DESENVOLVIMENTO DE MODELOS SUBSTITUTOS PARA OTIMIZAÇÃO DO HIDROPROCESSAMENTO DE DIFERENTES BIOMASSAS OLEAGINOSAS

Marcos Vinícius Cordeiro Pereira da Silva (PIBIC/CNPq/FA/UEM), Leandro Vitor Pavão (Orientador). E-mail: lvpavao2@uem.br

Universidade Estadual de Maringá, Departamento de Engenharia Química, Maringá, PR.

Área e subárea do conhecimento: Engenharia Química / Modelagem, Simulação, Síntese, Otimização e Controle de Processos

Palavras-chave: Diesel verde; Redes neurais artificiais; Aspen Plus

RESUMO

Este trabalho apresenta o desenvolvimento de modelos substitutos baseados em redes neurais artificiais (RNAs) para a otimização energética do hidroprocessamento de óleo de soja visando à produção de diesel verde, além de avaliar a predição do ponto de entupimento de filtro a frio (CFPP). Metodologicamente, realizou-se a revisão crítica e a correção de uma simulação no software Aspen Plus para validação do balanço de massa e rendimentos. Um script em Python foi desenvolvido para realizar um estudo paramétrico estendido de quatro variáveis operacionais (pressões intermediárias, razão de refluxo e temperatura de entrada da coluna), gerando um banco de dados de pontos convergentes. Uma rede neural feedforward de três camadas ocultas foi treinada para predizer o consumo energético global da planta. A caracterização físico-química do combustível simulado foi avaliada segundo a Resolução ANP nº 842/2021. Os resultados mostraram excelente desempenho preditivo da RNA, com erro médio absoluto de 0,83 kW (MAPE de 0,07%). A busca pelo menor consumo convergiu para 1041,98 kW (pressão intermediária de 1 atm, razão de refluxo de 0,5 e temperatura de entrada de 100 °C), validada no Aspen Plus com desvio percentual de 0,00%. A viscosidade cinemática (5,76 mm²/s) superou o limite máximo da ANP devido à conversão parcial de ácidos graxos livres. Por fim, a correlação de Dinkov et al. (2011) mostrou-se inadequada para estimar o CFPP do diesel verde devido à diferença severa de densidade, justificando o futuro desenvolvimento de RNAs dedicadas.

INTRODUÇÃO

O uso de combustíveis fósseis, tal como o diesel de petróleo, tem impulsionado as emissões globais de CO2, exigindo o desenvolvimento de alternativas renováveis sustentáveis. O diesel verde, composto por hidrocarbonetos obtidos via hidroprocessamento de biomassa, destaca-se por sua alta similaridade ao combustível convencional, superando as desvantagens de estabilidade e desempenho do biodiesel éster (Vonortas; Papayannakos, 2014). No entanto, o

processo industrial de produção de diesel verde apresenta elevada demanda de capital e energia, exigindo estudos de modelagem e otimização de processo (Plazas-González et al., 2018).
Simulações rigorosas em softwares comerciais como o Aspen Plus são fundamentais para avaliar essas rotas, mas o custo computacional e problemas de não-linearidade limitam sua aplicação direta em otimizações em tempo real. Nesse contexto, a utilização de modelos substitutos (ou metamodelos) baseados em técnicas de inteligência artificial surge como alternativa promissora. Esses modelos aprendem o comportamento da simulação rigorosa a partir de um banco de dados previamente gerado, reduzindo drasticamente o tempo de cálculo e mantendo alta precisão (Huntington et al., 2023). O objetivo deste trabalho é desenvolver e validar modelos substitutos baseados em redes neurais artificiais para a otimização energética do processo de hidroprocessamento de óleo de soja, avaliando adicionalmente a caracterização físico-química e a predição das propriedades a frio do diesel verde simulado.

MATERIAIS E MÉTODOS

A metodologia baseou-se na simulação rigorosa de processo no software Aspen Plus integrada a scripts em Python via comunicação COM. Inicialmente, conduziu-se uma revisão crítica e a correção de uma simulação de referência proposta por Cavalcanti et al. (2022). Foram corrigidos três pontos: a composição da carga (óleo de soja), a inclusão das reações de descarbonilação no reator R-2 e de metanação no reator R-3, e a implementação de especificações de projeto (Design Specs) automáticas para as correntes de *make-up* de hidrogênio e para o controle da coluna de destilação.
Após a validação da simulação corrigida frente aos dados da literatura, desenvolveu-se um script em Python para realizar um estudo paramétrico estendido. Foram avaliadas quatro variáveis operacionais de entrada: pressão intermediária de separação de fases (P1), pressão antes da coluna de destilação (P2), razão de refluxo da coluna (RR) e temperatura de entrada na coluna (Tin). Implementou-se no script uma rotina sistemática de verificação de convergência, analisando o status de erro de cada simulação e descartando pontos não convergentes.
O banco de dados de consumo energético global da planta (composto por 85% para treino e 15% para teste) foi utilizado para treinar uma rede neural artificial (RNA) feedforward multicamadas (arquitetura 4-64-32-16-1, ativação ELU nas camadas ocultas e linear na saída) no Keras/TensorFlow. O consumo energético total foi extraído separando-se o duty do condensador e do refervedor da coluna. A otimização energética do processo foi realizada diretamente por meio da rede neural treinada através de uma busca em grid validada no simulador rigoroso. Por fim, as propriedades físico-químicas do diesel verde foram estimadas no Aspen Plus e confrontadas com os limites da Resolução ANP nº 842/2021. Avaliou-se também a adequação da correlação de Dinkov et al. (2011) para estimar o ponto de entupimento de filtro a frio (CFPP).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

O estudo paramétrico mostrou que o consumo energético global da planta variou entre 1042,0 kW e 1297,1 kW, exibindo uma amplitude de 255 kW. A razão de refluxo (RR) apresentou o maior impacto isolado crescente sobre o consumo, enquanto a pressão P2 mostrou efeito nulo. A pressão intermediária P1 exibiu relação linear crescente com o consumo e com o consumo de hidrogênio de reposição: pressões baixas (P1 = 1 atm) favorecem a separação de hidrogênio e gases leves, reduzindo o arraste de H2 dissolvido e diminuindo o consumo energético da planta.

A rede neural retreinada apresentou excelente desempenho de predição sobre o conjunto de teste, com erro médio absoluto (MAE) de 0,83 kW, erro quadrático médio (RMSE) de 1,00 kW e erro percentual médio (MAPE) de 0,07%. A busca pela configuração de menor consumo via RNA convergiu para P1 = 1 atm, P2 = 5 atm, RR = 0,5 e Tin = 100 °C, prevendo 1041,98 kW. Essa condição, quando validada diretamente no Aspen Plus, resultou em 1042,03 kW, confirmando um desvio percentual praticamente nulo (0,00%). Os resultados da caracterização físico-química e comparação regulatória estão sintetizados na Tabela 1.

Tabela 1 – Propriedades físico-químicas do diesel verde: comparação entre a simulação atual, a legislação e o artigo de referência

Propriedade	Unidade	Método	Limite ANP 842	Simulação Atual	Cavalcanti (2022)
Número de cetano (índice)	-	ASTM D4737	mín. 51	92,9	85
Ponto de fulgor (Tag)	°C	ASTM D56	mín. 38	86,1	81
Ponto de fulgor (PM)	°C	ASTM D93	mín. 38	81,0	86
Destilação, 10% vol.	°C	ASTM D86	mín. 180	233,4	223
Destilação, 50% vol.	°C	ASTM D86	245 - 295	293,0	276
Destilação, 95% vol.	°C	ASTM D86	máx. 370	349,5	348
Viscosidade cinemática, 40 °C	mm²/s	ASTM D445	2,00 - 4,50	5,76	n.r.
Ponto de fluidez	°C	Método API	-	-18,8	n.r.
Ponto de névoa	°C	-	-	-7,6	n.r.

n.r. = não reportado. Fonte: Elaborada pelo autor (2026), adaptado de Cavalcanti et al. (2022) e ANP (2021).

CONCLUSÕES

A revisão crítica corrigiu divergências cruciais na simulação de referência, resultando em um modelo validado e consistente. O estudo paramétrico estendido de quatro variáveis evidenciou que a razão de refluxo e a pressão intermediária P1 são as variáveis de maior impacto energético na planta. A verificação sistemática de convergência em Python mostrou-se indispensável para a higienização do banco de dados.

A rede neural retreinada demonstrou excelente precisão na predição do consumo energético, localizando a condição operacional ótima com erro nulo de validação (0,00%). A viscosidade cinemática do diesel verde simulado excedeu os limites da ANP devido à conversão parcial de ácidos graxos, enquanto a correlação de Dinkov et al. (2011) falhou em prever o comportamento de escoamento a frio. Esses achados validam a robustez das RNAs como metamodelos eficientes para a otimização energética de biorefinarias, além de justificar o futuro desenvolvimento de RNAs dedicadas à predição de propriedades térmicas.

AGRADECIMENTOS

O autor agradece ao orientador, Prof. Dr. Leandro Vitor Pavão, e ao coorientador, Prof. Me. Carlos Eduardo Korn Senko, pela orientação e suporte técnico ao longo do desenvolvimento deste trabalho. Agradece também à Universidade Estadual de Maringá (UEM) pela oportunidade e espaço institucional, e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) em conjunto com a Fundação Araucária pelo apoio financeiro e pela concessão da bolsa de iniciação científica que viabilizou esta pesquisa.

REFERÊNCIAS

CAVALCANTI, C. J. S. et al. Simulation of the soybean oil hydrotreating process for green diesel production. **Cleaner Chemical Engineering**, v. 1, 100004, 2022.

DINKOV, R. et al. Investigation on diesel cold flow properties. *In*: INTERNATIONAL PETROLEUM CONFERENCE, 45., 2011, Bratislava. **Anais** [...]. Bratislava, 2011.

HUNTINGTON, T. et al. Machine learning for surrogate process models of bioproduction pathways. **Bioresource Technology**, v. 370, 128528, fev. 2023.

PLAZAS-GONZÁLEZ, M.; GUERRERO-FAJARDO, C. A.; SODRÉ, J. R. Modelling and simulation of hydrotreating of palm oil components to obtain green diesel. **Journal of Cleaner Production**, v. 200, p. 123–135, 2018.

VERIANSYAH, B. et al. Production of renewable diesel by hydroprocessing of soybean oil: effect of catalysts. **Fuel**, v. 94, p. 578–585, 2012.

VONORTAS, A.; PAPAYANNAKOS, N. Comparative analysis of biodiesel versus green diesel. **Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment**, v. 3, p. 3–23, 2014.