

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA**

**Avaliação Técnico Econômica e Ambiental da Planta de Produção de
Hidrogênio Usando Fontes Renováveis (H2V): Diagnóstico, Otimização,
Avaliação dos Impactos Ambientais**

Túlio Tito Godinho de Rezende

Itajubá-MG, abril de 2025

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

Túlio Tito Godinho de Rezende

Avaliação Técnico Econômica e Ambiental da Planta de Produção de Hidrogênio Usando Fontes Renováveis (H2V): Diagnóstico, Otimização, Avaliação dos Impactos Ambientais

Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia da Mecânica (PPGEM), da Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI), como parte dos requisitos de obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

Orientador: Prof. Dr. Osvaldo José Venturini

Co-Orientador: Prof. Dr. José Carlos Escobar Palacio

Itajubá-MG, abril de 2025

UNIVERSIDADE FEDERAL DE ITAJUBÁ
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM
ENGENHARIA MECÂNICA

Túlio Tito Godinho de Rezende

Avaliação Técnico Econômica e Ambiental da Planta de Produção de Hidrogênio Usando Fontes Renováveis (H2V): Diagnóstico, Otimização, Avaliação dos Impactos Ambientais

Tese de Doutorado submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia da Mecânica (PPGEM), da Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI), como parte dos requisitos de obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica

Banca examinadora:

Prof. Dr. Osvaldo José Venturini
Prof. Dr. José Carlos Escobar Palacio
Prof. Dr. Dimas José Rúa Orozco
Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade
Profa. Dra. Maria Luiza Grillo Reno
Prof. Dr. York Castillo Santiago

Itajubá-MG, abril de 2025

DEDICATÓRIA

À minha amada mãe, Mariluci

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família, em especial minha mãe, por todo o apoio e amor.

Aos meus orientadores do mestrado, Prof. Dr. Flávio Neves Teixeira e Prof. Dr. Luiz Gustavo Monteiro Guimarães pelo auxílio e orientação durante a primeira etapa da minha vida acadêmica.

Aos meus atuais orientadores do doutorado, Prof. Dr. Osvaldo José Venturini e José Carlos Escobar Palacio pela parceria indispensável na elaboração deste trabalho.

À minha namorada e aos meus amigos por serem os catalisadores da minha felicidade.

Ao programa de Pós-Graduação em Engenharia da Mecânica da Universidade Federal de Itajubá (UNIFEI) por proporcionar todo o apoio e conhecimento necessário para que esse trabalho pudesse acontecer.

E por fim, à CNPq (317527/2021-5), FAPEMIG (APQ-02372-23 e RED-00090-21) e CAPES pelo apoio financeiro imprescindível para o desenvolvimento desse trabalho.

Epígrafe

“O modo científico de pensar é ao mesmo tempo imaginativo e disciplinado. Isso é fundamental para o seu sucesso. A ciência nos convida a acolher os fatos, mesmo quando eles não se ajustam às nossas concepções.”

Carl Sagan

RESUMO

O aumento populacional e a industrialização apresentam o desafio de fornecer mais energia com menos emissões de gases de efeito estufa. Nesse contexto, o hidrogênio se destaca como um dos mais promissores vetores energéticos, além de ser essencial na produção de amônia, metanol, aço, produtos da indústria de vidro, entre outros. Este estudo tem como objetivo analisar o potencial técnico, econômico e ambiental da produção de hidrogênio a partir de fontes de energia renováveis no estado de Minas Gerais. O primeiro processo analisado foi a gaseificação de resíduos de biomassa. Para isso, foram consideradas as 66 microrregiões de Minas Gerais na análise de nove diferentes resíduos selecionados, sob distintas condições de agentes gaseificantes e com possibilidade de aprimoramento dos gases. Para tal, foi desenvolvido um modelo de equilíbrio químico baseado na minimização da energia livre de Gibbs, validado para condições de gaseificação com ar, oxigênio puro e mistura de ar e vapor. Além disso, uma simulação de Monte Carlo sobre a análise econômica e uma análise de ciclo de vida foram empregadas para o processo de gaseificação. O segundo processo avaliado foi a eletrólise do tipo PEM (membrana de troca de prótons) a partir de fontes renováveis. A eletrólise foi modelada e, após a validação do modelo, foram realizadas análises de sensibilidade para determinar os pontos de operação que maximizam a produção de H₂. Com os pontos de máxima produção determinados para os processos de eletrólise e gaseificação, realizou-se uma análise econômica, utilizando o custo nivelado de produção do hidrogênio (LCOH) como métrica. Os principais resultados indicaram que, na gaseificação, o maior potencial teórico de produção em Minas Gerais foi obtido para os resíduos de cana-de-açúcar, representando 82% do total. Apenas nove microrregiões do estado concentraram cerca de 80% desse potencial. O potencial econômico foi avaliado em três cenários de recolhimento e uso dos resíduos, destacando-se Frutal e Uberaba como as microrregiões com melhores perspectivas econômicas, alcançando valores inferiores a 3 US\$/kg de hidrogênio sob condições otimistas de uso dos resíduos em todos os cenários de agente gaseificante. Na simulação de Monte Carlo, os parâmetros de entrada que mais influenciaram o LCOH na gaseificação foram: taxa mínima de atratividade, fator de recuperação de resíduos, CAPEX (despesas de capital), CEPCI (índice de custo de planta de engenharia química) e impostos locais. A análise de ciclo de vida evidenciou que o uso dos gases de purga do PSA (adsorção por oscilação de pressão) na gaseificação é ambientalmente necessário e que as emissões do processo ficaram abaixo de 2,44 kg_{CO₂eq}/kg_H que é considerado baixo segundo a Lei 14.948, de 2024, do código brasileiro. Para a eletrólise, verificou-se que a exigência de pureza do hidrogênio implica um aumento considerável do custo nivelado. Além disso, a adição de módulos de eletrólise gerou um efeito de economia de escala mais significativo para baixas capacidades. Constatou-se, ainda, que a geração de potência própria não consegue competir com as tarifas de leilão da mesma fonte, para ambos solar e eólica, pois estas se beneficiam de economias de escala, resultando em custos mais baixos.

Palavras-chave: Hidrogênio, Gaseificação de biomassa, Eletrólise tipo PEM, Minas Gerais.

ABSTRACT

Population growth and industrialization present the challenge of providing more energy with fewer greenhouse gas emissions. In this context, hydrogen stands out as one of the most promising energy carriers, in addition to being essential for the production of ammonia, methanol, steel, glass industry products, among others. This study aims to analyze the technical, economic, and environmental potential of hydrogen production from renewable energy sources in the state of Minas Gerais. The first process analyzed was biomass residue gasification. For this, the 66 microregions of Minas Gerais were considered in the analysis of nine selected types of residues, under different gasifying agent conditions and with the possibility of gas upgrading. A chemical equilibrium model based on Gibbs free energy minimization was developed for this purpose, validated under gasification conditions with air, pure oxygen, and air-steam mixtures. Additionally, a Monte Carlo simulation was applied for the economic analysis, along with a life cycle assessment (LCA) of the gasification process. The second process evaluated was proton exchange membrane (PEM) electrolysis powered by renewable sources. The electrolysis process was modeled and, after model validation, sensitivity analyses were carried out to determine the operating points that maximize hydrogen production. With the maximum production points defined for both the electrolysis and gasification processes, an economic analysis was performed using the Levelized Cost of Hydrogen (LCOH) as a metric. The main results indicated that, in the case of gasification, the highest theoretical hydrogen production potential in Minas Gerais was obtained from sugarcane residues, representing 82% of the total. Only nine microregions concentrated about 80% of this potential. The economic potential was evaluated under three residue collection and usage scenarios, with Frutal and Uberaba standing out as the regions with the best economic prospects, reaching LCOH values below US\$3/kg of hydrogen under optimistic waste utilization conditions across all gasifying agent scenarios. In the Monte Carlo simulation, the input parameters that most influenced the LCOH in gasification were: minimum attractive rate of return (MARR), residue recovery factor, capital expenditures (CAPEX), Chemical Engineering Plant Cost Index (CEPCI), and local taxes. The life cycle assessment indicated that using the purge gas from the PSA (Pressure Swing Adsorption) process in gasification is environmentally necessary, and that the process emissions were below 2.44 kgCO₂eq/kgH₂, which is considered low according to Law 14,948 of 2024, from the Brazilian code. For electrolysis, it was found that hydrogen purity requirements considerably increase the levelized cost. Furthermore, the addition of electrolysis modules showed a more significant economy of scale effect at lower production capacities. It was also found that self-generation of electricity cannot compete with auction-based tariffs from the same renewable sources (solar and wind), as these benefit from economies of scale, resulting in lower costs.

Keywords: Hydrogen, Biomass gasification, PEM electrolysis, Minas Gerais.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Minas Gerais dividida em microrregiões.....	24
Figura 2 - Esquema dos gaseificadores de leito fixo.....	27
Figura 3 - Esquema dos gaseificadores de leito fluidizado	29
Figura 4 – Gaseificador de leito arrastado.....	31
Figura 5 - Exemplo da conversão de CO de uma reação de mudança do vapor da água dos gases provenientes de uma típica reforma a vapor do metano.....	37
Figura 6 - <i>Pressure swing adsorption</i> (PSA)	39
Figura 7 -Principais tipos de eletrolisadores	43
Figura 8 - Diferentes fases da análise de ciclo de vida	50
Figura 9 - Esquema do pré-tratamento dos resíduos	64
Figura 10 - 1º Esquema da planta de produção	65
Figura 11 - Complexo de compressão de hidrogênio da gaseificação	66
Figura 12 - 2º Esquema da planta de produção	66
Figura 13 - Preço dos fretes por tonelada e distância percorrida	72
Figura 14 - Distribuições probabilísticas pressupostas das variáveis de entrada – Parte 1	74
Figura 15 - Distribuições probabilísticas pressupostas das variáveis de entrada – Parte 2	76
Figura 16 - Esquema da análise de ciclo de vida empregada no processo de gaseificação para produção de H ₂	77
Figura 17 - Comportamento da eficiência de Faraday pela densidade de corrente para diferentes temperaturas	81
Figura 18 - Pilha de células do eletrolisador de 1,25 MW da Bosch	87
Figura 19- Esquema da planta de produção de eletrólise.....	88
Figura 20 - Composição da tarifa de energia	94
Figura 21 - Comparação dos resultados obtidos por esse estudo com os obtidos por Zainal et al. (2001)	97
Figura 22 - Curvas de produção de H ₂ dos resíduos em função da razão de equivalência para gaseificação com ar (base úmida)	102
Figura 23 - Curvas de produção de H ₂ dos resíduos por razão de equivalência para gaseificação com oxigênio (base úmida).....	103
Figura 24 - Superfície da produção de H ₂ por Biomassa seca (g _{H2} /kg _{biomassa.seca}) com a variação de SB e ER da madeira de eucalipto.....	104
Figura 25 - Curvas dos pontos ótimos por SB para a madeira de eucalipto.....	107
Figura 26 - Potencial de produção teórico de hidrogênio por gaseificação com ar para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais	110

Figura 27 - Potencial de produção de hidrogênio por gaseificação com oxigênio para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais	111
Figura 28 - Potencial de produção de hidrogênio por gaseificação com ar e vapor para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais	112
Figura 29 - Colaboração percentual dos resíduos e das microrregiões no potencial de produção	113
Figura 30 - Comportamento da massa específica do H ₂ com a variação da pressão para uma temperatura fixa de 25 °C	115
Figura 31 - Custo do hidrogênio de diferentes rotas de produção.....	116
Figura 32 - Média anualizada do CEPCI ao longo dos anos.....	117
Figura 33 - Comparação dos custos nivelados de produção de hidrogênio para a gaseificação com ar e 30% de utilização de resíduos entre o esquema de planta com e sem aprimoramento dos gases	118
Figura 34 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com ar (2º esquema) avaliado pelo custo nivelado de produção.....	120
Figura 35 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com oxigênio (2º esquema) avaliado pelo custo nivelado de produção	121
Figura 36 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com ar e vapor (2º esquema) avaliado pelo custo de produção	122
Figura 37 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unaí e Juiz de Fora para gaseificação com ar	124
Figura 38 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unaí e Juiz de Fora para gaseificação com oxigênio.....	125
Figura 39 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unaí e Juiz de Fora para gaseificação com ar/vapor	126
Figura 40 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com ar	127
Figura 41 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com oxigênio...	128
Figura 42 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com ar/vapor ...	129
Figura 43 – Comparação das emissões da planta de gaseificação com ar sem e com reaproveitamento do gás de purga do PSA	130
Figura 44 – Emissões de dióxido de carbono equivalente para a planta de gaseificação nas três condições de agente gaseificante.....	131
Figura 45 - Comparação dos resultados do modelo deste estudo com os obtidos por Ruuskanen et al. (2017).....	133
Figura 46 - Comparação dos resultados do modelo deste estudo com os obtidos por Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012).....	134
Figura 47 - Curvas de polarização e eficiência para diferentes temperaturas da célula do eletrolisador	136

Figura 48 - Curvas de polarização e eficiência para diferentes pressões no catodo da célula do eletrolisador.....	137
Figura 49 - Curva de polarização da célula típica definida.....	138
Figura 50 - Vazão mássica de hidrogênio produzido e eficiência da célula em relação a densidade de corrente.....	139
Figura 51 - Potencial de produção de hidrogênio por eletrólise tipo PEM considerando energia elétrica eólica em MG com torres de 100 m de altura	142
Figura 52 - Potencial de produção de hidrogênio por eletrólise tipo PEM considerando energia elétrica solar fotovoltaica em MG.....	144
Figura 53 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com o número de módulos para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte eólica.....	148
Figura 54 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com a potência nominal da planta para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte eólica.....	149
Figura 55 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com o número de módulos para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte solar	150
Figura 56 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com a potência nominal da planta para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte solar	150
Figura 57 - Comportamento do custo nivelado da eletrólise com a tarifa TUSD para módulos de diferentes capacidades utilizando energia solar própria.....	151
Figura 58 - Comportamento do custo nivelado da eletrólise com a tarifa TUSD para módulos de diferentes capacidades utilizando energia eólica própria	152

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Principais reações da gaseificação	25
Tabela 2 - Resíduos de biomassas escolhidos e suas análises elementar e imediatas	60
Tabela 3 - Dados utilizados na estimativa de custos da gaseificação.....	68
Tabela 4 - Estimativa do custo total de investimento da gaseificação	68
Tabela 5 - Estimativa dos custos O&M da gaseificação	69
Tabela 6 - Densidade dos resíduos de biomassa	72
Tabela 7 - Consumo de diesel para as etapas de recolhimento da palhada	78
Tabela 8 - Gastos de água e energia dos métodos de desmineralização considerados.....	79
Tabela 9 - Valores de densidade de corrente trocada e coeficiente de transferência de carga da literatura	84
Tabela 10 - Dados utilizados na estimativa de custos da eletrólise.....	90
Tabela 11 – Estimativa dos custos O&M da eletrólise	91
Tabela 12 – Estimativa do CAPEX de plantas fotovoltaicas e eólicas para os próximos anos.....	92
Tabela 13 – Radiação solar média diária do mês de dezembro.....	93
Tabela 14 - Comparação dos resultados em concentração volumétrica com os de Zainal et al. (2001)	96
Tabela 15 - Dados de entrada utilizados pelos autores na validação de Santiago et al. (2021)	98
Tabela 16 - Comparação dos resultados do modelo de equilíbrio com os resultados de outros autores	98
Tabela 17 - Dados de entrada da biomassa utilizados por Sales et al. (2017).....	99
Tabela 18 - Comparação com os resultados experimentais da gaseificação com ar/vapor de Sales et. al. (2017) (Base seca). Exp = experimental, Mod = modelo deste estudo	100
Tabela 19 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com ar como agente oxidante	101
Tabela 20 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com oxigênio como agente oxidante	101
Tabela 21 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com ar/vapor como agente oxidante.....	105
Tabela 22 - Potencial de produção de H ₂ pós reatores para gaseificação com ar.....	106
Tabela 23 - Potencial de produção de H ₂ pós reatores para gaseificação com oxigênio.....	106
Tabela 24 - Potencial de produção de H ₂ pós reatores para gaseificação com ar e vapor.....	108
Tabela 25 - Dados para o cálculo da potência de acionamento dos compressores	114
Tabela 26 - Dados da análise econômica	116
Tabela 27 - Ranque qualitativo para o custo de produção de H ₂	117
Tabela 28 – Cenários da análise de ciclo de vida.....	130
Tabela 29 - Propriedades da entrada utilizadas para a comparação dos resultados com os de Ruuskanen et al. (2017)	132
Tabela 30 - Valores de CTC e densidade de carga trocada utilizadas por Ruuskanen et al. (2017) ...	133
Tabela 31 - Propriedades da entrada utilizadas para a comparação dos resultados com os de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012).....	134

Tabela 32 - Dados de entrada considerados baseando-se em um eletrolisador PEM típico	135
Tabela 33 – Parâmetros da célula eletrolítica típica estabelecida	140
Tabela 34 – Turbinas adotadas para a análise do Atlas Eólico de Minas Gerais	140
Tabela 35 - Potencial de produção de H ₂ em Minas Gerais a partir da eletrólise utilizando energia elétrica de fonte eólica.....	141
Tabela 36 - Potencial de produção de H ₂ em Minas Gerais a partir da eletrólise utilizando energia elétrica de fonte solar fotovoltaica	143
Tabela 37 – Tarifas de energia elétricas baseadas em diferentes fontes	145
Tabela 38 - Tarifas de energia elétrica da Cemig para média e alta tensão - A2	146
Tabela 39 - LCOH para módulos eletrolisadores de diferentes capacidades com pureza 3N e tarifas de diferentes fontes renováveis	146
Tabela 40 - LCOH para módulos eletrolisadores de diferentes capacidades com pureza 5N e tarifas de diferentes fontes renováveis	147

LISTA DE SÍMBOLOS

LCOH	custo nivelado de produção de hidrogênio, US\$ ano ⁻¹
GLP	gás liquefeito de petróleo
PEM	membrana de troca de prótons
SOE	óxido sólido
CFD	fluido dinâmica computacional
ANN	redes neurais artificiais
PCI	poder calorífico inferior, kJ kg ⁻¹ ou kJ Nm ⁻³
WGS	<i>water gas shift</i> ou deslocamento gás-água
S/G	relação molar de vapor por gás seco
RME	éster metílico de óleo de colza
PSA	<i>pressure swing adsorption</i>
AWE	alcalino convencional com eletrólito líquido
n	número normalizado de átomos da composição elementar da biomassa
w	coeficiente estequiométrico da umidade
α	coeficiente estequiométrico do vapor
m	coeficiente estequiométrico do ar
ρ	proporção de nitrogênio com relação ao oxigênio
x	coeficiente estequiométrico das espécies dos produtos
C	porcentagem da análise elementar em base seca do carbono
H	porcentagem da análise elementar em base seca do hidrogênio
O	porcentagem da análise elementar em base seca do oxigênio
N	porcentagem da análise elementar em base seca do nitrogênio
S	porcentagem da análise elementar em base seca do enxofre
U	porcentagem de umidade da biomassa
MM	massa molar, kg kmol ⁻¹
OP	porcentagem de oxigênio no ar
SB	razão de vapor superaquecido e biomassa úmida
K ₁	constante de equilíbrio da reação de formação do metano
K ₂	constante de equilíbrio da reação de deslocamento gás-água
dH	entalpia da espécie química, kJ kmol ⁻¹
H _f ⁰	entalpia de formação do gás, kJ kmol ⁻¹
ΔH	variação de entalpia com relação a temperatura de referência, kJ kmol ⁻¹
C _p	calor específico, kJ kmol ⁻¹ K ⁻¹
ΔT	variação de temperatura do gás com relação a temperatura de referência, K

$H_{(\text{vap})}$	entalpia de vaporização da água, kJ kmol^{-1}
PCS	poder calorífico superior, kJ kg^{-1}
ΔG^0	variação da energia livre de Gibbs com relação a temperatura de referência, kJ kmol^{-1}
R	constante universal dos gases, $\text{kJ kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$
T	temperatura, K
%H ₂	porcentagem de hidrogênio diatômico nos produtos
%Bio	porcentagem de Biomassa nos reagentes
ER	razão de equivalência
AC	razão ar/combustível
[CO]	porcentagem molar do monóxido de carbono nos produtos
[H ₂]	porcentagem molar do hidrogênio diatômico nos produtos
[CH ₄]	porcentagem molar do metano nos produtos
[C _m H _n]	porcentagem molar dos demais hidrocarbonetos nos produtos
%CO	porcentagem de monóxido de carbono nos produtos
%CO ₂	porcentagem de dióxido de carbono nos produtos
%H ₂ O	porcentagem de água nos produtos
%CH ₄	porcentagem de metano nos produtos
%SO ₂	porcentagem de dióxido de enxofre nos produtos
%N ₂	porcentagem de gás nitrogênio nos produtos
C _{co}	eficiência de conversão do monóxido de carbono
P _{th2}	potencial de produção de hidrogênio diatômico, ton ano^{-1}
RH ₂ Bio	razão mássica de hidrogênio por biomassa seca, $\text{kg}_{\text{H}_2} \text{kg}^{-1}_{\text{Biomassa}}$
PB	quantidade de biomassa produzida na microrregião no período de um ano, ton ano^{-1}
RRB	razão de resíduos produzidos em relação a biomassa produzida
η	porcentagem do resíduo produzido possível de ser utilizada para produzir hidrogênio por gaseificação ou fator de recuperação;
C _E	custo estimado do equipamento para uma determinada capacidade, US\$
C _R	custo de referência do equipamento para uma determinada capacidade, US\$
S	capacidade
S _R	capacidade de referência
CEPCI	índice de custo de planta de engenharia química
<i>f</i>	parâmetro de ajuste da escala para estimativa de custo
Pot	potência, kW
k	coeficiente isentrópico do compressor
Z	fator de compressibilidade
P	pressão, kPa

\dot{m}	vazão mássica do gás, kg s^{-1}
η_c	eficiência do compressor
η_{mele}	eficiência do motor elétrico
\dot{Q}	transferência de calor, kW
ε	efetividade do trocador de calor
h	entalpia, kJ kg^{-1}
R_T	raio teórico, km
A_m	área da microrregião, km^2
R_M	raio médio, km
τ	fator de tortuosidade
C_T	custo de transporte, US\$
P_f	preço dos fretes, $\text{US\$ ton}^{-1} \text{ km}^{-1}$
Cap	capacidade de carga do caminhão de transporte, ton
Viag	número de viagens necessárias
TMA	taxa mínima de atratividade
Em	emissão, g
FE	fator de emissão, $\text{g hp}^{-1} \text{ h}^{-1}$
TO	tempo de operação, h
FC	fator de carga
\dot{N}_{cel}	taxa de produção de hidrogênio, oxigênio ou consumo de água de uma única célula eletrolítica, mol s^{-1}
η_F	eficiência de Faraday
i_d	densidade de corrente, A cm^{-2}
A_{cel}	área da célula, cm^2
z	número de mols de elétrons transferidos na reação
F	constante de Faraday, C mol^{-1}
I	corrente, A
n_c	número de células PEM
V_{cel}	tensão na célula, V
V_{CA}	sobretensão de circuito aberto ou tensão termoneutra, V
V_{Ohm}	sobretensão ôhmica, V
V_{act}	sobretensão de ativação, V
V_{Con}	sobretensão de concentração, V
V_{rev}	tensão reversível da célula, V
Tele	temperatura do eletrolisador, K
P_{H_2}	pressão parcial do hidrogênio, kPa

P_{H_2O}	pressão parcial do vapor de água, kPa
P_{O_2}	pressão parcial do oxigênio, kPa
ϕ_m	espessura da membrana do eletrolisador, cm
σ_m	condutividade da membrana, S cm ⁻¹
λ	conteúdo de água na membrana
α	coeficiente de transferência de carga
i_o	densidade de corrente trocada, A cm ⁻²
V_{pilha}	tensão da pilha de células
BOP	balanço da planta
$V_{ltanque}$	volume do tanque de armazenamento, m ³
t	tempo de operação até coleta do hidrogênio dos tanques de armazenamento, s
CIT	custo de investimento total, US\$
$Pot_{N.SOLAR}$	potência nominal que a planta solar, MW
$Pot_{N.ELE}$	potência nominal da planta do eletrolisador, MW
FD	fator de disponibilidade
HSP	horas de sol pleno, h dia ⁻¹
$Pot_{N.EÓLICA}$	potência nominal que a planta eólica, MW
FC	fator de capacidade
TE	tarifa de energia, R\$ kWh ⁻¹
TUSD	tarifa de uso do sistema de distribuição, R\$ kW ⁻¹ e R\$ kWh ⁻¹
EQM	erro médio quadrático
Nd	número de dados

Subscrito

l	líquido
v	vapor
mass	mássico
est	estequiométrico
bs	base seca
mec	mecânico
e	entrada
s	saída
g	gás
ag	água
an	anodo

ca	catodo
tn	termoneutra
op	óleo pesado
ref	referência

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	16
1.1	Objetivos.....	20
1.1.1	Objetivos Específicos	20
1.2	Justificativa.....	21
1.3	Estrutura do Trabalho	21
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	24
2.1	Região Geográfica da Análise	24
2.2	Gaseificação e Principais Tipos de Gaseificadores	25
2.3	Modelamentos para Gaseificação	31
2.3.1	Modelamentos de Equilíbrio Químico	32
2.3.2	Modelamentos de Cinética Química	33
2.3.3	Modelamentos CFD e Redes Neurais.....	34
2.4	Componentes do Sistema de Produção de H ₂ por Gaseificação de Biomassa.....	36
2.4.1	Reator de Deslocamento Gás-Água (WGS).....	36
2.4.2	Limpeza do gás de síntese	38
2.4.3	PSA.....	38
2.4.4	Unidade Separadora de Ar.....	40
2.4.5	Tanque de Armazenamento.....	40
2.5	Eletrólise e Principais Tipos de Eletrolisadores	42
2.6	Otimização.....	47
2.7	Simulação de Monte Carlo	48
2.8	Análise de Ciclo de Vida	49
3	METODOLOGIA	51
3.1	Modelo Termodinâmico de Equilíbrio Químico.....	52
3.2	Equilíbrio Químico Termodinâmico dos Reatores WGS	59
3.3	Potencial Teórico de Produção de Hidrogênio	59
3.4	Escolha dos Resíduos de Biomassa	60
3.4.1	Bagaço de Cana	60

3.4.2	Palhiço de Cana	61
3.4.3	Borra de Café.....	61
3.4.4	Espiga de Milho.....	62
3.4.5	Palhiço de Milho.....	62
3.4.6	Casca de Soja.....	62
3.4.7	Casca de Cacau.....	63
3.4.8	Madeira de Eucalipto.....	63
3.4.9	Casca de Eucalipto	64
3.5	Pré-tratamento dos Resíduos de Biomassa	64
3.6	Esquema dos Componentes da Planta de Gaseificação	64
3.7	Análise Econômica da Gaseificação.....	67
3.7.1	Estimativa de Custo da Gaseificação.....	67
3.7.2	Custo dos Compressores.....	69
3.7.3	Custo dos Trocadores de Calor.....	70
3.7.4	Custo de transporte	70
3.8	Simulação de Monte Carlo para a Gaseificação	73
3.9	Análise de ciclo de vida para a gaseificação.....	77
3.10	Modelo do eletrolisador de membrana de troca de prótons (PEM)	80
3.11	Definição de um eletrolisador de referência e ponto de operação típicos	86
3.12	Esquema dos componentes da planta de eletrólise	88
3.13	Análise econômica da eletrólise	89
3.13.1	Estimativa de custos da eletrólise.....	90
4	RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	96
4.1	Validação do Modelo Termodinâmico de Equilíbrio Químico	96
4.2	Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H ₂ sem Aprimoramento	100
4.3	Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H ₂ com Aprimoramento por Reatores WGS	105
4.4	Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H ₂ para Gaseificação a Vapor com Aprimoramento por Reatores WGS.....	107
4.5	Potenciais de Produção de H ₂ por meio da gaseificação de resíduos de biomassa do estado de Minas Gerais.....	109

4.6	Potenciais Econômicos da Produção de H ₂ por meio da gaseificação de resíduos de biomassa do estado de Minas Gerais.....	113
4.7	Resultados da Simulação de Monte Carlo	124
4.8	Resultados da Análise de Ciclo de Vida da Gaseificação.....	129
4.9	Validação do modelo de eletrólise.....	132
4.10	Ponto de operação que maximiza a produção de H ₂	135
4.11	Potenciais de Produção de H ₂ por meio da eletrólise a partir de fontes renováveis do estado de Minas Gerais.....	140
4.12	Potenciais Econômicos da Produção de H ₂ por meio da eletrólise a partir de fontes renováveis do estado de Minas Gerais.....	144
5	CONCLUSÕES.....	154
6	RECOMENDAÇÕES DE TRABALHOS FUTUROS	157
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	158

1 INTRODUÇÃO

O contínuo aumento populacional e da industrialização no mundo carrega consigo uma demanda cada vez maior por energia. Além disso, os efeitos das mudanças climáticas, resultantes das emissões de gases na atmosfera ao longo de mais de um século, têm se tornado mais frequentes. Isso tem levado a economia global a buscar soluções limpas para a produção e distribuição de energia. E mesmo desconsiderando os efeitos ambientais do uso de combustíveis fósseis, outro fato que não pode ser ignorado é quanto a finitude do petróleo, carvão mineral e todos os outros combustíveis fósseis cuja dependência acarretaria em crises econômicas cada vez mais severas em um mundo que não buscou alternativas sustentáveis.

Entre as diferentes alternativas atuais para mitigar as possíveis crises energéticas e ambientais do futuro está o uso do hidrogênio diatômico. O hidrogênio possui o potencial de substituir outros combustíveis, tem alto teor de energia gravimétrica, pode ser produzido por métodos renováveis, é um recurso basicamente ilimitado e um dos vetores energéticos mais limpos. O uso do hidrogênio, seja por combustão direta ou em células combustível, produz somente vapor de água como subproduto. Aliado a esse aspecto, o uso do hidrogênio, como potencial fonte de energia ou vetor energético de fontes renováveis, tornou-se um objetivo estratégico de vários governos e empresas ao redor do mundo (EPE, 2021). Sendo uma fonte economicamente acessível, confiável e ambientalmente amigável, o uso do hidrogênio vem ganhando cada vez mais espaço no mercado mundial. Há previsões que estimam um significativo crescimento do mercado do hidrogênio nos próximos anos, podendo alcançar valores de US\$ 160 bilhões em 2026 (GLOBAL MARKET INSIGHTS, 2020) a US\$ 257,9 bilhões em 2028 (MARKETS AND MARKETS, 2023).

Mesmo com essas diversas vantagens e oportunidades que o uso do hidrogênio tem como insumo de produção e no ramo de energia, ainda há muitos desafios que precisam ser vencidos e que exigirão inovação e desenvolvimento tecnológico.

Embora o hidrogênio não seja tóxico, é extremamente inflamável, possui uma velocidade de chama laminar e de propagação significativamente mais altas que a dos outros combustíveis fósseis como a gasolina ou diesel (CHEN et al., 2023). Além disso, o hidrogênio possui uma alta faixa de inflamabilidade e reduzida energia de ignição. O reduzido tamanho molecular do hidrogênio favorece sua difusão em materiais, como ligas de aço, o que acarreta na fragilização dos mesmos. Também, pelo mesmo motivo, é capaz de infiltrar-se em fissuras microscópicas de tubulações, criando tensões locais e viabilizando o surgimento de vazamentos. A segurança em processos de produção de hidrogênio é uma prioridade (YANG et al., 2021).

Outro grande desafio do uso do hidrogênio como combustível é o seu armazenamento. O hidrogênio em seu estado gasoso, sob as condições normais de temperatura e pressão, possui uma massa específica muito baixa (0,0899 g/L) e, por isso, baixa densidade energética. Por outro lado, o hidrogênio

exibe o mais alto poder calorífico por unidade de massa entre todos os combustíveis conhecidos. A forma mais comum de armazenamento é em tanques altamente pressurizados que acabam ficando limitados pelas restrições construtivas e seus custos de produção, operação e manutenção. Apesar disso, em sua forma líquida, o hidrogênio alcança uma alta densidade energética (8,5 MJ/L) e carrega consigo vantagens como um armazenamento compacto e leve. À pressão ambiente, o hidrogênio para se liquefazer precisa ser resfriado à temperatura 21,2 K (-251,95 °C). Como medida de segurança, o hidrogênio líquido precisa ser armazenado em local aberto, pois possui uma temperatura crítica de 33 K, ou seja, acima dessa temperatura não há aumento de pressão que possa liquefazer o gás. Outras formas de armazenamento do hidrogênio são a adsorção em materiais com grande área superficial específica, adsorção em vacâncias intersticiais de metais (pode ser feito a condições ambientes de temperatura e pressão), por ligações covalentes e compostos iônicos e, por fim, através da oxidação de metais reativos como lítio, sódio, magnésio, zinco, alumínio com água (MORADI e GROTH, 2019).

Utilizam-se diferentes métodos para se produzir hidrogênio em grandes escalas. Começando com métodos baseados em combustíveis fósseis: Quase metade do hidrogênio produzido no mundo todo é derivado do gás natural geralmente pela reforma a vapor do metano, 30% é produzido de óleos derivados do petróleo que são primariamente consumidos na aplicação de processos nas refinarias, 19% é produzido do carvão que geralmente é utilizado na produção de amônia e somente 4% da produção de hidrogênio vem da eletrólise da água. A produção do hidrogênio por gaseificação do carvão é o método mais antigo de produção do gás e, de modo geral, se baseia na trituração ou pulverização do carvão, tanto seco ou em pasta, para ser então misturado com um oxidante. O carvão é aquecido a temperaturas superiores a 900 °C alcançando o estado gasoso para que a mistura com o oxidante e o vapor possa acontecer (KAYFECI, KEÇEBAŞ E BAYAT, 2019).

Existe vários métodos diferentes de produção de hidrogênio através do gás natural (metano), mas o único comercialmente utilizado é a reforma a vapor do metano (ACAR E DINCER, 2019). Esse método se baseia na reação química endotérmica entre o vapor e o metano como reagentes para gerar como produtos monóxido de carbono e hidrogênio diatômico. As condições necessárias para essa reação são temperaturas entre 700 e 1000 °C e pressões de 3 a 25 bar no reator com catalizadores como o de cobre-níquel (KAYFECI, KEÇEBAŞ E BAYAT, 2019).

Outro método baseado em combustíveis fósseis é a produção a partir do gás liquefeito de petróleo (GLP). Esse gás é primariamente composto de butano e propano além de outros hidrocarbonetos como o propileno, pentano, isobutano, etilenos e butilenos (MALAIBARI, 2014). A maneira como o hidrogênio é produzido na reforma a vapor do GLP é praticamente a mesma utilizada na produção por meio do gás natural. O processo pelo qual o GLP passa, começa com o aquecimento até aproximadamente 380 °C, seguido pela purificação através de catalisadores metálicos (KAYFECI, KEÇEBAŞ E BAYAT, 2019). Os catalisadores utilizados variam entre diferentes tipos, desde baseados em níquel até metais nobres como ródio, rutênio, paládio em óxido de alumínio, óxido de cério e óxido

de magnésio sem níquel (MALAIBARI, 2014). O gás resultante da purificação é misturado com vapor e aquecido até 480 °C para então passar por um catalizador de níquel gerando como produtos da reação hidrogênio e monóxido de carbono.

A nafta, a gasolina e o metanol também podem ser utilizados na produção de hidrogênio. No entanto, o uso de combustíveis fósseis é por si só um dos motivos dos esforços de transição para o hidrogênio. Portanto, uma das alternativas limpas é a produção de hidrogênio pela separação da molécula de água. A maior vantagem da produção do hidrogênio pela água é que a sua queima é completamente renovável, ou seja, o hidrogênio é retirado da água e reconvertido na mesma após seu uso através da combustão ou por células de combustível. Há atualmente uma série de métodos para a produção de hidrogênio pela água como a eletrólise de alta e baixa temperatura, fotoeletrólise, decomposição térmica, processos fotobiológicos e outros métodos termoquímicos.

A eletrólise é o processo químico de oxirredução que ocorre pela passagem de uma corrente elétrica. Um eletrolisador geralmente é constituído de um anodo e um catodo imersos em um eletrólito e, conforme a água é separada, hidrogênio é produzido no catodo e oxigênio no anodo. À medida que novas tecnologias e materiais evoluem ao longo do tempo, espera-se que os vários tipos de eletrolisadores ganhem cada vez mais espaço de destaque na produção de hidrogênio. Os eletrolisadores são classificados de acordo com o meio iônico entre seus eletrodos e os principais tipos são: os alcalinos, no qual uma solução aquosa de hidróxido de potássio (KOH) opera como eletrólito, os de membrana polimérica ou membrana de troca de prótons (PEM), que são caracterizados por possuir um condutor iônico sólido em forma de uma membrana de polímero e os eletrolisadores de óxido sólido (SOE) que possuem como mediador iônico um material cerâmico sólido (ACAR E DINCER, 2019).

Outra forma de decomposição da molécula de água é através de altas temperaturas 500 a 2000 °C através de um ciclo de reações químicas. As altas temperaturas necessárias podem ser geradas a partir de concentradores solares ou através de calor remanescente de reatores nucleares. Dois exemplos de ciclos termoquímicos de dissociação da água são o ciclo térmico "direto" de dois estágios com óxido de cério e o ciclo "híbrido" com cloreto de cobre. Normalmente, os ciclos diretos são menos complexos, com menos etapas, mas exigem temperaturas de operação mais elevadas em comparação aos ciclos híbridos, que são mais complexos. Essa forma termoquímica, por se tratar de um ciclo fechado, consome apenas água para a produção do hidrogênio (US DEPARTMENT OF ENERGY, 2021). Os reagentes utilizados nessas reações podem ser reutilizados repetidamente. O processo da separação da água acontece em três etapas: a produção do oxigênio, a produção do hidrogênio e a reciclagem dos reagentes utilizados nas etapas anteriores (KAYFECI, KEÇEBAŞ E BAYAT, 2019).

Estritamente por temperatura e dissociação química, existe a separação da água por termólise. A termólise ou decomposição térmica é a reação química em que uma substância é decomposta em outras substâncias a partir de um aumento de sua temperatura. É, portanto, uma reação endotérmica já que requer entrada de calor para que possa ocorrer. Cada substância requer uma determinada temperatura

para que a reação aconteça. No caso da água, para que a reação de dissociação chegue próximo ao máximo, a temperatura precisa ultrapassar 2500 K. Sob uma pressão de 100 kPa e temperatura de 3000 K, o grau de dissociação da água alcança 65% (ACAR E DINCER, 2019).

Mais uma forma de produção de hidrogênio é por meios biológicos como a biofotólise, fotofermentação e fermentação escura. Esses métodos são caracterizados pela presença de organismos vivos, como bactérias e algas, e o uso de seus processos biológicos metabólicos para a produção do hidrogênio.

A biofotólise se caracteriza pela necessidade de luz incidente sobre os organismos como energia motora dos seus processos biológicos. A produção de hidrogênio através da biofotólise pode ocorrer de duas formas, dependendo da maneira como a luz é irradiada durante o processo de evolução do hidrogênio. Algumas espécies de alga verde possuem uma enzima chamada hidrogenase reversível, o que permite que elas sejam utilizadas na biofotólise direta. Essa hidrogenase desempenha um papel importante no metabolismo anaeróbico, que ocorre na ausência de oxigênio, catalisando a oxidação reversível do hidrogênio diatômico. Entre as diversas espécies de algas verdes, a *Chlamydomonas reinhardtii* mostrou uma eficiência de conversão de cerca de 22% da energia solar em hidrogênio diatômico sob condições de luz de baixa intensidade e baixa pressão parcial de oxigênio (menos de 0,1%). No entanto, na prática, manter uma pressão parcial de oxigênio tão baixa é quase impossível devido às grandes quantidades de gás e energia necessárias para remover o oxigênio produzido pela alga. Para superar esse desafio, foram sugeridas algumas abordagens. Uma delas é a criação de algas por meio de engenharia genética, tornando-as mais tolerantes ao oxigênio. Outra proposta é inibir a evolução do oxigênio durante o processo. Além disso, foi aventada a possibilidade de introduzir proteínas que se ligam ao oxigênio, ajudando a lidar com o problema do acúmulo desse gás durante a biofotólise (NTAIKOU, 2021). Já a biofotólise indireta acontece em duas etapas que são a produção fotossintética de açúcares mais oxigênio e a fermentação desses mesmos carboidratos para a produção do hidrogênio (VEERAVALLI ET AL, 2019).

A fotofermentação é processo pelo qual uma bactéria fotossintetizante utiliza cadeias curtas de ácidos carboxílicos como ácido acético ou ácido succínico como doadores de elétrons e produzem hidrogênio diatômico durante metabolismo (VEERAVALLI ET AL, 2019). Com bactérias fotossintéticas roxas ou bactérias redutoras de sulfato, a produção depende apenas de luz e ácidos orgânicos na presença de nitrogenase sob condições insuficientes de oxigênio (KAYFECI, KEÇEBAŞ E BAYAT, 2019). A nitrogenase é uma enzima que utiliza o dinitrogênio (N_2) para produzir amônia (NH_3). As principais bactérias fotossintetizantes são *Rhodospirillum rubrum*, *Rhodobacter sphaeroides*, *Rhodopseudomonas palustris*, *Rhodopseudomonas capsulate*, entre outras.

A fermentação escura ocorre em condições anaeróbicas, sem luz, e tem vantagens em relação à fotofermentação: é mais fácil de conduzir e controlar, não requer luz, possui maior rendimento de hidrogênio relativo a fotofermentação, é estável e viável para a industrialização, tem custos operacionais

menores e pode usar diversas fontes de carbono, como resíduos orgânicos e águas residuais (BOSHAGH, ROSTAMI e MOAZAMI, 2023).

A última das principais formas é a gaseificação de resíduos de biomassa. A gaseificação é um processo de conversão termoquímica que transforma combustíveis sólidos ou líquidos em um gás sintético, conhecido como gás de síntese. Esse processo é geralmente realizado a altas temperaturas (entre 700 °C e 1200 °C), em presença limitada de oxigênio, o que resulta em uma mistura de gases, incluindo hidrogênio, monóxido de carbono, dióxido de carbono, metano e outros hidrocarbonetos. Quanto a utilização de resíduos de biomassa, uma grande vantagem é o potencial neutro quanto a emissão de carbono dado o ciclo de vida de produção desses materiais. Além disso, em países como o Brasil, existe a vantagem da alta disponibilidade desses insumos (MOTTA et al., 2022).

Considerando a crescente tendência global em transitar para o uso de energias renováveis e o papel fundamental do hidrogênio nesse cenário, este estudo tem como objetivo analisar os potenciais de produção e os impactos ambientais associados de diferentes processos de produção de hidrogênio por fontes renováveis. O foco desse trabalho será na produção de hidrogênio por meio da gaseificação de resíduos de biomassa e na eletrólise a partir de fontes de energia renováveis.

1.1 Objetivos

Este trabalho tem como objetivo determinar o potencial técnico econômico e ambiental da produção de hidrogênio por meio de diferentes processos de produção que utilizam energias renováveis no estado brasileiro de Minas Gerais. Estes processos são a gaseificação de resíduos de biomassa e a eletrólise a partir de fontes de energia renováveis com foco em energia solar e eólica.

1.1.1 Objetivos Específicos

- Desenvolvimento de modelos que sejam capazes de simular de forma suficientemente acurada os processos de produção de hidrogênio a partir da gaseificação de resíduos de biomassa e da eletrólise a partir de fontes de energia solar e eólica em todas as condições e cenários propostos;
- Validação dos modelos desenvolvidos com os resultados de outros modelos e com os resultados experimentais da literatura em todas as condições de análise propostas;
- Otimização por meio de diferentes métodos com intuito de se encontrar os pontos de operação que maximizam a produção de hidrogênio em todos os cenários e condições estabelecidos;
- Coleta de dados correspondentes a disponibilidade de energia ou insumos nas diferentes regiões de Minas Gerais para a determinação do potencial teórico de produção;
- Análise econômica no ponto de operação que maximiza a produção de hidrogênio em distintas condições e cenários de análise;

- Análises de risco para a compreensão global das condições de implementação das tecnologias analisadas e análises de sensibilidade para o entendimento do peso e influência dos diferentes parâmetros nos potenciais de produção de hidrogênio.
- Avaliação do impacto ambiental considerando todo o ciclo de vida de produção dos processos.

1.2 Justificativa

O estudo proposto tem como objetivo investigar o potencial de produção de hidrogênio em Minas Gerais, uma vez que o hidrogênio emergiu como uma fonte promissora de energia limpa e renovável com amplas aplicações em diversos setores industriais e de mobilidade. Diante do cenário mundial de transição energética e preocupações crescentes com as mudanças climáticas, o hidrogênio representa uma alternativa viável para mitigar a dependência de combustíveis fósseis e reduzir significativamente as emissões de gases de efeito estufa.

Minas Gerais é um estado brasileiro com uma economia diversificada e um extenso potencial de recursos naturais. Sua rica diversidade energética, incluindo fontes renováveis como a solar, eólica e biomassa, torna o estado especialmente adequado para explorar a produção de hidrogênio verde, obtido através do processo de eletrólise da água utilizando energia elétrica proveniente de fontes limpas e renováveis e da gaseificação de resíduos de biomassa.

A compreensão do potencial de produção de hidrogênio em Minas Gerais é crucial para o planejamento estratégico do estado em relação à sua matriz energética, atração de investimentos em tecnologias de produção e infraestrutura associada ao hidrogênio, além de fomentar a criação de políticas públicas que estimulem o desenvolvimento sustentável da indústria do hidrogênio.

A pesquisa também permitirá identificar e mapear os recursos e fatores locais favoráveis para a implantação de projetos de produção de hidrogênio, bem como as possíveis sinergias com setores já estabelecidos na região.

Com base nessa justificativa, a investigação do potencial de produção de hidrogênio em Minas Gerais é de extrema relevância para alinhar o estado com as tendências globais de transição energética, promover a sustentabilidade ambiental e econômica, bem como impulsionar a inovação tecnológica e a competitividade regional. Os resultados obtidos a partir deste estudo têm o potencial de orientar decisões estratégicas e políticas públicas que visem o crescimento sustentável do setor energético, consolidando Minas Gerais como uma referência nacional e internacional na produção de hidrogênio verde e suas aplicações inovadoras.

1.3 Estrutura do Trabalho

Este trabalho é dividido em sete capítulos conforme descritos a seguir:

- Capítulo 1 – Introdução: apresenta uma contextualização do uso do hidrogênio e as mudanças atuais de paradigma que estão trazendo de volta o interesse por sua produção, sobre os desafios de produção e sobre as diferentes tecnologias para a produção de hidrogênio. Em seguida, descreve os objetivos e a justificativa desse estudo;
- Capítulo 2 – Revisão Bibliográfica: Esta seção inicia com uma apresentação sobre a região geográfica analisada, seguida de uma revisão dos processos de gaseificação, incluindo os diferentes modelos utilizados para sua descrição e os principais componentes de uma planta de gaseificação. Em seguida, aborda o processo de eletrólise, destacando seus principais tipos. Por fim, a seção conclui com uma breve explicação sobre otimização, análise de ciclo de vida e análise de Monte Carlo.
- Capítulo 3 – Metodologia: Esta seção detalha todas as equações que compõem o modelo da gaseificação, bem como o método de equilíbrio químico utilizado para sua resolução. Além disso, descreve o processo de seleção dos resíduos de biomassa utilizados, incluindo os parâmetros necessários para a análise. Também são apresentadas as estimativas de custo dos equipamentos, as premissas adotadas para a análise econômica e os pressupostos considerados na simulação de Monte Carlo. A abordagem utilizada para a análise do ciclo de vida do processo de produção de hidrogênio via gaseificação de resíduos de biomassa é detalhada. Adicionalmente, são fornecidas as informações utilizadas para a definição de uma célula PEM e de uma pilha de células típica, destacando os pontos de operação que maximizam a produção. Por fim, a planta de eletrólise considerada é descrita, juntamente com os dados empregados para estimar os custos dos componentes do processo, incluindo as informações econômicas referentes às plantas solar fotovoltaica e eólica.
- Capítulo 4 – Resultados: Esta seção apresenta a validação do modelo de equilíbrio químico para todas as condições em que será posteriormente utilizado. Em seguida, são expostos os resultados das otimizações para cada um dos resíduos, considerando diferentes condições de agentes gaseificantes. Também é realizada uma análise da otimização ao incluir o aprimoramento de gases. Os resultados da gaseificação incluem a análise do potencial técnico de produção, do potencial econômico, da análise de Monte Carlo aplicada à métrica econômica escolhida e da análise ambiental por meio da Análise de Ciclo de Vida (ACV). Na sequência, é apresentada a validação do modelo de eletrólise, juntamente com a definição do ponto de operação que maximiza a produção de hidrogênio. Por fim, são avaliados os potenciais técnicos e econômicos da eletrólise em uma ampla variedade de cenários.
- Capítulo 5 – Conclusões: sintetização dos principais resultados observados no estudo.
- Capítulo 6 – Recomendações de Trabalhos Futuros: indicações para continuidade da pesquisa desenvolvida;
- Capítulo 7 – Referências Bibliográficas: lista com as referências utilizadas na elaboração deste

estudo.

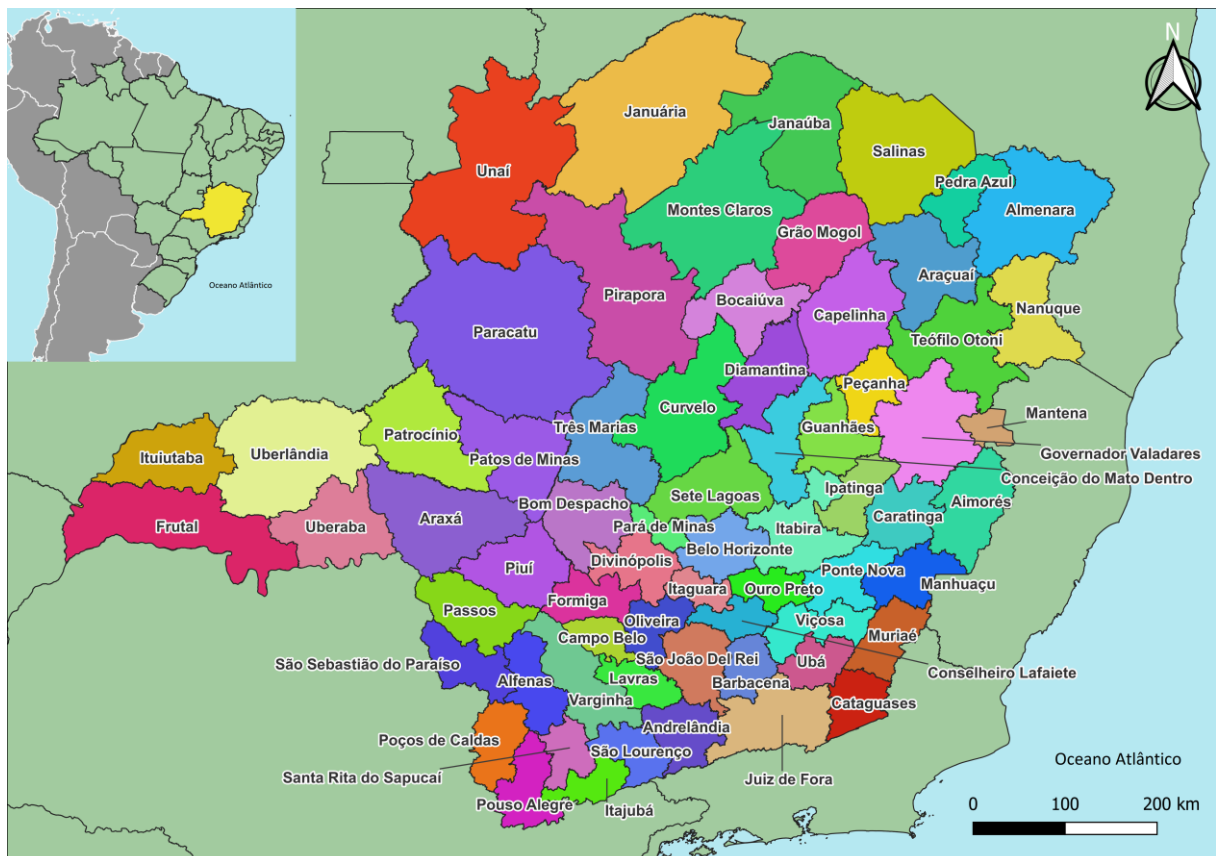
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A seguir será apresentado uma revisão bibliográfica sobre a região geográfica escolhida pelo estudo, sobre o processo de gaseificação e sobre a eletrólise. Também será explicado sobre alguns fundamentos de análises utilizadas neste trabalho.

2.1 Região Geográfica da Análise

O estado brasileiro de Minas Gerais (Figura 1) faz parte das 27 unidades federativas do país. É o segundo estado brasileiro em número de habitantes e é o quarto em área territorial. Divido em 12 mesorregiões, 66 microrregiões e 853 municípios. Para este trabalho, a escala de análise escolhida foi a de microrregião, permitindo uma visão geral do potencial ao longo do estado e para que haja uma oferta suficientemente viável de resíduos de biomassa em uma área passível de recolhimento.

Figura 1 - Minas Gerais dividida em microrregiões



Fonte: Elaborada pelo Autor.

Minas Gerais também é o estado com o maior número de municípios e, com 586.528 km², ocupa o quarto lugar em área. É um dos estados de maior produção agrícola nacional. Segundo Ministério da

Agricultura e Pecuária (2024), o Brasil deve alcançar um valor bruto de produção agropecuária para a safra 2024/2025 de R\$ 1,31 trilhão, sendo esse valor 7,6% maior que no ano anterior graças principalmente a produção de café, cana de açúcar, algodão, milho e soja. Minas Gerais é o quinto estado que mais contribuiu para esse valor sendo o estado que mais produziu café no país.

Levando em consideração esses fatores, Minas Gerais se torna um grande candidato para a produção de hidrogênio por gaseificação de resíduos de biomassa e cujo potencial merece ser investigado.

2.2 Gaseificação e Principais Tipos de Gaseificadores

A gaseificação é um processo termoquímico que converte um combustível sólido ou líquido em um gás combustível, chamado de gás de síntese, que pode ser utilizado para gerar eletricidade, produzir produtos químicos, combustíveis sintéticos e fertilizantes. É um processo que ocorre sob altas temperaturas e quantidades baixas de oxigênio. Durante a gaseificação, o material é submetido a um fluxo de um agente oxidante, como ar ou oxigênio puro, com ou sem a adição vapor superaquecido. Os principais gases que compõem o gás de síntese são o monóxido de carbono (CO), dióxido de carbono (CO₂), metano (CH₄), o hidrogênio (H₂), hidrocarbonetos leves como o propano e o etano, e pesados como o alcatrão, nitrogênio (N₂), gás sulfídrico (H₂S) e ácido clorídrico (HCl) (MOLINO; CHIANESE e MUSMARRA, 2016).

A Tabela 1 apresenta as principais reações químicas que compõem o processo de gaseificação.

Tabela 1 - Principais reações da gaseificação

Reações Homogêneas	
Combustão Parcial do CO	$\text{CO} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 283 \text{ kJ/mol}$
Combustão do H ₂	$\text{H}_2 + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{H}_2\text{O} + 242 \text{ kJ/mol}$
Deslocamento gás-água (WGS)	$\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2 + 41 \text{ kJ/mol}$
Reforma do Metano	$\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + 3\text{H}_2 - 206 \text{ kJ/mol}$
Reações Heterogêneas	
Combustão Completa	$\text{C} + \text{O}_2 \rightarrow \text{CO}_2 + 394 \text{ kJ/mol}$
Combustão Parcial	$\text{C} + 0,5\text{O}_2 \rightarrow \text{CO} + 111 \text{ kJ/mol}$
Boudouard	$\text{C} + \text{CO}_2 \rightarrow 2\text{CO} - 172 \text{ kJ/mol}$
<i>Water-gas</i>	$\text{C} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO} + \text{H}_2 - 131 \text{ kJ/mol}$
Metanação do Carbono	$\text{C} + 2\text{H}_2 \rightarrow \text{CH}_4 + 75 \text{ kJ/mol}$
Reações de Formação do H₂S e NH₃	
Formação do H ₂ S	$\text{H}_2 + \text{S} \rightarrow \text{H}_2\text{S}$
Formação do NH ₃	$3\text{H}_2 + \text{N}_2 \rightarrow 2\text{NH}_3$

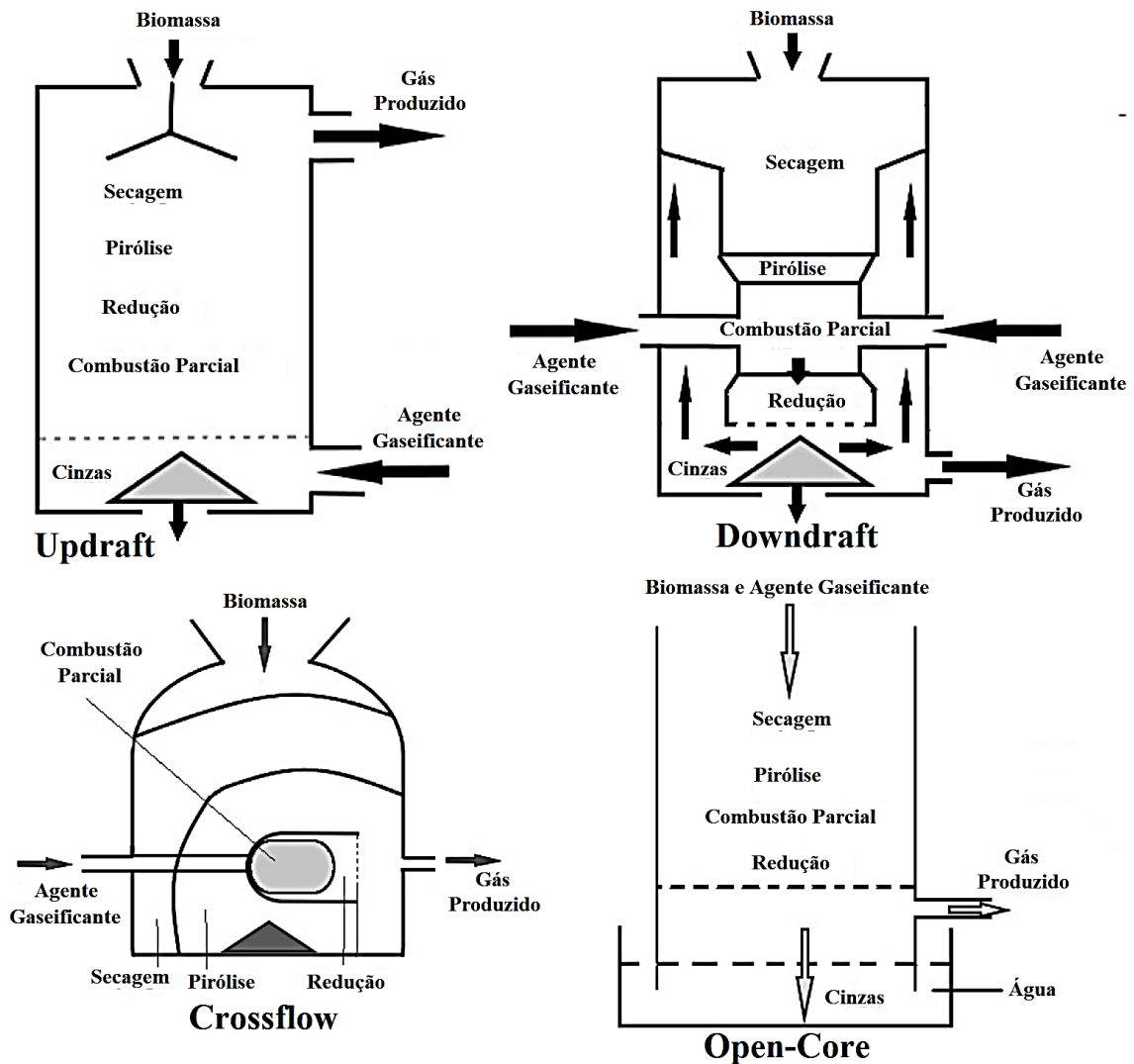
De acordo com Mitianiec (2023) e Cortazar et al. (2023), os estágios do processo de gaseificação ocorrem da seguinte maneira:

- 1 Secagem: Ocorre sob temperaturas inferiores a 150 °C. A umidade contida na biomassa evapora liberando vapor;
- 2 Pirólise: uma vasta gama de voláteis é liberada da biomassa seca. Esse processo ocorre entre temperaturas de 125 a 500 °C. Esses voláteis podem ser divididos entre: a) espécies leves de voláteis: CH₄, C₂H₆, H₂O, H₂, H₂S, CO₂, CO etc, b) espécies voláteis pesadas: alcatrão, que pode se apresentar como sólido ou líquido a temperatura ambiente e c) uma fase sólida de carvão.
- 3 Combustão: na presença de oxigênio, os produtos da pirólise irão passar por reações químicas heterogêneas. Nessa etapa ocorre a liberação de calor nas reações de combustão parcial e completa que são utilizadas nas reações endotérmicas de pirólise e redução;
- 4 Redução: o carbono fixo contido nas espécies reage nas chamadas reações químicas homogêneas com o vapor, gás hidrogênio, monóxido de carbono e oxigênio. Essa etapa ocorre na região de redução no reator;

Existem diversos tipos de gaseificadores, cada um com características únicas que variam de acordo com o agente gaseificante utilizado, a temperatura e pressão do processo, o método de transporte, a forma de adição de calor e o material do leito utilizado.

Os gaseificadores de leito fixo são definidos pelas partículas do combustível permanecerem no leito até o fim do processo. Esse tipo de gaseificador permite a queima de partículas de combustível maiores, sendo necessário um tamanho médio inferior a 51 mm (SALAM et al., 2018). Entre os gaseificadores de leito fixo estão o *Updraft*, *Downdraft*, *Crossflow*, *Open-Core* (Figura 2). Os tipos *Updraft*, *Downdraft*, *Crossflow* são classificados de acordo com a direção do agente gaseificante e combustível no reator. São reatores de projeto e fabricação simples e operam, usualmente, em plantas térmicas de baixa (10 kW) até alta escala (10 MW) (TEZER et al., 2022).

Figura 2 - Esquema dos gaseificadores de leito fixo



Fonte: Adaptado de Tezer et al. (2022)

Nos gaseificadores *updraft*, o agente oxidante entra por baixo do reator seguindo em contracorrente ao combustível adicionado no topo. Os gases de síntese produzidos deixam o reator pelo topo auxiliando os processos de secagem e pirólise devido ao calor produzido na região de combustão parcial. (MISHRA e UPADHYAY, 2021). As principais vantagens desses gaseificadores são o baixo custo de investimento, estrutura simples, fácil manutenção, alta eficiência térmica devido a baixa temperatura dos gases que deixam o gaseificador (200 a 400 °C) e baixa queda de pressão (SALAM et al., 2018). Por outro lado, possuem baixa eficiência de síntese de gás, são difíceis de serem iniciados, baixa capacidade de gaseificação e alta sensibilidade quanto a produção de alcatrão (TEZER et al., 2022).

Os gaseificadores *downdraft* funcionam de forma oposta aos *updraft*. O agente oxidante é adicionado na parte lateral do reator e o gás de síntese deixa o reator pela parte inferior. Por consequência, esses gaseificadores são comumente chamados também de co-corrente (MISHRA e

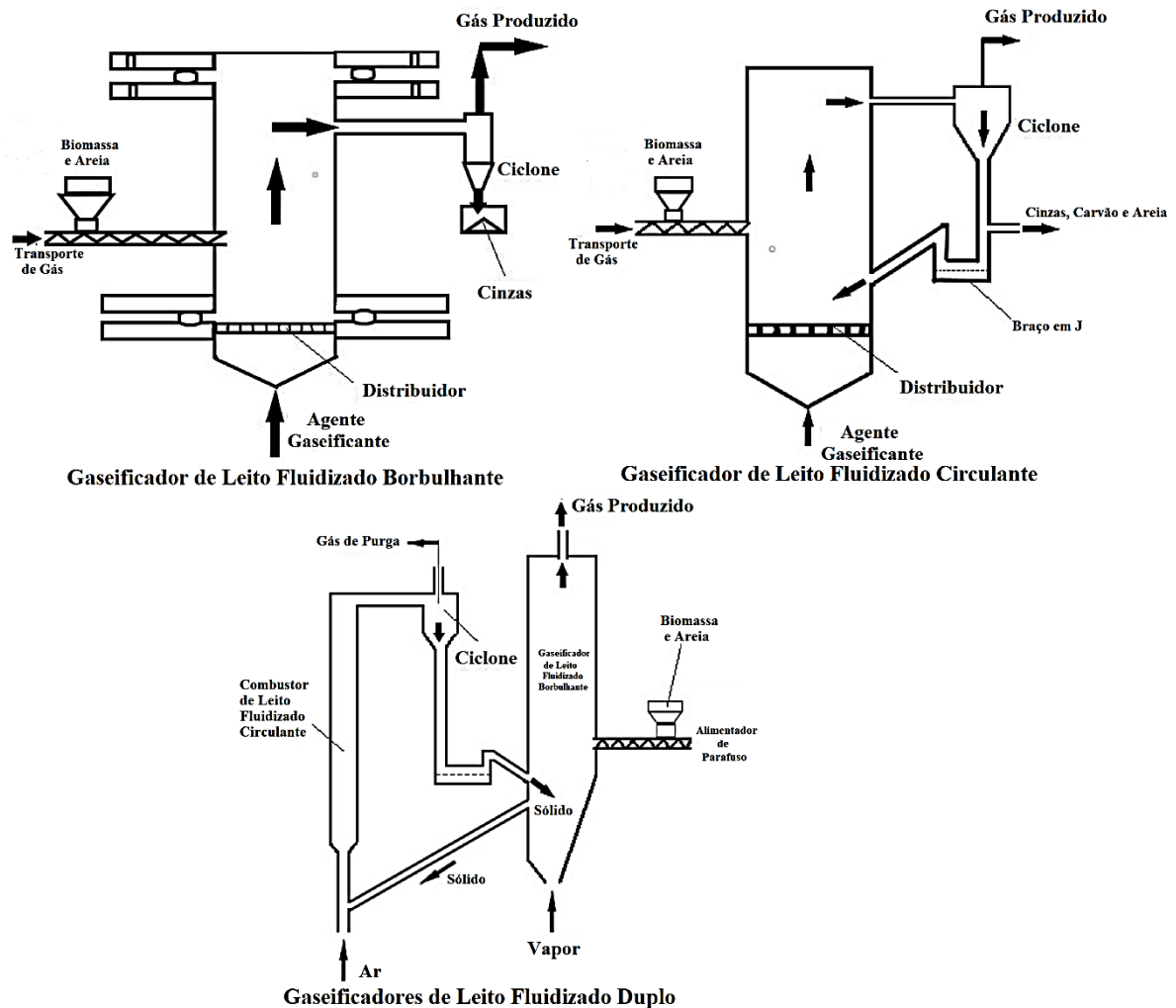
UPADHYAY, 2021). Devido essa configuração, a produção de alcatrão é baixa pois o gás contendo o alcatrão é obrigado a passar pela zona de combustão. O gás de síntese nesse processo carrega consigo grandes quantidades de cinzas e material particulado. São utilizados comumente em geração de potências de pequena a médias escalas (TEZER et al., 2022). O gás deixa o gaseificador com temperaturas de aproximadamente 700 °C (SALAM et al., 2018).

Nos gaseificadores *crossflow*, o combustível é adicionado no topo do reator e o agente gaseificante é alimentado em um tubo lateral. O gás produzido sai no lado oposto ao agente gaseificante e, por isso, esses gaseificadores também são chamados de *sidedraft*. Temperaturas de mais de 1500 °C são atingidas na região de combustão parcial. O gás produzido por esse tipo de gaseificador é caracterizado por altas quantidades de monóxido de carbono e baixas quantidades de hidrogênio diatômico e metano (WATSON et al., 2018). As principais vantagens desses gaseificadores são: i) possuem menor produção de alcatrão, entre 0,01 e 0,1 g Nm⁻³, ii) são colocados em operação mais rapidamente, iii) conseguem lidar com níveis mais altos de umidade na biomassa, iv) tempo de resposta a mudança de parâmetros mais rápida. Como desvantagens, esse tipo de gaseificador não consegue escalar de tamanho sendo capaz de operar em pequenas potências e não são recomendados para biomassas com alta quantidade de cinzas (MISHRA e UPADHYAY, 2021).

Gaseificadores *Open-core*, também conhecidos como *downdraft* sem pescoço, operam com ar entrando juntamente com o combustível pelo topo do reator. São usados em escala menores de potência. Seu projeto é específico para combustíveis finos e de baixa densidade e alta quantidade de cinzas, como é o caso da casca de arroz ou o lodo de esgoto. A base com água na parte inferior do reator serve para a retirada de cinzas e a ausência do pescoço evita o entupimento do gaseificador (KAN, 2014).

Os gaseificadores de leito fluidizado (Figura 3) produzem gás de síntese por meio da decomposição térmica do combustível com alta eficiência (TEZER et al., 2022). Para que o efeito de fluidização possa acontecer de forma efetiva, requer partículas de combustível bem menores do que os gaseificadores de leito fixo permitem. Segundo Salam et al. (2018) é recomendado o uso de partículas menores que 6 mm. Com a mistura entre sólidos e gás e os efeitos térmicos que o movimento de fluidização do combustível carrega consigo, esses tipos de reatores tendem a apresentar uma distribuição uniforme de temperatura. Partículas menores e inertes são misturadas ao combustível para auxiliar no processo de fluidização sendo elas: areia, sílica, partículas de vidro e dolomita são usadas para material de leito. Para o melhoramento da produção de hidrogênio, há relatos do uso de magnesita como material de leito ao invés de areia. Os materiais de leito, no entanto, limitam a temperatura de operação do gaseificador devido a sua temperatura de fusão obrigando faixas de 650 a 950 °C e pressões de 0 a 70 bar. Devido a temperatura que esses gaseificadores operam, as reações que compõe o processo não conseguem atingir o equilíbrio químico reduzindo a quantidade de hidrocarbonetos produzidos no gás final. A formação de alcatrão fica entre os valores encontrados nos gaseificadores *updraft* e *downdraft* (MISHRA e UPADHYAY, 2021).

Figura 3 - Esquema dos gaseificadores de leito fluidizado



Fonte: Adaptado de Tezer et al. (2022)

Dentre os gaseificadores de leito fluidizado, os de leito borbulhante são a tecnologia mais antiga (MISHRA e UPADHYAY, 2021). Nesses reatores, o leito é composto por material granular, e o agente oxidante é injetado de baixo para cima, por meio de uma grade distribuidora, para que a condição de fluidização seja atingida. A velocidade de 1 a 3 ms^{-1} do agente oxidante é o que geralmente é requerido para que as partículas sólidas comecem a fluidizar. Essa movimentação dos componentes da gaseificação permite uma uniformização das condições de transferência de massa e calor. Durante todo esse processo, frações sólidas são separadas por um ciclone e retornam para o fundo do reator. Conseguem operar sob uma alta temperatura média de cerca de 850 °C criando uma decomposição térmica superior. Apesar disso, possuem uma eficiência de conversão de carbono inferior ao da gaseificação de leito circulante (YAN, AFXENTIOU e FOKAIDES, 2021). Outra importante característica desses gaseificadores é o alto tempo de residência das partículas de combustível (SALAN et al., 2018).

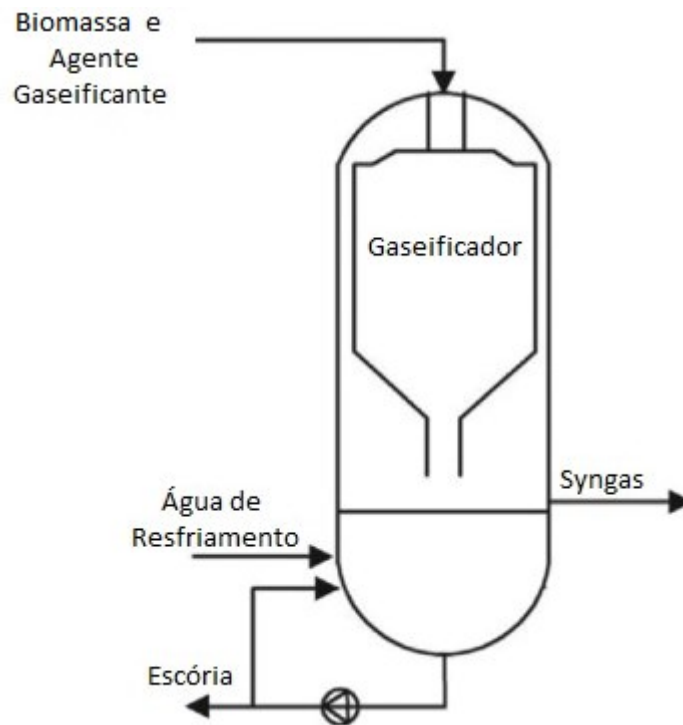
Com velocidade do agente gaseificante muito superiores aos dos reatores de leito borbulhante,

por volta de 3 a 10 m/s, os gaseificadores de leito circulante fazem com que as misturas das partículas de combustível e material do leito sejam arrastadas para fora do reator e serem recicladas em um ciclone (TEZER et al., 2022). Isso faz com que esses reatores possuam um amplo tempo de residência. Um dos problemas de se trabalhar com velocidades mais altas, é que o agente gaseificante acaba por empurrar os sólidos contra as paredes do reator e isso pode levar a uma mistura pouco uniforme caso não haja um bom controle das condições de operação. Além disso, durante a reciclagem, o acúmulo de sólidos pode levar a obstrução ou interrupção de fluxo livre caso haja grandes quantidades de umidade no processo. Também são caracterizados pela baixa produção de alcatrão (MISHRA e UPADHYAY, 2021). São sistemas que se adequam a produções em grande escala, como a produção de combustíveis, indústria de papel e celulose, geração de energia ou sistema com capacidade térmica superiores a 10 MW (YAN, AFXENTIOU e FOKAIDES, 2021).

O gaseificador de leito fluidizado duplo consiste basicamente em dois gaseificadores de leito fluidizado interconectados de modo que o material do leito possa circular entre ambos gaseificadores. Um desses gaseificadores é um combustor que tem como objetivo prover calor para o outro gaseificador. Nesse tipo de gaseificador, a temperatura de gaseificação da biomassa com vapor superaquecido tende a uma faixa de 800 a 850 °C. Como a natureza da gaseificação com vapor é endotérmica, calor produzido pelo combustor pela queima do “*char*” de 900 a 950 °C pode prover o calor necessário ao outro gaseificador sendo carregado pelo material do leito. Esse tipo de configuração permite um melhoramento significativo na produção de hidrogênio e diminuição na produção de alcatrão (TEZER et al., 2022) (MISHRA e UPADHYAY, 2021).

Os gaseificadores de fluxo arrastado (Figura 4) são considerados o tipo de gaseificador mais bem sucedido sendo capaz de atingir eficiências de conversão de carbono de quase 100% (MISHRA e UPADHYAY, 2021). Partículas pulverizadas de combustível (0,1 a 1 mm) são alimentadas junto ao agente gaseificante de forma pneumática pelo topo do reator. O reator opera sob condições de 1300 a 1500 °C e pressões de 25 a 30 bar (MOLINO, CHIANESE E MUSMARRA, 2016). Mishra e Upadhyay (2021) citam pressões de operação ainda mais altas, com faixas de 20 a 70 bar. Devido as altas temperaturas, o tempo de residência pode ser menor e varia de 5 a 10 segundos. O problema de trabalhar sob temperaturas tão altas é a necessidade de materiais mais caros e a possibilidade de derretimento de cinzas. As principais vantagens desses gaseificadores são flexibilidade com combustível, alta conversão de carbono, uniformidade da temperatura, não há problemas no aumento de sua escala, baixa produção de alcatrão e fácil controle das condições de operação. Como desvantagens, vale destacar, alto nível de calor sensível no gás produzido, baixa eficiência de gás frio, baixo tempo de vida dos componentes do sistema, alto custo associado a aquisição dos equipamentos da planta e alto custo de manutenção (MOLINO, CHIANESE e MUSMARRA, 2016). Esse tipo de gaseificação é responsável por cerca de 70% da produção de gás de síntese ao redor do mundo (TEZER et al., 2022).

Figura 4 – Gaseificador de leito arrastado



Fonte: Adaptada de Munawar et al. (2023)

Existem ainda outros tipos de gaseificadores que utilizam outras origens para o calor que produz a gaseificação, que incluem a presença de leitos catalíticos ou que até mesmo rotacionam em seu próprio eixo. Tais tipos operam em casos mais específicos, muitas das vezes com outros tipos de materiais mais difíceis de gaseificar e não são amplamente aplicados no caso da gaseificação de biomassa.

2.3 Modelamentos para Gaseificação

Modelamentos matemáticos para a simulação do comportamento do processo de gaseificação podem ser categorizados em: modelos de equilíbrio químico, modelos de cinética química, modelos de fluido dinâmica computacional (CFD) e modelos que utilizam redes neurais artificiais (ANN).

A escolha do modelo mais adequado para a investigação do processo de gaseificação de biomassa irá depender da escala em que a análise será realizada. Modelos mais complexos, como é o caso dos modelos cinéticos, CFD e de redes neurais, conseguem detalhamento de informação dos mecanismos das reações envolvidas no processo. Porém tal detalhamento carrega consigo um custo computacional geralmente muito elevado. Desse modo, a escolha do modelamento por equilíbrio químico para este estudo se baseia no elevado número de condições de operação, grande quantidade de tipos de biomassa analisados, elevada quantidade de soluções a serem encontradas.

2.3.1 Modelamentos de Equilíbrio Químico

O objetivo dos modelos de equilíbrio químico é prever a composição do gás produzido levando como consideração que os reagentes estão totalmente misturados por um período infinito de tempo, no que se pode dizer como equilíbrio químico (BARUAH e BARUAH, 2014). O equilíbrio químico, por sua vez, se refere ao estado em que, na reação, as velocidades das reações diretas e inversas são iguais, mantendo as frações das espécies dos produtos e reagentes constantes. Essa condição ocorre quando a entropia do sistema atinge seu valor máximo enquanto a energia livre de Gibbs atinge seu mínimo (PUIG-ARNAVAT, BRUNO e CORONAS, 2010). Entre os modelos que simulam a gaseificação, os modelos de equilíbrio químico são os que possuem menor custo computacional.

Os modelos de equilíbrio operam sob algumas hipóteses gerais que os tornam mais adequados para uma descrição mais acurada de alguns tipos específicos de reatores (PUIG-ARNAVAT, BRUNO e CORONAS, 2010):

- São implicitamente zero dimensionais;
- Não consideram trocas de calor exteriores a reação e, dessa forma, implicitamente consideram o reator como sendo adiabático. No entanto, é possível a inclusão de trocas externas para análises mais específicas;
- Consideração de isotropia de mistura e temperatura enquanto, na realidade, diferentes fenômenos hidrodinâmicos acontecem dependendo do gaseificador;
- Assumem que as taxas com que as reações ocorrem são rápidas o suficiente para que a condição de equilíbrio seja alcançada;

Mesmo com essas hipóteses e simplicidade, os modelos de equilíbrio conseguem ser uma boa aproximação para descrever o processo de gaseificação. Considerando essas hipóteses inerentes a esse tipo de modelamento, a gaseificação de leito fixo *downdraft* é a que tende a mostrar melhor concordância com os resultados obtidos por esses tipos de modelamentos, pois é o tipo de gaseificador que trabalha mais próximo da condição de equilíbrio químico (BARUAH e BARUAH, 2014).

Entre os modelos termodinâmicos de equilíbrio existem duas formas gerais que são os estequiométricos e não estequiométricos. Safarian, Unnþórsson e Richter (2019) verificaram que 72,5% das simulações de equilíbrio químico da literatura utilizaram modelos não estequiométricos e 27,5% utilizaram estequiométricos. E ainda segundo os mesmos autores, a literatura também mostrou que as duas formas são essencialmente equivalentes no que tange qualquer diferente cenário envolvendo gaseificação de biomassa. São apenas duas formas distintas de resolver a mesma metodologia.

O método estequiométrico se baseia nos seguintes passos (SAFARIAN, UNNÞÓRSSON E RICHTER, 2019):

1. Selecionar as reações a ser incluir na simulação. A reação principal é construída com o

conhecimento prévio das espécies que irão participar nela. Na maioria das vezes, uma parte de espécies não são incluídas, pois por conhecimento experimental, sabe-se que suas concentrações são absolutamente insignificantes perante as outras espécies. No entanto, somente a reação principal não é suficiente para prover o número de equações necessárias, dado o número de incógnitas.

2. É calculado as constantes de equilíbrio correspondentes com reações que tomam parte na dissociação das espécies na reação principal à temperatura da reação. Essas constantes surgem da minimização da energia livre de Gibbs, naquele estado termodinâmico específico.
3. Por fim, é feito o cálculo do equilíbrio químico por meio das equações não lineares determinando-se as composições dos produtos a partir dos dados das composições do combustível a ser gaseificado.

Já o método não estequiométrico se baseia nos seguintes passos (SAFARIAN, UNNÞÓRSSON E RICHTER, 2019):

1. Seleção de todas as espécies a serem adicionadas na reação. Não há um conjunto de reações específicos a ser adicionado no cálculo numérico;
2. Em seguida é calculado a distribuição da energia livre de Gibbs entre essas espécies, dada a composição de entrada do combustível, a uma determinada pressão e temperatura.

O uso de modelamentos por equilíbrio químico é extenso na literatura. Exemplos disso são os estudos de Ruggiero e Manfrida (1999), Zainal et al. (2001), Schuster et al. (2001), Altafini, Wander e Barreto (2003), Jarunghammachote e Dutta (2008), Yoshida et al. (2008), Karamarkovic e Karamarkovic (2009), Huang e Ramaswamy (2009), Haryanto et al. (2009), Sreejith, Arun e Muraleedharan (2013), Gagliano et al. (2016), Gambarotta, Morini e Zubani (2018) e Upadhyay et al. (2019). Todos esses autores mostraram resultados coerentes com dados experimentais.

Em um estudo que exija uma extensa entrada de dados para análise e exija generalização em decorrência da diversidade de escalas de análise, dado o baixo o custo computacional e adimensionalidade inerentes, o modelamento de equilíbrio químico termodinâmico torna-se a escolha ideal (MORETTI et al., 2022).

2.3.2 Modelamentos de Cinética Química

Quando se busca uma previsão mais precisa dos produtos em uma distribuição de não equilíbrio, o modelamento por cinética química torna-se necessário. Os modelos cinéticos preveem a composição dos gases produtos da gaseificação em um tempo finito. Não somente isso, levam em consideração as dimensões do gaseificador e, dessa forma, conseguem prever os perfis de temperatura e composição do

gás e a eficiência global, dadas as condições de operação e as configurações do gaseificador (BARUAH e BARUAH, 2014). Também conseguem simular o processo e prever esses resultados sob condições de regime transiente. De modo geral, podem incluir, além das reações cinéticas e transporte de massa, modelos de distribuição do tamanho de partículas, de transporte de massa em microescala e misturas dentro do gaseificador (SAFARIAN, UNNÞÓRSSON E RICHTER, 2019).

Esses modelos se baseiam nas descrições matemáticas da cinética das principais reações e dos fenômenos hidrodinâmicos entre as diferentes fases que ocorrem dentro de um gaseificador. A aplicação desses modelos requer o conhecimento prévio do tempo de residência, das taxas de reação, da hidrodinâmica do reator e da geometria do gaseificador (MORETTI et al., 2022).

As principais características deste modelo também incluem: resultados mais acurados sob temperaturas de gaseificação relativamente mais baixas, capacidade de avaliação do impacto do tamanho das partículas de combustível, são adequados para simular gaseificadores de leito fluidizado e capaz de avaliar a composição dos produtos em diferentes posições no reator. Tem como desvantagens o alto custo computacional, o alto nível de especificidade limita o mesmo modelo criado de ser utilizado em diferentes plantas e possui sensibilidade aos processos envolvendo o contato entre as fases sólido/gás (SAFARIAN, UNNÞÓRSSON E RICHTER, 2019).

Na literatura, diversos autores trabalharam com o modelamento por cinética química para descrição do processo de gaseificação de biomassa. Alguns exemplos são: Wang e Kinoshita (1993), Di Blasi (2000), Fiaschi e Michelini (2001), Giltrap, Mckibbin e Barnes (2003), Rostami, Murthy e Hajaligol (2004), Radmanesh, Chaouki e Guy (2006), Feroso et al. (2008), Roy, Datta e Chakraborty (2010) e Jia et al. (2018).

2.3.3 Modelamentos CFD e Redes Neurais

Os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD) descrevem o comportamento de substâncias fluidas a partir da solução computacional de conjuntos de equações não lineares que contabilizam versões aproximadas das equações de Navier-Stokes, diferentes modelos para descrição de turbulência, equações gerais da conservação de energia, massa, momento, energia e espécies em uma região discreta do gaseificador. Quando os fenômenos hidrodinâmicos são bem conhecidos, os modelos CFD são bastante precisos em prever a temperatura e produção de gás no reator. Na gaseificação, há uma combinação de partículas fluindo e se degradando com uma química específica. Esses são aspectos desafiadores em CFD (BARUAH e BARUAH, 2014). O modelamento CFD também pode ser utilizado para otimização da geometria dos gaseificadores e entender características do gaseificador como os parâmetros de operação ou as propriedades físicas do combustível. No entanto, simulações CFD da gaseificação de biomassa são pouco abundantes devido à alta demanda computacional e da natureza anisotrópica da biomassa (MORETTI et al., 2022).

Entre os autores que procuraram descrever a gaseificação por meio de modelamento CFD, Gao et al. (2012) desenvolveram um modelamento para um gaseificador tipo ciclone, que se trata de um tipo de leito de fluxo arrastado, com serragem como combustível. Incluíram modelamentos para a pirólise da serragem e combustão de voláteis. Os conjuntos de equações foram resolvidos por volume finitos. Os efeitos da razão de equivalência foram investigados e validados experimentalmente. Encontraram a faixa de eficiência de conversão de carbono e eficiência de gás frio variando de 77 a 94,2% e 53,6 a 63%, respectivamente, quando a razão de equivalência variou na faixa de 0,23 a 0,35. Também verificaram que o Poder Calorífico Inferior (PCI) máximo do gás de síntese foi de $5,7 \text{ MJ Nm}^{-3}$ na faixa de razão de equivalência de 0,23 a 0,26.

Pandey, Prajapati e Sheth (2022) desenvolveram um modelo CFD bidimensional em regime permanente para a gaseificação de biomassa em leito fixo *downdraft*. Para um gaseificador de 5 kW, foi aplicado um modelo de fase discreta com bases na visão Euler-Lagrangiana. O modelo foi validado para diferentes razões de equivalência. Verificaram que razões de equivalência entre 0,25 a 0,3 são a melhor faixa de operação para esse tipo de sistema de gaseificação. O esquema de simulação proposto permite a previsão do comportamento da gaseificação em diferentes condições de operação permitindo a otimização dessas condições de operação.

Salem e Paul (2023) apresenta um modelamento bidimensional para um gaseificador *downdraft*, operando com biomassa, utilizando um total de 20 reações cinéticas termoquímicas na investigação da formação de espécies de alcatrão, conhecendo-se o tempo de residência. O modelo foi validado com dados experimentais. Foram investigadas as taxas de reação da decomposição dos voláteis, da combustão e da gaseificação em si. Observaram que, de modo geral, benzeno mostrou-se a espécie com mais alta concentração, seguido por naftaleno e relativamente baixas quantidades de fenol e tolueno no alcatrão.

Modelos com redes neurais artificiais (ANN) para a simulação do processo de gaseificação são uma alternativa relativamente nova. Esse método funciona a partir do aprendizado de amostras de dados experimentais de modo a procurar uma solução a partir de funções matemáticas que objetivam encontrar padrões. É um processo que trabalha por aproximações numéricas da solução e não de forma analítica. Devido a essa própria natureza de como o processo funciona então, se os dados para calibração e avaliação do modelo são limitados, uma rede neural pode acabar por entregar resultados ruins para entradas muito distintas das utilizadas no treinamento do modelo (BARUAH e BARUAH, 2014). O uso, porém, de redes neurais para modelagem da gaseificação ainda é um tanto raro (MORETTI et al., 2022).

O estudo realizado por Puig-Arnavat et al. (2013), que utilizaram duas diferentes arquiteturas de ANN's, uma para simular gaseificadores de leito fluidizado circulante e outra para gaseificadores de leito borbulhante, foi baseado no uso de dados experimentais da literatura para treinarem as ANN's. Os autores verificaram confiabilidade nas previsões do modelo na determinação das espécies nos produtos ($R^2 = 0,98$). Também observaram, através de uma análise de sensibilidade, que todas as variáveis de entrada

tem uma significativa influência nos resultados.

Serrano, Golpour e Sánchez-Delgado (2020) adicionaram como um novo parâmetro de entrada do modelo, os diferentes materiais do leito para investigar o comportamento da produção e composição dos gases de síntese em um gaseificador de leito fluidizado borbulhante que gaseifica biomassa. O modelo foi treinado com algoritmos de aprendizagem utilizando um alto número de redes topológicas para determinar a melhor configuração. Verificaram que o modelo foi capaz de prever as composições de H₂, CH₄, CO₂ e CO com boa acurácia: erro médio quadrático menor que $1,7 \times 10^{-3}$ e R² maior que 0,94. Concluíram que essa alternativa para simulação de gaseificação de leito fluidizante borbulhante se mostrou bastante poderosa e capaz de auxiliar no melhoramento do projeto, do controle das condições de operação e na compreensão dos efeitos de diferentes materiais de leito.

Jamro et al. (2023) aplicaram um modelo ANN para avaliar a gaseificação de resíduos sólidos urbanos direcionada ao melhoramento da produção de H₂. Para o treinamento do modelo, foram conduzidos experimentos usando um reator de tubo horizontal sob diferentes parâmetros: temperatura, tempo de residência, carga de resíduo sólido urbano e razões de equivalência. O coeficiente de regressão (R²) para a fase de treino do algoritmo ficou entre 0,9392 e 0,9991 e para a fase de teste ou validação ficou entre 0,9363 e 0,993824. O erro médio quadrático para a fase de treino ficou entre 0,4111 e 0,8422 e para a fase de teste ficou 0,1476 e 0,732. Observaram que a maior quantidade de H₂, cerca de 42% molar, acontece sob temperaturas superiores a 900 °C. E entre compostos dominantes no alcatrão, estão 17 compostos aromáticos, seguidos por aromático policíclico, fenil, alifático, aromático heterocíclico, policíclico e cetona aromáticas.

2.4 Componentes do Sistema de Produção de H₂ por Gaseificação de Biomassa

A gaseificação em si não é o único processo pelo qual a biomassa passa para a produção de hidrogênio. O gás de síntese precisa ser limpo, pode ser aprimorado e o hidrogênio precisa ser separado dos demais gases que compõe a mistura. Existem diferentes componentes com distintos métodos de se realizar esses processos, sendo alguns mais ou menos eficientes e mais ou menos onerosos em relação aos outros.

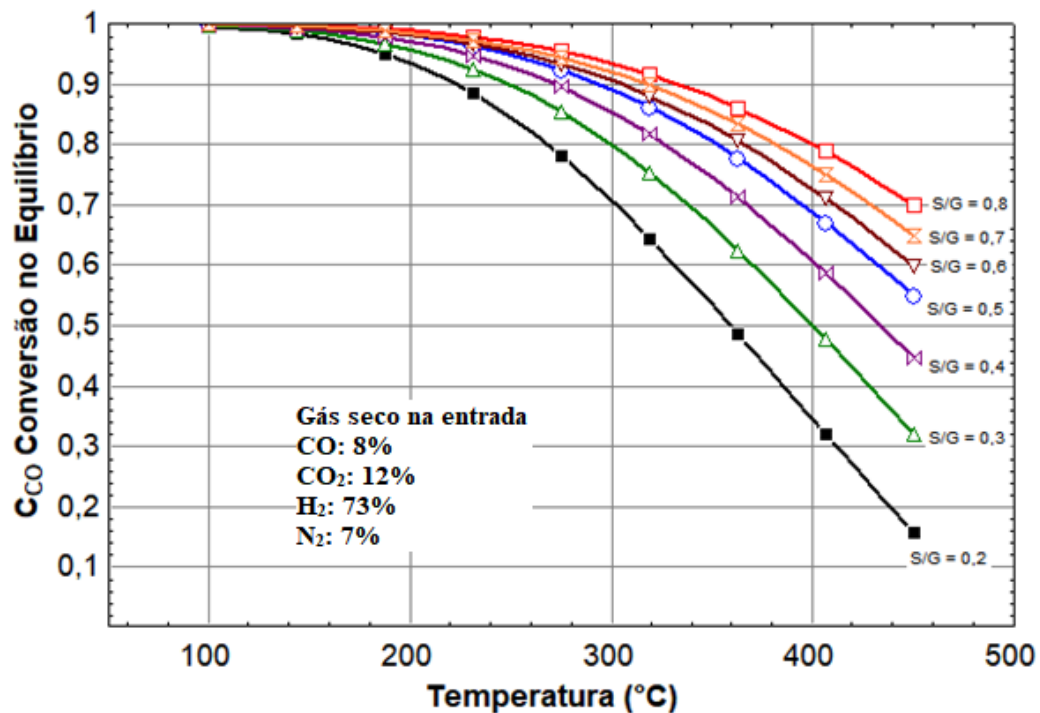
2.4.1 Reator de Deslocamento Gás-Água (WGS)

Uma das formas de se aumentar a produção de hidrogênio é aproveitar o monóxido de carbono presente no gás de síntese e converte-lo por meio da reação de deslocamento gás-água em hidrogênio ($\text{CO} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + \text{H}_2$) em um reator catalítico. Os catalisadores são substâncias que não participam das reações, ou seja, substâncias não consumidas durante o processo, mas são capazes de aumentar a velocidades dessas reações. A composição de equilíbrio não é alterada pelos catalisadores, apenas a

velocidade em que o equilíbrio é alcançado. As reações que induzem ao equilíbrio são controladas pelas condições cinéticas da reação de deslocamento gás-água e essas, por sua vez, necessitam da presença de catalisadores altamente ativos e estáveis.

No entanto, mesmo no equilíbrio químico, nem todo monóxido de carbono é convertido. Há um efeito de diminuição da constante de equilíbrio da reação de deslocamento gás-água à medida que a temperatura aumenta e, por consequência, da conversão de monóxido de carbono. Isso significa que a produção de H_2 é favorecida a temperaturas de reação mais baixas, além de que temperaturas mais baixas também ajudam a diminuir a necessidade de vapor. Esses comportamentos podem ser observados na Figura 5, onde as curvas de conversão tendem a 100% próximo dos 100 °C e maiores relações molares de vapor por gás seco (S/G) tendem a aumentar a conversão, principalmente em temperaturas mais altas.

Figura 5 - Exemplo da conversão de CO de uma reação de mudança do vapor da água dos gases provenientes de uma típica reforma a vapor do metano



Fonte: Replicado de Mendes et al. (2010) pelo autor.

Usualmente, são utilizados dois ou três estágios para a conversão catalítica do monóxido de carbono. Para favorecer a rápida conversão de monóxido de carbono ao mesmo tempo que se minimiza a necessidade de um grande volume de catalisador, o primeiro estágio deve ocorrer em temperaturas mais altas. Além disso, o catalisador Fe-Cr permanece inativo sob temperaturas inferiores à 200 °C (REDDY; SMIRNIOTIS, 2015). Os próximos estágios vão progressivamente reduzindo a temperatura para que a conversão em si seja mais alta. Sistemas de resfriamento são empregados entre os estágios para a indução das quedas de temperatura necessárias (MENDES et al., 2010).

Catalisadores considerados de alta temperatura operam em faixas de 310 a 450 °C. Historicamente, por mais de 70 anos, catalisadores baseados em ferro e cromo dominavam a indústria com primeiros estágios de conversão operando à aproximadamente 420 °C e segundos estágios à 320 °C. A invenção de catalisadores baseados em cobre permitiu que a conversão pudesse ocorrer sob temperaturas mais baixas. Esses catalisadores são considerados de baixa temperatura e operam entre 150 a 250 °C (REDDY e SMIRNIOTIS, 2015).

2.4.2 Limpeza do gás de síntese

Água, material particulado, compostos alcalinos, compostos nitrogenados, alcatrão e carbonetos leves e pesados estarão dissolvidos junto ao gás de síntese após o processo de gaseificação e, caso houver, de WGS. Essas impurezas nos gases podem causar diversos problemas nos equipamentos, como corrosão, desativação de catalisadores e entupimentos. A limpeza e secagem do gás acontece com o seu resfriamento a temperaturas próximas a do ambiente para sua passagem por filtros, ciclone e lavadores que utilizam RME (*Rapeseed oil methyl ester*) ou água ou biodiesel, etc (SALAM et al., 2018) (BALLAS et al., 2014).

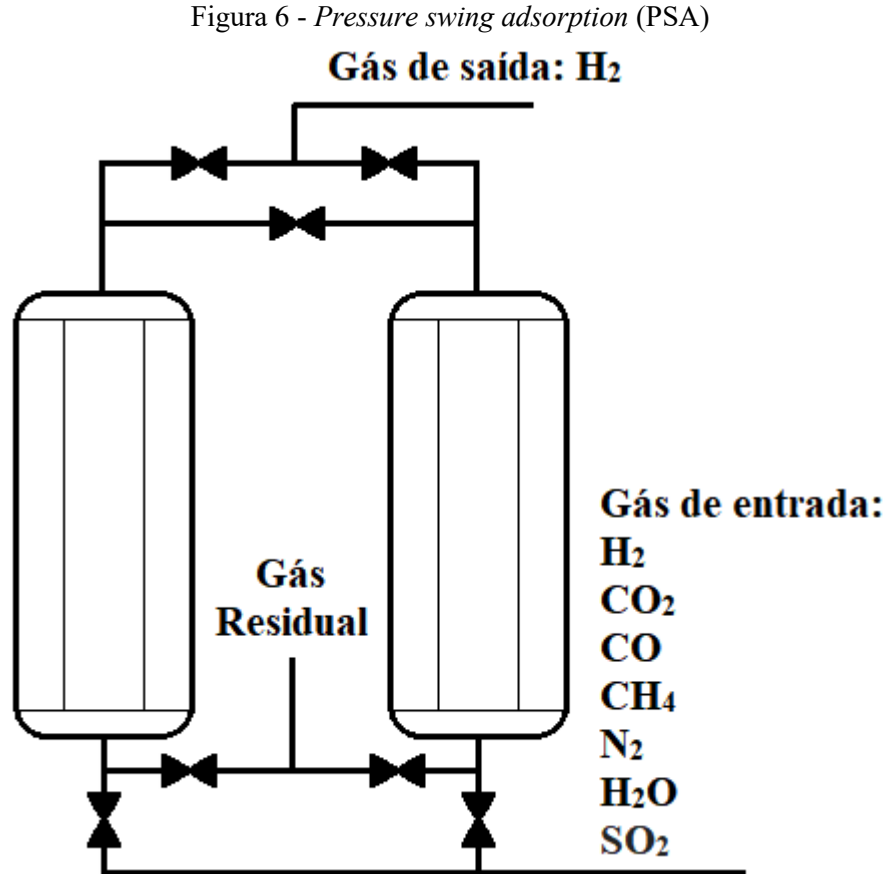
Loipersbock et al. (2017) verificaram uma redução de 70% no alcatrão, 70% no enxofre, de 3 a 5% de redução de água e 99,7% na amônia em um lavador com biodiesel de dois estágios com resfriamento. Nakamura, Kitano e Yoshikawa (2016) reportaram uma remoção de 64,5% de alcatrão com um lavador de bio-óleo à 50 °C e de 98% em um lavador de bio-óleo com leito de carvão à mesma temperatura. Unyaphan et al. (2017) relatou uma diminuição de mais de 90% utilizando um lavador de venturi com óleo de canola. Hanaoka et al. (2012) obteve uma limpeza de 95,79% do alcatrão e 91,93% do enxofre e outras partículas com um lavador com um leito de ferro e carbono ativado. E até mesmo óleo de palmeira de cozinhar usado coletado foi utilizado em um lavador por Ahmad e Zainal (2016) conseguindo remover 86% do alcatrão e 98% com a adição de carvão ativado.

2.4.3 PSA

Os três principais métodos de separação do hidrogênio são PSA (*Pressure Swing Adsorption*), destilação criogênica e separação por membrana. Cada um desses métodos possui vantagens e desvantagens e são indicados para determinadas demandas.

O método de separação PSA é o mais extensamente utilizado em processos industriais para a separação do H₂ (ADHIKARI e FERNANDO, 2006). Também é comumente utilizado na separação de oxigênio do ar, algo que será necessário no caso da gaseificação com oxigênio. Seu princípio de funcionamento está ligado a adsorção. A adsorção é definida como o acúmulo das moléculas de um fluido a superfície de um material. Esse fenômeno é dependente da composição dos gases, da

temperatura parcial de seus componentes, do tipo de adsorvente e da temperatura. A Figura 6 mostra o esquema de um separador PSA.



Fonte: Elaborado pelo Autor.

O funcionamento do PSA se dá pela abertura da válvula de entrada onde o gás de síntese entra continuamente no tanque vindo de um compressor. A adsorção é diretamente proporcional à pressão, dessa forma, à medida que a pressão se eleva, todos os outros gases, exceto o H₂, vão se aderindo à superfície do adsorvedor. Quando o adsorvedor, que fica no leito dos tanques, fica saturado com os outros gases, uma válvula se abre liberando esses gases residuais do sistema. Na parte superior do tanque, o hidrogênio é separado com a abertura da válvula de saída e a pressão começa a cair. Enquanto isso ocorre em um tanque, é iniciado o processo de abertura da válvula de entrada de outro tanque. Isso faz com que enquanto a pressão de um tanque esteja abaixando e do outro esteja subindo, garantindo dessa forma, uma vazão constante de hidrogênio na saída do PSA. O caso da separação do oxigênio do ar pelo PSA é análogo ao do hidrogênio. A separação com esse equipamento permite purezas bastante elevadas de mais de 99,99% (LUBERTI e AHN, 2022). No entanto, o fator de recuperação, a porcentagem que é possível de ser separado da mistura de gases, é limitada a no máximo 90% (BINDER et al., 2018). A demanda desse trabalho é a de hidrogênio com alta pureza e alta taxa de produção,

portanto, o PSA foi o método escolhido para separar o hidrogênio nessa análise.

2.4.4 Unidade Separadora de Ar

A gaseificação utilizando oxigênio como agente oxidante em alta escala requer a sua produção *in situ*. De acordo com Alsultannty e Al-shammari (2014), unidades de separação de ar criogênicas são consideradas, quando se trata de produção em grandes quantidades e alta pureza, a tecnologia com maior custo benefício. A potência demandada estimada para produção de oxigênio por essa tecnologia é de 1 MW_e por quilo por segundo de vazão de oxigênio produzido levando em conta uma pureza de 99,6% molar de O₂ (ANDERSSON e LUNDGREN, 2014). Outro subproduto da separação do ar é o nitrogênio que também possui valor comercial. Este estudo, no entanto, não irá considerar a venda desse subproduto.

As unidades de separação de ar criogênico consistem em um conjunto de equipamentos, incluindo trocadores de calor, expansores, compressores e colunas de destilação, cuja função é realizar a separação do oxigênio e o nitrogênio do ar, por meio de processos de baixa temperatura. A configuração de cada unidade é definida em conformidade com as exigências particulares de cada instalação.

2.4.5 Tanque de Armazenamento

Devido à baixa densidade do hidrogênio, seu armazenamento é um desafio. Um quilo de hidrogênio sob as condições normais de temperatura e pressão ocupa um volume de aproximadamente 11 m³. Portanto, é necessário aumentar sua densidade para que seu armazenamento se torne economicamente viável. Existem diversas formas de armazenamento de H₂ e todas elas envolvem a aplicação de energia ou o uso de materiais que se utilizam de ligações químicas (ANDERSSON e GRÖNKVIST, 2019). Dessa forma, há três formas distintas de se armazenar hidrogênio: hidrogênio na forma gasosa comprimido, hidrogênio na forma líquida e hidrogênio armazenado em materiais. Cada uma dessas formas carrega consigo suas próprias vantagens e desvantagens (BARTHÉLÉMY, WEBER e BARBIER, 2017).

A primeira forma, hidrogênio na forma gasosa comprimido, requer um compressor para elevação da pressão do gás e, por consequência, aumento da sua massa específica. O gás comprimido segue para um tanque que pode ser categorizado em quatro tipos (BARTHÉLÉMY, WEBER e BARBIER, 2017) (MORADI e GROTH, 2019):

- Tipo I: Tanque pressurizados metálicos, geralmente de aço ou alumínio, e por ser todo metálico costuma ser mais pesado que os outros tipos. Limite de pressão por volta dos 50 MPa e pela simplicidade construtiva e de materiais são mais baratos;
- Tipo II: Forro metálico parcialmente envolto com polímero de fibra de carbono reforçado. A parte

metálica e de material compósito compartilham as mesmas distribuições de tensão estrutural. O custo de fabricação desse tipo de tanque é cerca de 50% maior que do tipo I, mas oferecem uma redução de cerca de 30% a 40% de peso. Possuem a mais alta tolerância de pressão;

- Tipo III: Forro metálico completamente envolto com polímero de fibra de carbono reforçado. A estrutura de compósito é a principal responsável pela carga estrutural enquanto que a forro metálico têm como função primária a de selar o gás, pois apenas 5% da carga é transferida para essa parte. É um tipo de tanque cerca de duas vezes mais caro que o tipo II e ainda se mantém mais leve que o tipo I. Confiável de operar sob pressões inferiores a 45 MPa e possui problemas em passar testes à 70 MPa de pressão de operação;
- Tipo IV: Revestimento de polímero completamente coberto por polímero de fibra de carbono reforçado. O revestimento é usualmente feito de um polímero como polietileno de alta densidade e o polímero de fibra de carbono reforçado carrega a carga estrutural. Seguindo a tendência de um tipo para o próximo, são o tipo de tanque mais leve e os mais caros em contrapartida. Suportam pressões de até 100 MPa.

Dois formas de armazenamento do hidrogênio comprimido podem ser adotadas: acima e abaixo do nível do solo. Em grandes escalas, o armazenamento acima do nível do solo requer altos investimentos. Em cavernas de sal em Teeside, UK e Texas, EUA, hidrogênio foi armazenado com sucesso demonstrando aplicabilidade dessa alternativa. O problema de se armazenar assim é a dependência geográfica de disponibilidade dessas formações geológicas. Armazenamento em tanques garantem, apesar dos mais altos investimentos, estabilidade do armazenamento, pureza do gás e podem ser aplicados independentes do local (ANDERSSON e GRÖNKVIST, 2019).

A segunda forma é o armazenamento do hidrogênio na sua forma líquida. Essa maneira permite aumentar de forma significativa densidade do hidrogênio comparado as outras técnicas. Para isso, porém, é necessária uma grande quantidade de energia e um tanque com isolamento térmico para reduzir a evaporação do hidrogênio líquido ao longo do tempo (TAKEICHI et al., 2003). A forma líquida do hidrogênio, sob pressão atmosférica, requer a redução da temperatura para cerca de 20 K aumentando assim a densidade para cerca de $70,9 \text{ kg m}^{-3}$ (HASSAN et al., 2021). Tanques para o armazenamento criogênico usualmente são construídos com duas camadas de parede separadas por uma camada de vácuo. O vácuo tem como objetivo a redução de transferência de calor por condução e convecção. Para isolamento contra radiação, a parede do espaço interno à camada dupla é revestida por materiais como folhas de poliéster e alumina ou camadas alternadas de fibra de vidro e folhas de alumínio. Esse isolamento térmico é importante para evitar a evaporação que cria um aumento contínuo da pressão no tanque gerando a necessidade da liberação de hidrogênio. No entanto, essas perdas por evaporação são bastante pequenas, geralmente abaixo de 0,1% por dia (ANDERSSON e GRÖNKVIST, 2019). Os custos de investimento de plantas de liquefação de hidrogênio são bastante altos. A liquefação requer

tempo e é estimado que consome até 40% do conteúdo de energia correspondente ao hidrogênio comparado aos 10% do armazenamento por compressão de gás. É um método que é utilizado em produções de média a grande escala e para entregas por caminhão ou mesmo intercontinentais com tanques criogênicos sendo capazes de carregar 5 toneladas de hidrogênio (MORADI e GROTH, 2019).

A última forma, o armazenamento em materiais, é baseada em adsorção ou absorção. Essa forma de armazenamento depende da habilidade de se retirar o hidrogênio armazenado do material seja na forma de hidretos ou hidrogênio molecular. Algumas características são necessárias a esses materiais: cinética rápida, preço acessível, reversibilidade e alta capacidade de armazenamento sob condições razoáveis de temperatura e pressão de operação. O armazenamento por adsorção acontece com a transferência das moléculas do gás ou líquido para a superfície sólida do material adsorvente (HASSAN et al., 2021). Isso acontece a partir do uso das ligações de Van der Waals entre as moléculas de hidrogênio e as do material com grande área superficial específica. A força desse tipo de ligação faz necessário o uso de baixa temperatura e alta pressão para se conseguir uma alta densidade de armazenagem (ANDERSSON e GRÖNKVIST, 2019). Entre os materiais que armazenam hidrogênio por meio da adsorção, alguns promissores são: nanoestruturas de carbono, estrutura metalorgânica, polímeros de microporosidade intrínseca e zeolites. A absorção se caracteriza pela dissociação do hidrogênio e formação de ligações com outros materiais de forma reversível. A absorção pode ser feita pelo armazenamento químico em materiais como a amônia, borohidreto de sódio, hidreto de alumínio e outros ou pode ser feito por hidretos metálicos. Por sua vez, os hidretos metálicos podem ser classificados em: elementais, metais complexos e intersticiais (HASSAN et al., 2021). O uso comercial desses métodos ainda é pouco provável de acontecer em um futuro próximo (MORADI e GROTH, 2019).

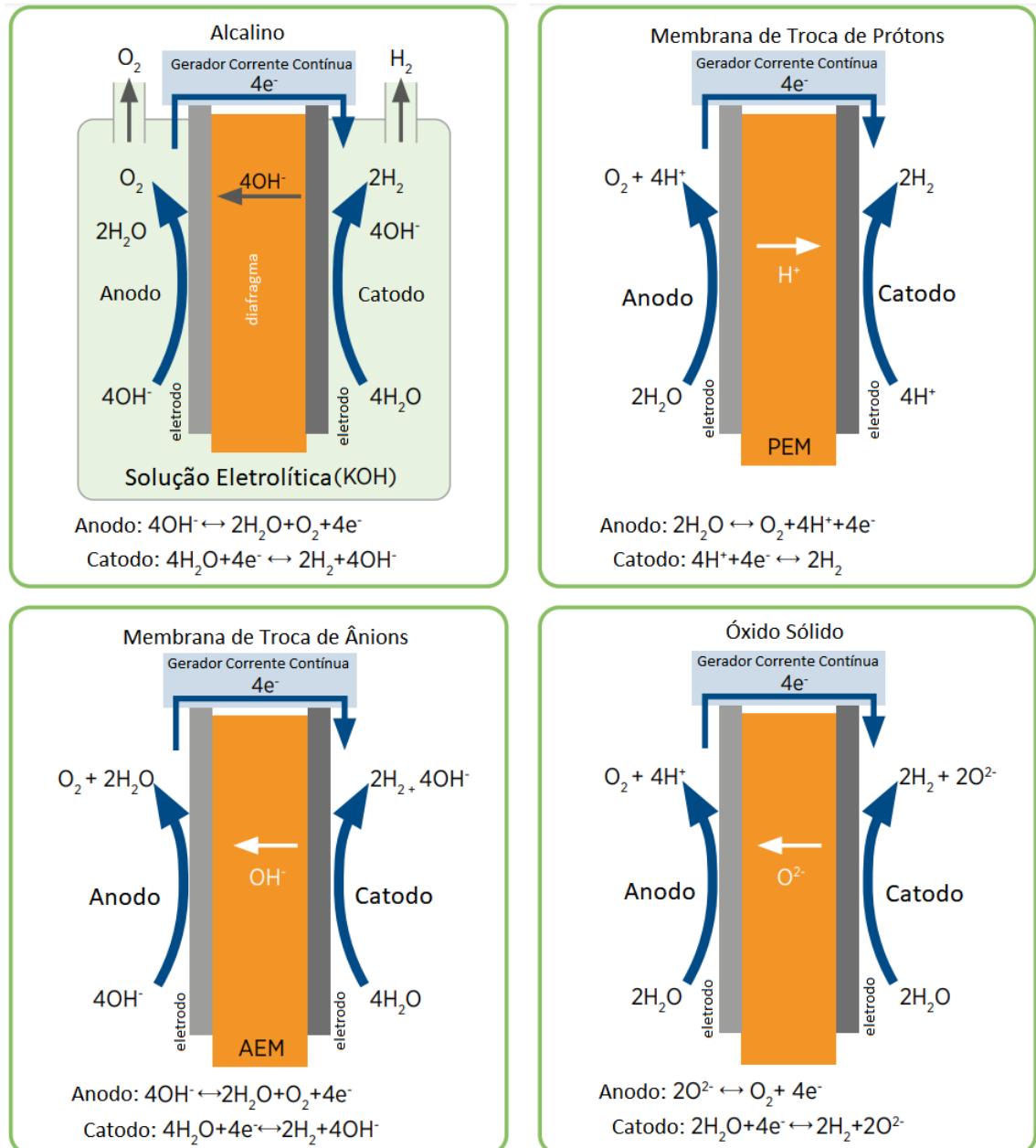
2.5 Eletrólise e Principais Tipos de Eletrolisadores

A eletrólise da água é definida como o processo ao qual a molécula de água é separada a partir da introdução de uma corrente elétrica (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018). A história da eletrólise começa com sua primeira descrição, em 1789, por Jan Rudolph Deiman e Adriaan Paets van Troostwijk. Posteriormente, destacou-se a aplicação da pilha elétrica de Alessandro Volta na eletrólise da água e os experimentos de W. Nicholson e A. Carlisle, com eletrodos de cobre, em 1800. Finalmente, desenvolveu-se aplicações industriais para a eletrólise, no final do século XIX, com eletrolisadores alcalinos. Esse longo intervalo de tempo até o desenvolvimento industrial deveu-se a várias razões técnicas, incluindo o tempo necessário para a criação de fontes adequadas de corrente contínua. Entretanto, o desenvolvimento de diafragmas eficientes para a separação das câmaras do ânodo e do cátodo foi, provavelmente, um desafio ainda maior. Por isso, durante o século XX, a maior parte dos avanços tecnológicos esteve intimamente relacionada à pesquisa e desenvolvimento de materiais para

membranas de diafragma (GRIGORIEV, 2020).

Eletrolisadores podem ser classificados em quatro tipos principais, conforme apresentado na Figura 7: membrana de troca de prótons, também conhecida como membrana eletrolítica de polímero (PEM), alcalinos (AWE), óxido sólido (SOE) e membrana de troca de ânions (AEM).

Figura 7 -Principais tipos de eletrolisadores



Fonte: Adaptado de IRENA (2020)

Dentre essas tecnologias, os eletrolisadores alcalinos e PEM já estão em uso comercial. Por outro lado, os eletrolisadores de membrana de troca de ânions e óxido sólido ainda estão em fase de desenvolvimento laboratorial, com promessas de avanços significativos (LI et al. (2024)). O nível de

prontidão tecnológica (TRL - *technology readiness level*) desenvolvido pela NASA, na década de 70, estabelece através de uma escala a progressão de uma determinada tecnologia desde a concepção inicial até sua implementação em um ambiente operacional (OLECHOWSKI et al., 2020). A escala TRL segue como (YFANTI e SAKKAS, 2024):

- TRL 1: Princípio básico observado;
- TRL 2: Conceito tecnológico formulado;
- TRL 3: Prova de conceito experimental;
- TRL 4: Tecnologia validada em laboratório;
- TRL 5: Tecnologia validada em ambiente relevante;
- TRL 6: Tecnologia demonstrada em ambiente relevante;
- TRL 7: Tecnologia demonstrada em ambiente operacional;
- TRL 8: Sistema completo e qualificado;
- TRL 9: Sistema real comprovado em ambiente operacional.

Para as principais tecnologias de eletrólise apresentadas, o TRL de cada uma delas, segundo Li et al. (2024): alcalino (AWE) é 9, membrana de troca de prótons (PEM) é 8, membrana de troca de ânions (AEM) está entre 2 e 3, óxido sólido (SOE) é de 6.

Cada tipo de eletrolisador possui suas próprias particularidades, como por exemplo a pureza do hidrogênio produzido. Na literatura, é comum o uso do termo (número de noves) para indicar a pureza obtida na separação de gases. Por exemplo, três noves ou 3N significa 99,9% de pureza, 6N que indica uma pureza de 99,9999% e pureza 3,5N indica 99,95%. A subtração de 100% por essas purezas indica a quantidade de impurezas remanescentes junto ao hidrogênio.

Diferentes aplicações requerem diferentes níveis de pureza. De acordo com Dawood, Anda e Shafiullah (2020), para os seguintes requerimentos:

- Acima de 6N: Nível hidrogênio para pesquisa e desenvolvimento;
- Acima de 5N: Nível ultra alta pureza: Aplicações em produção de semicondutores;
- Acima de 4N: Nível alta pureza: Células Combustível, aeronaves e veículos espaciais;
- Acima de 3N: Nível industrial: Produção de aço;
- Acima de 98%: Uso em motores de combustão externa e aplicações comerciais;

Começando com os eletrolisadores alcalinos, eles representam a tecnologia mais antiga e com maior maturidade tecnológica dentre os principais tipos (SMOLINKA et al., 2022), sendo aplicados em operações de escala de MW já no começo do século XX (GRIGORIEV et al., 2020). São uma tecnologia de relativo baixo custo e estável a longo prazo (DAOUDI e BOUNAHMIDI, 2024). As reações são apresentadas na Figura 7. No catodo, moléculas de água são reduzidas pelos elétrons em íons de hidroxila e gás hidrogênio. As moléculas de hidroxila formadas no catodo atravessam o diafragma

atraídas pelo anodo onde se oxidam em gás oxigênio e água (BRAUNS e TUREK, 2020). Os eletrodos são imersos em um eletrólito líquido que são separados por um diafragma. O eletrólito geralmente consiste em uma solução aquosa de KOH de 25% a 30%. Ele é circulado para remover bolhas de gás dos produtos e dissipar calor, seja por meio de bombas ou por circulação natural, devido a gradientes de temperatura e à fluatibilidade das bolhas de gás. O eletrólito é mantido em dois reservatórios separados, um para cada gás produzido (O_2 e H_2), que também atuam como separadores gás-líquido. Após a purificação, a qualidade típica dos gases produzidos é de 99,5% a 99,9% para H_2 e 99% a 99,8% para O_2 (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018). Os diafragmas são usualmente de baseados em zircônio e os eletrodos são de ligas de aço inox revestido com níquel (IRENA, 2020), sendo que o tempo médio de vida de uma célula alcalina é de 60000 horas (DAOUDI e BOUNAHMIDI, 2024).

Um eletrolisador alcalino convencional com eletrólito líquido (AWE) apresenta algumas limitações operacionais. Em especial, a densidade de corrente máxima geralmente é limitada a menos de $0,45 \text{ A/cm}^2$. Isso ocorre porque, em densidades de corrente mais elevadas, as bolhas de gás geradas tendem a subir ao longo da superfície do eletrodo, podendo formar uma película contínua e não condutiva de gás sobre toda a superfície do eletrodo. Esse efeito de isolamento aumenta o consumo de energia e favorece o transporte de gases em ambas as direções através do diafragma (GRIGORIEV et al., 2020).

Os eletrolisadores PEM são uma tecnologia que foi desenvolvida pela General Electric Co. nos anos 1960s para superar as desvantagens dos eletrolisadores alcalinos (KUMAR e HIMABINDU, 2019) (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018). Já são utilizados comercialmente, com um rápido tempo de resposta e alta capacidade dinâmica, tornando essa tecnologia ideal para a intermitência e variação inerentes de fontes renováveis de energia (DAOUDI e BOUNAHMIDI, 2024). Conseguem ser muito mais compactos que os alcalinos sob mesma potência nominal devido a capacidade de operar sob densidades de corrente bem mais elevadas, com PEM comerciais operando entre 1 a 3 A/cm^2 (LEE et al., 2020) (KUMAR e HIMABINDU, 2019), com relatos de operação de até 10 A/cm^2 (GRIGORIEV et al., 2020). A operação dos eletrolisadores PEM se baseia (Figura 7) na água que é bombeada para o anodo sendo separada em gás oxigênio e prótons (ou íons de hidrogênio). Esses prótons são atraídos pelo catodo através da membrana de troca de prótons e se recombina com os elétrons, formando-se gás hidrogênio (KUMAR e HIMABINDU, 2019). Os eletrolisadores PEM são uma tecnologia mais cara do que a dos eletrolisadores alcalinos devido as suas características construtivas e materiais necessários para a produção da membrana de troca de prótons como: polímeros perfluorados, polímeros hidrocarbonados e óxidos metálicos. A pilha desses eletrolisadores consiste em suas células conectadas em série, sendo cada célula composta por três principais componentes que são: o compartimento do anodo, do catodo e o conjunto membrana eletrodo (MEA) (RATIB et al., 2024). A pureza do hidrogênio produzido por eletrólise tipo PEM, considerando os processos de separação, recombinação catalítica e secagem do gás, chega até valores na faixa de 99,5% e 99,9%, como observado no eletrolisador Siemens

Silyzer 200 Basic (RUTH, MAYYAS e MANN, 2019). Para atingir purezas de 99,999% é necessário a adição de um PSA (GRASYS, 2024) (TAGLIABUE e DELNERO, 2018). O tempo médio de vida de uma célula PEM é de 50000 a 80000 horas (DAOUDI e BOUNAHMIDI, 2024).

A eletrólise de óxido sólido, inicialmente apresentada por Donitz e Erdle na década de 1980, tem recebido significativa atenção devido à sua eficiência em transformar energia elétrica em energia química. Além disso, essa tecnologia se destaca pela produção de hidrogênio altamente purificado de forma bastante eficiente (KUMAR e HIMABINDU, 2019). Embora seja uma tecnologia com menor maturidade quando comparada com AWE e PEM, muito desenvolvimento dessa tecnologia tem sido feito nos últimos 20 anos (NECHACHE e HODY, 2021). Esse sistema opera sob altas temperaturas, tipicamente entre 700°C a 900°C. Termodinamicamente, isso implica em uma menor demanda elétrica e, por consequência, uma maior eficiência quando comparado aos eletrolisadores alcalino e PEM (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018). Isso acontece devido ao fato de que cinéticas químicas favoráveis permitem a redução na demanda por eletricidade, uma vez que parte da energia necessária para a separação pode ser suprida na forma de calor, incluindo calor residual, além do potencial de reversibilidade, possibilitando o funcionamento tanto como célula combustível quanto como eletrólise (IRENA, 2020). Altas temperaturas de operação, no entanto, criam desafios quanto a materiais que possam resistir ao ponto de que o tempo de vida possa se igualar aos dos eletrolisadores alcalinos e PEM (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018). O tempo de vida de uma célula de óxido sólido é de 20000 horas (DAOUDI e BOUNAHMIDI, 2024). Essa célula, com espessura típica de 200 a 300 μm , é composta por um anodo e um catodo separados por um eletrólito sólido condutor de íons. A água fornecida no lado do catodo é reduzida, gerando H_2 e íons O^{2-} . Esses íons atravessam o eletrólito e, no lado do anodo, sofrem oxidação para formar O_2 (NECHACHE e HODY, 2021).

Por fim, os eletrolisadores de membrana de troca de ânions são uma das mais recentes tecnologias ainda em fase de pesquisa e desenvolvimento. O potencial dessa tecnologia está na combinação de um ambiente menos agressivo dos eletrolisadores alcalinos e a simplicidade e eficiência dos eletrolisadores PEM. Possui as vantagens de não requerer materiais nobres para o catalisador, não dependência de componentes de titânio e pode operar sob condição de pressões distintas nos eletrodos (IRENA, 2020). O funcionamento desse eletrolisador (Figura 7) é semelhante ao dos eletrolisadores alcalinos no que tange as reações eletroquímicas. Água é fornecida no catodo de forma a se reduzir em gás hidrogênio e íons de hidroxila. A hidroxila é atraída pelo anodo através da membrana de troca de ânions, onde se recombina como água e gás oxigênio (VINCENT e BESSARABOV, 2018). Um dos problemas dessa tecnologia, que ainda não foi solucionado, é sua instabilidade de produção sob temperaturas superiores a 60 °C (DU et al., 2022). As principais vantagens desses eletrolisadores são que possuem um formato compacto, tendem a possuir baixo custo devido a não necessidade de materiais de alta qualidade, conseguem operar sob pressões elevadas. Como desvantagens, ainda não alcançaram maturidade tecnológica, operam em faixa de densidade de correntes baixas, possuem pouco tempo de vida e

requerem alta carga de catalisadores (VINCENT e BESSARABOV, 2018).

2.6 Otimização

Para determinação das condições de operação que maximiza a produção de hidrogênio, métodos de otimização podem e, para o caso de gaseificação com vapor superaquecido, devem ser utilizados. Otimização, na matemática, é a disciplina que visa encontrar as variáveis de entrada da função que minimizam ou maximizam seu valor, que pode estar submetido a restrições (BANOS et al., 2011). Existem duas principais formas de otimização. A primeira envolve um indivíduo, um ponto na “superfície da função”, que se desloca com determinado passo em direção ao máximo ou mínimo dessa função. A segunda forma trabalha com uma população de pontos na superfície da função que, com o passar das iterações, irão começar a tender em direção aos pontos de máximo ou mínimo.

Para determinação do ponto de operação que maximiza a produção de H_2 para gaseificação com ar e oxigênio, métodos mais simples para resolução de equações não lineares unidimensionais foram aplicados. No caso com vapor superaquecido, métodos heurísticos foram utilizados. A seguir serão explicados de forma breve sobre os métodos utilizados nesse estudo:

- Método das aproximações quadráticas: método iterativo em que a direção é dada pelo vetor gradiente e o passo se desloca com a solução das raízes da função. Utilizado em funções unimodais (CHONG e ZAK, 2013);
- Método da seção áurea: método iterativo em que o passo que o ponto se desloca na função é baseado na razão Fibonacci. Solução aproximada com critério de parada. É um método utilizado em funções unimodais e unidimensionais (CHONG e ZAK, 2013);
- Método dos gradientes conjugados: opera utilizando um número n de direções de busca ortogonais no começo e dá um passo em cada direção de busca, de modo que o tamanho do passo seja a solução da função naquela direção. Utilizado em funções multidimensionais e unimodais (STUETZLE, 2021);
- Método *variable metric*: também chamado de método quasi-Newton, são comumente usados em problemas irrestritos devidos a suas propriedades de convergência. Conseguem resolver problemas lineares e não lineares e são uma classe de métodos iterativos. Utilizado em funções multidimensionais e unimodais (LUKŠAN e SPEDICATO, 2000);
- Algoritmo simplex de Nelder-Mead: o método se utiliza do conceito de simplex que é um polítopo. Polítopo é uma região que é a resultante da intersecção de um conjunto de semi-espacos e são utilizados para determinação da direção preferencial, dados os valores dos vértices. São problemas de busca diretas que são geralmente empregados quando a derivada da função objetivo pode não ser conhecida. Utilizado em funções multidimensionais, não lineares e unimodais (LAGARIAS et al., 1998);

- Algoritmo genético: método populacional que se baseia no princípio Darwinista da seleção natural. Indivíduos na população mais próximos do ponto ótimo têm mais chance de reprodução e de deixar descendentes na próxima iteração. Não possuem muitas limitações, podendo otimizar funções multidimensionais, lineares ou não lineares e multimodais. Possuem um custo computacional bem mais alto que os outros métodos apresentados.

2.7 Simulação de Monte Carlo

A simulação de Monte Carlo se baseia na repetição de uma amostragem aleatória para a geração de uma análise estatística. É uma forma metódica de construção de cenários “e se”. Em diversas áreas da ciência, o comportamento dos fenômenos do mundo físico é descrito por meio de modelamentos matemáticos. Esse comportamento é usualmente complexo e depende de todo um conjunto de parâmetros que irão entrar no modelo e sair como o resultado que se busca compreender do fenômeno em questão. Em uma visão mais determinística de análise do modelo, usualmente, três cenários são construídos: o pior cenário, o melhor cenário e o caso base. O caso base se caracteriza por assumir como parâmetros de entrada no modelo os valores que são mais prováveis de ocorrerem. No entanto, a forma mais efetiva para acessar os diversos riscos possíveis é a consideração de cenários que intermediam, por exemplo, piores valores de um determinado parâmetro de entrada com os melhores de outro. Portanto, a verificação do número suficiente de cenários que permitam uma visão geral de todos os cenários possíveis e a probabilidade de eles acontecerem é a melhor maneira de entender de fato o fenômeno de forma global (RAYCHAUDHURI, 2008).

A simulação de Monte Carlo é realizada a partir do seguinte procedimento (MOONEY, 1997) (RAYCHAUDHURI, 2008):

1. Criação do Modelamento Estático: Para que a simulação de Monte Carlo possa ser feita é necessário a existência inicial de um modelo determinístico que busca em seu cenário base a determinação da resposta à entrada de valores nos parâmetros que possuam maior probabilidade de acontecer;
2. Entrada de Distribuições Probabilística nos Parâmetros de Entrada: Adição de curvas de distribuição de probabilidade escolhendo faixas de possibilidade de ocorrência de valores nos parâmetros de entrada. Amostras serão criadas de uma pseudo-população de maneira a refletir as distribuições probabilísticas.
3. Geração de Variáveis Aleatórias: Com as distribuições estabelecidas, são geradas um conjunto de valores aleatórios associados as variáveis de entrada e com chances de escolha guiadas pelas distribuições. Um conjunto de respostas surgirão dessa entrada e o processo então se repete gerando novos conjuntos de números aleatórios e novos resultados. Com o acúmulo contínuo de resultados, é construído uma distribuição relativa de frequência e uma análise de sensibilidade.

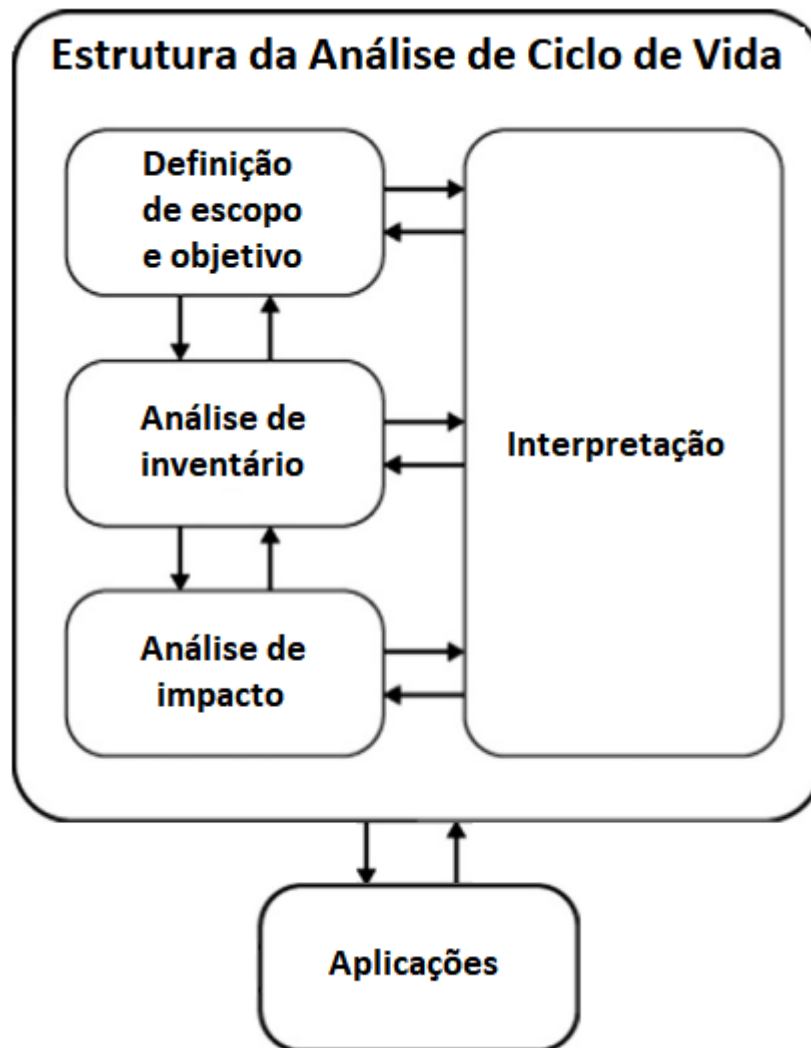
Os resultados da simulação de Monte Carlo permitem a tomada de decisões baseadas nas chances que certos cenários específicos têm de ocorrer permitindo compreender quais conjuntos de parâmetros de entrada favorecem ou não certos resultados desejados. A análise de sensibilidade que essa simulação fornece, permite entender quais dos parâmetros carrega consigo um maior peso de mudança no resultado final.

2.8 Análise de Ciclo de Vida

Análise de ciclo de vida (ACV) se trata de uma metodologia focada em avaliar os impactos ambientais totais de um determinado produto, processo ou atividade dado todo o ciclo de vida das matérias e da energia envolvida. Esse tipo de análise contabiliza a extração e processamento dos materiais envolvidos, a manufatura, transporte e distribuição, uso, reuso, manutenção, reciclagem e descarte (CHAU, LEUNG e NG, 2015). É amplamente recomendada por instituições internacionais, como a Comissão Europeia e o Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente. Esse método é frequentemente aplicado por profissionais em empresas, além de ser utilizado para embasar programas de rotulagem ambiental e declarações ambientais de produtos. A ACV auxilia na redução de compensações entre alternativas similares, ao mesmo tempo em que evita a transferência de impactos ambientais entre diferentes estágios ou processos do ciclo de vida, bem como entre distintos tipos de impacto ambiental. As diretrizes para a realização da ACV estão estabelecidas na série de normas 14040, publicadas pela Organização Internacional para Padronização (ISO) (CUCURACHI et al., 2019).

A análise de ciclo de vida pode ser separada em quatro fases distintas: Começando com a descrição do escopo e dos objetivos que incluem a definição das limitações da análise. Em seguida, na segunda fase, vem a análise de inventários que compilam as entradas e saídas de cada processo pertencente ao ciclo de vida do produto, processo ou atividade. Essas entradas incluem os materiais necessários à manufatura, os materiais utilizados no processo de produção e a energia; já as saídas representam os poluentes atmosféricos, os efluentes e os resíduos sólidos gerados. Na terceira etapa, emissões e recursos são agrupados de acordo com a categoria dos seus impactos e convertidos para um impacto comum de forma a tornar suas unidades comparáveis. A última fase compreende a interpretação do inventário e a análise do resultado dos impactos de forma a atender os objetivos do estudo (TONIOLO et al., 2020). A Figura 8 apresenta as diferentes fases da análise de ciclo de vida.

Figura 8 - Diferentes fases da análise de ciclo de vida



Fonte: Adaptado de Chau, Leung e Ng (2015)

Outro conceito importante na ACV é a Unidade Funcional (UF). É definida pela norma internacional de Análise de Ciclo de Vida (ACV) ISO 14040/44 como o “desempenho quantificado de um sistema de produto, utilizado como unidade de referência”. Ela atua como um fator de escala para todos os cálculos da ACV e exerce um papel central nos resultados obtidos. A unidade funcional deve ser claramente especificada, mensurável e estar alinhada com os objetivos e o escopo do estudo. Caso alguma função do produto ou processo analisado não esteja contemplada na unidade funcional, essa omissão deve ser justificada e registrada. Fora essas exigências, as normas ISO 14040/44 não estabelecem critérios adicionais, o que permite uma margem considerável de interpretação na definição da UF (BACKES, HINKLE-JOHNSON e TRAVERSO, 2023).

3 METODOLOGIA

A metodologia deste trabalho irá consistir no modelamento físico dos processos de produção de hidrogênio a partir da gaseificação de resíduos de biomassa e da eletrólise a partir de fontes de energia renováveis. A partir de um modelamento que consiga representar de forma suficientemente fiel os processos, um conjunto de otimizações será realizado para a determinação dos pontos de operação que maximizem a produção de hidrogênio. Dados regionais de Minas Gerais das fontes energéticas e de insumos necessários serão levantados para que possa ser estabelecido um potencial teórico de produção sob diferentes cenários. Em seguida, serão realizadas análises econômicas, análises de risco e de impactos ambientais.

O primeiro processo de produção investigado é a gaseificação de resíduos de biomassa. A metodologia utilizada no estudo deste processo é explicada a seguir:

1. Foi desenvolvido um modelo de equilíbrio químico por meio da minimização da energia livre de Gibbs que seja capaz de simular a gaseificação com diferentes agentes gaseificantes: ar, oxigênio puro e mistura ar/vapor; E com e sem aprimoramento de gás por reatores WGS;
2. O processo foi otimizado com diferentes métodos para encontrar o ponto que maximiza a produção de hidrogênio;
3. Foi avaliado a disponibilidade das principais biomassas produzidas no estado de Minas Gerais e determinado as suas respectivas gerações de resíduos;
4. Foi determinado o potencial teórico de produção de hidrogênio para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais;
5. Uma análise econômica, utilizando como métrica o custo nivelado de produção do hidrogênio, foi desenvolvida.
6. Foi realizado uma simulação de Monte Carlo para o desenvolvimento de uma visão global do comportamento do custo nivelado a partir da variação probabilística de parâmetros de interesse.
7. Por fim, foi realizado uma análise de ciclo de vida para a determinação dos impactos ambientais do processo.

Em seguida, foi investigado a produção de hidrogênio por meio da eletrólise do tipo PEM utilizando fontes renováveis de energia.

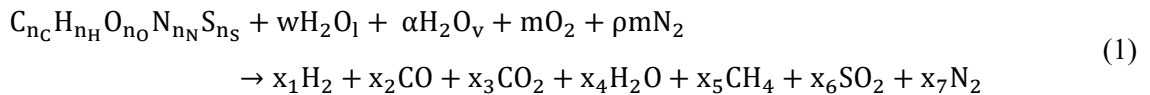
1. Foi desenvolvido um modelo para o eletrolisador tipo PEM para a obtenção da curva de polarização;
2. O ponto que maximiza a produção de hidrogênio foi investigado levando também em consideração as limitações dos eletrolisadores comerciais disponíveis;
3. Uma análise econômica foi conduzida dadas diversas considerações e cenários;

3.1 Modelo Termodinâmico de Equilíbrio Químico

Conforme mencionado, existem diferentes métodos para o modelamento da gaseificação, sendo os principais: modelamento termodinâmico por equilíbrio químico, por cinética química, fluidodinâmica computacional (CFD) e até mesmo redes neurais. A escolha do equilíbrio químico para esta análise está atrelada ao baixo custo computacional e fácil generalização desse tipo de modelamento. Este estudo exigirá um altíssimo número de simulações dado o grande número de resíduos de biomassas e cenários que serão testados.

Neste modelo é assumido que todas as reações estão em equilíbrio químico, ou seja, quando as reações diretas e reversas do processo ocorrem paralelamente nos dois sentidos de forma que as quantidades dos reagentes e produtos envolvidos permanecem constantes. É também esperado que os produtos da pirólise sejam queimados e atinjam o equilíbrio na zona de redução antes de deixar o gaseificador, permitindo dessa maneira que o modelo de equilíbrio possa ser utilizado com maior proximidade de um gaseificador real. O tipo de gaseificação que tende a ser melhor representado pelo modelamento de equilíbrio químico é a gaseificação *downdraft*, dado os fatores como a direção que os gases percorrem conforme são produzidos e o tempo de residência típico do processo.

Para esse modelamento, foi considerado a seguinte reação genérica:



Onde:

- w : coeficiente estequiométrico da umidade;
- m : coeficiente estequiométrico do ar;
- x_1 ao x_7 : coeficientes estequiométricos dos produtos;
- ρ : é a proporção de nitrogênio com relação ao oxigênio, usualmente considerada como 3,76;
- α : coeficiente estequiométrico do vapor superaquecido.

As normalizações dos índices estequiométricos de cada um dos elementos que compõem a biomassa são dadas por:

$$C_{\text{molar}} = \frac{C}{12} \quad (2)$$

$$n_C = 1 \quad (3)$$

$$n_H = \frac{H}{C_{\text{molar}}} \quad (4)$$

$$n_N = \frac{N}{14 C_{\text{molar}}} \quad (5)$$

$$n_S = \frac{S}{32 C_{\text{molar}}} \quad (6)$$

$$n_O = \frac{O}{16 C_{\text{molar}}} \quad (7)$$

Onde C, H, O, N e S são as porcentagens mássicas da análise elementar em base seca da biomassa.

A umidade (U) é dada através da relação da massa de água pela massa de biomassa úmida e a partir dessa relação o coeficiente estequiométrico w pode ser determinado:

$$U = \frac{\text{massa de água}}{\text{massa de biomassa úmida}} 100\% = \frac{18w}{MM_b + 18w} 100\% \quad (8)$$

Onde MM_b é a massa molar da biomassa:

$$MM_b = 12n_C + 1n_H + 16n_O + 32n_S + 14n_N \quad (9)$$

Dessa forma, uma vez que a quantidade de umidade é conhecida, w pode ser calculado.

A porcentagem de oxigênio no ar (OP) é utilizada para calcular a proporção de nitrogênio com relação ao oxigênio (ρ):

$$OP = \frac{1}{1 + \rho} 100\% \quad (10)$$

Em análises que envolvem ar, usualmente é considerado que o ar é formado apenas por 21% de oxigênio e 79% de nitrogênio desconsiderando a existência de outros gases devido a sua quantidade desprezível.

No caso de gaseificação com vapor superaquecido sendo fornecido junto ao ar, é utilizado a razão de vapor com relação a biomassa (SB) para determinar quantidade de vapor superaquecido por kmol de biomassa (α):

$$SB = \frac{18\alpha}{MM_b + 18w} \quad (11)$$

Da reação genérica, podemos retirar as seguintes equações a partir dos elementos participantes da reação:

Carbono:

$$n_C = x_2 + x_3 + x_5 \quad (12)$$

Hidrogênio:

$$n_H + 2w + 2\alpha = 2x_1 + 2x_4 + 4x_5 \quad (13)$$

Oxigênio:

$$n_O + w + \alpha + 2m = x_2 + 2x_3 + x_4 + 2x_6 \quad (14)$$

Enxofre:

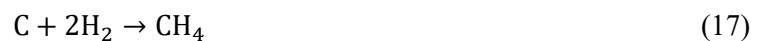
$$n_S = x_6 \quad (15)$$

Nitrogênio:

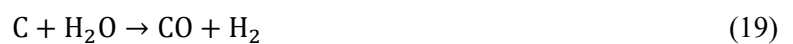
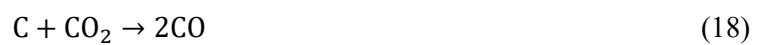
$$n_N + 2\rho m = 2x_7 \quad (16)$$

Como observado, a reação possui sete variáveis e apenas cinco equações dados os cinco elementos que envolvem a reação. Dessa forma, foram utilizadas duas das principais reações que compõem a gaseificação para prover as duas reações necessárias para a solução do equilíbrio químico.

A reação de formação de metano:



E a reação de deslocamento gás-água formada pelas subreações:



Assim:



As duas equações que faltam são dadas pela constante de equilíbrio da formação do metano.

$$K_1 = \frac{x_5}{x_1^2} \quad (21)$$

Pela constante de equilíbrio da reação de deslocamento gás-água.

$$K_2 = \frac{x_1 x_3}{x_2 x_4} \quad (22)$$

A equação da Primeira Lei da Termodinâmica para a reação de gaseificação, assumindo processo adiabático, é dada por:

$$x_1 dH_{\text{H}_2} + x_2 dH_{\text{CO}} + x_3 dH_{\text{CO}_2} + x_4 dH_{\text{H}_2\text{O}} + x_5 dH_{\text{CH}_4} + x_6 dH_{\text{SO}_2} + x_7 dH_{\text{N}_2} - dH_{\text{biomassa}} - wdH_{\text{H}_2\text{O}_l} - \alpha dH_{\text{H}_2\text{O}_v} = 0 \quad (23)$$

E, para qualquer gás ideal, sua entalpia é dada por:

$$dH_{(\text{para qualquer gás})} = H_f^0 + \Delta H \quad (24)$$

Onde:

- H_f^0 : entalpia de formação do gás;
- ΔH : variação de entalpia com relação a temperatura de referência.

Sendo que a variação de entalpia pode ser calculada por:

$$\Delta H = C_p \Delta T \quad (25)$$

Onde ΔT é a diferença da temperatura do gás e a temperatura de referência (298,15 K) e C_p é o calor específico.

Para a água líquida, a sua variação de entalpia é dada por:

$$dH_{H_2O_l} = H_{fH_2O(l)}^0 + H_{(vap)} \quad (26)$$

Onde:

- $H_{fH_2O(l)}^0$: entalpia de formação da água líquida;
- $H_{(vap)}$: entalpia de vaporização da água.

Para o vapor superaquecido, a sua variação de entalpia é dada por:

$$dH_{H_2O_v} = H_{fH_2O(v)}^0 + \Delta H \quad (27)$$

Onde, $H_{fH_2O(v)}^0$ é a entalpia de formação do vapor de água;

E para a biomassa:

$$dH_{biomassa} = H_{fbiomassa}^0 \quad (28)$$

O cálculo da entalpia de formação da biomassa é dado por:

$$H_{fbiomassa}^0 = PCS_{biomassa} MM_b + H_{fCO_2}^0 + \frac{n_H}{2} H_{fH_2O(l)}^0 + n_S H_{fSO_2}^0 \quad (29)$$

De acordo com Callejón-Ferre et al. (2011), o poder calorífico superior de qualquer biomassa pode ser calculado com boa precisão a partir da seguinte fórmula:

$$PCS_{biomassa} = (-3,393 + 0,507 C - 0,341 H + 0,067 N) * 1000 \text{ (kJ/kg)} \quad (30)$$

Onde C, H e N são a percentagem da composição elementar em base mássica e em base seca.

As constantes de equilíbrio são calculadas a partir da minimização do Gibbs.

$$\ln K = -\frac{\Delta G^0}{RT} \quad (31)$$

Onde ΔG^0 é variação da energia livre de Gibbs com relação à temperatura de referência, R é a constante universal dos gases.

Zainal et al. (2001), a partir do cálculo da minimização de Gibbs da reação de formação de metano e da reação de deslocamento gás-água, chegaram as seguintes equações dependentes da temperatura de gaseificação (K), respectivamente:

$$\ln K_1 = \frac{7082,848}{T} + (-6,567)\ln T + \frac{7,466 \times 10^{-3}}{2}T + \frac{-2,164 \times 10^{-6}}{6}T^2 + \frac{0,701 \times 10^{-5}}{2T^2} + 32,541 \quad (32)$$

$$\ln K_2 = \frac{5870,53}{T} + 1,86\ln T + 2,7 \times 10^{-4}T + \frac{58200}{T^2} + 18,007 \quad (33)$$

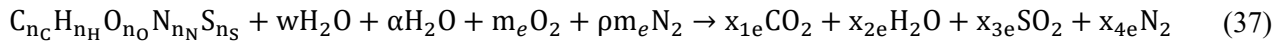
As porcentagens molar e mássica do H₂ (base úmida) e mássica da biomassa (base úmida) nos reagentes foram calculadas a partir das seguintes equações:

$$\%H_{2\text{molar}} = \frac{x_1}{x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 + x_7} \quad (34)$$

$$\%H_{2\text{mass}} = \frac{2x_1}{2x_1 + 28x_2 + 44x_3 + 18x_4 + 16x_5 + 64x_6 + 28x_7} \quad (35)$$

$$\%Bio_{\text{mass}} = \frac{MM_b}{MM_b + 18w + 18\alpha + m(32 + \rho 28)} \quad (36)$$

A equação estequiométrica da reação é dada por



Onde o subscrito *e* se refere a estequiométrico nas variáveis.

Da reação estequiométrica, obtém-se as seguintes equações a partir dos elementos participantes da reação:

Carbono:

$$n_C = x_{1e} \quad (38)$$

Hidrogênio

$$n_H + 2w + 2\alpha = 2x_{2e} \quad (39)$$

Oxigênio:

$$n_O + w + 2m_e + \alpha = 2x_{1e} + x_{2e} + 2x_{3e} \quad (40)$$

Enxofre:

$$n_S = x_{3e} \quad (41)$$

Nitrogênio:

$$n_N + 2\rho m_e = 2x_{4e} \quad (42)$$

A razão Ar/Combustível é dada por:

$$AC = \frac{m(32 + \rho 28)}{MM_b} \quad (43)$$

A razão Ar/Combustível estequiométrica é dada por:

$$AC_{est} = \frac{m_{est}(32 + \rho 28)}{MM_b} \quad (44)$$

A razão de equivalência pode então ser calculada como:

$$ER = \frac{AC}{AC_{est}} \quad (45)$$

O poder calorífico inferior do gás de síntese pode ser calculado através da seguinte equação (KORONEOS E LYKIDOU, 2011):

$$PCI_{syngas} = (30[CO] + 25,7[H_2] + 85,4[CH_4] + 151,3[C_m H_n])4,2/1000 \text{ (MJ/Nm}^3\text{)} \quad (46)$$

Onde [gás] indica a concentração molar do respectivo produto da gaseificação.

A massa molar do gás de síntese pode ser calculado ponderação da seguinte equação (porcentagens mássicas em base úmida):

$$MM_{\text{gás de síntese}} = \frac{2 \%H_{2\text{mass}}}{100} + \frac{28 \%CO_{\text{mass}}}{100} + \frac{44 \%CO_{2\text{mass}}}{100} + \frac{18 \%H_2O_{\text{mass}}}{100} + \frac{16 \%CH_{4\text{mass}}}{100} + \frac{64 \%SO_{2\text{mass}}}{100} + \frac{28 \%N_{2\text{mass}}}{100} \quad (47)$$

3.2 Equilíbrio Químico Termodinâmico dos Reatores WGS

A razão de conversão ou eficiência de conversão de monóxido de carbono também pode ser estimada por meio de análise de equilíbrio químico por minimização de Gibbs. A Equação 33 utilizada anteriormente para determinar a constante de equilíbrio também pode ser utilizada e com a Equação 48 (MENDES et al., 2010) é possível determinar a taxa de conversão de monóxido de carbono para a produção adicional de hidrogênio, assumindo comportamento de gás ideal:

$$K_2 = \frac{\left(\frac{\%CO_2_{molar.bs}}{100} + \frac{\%CO_{molar.bs}}{100} C_{CO}\right) \left(\frac{\%H_2_{molar.bs}}{100} + \frac{\%CO_{molar.bs}}{100} C_{CO}\right)}{\frac{\%CO_{molar.bs}}{100} (1 - C_{CO}) \left(S/G - \frac{\%CO_{molar.bs}}{100} C_{CO}\right)} \quad (48)$$

Onde:

- C_{CO} é a eficiência de conversão do monóxido de carbono;
- Sufixo molar.bs indica que se tratam de porcentagens molares em base seca;
- S/G é a razão molar de vapor por gás seco;
- K_2 é a constante de equilíbrio químico da reação de deslocamento gás-água;

3.3 Potencial Teórico de Produção de Hidrogênio

O potencial teórico de produção de hidrogênio é definido como a quantidade possível de produção de hidrogênio por ano dada algumas considerações específicas do resíduo e foi calculado da Equação 49.

$$P_{tH_2} = RH_2Bio. PB . RRB(1 - U)\eta \quad (49)$$

Onde:

- PB: quantidade de biomassa gerada na microrregião no período de um ano (ton/ano);
- RRB: razão de resíduos gerados em relação a biomassa produzida;
- U: porcentagem de umidade da análise elementar;
- η : porcentagem do resíduo gerado passível de ser utilizada para produzir hidrogênio por gaseificação ou fator de recuperação;
- RH_2Bio : razão de massa de hidrogênio produzido por massa de biomassa seca.

A razão mássica de hidrogênio por biomassa seca e sem cinzas é dada por:

$$RH_2Bio = \frac{\%H_{2MÁSS}}{\%Bio_{MÁSS}} \quad (50)$$

Onde:

- $\%H_{2MÁSS}$: porcentagem mássica de H_2 produzida na gaseificação do resíduo da biomassa;
- $\%Bio_{MÁSS}$: porcentagem mássica de biomassa seca e sem cinzas nos reagentes;

3.4 Escolha dos Resíduos de Biomassa

Para este trabalho foram escolhidos nove resíduos provindos de seis tipos de biomassas. Os critérios de escolha desses resíduos se basearam na sua disponibilidade e no potencial de gaseificação dos mesmos. A Tabela 2 apresenta os resíduos de biomassas escolhidos e suas respectivas análises elementar e imediata.

Tabela 2 - Resíduos de biomassas escolhidos e suas análises elementar e imediatas

Biomassa	Análise Elementar (Base seca) (%)						Análise Imediata (Base Úmida) (%)			
	C	H	O	N	S	A	Umidade	Cinzas	Voláteis	Carbono Fixo
Bagaço de cana ^a	48,81	5,9	43,1	0,49	0	1,7	7	1,49	76,35	15,16
Palhiço de cana ^b	39,75	5,5	46,84	0,19	0	7,72	33	5,17	51,86	9,97
Borra de café gasta ^c	59,70	7,80	30,20	2,19	0,10	0,01	57,9	0,17	34,73	7,19
Espiga de milho ^d	46,51	5,68	44,13	0,47	0,09	3,12	7,04	2,9	72,67	17,39
Palhiço de milho ^e	44,77	5,39	41,76	0,85	0,21	7,02	8,02	6,46	67,55	17,97
Casca de soja ^f	43,08	6,36	44,51	0,85	0,09	5,11	6,3	4,78	69,6	19
Casca de cacau ^g	45,58	5,63	36,05	3,36	0,17	9,21	6,7	8,58	-	-
Madeira de Eucalipto (serragem) ^h	48,33	5,89	45,13	0,15	0,01	0,49	16	0,44	69,34	14,22
Casca de Eucalipto ⁱ	47,4	5,5	44,1	0,3	0,05	2,65	12	4,22	68,73	15,05

a: Garcia-Pérez, Chaala e Roy (2002); b: Jorapur e Rajvanshi (1995); c: Barbanera e Muguerra (2020); d: Lu et al. (2006); e: Lu et al. (2006); f: Werther et al. (2000); g: Van Ree et al. (1995); h: Kitani, Hall e Wagener (1989); i: Theis et al. (2006).

A seguir é apresentado mais detalhadamente as características e justificativas para a escolha dos resíduos, levando em consideração o nível de produção nacional e estadual das culturas que os originam. Também são apresentados os dados das condições da umidade comumente observada nesses resíduos e a sua relação com as culturas que os geram.

3.4.1 Bagaço de Cana

O Brasil é o maior produtor mundial de cana de açúcar sendo a região centro-sul responsável por 90% da produção nacional. Segundo o IBGE (2022), Minas Gerais foi o segundo estado que mais

produziu cana de açúcar no país no ano de 2022.

A cana de açúcar é responsável pela produção de dois essenciais produtos: o açúcar e o álcool. Graças aos contínuos avanços nos estudos que envolvem o reaproveitamento de resíduos, praticamente toda a planta da cana pode ser utilizada. Os principais resíduos que a cana produz são a vinhaça, palhiça e o bagaço.

O bagaço é o subproduto da moagem para a extração do caldo de cana de açúcar. É principalmente utilizado como combustível em caldeiras para cogeração e produção de eletricidade. Recém moído, possui uma umidade de aproximadamente 50% (SANTOS et al., 2011) chegando até 56% (DIAZ-MATEUS, ALVAREZ-CASTRO E CHAVES-GUERRERO, 2018). Comparativamente, quando se queima carvão, este está com uma umidade geralmente abaixo dos 10%, e o bagaço, com umidades tão altas, faz com que, em maior parte dos casos, seja pouco viável economicamente um pré-tratamento de secagem antes de seu uso (DIAZ-MATEUS, ALVAREZ-CASTRO E CHAVES-GUERRERO, 2018). O bagaço representa 30% da massa da cana de açúcar e isso faz com que sua utilização também seja um benefício não somente econômico, mas também ambiental (SELMAN-HOUSEIN, 2000).

3.4.2 Palhiço de Cana

O palhiço é definido como a soma das folhas secas, verdes e ponteiro da cana de açúcar. Anteriormente, a prática comum era a queima do palhiço, mas a legislação ambiental forçou uma mudança de comportamento. Hoje, cerca de 97% das colheitas de cana de açúcar nos campos são mecanizadas e não queimam palhiça (colheita verde), deixando grandes quantidades cobrindo o solo. Segundo Cherubin et al. (2021), a quantidade deixada no campo varia de 10 e 20 ton ha⁻¹, sendo consistente com a média de 14,43 ton ha⁻¹ obtida de Hassuani, Leal e Macedo (2005).

Uma das dificuldades do reaproveitamento do palhiço está no seu recolhimento do campo, pois possui baixa densidade. As alternativas para isso seriam o enfardamento no campo para posterior transporte, o desligamento dos ventiladores da colheitadeira de modo que o palhiço seja colhido junto com a cana e separado em uma Estação de Limpeza agregada a usina e, por fim, o ventilador primário é mantido em baixa velocidade e o secundário desligado para o palhiço seja parcialmente colhido junto com a cana para também ser separado posteriormente na usina (LEITE et al., 2009).

E quanto a umidade da palhiça, Jorapur e Rajvanshi (1995) observaram valores entre 4 e 33% nas suas amostras.

3.4.3 Borra de Café

O Brasil é maior produtor mundial de café com 30% de todo café comercializado internacionalmente seguido pelo Vietnã e Colômbia (ATLAS DE BIOMASSA DE MINAS GERAIS,

2017). E entre os estados brasileiros, Minas Gerais é o maior produtor com 1.735.408 toneladas produzidas em 2023, sendo Espírito Santo o segundo maior com 811.417 toneladas (IBGE, 2023).

A borra de café é um subproduto da fabricação do pó de café, que é processado por métodos secos ou úmidos. Uma parte considerável desse resíduo é despejado em aterro sanitários, incinerado ou compostado (BARBANERA e MUGUERZA, 2020). Em média, uma tonelada de café colhido gera cerca de 650 kg de borra (COLANTONI et al., 2021). A umidade da borra é consideravelmente alta, por volta de 58%, requerendo um pré-tratamento de secagem antes do processo de gaseificação. Como se trata de um subproduto do processo de fabricação do pó, em escalas industriais, sua coleta não é um problema.

3.4.4 Espiga de Milho

Em termos de produção mundial, o Brasil fica em terceiro lugar como produtor de milho, perdendo somente para os Estados Unidos e a China (ATLAS DE BIOMASSA DE MINAS GERAIS, 2017). E entre os estados brasileiros, Minas Gerais ocupa 5º lugar como produtor nacional do grão (IBGE, 2022).

Uma série de resíduos são gerados durante o processamento do milho, sendo eles: o talo, as folhas, a palha e a espiga. Esses resíduos compõem 40% da produção total do grão e a espiga contabiliza 40% desse total. A umidade da espiga é baixa, inferior a 15%, fazendo com que pré-tratamentos de secagem não sejam necessários para seu uso em processos termoquímicos (MIRANDA et al., 2018).

3.4.5 Palhiço de Milho

O palhiço de milho é considerado toda a porção da planta acima da terra menos o grão de milho, ou seja, a soma do talo, folhas e da palha que envolve a espiga. Isso pode ser feito porque as composições elementares desses componentes da planta diferem muito pouco. Segundo Igathinathane et al. (2009), a disponibilidade da palhiço pode ser estimada como sendo de 80% da produção do grão e metade dessa quantidade pode ser coletada para utilização. A umidade do palhiço é geralmente baixa, pois o milho muitas vezes é colhido no campo com o resto da planta já significativamente seco. Além disso, é comum que a palhiço seja deixado exposto no campo pós colheita dando ainda mais tempo para secar. Zhang, Ghaly e Li (2012) verificaram na sua amostra de estudo uma umidade de 7,92% para as folhas e 6,4% para o talo enquanto que Lu et al. (2006) obteve uma umidade de 8,02%.

3.4.6 Casca de Soja

No que toca a produção e processamento mundial da soja, o Brasil fica em segundo lugar,

enquanto que o estado de Minas Gerais é o 6º maior produtor entre os estados brasileiros (IBGE, 2022). A casca de soja, que é uma fina camada que recobre o grão e é obtida após o processamento industrial, constitui 2% do total da massa do grão (SANTOS et al., 2008). É geralmente utilizada como complemento à ração animal como forma de reaproveitamento do resíduo. Werther et al. (2000) em sua análise imediata de resíduos agrícolas, florestais e de carvão observaram uma umidade de cerca de 6,3% na casca de soja.

3.4.7 Casca de Cacau

Brasil é o sétimo maior produtor de cacau no mundo e o quinto maior consumidor do principal produto da planta: o chocolate (FORBES, 2022). Minas Gerais é segundo estado que mais produz cacau, sendo o Pará o que mais produz (IBGE, 2022). A casca do cacau é a camada que recobre sua polpa e representa entre 12 a 20% do fruto (OKIYAMA, NAVARRO e RODRIGUES, 2017). Van Ree et al. (1995) estimam uma umidade de cerca de 6,7% para a casca após pré-tratamento em um secador de tambor rotativo.

3.4.8 Madeira de Eucalipto

O eucalipto é a madeira mais plantada e estudada no Brasil e continua em ritmo de crescimento ano após ano. As espécies mais plantadas e pesquisadas com vista em fins energéticos são: *Eucalyptus grandis*, *Eucalyptus urophylla*, *Eucalyptus camaldulensis*, *Eucalyptus cloeziana*, *Eucalyptus pellita*, *Eucalyptus saligna*, híbrido *Eucalyptus grandis x Eucalyptus urophylla* e híbrido *Eucalyptus grandis x Eucalyptus camaldulensis* (ATLAS DE BIOMASSA DE MINAS GERAIS, 2017). Por ser a espécie mais plantada no país, *Eucalyptus grandis* foi utilizada como referência quanto aos dados da composição elementar neste trabalho para a análise do ponto de operação de produção máxima de hidrogênio. Outros países que também se destacam na plantação de eucalipto são a Índia, África do Sul, Zâmbia, Zimbábue, Tanzânia, Uganda e Ceilão (EMBRAPA, 2019). E entre os estados brasileiros, de acordo com o IBGE (2022), Minas Gerais detém o primeiro lugar em produção de eucalipto.

O IBGE (2022) avalia a produção do eucalipto de acordo com sua finalidade e a proporção de seu uso no estado de Minas Gerais fica como: 25,1% para lenha, 29,1% de madeira em tora para papel e celulose, 21,7% de carvão vegetal e 24,1% de madeira em tora para outras finalidades.

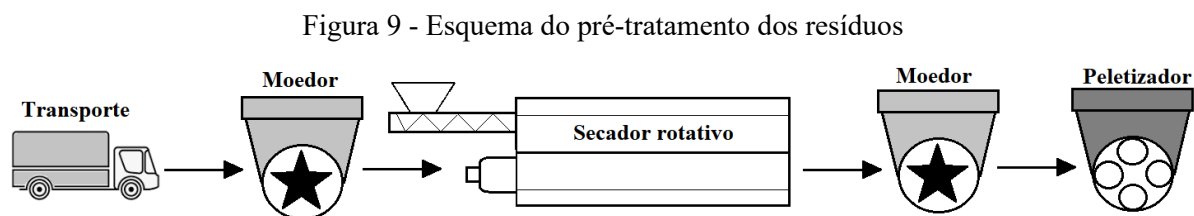
A densidade do eucalipto varia entre espécies. O *Eucalyptus grandis*, espécie adotada nessa análise, possui uma densidade média de 0,49 g/cm³ (OLIVEIRA, HELLMEISTER e TOMAZELLO FILHO, 2005). Quanto a umidade, Zanuncio et al. (2013) fizeram uma análise do eucalipto secando ao ar livre em um período de 90 dias, para três variedades de eucalipto, e verificaram uma umidade média da superfície diretamente em contato com o ar de 16%.

3.4.9 Casca de Eucalipto

A casca é a camada exterior que recobre desde as raízes até o tronco e os ramos da árvore. No eucalipto, segundo Chemetova et al. (2021), a casca representa cerca de 7 a 20% do peso total da tora. E em sua amostra, Theis et al. (2006) verificaram uma umidade de cerca de 12%. Usualmente, a casca é utilizada na queima como combustível, como cobertura morta ao solo, adubo, para produção de carvão vegetal e etc. Dessa forma, a sua utilização para a produção de hidrogênio pode ser uma alternativa interessante às atuais utilizações.

3.5 Pré-tratamento dos Resíduos de Biomassa

O processo de pré-tratamento dos resíduos (Figura 9) a serem gaseificados se baseia primeiramente na redução de sua granulometria por meio de um moedor. A partir da redução do resíduo a uma granulometria abaixo de 50 mm, o resíduo passa por um secador rotativo a gás reduzindo a umidade para uma faixa de cerca de 10 a 12%. Uma segunda moagem do resíduo seco é então realizada visando a redução do tamanho da partícula para menos de 2 a 5 mm finalizando com a peletização (LAMERS et al., 2015) (RAHAYU et al., 2023).



Fonte: Elaborado pelo Autor

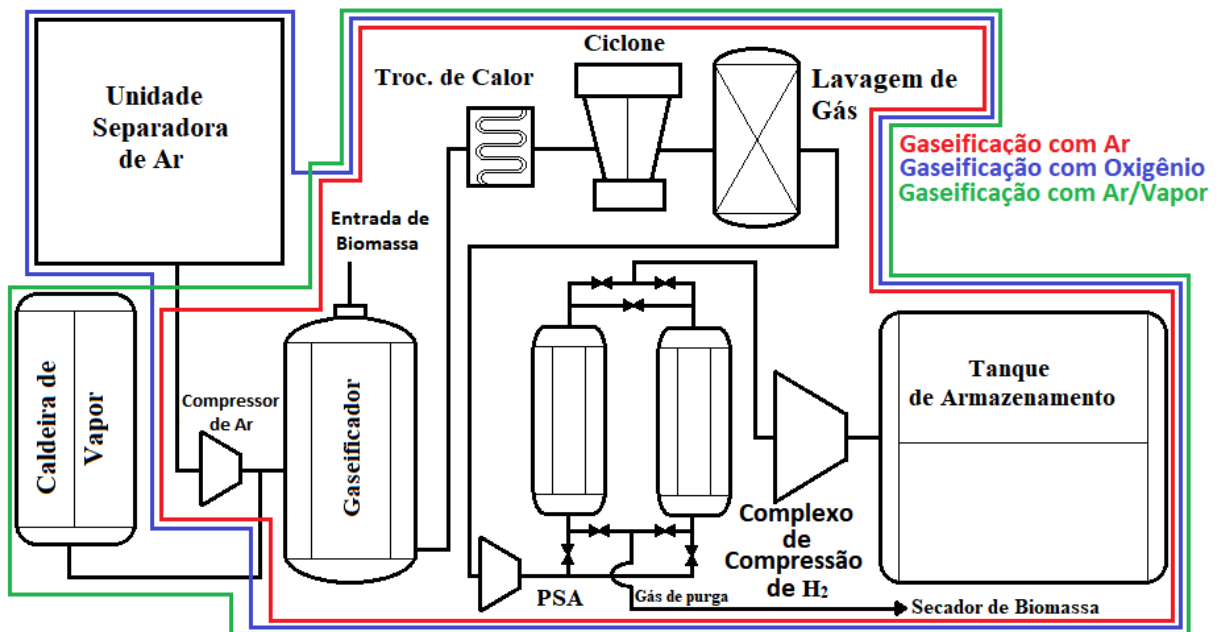
O gasto de energia de cada componente do processo, segundo Mobini, Sowlati e Sokhansanj (2013), é de 399 kWh/ton de pellets para o secador, 31,36 kWh/ton de pellets para cada moagem, 50,84 kWh/ton de pellets para o peletizador.

3.6 Esquema dos Componentes da Planta de Gaseificação

Neste estudo foram investigados dois esquemas distintos de planta. O primeiro esquema investigado se trata da gaseificação sem o aprimoramento dos gases (Figura 10). O processo ocorre da seguinte forma: após transportado até um ponto central da microrregião, o resíduo é descarregado e será pré-tratado para a gaseificação de forma que atinja a densidade e umidade necessária. A partir desse ponto, três formas de gaseificação serão analisadas. Na gaseificação com ar, não haverá uma unidade

separadora de ar nem caldeira para produção e vapor superaquecido. Nesse cenário, somente ar entrará como agente gaseificante junto à biomassa. O segundo cenário consiste na adição da unidade separadora de ar para a produção de oxigênio *in situ* e seu uso como agente gaseificante. Este caso também não contará com o soprador de ar e a caldeira de vapor. O último cenário é a gaseificação com ar e vapor como agentes gaseificantes exigindo, portanto, a caldeira para produção de vapor superaquecido, mas sem necessidade da unidade separadora de ar.

Figura 10 - 1º Esquema da planta de produção

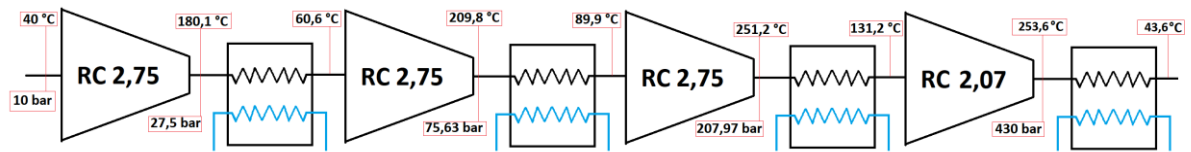


Fonte: Elaborado pelo Autor

A gaseificação acontece então com a entrada do agente gaseificante na condição de operação que maximiza a produção de hidrogênio e segue para um trocador de calor que irá resfriar os gases até cerca de 150 °C. Os gases passam em seguida por um ciclone para a retirada de material particulado grosseiro. O material particulado mais fino, assim como o alcatrão e outras impurezas, são filtrados na lavagem do gás. No PSA, o gás será desidratado e comprimido até as condições requeridas para a adsorção (pressão de 10 bar e temperatura de 50 °C). O hidrogênio é por fim separado do gás e armazenado em um tanque de armazenamento após ter sua pressão elevada até 430 bar pelo complexo de compressão. O complexo de compressão é composto por quatro compressores e quatro trocadores de calor em série. Scheepers et al. (2020) adotaram em seu estudo, para a compressão em série do hidrogênio, uma faixa de razão de compressão de 2,5 a 3. Dessa forma, para a compressão do hidrogênio de 10 bar até 430 bar, foram considerados três compressores com razão de compressão de 2,75 e um compressor final com razão de 2,07. A água de resfriamento em todos os quatro trocadores de calor entra com 200 kPa e 25 °C e sai sob pressão atmosférica e 120 °C. Considera-se uma queda de 120 °C na temperatura do hidrogênio ao

passar pelos trocadores de calor e de 210 no último trocador de calor. A Figura 11 mostra o esquema do complexo de compressão com os parâmetros considerados. O gás de purga do PSA é utilizado para a secagem dos resíduos de biomassa durante o pré-tratamento.

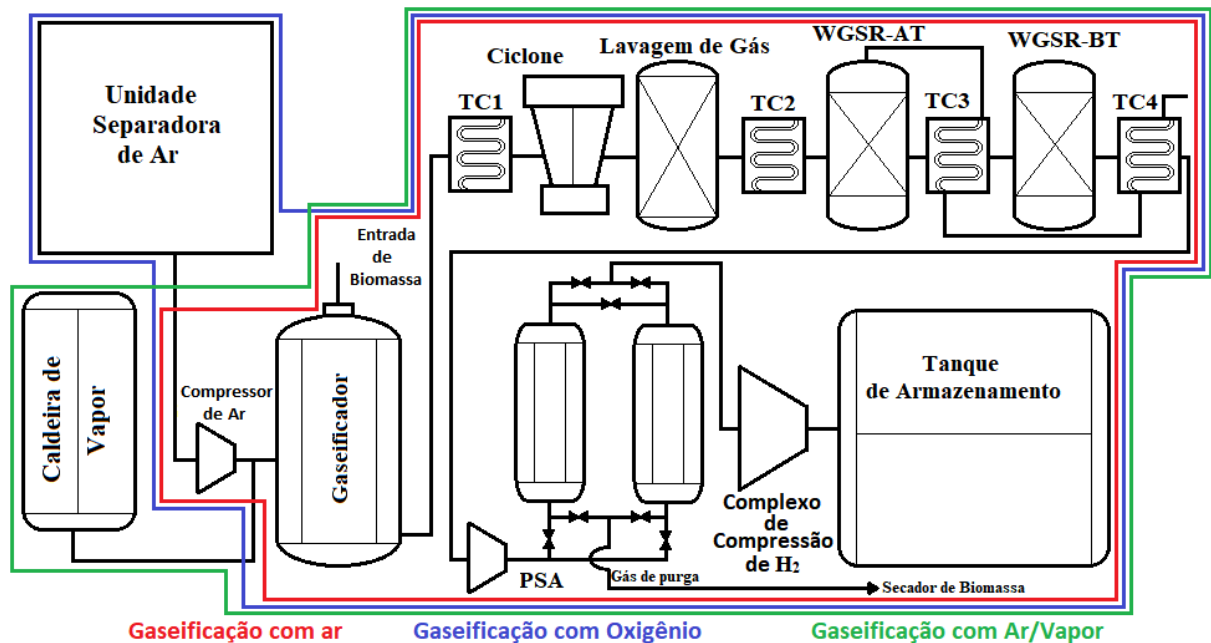
Figura 11 - Complexo de compressão de hidrogênio da gaseificação



RC: Razão de compressão. Fonte: Elaborado pelo Autor

O segundo esquema investigado considera a adição de reatores WGS de alta e baixa temperatura para a conversão do monóxido de carbono, através da adição de vapor de água, em hidrogênio como forma de aprimoramento do gás (Figura 12). O uso desses reatores requer a adição de mais três trocadores de calor. O esquema de funcionamento é semelhante ao anterior, sendo a diferença principal a redução consecutiva da temperatura do gás e a produção de vapor pelos trocadores de calor para atender as exigências dos reatores WGS.

Figura 12 - 2º Esquema da planta de produção



TC: Trocador de calor; WGSR-AT: Reator *water gas shift* de alta temperatura; WGSR-BT: Reator *water gas shift* de baixa temperatura. Fonte: Elaborado pelo Autor

3.7 Análise Econômica da Gaseificação

O potencial econômico da produção de hidrogênio para cada uma das microrregiões de Minas Gerais é investigado a seguir. A métrica de avaliação utilizada foi a de encontrar o preço mínimo do quilo de hidrogênio para que o investimento em uma planta de produção de hidrogênio por meio da gaseificação da biomassa se pagasse dentro do tempo de vida do projeto que também pode ser definido como o custo de produção do hidrogênio dado um tempo de vida do projeto. Para isso, é necessário, primeiramente, definir o sistema com todos os seus componentes. A partir disso, estimar os custos associados aos equipamentos, operação, manutenção, etc e, por fim, o fluxo de caixa para cada uma das 66 microrregiões mineiras.

3.7.1 Estimativa de Custo da Gaseificação

Os custos dos equipamentos foram estimados a partir de um custo de referência e a escala da estimativa é baseada em um parâmetro característico do equipamento. Além disso, o custo também foi ajustado de acordo com o índice de custos de plantas de engenharia química (CEPCI)(MIGNARD, 2014). O custo utilizado foi anualizado de 2022 levando em consideração que os dados mais recentes e utilizados neste estudo das culturas de biomassa são também desse ano.

$$C_E = C_R \left(\frac{S}{S_R} \right)^f \frac{CEPCI_{2022}}{CEPCI_{ano}} \quad (51)$$

Onde:

- C_E : é o custo estimado do equipamento para uma capacidade S ;
- C_R : é o custo de referência do equipamento para uma capacidade S_R ;
- CEPCI: índice de custos de plantas de engenharia química para um determinado período;
- f : parâmetro de ajuste da escala para estimativa de custo.

A Tabela 3 apresenta os dados de referência obtidos na literatura para a estimativa dos custos dos equipamentos.

Tabela 3 - Dados utilizados na estimativa de custos da gaseificação

Equipamento	Custo Ref (C _R) k\$	Capacidade Ref (S _R)	Base de S _R	Unid.	<i>f</i>	CEPCI _{ano}	Ref.
Gaseificador	137090	2464	Vazão de biomassa seca	ton/dia	0,67	556,8	[1]
Reator WGS	37527	1450	PCI do gás de síntese de entrada	MW	0,65	541,7	[2]
PSA	27121,2	17069	Vazão de entrada do gás	kmol/h	0,6	525,4	[3]
Soprador de Ar	223,1	1	Potência elétrica	MWe	0,67	499,6	[4]
Ciclone	355	52,720	Vazão do gás	kg/s	0,64	468,2	[5]
Pré Processamento da Biomassa	27221	2000	Vazão de biomassa seca	ton/dia	0,67	541,7	[6]
Manuseio das Cinzas	6571	9,7	Vazão de cinzas	kg/s	0,6	541,7	[7]
Compressor de H ₂	343,24	0,52	Potência elétrica	MWe	0,62*	575,4	[8]
Trocador de Calor	10514,8	193,398	Calor retirado do gás de síntese	MW	0,6	499,6	[9]
Lavagem de Gás	41710	37	Vazão do gás de síntese seco	kg/s	0,7	584,6	[10]
Tanque de Armazenamento	0,843	1	Massa de hidrogênio	kg/dia	0,7	525,4	[11]
Caldeira de Vapor	1187,66	1	Potência necessária para geração de vapor	MW	0,8	556,8	[12]
Unidade Separadora de Ar	46560	1000	Produção de O ₂ diária	ton/dia	0,9	584,6	[13]

[1]: Jiang, Y., & Bhattacharyya (2017); [2]: Yang et al. (2013); [3]: Szima et al. (2019); [4]: Pérez et al. (2021); [5]: Feedstock (2006); [6] Jiang, Y., & Bhattacharyya (2017); [7]: Manzolini, Macchi e Gazzani (2013); [8]: Apt et al. (2008); [9]: Pérez et al. (2021); [10]: Andersson e Lundgren (2014); [11]: Parks (2014); [12] Kumar, Sharma e Tewari (2015); [13]: Andersson e Lundgren (2014); *: Feedstock (2006)

Para a estimativa do custo de investimento total (CIT), foram utilizadas as hipóteses apresentadas na Tabela 4 (CORMOS, VATOPOULOS e TZIMAS, 2013):

Tabela 4 - Estimativa do custo total de investimento da gaseificação

Cálculo do CIT	Métodos
Custos dos Equipamentos	A partir da Equação 51
Custo instalado de utilitários e unidades externas (U)	25% da soma do custo dos equipamentos (Σ CCE)
Custo Instalado (CI)	$CI = \Sigma CCE + U$
Custo e contingência dos proprietários (C)	15% do CI
Compra de terrenos, licenciamento, topografia etc. (TLT)	5% do CI
Custo de Investimento Total (CIT)	$CIT = CI + C + TLT$

A estimativa dos custos de operação e manutenção foi feita a partir dos dados da Tabela 5. Os

valores foram ajustados com a inflação para o ano de 2022.

Tabela 5 - Estimativa dos custos O&M da gaseificação

Custos O&M		Unidade	Ref
Preço da Água de Resfriamento	0,0162	\$/ton	[1]
Preço do resíduo agrícola	18,00	\$/ton	[2]
Preço do resíduo florestal	16,00	\$/ton	[3]
Preço da eletricidade	81,09	\$/MWh	[4]
Mão de Obra	10% do custo de produção		[5]
Manutenção Variável	5% dos custos fixos		[6]
Impostos Locais	2% do CIT		[7]

[1][4][7]: Cormos, Vatopoulos e Tzimas (2013), [2][3]: Cervi et al., (2021), [5][6]: Salkuyeh, Saville e Maclean (2018),

Os gastos com transporte foram calculados por meio do raio econômico de transporte. A densidade dos resíduos de biomassa também foi levada em consideração e para alguns deles foi considerado o custo associado ao enfardamento anterior ao transporte.

As seções seguintes irão explicar mais detalhadamente os cálculos utilizados para a estimativa de alguns dos custos que necessitaram de fórmulas específicas para o cálculo da capacidade dos equipamentos.

3.7.2 Custo dos Compressores

Os compressores necessários na planta de gaseificação são: o compressor de ar, o compressor do gás de síntese do PSA e os compressores do complexo de compressão do hidrogênio. O parâmetro que permite escalar o custo é a potência elétrica de acionamento dos mesmos. A potência mecânica necessária pode ser calculada a partir da seguinte equação (PERRY, 2008):

$$\text{Pot}_{\text{mec}} = \frac{k \cdot Z \cdot R \cdot T_e}{M_{\text{gás}}(k-1)} \left[\left(\frac{P_s}{P_e} \right)^{(k-1)/k} - 1 \right] \dot{m} \quad (52)$$

Onde:

- k: coeficiente isentrópico do compressor;
- Z: fator de compressibilidade;
- R: constante universal dos gases (8,314 kJ kmol⁻¹ K⁻¹);
- T_e: temperatura de entrada (K);
- M_{gás}: massa molar do gás (kg kmol⁻¹);
- P_s: pressão de saída do compressor (kPa);

- P_e : pressão de entrada do compressor (kPa);
- \dot{m} : vazão mássica do gás (kg s^{-1}).

A potência elétrica de acionamento é calculada a partir das eficiências do compressor (η_c) e do motor elétrico (η_{mele}), utilizando a Equação 53.

$$\text{Pot}_{ele} = \frac{\text{Pot}_{mec}}{\eta_c \cdot \eta_{mele}} \quad (53)$$

3.7.3 Custo dos Trocadores de Calor

O resfriamento do gás proveniente da gaseificação é feito por um trocador de calor que utiliza água como fluido de resfriamento. O calor extraído do gás da gaseificação é calculado a partir das entalpias de entrada e saída de cada uma das espécies que compõem o gás de síntese, já que os estados termodinâmicos dos pontos são fixados, e a vazão mássica de cada uma das espécies é conhecida, conforme Equação 54.

$$\dot{Q}_g = \sum \dot{m}_{espécie} (h_{espécie.s} - h_{espécie.e}) \quad (54)$$

Para o cálculo da vazão de água necessária para o resfriamento é utilizado a equação da efetividade do trocador de calor.

$$\dot{Q}_g = \varepsilon \dot{m}_{ag} (h_s - h_e) \quad (55)$$

Onde:

- ε : efetividade do trocador de calor;
- \dot{m}_{ag} : vazão mássica de água;
- h_s : entalpia de saída da água;
- h_e : entalpia de entrada da água.

3.7.4 Custo de transporte

Esse estudo considera que em cada microrregião do estado haverá uma única planta de produção de hidrogênio por gaseificação formando um polo de produção unificado localizado aproximadamente no centroide geográfico da microrregião. Para se estimar a distância média de transporte dos resíduos

de biomassa até esse polo unificado, levando em consideração a variação única que cada microrregião tem, foi adotado um círculo de área equivalente à cada uma das microrregiões. O raio desse círculo é definido como o raio teórico ou raio correspondente:

$$R_T = \sqrt{\frac{A_m}{\pi}} \quad (56)$$

Onde A_m é a área da microrregião.

Levando em conta uma média estatística de distribuição dos pontos de coleta, foi adotado um raio médio correspondente a dois terços do raio teórico. No entanto, as estradas muito dificilmente irão seguir uma direção retilínea do centroide do círculo em direção a borda. Cada estrada segue um percurso que depende das características únicas do terreno e uma forma de contabilizar isso é através do fator de tortuosidade. Regiões altamente desenvolvidas e com percursos de grades retangulares, segundo Piñas et al (2019), possuem um fator de tortuosidade de 1,27 e regiões menos desenvolvidas possuem um fator de 3. Para este estudo, foi adotado um fator de 2,5. Dessa forma, o raio médio fica definido como:

$$R_M = \frac{2}{3} R_T \tau \quad (57)$$

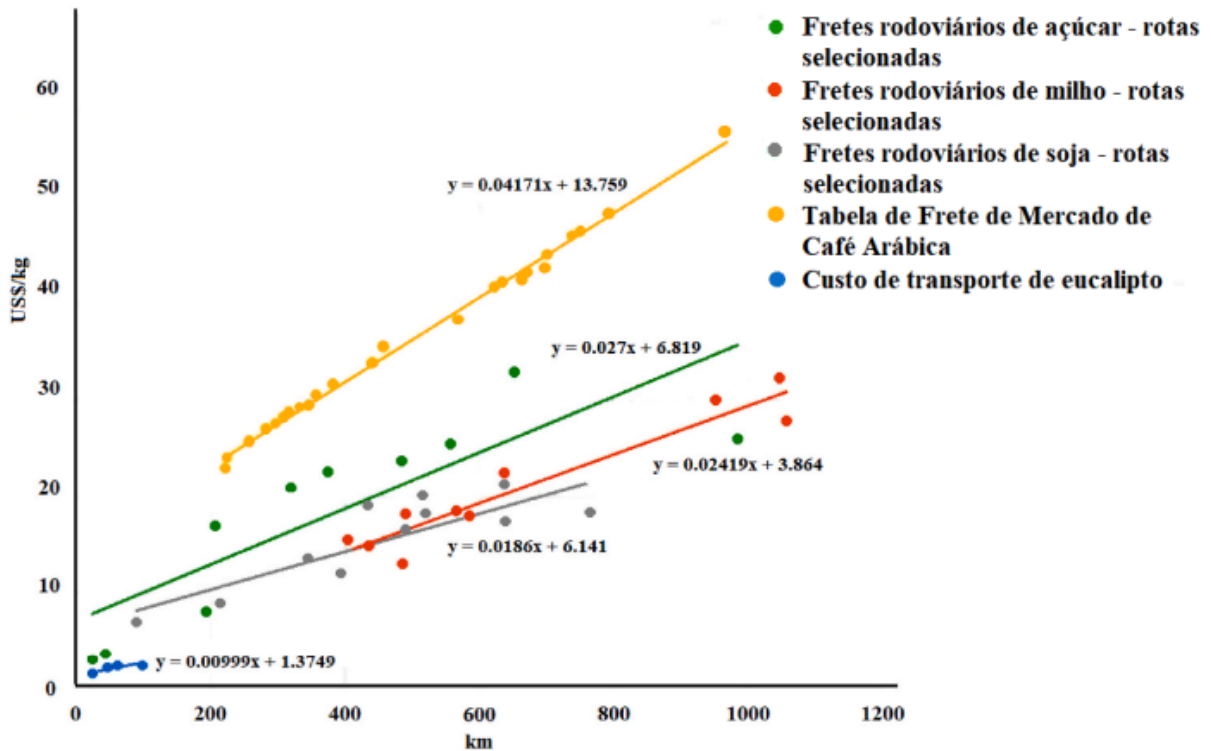
Onde τ é o fator de tortuosidade.

Quando se considera transporte, a distância é apenas um dos parâmetros que influencia no custo. O tipo do transporte, a densidade do resíduo, o preço do frete e o número de viagens necessárias também são fatores que determinam o custo.

Para este estudo, foi adotado o transporte rodoviário por caminhões de carga. O caminhão escolhido como referência para o transporte dos resíduos possui de dois a três eixos, com uma capacidade de 30 toneladas e dimensões da caçamba de 18 metros de comprimento, 3 de largura e 2,8 metros de altura.

O preço dos fretes foi estimado por meio de regressões lineares provindas da coleta de dados do frete de várias viagens através do Sistema de Informações de Fretes – SIFRECA vindo do Grupo de Pesquisa e Extensão em Logística Agroindustrial - ESALQ-LOG (Figura 13). Por não haver dados diretos de transporte dos resíduos, foram utilizados os dados das culturas que os originam. Para o cacau, foram utilizados como referência os custos de transporte do café por se tratar do custo mais elevado, como forma de não subestimar os resultados da análise. Além disso, a produção de casca de cacau é extremamente pequena em comparação com as outras culturas. O preço dos fretes, conforme mostrado na Figura 13, depende da distância da viagem e da quantidade de carga.

Figura 13 - Preço dos fretes por tonelada e distância percorrida



Fonte: Adaptado de ESALQ-LOG (2021)

Alguns dos resíduos possuem densidades muito baixas e tornam inviável seu transporte, como é o caso dos palhiços de cana de açúcar e milho (Tabela 6). Para esses resíduos, foi considerado o preço do enfardamento. Para o palhiço de cana, segundo Denadai (2018), o custo do enfardamento é de 44,47 US\$/ton e para o palhiço de milho, segundo Vadas e Digman (2013), o custo do enfardamento é de 17,00 US\$/ton. Esses valores de custo estão corrigidos para o ano de 2022, mediante aplicação dos índices de inflação no período.

Tabela 6 - Densidade dos resíduos de biomassa

Biomassa	Densidade (kg/m ³)	Referência
Bagaço de cana	120	(DA SILVA E DOS SANTOS MORAIS, 2008)
Palhiço de cana	170*	(DENADAI, 2018)
Borra de café gasta	381	(KIBRET et al., 2021)
Espiga de milho	282,38	(ZHANG et al., 2012)
Palhiço de milho	185*	(KEENE et al., 2012)
Casca de soja	172	(ANDERSON; MERRILL e KLOPFENSTEIN, 1988)
Casca de cacau	224	(JUNIOR et al., 2019)
Madeira de Eucalipto	490	(OLIVEIRA, HELLMEISTER e TOMAZELLO FILHO, 2005)
Casca de Eucalipto	455	(MIRANDA e PEREIRA, 2015)

* Densidade pós enfardamento

Foi considerado um carregamento máximo de 30 ton e isso significa que resíduos com uma densidade superior a $198,41 \text{ kg m}^{-3}$ alcançam a capacidade máxima mesmo não preenchendo todo o volume da caçamba e, dessa forma, requerendo uma nova viagem. As viagens foram calculadas pela relação entre a quantidade mássica gerada de resíduos (levando em consideração o fator de recuperação η) pela capacidade de carregamento do caminhão com o resultado arredondado para cima.

Portanto o custo de transporte é dado pela Equação 58.

$$C_T = P_f \cdot \text{Cap} \cdot \text{Viag} \quad (58)$$

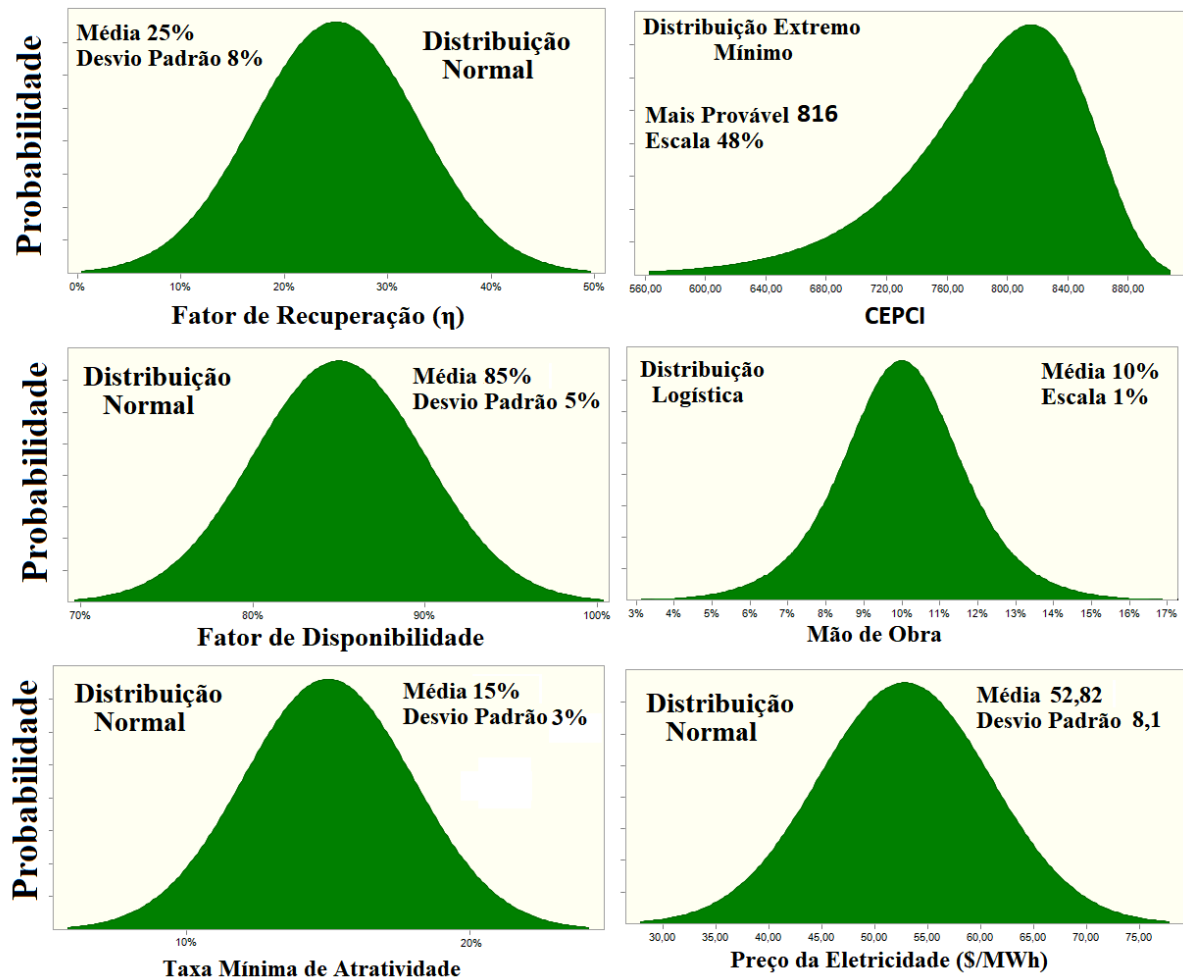
Onde:

- P_f : preço dos fretes ($\text{US\$ ton}^{-1} \text{ km}^{-1}$);
- Cap : capacidade (depende da densidade do resíduo, sendo máximo 30 toneladas);
- Viag : números de viagens necessárias.

3.8 Simulação de Monte Carlo para a Gaseificação

Para as três condições de agentes gaseificantes e considerando aprimoramento dos gases de síntese, foram escolhidos como parâmetro de entrada da simulação de Monte Carlo os dados e distribuições probabilísticas pressupostas (Figura 14 e Figura 15). Todos os valores bases foram calculados e definidos anteriormente às simulações.

Figura 14 - Distribuições probabilísticas pressupostas das variáveis de entrada – Parte 1



Fonte: Elaborada pelo autor

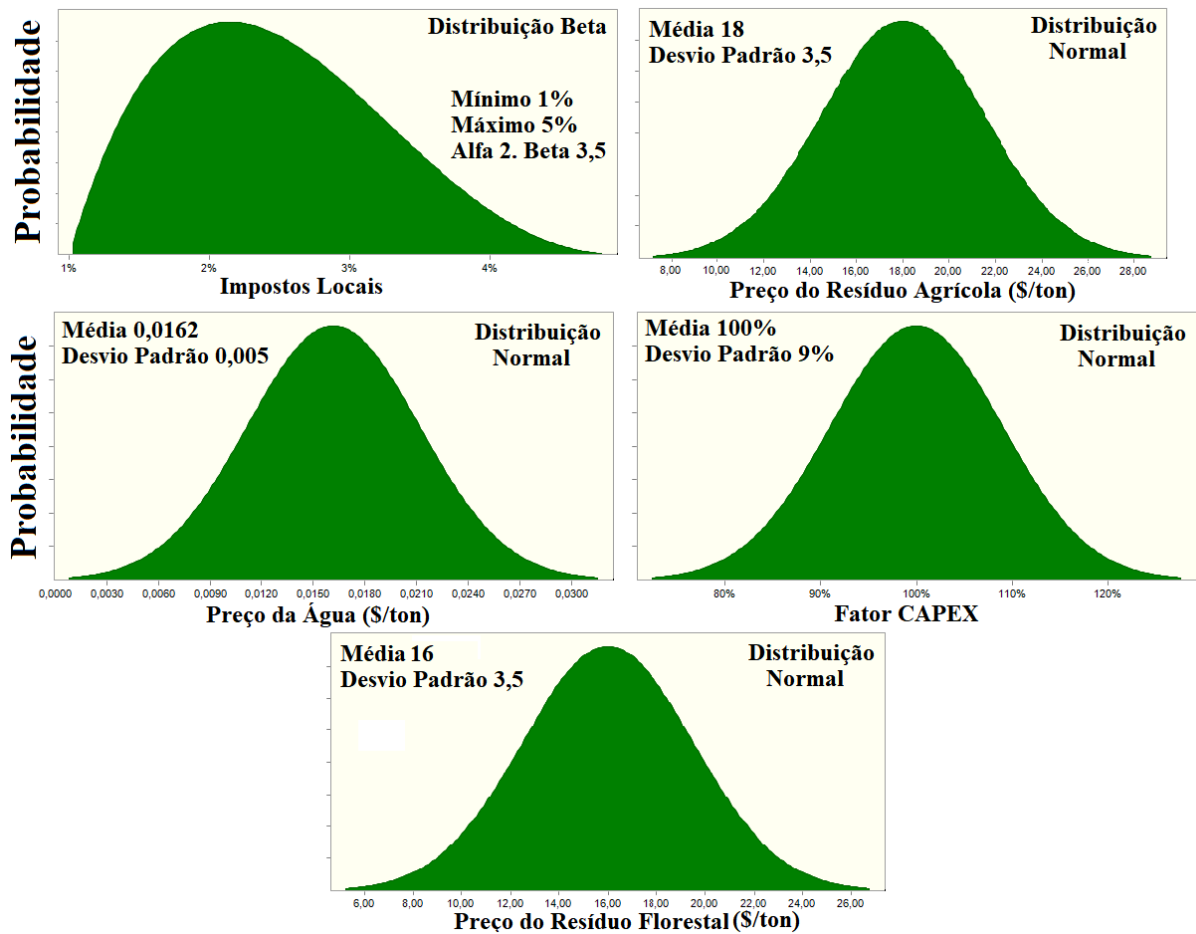
A seguir é explicado as escolhas das curvas de cada parâmetro:

- Fator de Recuperação (η): É a porcentagem de recuperação de resíduos de biomassa a ser usado para a produção de H_2 por gaseificação. Foi adotado uma faixa que vai desde próximo de zero (Cenário extremamente pessimista) até 50% (Cenário otimista). A média de 25% fica próxima do caso base e distribuição normal relega um caráter homogêneo às chances de aumento ou diminuição da oferta de resíduos;
- CEPCI: É o índice de custo de plantas químicas que atualiza o custo capital de uma data passada para uma posterior, ou seja, considera a possibilidade de inflação e deflação. Embora não seja um valor que possa ser controlado diretamente, o peso que a sua variação tem na viabilidade econômica merece ser investigado dado a necessidade de conhecimento do mercado para a análise de viabilidade de investimento em novos empreendimentos. O ponto mais provável foi o valor base adotado (ano 2022) e a consideração de mais casos e maior probabilidade de queda e menos casos e menor probabilidade de aumento.
- Taxa Mínima de Atratividade (TMA): É a mínima taxa que um investidor espera de retorno de

investimento em um projeto. Foi adotado uma distribuição normal com a média no ponto utilizado no caso base (15%). O desvio padrão de 3% nessa distribuição permite uma faixa que vai de aproximadamente 6% a 24% para casos os casos extremos mínimo e máximo;

- Fator de Disponibilidade: Porcentagem de tempo que a planta irá operar ao longo do ano. O ponto de maior probabilidade da distribuição acontece em 85%, caso base. Portanto, para uma boa representação da distribuição desse parâmetro levando em consideração situações de melhor e pior gestão logísticas que possam permitir mais ou menos tempo de operação da planta, foi utilizado uma distribuição normal.
- Mão de Obra: No caso base, é calculado como 10% do custo de produção. Uma curva normal para esse caso iria tender a uma distribuição muito larga dos valores. Assim, foi adotado a chamada de distribuição logística, que corresponde também a uma distribuição simétrica, porém, mais fina na média.
- Preço da eletricidade: É outra variável que foge do controle do projeto, mas também merece ser investigada. Ao longo dos anos, haverá variações do custo associado à eletricidade que passa por tendências de diminuir e aumentar por uma série de fatores. Foi adotado uma distribuição normal que cria uma faixa de pouco mais de 20\$ MWh⁻¹ para mais e para menos do custo base utilizado.

Figura 15 - Distribuições probabilísticas pressupostas das variáveis de entrada – Parte 2



Fonte: Elaborada pelo autor

- Impostos Locais: Distribuição beta. Mínimo de 1%, máximo de 5%, alfa de 2 e beta de 3,5. Os impostos locais representam uma porcentagem do investimento total da planta. O caso base considera um valor de 2% e a curva foi construída de modo a criar uma variação de metade desse valor até um aumento de mais de 100% desses impostos. Também se trata de uma variável que não pode ser controlada, mas que vale ser investigada com respeito ao seu impacto na viabilidade econômica e eventuais necessidades de criação de planos governamentais de incentivos à produção de H₂ verde.
- Preço dos resíduos agrícolas e florestais: Com a média do caso base de 18 \$/ton e 16 \$/ton para o resíduo agrícola e florestal, respectivamente, as distribuições normais foram desenvolvidas de modo a gerar uma variação de preço de cerca de 7,5 a 28,5 \$/ton e 5,5 a 26,5 \$/ton para os resíduos agrícolas e florestais, respectivamente. A distribuição normal para ambos os casos busca encapsular as variações de preços que podem vir a acontecer dados as diversas variáveis econômicas que possam vir a influenciar o preço;
- Preço da Água: Também foi considerado uma variação de preço da água consumida na planta. A

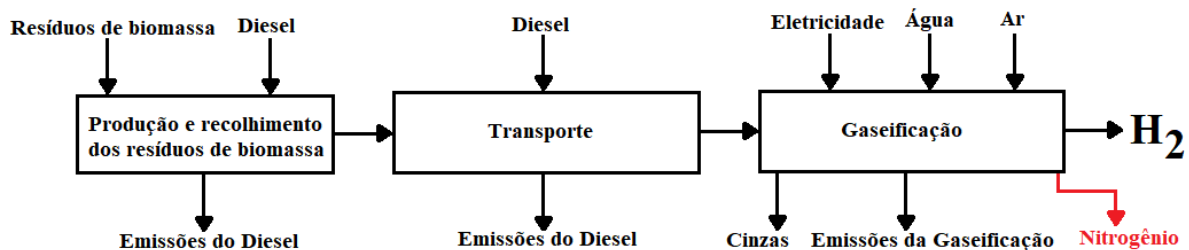
distribuição normal abrange a faixa de preço de 0,007 a 0,0315 \$/ton. Uma variação de cerca de 100% do preço considerando as variações que o preço da água pode passar com os ciclos de chuvas e outros fatores econômicos;

- Fator CAPEX: É o custo com as despesas de capitais ou investimentos em bens capitais. Esse fator é uma porcentagem que multiplica o CAPEX para que possa ser avaliado o peso que o investimento nos bens capitais tem sobre a viabilidade econômica. A variação da distribuição normal abrange cerca de 28% de diminuição e aumento do CAPEX.

3.9 Análise de ciclo de vida para a gaseificação

A análise de ciclo de vida (ACV) para a produção de hidrogênio por meio da gaseificação dos resíduos de biomassa foi dividida em três etapas, são elas: a etapa que envolve a produção dos resíduos e o processo de recolhimento dos mesmos, a etapa que envolve o transporte dos resíduos e, por fim, a etapa que envolve a gaseificação em si. A Figura 16 mostra as entradas e saídas consideradas na análise. A saída de nitrogênio é exclusiva para a gaseificação com oxigênio devido a adição da unidade separadora de ar.

Figura 16 - Esquema da análise de ciclo de vida empregada no processo de gaseificação para produção de H₂



Fonte: Elaborada pelo autor

A primeira etapa começa com a consideração do enfardamento, necessário para o transporte dos resíduos de baixa densidade. No caso, o enfardamento foi considerado para as palhas de cana e de milho conforme já descrito na seção de custos de transporte. O processo de recolhimento considerado engloba as etapas de aleiramento dos palhiços no solo, seguido pelo enfardamento em si e, por fim, o recolhimento e empilhamento dos fardos. Os dados de consumo de diesel para cada uma dessas etapas são apresentados na Tabela 7 (DENADAI, 2018).

Tabela 7 - Consumo de diesel para as etapas de recolhimento da palhada

Etapas	Trator	Implemento	Consumo (l/h)	Capacidade de campo (ha/h)	Consumo por Área (l/ha)
Aleiramento	New Holland TL75	Enleirador Massey Ferguson 5130	7,5	9,5	0,7895
Enfardamento convencional	New Holland T7-245	Enfardadora Challenger 2270	21,3	5,6	3,8036
Recolhimento dos fardos e empilhamento	New Holland T7-245	Carreta acumuladora fardos New Holland	12,7	7,5	1,6933

Fonte: Denadai (2018)

As emissões dos tratores durante as etapas do recolhimento dos palhiços foram calculados com base em seus fatores de emissão. A emissão de CO₂ da queima do diesel é, segundo o Instituto de Energia e Meio Ambiente – IEMA (2011), 2,671 kg/litro de diesel. A emissão dos outros gases provenientes da queima é dada por:

$$E_{\text{espécie}} = FE_{\text{espécie}} \cdot Pot_{\text{trator}} \cdot TO \cdot FC \quad (59)$$

Onde:

- FE: fator de emissão da espécie (g hp⁻¹ h⁻¹)
- Pot_{trator}: potência do trator (hp);
- TO: tempo de operação (h);
- FC: fator de carga.

O trator utilizado como referência tem 150 hp de potência e possui os seguintes fatores de emissão (US ARMY CORPS OF ENGINEERS, 2016):

- Hidrocarbonetos (HC): 0,16 g hp⁻¹ h⁻¹;
- Monóxido de carbono (CO): 0,65 g hp⁻¹ h⁻¹;
- Óxidos de nitrogênio (NOx): 1,49 g hp⁻¹ h⁻¹;
- Material particulado (MP): 0,15 g hp⁻¹ h⁻¹.

Em seguida, vem a etapa de transporte. Foram considerados os fatores de emissão da fase P7 da resolução CONAMA nº 403, para veículos pesados, que introduziu uma demanda por sistemas de controle de emissão pós-combustão seja por catalisadores de redução de NOx e/ou filtros de material particulado (IEMA, 2011):

- Hidrocarbonetos não metano (NMHC): 0,76 g hp⁻¹ h⁻¹;
- Monóxido de carbono (CO): 3,95 g hp⁻¹ h⁻¹;
- Óxidos de nitrogênio (NOx): 8,57 g hp⁻¹ h⁻¹;

- Material particulado (MP): $0,086 \text{ g hp}^{-1} \text{ h}^{-1}$.

Na etapa da gaseificação, quanto ao gasto de água, foram considerados para a análise a desmineralização por troca de íons e separação por membranas, sendo ambos métodos utilizados em plantas termoquímicas. A Tabela 8 mostra o aproveitamento da água desmineralizada e energia necessária de ambos os processos (EWT WATER TECHNOLOGY, 2018):

Tabela 8 - Gastos de água e energia dos métodos de desmineralização considerados

	Troca de Íons	Separação por membrana
Água Bruta ($\text{m}^3_{\text{bruta}}/\text{m}^3_{\text{desmineralizada}}$)	1,055	1,29
Energia Elétrica (kWh/ m^3)	0,2	1,5

Fonte: EWT Water Technology (2018)

A perda de água durante o processo de desmineralização é significativamente menor na troca de íons do que na separação de membranas e o gasto de energia elétrica também é muito inferior. Desse modo, para essa análise, o método escolhido foi o de troca de íons. Mas de qualquer maneira, em comparação aos demais consumos elétricos da planta, os gastos elétricos de ambos os métodos são pouco significativos.

Os consumos elétricos da análise compreendem os consumos dos compressores, dos componentes do pré-tratamento e da desmineralização da água. E o gás de purga do PSA excedente, após ser queimado no secador do pré-tratamento, passa por *flaring*. O fator de emissão de NOx da queima do gás de purga do PSA utilizado foi de 23,6 ppm (DION et al., 2013). E a eficiência de queima total para secador mais *flaring* considerado foi de 98% (SHAW et al., 2023).

A análise de ciclo de vida foi realizada através do software Simapro. Foi utilizado o método IPCC 2021 GWP100 que avalia o impacto ambiental por meio da métrica de CO₂ equivalente. Para os dados de entrada do diesel foi utilizada a opção “*Diesel {BR} | market for diesel | APOS, S*” devido a necessidade de uma representação média do mercado do diesel provindo de diferentes fontes de produção disponível no banco de dados do Simapro. As subopções desse banco de dados para o diesel foi o APOS (*Allocation at the Point of Substitution*) por ser uma abordagem que é tipicamente utilizada em análises de economia circular. E para a eletricidade, foi utilizado o inventário correspondente as condições de produção elétrica de Minas Gerais: *Electricity, high voltage {BR-South-eastern grid} | market for electricity, high voltage | APOS, S*. A unidade funcional é a tonelada de hidrogênio produzido anualmente.

3.10 Modelo do eletrolisador de membrana de troca de prótons (PEM)

O modelamento da pilha de células eletrolíticas permite a definição da tensão elétrica a ser aplicada, sob diferentes condições de temperatura e pressão, como função da densidade de corrente. Com essa definição, a curva de polarização da célula ou pilha de células pode ser construída possibilitando a análise e ajuste dos pontos de operação visando o aumento da eficiência. A curva de polarização também é utilizada na determinação da potência necessária na pilha de células eletrolíticas dado o ponto de operação já fixado.

A lei de Faraday da eletrólise define que a produção de hidrogênio é diretamente proporcional a quantidade de carga elétrica transferida aos eletrodos. Desse modo, a taxa de produção de hidrogênio, oxigênio ou o consumo de água de uma única célula eletrolítica pode ser definida como (TIJANI, KAMARUDIN e MAZLAN, 2018):

$$\dot{N}_{\text{cel}} = \eta_F \frac{i_d A_{\text{cel}}}{zF} \left(\frac{\text{mol}}{\text{s}} \right) \quad (60)$$

Onde:

- η_F : eficiência de Faraday;
- i_d : densidade de corrente da célula (A cm^{-2});
- A_{cel} : área ativa da célula ou área da membrana onde acontece a troca de prótons;
- z : número de mols de elétrons transferidos na reação (para o hidrogênio produzido, $z = 2$; para água consumida, $z = 2/1,25$; para o oxigênio produzido, $z = 4$);
- F : constante de Faraday ($9,6485 \times 10^4 \text{ C mol}^{-1}$).

A densidade de corrente é a relação entre a corrente aplicada sobre a área ativa da membrana, conforme apresentado na Equação 61:

$$i_d = \frac{I}{A_{\text{cel}}} \quad (61)$$

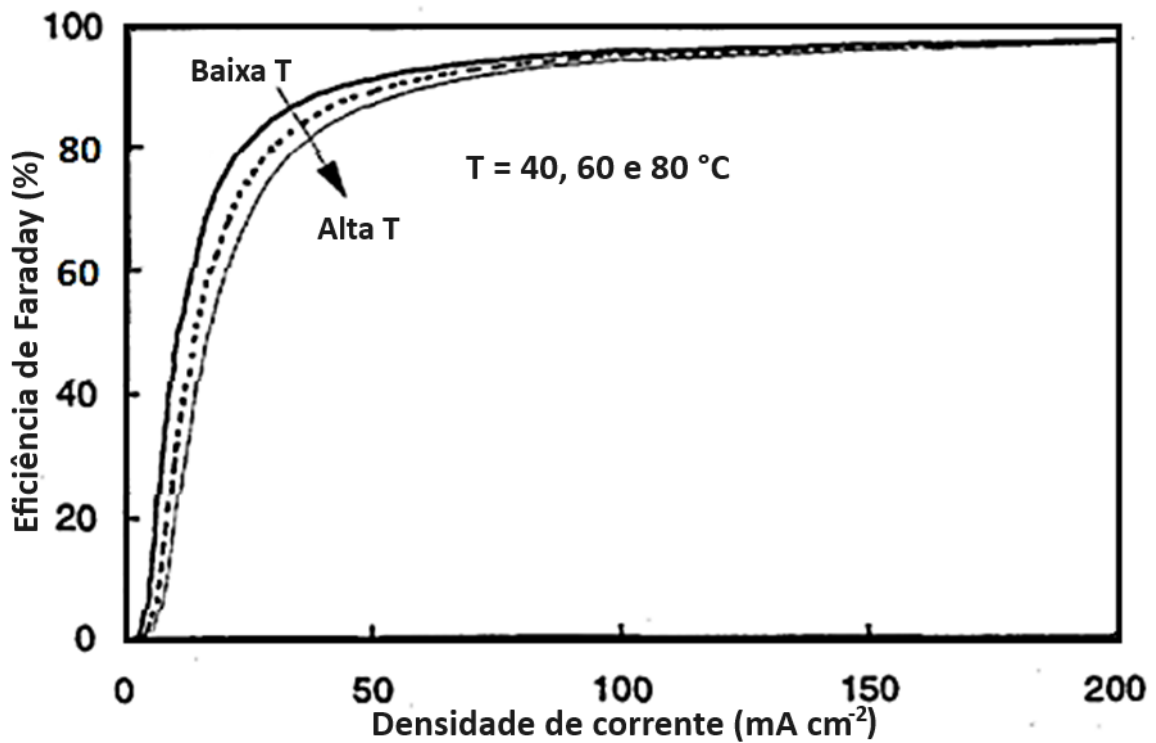
A produção total de hidrogênio é dada pela multiplicação da produção da célula pelo número de células (nc), conforme apresentado na Equação 62:

$$\dot{N}_{\text{totalH}_2} = \dot{N}_{\text{celH}_2} nc \quad (62)$$

Modelos de eletrolisadores PEM usualmente consideram a eficiência de Faraday sendo 100% ou muito próximo disso, pois, como pode ser observado na Figura 17, a queda significativa dessa eficiência

acontece sob faixas de densidade de corrente baixas e eletrolisadores PEM comerciais operam entre faixas de densidade de corrente de 1 a 3 A/cm². Portanto, somente para os eletrolisadores alcalinos a consideração do comportamento dessa eficiência é significativa (PASTURE e DE JAEGER, 2022). Para o modelo utilizado neste trabalho, foi adotado uma eficiência Faraday de 98% (BUTTLER e SPLIETHOFF, 2018).

Figura 17 - Comportamento da eficiência de Faraday pela densidade de corrente para diferentes temperaturas



Fonte: Adaptado de Pasture e De Jaeger (2022)

A tensão de operação da célula eletrolítica pode ser calculada a partir da Equação 63.

$$V_{\text{cel}} = V_{\text{CA}} + V_{\text{Ohm}} + V_{\text{Act}} + V_{\text{Con}} \quad (63)$$

Onde:

- V_{CA} : tensão circuito aberto ou tensão termoneutra (V);
- V_{Ohm} : sobretensão ôhmica (V);
- V_{act} : sobretensão de ativação (V);
- V_{Con} : sobretensão de concentração (V).

A tensão de circuito aberto pode ser calculada a partir da equação de Nernst e representa a

diferença de potencial entre os eletrodos quando não há corrente fluindo no circuito, ou seja, em condições de equilíbrio. Esse valor representa a força eletromotriz intrínseca da célula e é determinado pelas propriedades termodinâmicas dos materiais envolvidos.

$$V_{CA} = V_{rev} + \frac{RT_{ele}}{2F} \ln \left[P_{H_2} \frac{\sqrt{P_{O_2}}}{P_{H_2O}} \right] \quad (64)$$

Onde:

- R: constante universal dos gases ($\text{kJ kmol}^{-1} \text{K}^{-1}$);
- T_{ele} : temperatura do eletrolisador (K);
- V_{rev} : tensão reversível da célula (V);
- P_{H_2} , P_{O_2} e P_{H_2O} : pressões parciais dos gases hidrogênio, oxigênio e vapor de água (kPa).

As pressões parciais dos gases podem ser calculadas a partir da lei de Dalton que estabelece que a pressão total de uma mistura de gases é igual a soma das pressões parciais dos gases que compõem a mistura. Assim:

$$P_{O_2} = P_{an} - P_{H_2O} \quad (65)$$

$$P_{H_2} = P_{ca} - P_{H_2O} \quad (66)$$

P_{H_2O} é a pressão de saturação da água na temperatura de trabalho do eletrolisador. P_{an} e P_{ca} são as pressões no anodo e catodo.

A tensão reversível da célula é 1,299 V nas condições normais de temperatura e pressão. Fora dessas condições, torna-se dependente da temperatura e pode ser calculada a partir da seguinte expressão (HARRISON et al., 2006):

$$V_{rev} = 1,229 - 0,9 \times 10^{-3} (T_{ele} - 298) \quad (67)$$

A sobretensão ôhmica acontece devido as resistências dos eletrodos e condutores metálicos, sendo, portanto, causada primariamente pela tensão através da membrana onde a condutividade dos eletrodos é significativamente maior. Pode ser calculada através da Equação 68:

$$V_{Ohm} = \frac{\Phi_m i_d}{\sigma_m} \quad (68)$$

Onde:

- ϕ_m : espessura da membrana (cm);
- σ_m : condutividade da membrana ($S\ cm^{-1}$).

A condutividade da membrana pode, por sua vez, ser expressa como (RUUSKANEN et al., 2017)):

$$\sigma_m = (0,005139\lambda - 0,00326)\exp\left[1268\left(\frac{1}{303} - \frac{1}{T_{ele}}\right)\right] \quad (69)$$

Onde λ é o conteúdo de água da membrana que pode ser calculado, para valores acima de 14 (região na qual a correlação obtida pelos autores se mantém fiel aos dados experimentais empíricos), como sendo (LI et al., 2009):

$$\lambda = \frac{-2,89556 + 0,016T_{ele} + 1,625}{0,1875} \quad (70)$$

A sobretensão de ativação é a representação do comportamento eletroquímico e descreve como a cinética da transferência de cargas na superfície do eletrodo acontece. Essa sobretensão é calculada através da equação de Butler-Volmer para o anodo e catodo (YIGIT E SELAMET, 2016):

$$V_{Act} = V_{Actan} + V_{Actca} \quad (71)$$

$$V_{Actan} = \frac{RT_{ele}}{\alpha_{an}F} \operatorname{arcsenh}\left(\frac{i_d}{2i_{oan}}\right) \quad (72)$$

$$V_{Actca} = \frac{RT_{ele}}{\alpha_{ca}F} \operatorname{arcsenh}\left(\frac{i_d}{2i_{oca}}\right) \quad (73)$$

Onde:

- α_{an} : coeficiente de transferência de carga (CTC) do anodo;
- α_{ca} : coeficiente de transferência de carga (CTC) do catodo;
- i_{oan} : densidade de corrente trocada do anodo ($A\ cm^{-2}$);
- i_{oca} : densidade de corrente trocada do catodo ($A\ cm^{-2}$).

No que tange a compreensão do comportamento do desempenho de um eletrolisador, o coeficiente de transferência de carga (CTC) é um dos parâmetros mais importantes. Esse parâmetro

reflete a proporção da energia potencial que afeta a velocidade da reação (TIJANI, KAMARUDIN E MAZLAN, 2018). Junto ao CTC, a densidade de corrente trocada também afeta fortemente o comportamento eletroquímico da eletrólise e se trata da densidade de corrente no anodo e catodo quando as reações diretas e reversas são iguais (XING, XUAN E DAS, 2023).

Não existe um consenso absoluto na literatura quanto aos valores de CTC e densidade de carga trocada no catodo e anodo. A maioria dos autores tende a considerar que o CTC não varia com a temperatura, enquanto outros definiram relações para calcular o CTC em função da temperatura, como é o caso de Ruuskanen et al. (2017). Quanto à influência da pressão, Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) verificaram não haver diferença significativa de mudança no CTC em ambos eletrodos, tanto no caso de pressão simétrica quanto assimétrica. A literatura tende em concordar que a densidade de corrente trocada do anodo é significativamente menor que a do catodo e a maioria dos autores adota o CTC do catodo como sendo 0,5. Na Tabela 9 são apresentados alguns dos valores utilizados para esses dois parâmetros na literatura:

Tabela 9 - Valores de densidade de corrente trocada e coeficiente de transferência de carga da literatura

Referência	i_{oan} (A/cm ²)	i_{oca} (A/cm ²)	α_{an}	α_{ca}
Choi et al. (2004)	$1,0 \times 10^{-7}$	$1,0 \times 10^{-3}$	0,5	0,5
Harrison et al. (2005)	$1,0 \times 10^{-8}$	$9,0 \times 10^{-2}$	0,5	0,5
Ni, Leung e Leung (2008)	$1,0 \times 10^{-9}$	$1,0 \times 10^{-3}$	0,5	0,5
Marangio, Santarelli e Cali, (2009)	De 10^{-13} a 10^{-6a}	De 10^{-13} a 10^{-6a}	2	0,5
Hwang et al. (2009)	$0,5 \times 10^{-3}$	$0,4 \times 10^{-6}$	0,5	0,25
Agbli et al. (2011)	$1,548 \times 10^{-3}$	$3,539 \times 10^{-2}$	0,7178	0,6935
Abdin, Webb e Gray (2015)	$1,0 \times 10^{-7}$	$1,0 \times 10^{-1}$	0,8	0,25
Chandesris et al. (2015)	-	-	0,65	0,51
Yigit e Selamet (2016)	$2,0 \times 10^{-7}$	$2,0 \times 10^{-3}$	2	0,5
Ruuskanen et al. (2017)	$0,5 \times 10^{-3b}$	$0,391^b$	$0,433^b$	0,5
Kang et al. (2017)	$6,0 \times 10^{-10}$	$3,4 \times 10^{-1}$	2	0,5
Tijani et al. (2018)	$1,0 \times 10^{-9}$	$1,0 \times 10^{-3}$	2^c e $0,949^b$	$0,5^c$ e $0,237^b$
Toghyani et al. (2018)	-	-	2	0,5

a: Faixas que melhor encaixaram resultados do modelo com resultados experimentais

b: Utilizaram CTC dependente da temperatura para resultados. Os valores apresentados na tabela são para temperatura de 60 °C

c: Validaram o modelo com esses valores

Por fim, a literatura considera que a sobretensão de concentração só é significativa sob densidades de corrente muito mais altas do que as observadas em eletrolisadores PEM comerciais (GARCÍA-VALVERDE, ESPINOS e URBINA, 2012) (YIGIT e SELAMET, 2016). Dessa forma, a sobretensão de concentração foi considerada desprezível nesse modelo.

A tensão a ser aplicada a pilha de células é dada pela simples multiplicação da tensão da célula pelo número de células:

$$V_{\text{pilha}} = V_{\text{cel}} n c \quad (74)$$

A potência a ser aplicada na pilha de células é dada por:

$$\text{Pot}_{\text{pilha}} = V_{\text{pilha}} I \quad (75)$$

A potência total requerida de todo o processo de eletrólise é a soma da potência a ser aplicada na pilha com a dos componentes auxiliares do processo. Esses componentes são comumente referidos na literatura como balanço da planta (BOP):

$$\text{Pot}_{\text{total}} = \text{Pot}_{\text{pilha}} + \text{Pot}_{\text{BOP}} \quad (76)$$

A mínima tensão necessária que deve ser aplicada à uma célula eletrolítica PEM, sob condições padrão de temperatura e pressão, é chamada de tensão termoneutra e é calculada da seguinte forma (SELAMET et al., 2012):

$$V_{\text{tn}} = \frac{\Delta H}{2 \times F} = \frac{286 \text{ kJ/mol}}{2 \times 96485 \text{ C/mol}} = 1,481 \text{ V} \quad (77)$$

Onde ΔH é a entalpia necessária para a dissociação da molécula de água em gás hidrogênio e oxigênio, na condição de referência (T_0 ; P_0).

E a eficiência da célula eletrolítica é dada por:

$$\eta_{\text{cel}} = \frac{V_{\text{tn}}}{V_{\text{cel}}} \quad (78)$$

A eficiência total do processo de eletrólise é dada pela relação da energia contida no hidrogênio pela energia utilizada para a geração desse hidrogênio. Essa eficiência pode ser apresentada em termos de PCS e PCI, conforme as Equações 79 e 80, respectivamente:

$$\eta_{\text{PCS}} = \frac{\text{PCS}_{\text{H}_2} \dot{m}_{\text{H}_2, \text{total}}}{\text{Pot}_{\text{total}}} = 141,86 \frac{\dot{m}_{\text{H}_2, \text{total}}}{\text{Pot}_{\text{total}}} \quad (79)$$

$$\eta_{\text{PCI}} = \frac{\text{PCI}_{\text{H}_2} \dot{m}_{\text{H}_2.\text{total}}}{\text{Pot}_{\text{total}}} = 120,1 \frac{\dot{m}_{\text{H}_2.\text{total}}}{\text{Pot}_{\text{total}}} \quad (80)$$

Onde:

- PCS e PCI: poder calorífico superior e inferior (MJ/kg);
- $\dot{m}_{\text{H}_2.\text{total}}$: vazão mássica de hidrogênio produzido (kg/s);
- $\text{Pot}_{\text{total}}$: potência total requerida (MW).

O volume necessário para o tanque de armazenamento de hidrogênio depende do período de permanência do hidrogênio em armazenamento entre os períodos de coleta. Pode ser calculado a partir da seguinte equação:

$$\text{Vol}_{\text{tanque}} = Z \dot{N}_{\text{totalH}_2} R \frac{T_{\text{tanque}}}{P_{\text{tanque}}} t \quad (81)$$

Onde;

- Z: fator de compressibilidade do hidrogênio;
- T_{tanque} : temperatura do tanque (K);
- P_{tanque} : pressão do tanque (Pa);
- t: tempo de operação até coleta do hidrogênio dos tanques de armazenamento (s).

3.11 Definição de um eletrolisador de referência e ponto de operação típicos

Para este estudo, foi considerado o uso de eletrolisadores comerciais para que as análises posteriores sejam fundamentadas em resultados realistas quanto a viabilidade do seu uso. Para tal, foi escolhido um eletrolisador comercial típico de 1,25 MW de potência nominal da Bosch (Figura 18). A pilha de células desse eletrolisador pesa cerca de 2850 kg, sendo bastante compacto, com dimensões de 80x97x150 cm. Sob carga nominal produz 23 kg/h de hidrogênio, operando com pressões acima de 30 bar no catodo.

Figura 18 - Pilha de células do eletrolisador de 1,25 MW da Bosch



Fonte: Adaptado de Robert Bosch GmbH (2024)

Como já mencionado anteriormente, a massa específica do hidrogênio é muito baixa, exigindo, portanto, que seja pressurizado. Pilhas de células eletrolíticas são capazes de produzir hidrogênio pressurizado no catodo até certa pressão. Isso reduz custos relacionados com a adição de compressão mecânica. E quando existe um gradiente de pressão entre catodo e anodo, o que geralmente é o caso, em que o catodo opera sob pressão elevada e o anodo opera em pressões muitas das vezes próximas da pressão ambiente, outro efeito favorável pode ser observado. Há uma diminuição significativa do transporte de água devido ao arrasto eletro-osmótico na membrana. Arrasto eletro-osmótico, no caso da eletrólise, se trata do deslocamento de moléculas de água pela membrana polimérica causado pela troca de prótons do anodo para o catodo através da membrana (MEDINA e SANTARELLI, 2010).

A pressão no catodo, saída do hidrogênio, em eletrolisadores PEM comerciais é usualmente de 30 bar (AHMED et al., 2022). Alguns pesquisadores reportaram o desenvolvimento de pilhas capazes de pressões ainda mais elevadas. Zhang et al (2021) projetaram uma pilha de cinco células PEM capaz de tolerar uma pressão de 50 bar e Siber et al. (2021) relataram a operação de uma célula PEM sob condições de 52 °C e 95 bar. No anodo, PEM comerciais costumam operar sob pressão atmosférica ou próxima da atmosférica como, por exemplo, o eletrolisador de potência nominal de 5 MW da Andritz

que opera com uma pressão de 5 bar (ANDRITZ, 2024).

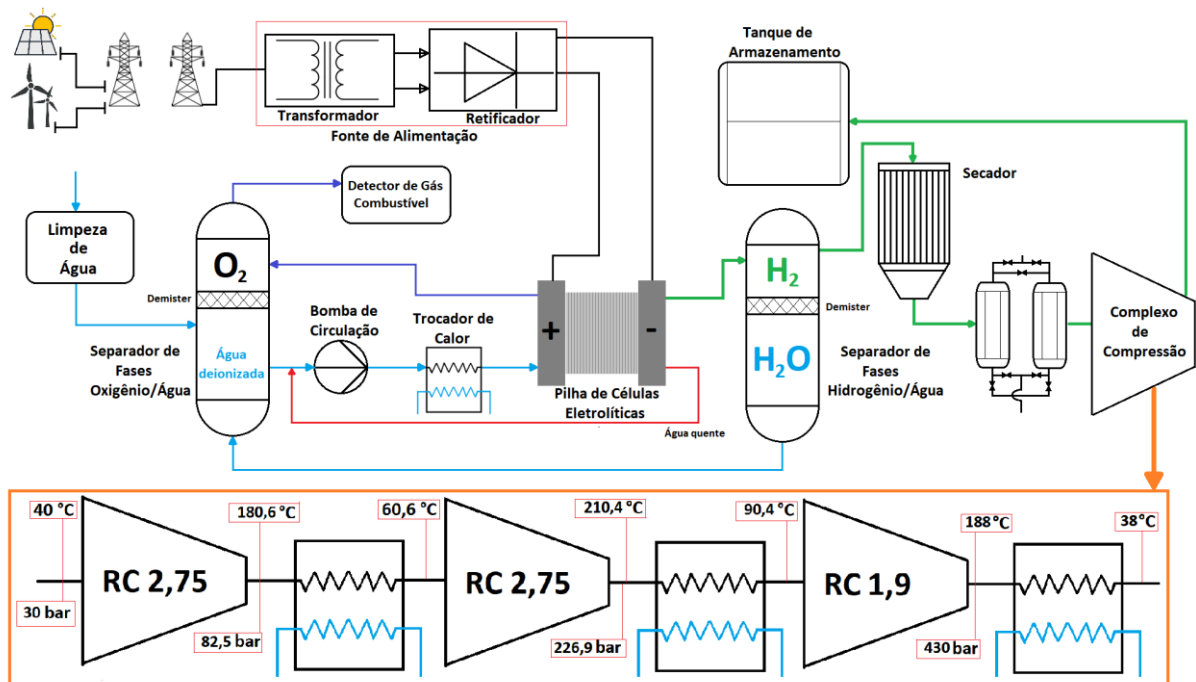
A faixa de temperatura dos PEM comerciais é de aproximadamente 60 a 80 °C e a densidade de corrente varia de 1 a 3 A/cm², usualmente 2 A/cm² (AHMED et al., 2022) (WANG; CAO e JIAO, 2022) (LEE et al., 2020). A eficiência da eletrólise varia, segundo Kumar e Himabindu (2019), de 60% a 80% e segundo Wang; Cao e Jiao (2022), para eletrolisadores tipo PEM, de 67% a 82%.

A maioria dos eletrolisadores de água utilizam membranas de ácido perfluorosulfônico, ou, membranas Nafion (XU e SCOTT, 2010). Essas membranas possuem diferentes espessuras que são expressas por numerações. As membranas Nafion 117 possuem uma espessura de aproximadamente 7 milésimos de polegada que corresponde a cerca de 178 µm e são as mais comumente utilizadas (PARK et al., 2022).

3.12 Esquema dos componentes da planta de eletrólise

As plantas de eletrólise são comercialmente vendidas em módulos contendo a pilha de células e os demais componentes auxiliares que compõem o balanço da planta. Costumam ser montados em contêineres de forma a facilitar o transporte e minimizar o espaço requerido por esses equipamentos. A Figura 19 apresenta o esquema da planta de eletrólise com a adição de um complexo de compressão e tanque de armazenamento. Também são apresentadas as condições de operação fixadas e diferentes pontos do complexo de compressão que foram adotados nessa análise.

Figura 19- Esquema da planta de produção de eletrólise



Fonte: Elaborada pelo autor.

Dada a potência nominal e as condições de operação fixadas para a pilha de células, uma corrente elétrica vinda da fonte de alimentação sob uma tensão necessária provinda da curva de polarização da pilha faz com que a produção de hidrogênio aconteça. Água deionizada passa por um tanque separador de fases e é bombeado através de um trocador de calor que controlará a temperatura da pilha de células de modo a garantir a temperatura de operação desejada. Água quente deixa a pilha de células e retorna para ser novamente bombeada no circuito. Oxigênio produzido pelo anodo é enviado para o separador e vapor de água misturado ao oxigênio é separado voltando a circulação de água. O oxigênio também passa por detector de gás que verificará a presença de hidrogênio que possa ter permeado pelas membranas da célula. No catodo, hidrogênio é produzido seguindo para o separador de fases e, da mesma forma que o separador do oxigênio, terá o vapor de água contido no mesmo retirado. Esse vapor volta para a circulação de água. O hidrogênio então segue para um secador para aumentar ainda mais a pureza do mesmo, sendo posteriormente comprimido no complexo de compressão, de forma a atingir a pressão do tanque de armazenamento.

3.13 Análise econômica da eletrólise

A análise econômica será um pouco distinta da apresentada no caso da gaseificação de resíduos de biomassa. Primeiro são estimados os custos dos componentes, operação, manutenção e etc. Em seguida, é feita a análise de fluxo de caixa. Diferentemente da análise com gaseificação, a análise com eletrólise não será realizada considerando as microrregiões do estado. Para a eletrólise, não há a necessidade do recolhimento dos insumos para a produção do hidrogênio, já que esses insumos são somente eletricidade e água. Outro aspecto que também foi considerado é a geração da potência consumida no eletrolisador. Se conectado diretamente às usinas de produção de eletricidade (solar e eólica), pode haver uma disparidade entre os pontos com maior potencial dessas fontes de energia renovável e o local onde há demanda pelo hidrogênio. Como discutido anteriormente, o transporte do hidrogênio é um dos grandes desafios à utilização do mesmo como vetor energético. Dessa forma, produzir o hidrogênio em um local distante do local de consumo pode não fazer sentido logístico, exceto se houver redes de distribuição. Portanto, para essa análise, as plantas de eletrólise ficaram separadas das plantas de produção solar e eólica. As plantas de produção de potência serão conectadas na rede elétrica e a potência equivalente será utilizada para a produção de hidrogênio nas plantas de eletrólise. Outra vantagem dessa separação é que os eletrolisadores podem operar constantemente sob carga nominal, permitindo escalar os módulos e quantidade deles não somente em um valor de pico de potência momentâneo, mas numa base de produção mais estável.

3.13.1 Estimativa de custos da eletrólise

Os custos dos equipamentos também foram estimados a partir da Equação 51, que utiliza custo e capacidade de referência, fator de escala e correção por CEPCI para o ano da análise. O ano referência para a análise foi de 2023. Como os eletrolisadores PEM comerciais são vendidos em módulos e não tenderão a ter uma queda de custo com a adição de novos módulos, foi feita uma análise para módulos de 1, 5 e 20 MW. Isso permite a compreensão do impacto da capacidade dos módulos no custo de produção.

A Tabela 10 apresenta os dados de referência obtidos na literatura para a estimativa dos custos dos equipamentos.

Tabela 10 - Dados utilizados na estimativa de custos da eletrólise

Equipamento	Custo Ref (C _R) \$	Capacidade Ref (S _R)	Base de S _R	Unid.	CEPCI _{ano}	Ref.
Pilha de Células Eletrolíticas	385.498,13	1	Potência Nominal da Planta	MW	797,9	Chardonnet et al. (2017)
	1.711.070,63	5				
	5.681.025,00	20				
Circulação de Água deionizada	82.082,00	1	Potência Nominal da Planta	MW	567,9	Ruth, Mayyas e Mann (2017)
	255.056,00	5				
	768.019,60	20				
Fonte de Alimentação	198.225,00	1	Potência Nominal da Planta	MW	567,9	Ruth, Mayyas e Mann (2017)
	734.475,00	5				
	2.418.603,71	20				
Processamento do Hidrogênio	83.880,00	1	Potência Nominal da Planta	MW	567,9	Ruth, Mayyas e Mann (2017)
	267.424,00	5				
	745.191,77	20				
Resfriamento	21.215,00	1	Potência Nominal da Planta	MW	567,9	Ruth, Mayyas e Mann (2017)
	44.008,00	5				
	103.371,75	20				
Outros Componentes	6.000,00	Qualquer Capacidade	Potência Nominal da Planta	MW	567,9	Ruth, Mayyas e Mann (2017)

Exceto para o custo da pilha de células eletrolíticas, foram utilizadas regressões lineares para extrapolar a tendência de aumento de custo com capacidade para a capacidade de 20 MW levando em consideração que os dados de Ruth, Mayyas e Mann (2017) chegam somente até 10 MW. O coeficiente de determinação (R²) de nenhuma das curvas obtidas foi inferior a 98%.

Os custos de referência do tanque de armazenamento, trocador de calor, PSA e compressor de H₂ estão na Tabela 3, sendo iguais aos utilizados para a produção de H₂ por gaseificação.

Cada um desses subsistemas é composto por uma série de componentes:

- A circulação de água deionizada é composta por: separador de fases oxigênio/água, bomba de circulação, tubulação, controles, válvulas e instrumentação;
- A fonte de alimentação é composta por: transdutores DC de tensão e corrente e a própria fonte de

alimentação;

- O processamento de hidrogênio é composto por: secador, separador de fases hidrogênio/água, tubulação, controles, válvulas e instrumentação;
- Resfriamento é composto por: trocador de calor, bomba de resfriamento, tubulação, válvulas e instrumentação;
- Outros Componentes: válvula de entrada de ar (nitrogênio ou ar comprimido), detector de gases combustíveis e ventilação de exaustão.

Para a estimativa do custo de investimento total (CIT), foi utilizada a mesma metodologia estabelecida para a gaseificação na Tabela 4, com exceção da compra de terrenos e licenciamento. Plantas de produção por eletrólise são bem mais compactas. Dessa forma, foi utilizado 1% do custo instalado, baseando-se na metodologia utilizada por Saur (2008).

A estimativa dos custos de operação e manutenção foi feita a partir dos dados da Tabela 11, sendo os valores foram convertidos para o ano de 2023.

Tabela 11 – Estimativa dos custos O&M da eletrólise

Custos O&M		Unidade	Referência
Preço da Água Tratada	0,01	\$/kg	Jang et al. (2022)
Mão de Obra	64939,00	\$/ano	AG Capital (2024), Brasil (2023), Centro Universitário Tiradentes (2024), InvestNews (2024)
Manutenção Variável	3% dos custos fixos		Lee et al. (2017)
Impostos Locais	2% do CIT		Cormos, Vatopoulos e Tzimas (2013)

Os custos de mão de obra de operação e manutenção foram calculados levando em consideração que a equipe que acompanha o processo de produção é formada por 1 engenheiro e 2 técnicos de projetos elétricos. Foi utilizado o valor de salário piso do engenheiro como sendo 8 vezes o salário mínimo de 2023 (CENTRO UNIVERSITÁRIO TIRADENTES, 2024). O salário mínimo de 2023 foi de R\$ 1320 (BRASIL, 2023). O salário piso para o técnico de projetos elétricos é de R\$ 2733,92 para o ano de 2023 (INVESTNEWS, 2024). A contabilização dos direitos trabalhistas que englobam: FGTS, INSS, 13º salário, férias, aviso prévio, vale transporte e alimentação, foi considerado como sendo 70% sobre o salário base (AG CAPITAL, 2024).

O cálculo do consumo de potência dos compressores de hidrogênio e o cálculo do consumo de água dos trocadores de calor foram realizados utilizando a mesma metodologia apresentada nas seções de estimativa de custos da gaseificação.

Para estimar o CAPEX das plantas solar e eólica foram utilizados os resultados das estimativas de Sens, Neuling e Kaltschmitt (2022) para os próximos anos, conforme apresentados na Tabela 12.

Tabela 12 – Estimativa do CAPEX de plantas fotovoltaicas e eólicas para os próximos anos

Ano	Planta Fotovoltaica (€ ₂₀₂₀ /kW _{ele})	Planta de Turbinas Eólicas <i>on shore</i> (€ ₂₀₂₀ /kW _{ele})
2012	1400	1665
2020	630	1323
2030	338,6	1143,6
2050	237,5	963,6

Fonte: (SENS, NEULING E KALTSCHMITT, 2022)

Foram realizadas duas regressões lineares para encontrar os valores para o ano de 2023. Ambas regressões apresentam $R^2 = 100\%$.

$$\text{CAPEX}_{\text{SOLAR}} = 6,5051 \times 10^8 - 958135,91 \text{ ano} + 470,4 \text{ ano}^2 - 0,07699 \text{ ano}^3 \quad (82)$$

$$\text{CAPEX}_{\text{EÓLICO}} = 2,4024 \times 10^8 - 353835 \text{ ano} + 173,7 \text{ ano}^2 - 0,028429 \text{ ano}^3 \quad (83)$$

A potência de referência do CAPEX solar considerado por Sens, Neuling e Kaltschmitt (2022) é 5 MW. E o fator de escala considerado foi de 0,9 levando em conta a que o aumento da potência instalada para plantas acontece com a adição de módulos e isso tende uma economia de escala mais linear.

O CAPEX está sob potência elétrica contratada necessária a atender a demanda da planta de eletrólise. Essa demanda leva em conta a operação contínua do eletrolisador sob condição nominal. Para se determinar a potência nominal que a planta solar necessita para atender a demanda da planta de eletrólise, foi utilizada a Equação 84.

$$\text{Pot}_{\text{N.SOLAR}} = \frac{\text{Pot}_{\text{N.ELE}} 24 \text{ FD}}{\text{HSP}} \quad (84)$$

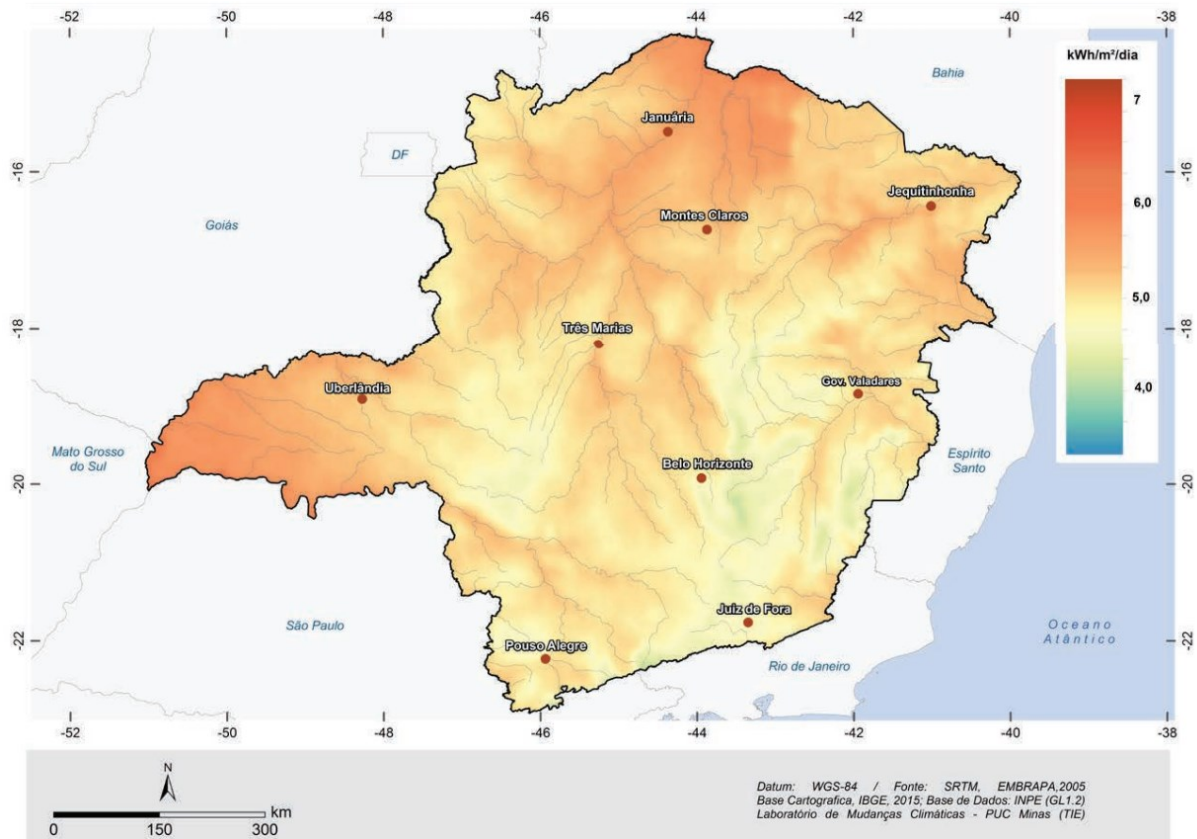
Onde:

- $\text{Pot}_{\text{N.ELE}}$: potência nominal da planta do eletrolisador (MW);
- FD: fator de disponibilidade;
- HSP: horas de sol pleno (h/dia).

Horas de sol pleno refere-se ao número de horas em que a radiação solar é, em média, pelo menos 1.000 W/m², ou seja, o valor padrão de radiação solar usado em cálculos de energia fotovoltaica. Para se calcular HSP são utilizados valores de radiação solar média diária anual do local e, em seguida, esses valores são divididos por 1 kW/m² (PÉREZ MARTÍNEZ, MORALES RODRÍGUEZ e CASTRO, 2017). Levando em consideração a irradiação de Minas Gerais e considerando que a planta solar

ocuparia alguma localidade na região norte do estado, foi utilizado um valor mais conservador de hora solar pico de 5,5 h/dia. A Figura 13 mostra a radiação solar média diária para o mês de dezembro no estado de MG.

Tabela 13 – Radiação solar média diária do mês de dezembro



Fonte: CEMIG (2021)

Para se determinar a potência nominal que a planta eólica necessita para atender a demanda da planta de eletrólise, foi utilizado a Equação 85. Essa demanda também leva em conta a operação contínua do eletrolisador sob condição nominal.

$$Pot_{N.EÓLICA} = \frac{Pot_{N.ELE} \cdot FD}{FC} \tag{85}$$

Onde FC é o fator de capacidade da turbina eólica.

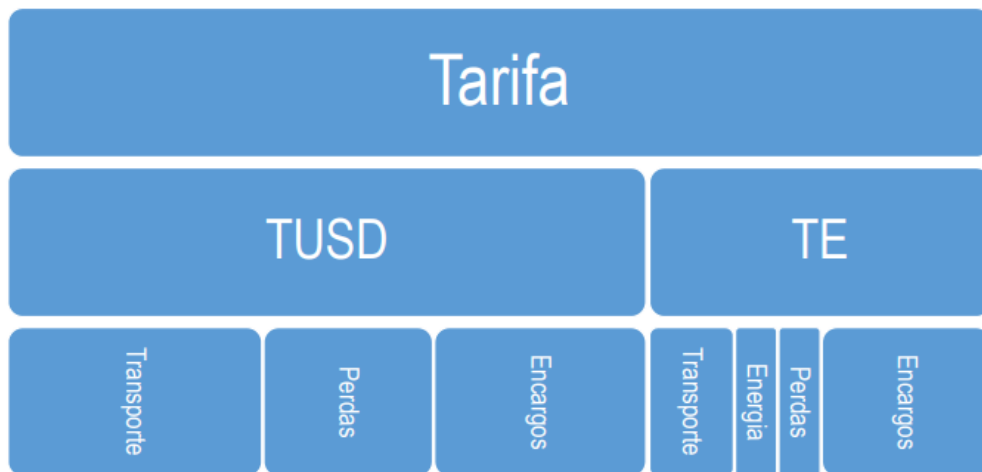
O fator de capacidade é definido como a razão entre a energia efetivamente gerada e a energia teórica que seria gerada considerando-se a potência nominal do aerogerador. Esse fator depende diretamente da intermitência do vento disponível, ou seja, depende diretamente da localização geográfica que é instalada e da altura do rotor em relação ao solo, já que há uma variação significativa da velocidade do vento com a distância do solo. Para que haja minimamente uma atratividade de

investimento sobre energia eólica é necessário, quando se fala de velocidade média anual do vento, valores entre 5,5 e 7 m/s. Levando isso em consideração, para essa análise foi considerado como referência uma turbina eólica com torre de 100 metros, com rotor diâmetro de 100 metros e potência nominal de 3 MW. Nessas condições, o fator de capacidade para uma velocidade média anual de 7 m/s é de 0,246 (CEMIG, 2010). O fator de escala considerado para a estimativa do CAPEX, assim como da planta solar, foi de 0,9.

Com a consideração do CAPEX das plantas eólicas e solares, também são incluídos custos associados a mão de obra de mais dois técnicos e um engenheiro para operação e manutenção para cada planta.

Quando a eletricidade utilizada em algum processo é produzida em uma localidade diferente e é utilizado uma compensação do que é produzido e consumido da rede elétrica, esse sistema é chamado de autoconsumo virtual ou compensação de energia. Embora com esse tipo de abordagem não haja um pagamento direto do consumo da energia, já que ela está sendo compensada, ainda há encargos que são cobrados pelas concessionárias de energia. Segundo a ANEEL (2021), a tarifa de energia é composta pelos seguintes componentes tarifários apresentados na Figura 20,

Figura 20 - Composição da tarifa de energia



Fonte: ANEEL (2021)

Enquanto a tarifa de energia (TE) é abatida na compensação de energia, a tarifa de uso do sistema de distribuição (TUSD) ainda é cobrada. O TUSD está atrelado à prestação do serviço necessário para o consumo de energia elétrica que contabiliza a disponibilização, manutenção e operação da infraestrutura do setor elétrico (ANEEL, 2021). Portanto, há uma desvantagem tangível da compensação de energia ou da não utilização da energia no local que ela é produzida. O grau dessa desvantagem será explorado com mais detalhes na seção dos resultados.

O custo da tarifa TUSD pode ser calculado por uma porção fixa (R\$/kW), que é dada por potência

contratada, mais a sua porção que está relacionada ao consumo (R\$/MWh). O valor dessas tarifas pode ser consultado pela ANEEL (2024).

Uma planta de eletrólise se encaixaria na modalidade tarifária azul, subgrupo A2. A modalidade tarifária azul é aplicada a consumidores de alta tensão e possui variação da tarifa ao longo do dia e das estações do ano. O Subgrupo A2 é dado a unidades consumidoras com conexão de tensão de 88 kV a 138 kV (CEMIG, 2024).

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

A seguir é apresentado a validação do modelo de equilíbrio químico da gaseificação e do modelo do eletrolisador PEM utilizado e, em seguida, os resultados obtidos quanto aos potenciais de produção de hidrogênio em Minas Gerais.

4.1 Validação do Modelo Termodinâmico de Equilíbrio Químico

O modelo de equilíbrio foi validado mediante uma comparação com dados de diferentes autores na literatura. A primeira comparação foi com o modelo de Zainal et al. (2001), pois foi desse estudo que as relações das constantes de equilíbrio da reação da metanação do carbono e da reação de deslocamento gás-água foram retiradas. Zainal et al. (2001) considerou madeira com uma composição elementar em base seca de 50% de carbono, 6% de hidrogênio e 44% de oxigênio. As porcentagens de nitrogênio, enxofre e cinzas foram ignoradas. A umidade da madeira utilizada foi de 20% e a temperatura de gaseificação de 800 °C.

Os valores dos calores específicos e entalpias de formação foram retiradas da biblioteca do EES e, além disso, esses valores também foram comparados com valores obtidos nas equações do *National Institute of Standards and Technology* (NIST, 2021) como forma de garantir que a comparação fosse efetuada nas mesmas bases dos resultados. Não houve qualquer diferença significativa, demonstrando confiabilidade da biblioteca do EES.

O desvio entre os resultados do modelo e os dados da literatura foram quantificados com o erro quadrático médio, que é calculado a partir da equação:

$$EQM = \sqrt{\frac{\sum_i^N (\text{referência}_i - \text{modelo}_i)^2}{Nd}} \quad (86)$$

Onde referência_i se refere aos dados experimentais ou da literatura, modelo_i se refere aos dados do modelo utilizado e Nd ao número de dados.

A Tabela 14 segue a comparação dos resultados obtidos com os de Zainal et al. (2001):

Tabela 14 - Comparação dos resultados em concentração volumétrica com os de Zainal et al. (2001)

Espécies	Modelo desse estudo	Modelo de Zainal et al. (2001)
H ₂ - Hidrogênio	23,69%	21,06%
CO - Monóxido de carbono	21,95%	19,61%
CH ₄ - Metano	0,40%	0,64%
CO ₂ - Dióxido de Carbono	11,52%	12,01%
N ₂ - Nitrogênio	42,47%	46,68%

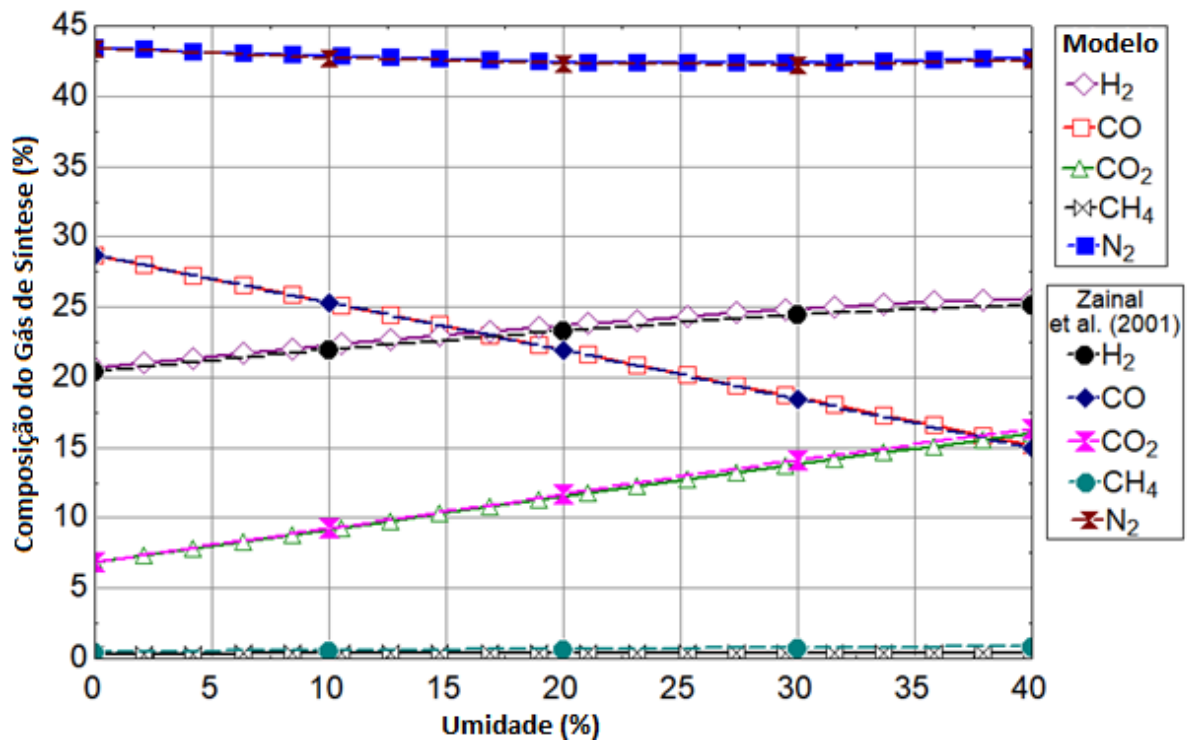
Tabela 14- Comparação dos resultados com os de Zainal et al. (2001) (Continuação)

SO ₂ - Dióxido de Enxofre	0%	0%
PCI dos gases (MJ/Nm ³)	4,90	4,72

Erro Quadrático Médio = 0,02252. Fonte: Elaborada pelo Autor

Também foi replicado a análise de sensibilidade do comportamento da composição dos gases pela variação da umidade (Figura 21).

Figura 21 - Comparação dos resultados obtidos por esse estudo com os obtidos por Zainal et al. (2001)



Erro Quadrático Médio = 0,00646. Fonte: Elaborada pelo Autor e adaptado de Zainal et al. (2001)

Como pode ser observado na Tabela 14 e Figura 21, os resultados, dentro de uma pequena variação, concordam entre si.

Também foi feita outra validação na literatura utilizando como referência o estudo de gaseificação de óleo pesado de Santiago et al. (2021). Por não se tratar de uma biomassa, foi utilizado uma fórmula distinta para o cálculo do poder calorífico superior da borra de petróleo obtida de Chen et al. (2022), conforme apresentado na Equação 87.

$$PCS_{op} = (0,423 C + 0,058 H - 0,013 O + 0,083 N + 0,046 S + 1,281) * 1000 \text{ (kJ/kg)} \quad (87)$$

Além disso, o modelo deste estudo considera gaseificação sob pressão atmosférica, enquanto Santiago et al. (2021) consideram uma pressão de gaseificação de 18,75 atm. Dessa forma, a equação

da constante de equilíbrio da formação de metano utilizada foi:

$$K_1 = \frac{x_5}{x_1^2} \frac{P_{ref}}{P} x_{total} \quad (88)$$

Onde:

- P_{ref} : pressão de referência (101,325 kPa);
- P : pressão total;
- x_{total} : número total de mols de gás produzido.

$$x_{total} = x_1 + x_2 + x_3 + x_4 + x_5 + x_6 \quad (89)$$

Os dados de entrada utilizados para a comparação dos modelos são mostrados na Tabela 15:

Tabela 15 - Dados de entrada utilizados pelos autores na validação de Santiago et al. (2021)

Parâmetros		Análise Imediata		Análise Elementar	
Razão de Equivalência	0,4	Umidade	28,80%	C	84,28%
Temperatura do Agente Gaseificante (°C)	25	Cinzas	0,25%	H	10,33%
				O	0,55%
Agente Gaseificante	O ₂	Carbono Fixo	18,04%	N	0,64%
				S	3,95%
Pressão de Gaseificação (atm)	18,75	Voláteis	81,71%	Cinzas	0,25%

Fonte: Elaborada pelo Autor

O resultado obtido pelo modelo deste trabalho foi comparado com o resultado do modelo de Santiago et al. (2021) e com os modelos utilizados pelo mesmo para sua própria validação (Tabela 16). Também foi calculado o erro quadrático médio em relação a todos os outros modelos.

Tabela 16 - Comparação dos resultados do modelo de equilíbrio com os resultados de outros autores

	Ashizawa et al. (2005)	Vaezi et al. (2011)	Yang et al. (2016)	Yue et al. (2016)	Santiago et al. (2021)	Este Estudo
Gases de síntese	Experimental (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)
H ₂	39,40%	39,77%	39,26%	40,24%	37,21%	36,26%
CO	38,70%	39,83%	35,23%	36,20%	40,80%	40,61%
CO ₂	8,67%	8,90%	10,09%	9,12%	7,47%	7,61%
H ₂ O	11,85%	11,34%	13,39%	12,41%	13,32%	13,35%
CH ₄	0,08%	0,01%	1,086%	0,084%	0,03%	1,30%

Tabela 16 - Comparação dos resultados do modelo de equilíbrio com os resultados de outros autores
(Continuação)

	Ashizawa et al. (2005)	Vaezi et al. (2011)	Yang et al. (2016)	Yue et al. (2016)	Santiago et al. (2021)	Este Estudo
Gases de síntese	Experimental (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)	Modelo (% molar)
outros	1,30%	0,15%	0,94%	1,95%	1,03%	0,87%
EQM	0,01758	0,01863	0,02711	0,02616	0,00659	

Fonte: Elaborada pelo Autor

Como pode ser observado, dado o pequeno valor do erro quadrático médio, conclui-se que houve concordância do modelo deste trabalho com o de outros cinco autores, sendo um deles de dados experimentais.

Por fim, considerando que o modelo foi validado para a gaseificação com ar e com oxigênio, foi feita uma comparação para a gaseificação com a mistura de vapor e ar como agentes gaseificantes. Sales et al. (2017) desenvolveram um estudo experimental com a gaseificação com eucalipto de um reator *downdraft* de dois estágios usando de ar, oxigênio e vapor saturado como agentes gaseificantes. Utilizando os mesmos parâmetros do estudo, o resultado do modelo foi comparado com os resultados experimentais. Sales et al. (2017) utilizaram uma definição diferente para a razão SB (vapor por biomassa) que foi alterada para que a comparação com seus resultados pudesse acontecer.

$$SB = \frac{18\alpha + 18w}{MM_b} \quad (90)$$

A caracterização da biomassa utilizada por Sales et. al. (2017) é apresentada na Tabela 17

Tabela 17 - Dados de entrada da biomassa utilizados por Sales et al. (2017)

Análise Elementar (Base seca e livre de cinzas)		Análise Imediata	
Carbono	49	Cinzas	0,79
Nitrogênio	0,2	Voláteis	72,86
Hidrogênio	6,3	Carbono Fixo	15,18
Enxofre	0,1	Umidade	11,17
Oxigênio	44,4		

Fonte: Elaborada pelo Autor

A Tabela 18 apresenta a comparação dos resultados do modelo com os experimentais obtidos por Sales et al. (2017):

Tabela 18 - Comparação com os resultados experimentais da gaseificação com ar/vapor de Sales et. al. (2017) (Base seca). Exp = experimental, Mod = modelo deste estudo

Teste	OP	ER	SB	CO		CH ₄		H ₂		EMQ
				Exp	Mod	Exp	Mod	Exp	Mod	
1	21	0,369	0,127	18,7	21,9	1,6	0,34	17,4	19,95	0,0247
2	21	0,42	0,127	15,5	21,2	1,6	0,09	16,3	16,85	0,0342
3	21	0,374	0,127	21,2	21,88	1,8	0,27	16,6	19,49	0,0193
4	21	0,409	0,476	12,7	16,2	1,7	0,27	19,9	20,7	0,0223
5	21	0,422	0,435	8,7	16,67	1,4	0,17	21,6	19,38	0,0483
6	21	0,454	0,418	8,3	16,7	1,6	0,10	18,9	17,76	0,0497
7	21	0,458	1,299	7,2	9,12	1,6	0,40	19,1	21,32	0,0183
8	21	0,413	1,031	12,8	10,64	1,7	0,60	18,8	22,95	0,0277
9	21	0,402	0,901	13,8	11,63	1,7	0,59	20,8	23,03	0,0191
									Média	0,0293

Fonte: Elaborada pelo Autor

Portanto, levando em consideração que o modelo concorda com os resultados do autor que forneceu as equações das constantes de equilíbrio e mais seis outros da literatura, o potencial de produção de hidrogênio por gaseificação de biomassa com ar, oxigênio e mistura ar/vapor pode ser explorado com segurança.

4.2 Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H₂ sem Aprimoramento

Foi analisada a gaseificação dos resíduos de biomassa entrando com 25 °C e com três tipos de agentes gaseificantes, sendo eles: ar, oxigênio e a mistura ar com vapor superaquecido. O modelo considera o ar puro como sendo composto por 21% O₂ e 79% N₂, já que a proporção dos outros gases é insignificante no comportamento do processo gaseificação. Também foi levado em consideração que a gaseificação ocorre sob pressão atmosférica. Os dados de entrada são a análise elementar, a umidade e a razão de equivalência ou temperatura de gaseificação. Foram utilizados os dados mostrados na Tabela 2 para os resíduos escolhidos.

Para maximizar a produção de hidrogênio, não basta encontrar somente a porcentagem máxima de hidrogênio nos produtos e sim a relação dessa porcentagem com a de biomassa necessária nos reagentes no ponto de equilíbrio químico. Portanto, a condição de operação com maior produção de hidrogênio ocorre no ponto máximo da razão da porcentagem mássica de hidrogênio nos produtos e a porcentagem mássica de biomassa nos reagentes (RH₂Bio). Em uma gaseificação com ar e com uma biomassa completamente seca, ou seja, umidade igual a zero, nem todo o hidrogênio que compõe a biomassa irá se converter em hidrogênio. Uma parte irá se tornar vapor de água nos produtos. Nesse tipo de gaseificação, portanto, é necessário minimizar a quantidade de vapor formado a partir do hidrogênio que compõe a biomassa. Para a otimização da gaseificação com ar e com oxigênio puro, por se tratar de

um problema unidimensional não linear, foi utilizado o método das aproximações quadráticas e o método da seção áurea para maximizar a produção de H₂.

As Tabelas 19 e 20 apresentam os resultados da otimização obtidos para cada uma das biomassas, ou seja, o ponto de operação que permite a produção máxima de H₂. Os valores da umidade das Tabelas 19 e 20 também são baseados nos autores da Tabela 2, com exceção do bagaço de cana, palhiço da cana e da borra de café gasta. Na queima do bagaço de cana, como citado anteriormente, é comum queimá-la com umidades bastante altas. Para a gaseificação, nesse caso, foi adotada uma umidade de 15% considerando pré-tratamento de secagem, um valor mais conservador se comparado ao da Tabela 2. Para o palhiço de cana, foi utilizado a média do valor de 4 a 33% do estudo de Jorapur e Rajvanshi (1995) e para a borra de café gasta foi utilizado o valor de 15% considerando algum processo de pré-tratamento que torne viável o seu uso em gaseificação.

Tabela 19 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com ar como agente oxidante

Biomassa	Umidade	%H ₂ máximo (molar – base úmida)	%Biomassa Reagentes (mássico)	Razão H ₂ /Biomassa (RH ₂ Bio)	ER	Temperatura (°C)
Bagaço de cana	15,00%	20,837%	33,270%	0,05357	0,3122	736,4
Palhiço de cana	18,5%	17,152%	32,417%	0,04319	0,3874	700
Borra de café gasta	15,00%	17,710%	22,396%	0,06578	0,4003	734,5
Espiga de milho	7,04%	19,666%	35,067%	0,04710	0,3198	732,6
Palhiço de milho	8,02%	17,741%	32,277%	0,04486	0,3603	715,2
Casca de soja	6,30%	16,176%	29,874%	0,04351	0,4156	701,6
Casca de cacau	6,70%	15,401%	27,321%	0,04503	0,4191	703,9
Madeira de Eucalipto	16,00%	21,940%	35,283%	0,05389	0,2913	740,3
Casca de Eucalipto	12,00%	21,140%	36,042%	0,05020	0,2942	738,9

Fonte: Elaborada pelo Autor

Tabela 20 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com oxigênio como agente oxidante

Biomassa	Umidade	H ₂ máximo (molar – base úmida)	Biomassa nos Reagentes (mássico)	Razão H ₂ /Biomassa (RH ₂ Bio)	ER	Temperatura (°C)
Bagaço de cana	15,00%	36,122%	64,551%	0,05707	0,2729	778,0
Palhiço de cana	18,5%	30,992%	62,231%	0,04690	0,3398	734,5
Borra de café gasta	15,00%	37,593%	54,201%	0,07222	0,3491	793,1
Espiga de milho	7,04%	34,970%	69,573%	0,05019	0,2793	775,9
Palhiço de milho	8,02%	33,452%	66,785%	0,04820	0,3153	757,4
Casca de soja	6,30%	32,686%	65,245%	0,04757	0,3640	743,8
Casca de cacau	6,70%	32,317%	62,496%	0,04919	0,3670	751,3

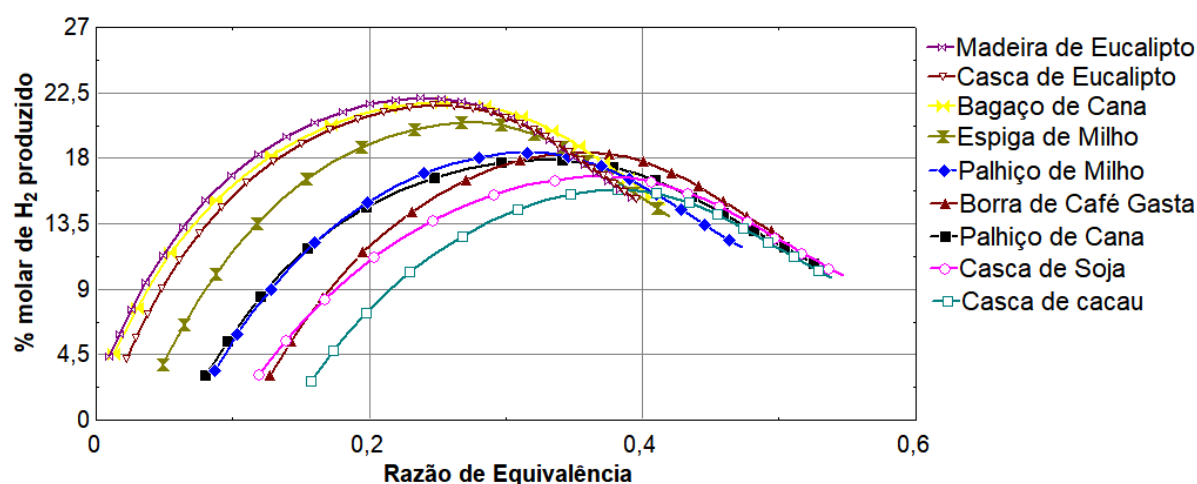
Tabela 20 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com oxigênio como agente oxidante
(Continuação)

Madeira de Eucalipto	16,00%	36,381%	65,535%	0,05713	0,2550	780,4
Casca de Eucalipto	12,00%	35,694%	68,010%	0,05320	0,2574	780,6

Fonte: Elaborada pelo Autor

A Figura 22 apresenta as curvas de produção de hidrogênio a partir da gaseificação, para os nove resíduos de biomassa, em função da razão de equivalência utilizando o ar como agente oxidante. Em ordem decrescente quanto ao potencial técnico de produção, tem-se: os resíduos do eucalipto, o bagaço de cana, os resíduos do milho, a borra de café, o palhiço de cana, a casca de soja e a de cacau.

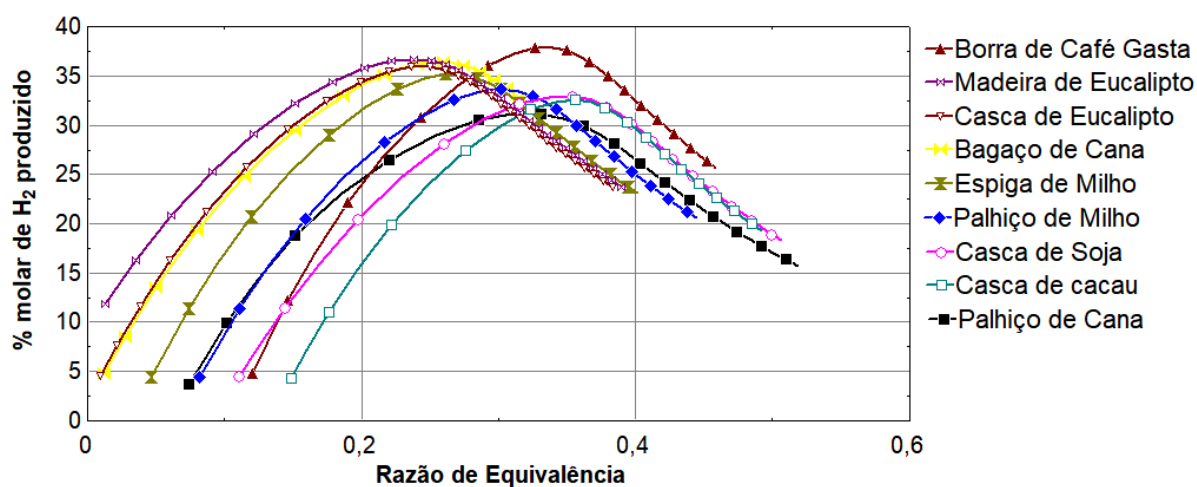
Figura 22 - Curvas de produção de H₂ dos resíduos em função da razão de equivalência para gaseificação com ar (base úmida)



Fonte: Elaborada pelo Autor

A Figura 23 apresenta as curvas de produção de hidrogênio utilizando-se oxigênio puro como agente oxidante. Quando presente junto ao oxigênio formando o ar, o nitrogênio, que não reage com nenhum outro elemento do processo de gaseificação, compreende mais de 40% da proporção molar dos produtos. Com a sua ausência, naturalmente, haverá uma proporção ainda maior de H₂ produzido. Todas as curvas de produção tenderam a aumentar a sua escala de forma proporcional umas com as outras, com exceção da borra de café que teve um aumento relativamente maior de seu valor máximo de H₂ produzido. A maior quantidade de oxigênio também favorece as reações de deslocamento gás-água e biomassas que possuem uma proporção de oxigênio/carbono menores serão favorecidas com o oxigênio puro como agente gaseificante como é o caso da borra de café. Em ordem decrescente de potencial químico de produção de hidrogênio, tem-se: a borra de café, os resíduos de eucalipto, o bagaço de cana, os resíduos de milho, a casca de soja, a casca de cacau e o palhiço de cana.

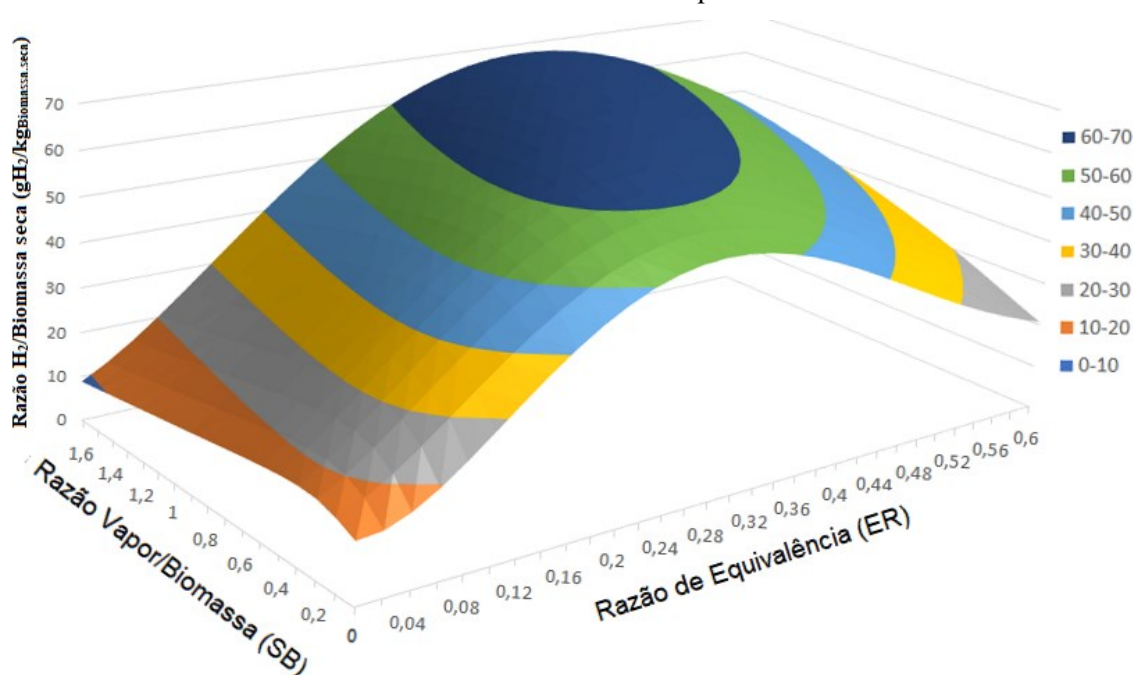
Figura 23 - Curvas de produção de H₂ dos resíduos por razão de equivalência para gaseificação com oxigênio (base úmida)



Fonte: Elaborada pelo Autor

Para maximizar a produção de hidrogênio na gaseificação com ar e vapor também é necessário levar em consideração a razão vapor/biomassa (SB). A adição do vapor superaquecido ajuda o mecanismo de reação de deslocamento gás-água e, por consequência, aumenta a produção de H₂ nos produtos. Existe, porém, um limite químico, a partir do qual a produção extra de hidrogênio pela adição de vapor cessa. Dessa forma, existe um ótimo teórico que maximiza a produção de H₂ e depende da razão vapor/biomassa, da razão de equivalência ou da temperatura de gaseificação. A Figura 24 mostra como os perfis de produção de H₂ por biomassa seca aumentam à medida que a SB aumenta até um valor máximo. No caso do eucalipto (Figura 24), o pico acontece em 69,76 g_{H2}/kg_{Biomassa.seca} com um SB de 1,175 e uma ER de 0,34.

Figura 24 - Superfície da produção de H₂ por Biomassa seca (gH₂/kg_{biomassa.seca}) com a variação de SB e ER da madeira de eucalipto



Fonte: Elaborada pelo Autor

Para este estudo, foi considerado uma temperatura para o vapor superaquecido de 200 °C, pois segundo Sales et al. (2017), apesar dessa temperatura ser considerada relativamente baixa, a produção de hidrogênio pode aumentar significativamente. E o fato de se optar por temperaturas mais baixas para o vapor é importante em reduzir o custo do gaseificador, da caldeira de vapor, do uso necessário de biomassa para gerar o vapor e da água em si.

Foram utilizados quatro diferentes métodos de otimização para garantir a confiabilidade dos resultados, são eles: o Método dos Gradientes Conjugados, Método *Variable Metric*, Algoritmo Simplex de Nelder-Mead e o Algoritmo Genético. Todos mostraram boa concordância nos resultados, sendo consistentemente o algoritmo genético a mostrar o melhor resultado e o método *Variable Metric* a mostrar o pior. Os outros métodos mostraram resultados próximos entre si. A Tabela 21 mostra o ponto de operação que maximiza a produção de H₂ para a gaseificação com ar/vapor, para cada biomassa considerada.

Tabela 21 - Ponto de máxima produção de hidrogênio com ar/vapor como agente oxidante

Biomassa	Umidade	Razão H ₂ /Biomassa (RH ₂ Bio)	Razão Vapor/Biomassa (SB)	ER	Temperatura (°C)
Bagaço de cana	15,00%	0,07011	1,219	0,3638	737,43
Palhiço de cana	18,5%	0,04970	0,744	0,4385	710,49
Borra de café gasta	15,00%	0,08557	1,472	0,4439	735,29
Espiga de milho	7,04%	0,06565	1,341	0,3699	733,29
Palhiço de milho	8,02%	0,06123	1,256	0,4106	722,91
Casca de soja	6,30%	0,05424	1,059	0,4645	713,21
Casca de cacau	6,70%	0,06096	1,288	0,4659	714,8
Madeira de Eucalipto	16,00%	0,06973	1,175	0,3444	740,32
Casca de Eucalipto	12,00%	0,06853	1,285	0,346	737,74

Como esperado, em ordem crescente quanto ao potencial de produção de hidrogênio, tem-se a gaseificação com ar seguida pela gaseificação com oxigênio e, por fim, a gaseificação com ar/vapor superaquecido. Cada resíduo de biomassa mostrou uma melhora distinta na produção de hidrogênio com relação ao uso de oxigênio puro e a adição de vapor superaquecido ao ar devido a sua composição e a natureza das reações que impõem o equilíbrio químico. Utilizando oxigênio como agente gaseificante, houve um aumento consistente de 5,9% a 9,7% na produção mássica de hidrogênio. A adição de vapor ao ar causou um aumento médio de 30% na massa de H₂ produzido entre todos os resíduos. Esses resultados demonstram o potencial máximo para um sistema sem aprimoramento dos gases.

4.3 Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H₂ com Aprimoramento por Reatores WGS

Mesmo considerando a operação em condições que maximizam a produção de H₂ a partir da gaseificação, ainda irá restar monóxido de carbono no gás de síntese, possível de ser convertido através de reações de *shift* (Equação 20). Assim, após serem retirados as cinzas e material particulado, os gases passarão por trocadores de calor que irão leva-los as condições de temperaturas estabelecidas para os reatores WGS de alta e baixa temperatura. Vapor será injetado no reator de alta temperatura de forma a alcançar uma razão de conversão (C_{CO}) que seja condizente com a literatura, considerando valores típicos de tempo de residência e capacidade dos catalisadores. O vapor pode ser produzido pelo próprio calor retirado do gás de síntese nos trocadores de calor (Figura 12).

Começando pela gaseificação com ar, para o reator WGS de alta temperatura foi escolhido a temperatura de 400 °C e razão S/G de 35% e para o reator de baixa temperatura foi escolhido uma temperatura de 250 °C (REDDY e SMIRNIOTIS, 2015). Na gaseificação com oxigênio, a razão S/G foi

alterada para 68% de modo que a eficiência de conversão se mantivesse semelhante à da gaseificação com ar. Foi utilizado modelamento de equilíbrio químico termodinâmico para ambos reatores (Equações 33 e 48). A Tabela 22 e 23 apresentam as razões de conversão do monóxido de carbono para os reatores levando em consideração temperatura, S/G e as porcentagens molares em base seca do H₂, CO, CO₂ para a gaseificação com ar e com oxigênio. As tabelas também apresentam a razão de H₂ por biomassa seca após o aprimoramento pelos reatores WGS (RH₂Bio₂).

Tabela 22 - Potencial de produção de H₂ pós reatores para gaseificação com ar

Biomassa	Reator de Alta Temperatura			Reator de Baixa Temperatura			RH ₂ Bio ₂ (kg _{H2} /kg _{Biomassa})
	T (°C)	S/G	C _{CO}	T (°C)	S/G	C _{CO}	
Bagaço de cana	400	35%	76,00%	250	15,63%	76,81%	0,1032493
Palhiço de cana	400	35%	77,76%	250	22,16%	81,46%	0,0715209
Borra de café gasta	400	35%	81,26%	250	17,68%	80,25%	0,1267886
Espiga de milho	400	35%	76,22%	250	14,34%	75,77%	0,0977214
Palhiço de milho	400	35%	78,15%	250	16,30%	78,34%	0,0914668
Casca de soja	400	35%	80,41%	250	20,15%	81,18%	0,0800178
Casca de cacau	400	35%	81,25%	250	18,16%	80,51%	0,0915697
Madeira de Eucalipto	400	35%	75,39%	250	15,28%	76,46%	0,1023406
Casca de Eucalipto	400	35%	74,97%	250	14,07%	74,81%	0,1013203

Fonte: Elaborada pelo Autor

Tabela 23 - Potencial de produção de H₂ pós reatores para gaseificação com oxigênio

Biomassa	Reator de Alta Temperatura			Reator de Baixa Temperatura			RH ₂ Bio ₂ (kg _{H2} /kg _{Biomassa})
	T (°C)	S/G	C _{CO}	T (°C)	S/G	C _{CO}	
Bagaço de cana	400	68%	79,17%	250	26,27%	78,00%	0,1132159
Palhiço de cana	400	68%	79,03%	250	36,37%	81,06%	0,0805805
Borra de café gasta	400	68%	79,13%	250	25,68%	78,01%	0,1430061
Espiga de milho	400	68%	78,59%	250	23,72%	76,52%	0,1070165
Palhiço de milho	400	68%	78,89%	250	25,54%	77,59%	0,1013131
Casca de soja	400	68%	79,37%	250	30,50%	79,63%	0,0907967
Casca de cacau	400	68%	79,30%	250	26,28%	78,10%	0,1034665
Madeira de Eucalipto	400	68%	79,23%	250	26,74%	78,21%	0,1116428
Casca de Eucalipto	400	68%	78,77%	250	24,38%	76,95%	0,1105183

Fonte: Elaborada pelo Autor

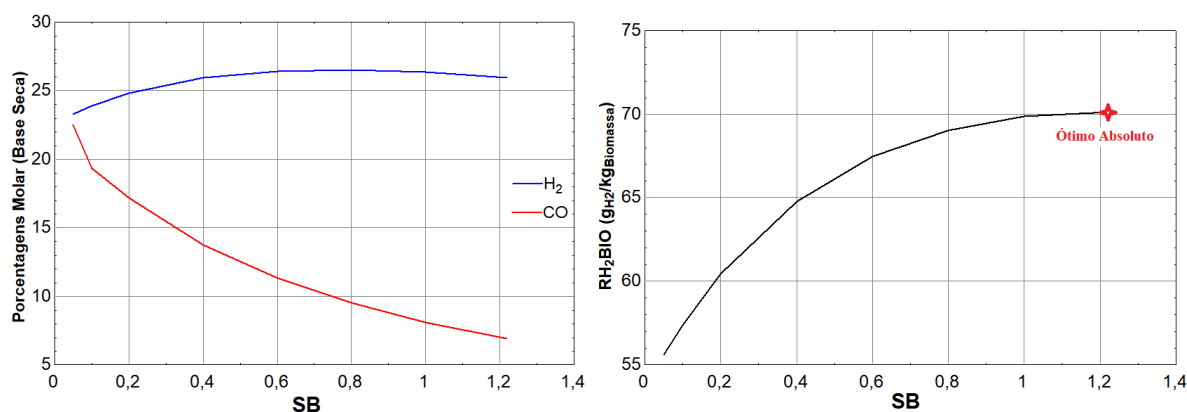
Os resultados demonstram o quão importante é o aprimoramento do gás de síntese quando se busca maximizar a produção de H₂ por meio da gaseificação de biomassa. Para a gaseificação com ar e com oxigênio, houve, em média, um aumento de 94% e 99%, respectivamente, da produção de hidrogênio com a inclusão dos reatores WGS.

4.4 Condições de Análise e Potencial Químico de Produção de H₂ para Gaseificação a Vapor com Aprimoramento por Reatores WGS

Os dados das otimizações apresentados nas seções anteriores consideraram a razão de H₂ por biomassa da saída do gaseificador. Isso gera problemas quando se considera a maximização com o auxílio dos reatores WGS, que têm a função de converter o monóxido de carbono em H₂ com auxílio da adição de vapor em um reator catalítico. Quando se otimiza considerando a razão da saída do gaseificador, o ponto ótimo irá tender ao máximo dessa razão, sem se importar com a conversão do CO por outros meios além da reação de deslocamento gás-água como a reação de combustão parcial do monóxido de carbono. Isso faz com que, nesse ponto ótimo, haja uma conversão muito alta do monóxido de carbono deixando muito pouco para ser convertido dos reatores WGS. Portanto, para a condição de haver reatores WGS no sistema, é necessário otimizar a produção de H₂ levando em consideração a saída do reator de baixa temperatura.

A Figura 25 demonstra o comportamento do H₂ e do CO para diferentes razões SB somente nos pontos ótimos que maximizam H₂ e o comportamento de RH₂Bio com SB também nos pontos otimizados. Fica aparente que a maior sensibilidade da maximização ocorre em condições de SB menores com uma taxa de crescimento maior da massa de H₂ por massa de biomassa. É também justamente nessa região que ocorre a queda mais acentuada do monóxido de carbono nos pontos ótimos. O que essa análise de sensibilidade sugere é que o ponto ótimo para a gaseificação com vapor e aprimoramento com reatores WGS é por volta da região de baixo SB, onde se tem uma relação H₂/CO mais favorável ao monóxido de carbono.

Figura 25 - Curvas dos pontos ótimos por SB para a madeira de eucalipto



Fonte: Elaborada pelo Autor

Dessa forma, para a gaseificação com ar e vapor e aprimoramento com reatores WGS, foi realizado um novo conjunto de otimizações levando em consideração os modelos de equilíbrio dos dois

reatores WGS junto ao modelo de equilíbrio do gaseificador e o parâmetro otimizado foi a produção específica de H_2 ($kg_{H_2}/kg_{biomassa}$) da saída do reator WGS de baixa temperatura (RH_2Bio_2). Com isso, o ponto ótimo deve naturalmente tender a uma relação H_2/CO mais favorável à conversão nos reatores WGS. Esse primeiro conjunto de otimização não considera a entrada de vapor no reator de alta temperatura, ou seja, as eficiências de conversão ficam, de início, dependentes do vapor em excesso do gaseificador. Após estabelecido esse ponto ótimo, vapor é adicionado nos reatores da simulação de modo a elevar as eficiências de conversão dos reatores até próximo dos valores estabelecidos nas condições de gaseificação com ar e com oxigênio.

Otimizações preliminares demonstraram que de fato, quando se considera os reatores na otimização, há uma diminuição significativa no SB ótimo. O bagaço de cana, por exemplo, tem seu ponto ótimo com um SB de 0,282 e temperatura de gaseificação de 818,26 °C. Devido a essa significativa diminuição da necessidade de vapor, foi decidido aumentar a temperatura do vapor superaquecido que entra no gaseificador de 200 °C para 500 °C. Essa mudança acarreta em maiores custos com a caldeira a vapor, mas mantém ainda o grau comparativo considerando a redução de quatro vezes na magnitude de SB com relação a otimização sem os reatores. Além disso, embora não tão significativo quanto a quantidade de vapor injetado, maiores temperaturas tendem a favorecer a produção de hidrogênio.

A Tabela 24 mostra o potencial técnico a partir dos novos pontos ótimos requeridos pela adição dos reatores WGS.

Tabela 24 - Potencial de produção de H_2 pós reatores para gaseificação com ar e vapor

Biomassa	SB	Temperatura de gaseificação (°C)	RH_2Bio	C_{CO} AT	C_{CO} BT	RH_2Bio_2
Bagaço de cana	0,22	799,00	0,0603534	80%	81,067%	0,1036634
Palhiço de cana	0,16	768,72	0,0455368	80%	82,601%	0,0720882
Borra de café gasta	0,10	788,00	0,0689592	80%	80,183%	0,1267932
Espiga de milho	0,29	788,28	0,0565458	80%	81,105%	0,0977059
Palhiço de milho	0,16	783,18	0,0495836	80%	80,688%	0,0917141
Casca de soja	0,14	772,05	0,0461288	80%	81,600%	0,0802881
Casca de cacau	0,15	769,49	0,0491730	80%	80,854%	0,0913299
Madeira de Eucalipto	0,25	810,39	0,0611143	80%	81,268%	0,1026765
Casca de Eucalipto	0,26	813,59	0,0582918	80%	80,899%	0,1017288

AT: Alta temperatura; BT: Baixa temperatura. Fonte: Elaborada pelo Autor

Conforme esperado, a adição de vapor no gaseificador ao invés de somente nos reatores WGS produz resultados bastante próximos dos obtidos quando se otimiza ambos os casos da gaseificação com ar e com ar e vapor. Isso se deve ao fato de que a reação de deslocamento gás-água é o que propulsiona

a produção extra de H_2 em ambos os casos. Portanto, o potencial superior de produção de H_2 da gaseificação com adição de vapor superaquecido só se justifica na condição de não haver aprimoramento posterior dos gases por meio de reatores WGS.

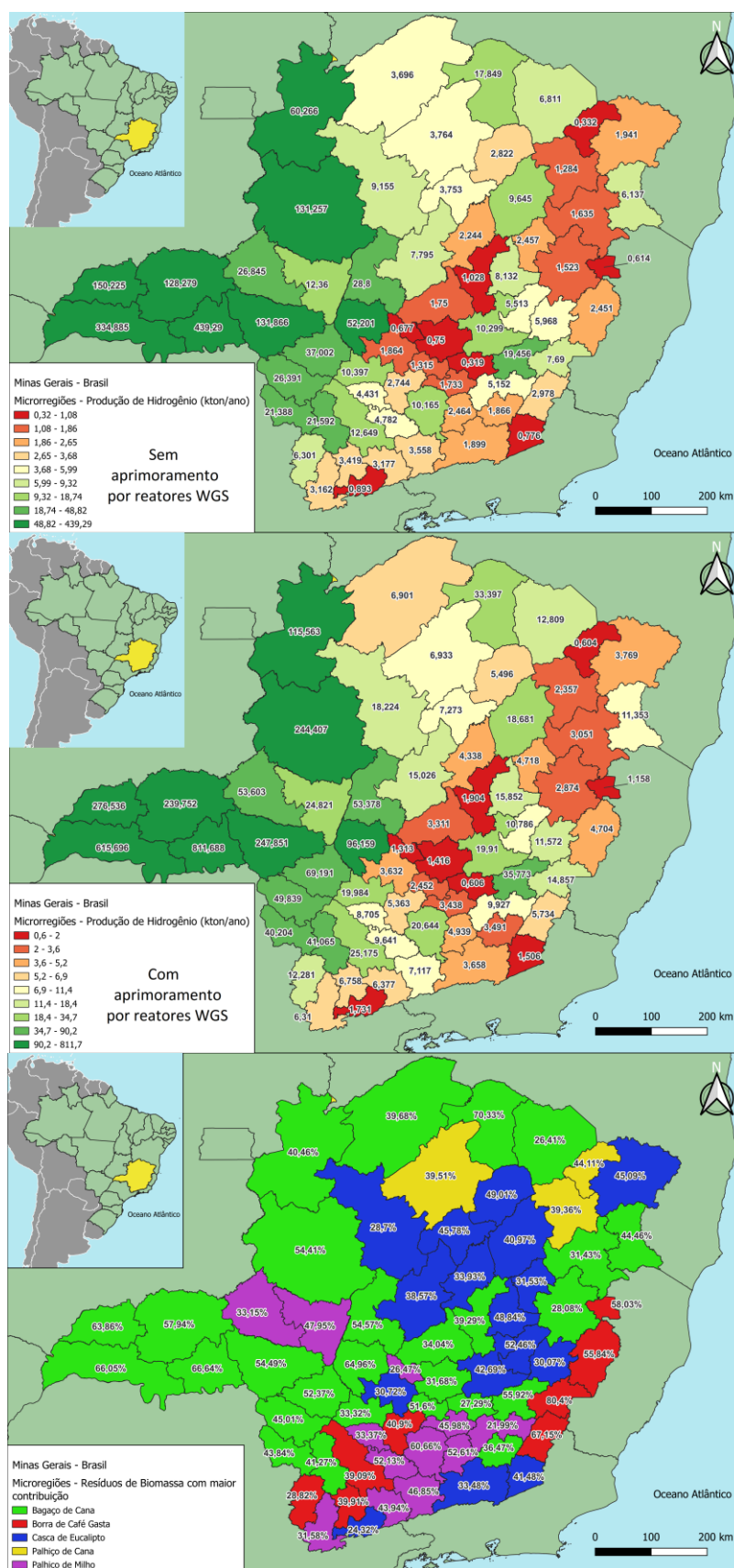
4.5 Potenciais de Produção de H_2 por meio da gaseificação de resíduos de biomassa do estado de Minas Gerais

Utilizando os dados de produção do IBGE quanto a produção em toneladas e, para o caso do palhicho de cana, por área plantada, foi estimado a produção do resíduo baseado na proporção do mesmo com a cultura de origem. Com a razão H_2 e biomassa maximizada e a proporção da biomassa que não gaseifica (cinzas), foi possível estimar a máxima produção teórica de H_2 . No entanto, não é viável ou mesmo possível em termos econômicos e de logística utilizar 100% dos resíduos. Para algumas culturas, é necessário que pelo menos uma porcentagem dos resíduos permaneça no solo para evitar maiores impactos no mesmo. Estudos que tratam de recolhimento de palhas no campo, como é o caso de Michelazzo e Braunbeck (2008), Macedo e Cortez (2000) e Ripoli (2002), utilizam valores de 50% de taxa de retirada. Dessa maneira, este estudo considerou três cenários de recolhimento dos resíduos (η): um valor conservador (15%), moderado (30%) e otimista (50%).

Para a madeira de eucalipto, por não ser necessariamente um resíduo, foi considerado uma porcentagem de 10% do que é produzido como resíduo para a gaseificação. Esse valor busca encapsular resíduos provenientes de diferentes processos de utilização, como na construção civil, serragem e até mesmo uso direto. Portanto, 10% do total produzido da madeira é o valor máximo teórico considerado de destinação da madeira de eucalipto para gaseificação. Assim, por fim, com um η de 15%, a quantidade da madeira que acabaria de fato sendo utilizada na análise será de 1,5% da madeira produzida no caso do cenário conservador.

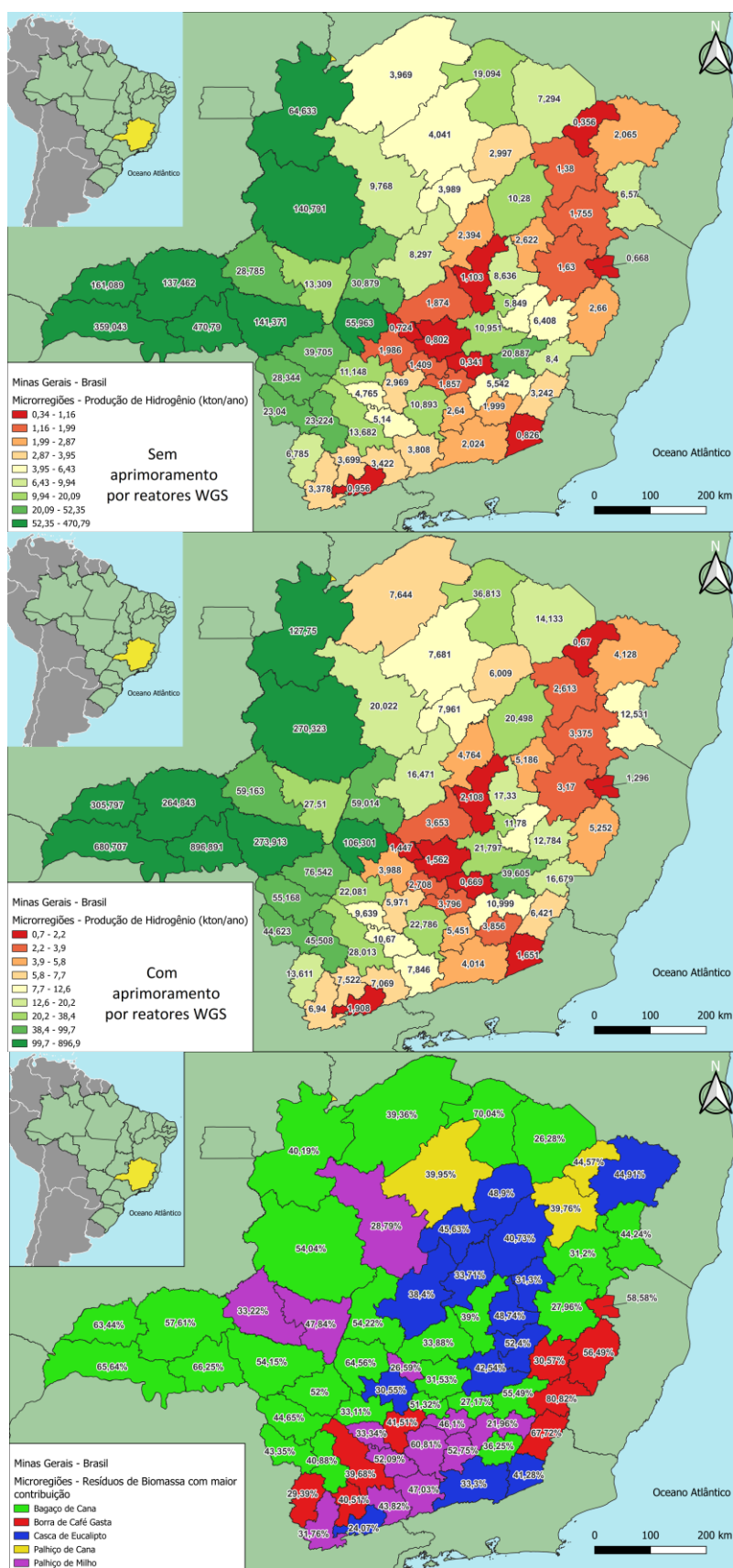
As Figuras 26, 27 e 28 apresentam o potencial teórico ($\eta = 100\%$) de produção de hidrogênio para os cenários com e sem aprimoramento por reatores WGS, para as microrregiões de Minas Gerais, considerando a gaseificação de todos os resíduos propostos. Também é apresentado o resíduo com maior potencial da microrregião e a sua participação percentual no potencial. Esses valores não consideram perdas ou o fator de recuperação de H_2 do PSA na unidade.

Figura 26 - Potencial de produção teórico de hidrogênio por gaseificação com ar para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais



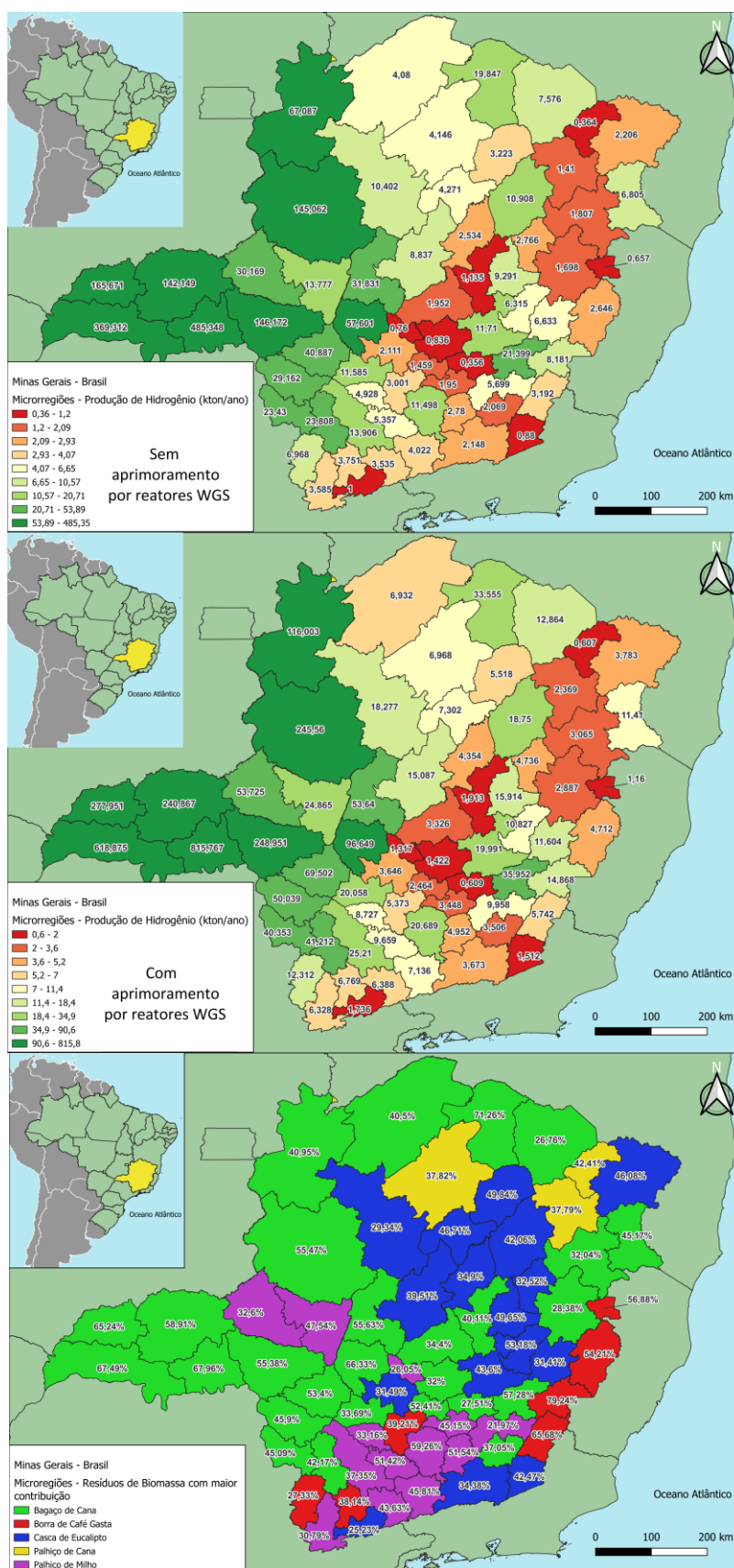
Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 27 - Potencial de produção de hidrogênio por gaseificação com oxigênio para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais



Fonte: Elaborada pelo Autor

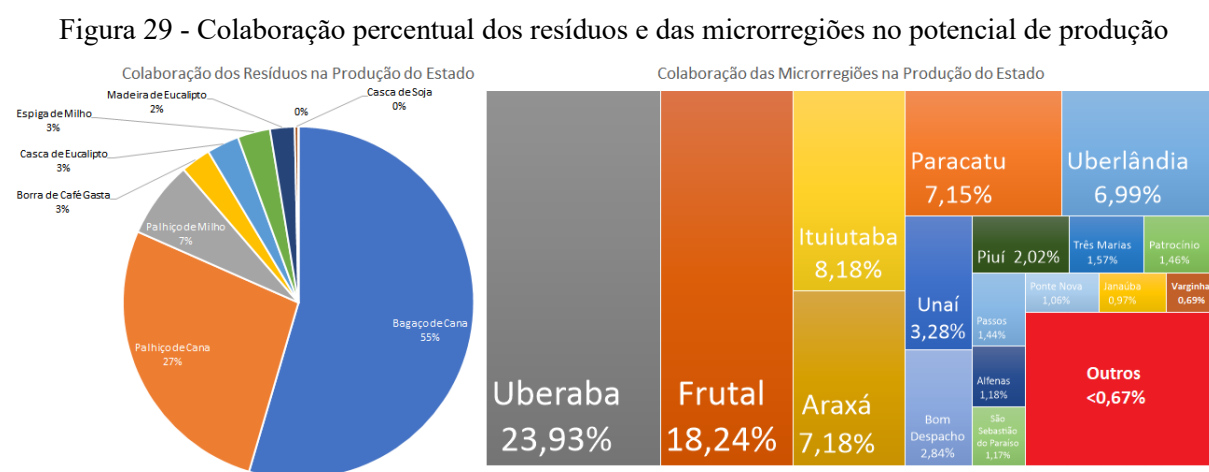
Figura 28 - Potencial de produção de hidrogênio por gaseificação com ar e vapor para cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais



Fonte: Elaborada pelo Autor

Portanto, o potencial de produção total do estado de Minas Gerais, para gaseificação com aprimoramento dos gases por reatores WGS, é de 3.429.581,01 ton ano⁻¹ para a gaseificação com ar, 3.790.627,98 ton ano⁻¹ para a gaseificação com oxigênio e 3.445.327,08 ton ano⁻¹ para a gaseificação ar/vapor.

O bagaço de cana é o resíduo com maior potencial no estado, contribuindo com 55,2% do potencial de produção e, se somado com o palhiço de cana, os resíduos da cana de açúcar correspondem a 82,8% do potencial total (Figura 29). O restante da contribuição é dado pelos resíduos do milho, café e eucalipto, enquanto a contribuição dos demais resíduos, como a casca de soja e cacau, é pouco significativa. Entre as microrregiões mineiras, nove delas são responsáveis por 79,8% do potencial, com destaque para Uberaba com 23,9% e Frutal com 18,24% (Figura 29). As proporções apresentadas na Figura 29 não se alteram significativamente para a gaseificação com oxigênio puro ou ar/vapor.



Fonte: Elaborada pelo Autor

4.6 Potenciais Econômicos da Produção de H₂ por meio da gaseificação de resíduos de biomassa do estado de Minas Gerais

Para estimar os custos de cada um dos componentes da planta de produção por gaseificação, algumas considerações precisaram ser feitas:

- Foi adotado um PSA com condições de entrada de 10 bar e 50 °C, separação de H₂ com uma pureza de 99,999% e fator de recuperação de 89%;
- Para o trocador de calor do 1º esquema de produção da planta (Figura 10), foi considerado água de resfriamento entrando com 25 °C e saindo com 200 °C e o gás entrando com a temperatura da zona de redução (temperatura obtida no modelo de equilíbrio químico) e saindo com 150 °C;
- Para o 2º esquema de produção (Figura 12), assim como no caso anterior, é considerado que os gases deixam o gaseificador na temperatura de equilíbrio químico e entram, com essa mesma

temperatura no trocador de calor 1 (TC1). Os gases deixam o TC1 a 500 °C e a água de resfriamento do mesmo entra com 25 °C e sai com 200 °C. No TC2, os gases entram 450 °C e saem com 410 °C e a água de resfriamento entra com 25 °C e sai com 300 °C. O vapor adicionado no reator WGS de alta temperatura e produzido pelo TC3 e TC4. Os gases entram com 400° C e saem com 200 °C no TC3 e entram com 200 °C e saem com 40°C (REDDY e SMIRNIOTIS, 2015). A água de resfriamento entra com 25 °C e sai com 120 °C no TC4 e segue para o TC3 que aquece o vapor até 380 °C. Por fim, foi considerado uma perda de carga nos trocadores de 100 kPa, sendo esse valor uma aproximação baseada na vazão mássica necessária da água de resfriamento e os valores relatados em IBM (2021);

- A temperatura do reator WGS de alta temperatura é de 400 °C e o de baixa temperatura de 250 °C. Além disso, os catalisadores conseguem acelerar a reação de deslocamento gás-água de modo que equilíbrio químico é alcançado nos reatores (REDDY e SMIRNIOTIS, 2015);
- Para a gaseificação com vapor, foi considerado um excedente de resíduo de biomassa a mais do usado na gaseificação para a produção de vapor pela caldeira e esse excedente é somado aos custos da biomassa a ser gaseificada. A média desse excedente é de em média 4% a mais da biomassa utilizada na gaseificação;
- Para os compressores, foram utilizados os seguintes dados:

Tabela 25 - Dados para o cálculo da potência de acionamento dos compressores

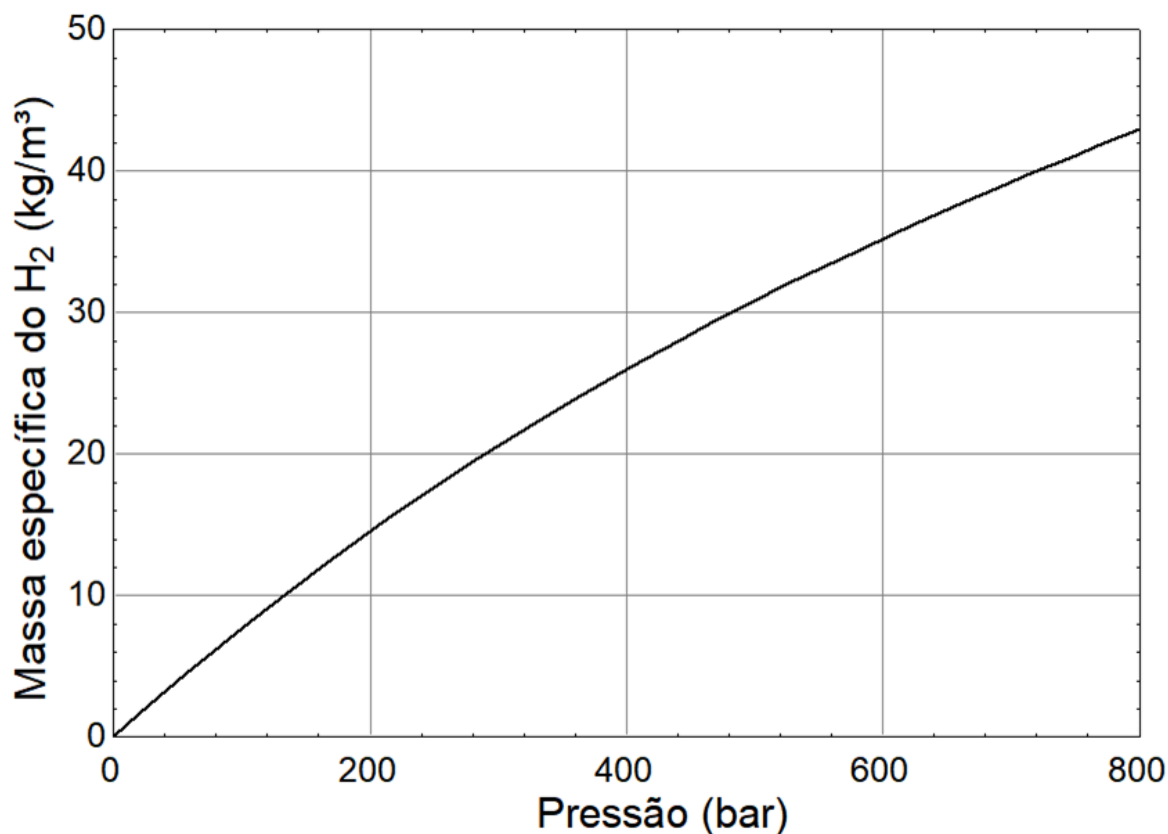
	Compressor de Ar	Gás de Síntese	Complexo de compressão de H ₂
Fator de compressibilidade (Z)	0,99987	0,9982	1,00558
Coefficiente isentrópico (k)	1,4	1,36	1,41132
Massa Molar (kg/kmol)	28,9645	Depende do syngas	2,01594
Pressão na entrada (P ₁) (kPa)	101,325	101,325	1000
Pressão na saída (P ₂) (kPa)	200	1000	43000
Temperatura na entrada (T ₁) (K)	298,15	323,15	313,15
Eficiência do compressor	0,75	0,75	0,75
Eficiência elétrica do motor	0,85	0,85	0,85

Fonte: Elaborada pelo Autor

A massa molar do gás de síntese varia em função da sua composição para o ponto de operação que maximiza a produção de hidrogênio, sendo, portanto, distinta para resíduo de biomassa.

O gás hidrogênio possui uma massa específica muito pequena sob condições normais de temperatura e pressão. Dessa forma, não é viável o armazenamento sob baixas pressões. A Figura 30 apresenta o comportamento da massa específica do hidrogênio pela pressão sob uma temperatura fixa de 25 °C.

Figura 30 - Comportamento da massa específica do H₂ com a variação da pressão para uma temperatura fixa de 25 °C



Fonte: Elaborada pelo Autor

Para a análise econômica, foram considerados tanques de armazenamento de alta pressão em cascata, com dimensões de 0,4 metros de diâmetro, 9,1 metros de comprimento e espessura de parede de 0,04 metros com hidrogênio armazenado a uma pressão de 430 bar (PARKS, 2014). Sob essa pressão, o hidrogênio possui uma massa específica de 27,47 kg m⁻³. Admite-se o uso de uma quantidade de tanques necessária para armazenar a produção de H₂ de um dia, ou seja, a produção diária de H₂ é comercializada no mesmo dia.

Após estimados os custos da planta de produção de hidrogênio de cada uma das microrregiões de Minas Gerais, foi montado o fluxo de caixa cujos dados de análise são apresentados na Tabela 26. O valor da taxa de depreciação utilizada foi baseado nos valores de Habgood; Hoadley e Zhang (2015), Tijmensen et al. (2002) e Jorapur e Rajvanshi (1997).

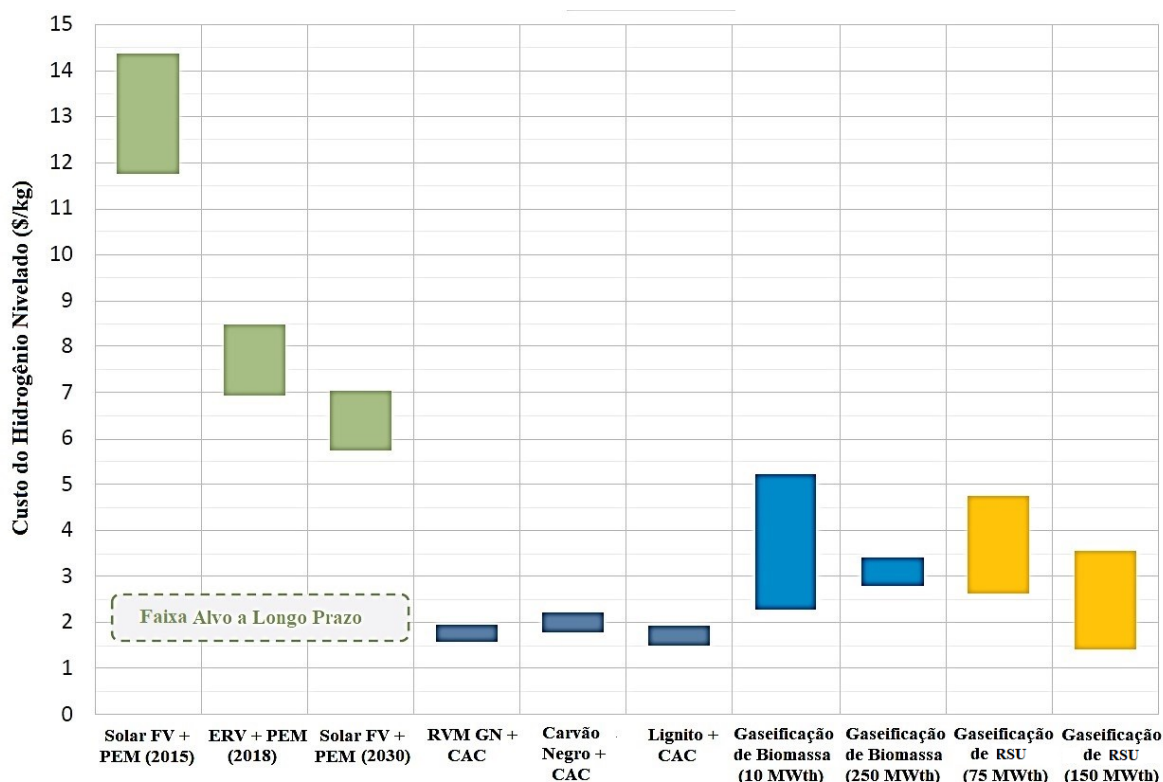
Tabela 26 - Dados da análise econômica

Fator de Disponibilidade	85%
ICMS, IPI, PIS, Cofins	18%
IRPJ/CSL	35%
Vida útil do projeto (anos)	20
Taxa Mínima de Atratividade	15%
Taxa de Depreciação	14,4%

Fonte: Elaborada pelo Autor

Uma das métricas importantes para a avaliação da viabilidade econômica de se produzir hidrogênio é seu custo nivelado de produção. Este custo é determinado considerando o preço de venda do hidrogênio que faz com que a taxa interna de retorno se iguale a taxa mínima de atratividade, ou quando o VPL zera no último ano de vida do projeto. Na revisão de Shahabuddin et al. (2020), os autores verificaram a faixa de custo nivelado por quilo de hidrogênio de diferentes rotas de produção, como apresentado na Figura 31.

Figura 31 - Custo do hidrogênio de diferentes rotas de produção



FV: Fotovoltaico. PEM: Membrana eletrolítica de polímero - Tipo de eletrolisador. ERV: Energia Renovável Variável, RVM: Reforma a Vapor do Metano; GN: Gás Natural. CAC: Captura e Armazenamento de Carbono. RSU: Resíduo Sólido Urbano. Fonte: Adaptado de Shahabuddin et al. (2020)

Utilizando como referência o estudo de Shahabuddin et al. (2020) para o custo de produção do hidrogênio, foram estabelecidos ranques qualitativos quanto a viabilidade da produção nas

microrregiões de Minas Gerais (Tabela 27).

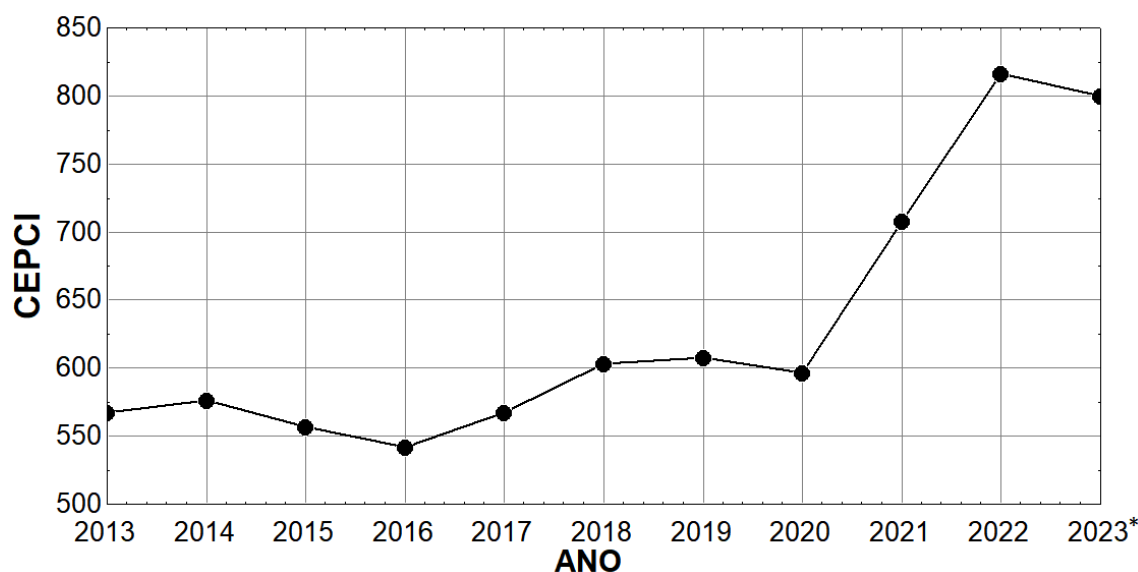
Tabela 27 - Ranque qualitativo para o custo de produção de H₂

Acima de 14,5 \$ kg ⁻¹	Inviável
De 8,5 até 14,5 \$ kg ⁻¹	Altíssimo Custo
De 5,5 até 8,5 \$ kg ⁻¹	Alto Custo
De 3 até 5,5 \$ kg ⁻¹	Moderado
Abaixo de 3 \$ kg ⁻¹	Baixo Custo

Fonte: Elaborada pelo Autor

Antes de apresentar os resultados, vale apontar um aspecto que contribuiu significativamente no custo de produção de hidrogênio no período analisado. Como pode ser observado na Figura 32, a média anual do CEPCI aumentou de forma muito significativa de 2020 até 2022. Como o CEPCI corrige as estimativas de custos dos equipamentos ao longo dos anos, o aumento observado desse fator de correção em 2022 causou uma elevação significativa dos custos e isso impacta diretamente no custo de produção do hidrogênio. O aumento drástico desse índice ocorreu principalmente devido a pandemia de COVID-19. Com a retomada de crescimento da economia mundial pós-pandemia, é esperado uma diminuição do CEPCI para os próximos anos e isso já pode ser observado na tendência nos valores de 2023. Portanto, essa análise econômica foi realizada em um dos piores períodos na economia mundial recente e os resultados apresentados aqui podem ser observados sobre uma ótica de que são bastantes conservadores. A tendência é de uma melhora significativa dos índices econômicos encontrado nesse estudo para os próximos anos.

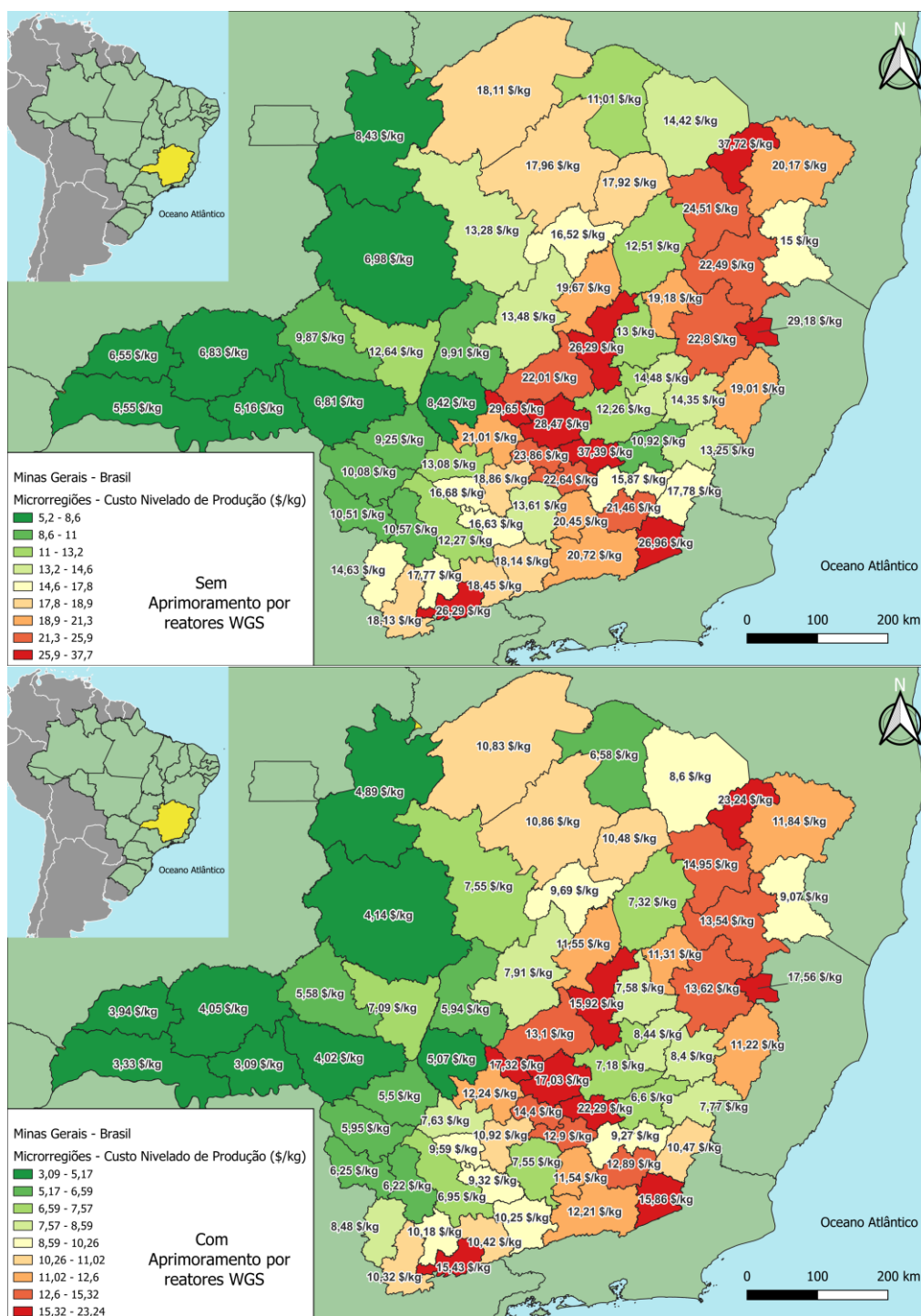
Figura 32 - Média anualizada do CEPCI ao longo dos anos



*Média de janeiro até outubro de 2023. Fonte: Chemical Engineering (2023)

A seguir, na Figura 33, é apresentado a comparação do custo nivelado do hidrogênio produzido com gaseificação com ar, para um cenário moderado de uso dos resíduos ($\eta = 30\%$), entre o 1º (sem aprimoramento do gás de síntese) e 2º esquema (com aprimoramento do gás de síntese) de planta de produção (Figura 10 e Figura 12).

Figura 33 - Comparação dos custos nivelados de produção de hidrogênio para a gaseificação com ar e 30% de utilização de resíduos entre o esquema de planta com e sem aprimoramento dos gases



Fonte: Elaborada pelo Autor

O aumento da produção de H₂ pelos reatores WGS supera em muito os custos envolvidos na aquisição de novos equipamentos e nos gastos com a operação e manutenção o que se reflete na redução do custo nivelado. A Figura 33 mostra que, em média, o custo nivelado de produção de H₂ é 70,3% maior em um sistema sem aprimoramento dos gases por reatores WGS. Sem aprimoramento de gases, com 30% de coleta de resíduos, somente Uberaba atinge um LCOH na faixa de valores moderados e, com aprimoramento, 8 microrregiões entraram na faixa de custo moderado e Uberaba entrou na faixa de baixo custo.

Portanto, levando em conta o quão essencial economicamente é a presença dos reatores WGS na produção, os resultados a seguir só irão apresentar os valores de produção com aprimoramento dos gases. As Figuras 34, 35 e 36 apresentam os resultados dos três tipos de gaseificação estudados para os três cenários de aproveitamento de resíduos (15%, 30% e 50%). A Figura 34 não mostra o mapa de aproveitamento de 30% de resíduos porque já foi apresentado na Figura 33.

Figura 34 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com ar (2º esquema)
avaliado pelo custo nivelado de produção

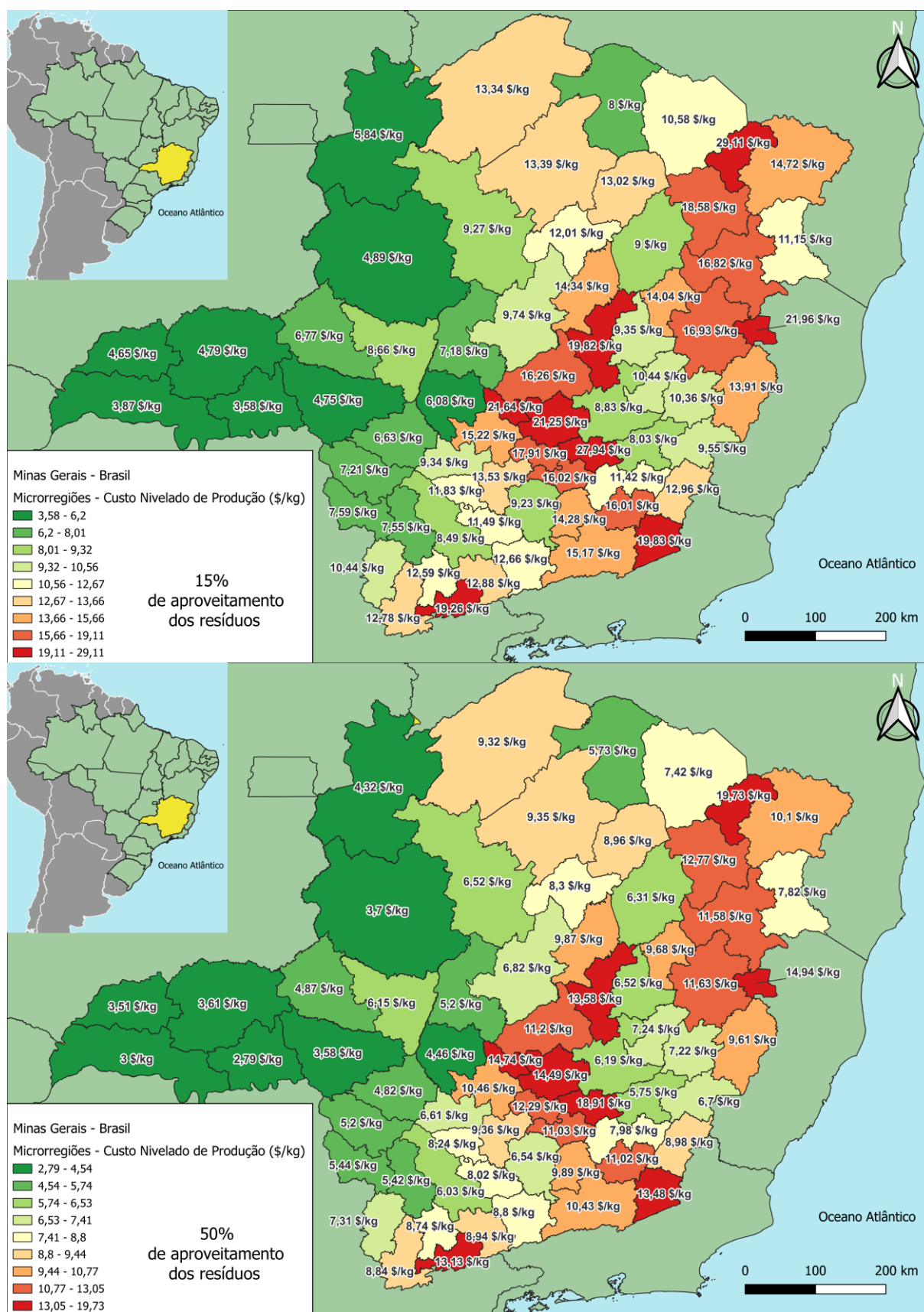


Figura 35 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com oxigênio (2º esquema) avaliado pelo custo nivelado de produção

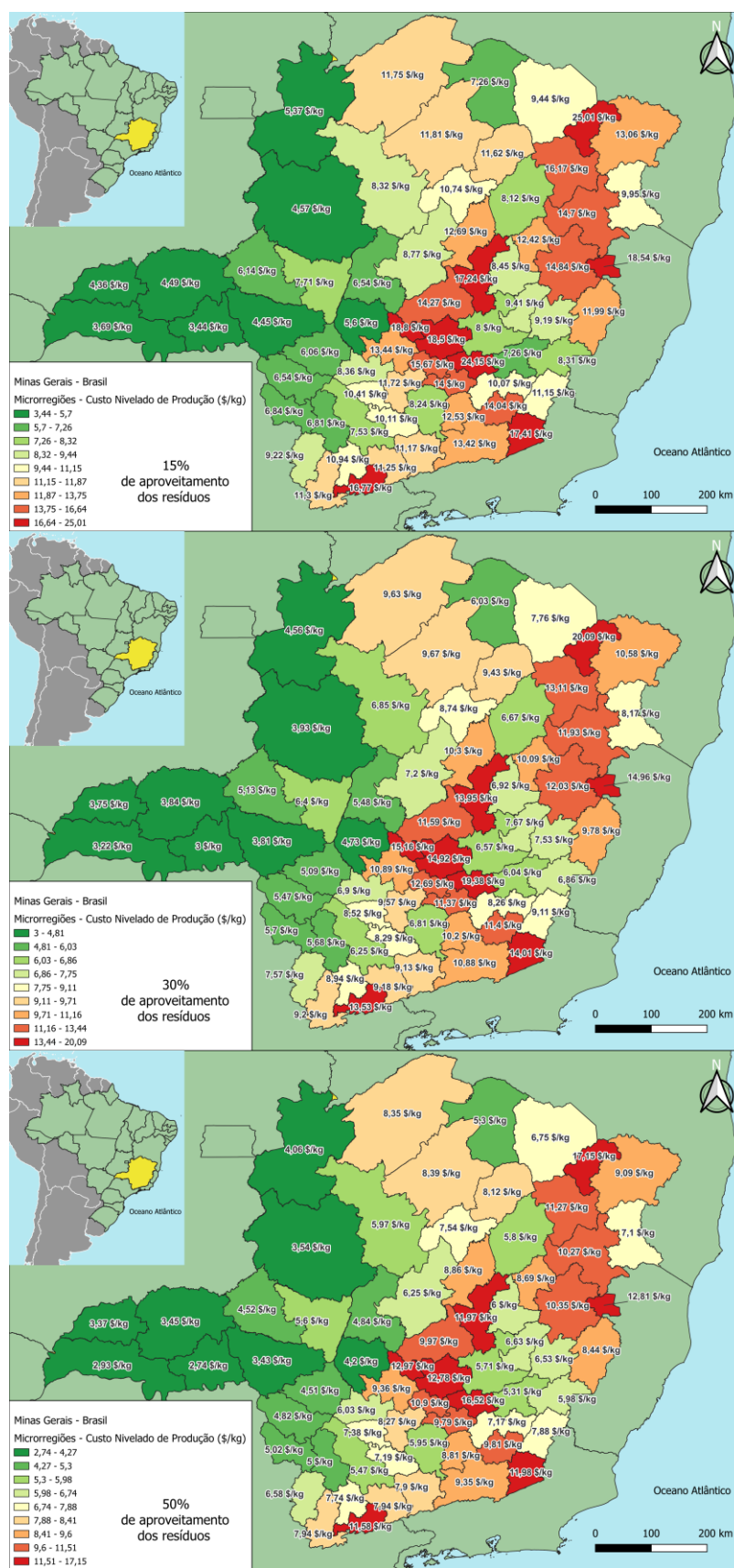
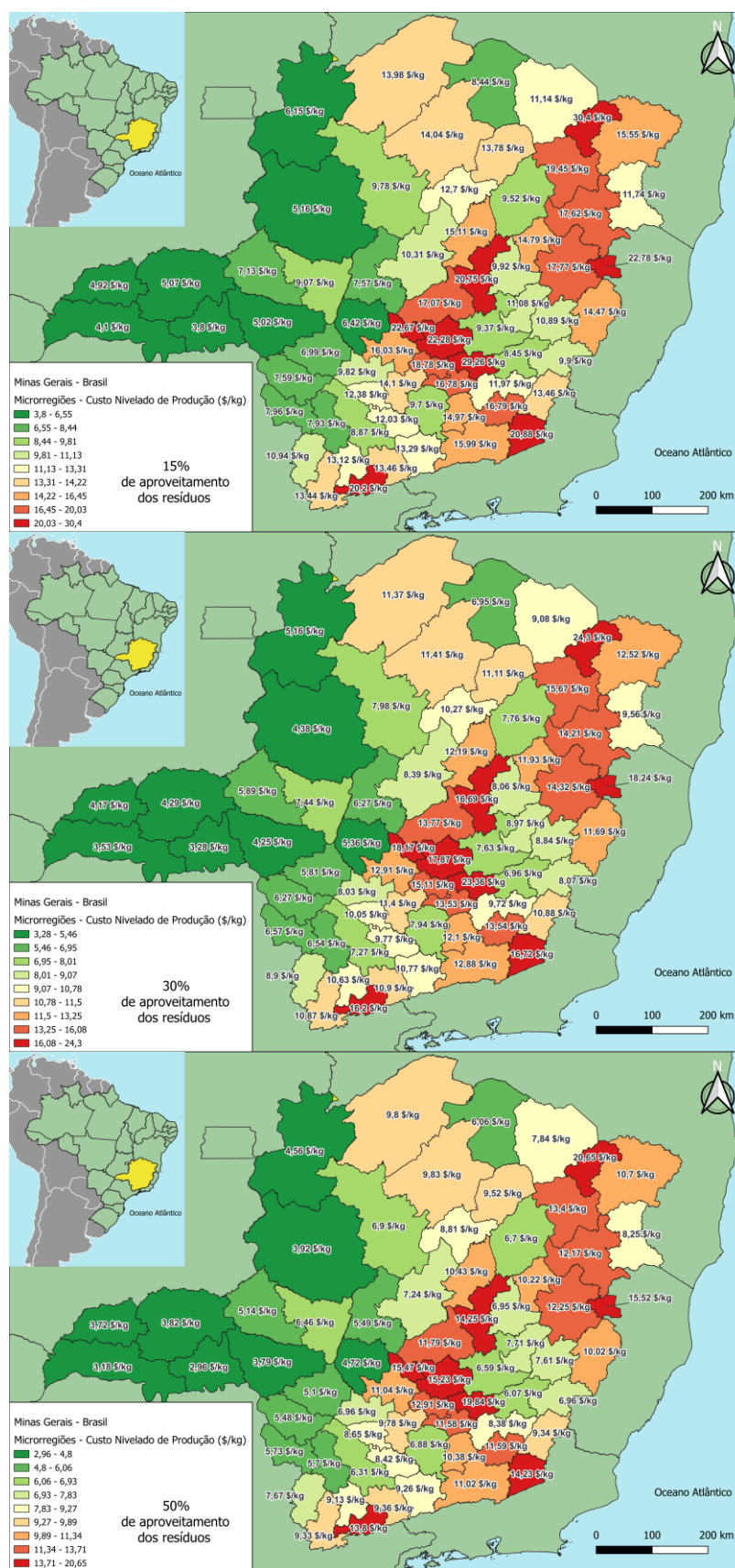


Figura 36 - Potencial econômico da produção de hidrogênio por gaseificação com ar e vapor (2º esquema) avaliado pelo custo de produção



Fonte: Elaborada pelo Autor

Em todos os três cenários de agente de gaseificação, Uberaba, Frutal, Ituiutaba, Araxá, Uberlândia e Paracatu se destacam como as microrregiões com melhores resultados, sendo todas elas grandes destaques na produção de cana de açúcar. O motivo principal do destaque dessas microrregiões é a produtividade dos resíduos estudados. Uberaba e Frutal são responsáveis por 42,2% da produção dos resíduos de Minas Gerais e essa maior escala de produção tende a aliviar o custo dos equipamentos, devido ao fator de escala (Equação 51). Ituiutaba, Araxá, Uberlândia e Paracatu são responsáveis por cerca de 8% a 6% da produção de resíduos do estado. Ao contrário, devido a pouca econômica de escala, Pedra Azul, Ouro Preto e Mantena consistentemente mostraram os piores resultados com custos altíssimos e inviáveis de produção de H_2 .

A disponibilidade dos resíduos (η) também afeta fortemente a viabilidade de produção e isso acontece também pelo efeito de escala da estimativa de custo. Também vale notar que, devido a própria natureza da estimativa de custo (Equação 51), o decréscimo do custo não acontece de forma linear com o aumento da capacidade da planta de produção tendendo a se estabilizar, no cenário otimista, entre um custo de 2,80 a 3,60 \$/kg de hidrogênio para uma contribuição de resíduos no estado superior a 7% ou, para o caso dessas análise, cerca de 1,5 milhões de toneladas anuais de resíduos. É necessário, portanto, uma produção de grande escala quando se busca um custo mais competitivo de produção.

Para a gaseificação com oxigênio é necessário a inclusão de uma unidade de separação de ar para a produção do oxigênio *in situ*. Devido ao fator de escala elevado da unidade de separação de ar, para Uberaba e Frutal, a unidade de separação representa mais de 40% do custo do gaseificador (o componente mais caro), mas, de modo geral, o custo é, em média, 18,5% do custo do gaseificador para as demais microrregiões. É importante ressaltar que vários dos componentes utilizados na gaseificação com oxigênio possuem a vazão de gás de síntese como capacidade na estimativa de seu custo, e a utilização do oxigênio como agente gaseificante possibilita o uso de equipamentos menores devido ausência de nitrogênio e, portanto, menor vazão. Os equipamentos de lavagem do gás foram os mais impactados pela redução da vazão. Apesar do custo elevado da unidade de separação de ar, a gaseificação com oxigênio permite um aumento na produção de hidrogênio, resultando em um custo nivelado do hidrogênio um pouco menor que o observado na gaseificação com ar.

No caso da gaseificação com ar/vapor, a inclusão de uma caldeira a vapor, mais seus custos associados e o aumento do custo de alguns dos componentes devido ao aumento da vazão de gás produzido na gaseificação, não é coberto pelo pequeno aumento observado na produção de hidrogênio. Dessa forma, os custos nivelados do hidrogênio para esse cenário são um pouco maiores do que os observados com o ar.

Portanto, quanto a viabilidade econômica da gaseificação de resíduos de biomassa para a produção de hidrogênio em Minas Gerais, haverá uma dependência direta quanto as regiões com maior produção de resíduos. A utilização de aprimoramento de gases por reatores WGS é essencial. E entre os tipos de agentes oxidantes a serem utilizados, todos apresentaram custos semelhantes entre si, mas o uso

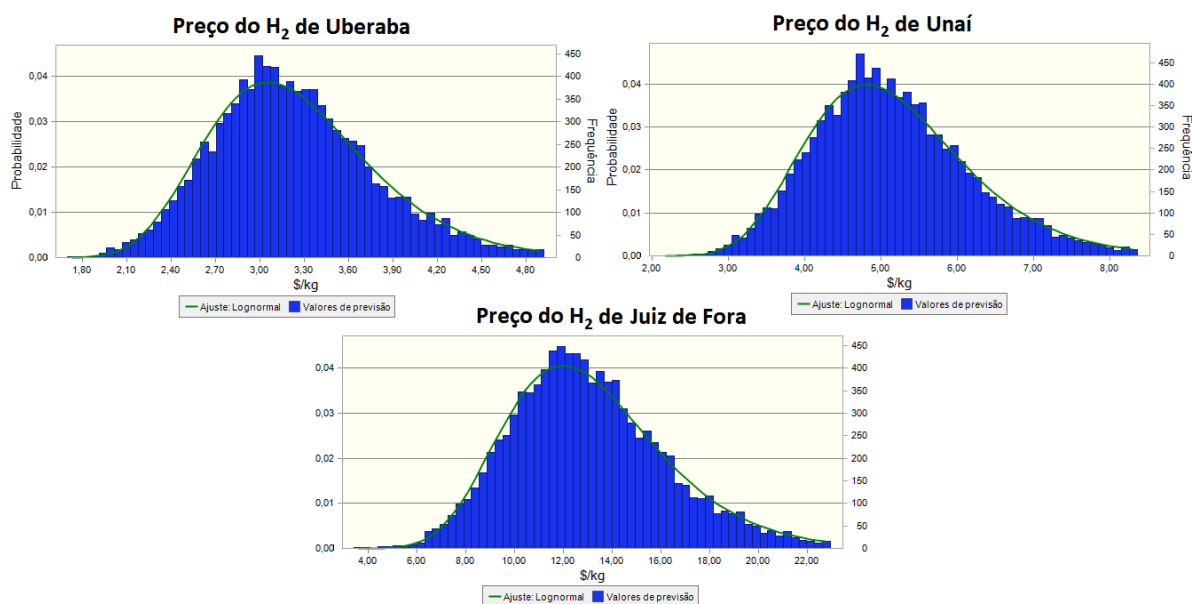
do oxigênio, mesmo com os custos da unidade de separação de ar *in situ*, ainda se mostrou superior economicamente, seguido pelo uso do ar e pelo uso do ar/vapor.

4.7 Resultados da Simulação de Monte Carlo

Foram realizadas as simulações para os três cenários de gaseificação com aprimoramento dos gases: ar, oxigênio e ar/vapor. Para cada um desses três cenários, foram escolhidas três microrregiões representantes do melhor, moderado e pior resultado econômico. As microrregiões escolhidas foram Uberaba, Unai e Juiz de Fora, respectivamente.

Portanto, dadas as condições de distribuição probabilística pressupostas da seção 3.8, com 10000 avaliações para cada uma das simulações, são apresentados, nas Figura 37, 38 e 39, os resultados das simulações para os casos da gaseificação com ar, oxigênio e ar/vapor.

Figura 37 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unai e Juiz de Fora para gaseificação com ar

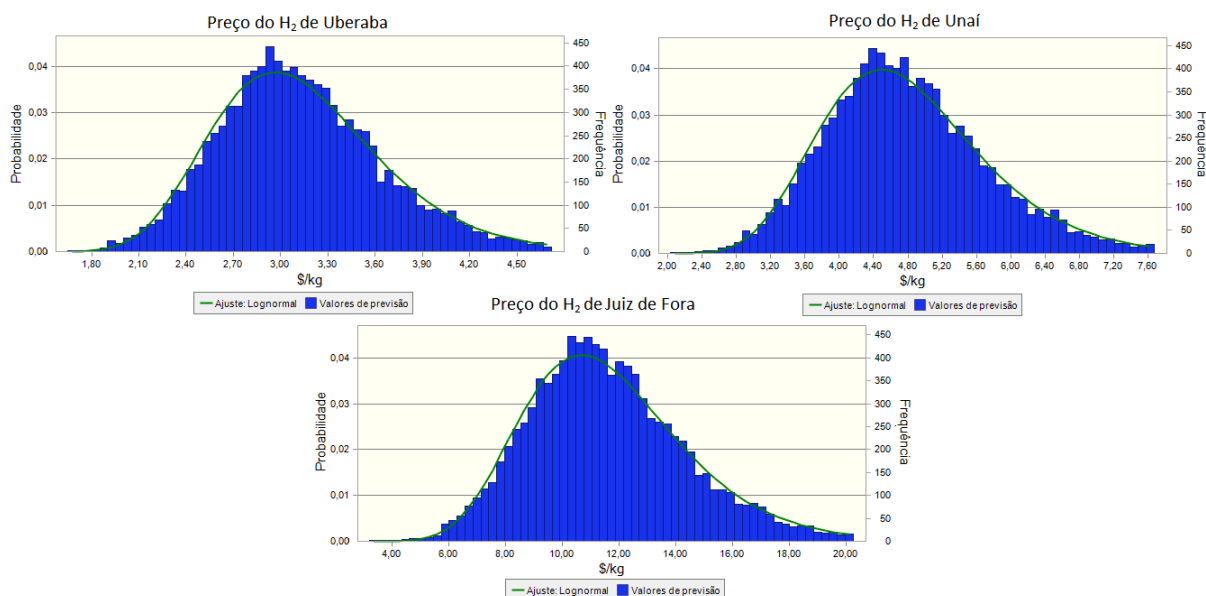


Fonte: Elaborada pelo Autor

Uberaba, a microrregião com melhores resultados econômicos de Minas Gerais, no cenário moderado de aproveitamento dos resíduos de biomassa (30%), tem um custo nivelado de produção de 3,09 \$/kg no caso base. A simulação de Monte Carlo mostrou que há, em Uberaba, 66,76% de probabilidade de se conseguir um custo nivelado de produção menor que 3,09 \$/kg e que existe 64% de probabilidade de um custo superior a 3,00 \$/kg. Unai têm 65,6% de chance de se manter na faixa de custo moderado, 33,7% de entrar na faixa de alto custo e apenas 0,6% de entrar na faixa de baixo custo. Por fim, a microrregião de Juiz de Fora, tem menos de 0,2% de chance de entrar na faixa moderada, possui 29,4% de entrar na faixa de inviabilidade e 70,5% de chance de permanecer do faixa de alto e

altíssimo custo.

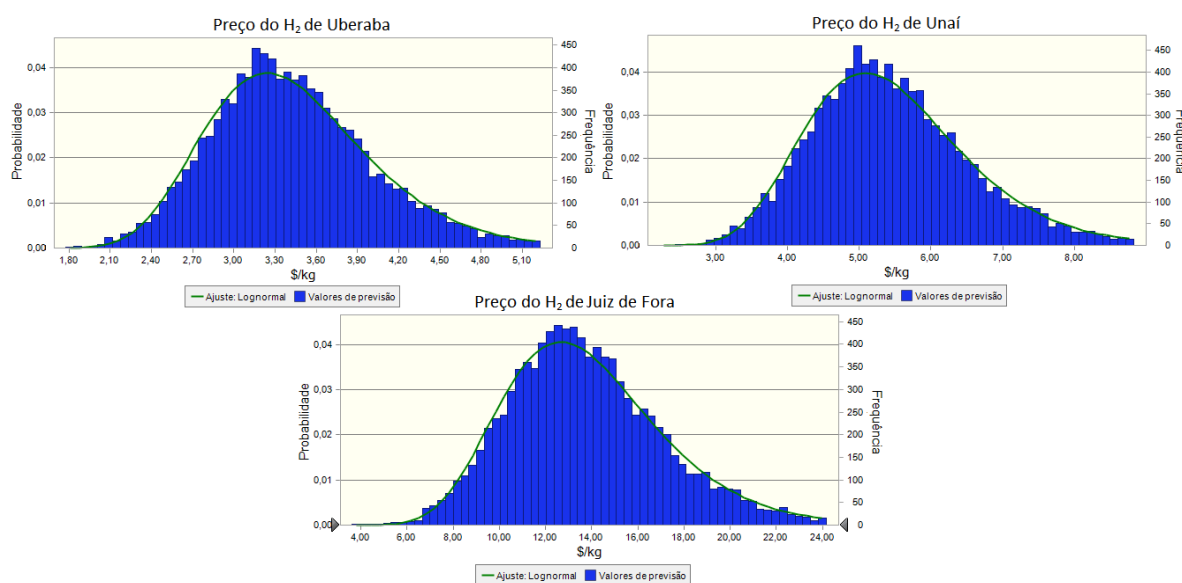
Figura 38 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unaí e Juiz de Fora para gaseificação com oxigênio



Fonte: Elaborada pelo Autor

Para a gaseificação com oxigênio e aprimoramento de gases, há um custo nivelado no caso base de Uberaba de 3,00 \$/kg para o cenário de uso moderado dos resíduos (30%). Existe 43,8% de probabilidade de se obter um custo inferior a esse caso base e 56% de que o custo entre na faixa moderada (acima de 3,00 \$/kg). Resultados levemente superiores aos obtidos na gaseificação com ar. Unaí tem apenas 1,4% de chance de conseguir um valor de baixo custo, 76,8% de permanecer na faixa de custo moderado e 22% de entrar na faixa de alto custo. Juiz de Fora tem cerca de 0,3% de chance de entrar na faixa moderada, 15,8% de entrar da faixa de inviabilidade e 83,9% de ficar nas faixas de alto e altíssimo custo. Dessa forma, também, ambos Unaí e Juiz de Fora demonstraram resultados melhores aos observados na gaseificação com ar.

Figura 39 - Distribuições de probabilidade de Uberaba, Unaí e Juiz de Fora para gaseificação com ar/vapor

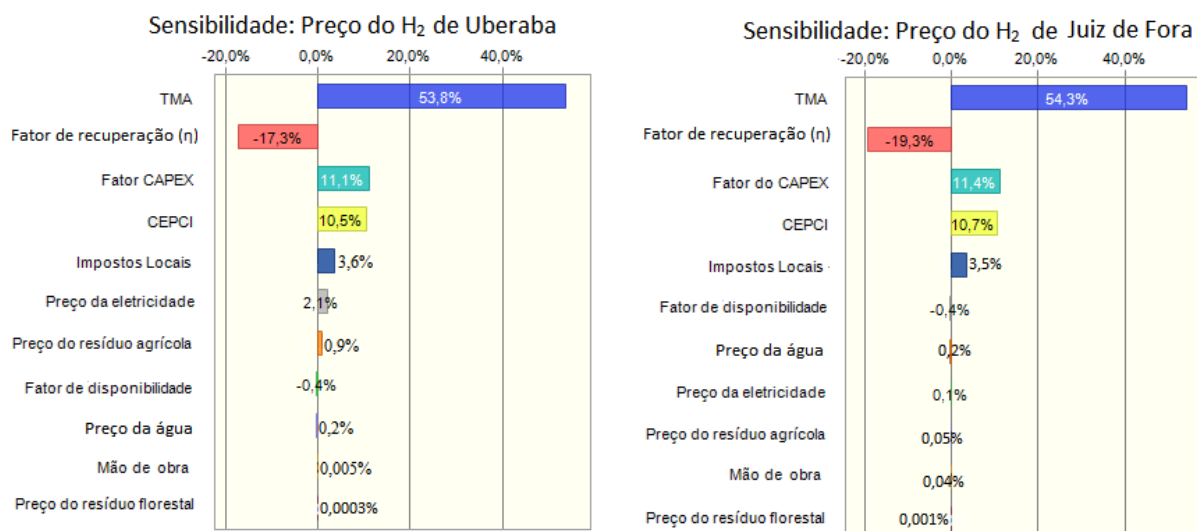


Fonte: Elaborada pelo Autor

Por fim, para a gaseificação com ar/vapor, também no caso moderado do uso de resíduos, o caso base chega a um custo nivelado de 3,28 \$/kg para Uberaba. Há 43,4% de probabilidade de se obter, em Uberaba, um custo inferior ao do caso base e 75,73% do mesmo permanecer na faixa moderada. Unaí tem 0,3% de entrar na faixa de baixo custo, 59,1% de permanecer na faixa moderada e 44,3% de entrar na faixa de alto custo. E Juiz de Fora tem 0,1% de chance de entrar na faixa moderada, 40,3% de chance de entrar na faixa de inviabilidade e 59,7% de chance de permanecer nas faixas de alta e altíssimo custo. A gaseificação com ar/vapor demonstrou consistentemente resultados inferiores aos casos anteriores, em termos de custos.

A seguir é apresentado o resultado da análise de sensibilidade para as três condições de agente gaseificante com aprimoramento de gases utilizando as cidades de Uberaba e Juiz de Fora, por serem extremos no potencial econômico, permitindo entender a contribuição de cada um dos parâmetros de entrada examinados na formação do custo nivelado de produção do hidrogênio (Figura 40, 41, 42).

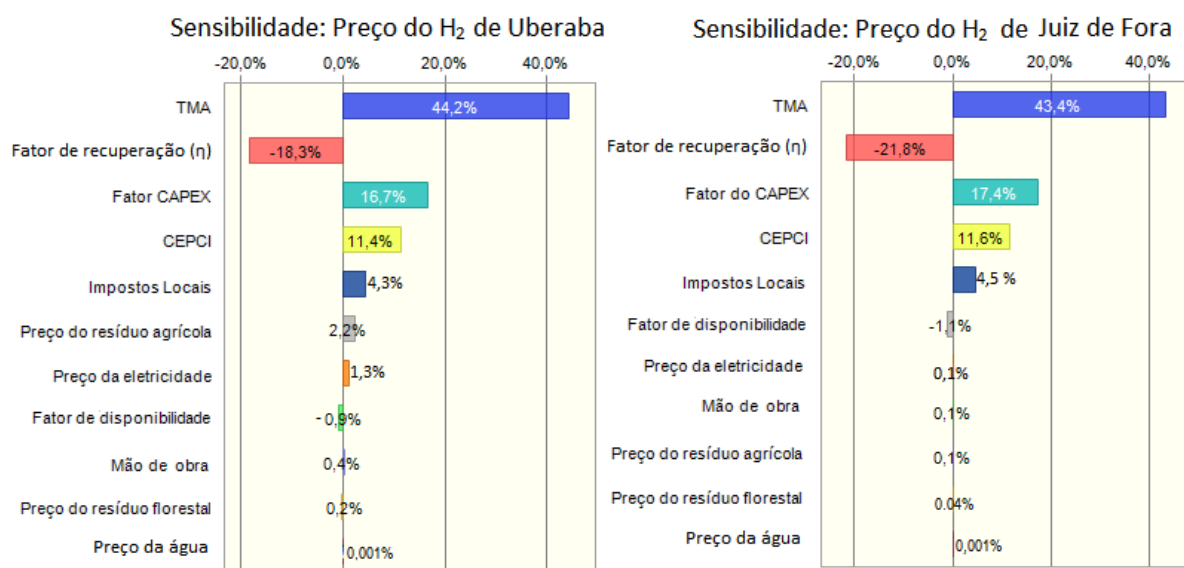
Figura 40 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com ar



Fonte: Elaborada pelo Autor

A taxa mínima atratividade é o parâmetro com o maior peso no custo nivelado, com cerca de 53% da contribuição. Em seguida, vem o fator de recuperação dos resíduos, ou seja, a porcentagem possível de ser utilizada para a gaseificação para a produção de hidrogênio. No entanto, diferentemente da TMA, o aumento do fator de recuperação tem como efeito a diminuição do valor do custo nivelado. Esse é o motivo da barra seguir para a porcentagem negativa nos diagramas da Figura 40. Outro ponto importante sobre o fator de recuperação é que há uma tendência do aumento de sua influência conforme a escala da planta diminui, como é o caso da planta de Juiz de Fora, em comparação com a de Uberaba. O motivo desse comportamento é o crescimento não linear dos custos de investimento (Equação 51) fazendo com que variações nesse valor gerem um impacto maior em plantas de menor capacidade do que em plantas que já possuem uma escala mais elevada. O CEPCI, fator CAPEX e impostos locais seguem sem variação significativa entre a escala das plantas. O forte impacto do CEPCI mostra que as condições econômicas influenciam bastante o custo final de produção e, dessa forma, podem alterar a tomada de decisões quanto ao investimento. As variações no CAPEX e dos impostos locais também mostraram impacto significativo no custo nivelado. A tarifa da eletricidade tem impacto significativo por causa, principalmente, do pré-tratamento e tende a ser mais influente com plantas de maior capacidade. O fator de disponibilidade mostrou pequena influência com tendência de melhorar o custo com o aumento do seu valor. Em pequena escala da planta, o preço da água, resíduos agrícolas e florestais, custo com mão de obra não têm praticamente qualquer influência significativa no custo nivelado quando inseridos no contexto com os demais parâmetros de entrada já citados. Em Uberaba, microrregião com altíssima produção de cana de açúcar, milho e soja, o impacto do preço dos resíduos é mais significativo. Embora a produção de eucalipto nessa microrregião seja significativa, acaba por ser fortemente ofuscada pela produção dos resíduos agrícolas. Esse é o motivo do impacto desprezível dos resíduos florestais.

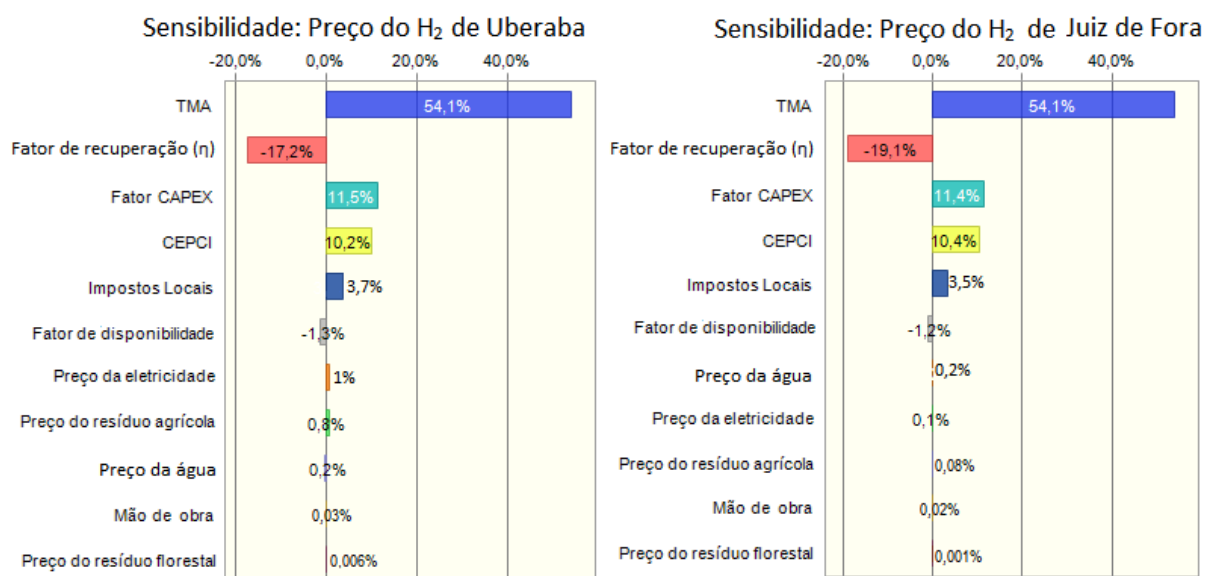
Figura 41 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com oxigênio



Fonte: Elaborada pelo Autor

Na gaseificação com oxigênio a influência da TMA cai cerca de 10% em comparação com a gaseificação com ar. O fator de recuperação mantém o mesmo comportamento com relação a escala da planta observado na gaseificação com ar. A influência do CEPCI pouco mudou em relação a gaseificação com ar. A influência dos impostos locais aumenta em comparação com a gaseificação com ar. A influência do preço do resíduo agrícola e do preço da eletricidade aumenta em comparação com a gaseificação com ar. Não houve diferença significativa do peso do fator de disponibilidade entre a gaseificação com ar e com oxigênio. E assim, como observado na gaseificação com ar, a influência dos outros parâmetros foi pouco significativa com relação a todos os parâmetros analisados. Boa parte das diferenças observadas acontecem pela diminuição da vazão de gás de síntese, devido à ausência de nitrogênio, que a adição da unidade de separação de ar traz a planta.

Figura 42 - Análise de sensibilidade de Uberaba e Juiz de Fora para a gaseificação com ar/vapor



Fonte: Elaborada pelo Autor

A influência dos parâmetros de entrada no caso da gaseificação com ar/vapor é praticamente a mesma observada na da gaseificação com ar. Mesmo com a adição de uma caldeira para a produção de vapor, por serem ambos casos que operam sobre a condição ótima de produção de hidrogênio a partir da reação de deslocamento gás-água, as mudanças nos valores de vazão são equilibradas. Ou seja, o aumento do CAPEX na gaseificação com vapor é equilibrado pelo pequeno aumento observado na produção de hidrogênio.

4.8 Resultados da Análise de Ciclo de Vida da Gaseificação

Para a análise de ciclo de vida, a microrregião de Uberaba foi utilizada como referência, considerando que foi a microrregião com os melhores resultados econômicos do estado de Minas Gerais. Os resultados apresentam o CO₂ equivalente emitido para cada parte do processo e o CO₂ sequestrado pelos resíduos. O sequestro de carbono dos resíduos é referente ao CO₂ que foi absorvido da atmosfera no crescimento das plantas através do processo da fotossíntese. A fator de recuperação utilizado para esta análise foi o de 30% de aproveitamento dos resíduos na região.

Os cenários considerados para a análise de ciclo de vida da microrregião de Uberaba são apresentados na Tabela 28.

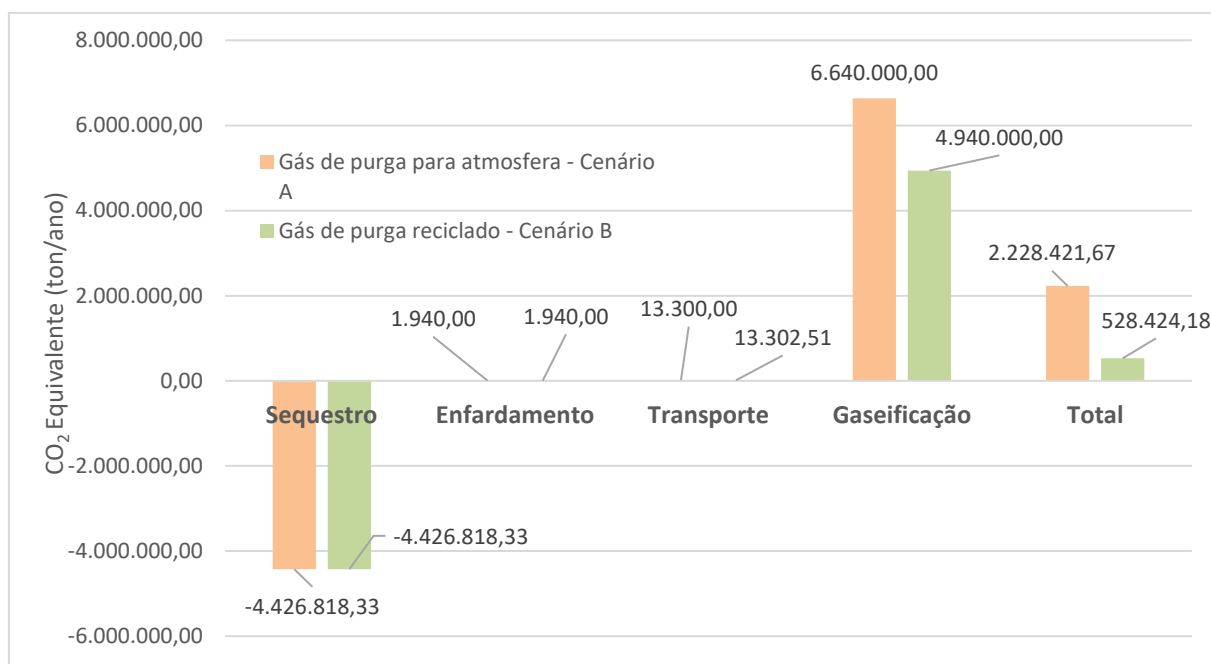
Tabela 28 – Cenários da análise de ciclo de vida

CENÁRIO A	Gaseificação com ar – sem reciclagem do gás de purga do PSA
CENÁRIO B	Gaseificação com ar – com reciclagem do gás de purga do PSA
CENÁRIO C	Gaseificação com oxigênio – com reciclagem do gás de purga do PSA
CENÁRIO D	Gaseificação com ar/vapor – com reciclagem do gás de purga do PSA

Fonte: Elaborada pelo Autor

A Figura 43 apresenta uma comparação das emissões de carbono equivalente quando o gás de purga do PSA não é reaproveitado e simplesmente liberado na atmosfera, ou seja, entre o Cenário A e B.

Figura 43 – Comparação das emissões da planta de gaseificação com ar sem e com reaproveitamento do gás de purga do PSA



Fonte: Elaborada pelo Autor

Como pode ser observado, há uma redução drástica de CO₂ equivalente com o reaproveitamento do gás de purga do PSA. Isso acontece porque cerca de 1% da composição do gás de purga do PSA, em base úmida, é metano, cujas emissões se equivalem a 28 vezes o dióxido de carbono, de acordo com o quinto relatório do IPCC (Painel Intergovernamental sobre Mudanças Climáticas), fazendo com que pequenas emissões tenham grande impacto (EUROPEAN ENVIRONMENTAL AGENCY, 2022). Assim há, portanto, não somente uma vantagem de aumento de eficiência da planta, mas uma redução significativa dos impactos ambientais com o reaproveitamento do gás de purga.

Vale notar que foi adotado uma porcentagem de eficiência de queima do gás de purga no secador de biomassa mais *flaring* (se necessário) de 98%, considerando fatores como o volume de queima,

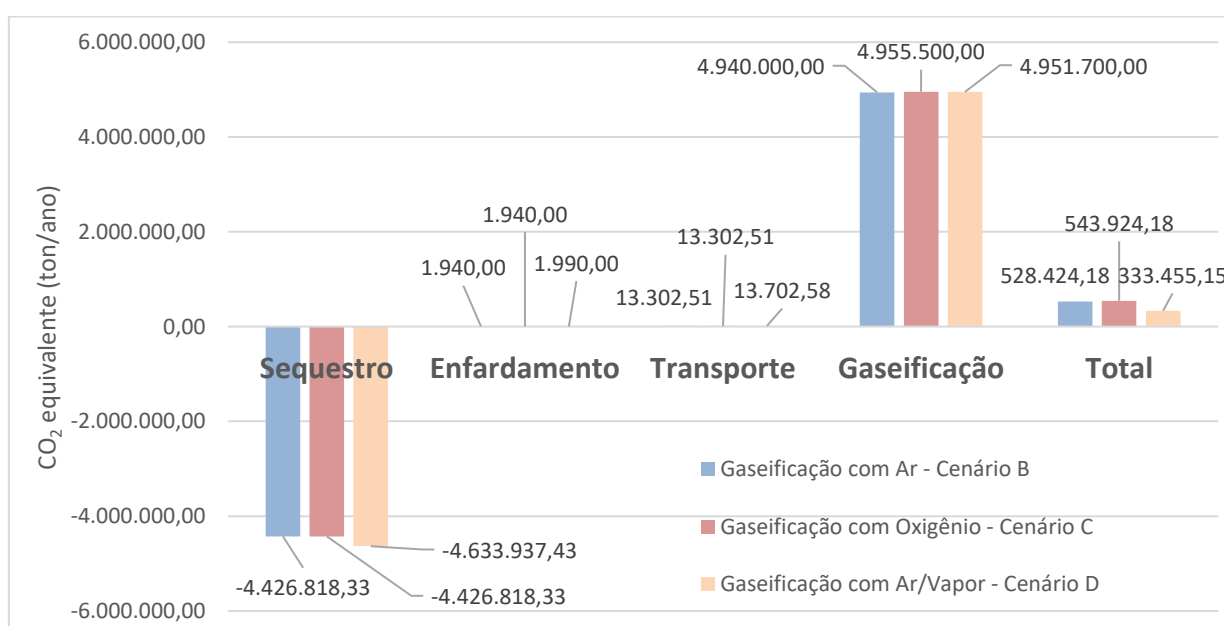
variações de vazão mássica ou a força do vento que podem afetar a eficiência de queima no *flaring* gerando combustões incompletas (SHAW et al., 2023). Essas inevitáveis perdas na queima geram impactos quanto as emissões de CO₂ equivalente. Além disso, existem os impactos referentes as emissões indiretas que são contabilizadas através dos bancos de dados dos inventários do Simapro. Essas emissões indiretas compreendem as produções do transporte, consumos de energia e tratamento de resíduos, construção, manutenção e descarte de equipamentos e dos próprios da fatores de emissão pré-calculados pelos bancos de dados do programa.

Portanto, mesmo que em termos de massa de carbono, considerando somente operação, o processo seja teoricamente neutro em emissões, ainda há outros fatores que irão tendenciar esse balanço como as emissões de metano e do carbono proveniente de emissões indiretas de forma global no ciclo de vida da planta.

Assim, com uma produção de 216.720,89 ton/ano de hidrogênio, a emissão específica da planta de gaseificação com ar, dado o ciclo de vida de produção e contabilizando o sequestro de carbono, é de 10,28 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂} e 2,44 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂} para os cenários de liberação direta do gás de purga do PSA na atmosfera e reaproveitamento do gás de purga do PSA para a secagem no pré-tratamento, respectivamente. Dessa forma, portanto, fica claro que o reaproveitamento do gás de purga é mandatório, não somente em termos de melhora de eficiência da planta, mas em termos ambientais. Por isso, as próximas análises focarão somente na planta com o reaproveitamento do gás de purga do PSA.

A Figura 44 apresenta os resultados da análise de ciclo de vida para as três condições de agente gaseificante:

Figura 44 – Emissões de dióxido de carbono equivalente para a planta de gaseificação nas três condições de agente gaseificante



Fonte: Elaborada pelo Autor

As três condições apresentam resultados bastante semelhantes. A condição que demonstrou maior diferença nas emissões totais foi a gaseificação com ar/vapor. Começando pelo sequestro de carbono, foi estabelecido a necessidade de um excedente de resíduos para atender a demanda de produção na caldeira de vapor e isso produziu aumento de sequestro de carbono na condição de ar/vapor. Esse excedente, que compreende em média apenas 4% a mais de resíduos, também impacta o processo de enfiamento e transporte, aumentando as emissões nessas etapas. Na gaseificação em si, no entanto, o nível de emissão fica entre o observado na gaseificação com ar e na gaseificação com ar/vapor, mesmo com o excedente de resíduos. Isso ocorre porque a adição de vapor ao gaseificador favorece a reação de reforma do metano, tornando a gaseificação com ar/vapor o cenário que menos produz metano. Dessa forma, há uma redução das emissões de CO₂ equivalente, tornando a gaseificação com ar/vapor a condição mais ambientalmente limpa entre as três consideradas neste estudo.

Portanto, na planta da microrregião de Uberaba, com uma produção de 216.720,89 ton/ano de hidrogênio, a emissão específica da planta de gaseificação com ar, dado o ciclo de vida de produção e contabilizando o sequestro de carbono, é de 2,44 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂}. Para a gaseificação com oxigênio, com uma produção de 239.470,18 ton/ano de hidrogênio, é de 2,27 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂}. Para a gaseificação com ar/vapor, para uma produção de 217.809,43 ton/ano de hidrogênio, é de 1,53 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂}. Esses valores de emissão específica, levando em consideração a metodologia IPCC 2021 GWP100, estão de acordo com os encontrados por outros autores na literatura. Takeda, Nam e Chapman (2022), considerando uma planta de gaseificação de biomassa no Japão, chegaram a uma emissão específica de 2,67 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂} e Buffi, Prussi e Scarlat (2022), para uma planta de gaseificação de biomassa de grande escala na Europa, obtiveram 2,14 kg_{CO₂eq}/kg_{H₂}.

4.9 Validação do modelo de eletrólise

O modelo do eletrolisador tipo PEM foi validado primeiramente com os resultados obtidos pelo modelo de Ruuskanen et al. (2017) e, em seguida, com os resultados do modelo de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e com os dos experimentos de Debe et al. (2012).

Os dados de entrada considerados por Ruuskanen et al. (2017) são apresentados na Tabela 29.

Tabela 29 - Propriedades da entrada utilizadas para a comparação dos resultados com os de Ruuskanen et al. (2017)

Número de células	33
Área da membrana (cm ²)	69
Espessura da membrana (cm)	0,0178
Pressão no catodo (kPa)	200
Pressão no anodo (kPa)	2000
Temperatura do eletrolisador (°C)	60

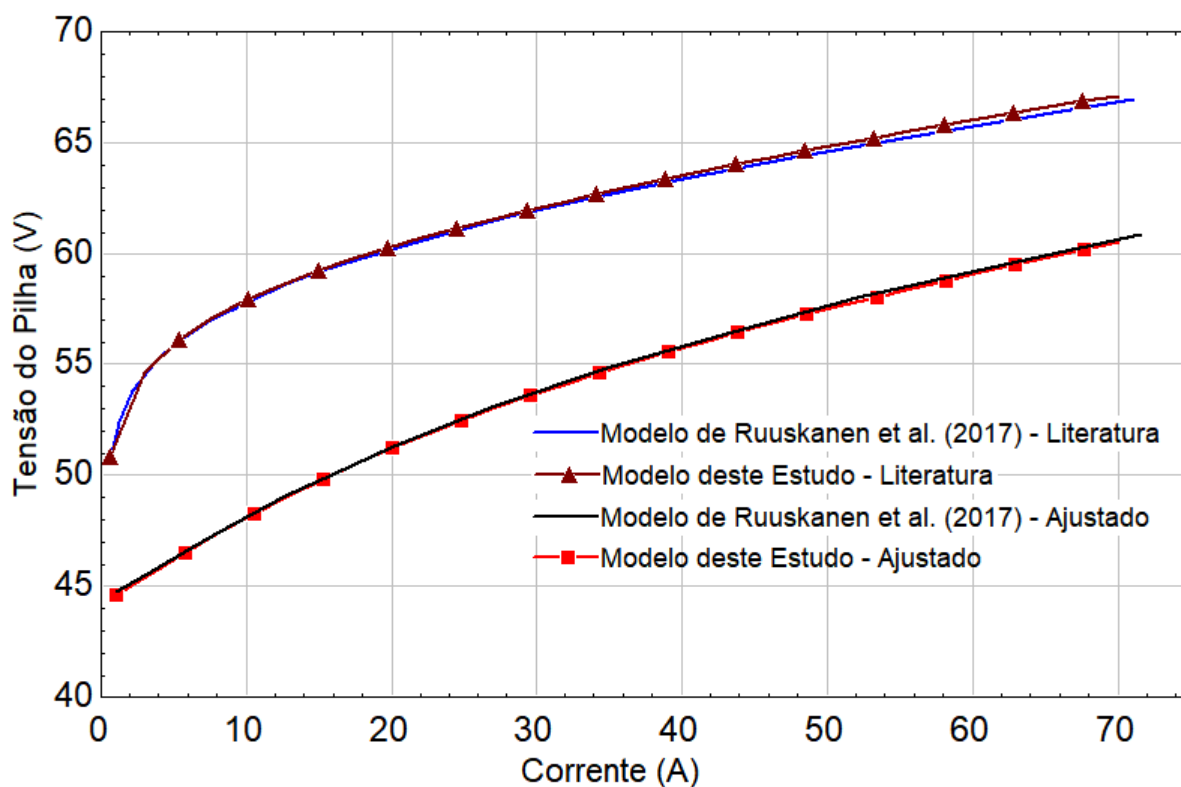
Ruuskanen et al. (2017) definiram algumas curvas durante a sua validação com os dados experimentais que obtiveram. Primeiro, utilizaram valores do coeficiente de transferência de carga e densidade de corrente trocada da literatura. Esses valores, no entanto, não coincidiram bem com os dados obtidos em seus experimentos. Em seguida, ajustaram esses valores de modo que seu modelo se ajustasse com os dados experimentais. Em ambos os casos, utilizaram o coeficiente de transferência de carga de 0,5 para o catodo.

Tabela 30 - Valores de CTC e densidade de carga trocada utilizadas por Ruuskanen et al. (2017)

	Literatura	Ajustado
α_{an}	0,433	0,186
i_{oan} (A cm ⁻²)	$0,5 \times 10^{-3}$	0,111
i_{oca} (A cm ⁻²)	0,391	0,653

A Figura 45 mostra a comparação das curvas de polarização dos modelos quando utilizado os mesmos parâmetros de entrada.

Figura 45 - Comparação dos resultados do modelo deste estudo com os obtidos por Ruuskanen et al. (2017)



EQM: Entre curvas - ajustadas: 0,1171; Entre curvas - literatura: 0,2178. Fonte: Elaborada pelo Autor

Como observado pelos erros médios quadráticos obtidos, o modelo consegue replicar o

comportamento da curva de polarização nas duas instâncias apresentadas por Ruuskanen et al. (2017) de forma fiel levando em conta o uso dos mesmos parâmetros de entrada utilizados.

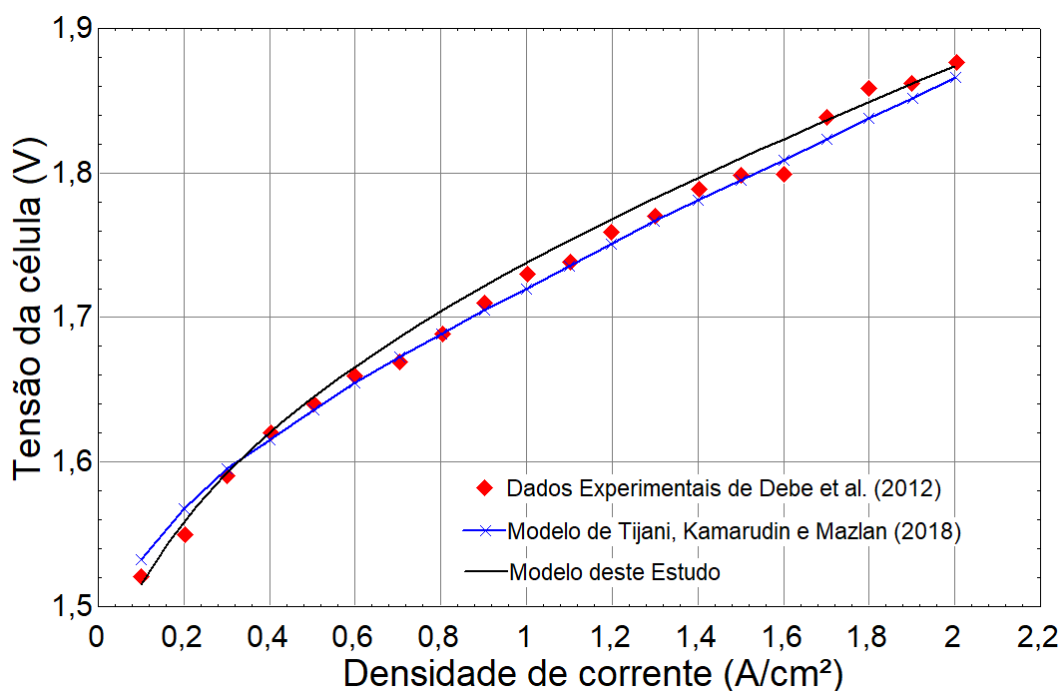
Para a validação com Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012), foram utilizados os seguintes dados de entrada:

Tabela 31 - Propriedades da entrada utilizadas para a comparação dos resultados com os de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012)

Parâmetros de entrada	
Espessura da membrana (cm)	0,0178
Pressão no catodo (atm)	1
Pressão no anodo (atm)	13,6
Temperatura do eletrolisador (°C)	80
Densidade de corrente trocada do anodo ($A\ cm^{-2}$)	2×10^{-6}
Densidade de corrente trocada do catodo ($A\ cm^{-2}$)	1×10^{-1}
Coefficiente de transferência de carga do anodo	2
Coefficiente de transferência de carga do cotodo	0,5

A Figura 46 apresenta a comparação dos resultados deste modelo com os de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012):

Figura 46 - Comparação dos resultados do modelo deste estudo com os obtidos por Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e Debe et al. (2012)



EQM: Entre Modelo de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018) e modelo deste estudo: 0,0133; Entre dados de Debe et al. (2012) e modelo deste estudo: 0,0105.

O modelo também conseguiu reproduzir o comportamento dos dados experimentais de Debe et al. (2012) de forma até mais fiel, levando em conta o EMQ, do que o modelo de Tijani, Kamarudin e Mazlan (2018). Portanto, dadas as validações com diferentes autores da literatura, o modelo foi considerado apto para ser usado na descrição da curva de polarização de uma célula típica para este estudo.

4.10 Ponto de operação que maximiza a produção de H₂

Para a análise do ponto que maximiza a produção de H₂, foram utilizados os seguintes dados (Tabela 32) de entrada levando em consideração um eletrolisador típico comercial:

Tabela 32 - Dados de entrada considerados baseando-se em um eletrolisador PEM típico

Espessura da membrana (cm)	0,0178
Pressão no anodo (bar)	5
Eficiência de Faraday (%)	98
Coefficiente de transferência de carga do anodo	2
Coefficiente de transferência de carga do catodo	0,5
Densidade de carga trocada do anodo (A cm ⁻²)	2x10 ⁻⁶
Densidade de carga trocada do catodo (A cm ⁻²)	10 ⁻¹

Considerando as dimensões da pilha de células do eletrolisador de 1,25 MW da Bosch, uma área ativa de 64x78 cm corresponderia a cerca de 80% da área total transversal da pilha. Com uma produção de 23 kg/h e operando com uma densidade de corrente de 2 A cm⁻², seriam necessárias cerca de 63 células na pilha. A tensão da pilha seria de 119,8 V e, portanto, seria necessária uma potência de 1,197 MW para o acionamento somente da pilha de células. Isso significa que a potência nos auxiliares ou balanço da planta (BOP) seria cerca de 53 kW ou 4,24% da potência total do sistema. A eficiência da pilha de células nesse ponto seria de cerca de 76,3%.

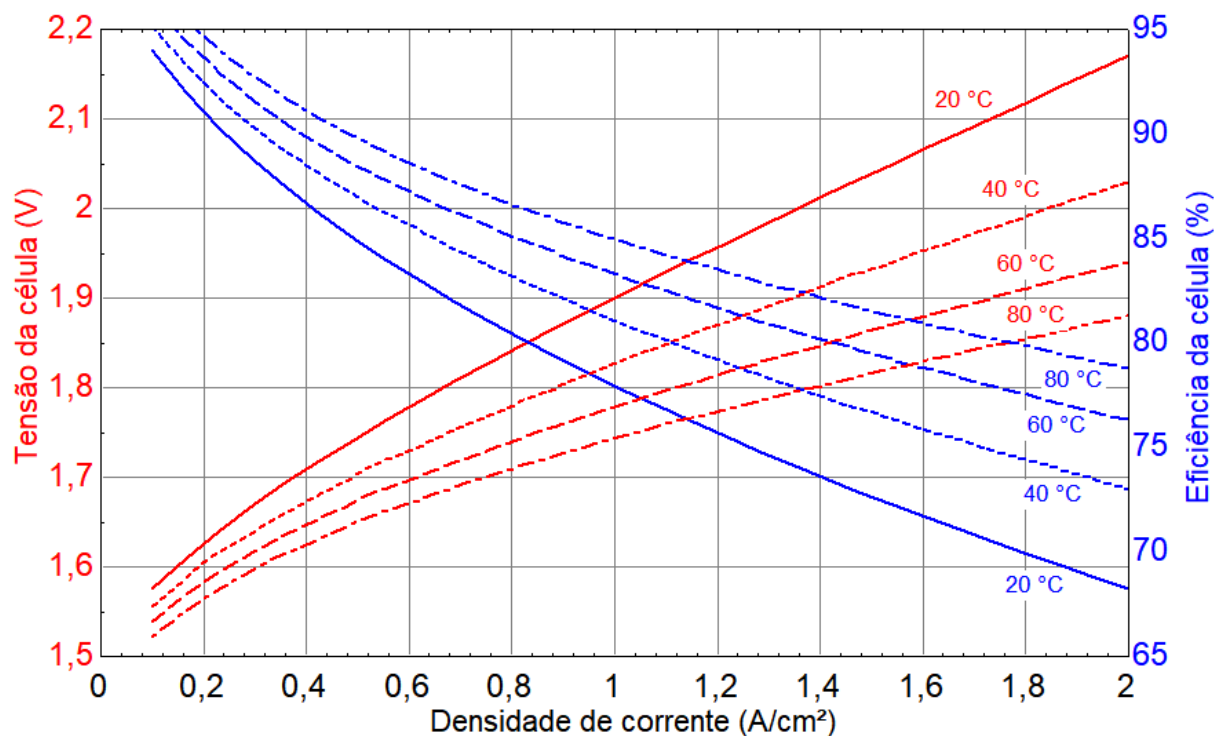
A eficiência do sistema com base no PCI do H₂, seria de 61,6% e a eficiência de PCS seria de 72,76%. Esses valores de eficiência estão dentro da faixa esperada para eletrolisadores comerciais. Segundo Ruth, Mayyas e Mann (2019), a faixa de eficiência de PCI de eletrolisadores PEM varia 45 a 71%, ou seja, uma média de 63%, o qual está bastante próximo dos 61,6% encontrado pelo modelo.

De acordo com Gallardo et al. (2021), para eletrolisadores PEM, o consumo específico da planta contando os auxiliares, é de 60 kWh/kg de hidrogênio, calculado com base de dados de 2018, sendo que se espera que este valor se reduza a 52 kWh/kg já em 2025. Aproximando, para o ano de 2023, através de uma interpolação linear, o consumo ficaria cerca de 54,29 kWh/kg. Para a vazão de 23 kg/h do eletrolisador Bosch e uma potência requerida na pilha de células de 1,197 MW, a potência do BOP seria cerca de 4,93% da potência total do sistema. O cálculo efetuado através do modelo resultou em cerca de

4,24% da potência total, demonstrando haver uma concordância entre os resultados. Portanto, foi adotado que o gasto de energia do BOP é 4,93% do consumo total de potência da planta de eletrólise.

A influência da temperatura na curva de polarização do eletrolisador foi levantada pelo modelo para uma célula do eletrolisador especificado. A eficiência também foi plotada em justaposição dos resultados para quatro temperaturas distintas (Figura 47):

Figura 47 - Curvas de polarização e eficiência para diferentes temperaturas da célula do eletrolisador



Fonte: Elaborada pelo Autor

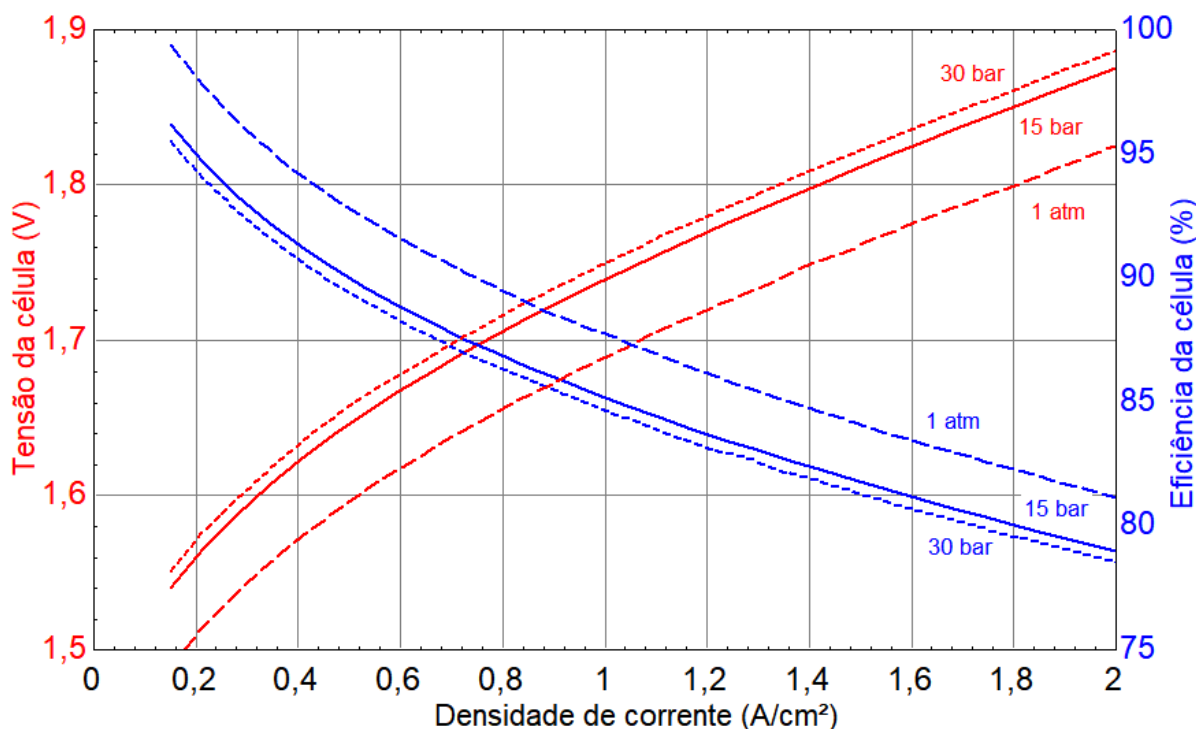
O aumento da temperatura faz com que a tensão requerida da célula diminua e a eficiência aumente. Temperaturas mais altas são indicadores da existência de maior quantidade de energia contida nas moléculas de água, fazendo com que seja requerido uma menor quantidade de energia elétrica para a quebra da molécula de água. Como consequência disso, a tensão requerida na célula é menor, tornando a célula mais eficiente em produzir a mesma quantidade de hidrogênio com menos energia. Embora haja um aumento das tensões de circuito aberto e sobretensão de ativação, a sobretensão ôhmica sofre uma queda significativa com o aumento da temperatura que ofusca esses aumentos. Essa queda da sobretensão ôhmica acontece devido ao aumento da condutividade da membrana com a temperatura e isso reduz as perdas ôhmicas, reduzindo a necessidade de sobretensão que compense essas perdas.

Assim, mesmo que seja termodinamicamente favorável a operação das células PEM sob temperaturas mais altas, os fabricantes limitam até 80 °C já que a membrana polimérica não consegue aguentar operações de longo prazo nas condições fortemente oxidantes do eletrodo polarizado sob

temperaturas mais altas (HAUCH et al., 2008) (BONANNO et al., 2024).

Em seguida, a influência da pressão do catodo na curva de polarização do eletrolisador foi avaliada no modelo para uma célula do eletrolisador especificado. A eficiência também foi plotada em justaposição dos resultados para quatro pressões distintas (Figura 48):

Figura 48 - Curvas de polarização e eficiência para diferentes pressões no catodo da célula do eletrolisador



Fonte: Elaborada pelo Autor

Maiores pressões no catodo tendem a aumentar a tensão requerida na célula. As sobretensões de ativação e ôhmicas não são afetadas com a mudança da pressão, somente a tensão de circuito aberto é influenciada, já que a equação de Nernst depende das pressões parciais do hidrogênio, oxigênio e vapor de água saturado. Por consequência, maiores pressões tendem a diminuir a eficiência da célula. Uma queda de 3,9% a 2,6% da eficiência é observada entre as pressões de 30 bar e 1 bar para a faixa de densidade de corrente variando de 0,2 A cm⁻² a 2 A cm⁻². Foi mencionado anteriormente que pressões mais elevadas no catodo ajudam a economizar na compressão mecânica posterior do H₂, no entanto, como observado, existe uma queda na eficiência com o aumento da pressão no catodo. Schalenbach et al (2013) verificaram que compressão subsequente é mais eficiente do que compressão eletroquímica para uma membrana de 50 μm. Por outro lado, Tjarks et al. (2018) determinaram que para uma membrana de 175 μm, a operação ótima foi de 20 bar no catodo para uma densidade de corrente de 3 A cm⁻². Outro problema com a operação sob alta pressão no catodo é a permeação de gases através da membrana. Isso pode levar a contaminação de hidrogênio no oxigênio, o que é um risco de segurança

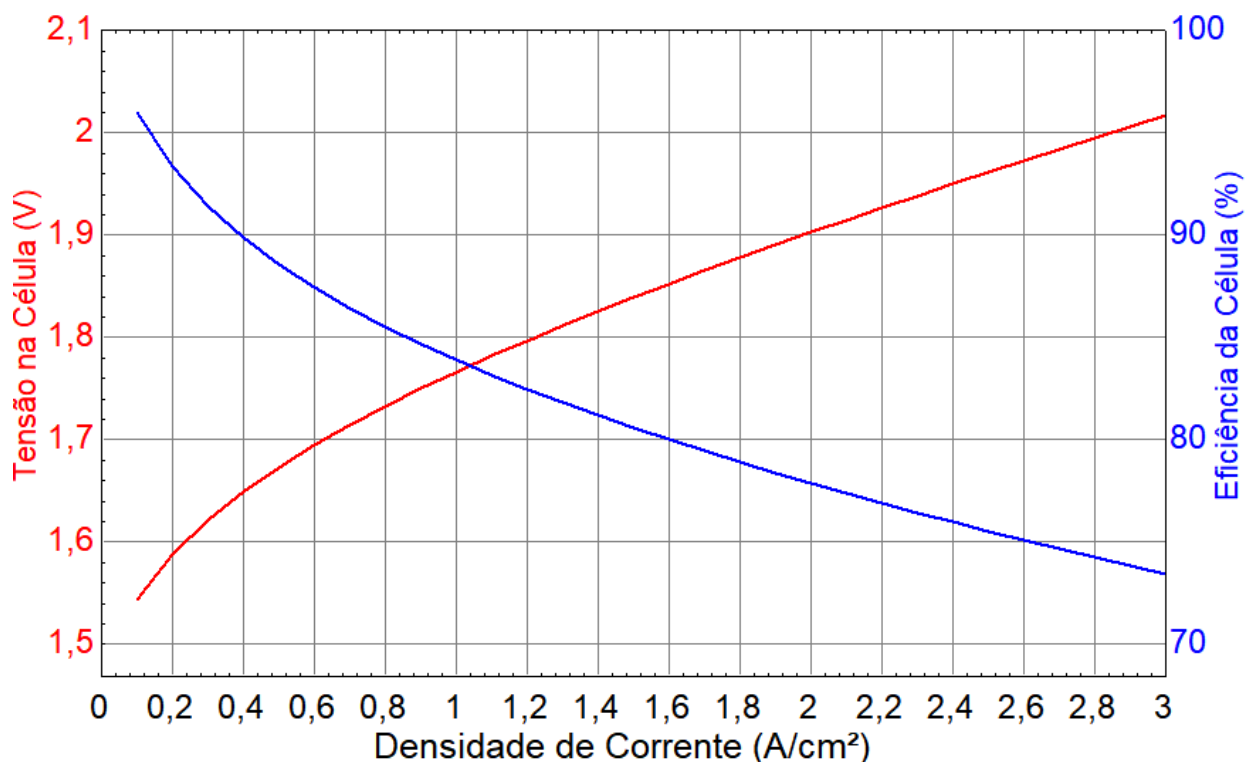
levando em conta o largo limite de inflamabilidade do hidrogênio (GRIGORIEV et al., 2010). Suermann et al. (2017) concluiu que esse problema é reduzido a níveis baixos com uso de membranas mais espessas como a Nafion 117, permitindo pressões de 100 bar no catodo.

Com essas informações, foram definidos os parâmetros de operação do eletrolisador típico comercial dessa análise:

- Temperatura: a mais alta que os eletrolisadores comerciais permitem, assim, 80 °C;
- Pressão: pressões altas no catodo tendem a diminuir a eficiência e podem causar problemas de permeação de gases pela membrana. No entanto, é considerado uma membrana mais espessa que mitiga o problema da permeação. Portanto, foi considerado a pressão de 30 bar baseando-se no valor comercial estabelecido pelo fabricante de referência e nas informações da literatura apresentadas.

Com isso, a Figura 49 apresenta a curva de polarização da célula eletrolítica típica definida para a análise. Para uma densidade de corrente típica de 2 A cm^{-2} , a tensão requerida na célula é de 1,9 V e eficiência de célula é de 77,86%. É possível a operação com uma eficiência mais alta, porém isso também significaria a operação com uma densidade de carga mais baixa. A operação com eficiência de 90% necessita de uma densidade de corrente de aproximadamente $0,4 \text{ A cm}^{-2}$. Isso seria uma densidade de corrente 5 vezes menor para uma adição de somente 12,14% na eficiência.

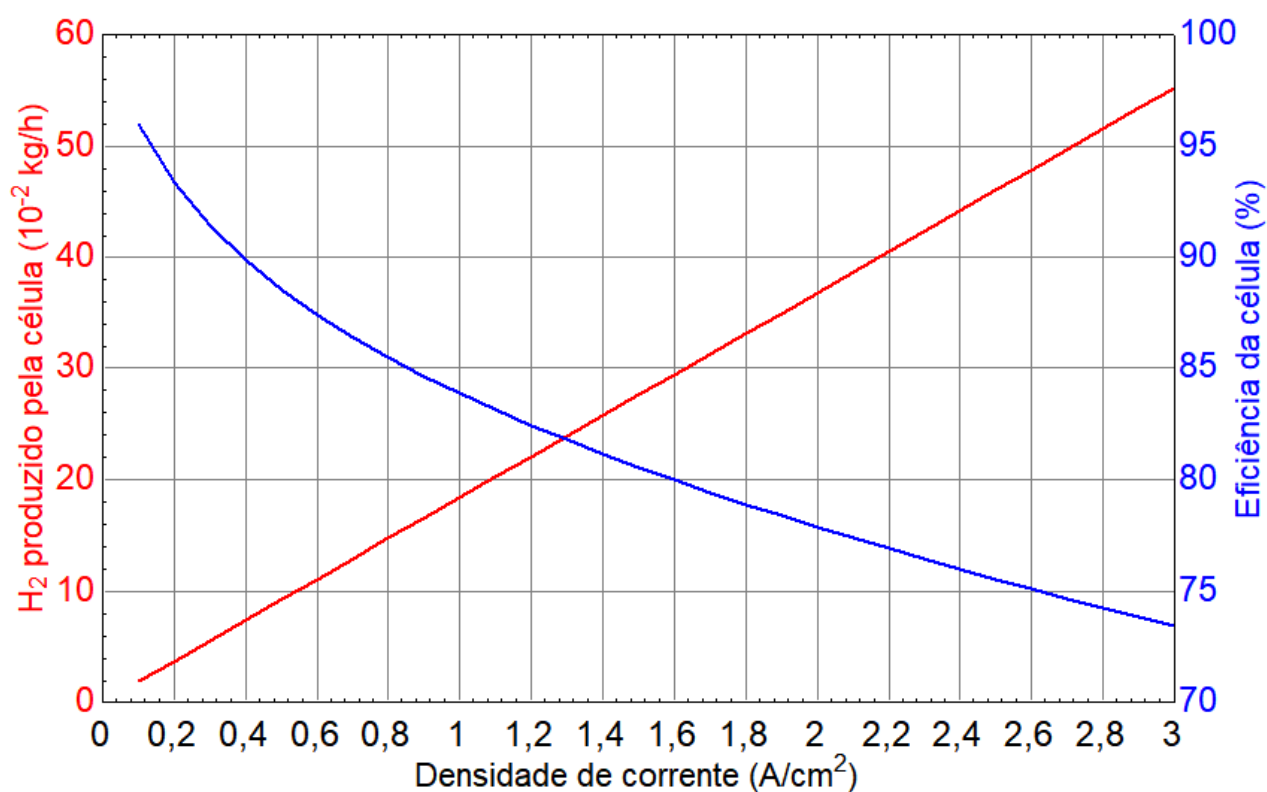
Figura 49 - Curva de polarização da célula típica definida



Fonte: Elaborada pelo Autor

A Figura 50 apresenta a relação da produção de hidrogênio e eficiência da célula pela densidade de corrente. Com 2 A cm^{-2} e eficiência de 77,86%, a célula típica produz $36,8 \times 10^{-2} \text{ kg/h}$ de hidrogênio enquanto, com $0,4 \text{ A cm}^{-2}$ e 90%, a célula produz $7,36 \times 10^{-2} \text{ kg/h}$ de hidrogênio. Dada a linearidade da relação da densidade de corrente e produção de hidrogênio pela célula, isso significa também uma redução de 5 vezes na produção de H_2 para um aumento de 12,14%. Portanto, para altas escalas de produção, os eletrolisadores comerciais necessitam trabalhar nas faixas de eficiência da pilha já apresentadas de 60% a 80% (KUMAR e HIMABINDU, 2019). Isso também significa que a operação sob cargas parciais carrega um efeito de aumento da eficiência de produção.

Figura 50 - Vazão mássica de hidrogênio produzido e eficiência da célula em relação a densidade de corrente



Fonte: Elaborada pelo Autor

Portanto, os parâmetros de operação estabelecidos para a célula eletrolítica típica são apresentados na Tabela 33.

Tabela 33 – Parâmetros da célula eletrolítica típica estabelecida

Área ativa da membrana (cm ²)	4992
Pressão no anodo (bar)	30
Temperatura no eletrolisador (°C)	80
Densidade de corrente (A cm ⁻²)	2
Tensão na célula (V)	1,9
Produção de H ₂ (10 ⁻² kg/h)	36,8
Potência requerida (kW)	18,99
Eficiência da célula (%)	77,9

Fonte: Elaborada pelo Autor

4.11 Potenciais de Produção de H₂ por meio da eletrólise a partir de fontes renováveis do estado de Minas Gerais

O Atlas Eólico de Minas Gerais da CEMIG (2010) apresenta o potencial que Minas Gerais possui em produção de potência eólica a partir da consideração de três diferentes turbinas eólicas, conforme apresentados na Tabela 34. O Atlas levou em consideração as áreas urbanas, as de proteção ambiental e as de demarcação de terras indígenas, de forma a não incluí-las na análise.

Tabela 34 – Turbinas adotadas para a análise do Atlas Eólico de Minas Gerais

Potência (kW)	Diâmetro do Rotor (m)	Altura da Torre (m)
500	40	50
1500	80	75
3000	100	100

Fonte: CEMIG (2010)

A Tabela 35 apresenta o potencial eólico de Minas Gerais em termos de altura da torre, velocidade média anual do vento, a área de Minas Gerais que possui a velocidade média anual apresentada, a potência possível de ser instalada e a quantidade de energia possível de ser produzida. Baseados nestes valores, este estudo adiciona a quantidade teórica de hidrogênio que pode ser produzido a partir da planta de eletrólise PEM típica estabelecida. Foi levado em consideração a produção do H₂ com pureza 5N, ou seja, foi considerado o fator de recuperação do PSA incluído na planta.

Tabela 35 - Potencial de produção de H₂ em Minas Gerais a partir da eletrólise utilizando energia elétrica de fonte eólica

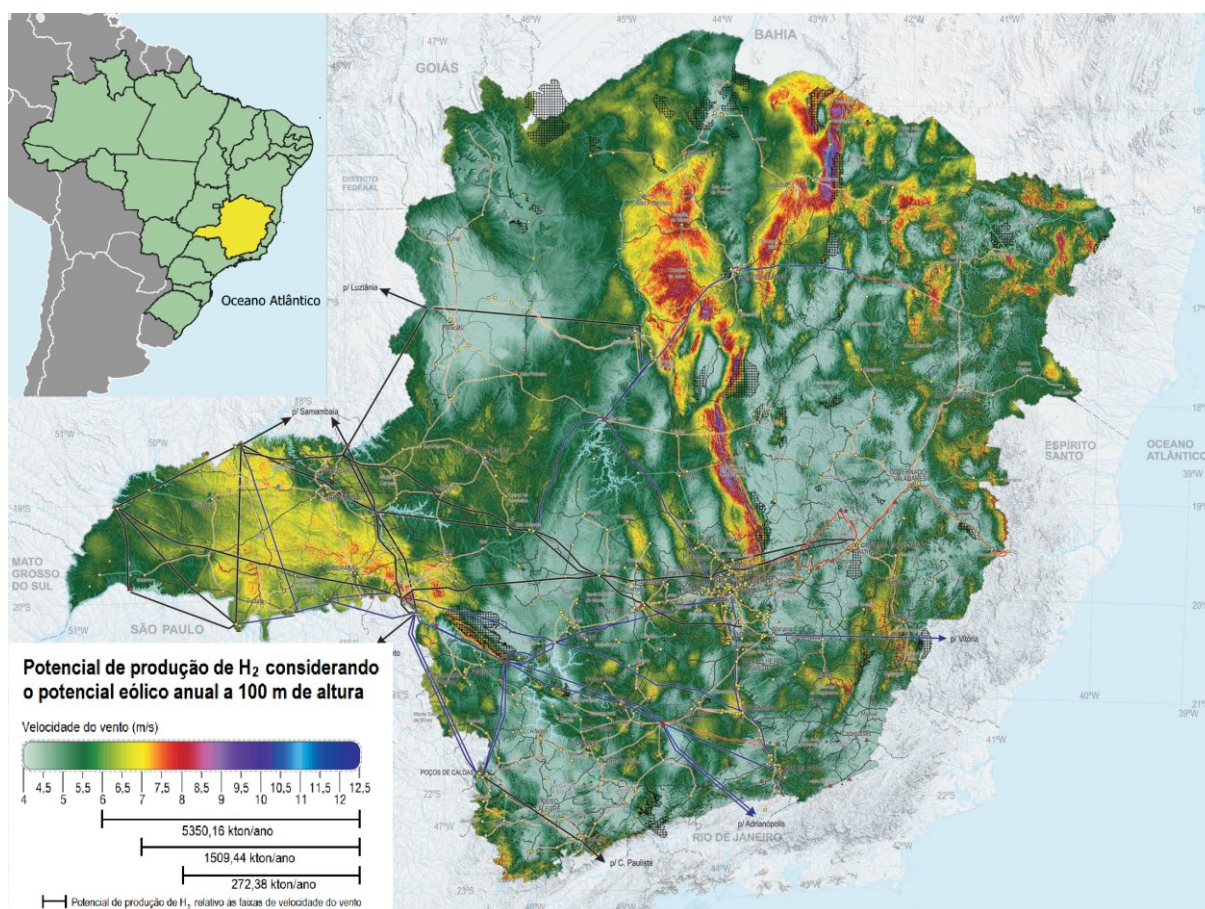
Altura (m)	Vento (m/s)	Área (km ²)	Potência Instalável (MW)	Energia (GWh/ano)	Potencial de produção de H ₂ (kton/ano)
100	≥ 6	121511	182266	326360	5350,164
	≥ 6,5	63415	95123	194899	3195,066
	≥ 7	26029	39043	92076	1509,443
	≥ 7,5	10645	15967	42287	693,230
	≥ 8	3757	5636	16615	272,377
	≥ 8,5	1355	2032	6575	107,787
75	≥ 6	93685	140528	245317	4021,590
	≥ 6,5	43038	64557	130441	2138,377
	≥ 7	16495	24742	57812	947,738
	≥ 7,5	6166	9249	24351	399,197
	≥ 8	2056	3084	9101	149,197
	≥ 8,5	801	1201	3859	63,262
50	≥ 6	55228	82841	149798	2455,705
	≥ 6,5	19884	29825	63503	1041,033
	≥ 7	7046	10570	25781	422,639
	≥ 7,5	2235	3352	9280	152,131
	≥ 8	823	1235	3757	61,590
	≥ 8,5	279	419	1379	22,607

Fonte: CEMIG (2010)

O potencial máximo teórico de produção considerando o uso de toda a área de Minas Gerais com velocidade média anual acima de 6 m/s para turbinas eólicas de 3 MW e altura de 100 m do solo é de 5350,2 kton de hidrogênio por ano.

A Figura 51 apresenta o mapa do potencial de produção de hidrogênio por meio da eletrólise tipo PEM, utilizando fonte eólica, no estado de Minas Gerais, considerando a velocidade média anual do vento para 100 metros de altura do solo.

Figura 51 - Potencial de produção de hidrogênio por eletrólise tipo PEM considerando energia elétrica eólica em MG com torres de 100 m de altura



Fonte: Adaptado de CEMIG (2010)

A Empresa de Pesquisa Energética (EPE, 2018a) calculou o potencial técnico brasileiro de geração elétrica fotovoltaica. Para tal, fez uma estimativa do aproveitamento fotovoltaico de grande porte a partir do mapeamento de áreas aptas à instalação de usinas fotovoltaicas, excluindo os biomas da Amazônia, Pantanal e Mata Atlântica de vegetação nativa, bem como unidades de conservação, terras indígenas, comunidades quilombolas, hidrografia e áreas urbanas.

A EPE (2018a) também considerou como aptas as áreas com declividade inferior a 3% e dimensões superiores a 0,5 km², pois essa é a área necessária para a instalação de uma unidade de cerca de 35 MWp. Do que restou de área apta, aplicou um desconto de 20% referente às áreas de reserva legal e às áreas de preservação permanente impostas pelas restrições de uso do Código Florestal.

A Tabela 36 apresenta o potencial solar fotovoltaico de Minas Gerais em termos de faixa de irradiação média anual, com as áreas aptas encontradas, a potência fotovoltaica equivalente, a geração de energia anual equivalente e com a adição do potencial de produção de hidrogênio a partir da planta de eletrólise PEM típica estabelecida. Também foi considerado a produção do H₂ com pureza 5N.

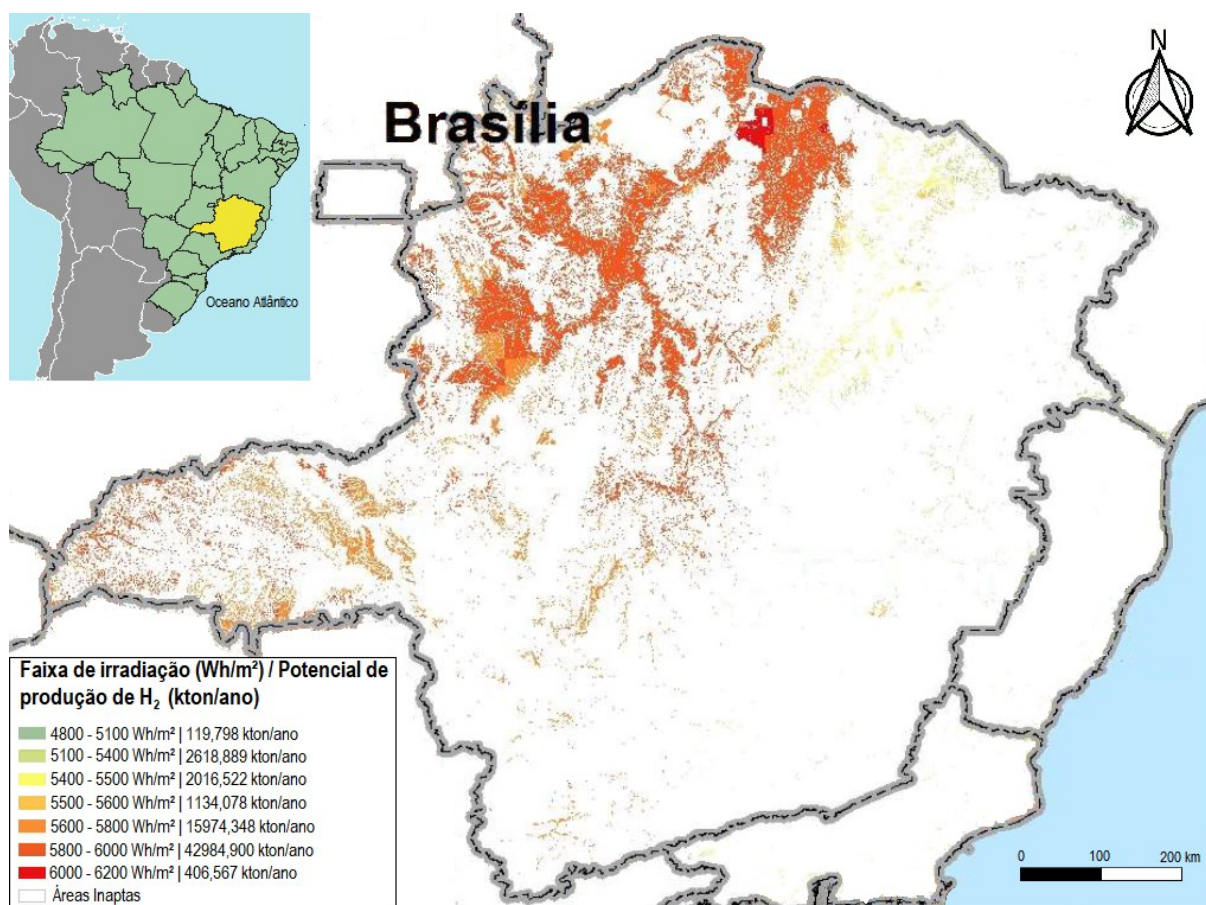
Tabela 36 - Potencial de produção de H₂ em Minas Gerais a partir da eletrólise utilizando energia elétrica de fonte solar fotovoltaica

Faixa de irradiação (Wh/m ²)	Área Apta Antropizada (km ²)	Potência Fotovoltaica (GWp)	Energia Gerada (TWh/ano)	H ₂ Produzido (kton)	Acumulado	
					Faixa de irradiação (Wh/m ²)	H ₂ Produzido (kton)
4800-5100	75,421	5,279	7,308	119,798	≥ 4800	65255,103
5100-5400	1584,648	110,925	159,752	2618,889	≥ 5100	65135,305
5400-5500	1177,269	82,409	123,008	2016,522	≥ 5400	62516,417
5500-5600	650,159	45,511	69,179	1134,078	≥ 5500	60499,894
5600-5800	8933,878	625,371	974,435	15974,348	≥ 5600	59365,816
5800-6000	23142,650	1619,985	2622,079	42984,900	≥ 5800	43391,467
6000-6200	214,655	15,026	24,801	406,567	≥ 6000	406,567

Fonte: EPE (2018b)

A Figura 52 apresenta o mapa do potencial de produção de hidrogênio por meio da eletrólise tipo PEM, utilizando fonte solar, no estado de Minas Gerais, considerando as faixas de irradiação solar diária em média anual das áreas aptas a construção de usinas solares fotovoltaicas.

Figura 52 - Potencial de produção de hidrogênio por eletrólise tipo PEM considerando energia elétrica solar fotovoltaica em MG



Fonte: Adaptado de EPE (2018a)

O potencial, considerando as áreas aptas e as faixas de irradiação, concentra-se no norte e noroeste do estado de Minas Gerais. Isso se deve, em maior parte, ao critério de declividade adotado na análise da EPE (2018a) e, em menor parte, à concentração urbana nessas regiões. Quanto à irradiação, há uma tendência natural de aumento à medida que se aproxima da linha do Equador.

4.12 Potenciais Econômicos da Produção de H₂ por meio da eletrólise a partir de fontes renováveis do estado de Minas Gerais

Foram realizadas a análise econômica para três capacidades de produção da planta de eletrólise, sendo elas 1, 5 e 20 MW. Primeiro, como base de comparação, foram analisadas plantas de produção que compram a energia elétrica baseada em fontes renováveis. Para essa análise, foram efetuadas as seguintes considerações:

- A água utilizada nos trocadores de calor do complexo de compressão entra com 25 °C e sai com 120 °C;

- Os dados dos compressores de H₂ são os mesmos utilizados na Tabela 25;
- Foram utilizados os mesmos tanques de armazenamento de referência da análise com gaseificação;
- As capacidades nominais dos módulos (1, 5 e 20 MW) são a soma da potência de acionamento da pilha de células mais o balanço da planta (BOP). Para uma planta de 1 MW, utilizando a célula típica estabelecida, seriam necessárias 50 células na pilha. Isso seria o equivalente a uma pilha com a potência nominal de cerca 950 kW e um balanço da planta de 45 kW. De forma correspondente, para o módulo de 5 MW e 20 MW seriam necessários 250 e 1000 células, respectivamente. Para a planta de 5 MW, isso equivaleria a uma potência nominal da pilha de células de 4,75 MW e um balanço da planta de 246 kW. Para a planta de 20 MW, isso equivaleria a uma potência real da pilha de células de 18,99 MW e um balanço da planta de 985 kW;
- O eletrolisador opera em condição nominal levando em conta seu fator de disponibilidade.

Os dados para análise econômica são os mesmos utilizados na Tabela 25, enquanto que a taxa de depreciação dos outros componentes se manteve a mesma utilizada na Tabela 26. Para a pilha de células eletrolíticas foi considerado uma vida útil de 40000 horas (JANG et al., 2022). Para um fator de disponibilidade de 95%, isso significa uma vida útil de 4,81 anos para a pilha. Isso implica em uma taxa de depreciação de 20,8% ao ano.

Considerando uma planta com um único módulo, foram utilizados diferentes dados de tarifas de energia da rede para a avaliação do custo nivelado de produção de hidrogênio por meio da eletrólise tipo PEM:

Tabela 37 – Tarifas de energia elétricas baseadas em diferentes fontes

Fonte	Tarifas utilizadas (R\$/MWh)
Leilão - Eólica	176,00
Leilão - Solar fotovoltaica	171,51
Leilão - Hidroelétrica	277,99
Leilão - Termelétrica Biomassa	211,65
Leilão - Termelétrica RSU	603,56

RSU – Resíduo sólido urbano. Fonte: EPE (2022)

Também foi considerado a energia provida pela CEMIG pela tarifa A2 apresentado na Tabela 38. Essa tarifa se trata de uma categoria tarifária aplicada aos consumidores que são conectados à rede elétrica em alta tensão, especificamente em 88 kV ou mais. Essa categoria atende grandes consumidores, como indústrias, hospitais e shoppings, que possuem altas demandas de energia e exigem conexão a redes de transmissão ou distribuição de maior capacidade. A tarifa apresentada na Tabela 38 é referente

a bandeira verde (CEMIG, 2024).

Tabela 38 - Tarifas de energia elétrica da Cemig para média e alta tensão - A2

Demanda Ponta (R\$/kW)	21,42
Demanda Fora de Ponta (R\$/kW)	10,57
Consumo Ponta (R\$/MWh)	543,82
Consumo Fora de Ponta (R\$/MWh)	373,1

Fonte: CEMIG (2024)

Primeiro foram analisadas as plantas de único módulo, sem a presença do PSA, ou seja, com uma pureza de 99,9% (também conhecido como 3N), sendo os resultados apresentados na Tabela 39.

Tabela 39 - LCOH para módulos eletrolisadores de diferentes capacidades com pureza 3N e tarifas de diferentes fontes renováveis

Capacidade do módulo (MW)	Produção de H ₂ (ton/ano)	Cemig (\$/kg)	Eólica (\$/kg)	Solar Fotovoltaica (\$/kg)	Hidroelétrica (\$/kg)	Termoelétrica (\$/kg)	
						Biomassa	Resíduo Sólido Urbano
1	153,11	9,70	6,58	6,52	7,96	7,06	12,39
5	765,57	7,92	4,81	4,74	6,19	5,29	10,62
20	3062,3	7,32	4,20	4,14	5,58	4,68	10,01

As tarifas de leilão de fonte solar e eólica foram as menores e isso se refletiu em um menor custo nivelado considerando que o custo da energia elétrica é um dos parâmetros mais importantes relativos à viabilidade econômica para eletrolisadores. Outra coisa a se observar é que o custo tende a se estabilizar com o aumento da capacidade da planta. No caso de compra de energia relativa à fonte solar, aumentos ainda maiores da capacidade do módulo dificilmente seriam capazes de produzir custos significativamente inferiores a 4,14 \$/kg. Para isso, o aumento da capacidade que conseguisse tal custo começaria a exceder o que existe já em produção no mercado em termos de capacidade por módulo. O alto LCOH observado no H₂ produzido com resíduo sólido urbano vem do alto custo da tarifa de leilão. Essa tarifa possui um alto custo por se tratar de um único projeto de uma Termoelétrica de 20 MW e, dessa forma, não ter sofrido os efeitos da economia de escala.

Com a adição de um PSA para garantia de pureza de 99,999% (ou 5N) são obtidos os resultados apresentados na Tabela 40:

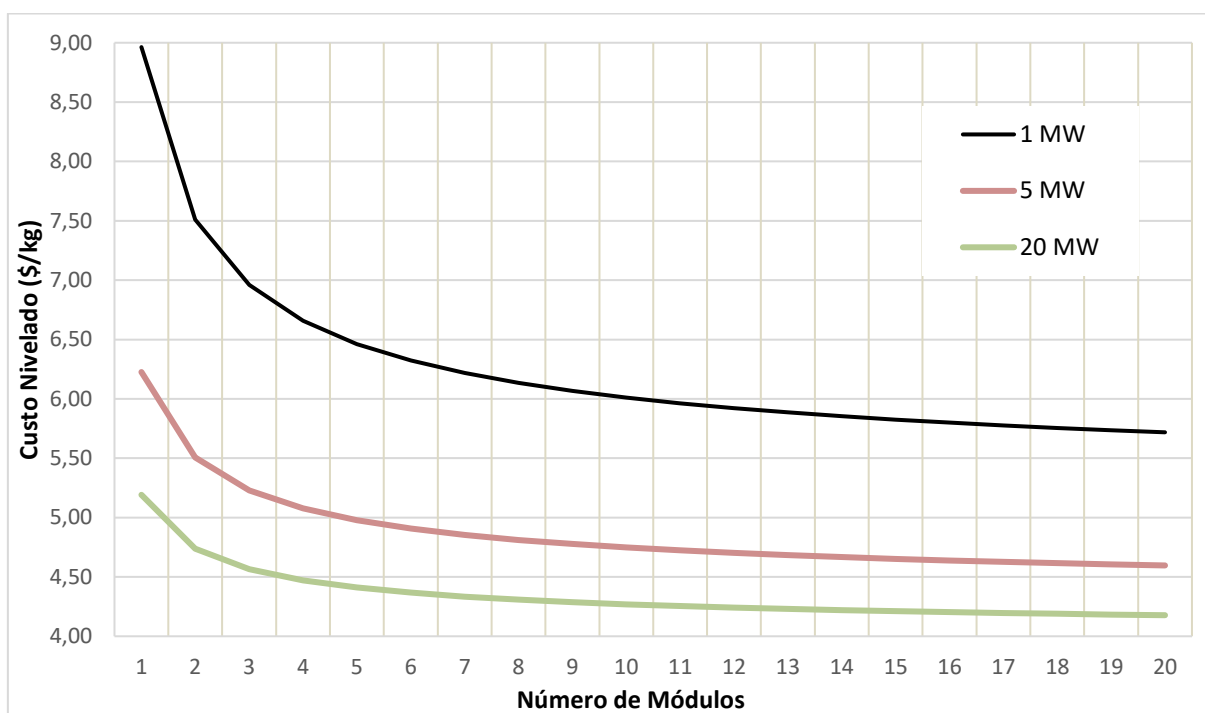
Tabela 40 - LCOH para módulos eletrolisadores de diferentes capacidades com pureza 5N e tarifas de diferentes fontes renováveis

Capacidade da Módulo (MW)	Produção de H ₂ (ton/ano)	Cemig (\$/kg)	Eólica (\$/kg)	Solar Fotovoltaica (\$/kg)	Hidroelétrica (\$/kg)	Termoelétrica (\$/kg)	
						Biomassa	Resíduo Sólido Urbano
1	136,27	12,47	8,96	8,89	10,52	9,51	15,49
5	681,36	9,73	6,23	6,16	7,78	6,77	12,76
20	2725,44	8,70	5,19	5,19	6,75	5,74	11,72

Uma pureza mais alta resultou em um custo nivelado mais alto em todas as condições apresentadas. Isso acontece devido aos custos do PSA, que são significativos, adicionados no CAPEX e na diminuição da produção devido ao fator de recuperação do PSA. Também pode ser observado que custos nivelados provenientes de tarifas elétricas mais altas mostram um maior aumento de custo nivelado dada a adição do PSA. Capacidades mais altas tendem a aliviar o aumento do custo nivelado de produção com a adição do PSA já que o custo de investimento por capacidade do PSA tende a aliviar com o aumento da escala do equipamento. Há, portanto, um aumento significativo no custo de produção do hidrogênio quando se busca uma pureza superior.

Em seguida, foi avaliado o impacto da adição de módulos na planta sobre o custo nivelado. Para essa análise, considerou-se que a planta operaria com um único sistema de purificação por PSA, um complexo de compressão e um sistema de armazenamento centralizados. Embora a configuração em que cada módulo possua seu próprio sistema de purificação, compressão e armazenamento, oferecendo maior flexibilidade operacional, uma redução significativa no custo nivelado só poderá ser alcançada com o efeito de economia de escala, possível ao dimensionar os sistemas de PSA, compressão e armazenamento centralizados, em vez de replicá-los em unidades independentes. A Figura 53 mostra esse comportamento para as três capacidades de módulo investigados utilizando a tarifa de energia de fonte eólica.

Figura 53 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com o número de módulos para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte eólica

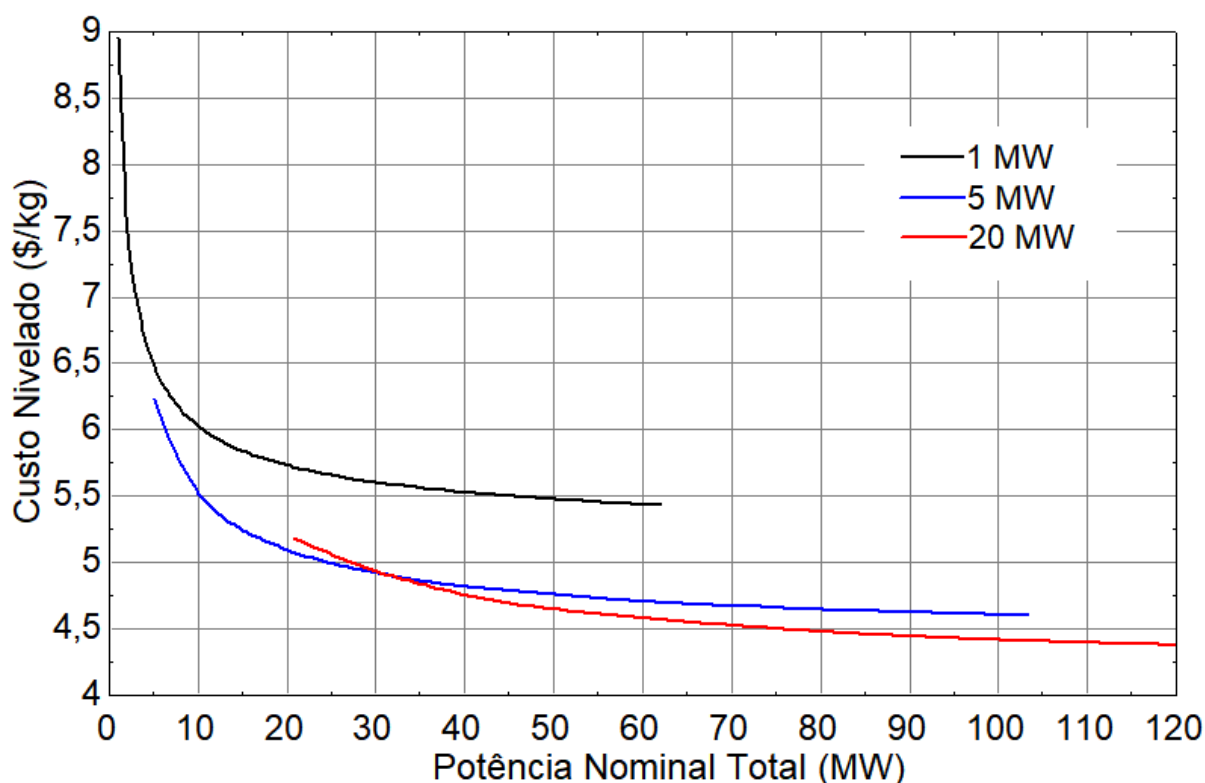


Fonte: Elaborada pelo Autor

Inicialmente, observa-se que, para as três capacidades de módulos avaliadas, a redução mais significativa do custo nivelado ocorre nas primeiras adições de módulos. Além disso, o efeito de economia de escala é mais pronunciado em módulos de menor capacidade. Por exemplo, um único módulo de 1 MW apresenta um custo nivelado próximo a 9 \$/kg, que é reduzido para 6,32 \$/kg com a adição de mais cinco módulos. Em contraste, para módulos de 20 MW, o custo nivelado inicial é de 5,19 \$/kg, caindo para 4,37 \$/kg com a adição de cinco módulos de mesma capacidade. Em termos relativos, isso representa uma redução de aproximadamente 30% no custo nivelado para módulos de 1 MW e de 15% para módulos de 20 MW, considerando o acréscimo de cinco novos módulos.

Esse mesmo comportamento foi analisado considerando o aumento da potência nominal que a adição do número de módulos produz. A Figura 54 apresenta isso para a adição de módulos de 1, 5 e 20 MW também para a tarifa de fonte eólica.

Figura 54 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com a potência nominal da planta para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte eólica

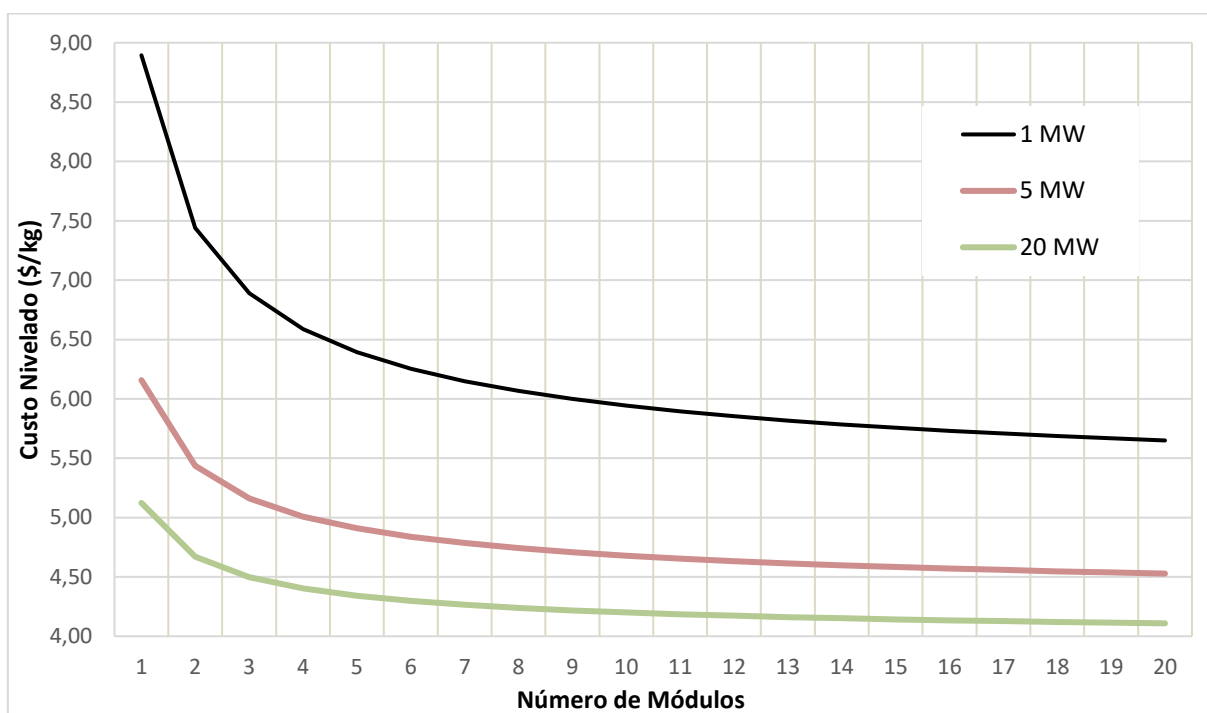


Fonte: Elaborada pelo Autor

O custo nivelado diminui de forma bastante brusca para a planta com módulos de 1 MW com a adição dos primeiros cinco módulos. Com potência nominal por volta de 5 MW, a diferença entre uma planta de cinco módulos de 1 MW e um único módulo de 5 MW é de 0,23 \$/kg. Essa diferença, no entanto, aumenta significativamente com a adição de módulos de 5 MW. Para uma potência nominal de aproximadamente 20 MW, quatro módulos de 5 MW se mostram mais atrativos economicamente do que um único módulo de 20 MW por uma margem de 0,11 \$/kg. Com a adição de mais módulos de 20 MW, a economia de escala volta a favorecer a planta com módulos de 20 MW, mas, no entanto, com uma margem de melhora econômica bem menos significativa do que a observada entre as plantas de 1 e 5 MW. O que todo esse comportamento aponta é que o aumento de potência por módulo só gera uma diminuição significativa do custo nivelado até certo ponto.

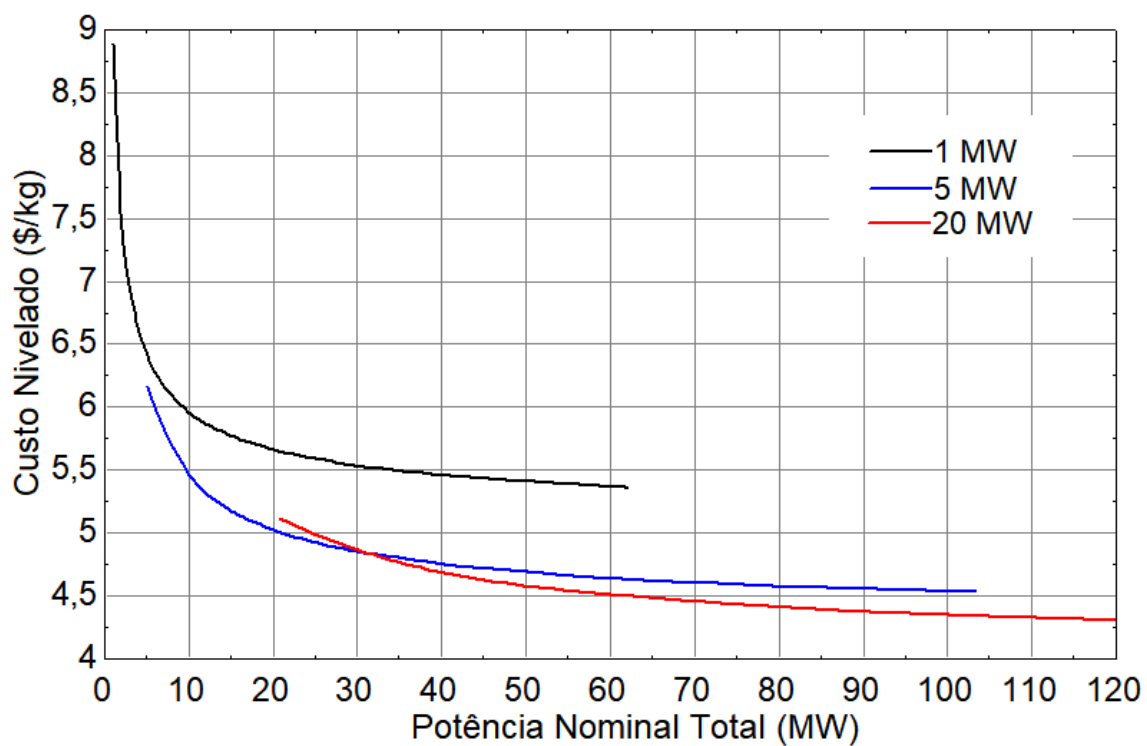
A Figura 55 e Figura 56 apresentam o comportamento do custo nivelado com o número de módulos e potência nominal para a tarifa de energia solar. Como as tarifas de leilão (Tabela 37) de fonte solar e eólicas são muito próximas, os resultados observados ficaram semelhantes para ambas fontes.

Figura 55 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com o número de módulos para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte solar



Fonte: Elaborada pelo Autor

Figura 56 - Comportamento do custo nivelado da planta de eletrólise com a potência nominal da planta para módulos de diferentes capacidades para tarifa de fonte solar

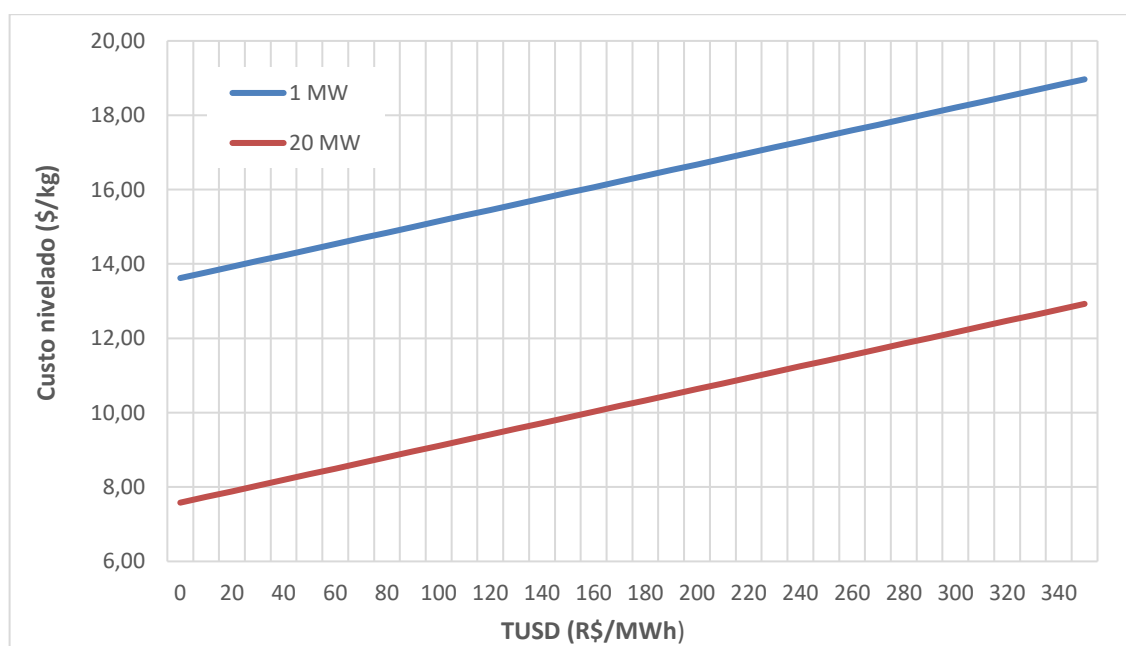


Fonte: Elaborada pelo Autor

Em seguida, foi analisado economicamente o custo nivelado de produção de hidrogênio no caso da produção própria da energia elétrica a ser utilizada. Isso foi feito com a inclusão do CAPEX das plantas de produção de energia e a exclusão do custo de compra da energia elétrica correspondente. O componente TUSD da tarifa, no entanto, ainda existirá sob alguma capacidade. No caso da consideração de que a energia é produzida totalmente em outra localidade que seja mais propensa para a produção de potência, toda a energia será consumida de forma compensada pela rede, sendo, portanto, a condição de maior gasto com a TUSD. Por outro lado, se a planta de produção de potência for conectada diretamente a planta de eletrólise, ainda haverá um gasto com a TUSD para a condição de se manter a produção de hidrogênio utilizando energia da rede devido as condições de intermitência da produção de potência inerentes das fontes solar e eólica. Além disso, as tarifas cobradas pelas CEMIG ao consumidor variam de acordo com nível de tensão, perfil de consumo, localização geográfica, regime contratual, existência de incentivos fiscais e etc (ANEEL, 2022).

Devido a estes fatores, foram construídas duas curvas de sensibilidade para as plantas de um único módulo (para 1 MW e 20 MW), operando com produção de energia solar própria instalada em outra localidade, variando a tarifa TUSD. Foi utilizado o valor fixo por potência contratada de demanda ponta e fora de ponta para as condições de modalidade tarifária azul e subgrupo A da CEMIG apresentadas na Tabela 38. Portanto, o TUSD da análise de sensibilidade do Figura 57 representa somente a parte de consumo da tarifa. Essas análises levam em conta pureza 5N.

Figura 57 - Comportamento do custo nivelado da eletrólise com a tarifa TUSD para módulos de diferentes capacidades utilizando energia solar própria



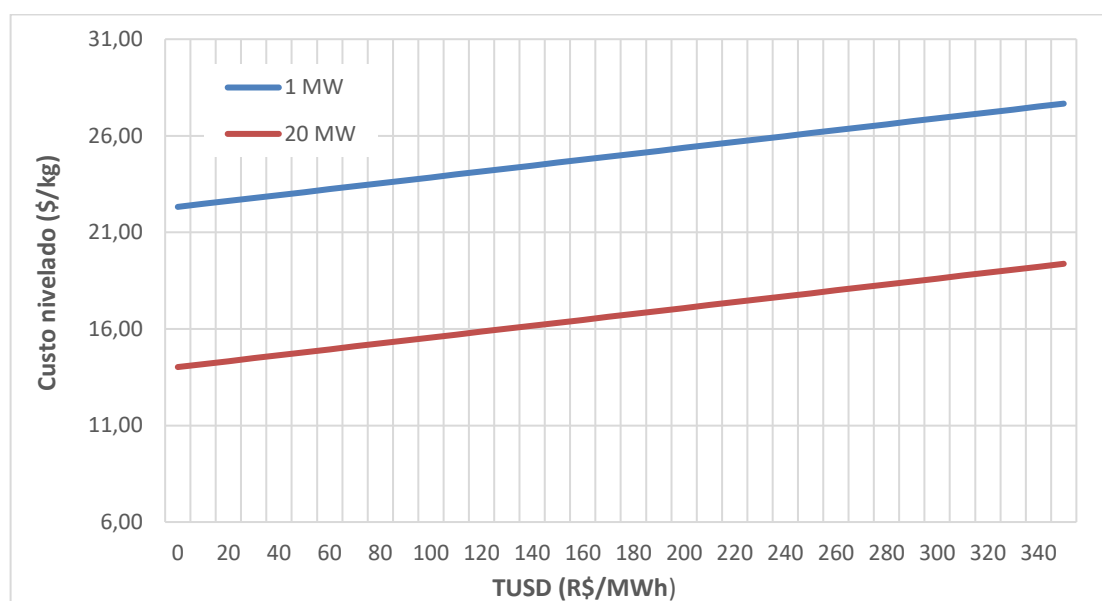
Fonte: Elaborada pelo Autor

Para se atender as potências nominais totais de 1,03 MW e 20,7 MW consideradas na Figura 57, levando em conta uma HSP média de 5,5, foram necessárias plantas fotovoltaicas de potência nominal de 4,29 MW e 85,6 MW, respectivamente.

A TUSD por consumo efetivo consultado na ANEEL (2024) da CEMIG variou entre 3,39 R\$/MWh até 77,57 R\$/MWh. Mas mesmo considerando esse custo como zero, o LCOH ainda é 53% maior do que observado quando a energia é comprada de leilão de fonte solar fotovoltaica, do que produzida por conta própria para capacidade 1 MW. Isso acontece porque o CAPEX da planta solar não é amortizado rápido o suficiente dada a exclusão do custo de energia da planta de eletrólise. Outra razão para essa disparidade é alta competitividade das tarifas dos leilões de energia. As tarifas de leilões de energias fazem uso da economia de escala proporcionada por plantas solares de grande porte, as margens reduzidas para geradores com contratos de energia de longo prazo, além das condições de financiamentos mais favoráveis que grandes geradores conseguem. Quando se leva em conta, no entanto, uma planta de módulo de 20 MW e uma TUSD de 0 até 77 R\$/MWh, um custo nivelado na faixa de 7,75 a 8,90 \$/kg é observado. Mesmo não sendo competitivo diretamente com a tarifa de leilão fotovoltaica, esses valores de custo nivelado conseguem ser mais atraentes que os valores obtidos com a tarifa da CEMIG de compra de energia. Um aumento da escala, certamente, irá produzir resultados ainda mais atrativos, mas somente até certo ponto conforme observado no comportamento do custo nivelado com a adição de módulos.

A Figura 58 apresenta o comportamento do custo nivelado com o valor da tarifa TUSD para o caso da inclusão da planta eólica no investimento.

Figura 58 - Comportamento do custo nivelado da eletrólise com a tarifa TUSD para módulos de diferentes capacidades utilizando energia eólica própria



Fonte: Elaborada pelo Autor

Como já era esperado, considerando que o CAPEX de planta eólicas chega a ser 2,5 vezes maior do que o de plantas fotovoltaicas, com base em valores de 2023 (Tabela 12), os custos nivelados de H₂ para plantas de eletrólise que produzem a própria energia via turbinas eólicas foram ainda piores dos apresentados com a adição de planta solar. Mesmo considerando TUSD por consumo efetivo igual a zero, o LCOH obtido ainda é 149% maior do obtido com a compra de energia a preço de leilão para capacidade de 1 MW.

Esses resultados demonstram ser pouco viável a produção própria de energia por meio de fontes solares fotovoltaicas e eólicas, pelos menos em escalas de um único módulo. É necessária uma economia de escala bastante alta para que se consiga valores de tarifa tão baixo quanto aos oferecidos em leilões de energia da mesma fonte de forma a amortizar o custo da adição do CAPEX das plantas de produção de potência no investimento.

5 CONCLUSÕES

Este estudo investigou o potencial técnico, econômico e ambiental da produção de hidrogênio por meio da gaseificação de nove diferentes tipos de resíduos de biomassa em cada uma das 66 microrregiões de Minas Gerais seguido pelo potencial técnico e econômico da eletrólise tipo PEM a partir de fontes de energia renováveis sob diferentes cenários. Para simular a gaseificação, foi desenvolvido um modelo de equilíbrio químico por minimização de Gibbs. Com esse modelo, foi realizado otimizações para se determinar o ponto de operação que maximiza a produção de hidrogênio para a gaseificação com ar, oxigênio puro e vapor/ar. Em seguida, foi determinado a partir dos dados de produção dos resíduos a quantidade teórica de hidrogênio é possível de ser produzida por ano com e sem aprimoramento dos gases. Por fim, foi realizado uma análise econômica para se determinar a viabilidade econômica usando como métrica o custo de produção do hidrogênio levando em conta o tempo de vida do projeto para: três cenários de coleta de resíduos, três condições de agente gaseificante e com ou sem aprimoramento dos gases por reatores WGS. Para a eletrólise, também foi desenvolvido um modelo para a construção da curva de polarização do eletrolisador. A partir do modelo, foi realizados análises de sensibilidade para a determinação do ponto de operação que maximiza a produção de hidrogênio. Por fim, foram realizados uma série de análises econômicas em cenários que compreendem a pureza do hidrogênio produzido, a tarifa de compra de energia para a produção, a escala da planta dado a adição de módulos e a inclusão da geração própria da potência a partir de fontes solar e eólica.

Começando com a gaseificação, foi concluído que os resíduos de eucalipto e o bagaço de cana possuem o maior potencial químico de produção de hidrogênio, seguidos pelos resíduos de milho, borra de café, palhiço de cana, casca de soja e casca de cacau para a gaseificação com o ar. Para a gaseificação com oxigênio, a ordem de potencial se mantém com a exceção da borra de café que passa a liderar o potencial químico e o palhiço de cana que passa a mostrar um potencial inferior ao da cascas de soja e cacau.

Na gaseificação com ar e vapor, foi verificado que existe um ponto de maximização da produção de hidrogênio que depende também da razão vapor/biomassa (SB). A adição de vapor na gaseificação além desse ponto não aumenta mais a produção de hidrogênio. A ordem de potencial de produção de H₂ nesse caso ficou com a borra de café, bagaço de cana, os resíduos de eucalipto, os resíduos de milho, a casca de cacau e de soja.

Considerando somente os produtos na saída do gaseificador, também foi concluído que o uso do oxigênio puro aumentou consistentemente de cerca de 6% a 9,7% a produção mássica de hidrogênio dos resíduos. Já o uso de vapor com o ar aumentou quase 40% a produção mássica de hidrogênio da espiga de milho e uma média de cerca de 30% entre os outros resíduos.

Quanto ao potencial teórico de produção, ou seja, considerando todo o recolhimento e uso de 100% dos resíduos para a gaseificação e o aprimoramento de gases, Minas Gerais poderia teoricamente produzir 3.429.581,01 ton ano⁻¹ de hidrogênio pela gaseificação com ar, 3.790.627,98 ton ano⁻¹ com a

gaseificação com oxigênio e 3.445.327,08 ton ano⁻¹ com a gaseificação com ar/vapor. Frisando que esse são valores teóricos também por não considerarem taxa de recuperação dos separadores de H₂.

Entre os resíduos, o bagaço de cana possui o maior potencial no estado de Minas Gerais com uma contribuição de aproximadamente 54,6%. Se somado o palhiço de cana, a contribuição dos resíduos de cana de açúcar representa 81,6% do potencial total. E das 66 microrregiões de Minas Gerais, apenas nove carregam consigo 79,8% do potencial mostrando que não há uma distribuição uniforme do potencial no estado. Os maiores destaques do estado ficam para as microrregiões de Uberaba e Frutal com 23,9% e 18,24% da contribuição no potencial técnico, respectivamente.

A utilização do monóxido de carbono presente nos gases resultantes da gaseificação para a produção adicional de hidrogênio em reatores catalíticos apresenta-se como um fator preponderante no âmbito econômico. O custo nivelado do hidrogênio em todas as microrregiões estudadas chega a cair quase pela metade, demonstrado assim que o aprimoramento dos gases na produção de hidrogênio é economicamente mandatório.

Ao avaliar qualitativamente as microrregiões, considerando o custo econômico de produção de hidrogênio em três cenários de recolhimento e uso de resíduos, para a gaseificação com oxigênio, em uma planta com aprimoramento de gases, constatou-se que, mesmo com os custos associados à unidade de separação de ar, devido à redução da vazão do gás de síntese, os custos dos demais componentes diminuem. Aliado a isso, a gaseificação com oxigênio produz um excedente de hidrogênio. Como resultado, a gaseificação com oxigênio demonstra ter um custo um pouco mais atraente do que a gaseificação com ar. Além disso, a gaseificação com ar/vapor, embora produza uma pequena quantidade adicional de hidrogênio, não conseguiu cobrir os custos associados à produção de vapor, resultando em custos um pouco mais altos do que a gaseificação com ar.

Uma simulação de Monte Carlo foi realizada utilizando como parâmetros de entrada a taxa mínima de atratividade (TMA), fator de recuperação de resíduos, CEPCI, fator CAPEX, impostos locais, preço do resíduo agrícola, preço da água, fator de disponibilidade, custo com mão de obra e preço do resíduo florestal. Como representantes das microrregiões, foram escolhidas um representante dos casos base com resultados econômicos bons, médios e ruins. Verificou-se que Uberaba na gaseificação com ar tem maior probabilidade de conseguir um custo nivelado inferior ao seu custo nivelado do caso base enquanto que na gaseificação com oxigênio há mais probabilidade de um custo acima do seu caso base. Unai, em todos os três casos de agente gaseificante, tem uma probabilidade de mais de 50% de se manter na faixa moderada (entre 3 e 5,5 \$/kg). E Juiz de Fora, também em todos os casos de agente oxidante, tem mais de 59% de chance de se manter na faixa de alto e altíssimo custo (entre 5,5 e 14,5 \$/kg). A análise de sensibilidade da simulação mostrou que dentre os parâmetros de entrada utilizados, a TMA, o fator de recuperação, o fator CAPEX, o CEPCI e os impostos locais são as variáveis que realmente têm impacto no custo nivelado de produção do hidrogênio. As outras variáveis tiveram ou pouco impacto ou impacto desprezível em comparação aos outros parâmetros. E plantas de maior escala tendem a tornar

a influência do custo com eletricidade e resíduos agrícolas mais expressiva.

Foi realizada uma análise do ciclo de vida utilizando a métrica de emissões de carbono equivalente, considerando todas as etapas do processo de produção de hidrogênio por meio da gaseificação de resíduos de biomassa. Observou-se que, em termos ambientais, o reaproveitamento dos gases do PSA é essencial devido à pequena quantidade de metano emitida e à sua equivalência de 21 vezes do potencial de aquecimento global do dióxido de carbono. As emissões específicas na gaseificação com ar, com oxigênio e com ar/vapor foram, respectivamente, de 2,44, 2,27 e 1,53 $\text{kg}_{\text{CO}_2\text{eq}}/\text{kg}_{\text{H}_2}$, considerando o uso dos gases de purga do PSA.

Em células PEM, temperaturas mais altas aumentam a eficiência. No entanto, os fabricantes limitam a temperatura a até 80 °C para evitar uma redução significativa no tempo de operação da membrana polimérica. Por outro lado, pressões mais altas no cátodo reduzem a eficiência da célula, mas contribuem para a economia de energia necessária à compressão mecânica do hidrogênio.

Um nível mais elevado de pureza do hidrogênio produzido pela eletrólise PEM requer a inclusão de um PSA, o que resultou em um aumento significativo no custo nivelado de produção. Esse aumento foi proporcionalmente mais elevado em capacidades menores devido ao efeito de escala. Para um módulo de 20 MW, considerando a tarifa de energia eólica de leilão, observou-se um aumento de cerca de 24%. Já para um módulo de 1 MW, com a mesma tarifa, o aumento foi de 36% no custo nivelado.

O comportamento do custo nivelado também foi analisado em relação à adição de módulos de eletrólise à planta como estratégia para aumento de escala. Observou-se um efeito de escala mais significativo em capacidades menores e com a adição dos primeiros módulos. Após esse ponto, o custo nivelado tende a permanecer relativamente constante. Esse comportamento ocorre devido à linearidade característica do efeito modular na análise econômica.

Com base no Atlas Eólico de Minas Gerais, verificou-se que, nas condições máximas de produção eólica no estado, há um potencial teórico para a produção de 5.350.163,93 toneladas de hidrogênio por ano. E com base no estudo da EPE (2018a), considerando as áreas aptas do estado de Minas Gerais para a produção solar fotovoltaica, há um potencial teórico para a produção de 65.255.103 toneladas de hidrogênio por ano.

Foi verificada a viabilidade da geração própria de energia por meio de fontes solar fotovoltaica e eólica para a produção de hidrogênio. Observou-se que a economia de energia não é suficiente para amortizar o CAPEX adicional exigido por ambas as fontes, pelo menos em escalas correspondentes a um único módulo. As tarifas de leilão apresentam uma série de vantagens que as tornam mais atrativas em comparação à geração própria.

6 RECOMENDAÇÕES DE TRABALHOS FUTUROS

Com base nos resultados e limitações identificadas ao longo deste estudo, recomenda-se a realização de investigações futuras que possam complementar e aprofundar a compreensão sobre o potencial técnico, econômico e ambiental da produção de hidrogênio a partir de fontes renováveis em Minas Gerais. As principais direções sugeridas são:

- Extensão da Análise de Ciclo de Vida (ACV) para as regiões economicamente atrativas na gaseificação: Embora a ACV tenha sido aplicada ao processo de gaseificação de resíduos de biomassa em Uberaba, a sua aplicação específica às outras microrregiões que demonstraram atratividade econômica permitirá uma avaliação mais detalhada do desempenho ambiental mais completo para o estado de Minas Gerais.
- Inclusão da Análise de Ciclo de Vida para o processo de eletrólise: Recomenda-se a realização de uma ACV específica para o processo de eletrólise do tipo PEM, considerando tanto a energia solar fotovoltaica quanto a energia eólica como fontes de alimentação. Essa análise é fundamental para compreender os impactos ambientais totais associados à produção de hidrogênio via eletrólise, especialmente em relação à pegada de carbono e ao consumo de recursos naturais.
- Aplicação de simulação de Monte Carlo para a análise econômica da eletrólise: A modelagem econômica da eletrólise pode ser significativamente aprimorada pela adoção de simulações de Monte Carlo, a exemplo do que foi realizado para a gaseificação. Essa abordagem permitirá identificar os parâmetros de maior sensibilidade e incerteza na determinação do LCOH, contribuindo para uma análise de risco mais robusta.
- Análise da infraestrutura logística para o transporte de hidrogênio: Uma etapa essencial para a viabilidade prática da produção de hidrogênio em larga escala é o estudo da infraestrutura existente e necessária para o transporte do vetor energético. Assim, recomenda-se uma análise detalhada das rotas potenciais de escoamento do hidrogênio das microrregiões produtoras — muitas vezes isoladas — até os centros consumidores, levando em conta a disponibilidade de dutos, estradas, ferrovias e possibilidades de armazenamento intermediário.

Essas recomendações têm o potencial de contribuir significativamente para a consolidação do hidrogênio como vetor energético estratégico em Minas Gerais, fornecendo subsídios técnicos e científicos para políticas públicas e decisões de investimento mais bem fundamentadas.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDIN, Z.; WEBB, C. J.; GRAY, E. Mac A. Modelling and simulation of a proton exchange membrane (PEM) electrolyser cell. **International journal of hydrogen energy**, v. 40, n. 39, p. 13243-13257, 2015.

ADHIKARI, Sushil; FERNANDO, Sandun. Hydrogen membrane separation techniques. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 45, n. 3, p. 875-881, 2006.

AG Capital. O que são encargos trabalhistas? Disponível em: <https://www.agcapital.com.br/blog/42-o-que-sao-encargos-trabalhistas#:~:text=Os%20percentuais%20que%20voc%C3%AA%20deve,regime%20tribut%C3%A1rio%20do%20seu%20neg%C3%B3cio.&text=Ou%20seja:%20a%20empresa%20do,e%20contribui%C3%A7%C3%B5es%20parafiscais%20a%20terceiros.&text=Dessa%20maneira%2C%20a%20empresa%20paga,RAT%20m%C3%A1ximo%2C%20de%203%25>. Acesso em: 10 jul. 2024.

AGBLI, K. S., PÉRA, M. C., HISSEL, D., RALLIÈRES, O., TURPIN, C., & DOUMBIA, I. Multiphysics simulation of a PEM electrolyser: Energetic Macroscopic Representation approach. **International journal of hydrogen energy**, v. 36, n. 2, p. 1382-1398, 2011.

Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL). (2022). *Procedimentos de Regulação Tarifária - PRORET: Submódulo 7.1 - Estrutura Tarifária das Concessionárias de Distribuição de Energia Elétrica (Versão 2.5C)*. Disponível em: https://www2.aneel.gov.br/cedoc/aren20221003_Proret_Submod_7_1_V2_5C.pdf. Acesso em: 18 jan. 2025.

Agência Nacional de Energia Elétrica (ANEEL). *Base de Dados das Tarifas de Energia Elétrica - Luz na Tarifa*. Disponível em: <https://portalrelatorios.aneel.gov.br/luznatarifa/basestarifas#!>. Acesso em: 18 jan. 2025.

AHMAD, Nor Azlina; ZAINAL, Z. A. Performance and chemical composition of waste palm cooking oil as scrubbing medium for tar removal from biomass producer gas. **Journal of Natural Gas Science and Engineering**, v. 32, p. 256-261, 2016.

AHMED, K. W., JANG, M. J., PARK, M. G., CHEN, Z., & FOWLER. Effect of components and operating conditions on the performance of PEM electrolyzers: A review. **Electrochem**, 3.4: 581-612. 2022.

ALSULTANNTY, Yas A.; AL-SHAMMARI, Nayef N. Oxygen specific power consumption comparison for air separation units. **Engineering Journal**, v. 18, n. 2, p. 67-80, 2014.

ALTAFINI, Carlos R.; WANDER, Paulo R.; BARRETO, Ronaldo M. Prediction of the working parameters of a wood waste gasifier through an equilibrium model. **Energy conversion and management**, v. 44, n. 17, p. 2763-2777, 2003.

ANDERSON, S. J.; MERRILL, J. K.; KLOPFENSTEIN, T. J. Soybean hulls as an energy supplement for the grazing ruminant. **Journal of Animal Science**, v. 66, n. 11, p. 2959-2964, 1988.

ANDERSSON, Jim; LUNDGREN, Joakim. Techno-economic analysis of ammonia production via integrated biomass gasification. **Applied Energy**, v. 130, p. 484-490, 2014.

ANDERSSON, Joakim; GRÖNKVIST, Stefan. Large-scale storage of hydrogen. **International journal of hydrogen energy**, v. 44, n. 23, p. 11901-11919, 2019.

ANDRITZ AG. Proton Exchange Membrane (PEM). Disponível em: <https://www.andritz.com/products-en/group/metals/green-hydrogen/pem>. Acesso em: 20 jun. 2024.

ANEEL. *Modelo de AIR – SGT – Tarifa Binômia*. Agência Nacional de Energia Elétrica, 2021. Disponível em: <https://antigo.aneel.gov.br/documents/656877/18485189/4+Modelo+de+AIR+-+SGT+-+Tarifa-Binomia.pdf/ea152997-0f6e-b2d1-d443-8354cd2a380a>. Acesso em: 17 jan. 2025.

ANNIWAER, Aisikaer; CHAIHAD, Nichaboon; ZHANG, Mengjuan; WANG, Chao; Yu, Tao; KASAI, Yutaka; ABUDULA, Abuliti; GUAN, Guoqing. Hydrogen-rich gas production from steam co-gasification of banana peel with agricultural residues and woody biomass. **Waste Management**, v. 125, p. 204-214, 2021.

APT, J., NEWCOMER, A., LAVE, L. B., DOUGLAS, S., & DUNN, L. M. An engineering-economic analysis of syngas storage. 2008.

ASHIZAWA, M., HARA, S., KIDOGUCHI, K., INUMARU, J. Gasification characteristics of extra-heavy oil in a research-scale gasifier. **Energy**, v. 30, n. 11-12, p. 2194-2205, 2005.

ATLAS DE BIOMASSA DE MINAS GERAIS. Ruiبران Januário dos Reis e Luciano Sathler dos Reis (Org.) Editora Rosa Gráfica Belo Horizonte. 2017

BACON, D. W., DOWNIE, J., HSU, J. C., & PETERS, J. (1985). Modelling of fluidized bed wood gasifiers. **Fundamentals of thermochemical biomass conversion**, pp. 717-732.

BACKES, Jana Gerta; HINKLE-JOHNSON, Rowan; TRAVERSO, Marzia. The influence of the Functional Unit on the comparability of life cycle assessments in the construction sector: A Systematic Literature Review and attempt at unification for Reinforced Concrete. **Case Studies in Construction Materials**, v. 18, p. e01966, 2023.

BALAS, Marek, LISY, Martin., KUBICEK, Jiri., & POSPISIL, Jiri. Syngas cleaning by wet scrubber. **Trans. Heat Mass Transf**, v. 9, p. 195-204, 2014.

BANOS, R., MANZANO-AGUGLIARO, F., MONTOYA, F. G., GIL, C., ALCAYDE, A., &

GÓMEZ, J. Optimization methods applied to renewable and sustainable energy: A review. **Renewable and sustainable energy reviews**, v. 15, n. 4, p. 1753-1766, 2011.

BARBANERA, Marco; MUGUERZA, I. F. Effect of the temperature on the spent coffee grounds torrefaction process in a continuous pilot-scale reactor. **Fuel**, v. 262, p. 116493, 2020.

BARTHÉLÉMY, Hervé; WEBER, Mathilde; BARBIER, Françoise. Hydrogen storage: Recent improvements and industrial perspectives. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 42, n. 11, p. 7254-7262, 2017.

BARUAH, Dipal; BARUAH, D. C. Modeling of biomass gasification: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 39, p. 806-815, 2014.

BINDER, Matthias; KRAUSSLER, Michael; KUBA, Matthias; LUISSER, Markus. **Hydrogen from biomass gasification**. IEA Bioenergy. 2018.

BONANNO, M., MÜLLER, K., BENSMANN, B., HANKE-RAUSCHENBACH, R., AILI, D., FRANKEN, T., ... & THIELE, S.. Review and prospects of PEM water electrolysis at elevated temperature operation. **Advanced materials technologies**, v. 9, n. 2, p. 2300281, 2024.

BOSHAGH, Fatemeh, ROSTAMI Khosrow, MOAZAMI Nasrin. Dark fermentative hydrogen production in packed-bed bioreactor using the Persian Gulf dead coral, ceramic saddle, and ceramic ball as support matrixes. **International Journal of Hydrogen Energy**. 2023

Brasil. Presidência da República. Lei nº 14.663, de 14 de dezembro de 2023. Disponível em: https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/_ato2023-2026/2023/lei/114663.htm. Acesso em: 10 jul. 2024.

BRAUNS, Jörn; TUREK, Thomas. Alkaline water electrolysis powered by renewable energy: A review. **Processes**, v. 8, n. 2, p. 248, 2020.

BUFFI, Marco; PRUSSI, Matteo; SCARLAT, Nicolae. Energy and environmental assessment of hydrogen from biomass sources: Challenges and perspectives. **Biomass and Bioenergy**, v. 165, p. 106556, 2022.

BUTTNER, Alexander; SPLIETHOFF, Hartmut. Current status of water electrolysis for energy storage, grid balancing and sector coupling via power-to-gas and power-to-liquids: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 82, p. 2440-2454, 2018.

CALLEJÓN-FERRE, A. J.; VELÁZQUEZ-MARTÍ, B.; LÓPEZ-MARTÍNEZ, J. A.; MANZANO-AGUGLIARO, F. Greenhouse crop residues: Energy potential and models for the prediction of their higher heating value. **Renewable and sustainable energy reviews**, v. 15, n. 2, p. 948-955, 2011.

CEMIG. *Atlas Eólico de Minas Gerais*. Companhia Energética de Minas Gerais, 2010. Disponível em: <https://www.cemig.com.br/wp-content/uploads/2021/03/atlas-eolico-mg.pdf>. Acesso

em: 22 jan. 2025.

CEMIG. *Atlas Solarimétrico de Minas Gerais – Volume II.* Companhia Energética de Minas Gerais, 2021. Disponível em: <https://www.cemig.com.br/wp-content/uploads/2021/03/atlas-solarimetrico-vol-ii-mg.pdf>. Acesso em: 2 jan. 2025.

Centro Universitário Tiradentes (Unit). Engenheiro elétrico: perspectivas salariais. Disponível em: <https://www.unit.br/blog/engenheiro-eletrico-perspectivas-salariais#:~:text=Portanto%2C%20j%C3%A1%20pode%20se%20ter,%3A%20R%24%2015.693%2C49>. Acesso em: 10 jul. 2024.

CERVI, Walter Rossi et al. Mapping the environmental and techno-economic potential of biojet fuel production from biomass residues in Brazil. **Biofuels, Bioproducts and Biorefining**, v. 15, n. 1, p. 282-304, 2021.

CHANDESRIS, M., MÉDEAU, V., GUILLET, N., CHELGHOU, S., THOBY, D., & FOUADONANA, F. Membrane degradation in PEM water electrolyzer: Numerical modeling and experimental evidence of the influence of temperature and current density. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 40, n. 3, p. 1353-1366, 2015.

CHARDONNET C, GIORDANO V, RAPOPORT S et al. Study on early business cases for H₂ in energy storage and broadly power to H₂ applications. P2H-BC/4NT/0550274/000/ 03, A study prepared for the FCH-JU by Tractebel and Hinicio, 16; 2017.

CHAU, Chi Kwan; LEUNG, T. M.; NG, W. Y. A review on life cycle assessment, life cycle energy assessment and life cycle carbon emissions assessment on buildings. **Applied energy**, v. 143, p. 395-413, 2015.

CHEMETOVA, C., MOTA, D., FABIÃO, A., GOMINHO, J., RIBEIRO, H. Low-temperature hydrothermally treated Eucalyptus globulus bark: From by-product to horticultural fiber-based growing media viability. **Journal of Cleaner Production**, v. 319, p. 128805, 2021.

CHEMICAL ENGINEERING - The Chemical Engineering Plant Cost Index, 2023. Disponível em: <<https://www.chemengonline.com/pci-home>>. Acesso em 21 de jan de 2024.

CHEN, P., SHEN, T. A., XIE, Y., & SU, X. Initial flame propagation characteristics of the hydrogen spherical premixed flame. **International Journal of Hydrogen Energy**, 2023.

CHEN, X., ZHANG, Y., XU, B., Li, Y. A simple model for estimation of higher heating value of oily sludge. **Energy**, v. 239, p. 121921, 2022.

CHERUBIN, M. R., FRANCHI, M. R. A., DE LIMA, R. P., DE MORAES, M. T., & DA LUZ, F. B. Sugarcane straw effects on soil compaction susceptibility. **Soil and Tillage Research**, v. 212, p. 105066, 2021.

CHOI, Pyoungho; BESSARABOV, Dmitri G.; DATTA, Ravindra. A simple model for solid polymer electrolyte (SPE) water electrolysis. *Solid State Ionics*, v. 175, n. 1-4, p. 535-539, 2004.

CHONG, E.K.P., ZAK S.H. An Introduction to Optimization, **Wiley-Interscience 4rd edition**, 2013.

CIPRIANI, Giovanni et al. Perspective on hydrogen energy carrier and its automotive applications. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 39, n. 16, p. 8482-8494, 2014.

COLANTONI, Andrea et al. Spent coffee ground characterization, pelletization test and emissions assessment in the combustion process. **Scientific reports**, v. 11, n. 1, p. 1-14, 2021.

COLLARD, Marie; TEYCHENÉ, Benoit; LEMÉE, Laurent. Comparison of three different wastewater sludge and their respective drying processes: Solar, thermal and reed beds–Impact on organic matter characteristics. **Journal of environmental management**, v. 203, p. 760-767, 2017.

COMPANHIA ENERGÉTICA DE MINAS GERAIS – CEMIG. Valores de tarifas e serviços. Disponível em: <<https://www.cemig.com.br/atendimento/valores-de-tarifas-e-servicos/>>. Acesso em: 7 ago. 2024.

CORMOS, Calin-Cristian; VATOPOULOS, Konstantinos; TZIMAS, Evangelos. Assessment of the consumption of water and construction materials in state-of-the-art fossil fuel power generation technologies involving CO₂ capture. **Energy**, v. 51, p. 37-49, 2013.

CORTAZAR, M. et al. A comprehensive review of primary strategies for tar removal in biomass gasification. **Energy Conversion and management**, v. 276, p. 116496, 2023.

CUCURACHI, S., SCHERER, L., GUINÉE, J., & TUKKER, A. Life cycle assessment of food systems. **One Earth**, v. 1, n. 3, p. 292-297, 2019.

DA SILVA, Marcelo Bacci; DOS SANTOS MORAIS, Anderson. Avaliação energética do bagaço de cana em diferentes níveis de umidade e graus de compactação. **XXVIII Encontro Nacional de Engenharia de Produção**, Rio de Janeiro, 2008.

DAOUDI, Camilia; BOUNAHMIDI, Tijani. Overview of alkaline water electrolysis modeling. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 49, p. 646-667, 2024.

DAWOOD, Furat; ANDA, Martin; SHAFIULLAH, G. M. Hydrogen production for energy: An overview. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 45, n. 7, p. 3847-3869, 2020.

DE SALES, C. A. V. B., MAYA, D. M. Y., LORA, E. E. S., JAÉN, R. L., REYES, A. M. M., GONZÁLEZ, A. M., ... & MARTÍNEZ, J. D. (2017). Experimental study on biomass (eucalyptus spp.) gasification in a two-stage downdraft reactor by using mixtures of air, saturated steam and oxygen as gasifying agents. **Energy conversion and management**, v. 145, p. 314-323, 2017.

DEBE, M. K., HENDRICKS, S. M., VERNSTROM, G. D., MEYERS, M., BROSTROM, M., STEPHENS, M., ... & ANDERSON, E. B. Initial performance and durability of ultra-low loaded NSTF electrodes for PEM electrolyzers. *Journal of the Electrochemical Society*, v. 159, n. 6, p. K165, 2012.

DENADAI, Marcelo Scantamburlo. Caracterização e avaliação da umidade em fardos de palhiço de cana-de-açúcar e economicidade de processos de recolhimento. 2018.

DI BLASI, Colomba. Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical engineering science*, v. 55, n. 15, p. 2931-2944, 2000.

DIAZ-MATEUS, Fabian Andrey; ALVAREZ-CASTRO, Helver Crispiniano; CHAVES-GUERRERO, Arlex. CFD simulation of sugarcane bagasse combustion in an industrial grate boiler. *Dyna*, v. 85, n. 204, p. 169-176, 2018.

DION, L.-M.; LEFSRUD, M.; ORSAT, V.; CIMON, C. Biomass gasification and syngas combustion for greenhouse CO₂ enrichment. *BioResources*, v. 8, n. 2, p. 1520-1538, 2013.

DU, Naiying et al. Anion-exchange membrane water electrolyzers. *Chemical reviews*, v. 122, n. 13, p. 11830-11895, 2022.

EMBRAPA. Florestas. Transferência de Tecnologia. Eucalipto. (2019). Disponível em: <<https://www.embrapa.br/florestas/transferencia-de-tecnologia/eucalipto/perguntas-e-respostas#:~:text=Qual%20a%20esp%C3%A9cie%20de%20eucalipto,Am%C3%A9rica%20Central%20e%20do%20Sul>>. Acesso em 25 de jun. de 2022.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA – EPE. Informe vencedores LEN A-5 2022. Disponível em: <https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-665/Informe%20Vencedores%20LEN%20A5_2022.pdf>. Acesso em: 7 ago. 2024.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (EPE). **Potencial dos recursos energéticos no horizonte 2050**. Rio de Janeiro: EPE, 2018a. Disponível em: https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-227/topico-416/NT04%20PR_RecursosEnergeticos%202050.pdf. Acesso em: 18 mar. 2025.

EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA (EPE). **Potencial fotovoltaico – Resumo por unidade federativa**. Rio de Janeiro: EPE, 2018b. Disponível em: <https://www.epe.gov.br/sites-pt/publicacoes-dados-abertos/publicacoes/PublicacoesArquivos/publicacao-227/topico-416/Potencial%20FV%20-%20Resumo%20UF.xlsx>. Acesso em: 22 mar. 2025.

EPE – EMPRESA DE PESQUISA ENERGÉTICA. Bases para a consolidação da estratégia brasileira do hidrogênio. **Nota Técnica No EPE-DEA-NT-003/2021**. Brasília: EPE, 2021.

ESALQ-LOG - Grupo de Pesquisa e Extensão em Logística Agroindustrial. **SIFRECA - Sistema**

de Informações de Fretes, 2021. Disponível em: < <https://sifreca.esalq.usp.br/> >. Acesso em: 25 de jun de 2022.

EUROPEAN ENVIRONMENTAL AGENCY (EEA). *Methane emissions in the EU: the key to immediate action on climate change*. Briefing n° 21/2022. Luxemburgo: EEA, nov. 2022. Disponível em: <https://www.eea.europa.eu/publications/methane-emissions-in-the-eu>. Acesso em: 13 jun. 2025.v

EWT WATER TECHNOLOGY. *Demineralised water*. Demineralised Water in Boiler Feed Water Treatment Applications. 2018. Disponível em: <https://www.ewt-wasser.de/en/knowledge/demineralised-water.html>. Acesso em: 07 nov. 2024.

FEEDSTOCK, Estimates–Wood. Equipment design and cost estimation for small modular biomass systems, synthesis gas cleanup, and oxygen separation equipment. **National Renewable Energy Laboratory**, 2006.

FERMOSO, J., ARIAS, B., PEVIDA, C., PLAZA, M., RUBIERA, F., PIS, J. Kinetic models comparison for steam gasification of different nature fuel chars. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 91, n. 3, p. 779-786, 2008.

FIASCHI, Daniele; MICHELINI, Marco. A two-phase one-dimensional biomass gasification kinetics model. **Biomass and Bioenergy**, v. 21, n. 2, p. 121-132, 2001.

FORBES. Indústria de cacau do Brasil vê alta de 5% no processamento em 2022. 2022. Disponível em: < <https://forbes.com.br/forbesagro/2022/02/industria-de-cacau-do-brasil-ve-alta-de-5-no-processamento-em-2022/> >. Acesso em 22 de jun. de 2022.

GAGLIANO, A., NOCERA, F., PATANIA, F., BRUNO, M., CASTALDO, D. G. A robust numerical model for characterizing the syngas composition in a downdraft gasification process. **Comptes Rendus Chimie**, v. 19, n. 4, p. 441-449, 2016.

GALLARDO, Felipe Ignacio; FERRARIO, Andrea Monforti; LAMAGNA, Mario; BOCCI, Enrico; GARCIA, Davide Astiaso; BAEZA-JERIA, Tomas E. A Techno-Economic Analysis of solar hydrogen production by electrolysis in the north of Chile and the case of exportation from Atacama Desert to Japan. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 46, n. 26, p. 13709-13728, 2021.

GAMBAROTTA, Agostino; MORINI, Mirko; ZUBANI, Andrea. A non-stoichiometric equilibrium model for the simulation of the biomass gasification process. **Applied Energy**, v. 227, p. 119-127, 2018.

GAO, J., ZHAO, Y., SUN, S., CHE, H., ZHAO, G., WU, J. Experiments and numerical simulation of sawdust gasification in an air cyclone gasifier. **Chemical engineering journal**, v. 213, p. 97-103, 2012.

GARCÍA-PÉREZ, Manuel; CHAALA, Abdelkader; ROY, Christian. Vacuum pyrolysis of

sugarcane bagasse. **Journal of analytical and applied pyrolysis**, v. 65, n. 2, p. 111-136, 2002.

GARCÍA-VALVERDE, Rafael; ESPINOSA, Nieves; URBINA, Antonio. Simple PEM water electrolyser model and experimental validation. *international journal of hydrogen energy*, v. 37, n. 2, p. 1927-1938, 2012.

GILTRAP, D. L.; MCKIBBIN, R.; BARNES, G. R. G. A steady state model of gas-char reactions in a downdraft biomass gasifier. **Solar Energy**, v. 74, n. 1, p. 85-91, 2003.

GLOBAL MARKET INSIGHTS (2020). Hydrogen Generation Market to hit \$160 billion by 2026, Says Global Market Insights, Inc. Disponível em: <https://www.globenewswire.com/news-release/2020/04/01/2009765/0/en/Hydrogen-Generation-Market-to-hit-160-billion-by-2026-Says-Global-Market-Insights-Inc.html>. Acessado em 18 de agosto de 2021.

GONZALEZ, A. M.; LORA, E. E. S.; PALACIO, J. C. E.; & DEL OLMO, O. A. A. Hydrogen production from oil sludge gasification/biomass mixtures and potential use in hydrotreatment processes. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 43, n. 16, p. 7808-7822, 2018.

GRASYS. Hydrogen plants: Pressure swing adsorption (PSA). Available at: <https://www.grasys.com/products/hydrogen-plants/press-swing-adsorption-psa/>. Accessed on: 14 Aug. 2024.

GRIGORIEV, S. A., FATEEV, V. N., BESSARABOV, D. G., & MILLET, P. Current status, research trends, and challenges in water electrolysis science and technology. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 45, n. 49, p. 26036-26058, 2020.

GRIGORIEV, S. A.; KALINNIKOV, A. A.; MILLET, P.; POREMBSKY, V. I.; FATEEV, V. N. Mathematical modeling of high-pressure PEM water electrolysis. *Journal of Applied Electrochemistry*, v. 40, p. 921-932, 2010

HABGOOD, David CC; HOADLEY, Andrew FA; ZHANG, Lian. Techno-economic analysis of gasification routes for ammonia production from Victorian brown coal. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 102, p. 57-68, 2015.

HANAOKA, Toshiaki, T., Matsunaga, K., Miyazawa, T., Hirata, S., & Sakanishi, K. Hot and dry cleaning of biomass-gasified gas using activated carbons with simultaneous removal of tar, particles, and sulfur compounds. **Catalysts**, v. 2, n. 2, p. 281-298, 2012.

HARRISON, K. W., HERNÁNDEZ-PACHECO, E., MANN, M., SALEHFAR, H. Semiempirical model for determining PEM electrolyzer stack characteristics. 2006.

HARYANTO, A., FERNANDO, S. D., PORDESIMO, L. O., ADHIKARI, S. Upgrading of syngas derived from biomass gasification: A thermodynamic analysis. **Biomass and bioenergy**, v. 33, n. 5, p. 882-889, 2009.

HASSAN, I. A., RAMADAN, H. S., SALEH, M. A., HISSEL, D. Hydrogen storage technologies for stationary and mobile applications: Review, analysis and perspectives. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 149, p. 111311, 2021.

HASSUANI, Suleiman José; LEAL, Manoel Regis Lima Verde; MACEDO, Isaías de Carvalho (Ed.). **Biomass power generation: sugar cane bagasse and trash**. CTC, 2005.

HAUCH, Anne; EBBESEN, Sune Dalgaard; JENSEN, Svend H.; MOGENSEN, Mogens. Highly efficient high temperature electrolysis. *Journal of Materials Chemistry*, v. 18, n. 20, p. 2331-2340, 2008.

HAYKIRI-ACMA, H.; YAMAN, S.; KUCUKBAYRAK, S. Effect of biomass on temperatures of sintering and initial deformation of lignite ash. **Fuel**, v. 89, n. 10, p. 3063-3068, 2010.

HUANG, Hua-Jiang; RAMASWAMY, Shri. Modeling biomass gasification using thermodynamic equilibrium approach. **Applied biochemistry and biotechnology**, v. 154, p. 14-25, 2009.

HWANG, J. J., LAI, L. K., WU, W., & CHANG, W. R. Dynamic modeling of a photovoltaic hydrogen fuel cell hybrid system. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 34, n. 23, p. 9531-9542, 2009.

IBGE SIDRA. Produção Agrícola Municipal, 2022. Disponível em: <<https://sidra.ibge.gov.br/tabela/1612>>. Acesso em 21 de jun. de 2023.

IBGE SIDRA. Produção Agrícola Municipal, 2023. Disponível em: <<https://sidra.ibge.gov.br/tabela/1612>>. Acesso em 10 de out. de 2024.

IBM. Heat exchanger specifications, 2021. Disponível em: <https://www.ibm.com/docs/en/power9/0009-ESS?topic=exchangers-heat-exchanger-specifications>. Acesso em: 24 de abril de 2023.

IGATHINATHANE, C. WOMAC, A. R., SOKHANSANJ, S., & NARAYAN, S. Size reduction of high-and low-moisture corn stalks by linear knife grid system. **Biomass and Bioenergy**, v. 33, n. 4, p. 547-557, 2009.

INSTITUTO DE ENERGIA E MEIO AMBIENTE – IEMA. *Elaboração de inventário de emissões veiculares da frota rodoviária no Brasil – ano base 2009*. Disponível em: https://energiaambiente.org.br/wp-content/uploads/2011/01/projeto_iema.pdf. Acesso em: 07 nov. 2024.

InvestNews. Piso salarial: O que é, como é definido e quais as diferenças para o salário mínimo. Disponível em: <https://investnews.com.br/economia/piso-salarial/>. Acesso em: 10 jul. 2024.

IRENA. Green Hydrogen Cost Reduction: Scaling up Electrolysers to Meet the 1.5°C Climate Goal. Abu Dhabi: **International Renewable Energy Agency**, 2020.

JAMRO, Imtiaz Al; RAHEEM, Abdul; KHOSO, Salim; BALOCH, Humair Ahmed; KUMAR, Akash; CHEN, Guanyi; BHAGAT, Waheed Ali; WENGA, Terrence; MA, Wenchao. Investigation of enhanced H₂ production from municipal solid waste gasification via artificial neural network with data on tar compounds. **Journal of Environmental Management**, v. 328, p. 117014, 2023.

JANG, D.; KIM, J.; KIM, D.; HAN, W. B.; KANG, S. Techno-economic analysis and Monte Carlo simulation of green hydrogen production technology through various water electrolysis technologies. *Energy Conversion and Management*, v. 258, p. 115499, 2022.

JARUNGTHAMMACHOTE, S.; DUTTA, A. Equilibrium modeling of gasification: Gibbs free energy minimization approach and its application to spouted bed and spout-fluid bed gasifiers. **Energy Conversion and Management**, v. 49, n. 6, p. 1345-1356, 2008.

JIA, J., XU, L., ABUDULA, A., & SUN, B. Effects of operating parameters on performance of a downdraft gasifier in steady and transient state. **Energy Conversion and Management**, v. 155, p. 138-146, 2018.

JIANG, Yuan; BHATTACHARYYA, Debangsu. Techno-economic analysis of direct coal-biomass to liquids (CBTL) plants with shale gas utilization and CO₂ capture and storage (CCS). **Applied Energy**, v. 189, p. 433-448, 2017.

JORAPUR, Rajeev M.; RAJVANSHI, Anil K. Development of a sugarcane leaf gasifier for electricity generation. **Biomass and Bioenergy**, v. 8, n. 2, p. 91-98, 1995.

JORAPUR, Rajeev; RAJVANSHI, Anil K. Sugarcane leaf-bagasse gasifiers for industrial heating applications. **Biomass and Bioenergy**, v. 13, n. 3, p. 141-146, 1997.

JUNIOR, G. L. C., MARTINS, A. D. O. V., COSTA, A. B. S., & DE SOUSA, R. C. Análise da cinética de secagem e do encolhimento das cascas de cacau. **Brazilian Journal of Development**, v. 5, n. 11, p. 27021-21032, 2019.

KALMAN, V.; VOIGT, J.; JORDAN, C.; HARASEK, M. Hydrogen purification by pressure swing adsorption: high-pressure PSA performance in recovery from seasonal storage. **Sustainability**, v. 14, n. 21, p. 14037, 2022.

KAN, Tao; STREZOV, Vladimir. Gasification of biomass. **Biomass Processing Technologies**, p. 81-121, 2014.

KANG, Z., MO, J., YANG, G., LI, Y., TALLEY, D. A., HAN, B., & ZHANG, F. Y. Performance modeling and current mapping of proton exchange membrane electrolyzer cells with novel thin/tunable liquid/gas diffusion layers. *Electrochimica Acta*, v. 255, p. 405-416, 2017.

KARAMARKOVIC, Rade; KARAMARKOVIC, Vladan. Energy and exergy analysis of biomass gasification at different temperatures. **Energy**, v. 35, n. 2, p. 537-549, 2010.

KAYFECI, Muhammet; KEÇEBAŞ, Ali; BAYAT, Mutlucan. Hydrogen production. In: **Solar hydrogen production**. Academic Press, p. 45-83, 2019.

KEENE, J. R., SHINNERS, K. J., HILL, L., STALLCOP, A., WEMHOFF, S., ANSTEY, H. D., ... JOHNSON, J. K. Single-pass baling of corn stover. In: 2012 Dallas, Texas, July 29-August 1, 2012. **American Society of Agricultural and Biological Engineers**, p. 1. 2012.

KIBREt, H. A., KUO, Y. L., KE, T. Y., TSENG, Y. H. Gasification of spent coffee grounds in a semi-fluidized bed reactor using steam and CO₂ gasification medium. **Journal of the Taiwan Institute of Chemical Engineers**, v. 119, p. 115-127, 2021.

KITANI, Osamu; HALL, Carl W.; WAGENER, Klaus. **Biomass handbook**. Gordon and Breach Science Publishers, 1989.

KOOPMANS, Auke; KOPPEJAN, Jaap. Agricultural and forest residues-generation, utilization and availability. **Regional consultation on modern applications of biomass energy**, v. 6, p. 10, 1997.

KORONEOS, C.; LYKIDOU, S. Equilibrium modeling for a downdraft biomass gasifier for cotton stalks biomass in comparison with experimental data. **Journal of Chemical Engineering and Materials Science**, v. 2, n. 4, p. 61-68, 2011.

KUMAR, Ravinder; SHARMA, Avdhesh Kr; TEWARI, P. C. Cost analysis of a coal-fired power plant using the NPV method. **Journal of Industrial Engineering International**, v. 11, p. 495-504, 2015.

KUMAR, S. Shiva; HIMABINDU, V. Hydrogen production by PEM water electrolysis—A review. **Materials Science for Energy Technologies**, v. 2, n. 3, p. 442-454, 2019.

LAGARIAS, J. C., REEDS, J. A., WRIGHT, M. H., WRIGHT, P. E. Convergence properties of the Nelder–Mead simplex method in low dimensions. **SIAM Journal on optimization**, v. 9, n. 1, p. 112-147, 1998.

LAMERS, P., RONI, M. S., TUMULURU, J. S., JACOBSON, J. J., CAFFERTY, K. G., HANSEN, J. K., ... & BALS, B. Techno-economic analysis of decentralized biomass processing depots. **Bioresource technology**, v. 194: p. 205-213, 2015.

LANGUER, Mariana Pires et al. Insights into pyrolysis characteristics of Brazilian high-ash sewage sludges using thermogravimetric analysis and bench-scale experiments with GC-MS to evaluate their bioenergy potential. **Biomass and Bioenergy**, v. 138, p. 105614, 2020.

LEE, B.; CHAE, H.; CHOI, N. H.; MOON, C.; MOON, S.; LIM, H. Economic evaluation with sensitivity and profitability analysis for hydrogen production from water electrolysis in Korea. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 42, n. 10, p. 6462-6471, 2017.

LEE, J. K., LEE, C., FAHY, K. F., ZHAO, B., LAMANNA, J. M., BALTIC, E., ... & BAZYLAK,

A. Critical current density as a performance indicator for gas-evolving electrochemical devices. **Cell Reports Physical Science**, v. 1, n. 8, 2020.

LEITE, RC de C. et al. Bioetanol combustível: uma oportunidade para o Brasil. **CGEE, Brasília, DF, Brazil, Coordinated by Rogério CC Leite, Brasília, DF, 536p**, 2009.

LI, X., QU, S., YU, H., HOU, M., SHAO, Z., YI, B. Membrane water-flow rate in electrolyzer cells with a solid polymer electrolyte (SPE). *Journal of Power Sources*, v. 190, n. 2, p. 534-537, 2009.

LI, Y., LIN, R., O'SHEA, R., THAORE, V., WALL, D., & MURPHY, J. D. A perspective on three sustainable hydrogen production technologies with a focus on technology readiness level, cost of production and life cycle environmental impacts. **Heliyon**, 2024.

LIN, Yu-Hsuan; CHANG, Alex C.-C. The effect of biomass feeding location on rice husk gasification for hydrogen production. **International Journal of Hydrogen Energy**, 2022.

LIU, Guangjian et al. Making Fischer–Tropsch fuels and electricity from coal and biomass: performance and cost analysis. **Energy & Fuels**, v. 25, n. 1, p. 415-437, 2011.

LOIPERSBÖCK, Jürgen et al. Hydrogen production from biomass: The behavior of impurities over a CO shift unit and a biodiesel scrubber used as a gas treatment stage. **Korean Journal of Chemical Engineering**, v. 34, n. 8, p. 2198-2203, 2017.

LU, Y. J.; GUO, L. J.; JI, C. M.; ZHANG, X. M.; HAO, X. H.; YAN, Q. H. Hydrogen production by biomass gasification in supercritical water: a parametric study. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 31, n. 7, p. 822-831, 2006.

LUBERTI, Mauro; AHN, Hyungwoong. Review of Polybed pressure swing adsorption for hydrogen purification. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 20, p. 10911-10933, 2022.

LUKŠAN, Ladislav; SPEDICATO, Emilio. Variable metric methods for unconstrained optimization and nonlinear least squares. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v. 124, n. 1-2, p. 61-95, 2000.

MACEDO, I. C.; CORTEZ, L. A. B. Sugar-cane industrial processing in Brazil. In: Rosillo-Calle, F.; Bajay, S. V.; Rothman, H. (ed.). **Industrial uses of biomass energy**. London: Taylor-Francis, p.140-154, 2000.

MANZOLINI, Giampaolo; MACCHI, Ennio; GAZZANI, Matteo. CO₂ capture in integrated gasification combined cycle with SEWGS–Part B: Economic assessment. **Fuel**, v. 105, p. 220-227, 2013.

MARANGIO, Francesco; SANTARELLI, Massimo; CALÌ, Michele. Theoretical model and experimental analysis of a high pressure PEM water electrolyser for hydrogen production. *International*

journal of hydrogen energy, v. 34, n. 3, p. 1143-1158, 2009.

MARKETS AND MARKETS (2023). Hydrogen Generation Market Size, Share & Trends Analysis Reports, Hydrogen Generation Market by Technology (SMR, ATR, POX, Coal Gasification, Electrolysis) Application (Refinery, Ammonia, Methanol, Transportation, Power Generation) Source (blue, Green, Gray) Generation & Delivery Mode, Region – Global Forecast to 2028. Disponível em: <https://www.marketsandmarkets.com/Market-Reports/hydrogen-generation-market-494.html>. Acessado em 20 de maio de 2025.

MAZLOOMI, Kaveh; GOMES, Chandima. Hydrogen as an energy carrier: Prospects and challenges. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 16, n. 5, p. 3024-3033, 2012.

MEDINA, P.; SANTARELLI, Massimo. Analysis of water transport in a high pressure PEM electrolyzer. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, n. 11, p. 5173-5186, 2010.

MENDES, D. et al. The water-gas shift reaction: From conventional catalytic systems to Pd-based membrane reactors- A review. **Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering**, v. 5, n. 1, p. 111–137, jan. 2010.

MICHELAZZO, Marcio B.; BRAUNBECK, Oscar A. Análise de seis sistemas de recolhimento do palhico na colheita mecânica da cana-de-açúcar. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 12, p. 546-552, 2008.

MIGNARD, Dimitri. Correlating the chemical engineering plant cost index with macro-economic indicators. **Chemical Engineering Research and Design**, v. 92, n. 2, p. 285-294, 2014.

MINISTÉRIO DA AGRICULTURA E PECUÁRIA. VBP. Valor Bruto da Produção atingirá R\$1,31 trilhão na safra 24/25. 2024. Disponível em: < <https://www.gov.br/agricultura/pt-br/assuntos/noticias/valor-bruto-da-producao-atingira-r-1-31-trilhao-na-safra-24-25>>. Acesso em: 20 de maio de 2025.

MIRANDA, Isabel; PEREIRA, Helena. Variation of wood and bark density and production in coppiced Eucalyptus globulus trees in a second rotation. **Forest-Biogeosciences and Forestry**, v. 9, n. 2, p. 270, 2015.

MIRANDA, M. T. SEPÚLVEDA, F. J., ARRANZ, J. I., MONTERO, I., & ROJAS, C. V. Analysis of pelletizing from corn cob waste. **Journal of environmental management**, v. 228, p. 303-311, 2018.

MISHRA, Somya; UPADHYAY, Rajesh Kumar. Review on biomass gasification: Gasifiers, gasifying mediums, and operational parameters. **Materials Science for Energy Technologies**, v. 4, p. 329-340, 2021.

MITIANIEC, Wladyslaw. Study of increasing thermodynamic efficiency and hydrogen amount

in the process of solid fuels and biomass gasification. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 48, n. 31, p. 11709-11726, 2023.

MOBINI, Mahdi; SOWLATI, Taraneh; SOKHANSANJ, Shahab. A simulation model for the design and analysis of wood pellet supply chains. **Applied energy**, v. 111, p. 1239-1249, 2013.

MOLINO, Antonio; CHIANESE, Simeone; MUSMARRA, Dino. Biomass gasification technology: The state of the art overview. **Journal of Energy Chemistry**, v. 25, n. 1, p. 10-25, 2016.

MOONEY, Christopher Z. **Monte carlo simulation**. Sage, 1997.

MORADI, Ramin; GROTH, Katrina M. Hydrogen storage and delivery: Review of the state of the art technologies and risk and reliability analysis. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 44, n. 23, p. 12254-12269, 2019.

MORENO, J.; DUFOUR, J. Life cycle assessment of hydrogen production from biomass gasification. Evaluation of different Spanish feedstocks. **International Journal of hydrogen energy**, v. 38, n. 18, p. 7616-7622, 2013.

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**, v. 15, n. 1, p. 61, 2022.

MOTTA, I. L., MARCHESAN, A. N., MACIEL FILHO, R., & MACIEL, M. R. W. Correlating biomass properties, gasification performance, and syngas applications of Brazilian feedstocks via simulation and multivariate analysis. **Industrial Crops and Products**, v. 181, p. 114808, 2022.

NAKAMURA, Shunsuke; KITANO, Shigeru; YOSHIKAWA, Kunio. Biomass gasification process with the tar removal technologies utilizing bio-oil scrubber and char bed. **Applied Energy**, v. 170, p. 186-192, 2016.

NECHACHE, Aziz; HODY, Stéphane. Alternative and innovative solid oxide electrolysis cell materials: A short review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 149, p. 111322, 2021.

NI, Meng; LEUNG, Michael KH; LEUNG, Dennis YC. Energy and exergy analysis of hydrogen production by a proton exchange membrane (PEM) electrolyzer plant. **Energy conversion and management**, v. 49, n. 10, p. 2748-2756, 2008.

NIST. National Institute of Standards and Technology. U.S. Department of Commerce. Disponível em: < <https://www.nist.gov/>>. Acesso em 2 de fev. de 2022.

OKIYAMA, Dayane CG; NAVARRO, Sandra LB; RODRIGUES, Christianne EC. Cocoa shell and its compounds: Applications in the food industry. **Trends in Food Science & Technology**, v. 63, p. 103-112, 2017.

OLECHOWSKI, A. L., EPPINGER, S. D., JOGLEKAR, N., TOMASCHEK, K. Technology readiness levels: Shortcomings and improvement opportunities. **Systems Engineering**, v. 23, n. 4, p. 395-408, 2020.

OLIVEIRA, José Tarcísio da Silva; HELLMEISTER, João Cesar; TOMAZELLO FILHO, Mário. Variação do teor de umidade e da densidade básica na madeira de sete espécies de eucalipto. *Revista Árvore*, v. 29, n. 1, p. 115-127, 2005.

PANDEY, Bhoopendra; PRAJAPATI, Yogesh K.; SHETH, Pratik N. CFD analysis of the downdraft gasifier using species-transport and discrete phase model. **Fuel**, v. 328, p. 125302, 2022.

PARK, Eun Joo, et al. Membrane strategies for water electrolysis. *ACS Energy Letters*. v. 7, n. 10: p. 3447-3457. 2022.

PARKS, George. Hydrogen station compression, storage, and dispensing technical status and costs. **National Renewable Energy Laboratory**, 2014.

PASTURE, Martin; DE JAEGER, Emmanuel. Study of the dynamic behaviour of large scale PEM electrolyzers in a fast demand response perspective, 2022.

PÉREZ MARTÍNEZ, Maykop; MORALES RODRÍGUEZ, Idalberto Clemente; CASTRO, Elio. La hora solar pico equivalente: Definición e interpretación. **Ingeniería Energética**, v. 38, n. 2, p. 124-131, 2017.

PÉREZ, B. J. L., JIMÉNEZ, J. A. M., BHARDWAJ, R., GOETHEER, E., VAN SINT ANNALAND, M., & Gallucci, F. Methane pyrolysis in a molten gallium bubble column reactor for sustainable hydrogen production: Proof of concept & techno-economic assessment. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 7, p. 4917-4935, 2021.

PERRY'S CHEMICAL ENGINEER'S HANDBOOK, Section 10 Transport and storage of fluids, page 10-45, McGraw-Hill, 2008

PHONPHUAK, N.; CHINDAPRASIRT, P. Types of waste, properties, and durability of pore-forming waste-based fired masonry bricks. **Eco-efficient masonry bricks and blocks**, p. 103-127, 2015.

PIÑAS, J. A. V., VENTURINI, O. J., LORA, E. E. S., DEL OLMO, O. A., ROALCABA, O. D. C. An economic holistic feasibility assessment of centralized and decentralized biogas plants with mono-digestion and co-digestion systems. **Renewable Energy**, v. 139, p. 40-51, 2019.

PUIG-ARNAVAT, M., HERNÁNDEZ, J. A., BRUNO, J. C., CORONAS, A. Artificial neural network models for biomass gasification in fluidized bed gasifiers. **Biomass and bioenergy**, v. 49, p. 279-289, 2013.

PUIG-ARNAVAT, Maria; BRUNO, Joan Carles; CORONAS, Alberto. Review and analysis of

biomass gasification models. **Renewable and sustainable energy reviews**, v. 14, n. 9, p. 2841-2851, 2010.

RADMANESH, Ramin; CHAOUKI, Jamal; GUY, Christophe. Biomass gasification in a bubbling fluidized bed reactor: experiments and modeling. **AIChE Journal**, v. 52, n. 12, p. 4258-4272, 2006.

RAHAYU, S. S., SUSASTRIAWAN, A. A. P., SURAHMANTO, F., FIRMANSYAH, M. R., & KURNIAWAN, G. Energy Efficiency of a Biomass Powered Dryer: An Analysis of Flue Gas Velocity Effects During Chili Drying. **International Journal of Heat & Technology**, v. 41, n. 5, 2023.

RATIB, Mohamed Khalid et al. Electrical circuit modeling of proton exchange membrane electrolyzer: The state-of-the-art, current challenges, and recommendations. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 49, p. 625-645, 2024.

RAYCHAUDHURI, Samik. Introduction to monte carlo simulation. In: **2008 Winter simulation conference**. IEEE, 2008. p. 91-100.

REDDY, G. K.; SMIRNIOTIS, P. G. Introduction About WGS Reaction. Em: **Water Gas Shift Reaction**. [s.l.] Elsevier, 2015. p. 1–20.

RIPOLI, Marco Lorenzo Cunali. Mapeamento do palhiço enfardado de cana-de-açúcar (*Saccharum spp.*) e do seu potencial energético. **Universidade de São Paulo**, São Paulo, Brazil, 2002.

ROBERT BOSCH GmbH. Bosch PEM electrolysis stack. Disponível em: <https://www.bosch-hydrogen-energy.com/electrolysis/#:~:text=The%20Bosch%20PEM%20electrolysis%20stack,kilograms%20of%20hydrogen%20per%20hour>. Acesso em: 20 jun. 2024.

ROSTAMI, Ali; MURTHY, Jayathi; HAJALIGOL, Mohammad. Modeling of smoldering process in a porous biomass fuel rod. **Fuel**, v. 83, n. 11-12, p. 1527-1536, 2004.

ROY, Prokash C.; DATTA, Amitava; CHAKRABORTY, Niladri. Assessment of cow dung as a supplementary fuel in a downdraft biomass gasifier. **Renewable Energy**, v. 35, n. 2, p. 379-386, 2010.

RUGGIERO, M.; MANFRIDA, G. An equilibrium model for biomass gasification processes. **Renewable energy**, v. 16, n. 1-4, p. 1106-1109, 1999.

RUTH, Mark F.; MAYYAS, Ahmad T.; MANN, Margaret K. Manufacturing competitiveness analysis for PEM and alkaline water electrolysis systems. National Renewable Energy Lab. (NREL), Golden, CO (United States), 2019.

RUUSKANEN, V., KOPONEN, J., HUOMAN, K., KOSONEN, A., NIEMELÄ, M., & AHOLA, J. PEM water electrolyzer model for a power-hardware-in-loop simulator. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 42, n. 16, p. 10775-10784, 2017.

SAFARIAN, Sahar; UNNÞÓRSSON, Rúnar; RICHTER, Christiaan. A review of biomass gasification modelling. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 110, p. 378-391, 2019.

SALAM, M. A., AHMED, K., AKTER, N., HOSSAIN, T., & ABDULLAH, B. A review of hydrogen production via biomass gasification and its prospect in Bangladesh. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 43, n. 32, p. 14944–14973, ago. 2018.

SALEM, Ahmed M.; PAUL, Manosh C. CFD modelling of spatiotemporal evolution of detailed tar species in a downdraft gasifier. **Biomass and Bioenergy**, v. 168, p. 106656, 2023.

SALKUYEH, Yaser Khojasteh; SAVILLE, Bradley A.; MACLEAN, Heather L. Techno-economic analysis and life cycle assessment of hydrogen production from different biomass gasification processes. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 43, n. 20, p. 9514-9528, 2018.

SANTIAGO, Y. C., GONZÁLEZ, A. M., VENTURINI, O. J., MAYA, D. M. Y. Assessment of the energy recovery potential of oil sludge through gasification aiming electricity generation. **Energy**, v. 215, p. 119210, 2021.

SANTOS, José Walter dos et al. Casca de soja em dietas para ovinos. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 37, p. 2049-2055, 2008.

SANTOS, M. L. D., LIMA, O. J. D., NASSAR, E. J., CIUFFI, K. J., & CALEFI, P. S. Study of the storage conditions of the sugarcane bagasse through thermal analysis. **Química Nova**, v. 34, p. 507-511, 2011.

SAUR, Genevieve. Wind-to-hydrogen project: electrolyzer capital cost study. National Renewable Energy Lab. (NREL), Golden, CO (United States), 2008.

SCHALENBACH, M.; CARMO, M.; FRITZ, D. L.; MERGEL, J.; STOLTEN, D. Pressurized PEM water electrolysis: Efficiency and gas crossover. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 38, n. 35, p. 14921-14933, 2013.

SCHEEPERS, F., STÄHLER, M., STÄHLER, A., RAULS, E., MÜLLER, M., CARMO, M., & LEHNERT, W. Improving the efficiency of PEM electrolyzers through membrane-specific pressure optimization. **Energies**, v. 13, n. 3, p. 612, 2020.

SCHUSTER, G., LÖFFLER, G., WEIGL, K., & HOFBAUER, H. Biomass steam gasification—an extensive parametric modeling study. **Bioresource technology**, v. 77, n. 1, p. 71-79, 2001.

SELAMET, Ö. F., ACAR, M. C., MAT, M. D., & KAPLAN, Y. Effects of operating parameters on the performance of a high-pressure proton exchange membrane electrolyzer. **International Journal of Energy Research**, v. 37, n. 5, p. 457-467, 2013.

SELMAN-HOUSEIN, G., LOPEZ, M. A., RAMOS, O., CARMONA, E. R., ARENCIBIA, A. D., MENÉNDEZ, E., & MIRANDA, F. Towards the improvement of sugarcane bagasse as raw material for

the production of paper pulp and animal feed. In: **Plant genetic engineering: towards the third millennium: Proceedings of the International Symposium on Plant Genetic Engineering, Havana, Cuba, 6-10 December, 1999**. Elsevier Science Publishers, 2000. p. 189-193.

SENS, Lucas; NEULING, Ulf; KALTSCHMITT, Martin. Capital expenditure and levelized cost of electricity of photovoltaic plants and wind turbines—Development by 2050. **Renewable Energy**, v. 185, p. 525-537, 2022.

SERRANO, Daniel; GOLPOUR, Iman; SÁNCHEZ-DELGADO, Sergio. Predicting the effect of bed materials in bubbling fluidized bed gasification using artificial neural networks (ANNs) modeling approach. **Fuel**, v. 266, p. 117021, 2020.

SHAHABUDDIN, M., KRISHNA, B. B., BHASKAR, T., PERKINS, G. Advances in the thermochemical production of hydrogen from biomass and residual wastes: Summary of recent techno-economic analyses. **Bioresource technology**, v. 299, p. 122557, 2020.

SHAW, J. T.; FOULDS, A.; WILDE, S.; BARKER, P.; SQUIRES, F. A.; LEE, J.; ALLEN, G. Flaring efficiencies and NOx emission ratios measured for offshore oil and gas facilities in the North Sea. *Atmospheric Chemistry and Physics*, v. 23, n. 2, p. 1491-1509, 2023.

SMOLINKA, T., BERGMANN, H., GARCHE, J., & KUSNEZOFF, M. The history of water electrolysis from its beginnings to the present. In: **Electrochemical power sources: fundamentals, systems, and applications**. Elsevier, 2022. p. 83-164.

SREEJITH, C. C.; ARUN, P.; MURALEEDHARAN, C. Thermochemical analysis of biomass gasification by Gibbs free energy minimization model—Part: I (optimization of pressure and temperature). **International journal of green energy**, v. 10, n. 3, p. 231-256, 2013.

STIBER, S., BALZER, H., WIERHAKE, A., WIRKERT, F. J., ROTH, J., ROST, U., ... & FRIEDRICH, K. A. Porous transport layers for proton exchange membrane electrolysis under extreme conditions of current density, temperature, and pressure. *Advanced Energy Materials*, 11.33: 2100630, 2021.

STUETZLE, W., “The Conjugate Gradient Method.” 2001. [Online]. Available: <<https://sites.stat.washington.edu/wxs/Stat538-w03/conjugate-gradients.pdf>>. Acesso em 15 de maio de 2023.

SUERMAN, M.; KIUPEL, T.; SCHMIDT, T. J.; BÜCHI, F. N. Electrochemical hydrogen compression: efficient pressurization concept derived from an energetic evaluation. *Journal of The Electrochemical Society*, v. 164, n. 12, p. F1187, 2017.

SZIMA, Szabolcs et al. Gas switching reforming for flexible power and hydrogen production to balance variable renewables. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 110, p. 207-219, 2019.

TAGLIABUE, Marcelo; DELNERO, Gastón. Optimization of a hydrogen purification system. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 33, n. 13, p. 3496-3498, 2008.

TAKEDA, Shutaro; NAM, Hoseok; CHAPMAN, Andrew. Low-carbon energy transition with the sun and forest: Solar-driven hydrogen production from biomass. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 47, n. 58, p. 24651-24668, 2022.

TAKEICHI, Nobuhiko et al. "Hybrid hydrogen storage vessel", a novel high-pressure hydrogen storage vessel combined with hydrogen storage material. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 28, n. 10, p. 1121-1129, 2003.

TEZER, Ö., KARABAĞ, N., ÖNGEN, A., ÇOLPAN, C. Ö., & AYOL, A. Biomass gasification for sustainable energy production: A review. **International Journal of Hydrogen Energy**, 2022.

THEIS, Mischa, SKRIFVARIS, B. J., HUPA, M., & TRAN, H. Fouling tendency of ash resulting from burning mixtures of biofuels. Part 1: Deposition rates. **Fuel**, v. 85, n. 7-8, p. 1125-1130, 2006.

TIJANI, Alhassan Salami; KAMARUDIN, Nur Afiqah Binti; MAZLAN, Fatin Athirah Binti. Investigation of the effect of charge transfer coefficient (CTC) on the operating voltage of polymer electrolyte membrane (PEM) electrolyzer. *international journal of hydrogen energy*, v. 43, n. 19, p. 9119-9132, 2018.

TIJMENSEN, M. J., FAAIJ, A. P., HAMELINCK, C. N., & VAN HARDEVELD, M. R. Exploration of the possibilities for production of Fischer Tropsch liquids and power via biomass gasification. **Biomass and bioenergy**, v. 23, n. 2, p. 129-152, 2002.

TJARKS, G.; GIBELHAUS, A.; LANZERATH, F.; MÜLLER, M.; BARDOW, A.; STOLTEN, D. Energetically-optimal PEM electrolyzer pressure in power-to-gas plants. *Applied Energy*, v. 218, p. 192-198, 2018.

TOGHYANI, S., AFSHARI, E., BANIASADI, E., & ATYABI, S. A. Thermal and electrochemical analysis of different flow field patterns in a PEM electrolyzer. *Electrochimica acta*, v. 267, p. 234-245, 2018.

TONIOLO, S., TOSATO, R. C., GAMBARO, F., & REN, J. (2020). Life cycle thinking tools: Life cycle assessment, life cycle costing and social life cycle assessment. In *Life Cycle Sustainability Assessment for Decision-Making* (pp. 39-56). Elsevier.

TURN, Scott Q., JENKINS, Bryan M., JAKEWAY, Lee A., BLEVINS, Linda G., WILLIAMS, Robert B., RUBENSTEIN, Gary, KINOSHITA, Charles M. Test results from sugar cane bagasse and high fiber cane co-fired with fossil fuels. **Biomass and Bioenergy**, v. 30, n. 6, p. 565-574, 2006.

UNYAPHAN, Siriwat et al. Improvement of tar removal performance of oil scrubber by producing syngas microbubbles. **Applied energy**, v. 205, p. 802-812, 2017.

UPADHYAY, D. S., SAKHIYA, A. K., PANCHAL, K., PATEL, A. H., PATEL, R. N. Effect of equivalence ratio on the performance of the downdraft gasifier—An experimental and modelling approach. **Energy**, v. 168, p. 833-846, 2019.

US ARMY CORPS OF ENGINEERS. *Appendix E. General Conformity Analysis Calculations*. Set. 2016. Disponível em: https://www.nap.usace.army.mil/Portals/39/docs/Civil/Reports/PennEast/AppE_Gen_Conformity_Emission_Calculations_FEW.pdf?ver=2017-06-15-083638-390. Acesso em: 07 nov. 2024.

US DEPARTMENT OF ENERGY. Hydrogen Production: Thermochemical Water Splitting. 2021. Disponível em: <https://www.energy.gov/eere/fuelcells/hydrogen-production-thermochemical-water-splitting>. Acesso em: 06 out. 2021.

VADAS, Peter A.; DIGMAN, Matthew F. Production costs of potential corn stover harvest and storage systems. **Biomass and Bioenergy**, v. 54, p. 133-139, 2013.

VAEZI, M., PASSANDIDEH-FARD, M., MOGHIMAN, M., CHARMCHI, M. Gasification of heavy fuel oils: A thermochemical equilibrium approach. **Fuel**, v. 90, n. 2, p. 878-885, 2011.

VAN REE, R., OUDHUIS, A. B., CURVERS, A. P., & FAAIJ, A. Modelling of a biomass-integrated-gasifier/combined-cycle (BIG/CC) system with the flowsheet simulation programme ASPEN^{plus}. 1995.

VILLANUEVA AL, GOMEZ-BAREA A, REVUELTA E, CAMPOY M, OLLERO P. Guidelines for selection of gasifiers modelling strategies. In: 16th European biomass conference and exhibition; 2008.

VINCENT, Immanuel; BESSARABOV, Dmitri. Low cost hydrogen production by anion exchange membrane electrolysis: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 81, p. 1690-1704, 2018.

VON SPERLING, M. Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos. Ed. UFMG, Belo Horizonte, 2014. 470p.

WANG, Tongzhou; CAO, Xuejie; JIAO, Lifang. PEM water electrolysis for hydrogen production: fundamentals, advances, and prospects. *Carbon Neutrality*, 1.1: 21. 2022.

WANG, Y.; KINOSHITA, C. M. Kinetic model of biomass gasification. **Solar energy**, v. 51, n. 1, p. 19-25, 1993.

WATSON, Jamison et al. Gasification of biowaste: A critical review and outlooks. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 83, p. 1-17, 2018.

WERTHER, J. SAENGER, M., HARTGE, E. U., OGADA, T., & SIAGI, Z. Combustion of agricultural residues. **Progress in energy and combustion science**, v. 26, n. 1, p. 1-27, 2000.

XING, Lei; XUAN, Jin; DAS, Prodip K. "Chapter 2 - Fuel cell fundamentals". In: DAS, Prodip K.; JIAO, Kui; WANG, Yun; BARBIR, Frano; LI, Xianguo (Eds.), *Fuel Cells for Transportation*. Woodhead Publishing, pp. 29-72, 2023.

XU, Wu; SCOTT, Keith. The effects of ionomer content on PEM water electrolyser membrane electrode assembly performance. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 35, n. 21: p. 12029-12037. 2010.

YAN, Moiseev; AFXENTIOU, Nicholas; FOKAIDES, Paris A. The state of the art overview of the biomass gasification technology. **Current Sustainable/Renewable Energy Reports**, p. 1-14, 2021.

YANG, F., WANG, T., DENG, X., DANG, J., HUANG, Z., HU, S., ... & OUYANG, M et al. Review on hydrogen safety issues: Incident statistics, hydrogen diffusion, and detonation process. **International Journal of Hydrogen Energy**, v. 46, n. 61, p. 31467-31488, 2021.

YANG, S., YANG, Q., MAN, Y., XIANG, D., & QIAN, Y. Conceptual design and analysis of a natural gas assisted coal-to-olefins process for CO₂ reuse. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 52, n. 40, p. 14406-14414, 2013.

YANG, X., HAMIDZADEH, A., ILKHANI, M., FOROUGHI, A., ESFAHANI, M. J., Motahari-Nezhad, M. Aspen plus simulation of heavy oil gasification in a fluidized bed gasifier. **Petroleum Science and Technology**, v. 34, n. 17-18, p. 1530-1533, 2016.

YFANTI, Sofia; SAKKAS, Nikos. Technology readiness levels (TRLs) in the era of co-creation. **Applied System Innovation**, v. 7, n. 2, p. 32, 2024.

YIGIT, Tevfik; SELAMET, Omer Faruk. Mathematical modeling and dynamic Simulink simulation of high-pressure PEM electrolyzer system. *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 41, n. 32, p. 13901-13914, 2016.

YOSHIDA, H., KIYONO, F., TAJIMA, H., YAMASAKI, A., OGASAWARA, K., MASUYAMA, T. Two-stage equilibrium model for a coal gasifier to predict the accurate carbon conversion in hydrogen production. **Fuel**, v. 87, n. 10-11, p. 2186-2193, 2008.

YUE, X. G., ESFAHANI, M. J., AKBAL, H., FOROUGHI, A. A kinetic model for gasification of heavy oil with in situ CO₂ capture. **Petroleum Science and Technology**, v. 34, n. 22, p. 1833-1836, 2016.

ZAINAL, Z. A., ALI, R., LEAN, C. H., SEETHARAMU, K. N. (2001), "Prediction of Performance of a Downdraft Gasifiers Using Equilibrium Modeling for Different Biomass Materials", **Energy Conversion and Management**, vol. 42, pp.1499–1515.

ZANUNCIO, A. J. V., MONTEIRO, T. C., LIMA, J. T., ANDRADE, H. B. e CARVALHO, A. G. Drying biomass for energy use of *Eucalyptus urophylla* and *Corymbia citriodora* logs. **BioResources**,

v. 8, n. 4, p. 5159-5168, 2013.

ZHANG, X., ZHANG, W., YANG, W., LIU, W., MIN, F., MAO, S. S., & XIE, J. Catalyst-coated proton exchange membrane for hydrogen production with high pressure water electrolysis. *Applied Physics Letters*, 119.12. 2021.

ZHANG, Y., GHALY, A. E., & LI, B. Physical properties of corn residues. **American Journal of Biochemistry and Biotechnology**, v. 8, n. 2, p. 44-53, 2012

ZULOAGA, O. NAVARRO, P., BIZKARGUENAGA, E., IPARRAGUIRRE, A., VALLEJO, A., OLIVARES, M., PRIETO, A. Overview of extraction, clean-up and detection techniques for the determination of organic pollutants in sewage sludge: a review. **Analytica Chimica Acta**, v. 736, p. 7-29, 2012.