólidos (escória ou *char*), nesse sistema, obtida pela simulação foi de 96%.

	Experimental	Simulação
Char (kg/h)	6,24	4,52
Umidade (kg / kg gás seco)	0,29	0,20
Temperatura do gás (°C)	827	817
Composiçõ	ão do gás seco (%	6 vol)
H ₂	7,95	6,59
N ₂	59,83	57,60
СО	10,83	4,39
CO ₂	17,21	19,95
demais hidrocarbo- netos gasosos	4,18	11,47

Tabela 4: Resultados para o sistema alimentado com 39 ka/h de bagaco de cana-de-acúcar

Fonte: os autores.

Para o gaseificador alimentado com 52 kg/h de bagaço de cana-de-açúcar os resultados são apresentados na Tabela 5. Obteve-se 96,4% de eficiência de separação de produtos sólidos nessa simulação.

Tabela 5: Resultados para o sistema alimentado com 52 kg/h de bagaço de cana-de-açúcar

		a
	Experimental	Simulação
Char (kg/h)	6,20	7,33
Umidade (kg / kg gás seco)	0,27	0,19
Temperatura do gás (°C)	826	827
Composiçõ	ão do gás seco (%	6 vol)
H ₂	7,91	6,60
N ₂	57,19	58,90
СО	12,38	4,62
CO ₂	16,17	19,21
demais hidrocarbo- netos gasosos	6,35	10,67

Fonte: os autores.

Em operações de gaseificação, usualmente, os alcatrões representam um grande problema operacional; entretanto, o bagaço da cana-deaçúcar mostrou nos dados práticos uma quantidade pouco significativa, em torno de 0,004 kg de alcatrão / kg de gás seco. Na apresentação, tanto nas simulações quanto nos experimentos, as frações de hidrocarbonetos como CH_4 , C_2H_4 , C_2H_6 , C_2H_2 foram preteridas em razão dos produtos de interesse como o H_2 e CO. Destes hidrocarbonetos, mesmo o CH_4 , que apresentou a maior porcentagem volumétrica em base seca nos dados práticos, não chegava a representar 2% da mistura gasosa.

A Tabela 6 traz, para os dois casos testados (39 kg/h e 52 kg/h de bagaço), o percentual médio de acurácia da simulação em confronto com os valores reais do equipamento.

Tabela 6: Média percentual de acurácia da simulação confrontada com os valores reais do equipamento

	Acurácia (%)
Char	77,1
Umidade	69,7
Temperatura do gás	99,3
Composição	o do gás seco
H ₂	83,2
N ₂	96,6
CO	38,9
CO ₂	82,6
demais hidrocarbonetos gasosos	48,0

Observa-se para os quatro componentes principais obtidos da gaseificação (hidrogênio, nitrogênio, monóxido de carbono e dióxido de carbono) uma média de 75,3 % de acurácia na estimativa do modelo em referência ao balanço material. Como média geral da simulação com base nos dados reais, obteve-se 74,4% de acurácia.

Considerando a complexidade do sistema e observando os valores individuais de cada estimativa, conclui-se que o modelo computacional prediz, com relativa boa acurácia, o comportamento do processo de gaseificação do bagaço para produção de *syngas*, em especial a concentração de hidrogênio. Assim, efetuaram-se simulações de análise de sensibilidade do processo, estimando o comportamento do equipamento em condições diferentes das testadas no sistema real.

3.2 Análise de sensibilidade do sistema

Variando-se a quantidade de oxidante, avaliaram-se a temperatura e a produção de H_2 na análise das condições de gaseificação. Na Figura 2 é apresentada a análise de sensibilidade da temperatura dos produtos gasosos do sistema em função do fluxo de alimentação do ar.

A análise de sensibilidade da obtenção de H_2 em função do fluxo de alimentação de ar está registrada na Figura 3. A composição em percentual volumétrico do hidrogênio nos produtos gasosos é apresentada em base seca.

Os gráficos apresentados nas Figuras 4 e 5 referem-se às análises de sensibilidade da temperatura dos produtos gasosos em função da razão entre a alimentação de oxidante e da biomassa, respectivamente para os fluxos de alimentação de bagaço de cana-de-açúcar de 39 kg/h e 52 kg/h.

Os gráficos apresentados nas Figuras 6 e 7 referem-se às análises de sensibilidade da obtenção de H_2 em função da razão entre alimentação de oxidante e de biomassa, respectivamente para os fluxos de alimentação de bagaço de cana-deaçúcar de 39 kg/h e 52 kg/h.

4 Discussão e considerações finais

O modelo construído para o sistema é adequado para fins de projeto. Constatou-se, ao se confrontarem os resultados da simulação com os dados práticos de duas condições operacionais diferentes apresentados nas Tabelas 4 e 5, que para as temperaturas do sistema, não se observaram des-













vios maiores do que 1,2 % entre os valores simulados e os reais. Quanto aos resultados da simulação













para o balanço material – à exceção do monóxido de carbono que, no caso menos favorável, aproxi-

38.8.°.

mou-se 37,3 % do resultado real –, para todos os demais componentes de interesse foram bastante satisfatórios (75,3 % de acurácia em média).

Nas análises de sensibilidade dos gráficos apresentados nas Figuras 1 e 2, podem-se observar as distinções que ocorrem para as diferentes alimentações de biomassa em relação à variação da alimentação de ar. Da Figura 3 infere-se que o sistema opera preferencialmente, efetuando a combustão dos reagentes em torno de 160 kg/h e 220 kg/h de vazão de ar, respectivamente para as alimentações de bagaço de cana-de-açúcar de 39 kg/h e 52 kg/h. Isso ocorre porque a taxa de produção de hidrogênio começa a diminuir, ou seja, ele está sendo consumido pelo sistema na formação de vapor d'água.

Entretanto, tabulando-se os resultados pela razão entre os fluxos de alimentação de ar e bagaço para os casos testados, observa-se uma tendência do sistema a comportar-se de maneira semelhante, independentemente da quantidade de biomassa alimentada em relação às variações de temperatura (Figuras 4 e 5) e obtenção de hidrogênio (Figuras 6 e 7). Essa similaridade de comportamento é importante para fins de *scale-up* de projeto, pois indica que o sistema apresenta comportamento de proporcionalidade nas condições operacionais avaliadas.

Observando-se as Figuras 6 e 7, pode-se obter uma avaliação mais consistente da faixa operacional indicada para a gaseificação do sistema. Para tal faixa operacional, a razão de alimentação ar/biomassa apresenta valores compreendidos entre 1,3 e 4.

Por fim, observa-se um valor máximo em torno de 9% em volume de H_2 para o produto gasoso obtido em base seca. Esse resultado otimizado serve de base para avaliação técnica do processo quanto a seu uso como alternativa na produção de hidrogênio.

Sugar cane bagasse gasification: modeling, analysis and real system comparison

The computational modeling of a biomass gasification (sugar cane bagasse) to obtain a hydrogen rich gaseous mixture was performed with the aid of Aspen Plus® software. The model presented an average of 74,4% of accuracy - this value is satisfactory, considering the system complexity, in comparison with real system behavior. Knowing the model accuracy, simulations were effected for analysis of the gasification system sensitivity, considering two different flow values of biomass, steam and air in the equipments, to search optimized operational conditions. According to the results, it is observed a maximum of 9% in volume of H2, obtained for gaseous products in dry basis, inferring range parameters of operational conditions recommended for gasification of the system.

Key words: Gasification. Hydrogen production. Industrial waste recycling. Modeling and simulation processes. Sugar cane bagasse.

Referências

ABNT; NBR 10004: Resíduos sólidos – Classificação, *Associação Brasileira de Normas Técnicas*, 2004.

BAGCHI, B.; RAWLSTON, J.; COUNCE, R.M.; HOLMES, J.M.; BIENKOWSKI, P.R.; Green production of hydrogen from excess biosolids originating from municipal wastewater treatment, *Separation Science and Technology*, v. 41, p. 2613-2628, 2006.

CRAIG, K.R.; MANN, M.K.; Cost and Performance Analysis of Biomass-Based Integrated Gasification Combined-Cycle (BIGCC) Power Systems. NREL NREL/ TP-430-21657, 1996.

ERLICH, C.; BJÖRNBORN, E.; BOLADO, D.; GINER, M.; FRANSSON, T.H.; Pyrolysis and gasification of pellets from sugar cane bagasse and wood, *Fuel*, v. 85, p. 1535-1540, 2006.

GABRA, M.; PETTERSSON, E.; BACKMAN, R.; KJELLSTRÖM, B.; Evaluation of cyclone gasifier performance for gasification of sugar cane residue – Part 1: gasification of bagasse, *Biomass & Bioenergy*, v. 21, p. 351-329, 2001. HASSUANI, J.S.; LEAL, M.R.L.V.; MACEDO, I.C.; Biomass power generation – sugarcane bagasse and trash, *Caminhos para a Sustentabilidade 1. ed.*, PNUD/CTC, 2005.

PANOPOULOS, K.D.; FRYDA, L.E.; KARL, J.; POULOU, S.; KAKARAS, E.; High temperature SOFC integrated with novel allothermal biomass gasification – Part I: Modeling and feasibility study, *Journal of Power Sources*, v. 159, 2006.

PHILIPS, S.D.; Technoeconomic analysis of a lignocellulosic biomass indirect gasification process to make ethanol via mixed alcohols synthesis, *Industrial Engineering Chemical Research*, v. 46, n. 26, p. 8887-8897, 2007.

REZAIYAN, J.; CHEREMISINOFF, N.P.; Gasification technology: a primer for engineers and scientists, CRC Press, 2005.

RÍPOLI, T.C.C.; MOLINA JR., W.F.; RÍPOLI, M.R.; Energy potential of sugar cane biomass in Brazil, *Scientia Agricola*, v. 57, n. 4, p. 677-681, 2000.

STERGARŠEK, A.; STEFAN, J.; Cleaning of syngas derived from waste and biomass gasification/pyrolysis for storage or direct use for electricity production. Production and Purification of Fuel from Waste and Biomass Workshop, Košice, Oct., 2004.

Recebido em 28 nov. 2008 / aprovado em 6 jan. 2009

Para referenciar este texto

CASTRO, A. J. A. de; CASSIANO, D. A.; FERREIRA, N. L. Gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar: modelagem, análise e comparação com sistema real. *Exacta*, São Paulo, v. 7, n. 1, p. 39-47, 2009.

alan a sa sa sa