



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA



Victor Hugo Xavier Bernardes

**Explorando a Produção de Hidrogênio a partir da Co-Gaseificação de
Biomassa–Plástico: Um Estudo Integrado de Simulação e Aprendizado de
Máquina**

**Fevereiro/2026
Uberlândia/MG**

Victor Hugo Xavier Bernardes

**Explorando a Produção de Hidrogênio a partir da Co-Gaseificação de
Biomassa–Plástico: Um Estudo Integrado de Simulação e Aprendizado de
Máquina**

Dissertação submetida ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de Uberlândia, como requisito parcial necessário à obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Área de concentração: Modelagem, Controle e Otimização de processos químicos

Orientadora: Prof. Dra. Sarah Arvelos Altino

Coorientador: Prof. Dr. Rubens Gedraite

**Fevereiro/2026
Uberlândia/MG**

Ficha Catalográfica Online do Sistema de Bibliotecas da UFU
com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).

B522 Bernardes, Victor Hugo Xavier, 1999-
2026 Explorando a Produção de Hidrogênio a partir da Co-
Gaseificação de Biomassa-Plástico: Um Estudo Integrado de
Simulação e Aprendizado de Máquina [recurso eletrônico] / Victor
Hugo Xavier Bernardes. - 2026.

Orientadora: Sarah Arvelos Altino.

Coorientador: Rubens Gedraite.

Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Pós-graduação em Engenharia Química.

Modo de acesso: Internet.

DOI <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2026.139>

Inclui bibliografia.

1. Engenharia química. I. Altino, Sarah Arvelos ,1986-, (Orient.).
II. Gedraite, Rubens,1958-, (Coorient.). III. Universidade Federal de
Uberlândia. Pós-graduação em Engenharia Química. IV. Título.

CDU: 66.0

Bibliotecários responsáveis pela estrutura de acordo com o AACR2:

Gizele Cristine Nunes do Couto - CRB6/2091

Nelson Marcos Ferreira - CRB6/3074



ATA DE DEFESA - PÓS-GRADUAÇÃO

Programa de Pós-graduação em:	Engenharia Química				
Defesa de:	Mestrado Acadêmico, 1/2026, PPGEQ				
Data:	13 de fevereiro de 2026	Hora de início:	16:00	Hora de encerramento:	17:52
Matrícula do Discente:	12412EQU009				
Nome do Discente:	Victor Hugo Xavier Bernardes				
Título do Trabalho:	Explorando a Produção de Hidrogênio a partir de Resíduos Plásticos: Um Estudo Integrado de Simulação e Aprendizado de Máquina				
Área de concentração:	Desenvolvimento de Processos Químicos				
Linha de pesquisa:	Modelagem, Controle e Otimização de Processos Químicos				
Projeto de Pesquisa de vinculação:	Projeto auxiliado por computador de processos industriais				
ODS-ONU:	ODS 9 - Indústria, Inovação e Infraestrutura				

Reuniu-se por meio de webconferência, a Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-graduação em Engenharia Química, assim composta: Doutores: Nicolas Spogis - AI4Tech e DEQ/UNICAMP e Professores Doutores: Ubirajara Coutinho Filho - FEQUI/UFU, Rubens Gedraite - PPGEQ/UFU, coorientador, e Sarah Arvelos Altino - PPGEQ/UFU, orientadora do candidato.

Iniciando os trabalhos a presidente da mesa, Profa. Dra. Sarah Arvelos Altino, apresentou a Comissão Examinadora e o candidato, agradeceu a presença do público, e concedeu ao discente a palavra para a exposição do seu trabalho. A duração da apresentação do discente e o tempo de arguição e resposta foram conforme as normas do Programa.

A seguir, a presidente concedeu a palavra, pela ordem sucessivamente aos examinadores, que passaram a arguir o candidato. Ultimada a arguição, que se desenvolveu dentro dos termos regimentais, a Banca, em sessão secreta, atribuiu o resultado final considerando o candidato:

Aprovado

Esta defesa faz parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre.

O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU.

Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos. Foi lavrada a presente ata que após lida e achada conforme foi assinada pela Banca Examinadora.



Documento assinado eletronicamente por **Nicolas Spogis, Usuário Externo**, em 13/02/2026, às 17:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rubens Gedraite, Professor(a) do Magistério Superior**, em 13/02/2026, às 17:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Ubirajara Coutinho Filho, Professor(a) do Magistério Superior**, em 13/02/2026, às 17:54, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



Documento assinado eletronicamente por **Sarah Arvelos Altino, Professor(a) do Magistério Superior**, em 13/02/2026, às 18:00, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 6º, § 1º, do [Decreto nº 8.539, de 8 de outubro de 2015](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://www.sei.ufu.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **7010837** e o código CRC **C4F23E6B**.

Referência: Processo nº 23117.003987/2026-50

SEI nº 7010837

Dedico este trabalho a todos que, com presença, palavras ou silêncio, fizeram parte desta caminhada e ajudaram a transformá-la em conquista.

AGRADECIMENTOS

Agradeço à minha família pelo apoio contínuo e pela compreensão ao longo de todo o período do mestrado.

À minha orientadora, Profa. Dra. Sarah Arvelos Altino, expresso minha sincera gratidão pela confiança depositada em meu trabalho, pela disponibilidade constante e pela orientação cuidadosa ao longo de todo o desenvolvimento desta pesquisa. Seu acompanhamento atento, aliado à compreensão, ao acolhimento e ao incentivo nos momentos decisivos, foi fundamental para a condução deste estudo e para o meu amadurecimento acadêmico.

Ao meu coorientador, Prof. Dr. Rubens Gedraite, pelas contribuições e apoio fundamentais para esta pesquisa.

Ao Prof. Dr. Nicolas Spogis, pelo apoio, pelas discussões e pela disponibilidade ao longo do percurso, contribuindo de forma significativa para o meu desenvolvimento acadêmico.

À Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio financeiro que possibilitou a dedicação a esta pesquisa.

Por fim, agradeço a todos que participaram desta etapa comigo, cada apoio, diálogo e contribuição teve importância para que esta pesquisa chegasse à sua conclusão.

“Nada na vida deve ser temido, apenas compreendido.
Agora é hora de compreender mais, para temer menos.”

Marie Curie

RESUMO

A co-gaseificação de biomassa e resíduos plásticos é uma rota promissora para a produção de gás de síntese e hidrogênio de baixo carbono, porém sua otimização é dificultada por interações não lineares entre temperatura, razão de equivalência e composição da alimentação. Neste trabalho, desenvolveu-se uma abordagem integrada que combina modelagem termoquímica em regime estacionário e aprendizado de máquina para predição e otimização do desempenho de sistemas biomassa-plástico. Um modelo fenomenológico foi implementado no simulador AVEVA PRO/II, estruturado em etapas de secagem, pirólise, gaseificação e equilíbrio químico restrito, utilizando ar como agente gaseificante. O modelo foi validado por comparação com dados experimentais da literatura, reproduzindo a ordem de grandeza das frações molares de H₂, CO, CO₂ e CH₄ em diferentes condições operacionais. A partir dessa base, gerou-se um banco de dados sintético com 3.000 simulações, obtidas por amostragem por Hipercubo Latino, contemplando cinco plásticos (HDPE, PE, PP, PS e PET), 35 biomassas lignocelulósicas e faixas representativas de temperatura e razão de equivalência. Em seguida, modelos Extreme Gradient Boosting (XGBoost) foram treinados para prever a composição do gás (H₂, CO e CO₂), o rendimento total de gás, o poder calorífico inferior e a razão H₂/CO. A separação entre conjuntos de treinamento, validação e teste foi avaliada por métricas de distância (1-NN, MMD e Energy Distance), assegurando representatividade e generalização. Os modelos apresentaram desempenho elevado, com coeficientes de determinação superiores a 0,98 fora da amostra. A interpretabilidade foi analisada por técnicas de IA explicável, com valores SHAP, indicando que temperatura e razão de equivalência são determinantes para a formação de H₂, enquanto os teores de carbono e carbono fixo controlam a geração de CO. O domínio de aplicabilidade foi verificado por distância de Mahalanobis, garantindo confiabilidade das previsões. Por fim, a otimização por Evolução Diferencial permitiu identificar pares biomassa-plástico sinérgicos e condições operacionais que maximizam a produção de hidrogênio e a qualidade do gás. As soluções ótimas favoreceram misturas ricas em polipropileno com biomassas lignocelulósicas, resultando em frações de H₂ da ordem de 28%, razão H₂/CO próxima de 1,1 e poder calorífico inferior em torno de 6,5 MJ·Nm⁻³. A abordagem proposta integra modelagem mecanística, aprendizado de máquina explicável e otimização, contribuindo para o projeto racional de sistemas de co-gaseificação orientados à produção de hidrogênio.

Palavras-chave: Co-gaseificação biomassa-plástico; Modelagem de processos; Aprendizado de máquina (XGBoost); IA explicável; Otimização por evolução diferencial; Gás de síntese rico em hidrogênio.

ABSTRACT

Biomass–plastic co-gasification is a promising route for producing low-carbon syngas and hydrogen; however, its optimization is challenged by nonlinear interactions among temperature, equivalence ratio, and feed composition. In this work, an integrated approach combining steady-state thermochemical process modelling and machine learning was developed to predict and optimize the performance of biomass–plastic systems. A phenomenological model was implemented in the AVEVA PRO/II simulator, structured into drying, pyrolysis, gasification, and restricted chemical-equilibrium stages, using air as the gasifying agent. The model was validated against experimental literature data, reproducing the order of magnitude of the molar fractions of H₂, CO, CO₂, and CH₄ under different operating conditions. Based on this validated platform, a synthetic dataset of 3,000 simulations was generated via Latin Hypercube Sampling, covering five plastics (HDPE, PE, PP, PS, and PET), 35 lignocellulosic biomasses, and representative ranges of temperature and equivalence ratio. Extreme Gradient Boosting (XGBoost) models were then trained to predict syngas composition (H₂, CO, and CO₂), total gas yield, lower heating value, and the H₂/CO ratio. The split into training, validation, and test sets was assessed using distance-based metrics (1-NN, MMD, and Energy Distance), ensuring representativeness and generalization. The models achieved high performance, with out-of-sample coefficients of determination above 0.98. Interpretability was examined using explainable AI techniques based on SHAP values, indicating that temperature and equivalence ratio are key drivers of H₂ formation, whereas carbon and fixed carbon contents govern CO generation. The applicability domain was verified using Mahalanobis distance, ensuring prediction reliability. Finally, Differential Evolution optimization identified synergistic biomass–plastic pairs and operating conditions that maximize hydrogen production and syngas quality. The optimal solutions favored polypropylene-rich blends with lignocellulosic biomasses, yielding H₂ fractions of approximately 28%, H₂/CO ratios close to 1.1, and lower heating values around 6.5 MJ·Nm⁻³. The proposed approach integrates mechanistic modelling, explainable machine learning, and optimization, supporting the rational design of hydrogen-oriented co-gasification systems.

Keywords: Biomass–plastic co-gasification; Process modelling; Machine learning (XGBoost); Explainable AI; Differential evolution optimisation; Hydrogen-rich syngas.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Representação esquemática do fluxo metodológico adotado.....	17
Figura 2 – Métodos de conversão de biomassa.	19
Figura 3 – Exemplificação das Etapas de Gaseificação.	24
Figura 4 – Tipos de gaseificadores de leito fixo.....	26
Figura 5 – Tipos de gaseificadores de leito fluidizado.....	28
Figura 6 – Gaseificador de leito arrastado.....	29
Figura 7 – Aplicações do gás de síntese.	32
Figura 8 – Sistema de gaseificação por CFD.	33
Figura 9 – Sistema de gaseificação por modelo cinético.....	35
Figura 10 – Sistema de gaseificação por modelo de equilíbrio.	37
Figura 11 – Modelo de uma Rede Neural	38
Figura 12 – Tipos de Aprendizado de Máquina.	40
Figura 13 – Tipos de ajuste do modelo.....	42
Figura 14 - Exemplo de uma Árvore de Decisão para diagnóstico de um paciente.....	43
Figura 15 – Representação esquemática do modelo XGBoost.....	45
Figura 16 – Diagrama de processo no AVEVA PRO/II da co-gaseificação biomassa-plástico (secagem, pirólise, gaseificação e equilíbrio final)	51
Figura 17 – Matriz de correlação de Pearson entre variáveis de entrada e saídas do gás de síntese (características e alvos do modelo).....	58
Figura 18 – Índices de validação de agrupamento para determinação do número de clusters (k): (a) Método do Cotovelo (Inércia), (b) Índice de Silhueta, (c) Índice de Davies–Bouldin.	59
Figura 19 – Distribuição das distâncias para o vizinho mais próximo das amostras de validação e teste em relação ao conjunto de treinamento no espaço padronizado de características.	61
Figura 20 – Comparação entre os valores previstos pelo XGBoost e os valores simulados para: (a) composição de H ₂ (%), (b) composição de CO (%), (c) composição de CO ₂ (%), (d) rendimento de gás de síntese (Nm ³ kg ⁻¹), (e) PCI (MJ Nm ⁻³) e (f) razão H ₂ /CO obtidos no AVEVA PRO/II.....	62
Figura 21 – Análise de importância das variáveis pelo método SHAP (valores médios absolutos) e gráficos de resumo do modelo XGBoost: (a–b) composição de H ₂ (%), (c–d) composição de CO (%), e (e–f) composição de CO ₂ (%).	64

Figura 22 – Análise de importância das variáveis pelo método SHAP (valores médios absolutos) e gráficos de resumo do modelo XGBoost: (a–b) rendimento do gás de síntese ($\text{Nm}^3 \text{kg}^{-1}$), (c–d) poder calorífico inferior (LHV, MJ Nm^{-3}) e (e–f) razão H_2/CO	66
Figura 23 – Domínio de aplicabilidade avaliado por meio da distância de Mahalanobis.	68

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Comparação das estratégias de pós-processamento em modelagens de conversão termoquímica assistidas por aprendizado de máquina	16
Tabela 2 – Reações que ocorrem na Gaseificação.	25
Tabela 3 – Parâmetros de entrada e faixas operacionais utilizadas nas simulações em PRO/II para a co-gaseificação biomassa-plástico.	46
Tabela 4 –Dados de análise imediata e elementar dos plásticos.	47
Tabela 5 – Dados de análise imediata e elementar das biomassas.	47
Tabela 6 – Comparação entre as composições simuladas e experimentais do gás de síntese para validação do modelo.	56
Tabela 7 – Comparação entre as composições simuladas e experimentais do gás de síntese para validação do modelo utilizando vapor como agente gaseificante.	56
Tabela 8 – Estatísticas de separação entre os subconjuntos de dados utilizando as métricas 1-NN, MMD e Energy Distance.	60
Tabela 9 – Resultados da otimização para as variáveis-alvo (ED): objetivos, matérias-primas ótimas, condições e resultados.....	69
Tabela 10 – Otimização da produção de H ₂ para cada tipo de plástico: par biomassa ótimo, condições operacionais (T e ER) e métricas previstas do gás de síntese.	72
Tabela 11 – Comparativo dos Resultados de Otimização para as variáveis-alvo com os Simulados	74
Tabela 12 – Comparativo dos Resultados de Otimização da produção de H ₂ com os Simulados para cada tipo de plástico.....	75

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ANN	<i>Artificial Neural Network</i> (Redes Neurais Artificiais)
AD	<i>Applicability domain</i> (Domínio de Aplicabilidade)
C	Teor de carbono na análise elementar
c	Átomos de carbono contido no combustível
CF	Quantidade de carbono fixo indicada pela análise imediata
CFD	Dinâmica dos Fluidos Computacional
CZ	Quantidade de cinzas indicada pela análise imediata
DT	<i>Decision Tree</i> (Árvore de Decisão)
dp	Desvio Padrão
ED	Evolução Diferencial
ER	<i>Equivalence Ratio</i> (Razão de Equivalência)
GY	<i>Gas Yield</i> (Rendimento de Gás)
H	Teor de hidrogênio na análise elementar
h	Átomos de hidrogênio contido no combustível
HCL	Amostragem por Hipercubo Latino
HDPE	<i>High-Density Polyethylene</i> (Polietileno de Alta Densidade)
HHV	<i>Higher Heating Value</i> (Poder Calorífico Superior)
IA	Inteligência Artificial
k	Subconjuntos
LHV	<i>Lower Heating Value</i> (Poder Calorífico Inferior)
m	Tamanho do Conjunto
MAE	<i>Mean Absolute Error</i> (Erro Absoluto Médio)
máx	Máximo
mín	Mínimo
ML	<i>Machine Learning</i> (Aprendizado de Máquina)
MMD	<i>Maximum Mean Discrepancy</i> (Discrepância Máxima de Médias)
MV	<i>Matter volatile</i> (Quantidade de massa volátil indicada pela análise imediata)

N	Teor de nitrogênio na análise elementar
n	Átomos de nitrogênio contido no combustível
n_C	Número de mols de carbono
n_{CH_4}	Número de mols de metano
n_{CO}	Número de mols de monóxido de carbono
n_{CO_2}	Número de mols de dióxido de carbono
n_{H_2}	Número de mols de hidrogênio molecular
n_{H_2O}	Número de mols de água
n_{N_2}	Número de mols de nitrogênio molecular
O	Teor de oxigênio na análise elementar
o	Átomos de oxigênio contido no combustível
p	Percentil
PE	Polietileno
PET	Politereftalato de Etileno
PP	Polipropileno
PS	Poliestireno
PU	Poliuretano
RConv	Reator de conversão
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i> (Erro Quadrático Médio)
R^2	Coefficiente de determinação
S	Teor de enxofre na análise elementar
s	Átomos de enxofre contido no combustível
SHAP	<i>SHapley Additive exPlanations</i>
SVM	<i>Support Vector Machine</i> (Máquina de Vetor de Suporte)
S/F	Razão Mássica de Vapor de Água por Alimentação
T	Temperatura do Reator
U	Quantidade de umidade indicada pela análise imediata
w	Proporção de hidrogênio em relação ao carbono no combustível
x	Proporção de oxigênio em relação ao carbono no combustível

XGBoost	<i>Extreme Gradient Boosting</i>
y	Proporção de nitrogênio em relação ao carbono no combustível
z	Proporção de enxofre em relação ao carbono no combustível
1-NN	Algoritmo de <i>Nearest Neighbor</i> com K=1
α	Fração mássica de plástico na mistura
β	Quantidade de ar fornecido ao gaseificador
β_{esteq}	Razão ar-combustível necessária para a combustão completa da biomassa
β_{real}	Razão ar-combustível alimentada ao processo
γ	Razão molar entre o nitrogênio e o oxigênio no agente oxidante
θ	Quantidade de umidade associada ao combustível

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	14
2. OBJETIVOS.....	17
2.1 Objetivo Geral	17
2.2 Objetivos Específicos	18
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	18
3.1. Biomassa e Plásticos.....	18
3.2. Gaseificação.....	23
3.2.1. Tipos de Gaseificadores	26
3.2.2. Agente Gaseificante.....	29
3.2.3. Temperatura.....	30
3.2.4. Gás de Síntese.....	31
3.3. Modelagem	32
3.3.1. Fluidodinâmica computacional.....	33
3.3.2. Modelo cinético	34
3.3.3. Modelo de Equilíbrio.....	35
3.3.4. Redes Neurais Artificiais.....	37
3.4. Aprendizado de Máquina.....	39
3.4.1. Modelos baseados em Árvore de Decisão	41
3.4.2. XGBoost	44
4. METODOLOGIA.....	45
4.1. Matérias-primas e Condições Operacionais	45
4.2. Simulação de Processo (PRO/II)	50
4.3. Variáveis-alvo e Métricas Estatísticas	52
4.4. Modelo de Aprendizado de Máquina	52
4.5. Interpretabilidade e Otimização.....	53
5. RESULTADOS E DISCUSSÃO	55
5.1. Validação do Modelo de Gaseificação do PRO/II.....	55
5.2. Análise de Dados e Modelagem com XGBoost	57
5.3. Interpretabilidade e Projeções	62
5.4. Limitações e Domínio de Aplicabilidade	75
6. CONCLUSÃO.....	76

1. INTRODUÇÃO

A crescente demanda global por energia e a contínua dependência de combustíveis fósseis intensificaram as emissões de gases de efeito estufa, acelerando as mudanças climáticas (Qi et al., 2024). A cada ano, mais de 2,3 bilhões de toneladas de resíduos sólidos urbanos e 3,8 bilhões de toneladas de resíduos agrícolas são gerados, enquanto a produção de plástico já excede 360 milhões de toneladas, com taxas de reciclagem criticamente baixas (Alliance to End Plastic Waste, 2023; Rao et al., 2024; United Nations Environment Programme, 2024). Diante desse duplo desafio de geração de energia e acúmulo de resíduos, a co-gaseificação surge como uma solução estratégica, permitindo a utilização sinérgica de biomassa renovável e neutra em carbono e de plásticos ricos em energia e de lenta degradação (Kern; Pfeifer; Hofbauer, 2013; Qi et al., 2024). Essa tecnologia não apenas mitiga a disposição inadequada de resíduos, mas também converte matérias-primas mistas em gás de síntese de alta qualidade e rico em hidrogênio, reduzindo impactos ambientais e promovendo uma transição energética mais limpa (Ajourloo et al., 2024; Fazil; Kumar; Mahajani, 2022).

A gaseificação é um processo termoquímico versátil que converte uma ampla variedade de materiais carbonáceos — como resíduos agrícolas, biomassa florestal, plásticos, pneus e carvão — em gás de síntese, principalmente composto por H_2 , CO , CO_2 e CH_4 , sob altas temperaturas e condições de oxidação controlada (Janajreh et al., 2021; Mishra; Ong; Lin, 2023). A escolha do agente gaseificante (vapor, oxigênio, ar, CO_2 ou suas combinações) afeta fortemente a composição e o poder calorífico do gás de síntese, bem como a formação de subprodutos como alcatrão, cinzas e carvão residual. De acordo com o princípio de Le Chatelier, a seleção do agente gaseificante pode ser utilizada para deslocar as vias reacionais em direção a maiores rendimentos de H_2 e CO . O ar geralmente promove a oxidação parcial, aumentando as concentrações de CO e CO_2 , enquanto o vapor favorece reações de reforma, intensificando a produção de H_2 e CH_4 (Bashir et al., 2025). O controle da temperatura é igualmente crítico, pois temperaturas mais elevadas deslocam o equilíbrio em direção à formação de H_2 e CO , suprimem a geração de alcatrão e aumentam o rendimento global de gás (Janajreh et al., 2021).

A co-alimentação de plásticos com biomassa proporciona vantagens significativas em comparação ao uso isolado de cada material. Embora a biomassa seja um combustível bem estabelecido, ela apresenta variabilidade sazonal, heterogeneidade, altos teores de oxigênio e umidade e, conseqüentemente, baixo poder calorífico e baixa razão H/C. Esses fatores promovem subprodutos indesejáveis como coque, alcatrão e cinzas, reduzindo a eficiência do

processo (Erdem; Gündüz Han; Midilli, 2024; Fazil; Kumar; Mahajani, 2022; Qi et al., 2024). Os plásticos, apesar do alto poder calorífico, enfrentam desafios operacionais na gaseificação, incluindo aglomeração, incrustações em equipamentos e elevada formação de alcatrão devido à sua natureza polimérica, o que restringe seu uso a tipos específicos de gaseificadores (Jeong et al., 2022; Lopez et al., 2018). Quando combinados, esses materiais interagem de forma sinérgica, reduzindo limitações individuais e melhorando o desempenho geral por meio de menores rendimentos de alcatrão e carvão, maior poder calorífico do gás produzido e maior rendimento total de gás (Fazil; Kumar; Mahajani, 2022; Islam, 2020).

Devido à complexidade, ao custo e ao tempo dos experimentos de gaseificação, a modelagem matemática e computacional tornou-se uma alternativa prática para explorar cenários operacionais. Abordagens comuns incluem equilíbrio termodinâmico, modelos cinéticos, dinâmica dos fluidos computacional (CFD) e redes neurais artificiais (ANNs), sendo os modelos de equilíbrio os mais amplamente utilizados por sua simplicidade e rapidez (Ayorloo et al., 2022a). A prática industrial padrão aplica a minimização da energia livre de Gibbs, normalmente no Aspen Plus, para calcular a conversão teórica máxima e distribuições ideais de produtos. Contudo, esses modelos tendem a superestimar H_2 e CO e subestimar CO_2 , CH_4 , alcatrão e carvão residual, especialmente em temperaturas mais baixas (Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Puig-Gamero et al., 2021). Modificações como o método de equilíbrio restrito, implementado neste trabalho, têm sido adotadas para reduzir esses erros de predição (Islam, 2020).

Embora ANNs tenham sido menos aplicadas que outras técnicas de aprendizado de máquina, como máquinas de vetor de suporte (SVM) e árvores de decisão (DT), modelos de ML em geral são orientados a dados e capazes de capturar relações complexas, multidimensionais e não lineares (Ascher; Watson; You, 2022). Eles não precisam representar explicitamente mecanismos físico-químicos, mas conseguem estabelecer relações robustas de entrada e saída, adaptar-se a novos dados e melhorar a precisão preditiva. Por essas razões, as aplicações de ML em estudos de gaseificação cresceram significativamente nos últimos anos (Lahafdoozian et al., 2024; Ozbas et al., 2019; Qi et al., 2024; Voltolini et al., 2025).

Estudos recentes indicam que outros métodos de ML podem alcançar precisão igual ou superior, oferecendo maior interpretabilidade e oportunidades de otimização de processos. Em vez de apresentar uma revisão exaustiva de estudos sobre pirólise ou gaseificação, a Tabela 1 concentra-se nas estratégias de pós-processamento adotadas em modelagens de conversão termoquímica assistidas por ML. Dessa forma, estudos sobre pirólise, gaseificação com alimentação única e co-gaseificação são considerados conjuntamente, com o objetivo de

contextualizar diferenças nos arcabouços de interpretabilidade, otimização e avaliação de confiabilidade, aspectos que ainda são pouco explorados em estudos de co-gaseificação biomassa-plástico. Por exemplo, Cheng et al. (2023) avaliaram quatro algoritmos de ML para pirólise de plásticos e concluíram que um modelo de DT baseado em análise elementar forneceu as melhores previsões para rendimentos de líquidos, gases e sólidos. De forma semelhante Efremov et al. (2024) estudaram a co-gaseificação biomassa-carvão visando maximizar o rendimento e a qualidade do gás de síntese, compararam cinco algoritmos e destacaram o modelo de árvore de decisão eXtreme Gradient Boost (XGBoost) como o mais preciso.

Tabela 1 – Comparação das estratégias de pós-processamento em modelagens de conversão termoquímica assistidas por aprendizado de máquina

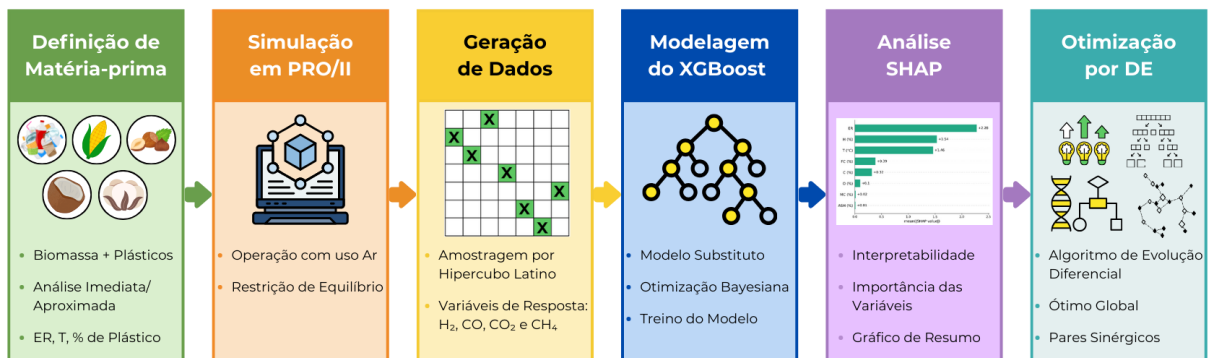
Fonte dos dados	Abordagem de ML	Estratégia de Pós-Processamento	Variáveis Alvo	Ref.
Dados provenientes da literatura	XGBoost, Regressão por <i>Gradient Boosting</i> , Random Forest, Regressão por <i>Gradient Boosting</i> baseada em histogramas	<i>SHapley Additive exPlanations</i> (SHAP)	Rendimento e composição do gás de síntese, LHV, rendimento de alcatrão, eficiência de conversão de carbono na co-gaseificação de biomassa e resíduos sólidos urbanos.	(Qi et al., 2024)
<i>Aspen Plus</i>	<i>K-Nearest Neighbour</i> , Regressão por Vetores de Suporte, ANN, Árvores de Classificação e Regressão, <i>Random Forest</i> , Regressão por <i>Gradient Boosting</i>	Não reportado	Vazões de H ₂ , CO, CO ₂ e CH ₄ , rendimento de H ₂ , eficiência do gás frio na gaseificação de resíduos plásticos.	(Lahafdoozian et al., 2024)
Dados provenientes da literatura	DT, ANN, SVM, Processo Gaussiano	SHAP	Produtos sólidos, líquidos e gasosos e subprodutos na pirólise de resíduos plásticos.	(Cheng et al., 2023)
Dados provenientes da literatura	XGBoost, Regressão Linear, <i>Categorical Boosting</i> , Regressão por Vetores de Suporte, Regressão por Processo Gaussiano	SHAP + <i>Local Interpretable Model-agnostic Explanations</i>	Rendimento de gás de síntese e LHV na co-gaseificação de biomassa e carvão	(Efremov et al., 2024)
<i>Aspen Plus</i>	ANN	<i>Non-dominated Sorting Genetic Algorithm-II</i>	Composição do gás de síntese, LHV, eficiência térmica na co-gaseificação biomassa-plástico	(Tian et al., 2025)
PRO/II (retrição de equilíbrio)	XGBoost	ED + SHAP	Composição e rendimento do gás de síntese, LHV, razão H ₂ /CO na co-gaseificação biomassa-plástico	Este trabalho

Fonte: O autor (2025).

Com base nesses avanços, o presente trabalho introduz a primeira integração de um modelo de equilíbrio PRO/II rigorosamente validado com o algoritmo XGBoost para prever H₂, CO,

CO₂, razão H₂/CO, poder calorífico inferior (LHV) e rendimento total de gás de síntese (GY) a partir das condições operacionais. Um conjunto de dados com 3.000 simulações de co-gaseificação — cobrindo cinco tipos de plásticos e 35 espécies de biomassa — foi gerado usando ar como agente gaseificante e o método de equilíbrio restrito dentro do simulador estacionário AVEVA PRO/II. Técnicas de otimização por evolução diferencial e ferramentas de IA explicável foram então aplicadas para ampliar o poder preditivo e revelar a influência subjacente das variáveis do processo, destacando a novidade e a dificuldade de combinar modelagem termoquímica complexa com aprendizado de máquina orientado por dados. A Figura 1 ilustra, de forma esquemática e resumida, apresenta o fluxo de trabalho adotado neste estudo, abrangendo desde a definição das matérias-primas e as simulações no PRO/II até a geração do conjunto de dados, a modelagem via XGBoost, a análise de interpretabilidade por SHAP e a etapa de otimização baseada em Evolução Diferencial (ED).

Figura 1 – Representação esquemática do fluxo metodológico adotado



Fonte: O autor (2025).

2. OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Desenvolver e avaliar uma abordagem integrada de simulação de processos e aprendizado de máquina para a predição e otimização da gaseificação, combinando um modelo fenomenológico implementado no simulador AVEVA PRO/II com modelos de aprendizado de máquina baseados em XGBoost, visando a análise do gás de síntese e a identificação de condições operacionais otimizadas.

2.2 Objetivos Específicos

- Desenvolver e implementar um modelo de simulação do processo de gaseificação no AVEVA PRO/II, capaz de representar adequadamente o comportamento termoquímico do sistema;
- Gerar uma base de dados sintética abrangente para as faixas operacionais e composicionais das matérias-primas, utilizando a técnica de Amostragem por Hipercubo Latino, a partir do modelo de simulação desenvolvido;
- Treinar modelos multivariados baseados em XGBoost para a predição dos principais parâmetros do gás de síntese, avaliando sua acurácia, robustez e capacidade de generalização;
- Avaliar o desempenho dos modelos preditivos por meio de métricas estatísticas adequadas, bem como analisar a importância relativa das variáveis de entrada, visando à interpretabilidade dos resultados;
- Investigar e otimizar as condições operacionais (temperatura, razão de equivalência e proporção de plástico) e identificar combinações sinérgicas de biomassa e plástico que maximizem a produção de hidrogênio e a qualidade do gás de síntese.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1. Biomassa e Plásticos

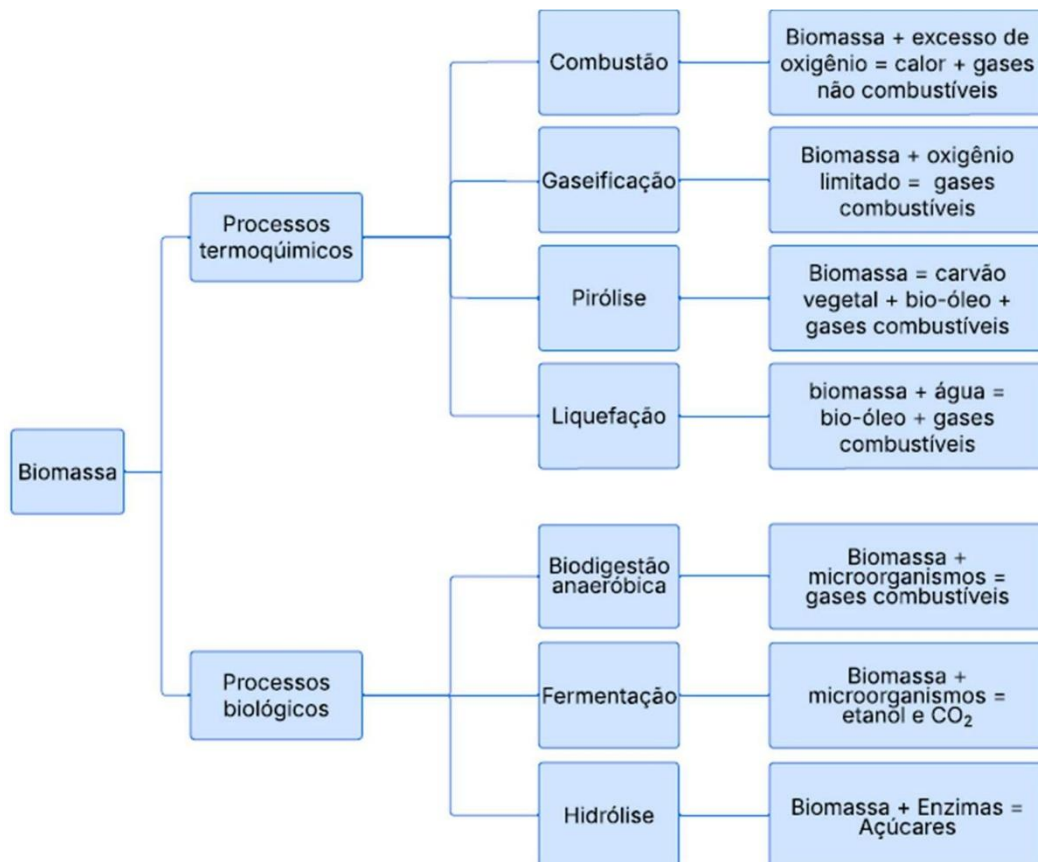
Segundo a ANEEL, (2008), a biomassa pode ser entendida como qualquer matéria orgânica passível de conversão energética nas formas térmica, elétrica ou mecânica, apresentando origens diversas, tais como florestal (madeira), agrícola (cana-de-açúcar) e resíduos urbanos e industriais (lixo). Dentre as fontes energéticas renováveis, a biomassa se destaca por sua independência das condições meteorológicas, além de sua abundante disponibilidade e ampla distribuição geográfica. Além disso, a biomassa apresenta participação majoritária na matriz de energias renováveis, respondendo por mais de dois terços da produção global desse segmento, e projeções indicam capacidade de suprir até 25% das necessidades energéticas globais (Chen, H. et al., 2022).

A conversão energética da biomassa pode ocorrer por duas rotas distintas: termoquímica e bioquímica. Os processos termoquímicos englobam a combustão direta, a pirólise e a gaseificação, permitindo a obtenção de calor, energia elétrica, combustíveis líquidos ou gasosos e gás de síntese, composto principalmente por hidrogênio e monóxido de carbono. As rotas

bioquímicas, por sua vez, baseiam-se na atuação de microrganismos e enzimas para a produção de biocombustíveis, como o etanol. Dentre essas alternativas, a gaseificação destaca-se pela flexibilidade operacional e pela capacidade de aproveitar energeticamente diferentes tipos de biomassa (Jalili et al., 2022; Paula, 2025; Rumão, 2013). A Figura 2 apresenta um fluxograma dos processos de conversão de biomassa e seus produtos.

Outros fatores que favorecem o interesse pelo uso da biomassa como alternativa aos combustíveis fósseis estão associados ao seu potencial de neutralidade de carbono e à ampla disponibilidade de matérias-primas provenientes de diferentes setores produtivos (Barros et al., 2022). Além do aspecto energético, seu aproveitamento pode gerar benefícios ambientais, sociais e econômicos, como a redução das emissões, a geração de empregos e a ampliação do acesso à energia, especialmente em regiões remotas (Silveira, 2022) Ressalta-se, entretanto, que esses benefícios dependem da adoção de políticas e sistemas de produção adequados, uma vez que práticas inadequadas podem comprometer as vantagens ambientais da biomassa (Vassilev et al., 2010).

Figura 2 – Métodos de conversão de biomassa.



Fonte: (Paula, 2025).

Por outro lado, os plásticos podem ser definidos como materiais poliméricos sintéticos ou semissintéticos, majoritariamente obtidos a partir de derivados de petróleo e gás natural, caracterizados por elevada versatilidade, baixo custo e ampla aplicação em diversos setores industriais e de consumo. Do ponto de vista estrutural, os polímeros são macromoléculas formadas por unidades químicas repetitivas unidas por ligações covalentes, cujas propriedades dependem de sua composição química, da estrutura da cadeia e das interações intra e intermoleculares (Spinacé; Paoli, 2005). De acordo com seu comportamento térmico, os plásticos podem ser classificados em termoplásticos, termofixos e elastômeros. Em função de sua ampla utilização, os resíduos plásticos representam uma parcela significativa dos resíduos sólidos urbanos e industriais, configurando-se como um desafio ambiental, mas também como um potencial recurso energético (Al-Salem; Lettieri; Baeyens, 2009; Hopewell; Dvorak; Kosior, 2009).

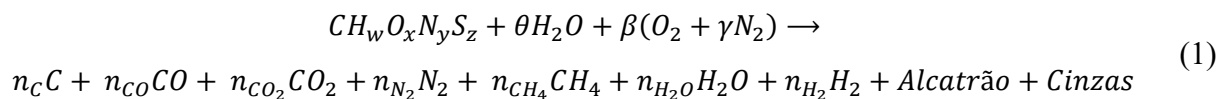
A gestão dos resíduos plásticos envolve diferentes estratégias de reaproveitamento e valorização, que podem ser organizadas em rotas de reciclagem mecânica, química e energética. A reciclagem mecânica baseia-se no reaproveitamento físico dos polímeros por meio de etapas como separação, trituração e reprocessamento, resultando na obtenção de grânulos empregados na fabricação de novos produtos, geralmente com menores exigências técnicas em relação aos materiais virgens. A reciclagem química, por sua vez, promove a conversão dos resíduos poliméricos em insumos químicos, como monômeros ou frações hidrocarbonadas, por meio de processos térmicos ou de solvólise, permitindo sua reinserção na cadeia petroquímica, embora apresente custos elevados e maior sensibilidade à presença de contaminantes (Gerbase; Reis De Oliveira, 2012; Spinacé; Paoli, 2005).

Quando as rotas de reciclagem material se tornam técnica ou economicamente inviáveis, a reciclagem energética desponta como alternativa para o aproveitamento do elevado poder calorífico dos resíduos plásticos. Nessa abordagem, esses materiais são utilizados como combustível em processos de conversão térmica para a geração de energia elétrica e térmica, apresentando desempenho energético comparável ao de combustíveis fósseis convencionais, uma vez que 1 kg de plástico pode liberar uma quantidade de energia equivalente à queima de aproximadamente 1 kg de óleo diesel. Além de reduzir o volume de resíduos destinados a aterros, essa rota contribui para a substituição parcial de combustíveis fósseis, desde que associada a sistemas adequados de controle ambiental, capazes de mitigar a emissão de compostos potencialmente (Al-Salem; Lettieri; Baeyens, 2009; Carolina Silva et al., 2011; Gerbase; Reis De Oliveira, 2012).

Na avaliação do potencial energético, a caracterização de combustíveis sólidos, como biomassas e resíduos plásticos, constitui uma etapa essencial na análise de processos termoquímicos. As propriedades físico-químicas desses materiais influenciam não apenas o desempenho operacional de processos como combustão, pirólise e gaseificação, mas também a composição e o rendimento dos produtos gerados. Nesse contexto, a análise imediata (*proximate analysis*) e a análise elementar (*ultimate analysis*) são amplamente empregadas na literatura, por fornecerem parâmetros fundamentais para a compreensão do comportamento do combustível e para o adequado projeto e operação de sistemas de conversão energética.

A análise elementar baseia-se na determinação das frações mássicas dos principais elementos químicos presentes em combustíveis sólidos — carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N) e enxofre (S) — os quais governam os mecanismos das reações termoquímicas. A partir desses dados, a composição global do material pode ser representada por uma fórmula empírica do tipo $C_cH_hO_oN_nS_s$, frequentemente normalizada em relação ao carbono, permitindo o estabelecimento das equações estequiométricas associadas aos processos de conversão. Nesse contexto, o carbono atua como principal precursor das espécies CO, CO₂, CH₄ e do carbono não reagido, enquanto o hidrogênio e o oxigênio influenciam diretamente as reações de formação de H₂ e H₂O. Os resultados dessa caracterização podem ser expressos na base recebida (*as received*), em base seca (*dry basis*) ou em base seca isenta de cinzas (*dry ash-free*). Assim, a análise elementar constitui uma ferramenta indispensável para a previsão da composição do gás de síntese, para o fechamento dos balanços de massa e energia e para a avaliação da conversão de carbono em processos de combustão, pirólise e gaseificação. (Halba; Thengane; Arora, 2023; Rajasekhar Reddy; Vinu, 2018)

Com base na composição elementar do combustível A equação geral da combustão incompleta do material alimentado pode ser representada, conforme apresentada na Equação (1).



Os índices w , x , y e z representam, respectivamente, as proporções hidrogênio, oxigênio, nitrogênio e enxofre em relação ao carbono na fórmula empírica do material. O termo θ corresponde à quantidade de umidade associada ao combustível, determinada a partir da análise imediata, enquanto β representa a quantidade de agente oxidante fornecida ao sistema. O parâmetro γ expressa a razão molar entre o nitrogênio e o oxigênio no agente oxidante,

assumindo o valor $\gamma = 3,76$ quando o ar atmosférico é utilizado e $\gamma = 0$ no caso de oxigênio puro. As incógnitas n_i denotam os coeficientes estequiométricos das espécies presentes nos produtos gasosos e sólidos, sendo i o índice associado a cada componente químico.

Os índices elementares da fórmula empírica podem ser estimados a partir das frações mássicas dos elementos obtidas experimentalmente, utilizando-se relações estequiométricas baseadas nas massas molares dos elementos constituintes, conforme expresso pela Equação (2):

$$k = \frac{\%j}{\%C} \cdot \frac{MM \text{ de } C}{MM \text{ de } j}, \text{ sendo } k = a, b, c, d \quad (2)$$

em que j corresponde aos elementos H, O, N ou S; MM representa a massa molar e k é o índice estequiométrico do respectivo elemento na fórmula empírica do combustível.

A análise imediata fornece uma caracterização preliminar do combustível sólido por meio dos teores de umidade, materiais voláteis, carbono fixo e cinzas, parâmetros que condicionam diretamente sua reatividade e o desempenho em processos termoquímicos. Elevados teores de umidade implicam maior consumo energético para secagem, redução da temperatura do reator e diminuição do poder calorífico do gás produzido, enquanto maiores razões entre materiais voláteis e carbono fixo estão associadas a uma conversão mais rápida e eficiente do combustível. O carbono fixo sustenta as reações heterogêneas responsáveis pela formação contínua das espécies gasosas, ao passo que as cinzas, embora inertes do ponto de vista energético, influenciam de forma significativa a operação do sistema, estando associadas a fenômenos de incrustação, corrosão (Ayorloo et al., 2022b; Rajasekhar Reddy; Vinu, 2018). Assim, a análise imediata constitui um critério essencial para a avaliação da viabilidade energética e operacional de combustíveis sólidos, sendo geralmente desejáveis teores de umidade inferiores a aproximadamente 15%, a depender do tipo de gaseificador empregado (Ramos et al., 2018).

Outra propriedade fundamental do material combustível, relacionada à análise imediata, é o poder calorífico, definido como a quantidade de energia liberada na forma de calor pela combustão completa de uma unidade de massa do combustível. Esse parâmetro pode ser expresso como Poder Calorífico Superior (HHV), que considera a condensação total da água formada, ou Poder Calorífico Inferior (LHV), que desconsidera o calor latente de vaporização e representa a energia efetivamente disponível nos processos termoquímicos (Dashti et al., 2019; Nemer, 2010). O valor do poder calorífico reflete o conteúdo energético global do material e depende da contribuição combinada de seus elementos químicos, sendo fortemente

influenciado pelos teores de umidade, cinzas e oxigênio estrutural. O poder calorífico pode ser determinado experimentalmente ou estimado por meio de correlações empíricas baseadas na análise imediata e/ou elementar, como as correlações de Dulong e suas modificações, amplamente utilizadas para a avaliação preliminar da viabilidade energética de biomassas, resíduos sólidos e materiais poliméricos (Channiwala; Parikh, 2002; Rajasekhar Reddy; Vinu, 2018).

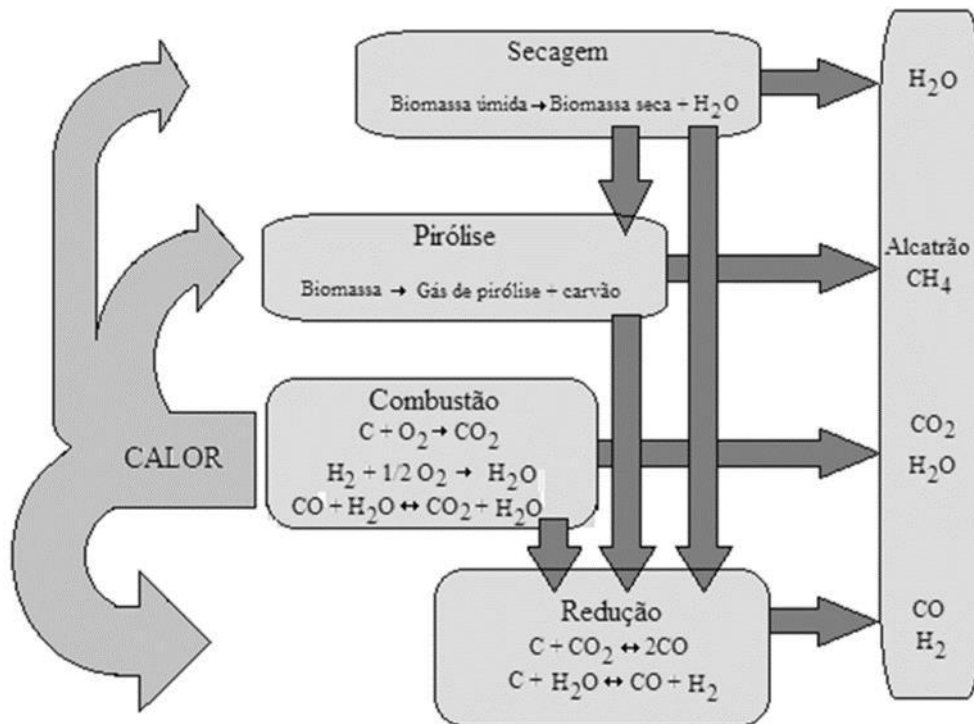
3.2. Gaseificação

A gaseificação consiste em um processo termoquímico de conversão no qual combustíveis sólidos ou resíduos carbonáceos são transformados em uma corrente gasosa denominada gás de síntese, composta predominantemente por monóxido de carbono (CO) e hidrogênio (H₂), além de quantidades variáveis de dióxido de carbono (CO₂) e metano (CH₄). O processo ocorre por meio de reações controladas em ambiente com suprimento limitado de agente oxidante, operando tipicamente em temperaturas elevadas, da ordem de 600 a 1000 °C (Janajreh et al., 2021; Kumar, A.; Jones; Hanna, 2009).

Nessas condições, o material alimentado reage parcialmente, resultando na formação de uma fase gasosa combustível, acompanhada de subprodutos sólidos e condensáveis. Entre os produtos sólidos, destaca-se o carvão residual, usualmente denominado char, correspondente à fração rica em carbono não convertida, enquanto as cinzas representam a fração inorgânica remanescente do combustível. Adicionalmente, são formados compostos orgânicos condensáveis, conhecidos como alcatrões (tar), constituídos por uma mistura complexa de hidrocarbonetos de maior peso molecular. A natureza e a concentração desses subprodutos dependem diretamente das propriedades físico-químicas do combustível de entrada e das condições operacionais do processo, refletindo a flexibilidade intrínseca da gaseificação em acomodar diferentes matérias-primas e arranjos de reatores (Bhurse et al., 2025; Janajreh et al., 2021; Marcantonio et al., 2023).

O processo de gaseificação pode ser descrito, de forma simplificada, por quatro etapas principais: secagem, pirólise, oxidação parcial e redução, as quais podem ocorrer de maneira simultânea no interior do gaseificador, dependendo de sua configuração e das condições operacionais (Marcantonio et al., 2023; Puig-Arnavat; Bruno; Coronas, 2010; Sansaniwal et al., 2017). A Figura 3 ilustra essas quatro etapas do processo de gaseificação.

Figura 3 – Exemplificação das Etapas de Gaseificação.



Fonte: (Rey, 2018).

A secagem ocorre tipicamente entre 100 e 200 °C e consiste na evaporação da umidade presente no combustível, sem a ocorrência de reações químicas. Nessa etapa, o teor de umidade é progressivamente reduzido, geralmente para valores inferiores a 5%, preparando o material para as etapas subsequentes. Por ser um processo endotérmico, a elevada umidade inicial aumenta a demanda energética do sistema e afeta negativamente a eficiência global da gaseificação (Kumar, A.; Jones; Hanna, 2009; Puig-Arnavat; Bruno; Coronas, 2010).

Em seguida, na pirólise, que se desenvolve aproximadamente entre 300 e 600 °C na ausência de oxigênio, ocorre a decomposição térmica do material, resultando na formação de uma fração gasosa, um resíduo sólido rico em carbono (char) e compostos orgânicos condensáveis, conhecidos como alcatrões. A proporção desses produtos depende das condições de operação, como temperatura, taxa de aquecimento e tempo de residência (Chawdhury; Mahkamov, 2010; Ciuffi et al., 2020).

Na etapa de oxidação parcial, uma quantidade substequiométrica de agente oxidante promove reações exotérmicas entre o carbono residual e os compostos voláteis com o agente. Nessa etapa, são formados predominantemente CO_2 e H_2O , além de CO em menores proporções, e são atingidas as temperaturas mais elevadas do reator, usualmente entre 1000 e 1500 °C. O calor liberado nessas reações é essencial para sustentar as etapas endotérmicas de secagem, pirólise e redução, além de exercer papel fundamental no controle da conversão do

carbono residual e na degradação térmica de alcatrões (Chawdhury; Mahkamov, 2010; Marcantonio et al., 2023).

Por fim, na redução, em temperaturas da ordem de 800 a 1000 °C e em ambiente pobre em oxigênio, ocorrem reações endotérmicas entre os gases e o carbono do coque, como as reações de Boudouard, gaseificação com vapor e deslocamento gás-água, responsáveis pela formação de CO e H₂ e pela definição da composição final do gás de síntese (Puig-Arnavat; Bruno; Coronas, 2010).

As principais reações envolvidas nas etapas da gaseificação, responsáveis pela conversão do combustível sólido em espécies gasosas, são apresentadas na Tabela 2.

Tabela 2 – Reações que ocorrem na Gaseificação.

Combustão Incompleta do Carbono	$C_{(s)} + 1/2 O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)}$	R1
Combustão Completa do Carbono	$C_{(s)} + O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)}$	R2
Reação de Boudouard	$C_{(s)} + CO_{2(g)} \rightleftharpoons 2 CO_{(g)}$	R3
Reação Água–Gás Primário	$C_{(s)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + H_2_{(g)}$	R4
Reação Água–Gás Secundário	$C_{(s)} + 2 H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)} + 2 H_2_{(g)}$	R5
Reação de Deslocamento Água–Gás	$CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)} + H_2_{(g)}$	R6
Metanação	$C_{(s)} + 2H_2_{(g)} \rightleftharpoons CH_4_{(g)}$	R7
Reforma a Vapor do Metano	$CH_4_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightleftharpoons CO_{(g)} + 3 H_2_{(g)}$	R8
Reforma Seca do Metano	$CH_4_{(g)} + CO_{2(g)} \rightleftharpoons 2 CO_{(g)} + 2 H_2_{(g)}$	R9
Combustão de Monóxido de Carbono	$CO_{(g)} + 1/2 O_{2(g)} \rightleftharpoons CO_{2(g)}$	R10
Combustão de Hidrogênio	$H_2_{(g)} + 1/2 O_{2(g)} \rightleftharpoons H_2O_{(g)}$	R11

Fonte: (Ramos et al., 2018).

A gaseificação pode ser conduzida a partir de uma única matéria-prima ou por meio da co-gaseificação, na qual dois ou mais combustíveis sólidos distintos são processados simultaneamente no mesmo reator. Essa abordagem tem sido amplamente investigada como estratégia para ampliar a flexibilidade do processo, otimizar a composição do gás de síntese e viabilizar energeticamente resíduos com características individuais menos favoráveis. No caso da combinação de biomassa e plásticos, esse arranjo mostra-se particularmente eficiente, uma vez que a interação entre os materiais favorece a liberação de compostos voláteis e eleva o poder calorífico do gás de síntese, ao mesmo tempo em que mitiga limitações operacionais e

termoquímicas associadas ao processamento individual de cada matéria-prima (Kaydouh; Hassan, El, 2022; Ramos et al., 2018).

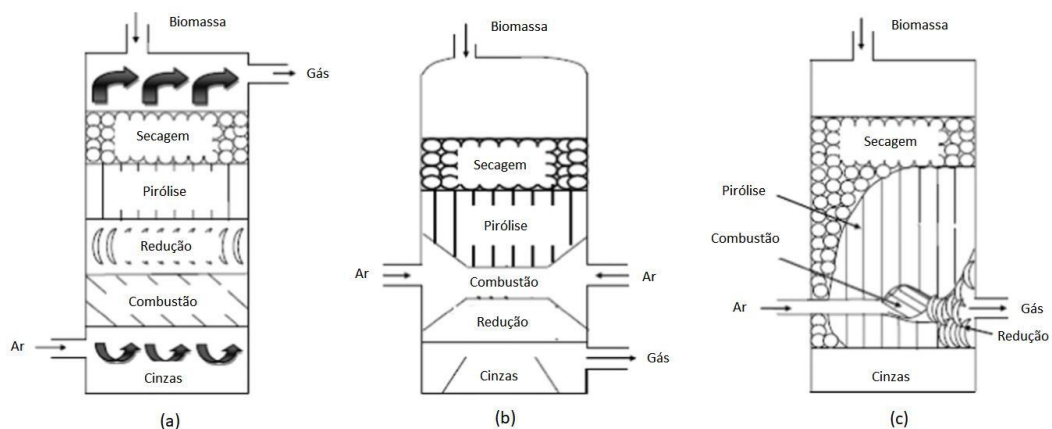
3.2.1. Tipos de Gaseificadores

Os gaseificadores podem ser classificados segundo diferentes critérios, como o agente gaseificante empregado, a forma de suprimento de calor e, principalmente, a configuração do reator. Entre essas abordagens, a classificação baseada na configuração e no regime de contato entre as fases sólida e gasosa é a mais adotada, pois está diretamente relacionada ao desempenho do processo. De modo geral, destacam-se os gaseificadores de leito fixo, leito fluidizado e de fluxo arrastado, cada qual com características operacionais, faixas de operação e aplicações específicas.

Os gaseificadores de leito fixo, também denominados de leito móvel, são caracterizados por um leito de partículas sólidas através do qual o agente gaseificante (ar, oxigênio e/ou vapor) escoou em regime relativamente lento, enquanto o combustível se desloca gradualmente ao longo do reator. Esse regime operacional resulta em baixas velocidades do gás, longos tempos de residência do sólido e elevada conversão de carbono. Esses sistemas, no entanto, são sensíveis à formação de alcatrões no gás produzido, embora avanços recentes em estratégias de controle desses compostos tenham ampliado sua viabilidade operacional (Mckendry, 2002; Ramirez; Gabriel do Amaral Crispim, 2022; Sansaniwal et al., 2017).

Os gaseificadores de leito fixo podem operar nas configurações contracorrente (*updraft*), co-corrente (*downdraft*) e corrente cruzada (*crossdraft*), sendo diferenciados principalmente pela direção relativa entre o fluxo do combustível sólido e do agente gaseificante, como ilustrado na Figura 4.

Figura 4 – Tipos de gaseificadores de leito fixo.



Fonte: (Lewin; Pradelle, 2020).

No contracorrente, o combustível é alimentado pelo topo e o agente gaseificante entra pela base, fazendo com que o gás produto escoe em sentido ascendente; esse arranjo favorece elevada eficiência térmica e alta conversão de carbono, porém resulta em gás com elevado teor de alcatrões, uma vez que os produtos da pirólise não atravessam a zona de oxidação de alta temperatura (Ajourloo et al., 2022b; Kumar, A.; Jones; Hanna, 2009; Mckendry, 2002).

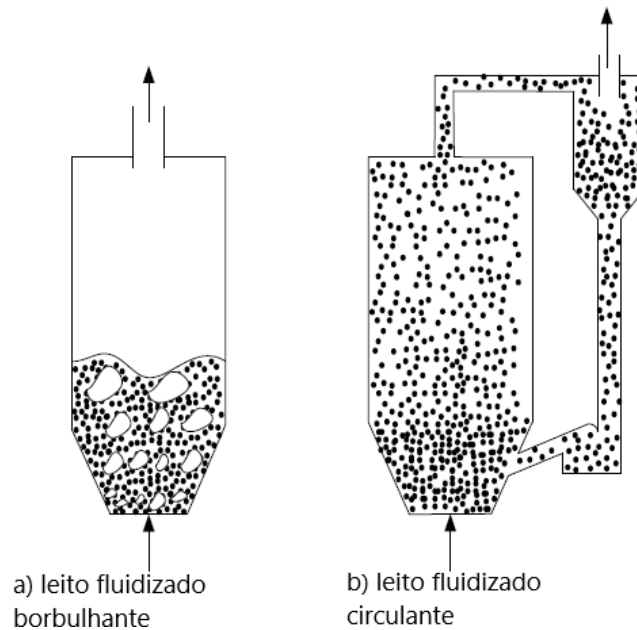
No co-corrente, o combustível e o agente gaseificante escoam no mesmo sentido e o gás é retirado pela base do reator, forçando os vapores da pirólise a atravessarem a zona de combustão, o que promove o craqueamento dos alcatrões e gera um gás de melhor qualidade, embora com menor eficiência térmica e maior sensibilidade às características do combustível (Ajourloo et al., 2022b; Block et al., 2019).

Na configuração de corrente cruzada, o combustível é alimentado pelo topo enquanto o agente gaseificante entra lateralmente, concentrando as reações em uma região específica do reator. Esse arranjo apresenta resposta operacional rápida e simplicidade construtiva, porém está associado a altas temperaturas locais, menor eficiência global e gás com elevado teor de alcatrões, o que restringe sua aplicação prática (Ajourloo et al., 2022b; Block et al., 2019).

De forma geral, os gaseificadores contracorrente e co-corrente são os mais utilizados em sistemas de pequena escala, sendo o primeiro indicado quando se prioriza eficiência térmica e o segundo quando se busca maior qualidade do gás, enquanto a configuração corrente cruzada (crossdraft) permanece limitada a aplicações específicas (Ajourloo et al., 2022b; Mckendry, 2002; Sansaniwal et al., 2017).

Os gaseificadores de leito fluidizado operam com partículas sólidas suspensas pelo escoamento do agente gaseificante, o que resulta em mistura intensa gás-sólido, elevada taxa de transferência de calor e perfil de temperatura quase uniforme no reator. Essa característica favorece altas conversões de carbono, boa flexibilidade operacional e maior viabilidade de ampliação de escala quando comparados aos gaseificadores de leito fixo, embora ainda apresentem geração moderada de alcatrões e material particulado no gás produzido. De acordo com o regime de escoamento, esses reatores são classificados em leito fluidizado borbulhante (bubbling fluidized bed – BFB) e leito fluidizado circulante (circulating fluidized bed – CFB), como ilustrado na Figura 5 (Block et al., 2019; George; Arun; Muraleedharan, 2018).

Figura 5 – Tipos de gaseificadores de leito fluidizado.

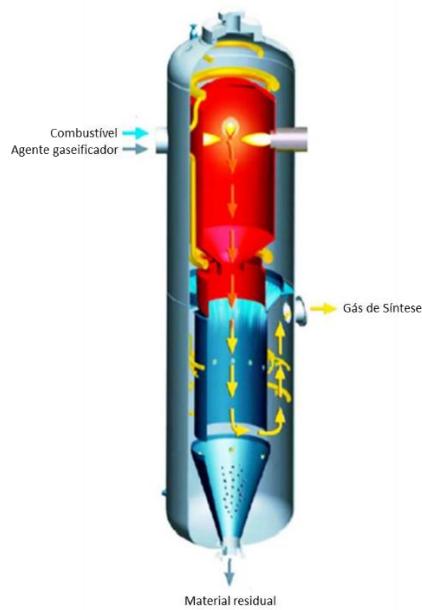


Fonte: (Turmina, 2021).

No BFB, o escoamento do agente gaseificante ocorre a velocidades relativamente baixas, de modo que as partículas sólidas permanecem majoritariamente no interior do leito, com circulação limitada. Essa dinâmica resulta em menores tempos de residência do sólido e, conseqüentemente, em conversões de carbono mais moderadas, devido ao arraste de partículas parcialmente reagidas. No CFB, o aumento da velocidade do gás promove o transporte contínuo das partículas para fora do reator, seguido de sua recirculação, o que amplia o tempo efetivo de residência e eleva a conversão global. Esse regime possibilita maior capacidade de processamento e melhor desempenho em aplicações de maior porte, embora implique maiores fluxos de particulados no gás produzido e maior complexidade nos sistemas de separação (Block et al., 2019; George; Arun; Muraleedharan, 2018; Nemer, 2010; Turmina, 2021).

Por fim, os gaseificadores de leito arrastado (*entrained-flow*), Figura 6, operam com partículas finas em escoamento co-corrente com o agente gaseificante, sob altas temperaturas e curtos tempos de residência. Essas condições favorecem elevada conversão e intenso craqueamento de alcatrões, resultando em gás de síntese de alta qualidade e tornando esse tipo de reator adequado para aplicações de grande escala. Contudo, a necessidade de alimentação finamente particulada, baixos teores de umidade e controle da fusão das cinzas impõe limitações operacionais (Puig-Arnavat; Bruno; Coronas, 2010; You et al., 2018; Zhang et al., 2020).

Figura 6 – Gaseificador de leito arrastado.



Fonte: (Fuziki, 2017).

3.2.2. Agente Gaseificante

O agente gaseificante é um dos principais parâmetros do processo de gaseificação, pois determina a atmosfera reacional no interior do reator e influencia diretamente a eficiência do processo, a formação de subprodutos e a composição do gás de síntese. Ar, oxigênio, vapor d'água, dióxido de carbono e suas combinações são os agentes mais empregados na literatura, sendo que cada um promove conjuntos distintos de reações químicas. A escolha do agente define o balanço entre reações de oxidação e de gaseificação, controlando simultaneamente a geração de calor no reator e a distribuição dos principais componentes do gás de síntese (Bashir et al., 2025; Islam, 2020).

A gaseificação a ar é a alternativa mais difundida devido à ampla disponibilidade e ao baixo custo operacional. Nesses sistemas, a quantidade de agente oxidante é usualmente expressa pela razão de equivalência (ER), Equação (3), definida como a razão entre o suprimento real de ar e o necessário para a combustão estequiométrica do combustível. Valores típicos de ER situam-se entre 0,20 e 0,45, faixa que assegura estabilidade térmica e conversão parcial adequada. Contudo, a presença de nitrogênio resulta na diluição do gás de síntese, levando a menores concentrações de CO e H₂ e a valores de poder calorífico relativamente baixos, geralmente entre 4 e 7 MJ·Nm⁻³. O aumento da ER tende a elevar a temperatura do reator e a reduzir a formação de alcatrões, porém promove maior oxidação do gás combustível, reduzindo seu valor

energético (Ciuffi et al., 2020; Halba; Thengane; Arora, 2023; Lasa et al., 2011; Mishra; Ong; Lin, 2023).

$$ER = \frac{\text{Massa de Combustível (kg/h) / Massa de Ar ou O}_2 \text{ (kg/h)}}{(\text{Massa de Combustível (kg/h) / Massa de Ar ou O}_2 \text{ (kg/h)})_{\text{Estequiométrico}}} \quad (3)$$

A utilização de oxigênio puro ou enriquecido elimina o efeito de diluição do nitrogênio, permitindo a produção de um gás de síntese com maior teor de CO e H₂ e poder calorífico significativamente superior. Nesses sistemas, a ER continua sendo um parâmetro relevante, uma vez que o excesso de oxigênio favorece a formação de CO₂ em detrimento de CO, reduzindo o desempenho energético do processo. Apesar das vantagens associadas à qualidade do gás e à menor formação de alcatrões e particulados, o elevado custo de produção do oxigênio e as altas temperaturas atingidas no reator constituem limitações importantes (Bashir et al., 2025; Ciuffi et al., 2020; Lasa et al., 2011; Lopez et al., 2015; Mishra; Ong; Lin, 2023).

O vapor d'água pode ser empregado isoladamente ou em combinação com ar ou oxigênio, sendo sua influência geralmente expressa pela razão vapor/combustível (S/C), Equação (4), definida como a razão entre as vazões mássicas de vapor e combustível. O aumento da S/C favorece reações endotérmicas, como a gaseificação com vapor e o deslocamento água-gás, elevando a concentração de hidrogênio no gás produzido e promovendo o craqueamento de alcatrões. Entretanto, valores excessivos de S/C podem comprometer o balanço energético do processo, reduzir a temperatura do reator e resultar em um gás de síntese com elevado teor de vapor residual (Bashir et al., 2025; Islam, 2020; Lasa et al., 2011; Lopez et al., 2015).

$$S/C = \frac{\text{Massa de Vapor de Água (kg/h)}}{\text{Massa de Combustível (kg/h)}} \quad (4)$$

3.2.3. Temperatura

A temperatura é um parâmetro determinante no processo de gaseificação, pois controla a cinética das reações e a conversão do carbono presente no combustível em espécies gasosas. Em condições de baixa temperatura, tipicamente em torno de 600 °C, predominam reações de oxidação parcial que favorecem a formação de CO₂, além de maiores rendimentos de coque e alcatrões, resultando em conversão limitada do combustível e menor eficiência energética do processo (Arena, 2012; Lasa et al., 2011). Nessas condições, a transformação do carbono em

gás de síntese é incompleta, o que compromete tanto o rendimento quanto a qualidade do gás produzido.

O aumento da temperatura desloca o sistema reacional em favor das reações endotérmicas, como a gaseificação com vapor, a reação de Boudouard e as reações de reforma e craqueamento de hidrocarbonetos. Como consequência, observa-se maior conversão de carbono, redução significativa da formação de alcatrões e incremento das concentrações de H₂ e CO no gás de síntese, acompanhado da diminuição de CH₄ e CO₂. Apesar desses benefícios, excessivamente elevadas podem impor limitações operacionais, como aglomeração ou fusão de cinzas e aumento das perdas energéticas associadas ao calor sensível, de modo que a temperatura ótima de operação deve ser definida em função do combustível, do agente gaseificante e do tipo de gaseificador empregado (Arena, 2012; Islam, 2020; Lasa et al., 2011; Sikarwar et al., 2017).

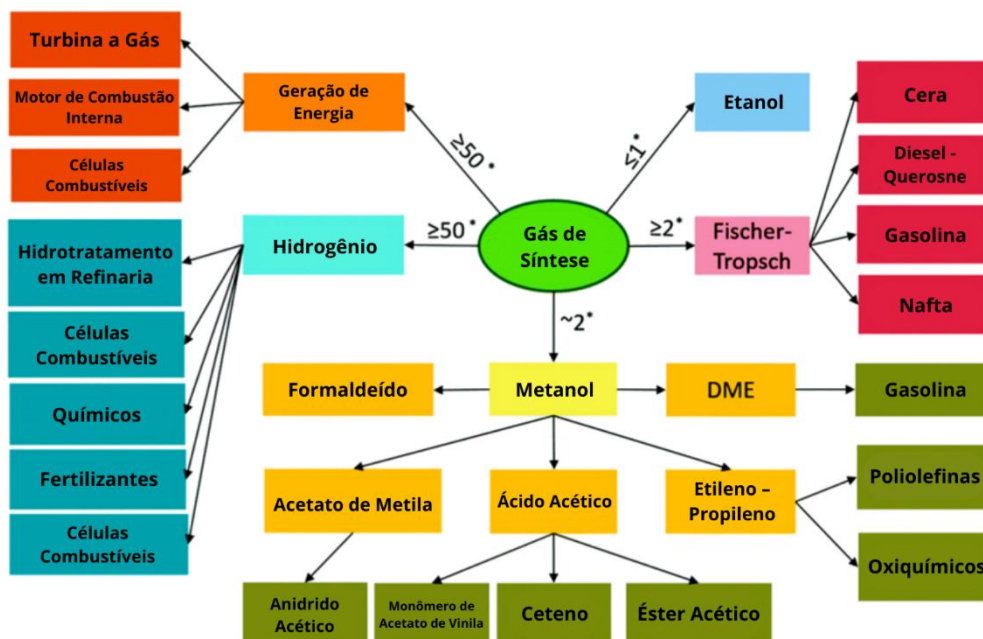
3.2.4. Gás de Síntese

O gás de síntese apresenta ampla versatilidade de uso, podendo ser empregado diretamente na geração de energia térmica e elétrica em caldeiras, fornos industriais, turbinas a gás e motores de combustão interna. Nessas aplicações, os requisitos de qualidade estão principalmente associados ao poder calorífico do gás e à limitação de contaminantes, como alcatrões, partículas, compostos sulfurados e metais alcalinos, de modo a evitar problemas de entupimento, deposição, corrosão e erosão dos equipamentos. Experiências em plantas de cogeração demonstram a viabilidade técnica do uso direto do gás, especialmente em sistemas de pequena e média escala, desde que sejam adotadas etapas adequadas de limpeza do gás, sendo a razão H₂/CO um parâmetro de menor relevância nesses casos (Ciuffi et al., 2020; Li, S., 2019; Lora et al., 2012).

Além do uso energético, o gás de síntese constitui uma plataforma intermediária estratégica para a produção de combustíveis e produtos químicos, incluindo hidrogênio, metanol, dimetil éter, combustíveis sintéticos via processo Fischer–Tropsch e gás natural sintético. Nessas rotas, a aplicação do gás exige controle rigoroso da razão H₂/CO, da concentração de CO₂ e da presença de impurezas, uma vez que os processos catalíticos operam sob condições específicas de temperatura e pressão e são altamente sensíveis à qualidade do gás de alimentação. Dessa forma, o seu condicionamento torna-se uma etapa indispensável para viabilizar aplicações de maior valor agregado (Ausfelder; Bazzanella, 2016; Li, S., 2019; Lora et al., 2012; Rauch; Hrbek; Hofbauer, 2014).

Considerando as rotas de síntese de combustíveis e produtos químicos, o gás de síntese deve atender a requisitos específicos de composição e pureza. Nas rotas de síntese, a aplicação do gás de síntese está fortemente associada à razão H_2/CO . Valores próximos de 1 são típicos para a produção de etanol e para algumas rotas de dimetil éter, enquanto razões em torno de 2 são requeridas para a síntese de metanol e para a síntese Fischer–Tropsch quando se utilizam catalisadores à base de cobalto. Razões mais baixas, da ordem de 0,6, são compatíveis com a síntese Fischer–Tropsch empregando catalisadores de ferro. Por outro lado, a produção de hidrogênio e de gás natural sintético demanda razões mais elevadas, geralmente superiores a 2 e 3, respectivamente (Li, S., 2019; Lora et al., 2012; Molino et al., 2018). A Figura 7 ilustra algumas aplicações de destaque do gás de síntese.

Figura 7 – Aplicações do gás de síntese.



Fonte: Adaptado de (Chae et al., 2020).

3.3. Modelagem

A modelagem e a simulação de processos de gaseificação constituem ferramentas fundamentais para o projeto, a análise e a otimização de gaseificadores, uma vez que esses sistemas envolvem fenômenos físicos e químicos fortemente interdependentes e sensíveis às condições operacionais. A realização exclusiva de ensaios experimentais para investigar tais interações é, em geral, limitada por custos elevados e longos tempos de execução, o que torna os modelos matemáticos essenciais para a compreensão do comportamento do reator, a previsão

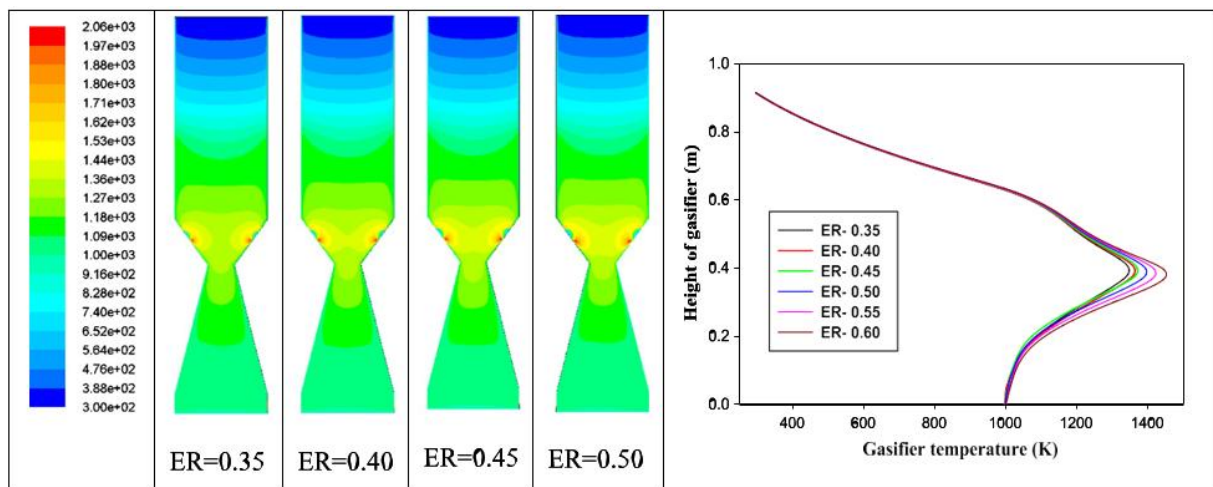
da composição do gás de síntese e a avaliação do impacto de alterações nos parâmetros de processo (Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Baruah; Baruah, 2014; Halba; Thengane; Arora, 2023; Silveira, 2022).

Diferentes estratégias de modelagem têm sido propostas para atender a esses objetivos, variando quanto ao nível de detalhamento e à complexidade computacional. De forma geral, os estudos de simulação de gaseificadores podem ser agrupados em quatro abordagens principais: modelos de equilíbrio termodinâmico, modelos cinéticos, modelos baseados em dinâmica dos fluidos computacional (CFD) e modelos empíricos fundamentados em redes neurais artificiais. Cada uma dessas abordagens apresenta vantagens e limitações específicas, sendo aplicada conforme o propósito do estudo, a disponibilidade de dados e o grau de fidelidade desejado na representação do processo (Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Halba; Thengane; Arora, 2023).

3.3.1. Fluidodinâmica computacional

Os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD) baseiam-se na resolução numérica das equações de conservação de massa, quantidade de movimento, energia e espécies químicas ao longo do domínio do reator, permitindo a descrição detalhada dos fenômenos de escoamento, transferência de calor e reações químicas. De forma semelhante aos modelos cinéticos, essas abordagens consideram explicitamente a geometria do reator, as propriedades dos materiais e as condições de contorno, o que lhes confere elevada capacidade preditiva e os torna adequados para estudos de projeto, análise operacional e avaliação do desempenho do gaseificador (Baruah; Baruah, 2014; Ramos et al., 2018; Silveira, 2022).

Figura 8 – Sistema de gaseificação por CFD.



Fonte: Adaptado de Kumar, U.; Paul (2019).

Os modelos CFD possibilitam a obtenção de perfis espaciais de temperatura e composição do gás, sendo amplamente aplicados a gaseificadores de leito fluidizado e de leito fixo concorrente. As formulações mais empregadas incluem as abordagens Euleriana–Euleriana e Euleriana–Lagrangiana, bem como variantes que incorporam o método dos elementos discretos (DEM), cuja escolha depende do nível de detalhamento desejado e da escala do sistema analisado. Apesar da elevada precisão na representação dos fenômenos físicos, esses modelos apresentam elevado custo computacional, o que limita sua aplicação em estudos paramétricos extensos (Baruah; Baruah, 2014; Gao, X. et al., 2018; Marcantonio et al., 2023).

3.3.2. Modelo cinético

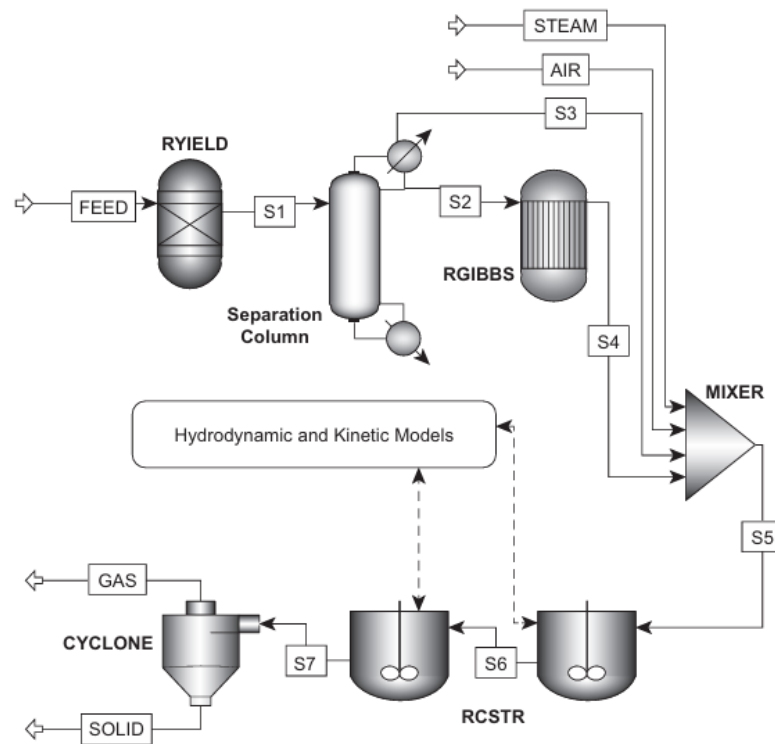
Os modelos cinéticos descrevem o processo de gaseificação a partir das taxas das reações químicas envolvidas, acopladas aos balanços de massa e de energia e, quando necessário, à hidrodinâmica do reator. Essa abordagem permite representar a evolução da composição do gás e da temperatura ao longo do reator, geralmente por meio de formulações unidimensionais ou bidimensionais. Ao considerar explicitamente parâmetros como tempo de residência, regime de escoamento e mecanismos de transferência de calor e massa entre as fases, os modelos cinéticos são especialmente adequados para a análise de condições afastadas do equilíbrio químico, nas quais as limitações cinéticas exercem papel dominante sobre o desempenho do processo (Lewin; Pradelle, 2020; Patra; Sheth, 2015; Ramos et al., 2018; Silveira, 2022).

A principal vantagem dos modelos cinéticos reside na sua capacidade de capturar os fenômenos que governam a conversão global, como a formação de *char* e alcatrão e a distinção entre reações homogêneas e heterogêneas ao longo do reator. Entretanto, formulações cinéticas simplificadas, frequentemente empregadas para reduzir a complexidade computacional, podem não permitir a identificação precisa das rotas reacionais responsáveis pela formação de determinados componentes do gás. Nesses casos, a associação entre modelos cinéticos e modelos de fluidodinâmica computacional constitui uma estratégia eficaz para superar tais limitações, uma vez que o acoplamento possibilita relacionar a hidrodinâmica e os campos locais de temperatura e concentração com a contribuição individual das reações químicas no interior do reator (Baruah; Baruah, 2014; Patra; Sheth, 2015; Puig-Arnavat; Bruno; Coronas, 2010).

A aplicação prática dessa abordagem é ilustrada na Figura 9, que apresenta um modelo abrangente de gaseificação em leito fluidizado desenvolvido no simulador Aspen Plus, no qual a cinética das reações químicas é explicitamente considerada em conjunto com a hidrodinâmica do reator. Nesse modelo, diferentes blocos de operação são utilizados para representar etapas

físicas e químicas distintas do processo, incluindo a decomposição do combustível sólido (RYield), o tratamento de reações sob condições próximas do equilíbrio (RGibbs) e a modelagem cinética da gaseificação do char em um reator do tipo CSTR (RCSTR), acoplada a equações hidrodinâmicas implementadas por sub-rotinas externas. Essa estrutura permite capturar a influência do tempo de residência, da fluidização e das taxas de reação sobre a conversão do combustível e a composição do gás de síntese, evidenciando o potencial dos modelos cinéticos para descrever condições afastadas do equilíbrio químico em sistemas reais de gaseificação.

Figura 9 – Sistema de gaseificação por modelo cinético.



Fonte: (Hantoko et al., 2019).

3.3.3. Modelo de Equilíbrio

Os modelos de equilíbrio termodinâmico constituem a abordagem mais difundida na modelagem de processos de gaseificação, sobretudo por aliarem simplicidade conceitual a baixo custo computacional. Ao assumir que o sistema evolui até um estado de equilíbrio químico, esses modelos permitem estimar rapidamente a composição do gás produzido a partir das condições de alimentação e operação. Essa característica favoreceu sua ampla incorporação em simuladores comerciais, como o Aspen Plus®, AVEVA PRO II® ou AVEVA Process

Simulation®, os quais utilizam balanços de massa e energia combinados com dados termodinâmicos para analisar o efeito de variáveis de processo, construir fluxogramas de plantas e apoiar estudos paramétricos, energéticos e de escalonamento (Champion et al., 2014; Khumalo; Patel, 2025; Voltolini et al., 2025).

A modelagem em equilíbrio pode ser conduzida por duas abordagens principais: a estequiométrica e a não estequiométrica. Na abordagem estequiométrica baseia-se na definição explícita de um conjunto de reações químicas e no cálculo das constantes de equilíbrio associadas, exigindo a seleção prévia das espécies e reações consideradas relevantes. Em contraste, a abordagem não estequiométrica determina a composição de equilíbrio por meio da minimização da energia livre de Gibbs do sistema, requerendo apenas a especificação dos elementos presentes na alimentação e das possíveis espécies nos produtos. Essa segunda abordagem apresenta maior generalidade e flexibilidade, embora, em geral, demande maior esforço computacional e apresente desafios numéricos adicionais (Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Elmaz; Yücel; Mutlu, 2020; Sezer; Özveren, 2021).

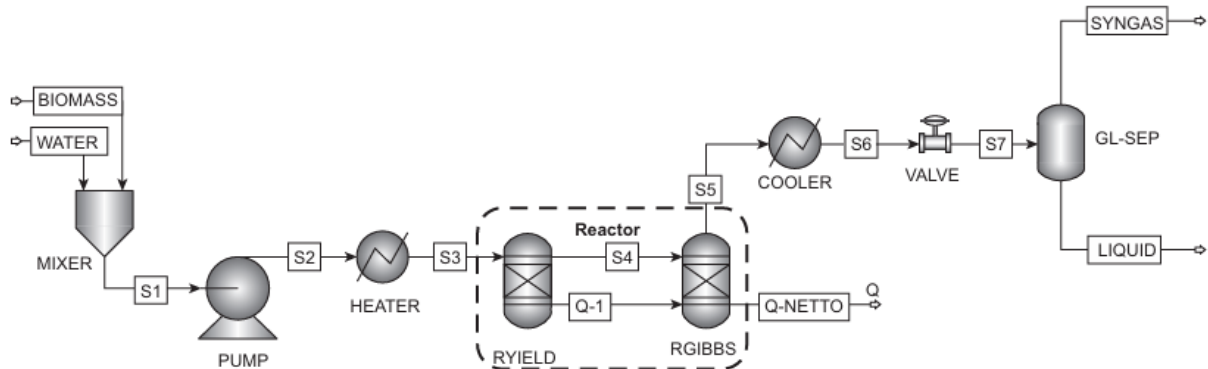
Apesar de suas vantagens, quando aplicados a sistemas reais que fogem às considerações de mistura perfeita, tempos de residência suficientemente longos e ausência de limitações cinéticas, têm sido amplamente adotadas abordagens de correção, em função da tendência desses modelos em superestimar as frações de H₂ e CO e subestimar a formação de CO₂, CH₄, alcatrões e carvão não convertido. De modo geral, tais modificações concentram-se em duas abordagens principais: a incorporação de relações empíricas ajustadas a dados experimentais e a restrição parcial do equilíbrio por meio da utilização de uma temperatura de equilíbrio distinta da temperatura real do reator (Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Gagliano et al., 2016; Salisu et al., 2023).

A consideração da diferença entre a temperatura de equilíbrio químico e a temperatura real do reator ($\Delta T_{\text{approach}} \neq 0$) permite deslocar o equilíbrio das reações selecionadas no sentido dos reagentes ou dos produtos, possibilitando a adequação da composição do gás de síntese às condições de não equilíbrio observadas em gaseificadores reais (Abdelrahim et al., 2020).

A Figura 10 ilustra um exemplo típico de aplicação de um modelo de equilíbrio termodinâmico para a gaseificação de biomassa implementado em simulador de processos. Nesse esquema, a biomassa e a água são inicialmente misturadas, pressurizadas e aquecidas, sendo em seguida encaminhadas a um reator do tipo RYield, no qual o combustível sólido é decomposto em seus constituintes elementares ou pseudoespécies. Posteriormente, a corrente resultante alimenta um reator RGibbs, responsável pelo cálculo da composição do gás de síntese em equilíbrio químico por meio da minimização da energia livre de Gibbs, considerando

balanços de massa e energia. As etapas subsequentes de resfriamento, expansão e separação gás-líquido permitem a obtenção das correntes finais de syngas e condensados, evidenciando a integração entre a modelagem termodinâmica do reator e a simulação do fluxograma global do processo.

Figura 10 – Sistema de gaseificação por modelo de equilíbrio.



Fonte: (Hantoko et al., 2019).

3.3.4. Redes Neurais Artificiais

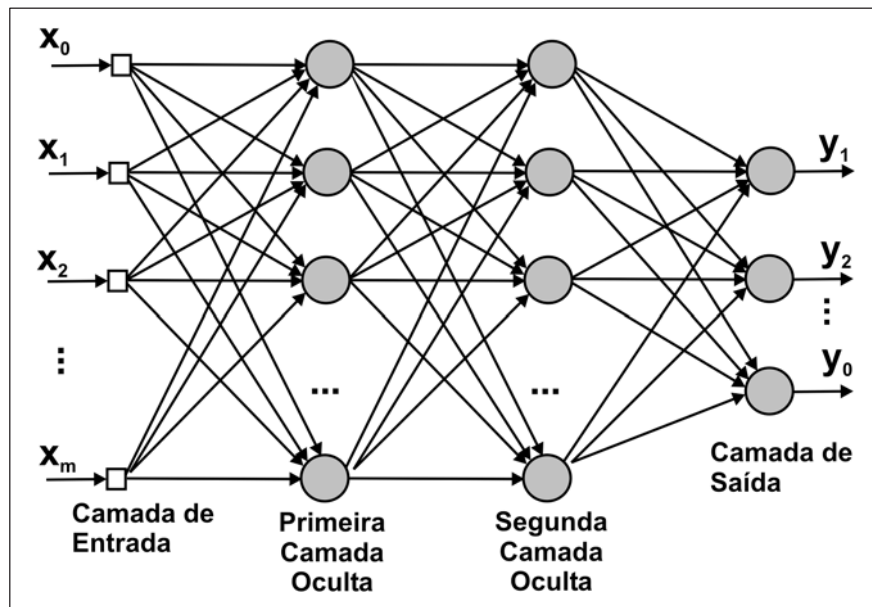
As redes neurais artificiais (ANN) constituem uma abordagem de modelagem amplamente empregada na análise e na previsão de processos de gaseificação, ao mesmo tempo em que integram o conjunto de técnicas de aprendizado de máquina que têm ganhado destaque nessa área de estudo. A atratividade dessa abordagem está associada à sua capacidade de representar relações complexas e fortemente não lineares entre variáveis operacionais, propriedades do combustível e respostas do processo, como composição do gás de síntese, rendimento e eficiência energética, sem a necessidade de descrever explicitamente os fenômenos físico-químicos envolvidos (Cheng et al., 2023; Halba; Thengane; Arora, 2023; Salisu et al., 2025).

O funcionamento das redes neurais artificiais baseia-se na interconexão de unidades de processamento que recebem variáveis de entrada, combinam essas informações por meio de pesos ajustáveis e as transformam em respostas de saída a partir de funções não lineares. Durante a etapa de treinamento, a rede ajusta iterativamente seus parâmetros internos com base em conjuntos de dados experimentais ou simulados, buscando minimizar o erro entre valores previstos e observados. Esse mecanismo permite que as ANN identifiquem padrões e relações complexas entre condições operacionais e respostas do processo de gaseificação, mesmo quando há forte não linearidade e interação entre variáveis (Ascher; Sloan et al., 2022; Cheng

et al., 2023; George; Arun; Muraleedharan, 2018; Halba; Thengane; Arora, 2023; Serrano; Golpour; Sánchez-Delgado, 2020).

Na Figura 11, por exemplo, x_0, x_1, \dots, x_m representam as variáveis de entrada do modelo. Num processo de gaseificação, por exemplo, podem ser associadas a parâmetros operacionais do processo e às propriedades do combustível, tais como razão agente gaseificante/combustível, temperatura, composição elementar ou teor de umidade. Essas variáveis são processadas por neurônios organizados em camadas ocultas, nos quais combinações lineares ponderadas por pesos ajustáveis, acrescidas de termos de viés, são transformadas por funções de ativação não lineares. As saídas do modelo, indicadas por y_1, y_2, y_0 correspondem às respostas do processo. Para um processo de gaseificação, por exemplo, poderiam ser a composição do gás de síntese (frações de H_2, CO, CO_2 e CH_4), rendimento energético ou eficiência do sistema.

Figura 11 – Modelo de uma Rede Neural



Fonte: (Barbosa; Freitas; Neves, 2005).

Além disso, essas redes têm demonstrado capacidade de fornecer previsões mais precisas utilizando o mesmo número, ou até um número reduzido, de variáveis de entrada quando comparadas a abordagens tradicionais de modelagem, como os modelos de equilíbrio, o que reforça sua atratividade em estudos de previsão e análise de desempenho (Baruah; Baruah, 2014; Salisu et al., 2025).

3.4. Aprendizado de Máquina

Além das redes neurais artificiais, outras técnicas como máquinas de vetores de suporte (SVM), métodos baseados em árvores de decisão, regressão por processos gaussianos (GPR) e algoritmos de aprendizado em conjunto, como o eXtreme Gradient Boosting (XGBoost), integram o conjunto de ferramentas associadas ao aprendizado de máquina (Li, Jie et al., 2023). De modo geral, essas abordagens têm sido progressivamente incorporadas aos estudos de gaseificação por se fundamentarem em métodos matemáticos e estatísticos aplicados à análise de dados existentes, permitindo melhorar a acurácia das previsões e identificar padrões complexos em conjuntos de dados experimentais ou simulados (Gharibi; Babazadeh; Hasanzadeh, 2024; Ozbas et al., 2019). Em particular, o XGBoost tem se consolidado como uma das técnicas mais utilizadas em múltiplas aplicações de modelagem preditiva, destacando-se pela boa capacidade de aproximação e elevado desempenho mesmo em problemas complexos (Paramasivam; Alruqi; Ağbulut, 2025).

Apesar dessas vantagens, a aplicação de métodos de aprendizado de máquina é fortemente dependente da disponibilidade e da qualidade dos dados utilizados no treinamento, o que pode limitar a robustez e a capacidade de generalização dos modelos desenvolvidos (Tian et al., 2025). Adicionalmente, a maioria dessas técnicas apresenta natureza de “caixa-preta”, dificultando a interpretação física das relações entre variáveis de entrada e respostas do processo. Nesse contexto, abordagens de aprendizado de máquina explicável têm ganhado relevância, destacando-se o uso de *SHapley Additive Explanations* (SHAP), que permitem quantificar a contribuição individual das variáveis e conferir maior transparência às previsões dos modelos (Paramasivam; Alruqi; Ağbulut, 2025).

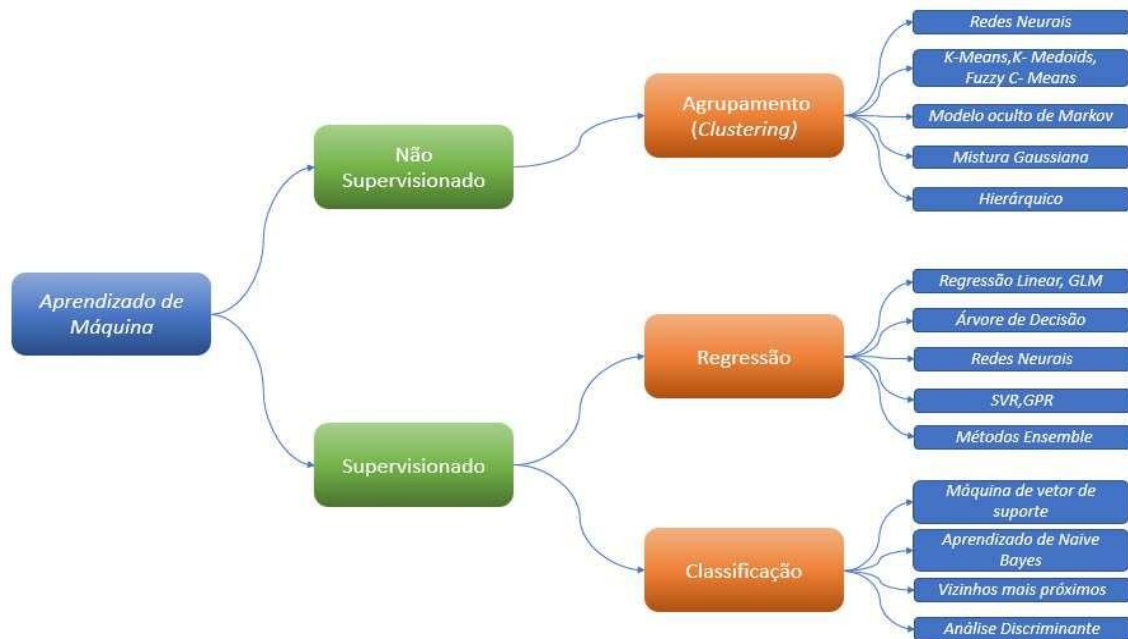
A escolha adequada do algoritmo e da base de dados é um dos aspectos mais críticos no desenvolvimento de modelos de aprendizado de máquina aplicados a processos de gaseificação. Algoritmos distintos apresentam capacidades diferentes para representar relações não lineares, lidar com variáveis correlacionadas e generalizar resultados para condições operacionais não observadas durante o treinamento. Quando a escolha do método não é compatível com a natureza do problema ou com a estrutura dos dados disponíveis, o modelo pode gerar previsões pouco confiáveis, mesmo apresentando bom desempenho aparente nos dados de treinamento (Géron, 2017; Shalev-Shwartz; Ben-David, 2014).

A qualidade da base de dados exerce papel igualmente central nesse processo. Dados insuficientes, mal distribuídos ou contendo informações irrelevantes tendem a introduzir ruído e vieses, comprometendo a capacidade preditiva dos modelos. Além disso, práticas inadequadas de treinamento podem resultar em overfitting, quando o modelo se ajusta excessivamente aos

dados de treino e perde capacidade de generalização, ou em underfitting, quando o modelo é demasiado simples para capturar os padrões subjacentes do sistema. Estratégias como a divisão dos dados em conjuntos de treinamento, validação e teste são amplamente recomendadas para avaliar a robustez do modelo e reduzir esses efeitos indesejáveis (Aquib Ansari; Singh, 2022; Géron, 2017; Hawkins, 2004).

Do ponto de vista metodológico, os algoritmos de aprendizado de máquina podem ser classificados em diferentes categorias, sendo a distinção entre aprendizado supervisionado e não supervisionado uma das mais utilizadas (Figura 12). Outras classificações incluem abordagens online ou em batelada, bem como métodos ativos ou passivos, dependendo da forma como o algoritmo interage com os dados ao longo do processo de aprendizagem. Essas classificações auxiliam na seleção da técnica mais adequada para cada tipo de problema e disponibilidade de dados (Aquib Ansari; Singh, 2022; Shalev-Shwartz; Ben-David, 2014). A Figura 12 ilustra essa classificação de forma esquemática, destacando a divisão entre aprendizado supervisionado e não supervisionado, bem como os principais tipos de tarefas associadas a cada categoria, como regressão, classificação e agrupamento, e exemplos representativos de algoritmos amplamente empregados em aplicações de engenharia.

Figura 12 – Tipos de Aprendizado de Máquina.



Fonte: (Lima Júnior, 2019).

No aprendizado supervisionado, o algoritmo é treinado a partir de exemplos rotulados, nos quais as variáveis de entrada e as saídas correspondentes são conhecidas. O objetivo é aprender

uma função capaz de prever corretamente a saída para novos dados não observados, sendo amplamente aplicado em problemas de regressão e classificação. Métodos como máquinas de vetores de suporte, árvores de decisão, regressões avançadas e redes neurais artificiais são comumente empregados nesse contexto, inclusive em aplicações energéticas e de conversão termoquímica (Monard; Baranauskas, 2003a; Usama et al., 2019; Wuest et al., 2016).

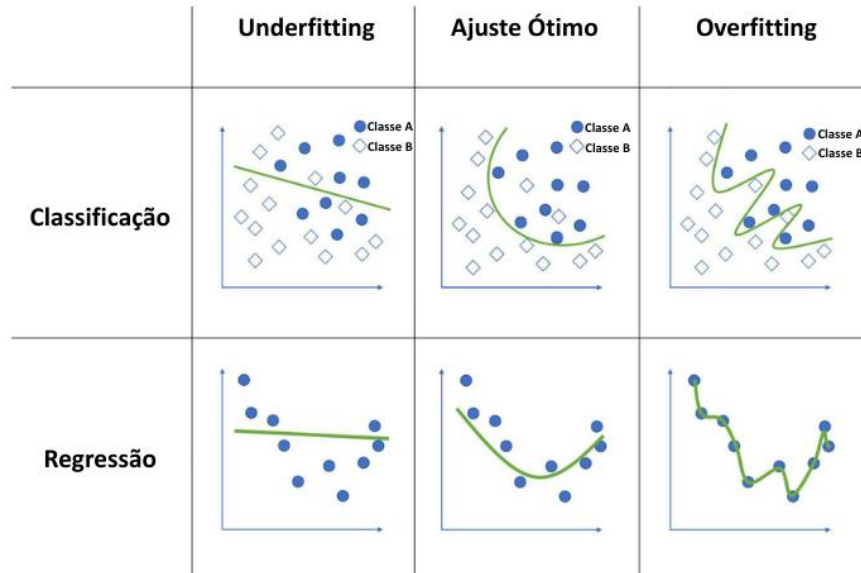
Em contraste, o aprendizado não supervisionado não utiliza rótulos associados aos dados. Nesse caso, os algoritmos buscam identificar padrões internos, similaridades ou estruturas latentes, como agrupamentos ou reduções de dimensionalidade. Essas abordagens são particularmente úteis para análise exploratória, identificação de regimes operacionais e pré-processamento de dados, servindo frequentemente como etapa complementar ao aprendizado supervisionado (Monard; Baranauskas, 2003a; Usama et al., 2019; Wuest et al., 2016).

A Figura 13 ilustra, de forma conceitual, os fenômenos de *underfitting*, ajuste ótimo e *overfitting* em problemas de classificação e regressão. No caso de *underfitting*, o modelo apresenta baixa complexidade e é incapaz de capturar os padrões fundamentais dos dados, resultando em erros elevados tanto nos conjuntos de treinamento quanto de validação. Em contraste, o *overfitting* ocorre quando o modelo se ajusta excessivamente aos dados de treino, aprendendo ruídos e flutuações específicas, o que se reflete em baixo erro de treinamento, mas desempenho degradado em dados não vistos. O ajuste ótimo corresponde a um equilíbrio entre viés e variância, no qual o modelo alcança boa capacidade de generalização. As curvas de erro de treinamento e validação apresentadas na figura evidenciam esses comportamentos e reforçam a importância de estratégias de validação adequadas e controle da complexidade do modelo no desenvolvimento de aplicações robustas de aprendizado de máquina (Solanes; Radua, 2022).

3.4.1. Modelos baseados em Árvore de Decisão

Os algoritmos baseados em árvores de decisão constituem uma classe amplamente utilizada de métodos supervisionados de aprendizado de máquina, aplicáveis tanto a problemas de classificação quanto de regressão. Esses algoritmos constroem modelos preditivos por meio de uma estrutura hierárquica em forma de árvore, na qual os nós internos representam testes sobre atributos, os ramos correspondem aos resultados desses testes e as folhas indicam a saída final do modelo, seja uma classe ou um valor contínuo. Devido à sua simplicidade conceitual, interpretabilidade e capacidade de lidar com dados numéricos e categóricos, as árvores de decisão são frequentemente empregadas em diferentes áreas do conhecimento (Aquib Ansari; Singh, 2022; Jena; Dehuri, 2020; Ozbas et al., 2019).

Figura 13 – Tipos de ajuste do modelo.



Fonte: Adaptado de (Solanes; Radua, 2022).

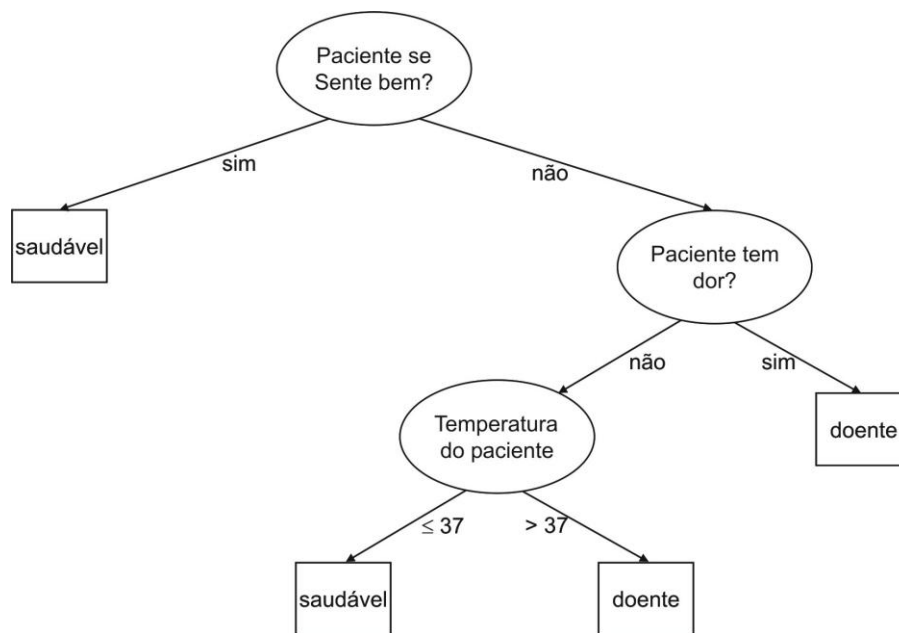
A Figura 14 apresenta um exemplo esquemático de uma árvore de decisão aplicada a um problema de classificação, ilustrando a lógica hierárquica que caracteriza esse tipo de modelo. Nesse exemplo, cada nó interno representa um teste sobre uma variável de entrada — como a presença de dor ou a temperatura corporal — enquanto os ramos correspondem aos possíveis resultados desses testes. As folhas da árvore indicam a decisão final do modelo, associada a uma classe específica. Essa representação evidencia como regras de decisão simples, interpretáveis e sequenciais podem ser combinadas para formar um modelo preditivo capaz de capturar relações não lineares entre variáveis, característica que torna as árvores de decisão particularmente atrativas em aplicações nas quais a transparência e a interpretabilidade do modelo são desejáveis.

No processo de construção da árvore, o conjunto de dados é particionado recursivamente em regiões cada vez mais homogêneas, a partir da avaliação de critérios de divisão baseados na redução da impureza ou do erro. Em tarefas de classificação, utilizam-se métricas como entropia ou ganho de informação, enquanto em problemas de regressão a divisão é orientada pela minimização da variância ou do erro quadrático médio. Embora essa estratégia permita capturar relações não lineares entre variáveis de forma eficiente, árvores de decisão individuais são sensíveis aos dados de treinamento e podem apresentar alta variância, resultando em overfitting. Técnicas como poda (pruning) e ajuste de hiperparâmetros são, portanto,

fundamentais para melhorar a capacidade de generalização desses modelos (Che; Rasheed; Tao, 2011; Cheng et al., 2023; Hastie; Tibshirani; Friedman, 2009).

Com o objetivo de superar essas limitações, foram desenvolvidos métodos de ensemble baseados em árvores de decisão, como Bagging, Random Forest e técnicas de Boosting. Esses métodos combinam múltiplas árvores treinadas a partir de diferentes subconjuntos dos dados ou com pesos adaptativos, resultando em modelos mais robustos e com melhor desempenho preditivo. O *Random Forest*, por exemplo, reduz a variância do modelo ao combinar diversas árvores independentes treinadas com amostragem aleatória dos dados e dos atributos, enquanto algoritmos como *AdaBoost*, *Gradient Boosting* e *XGBoost* utilizam estratégias sequenciais para corrigir erros cometidos por modelos anteriores (Che; Rasheed; Tao, 2011; Géron, 2017; Wuest et al., 2016; Xue et al., 2024).

Figura 14 - Exemplo de uma Árvore de Decisão para diagnóstico de um paciente.



Fonte: (Monard; Baranauskas, 2003b).

No estudo de Cheng et al. (2023), ao compararem quatro algoritmos de aprendizado de máquina para prever produtos da pirólise de plásticos, o modelo de Árvore de Decisão demonstrou desempenho preditivo superior ao da Rede Neural Artificial. De forma semelhante, Efremov et al. (2024) ao avaliarem cinco algoritmos (sendo três baseados em árvores) para prever o rendimento e poder calorífico do gás de síntese na co-gasificação, constataram que o XGBoost superou todos os demais modelos testados. Esses estudos demonstram que métodos

baseados em árvores de decisão representam uma alternativa robusta, eficiente e computacionalmente viável para a modelagem de processos termoquímicos.

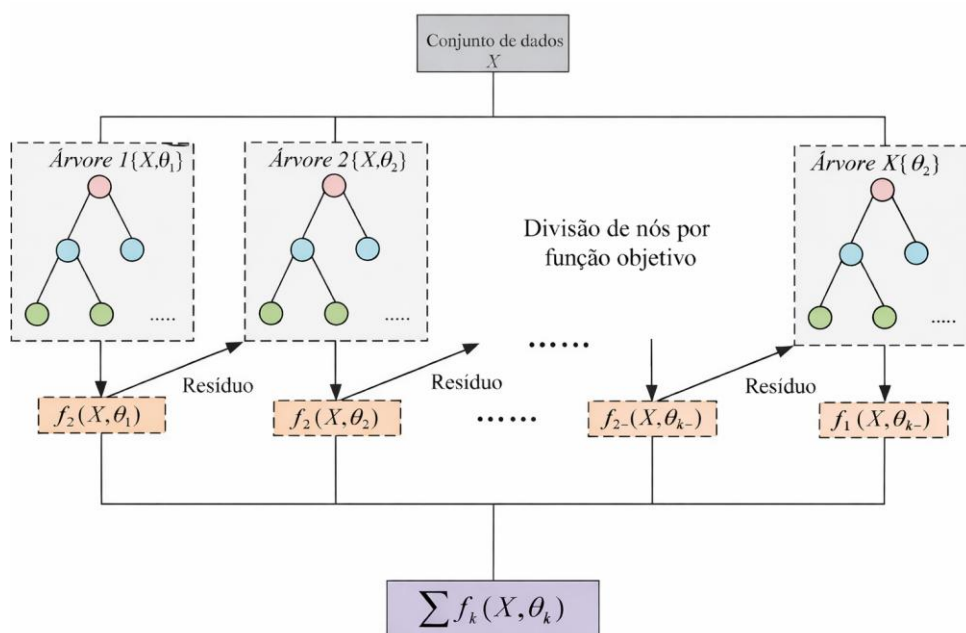
3.4.2. XGBoost

O *Extreme Gradient Boosting* (XGBoost) é um algoritmo de aprendizado de máquina que combina múltiplas árvores de decisão de forma sequencial para construir modelos preditivos robustos. A cada iteração, uma nova árvore é ajustada para corrigir os erros residuais das árvores previamente construídas, permitindo capturar relações não lineares e interações complexas entre variáveis. Sua elevada eficiência computacional, aliada à capacidade de lidar com grandes volumes de dados estruturados, valores ausentes e alta dimensionalidade, fez do XGBoost uma das técnicas mais utilizadas em problemas de regressão e classificação em diferentes áreas da engenharia e das ciências aplicadas (Chen, T.; Guestrin, 2016; Efremov et al., 2024; Paramasivam; Alruqi; Ağbulut, 2025).

A Figura 15 apresenta uma representação esquemática do funcionamento do algoritmo XGBoost, evidenciando o processo sequencial de construção das árvores de decisão característico dos métodos de boosting. A partir do conjunto de dados inicial, cada árvore é ajustada com base nos resíduos (erros) gerados pelo modelo até então, sendo otimizada em relação a uma função objetivo que combina o erro de predição e termos explícitos de regularização. As saídas individuais das árvores, representadas por funções $f_k(X, \theta_k)$, são posteriormente agregadas por soma ponderada para compor a predição final do modelo. Essa estrutura evidencia como o XGBoost realiza uma correção iterativa dos erros, permitindo refinar progressivamente as previsões e capturar relações não lineares complexas, ao mesmo tempo em que controla a complexidade do modelo por meio da regularização.

Uma característica central do XGBoost é a incorporação explícita de regularização na função objetivo, o que contribui para reduzir o *overfitting* e melhorar a generalização do modelo. Os principais hiperparâmetros responsáveis por esse controle incluem *max_depth*, que limita a profundidade máxima das árvores; *gamma*, que define a redução mínima da função de perda necessária para realizar uma divisão; e os termos de regularização *reg_alpha* e *reg_lambda*, correspondentes às penalizações L1 e L2 aplicadas aos pesos das folhas. Esses parâmetros atuam diretamente na complexidade estrutural do modelo, favorecendo árvores mais simples e estáveis, especialmente em conjuntos de dados com ruído ou número limitado de amostras (Bentéjac; Csörgő; Martínez-Muñoz, 2019; Chen, T.; Guestrin, 2016; Wade; Glynn, 2020).

Figura 15 – Representação esquemática do modelo XGBoost



Fonte: Adaptado de (Guo, R. et al., 2020).

O desempenho do modelo também é fortemente influenciado por hiperparâmetros associados ao processo de aprendizado e à aleatoriedade introduzida no treinamento. O número de árvores ($n_estimators$) determina quantos modelos base compõem o conjunto, enquanto a $learning_rate$ controla a contribuição de cada árvore individual na atualização do modelo, estabelecendo um compromisso entre velocidade de aprendizado e capacidade de generalização. Já os parâmetros $subsample$ e $colsample_bytree$ definem, respectivamente, a fração de amostras e de variáveis utilizadas na construção de cada árvore, introduzindo aleatoriedade que reduz a variância do modelo e melhora sua robustez. O ajuste adequado e conjunto desses hiperparâmetros é essencial para explorar plenamente a capacidade preditiva do XGBoost, garantindo eficiência e estabilidade em aplicações práticas (Chen, T.; Guestrin, 2016; Wade; Glynn, 2020).

4. METODOLOGIA

4.1. Matérias-primas e Condições Operacionais

Para as simulações de gaseificação, definiu-se um conjunto diversificado de matérias-primas, composto por cinco tipos de plásticos — polietileno (PE), polipropileno (PP), poliestireno (PS), politereftalato de etileno (PET) e poliuretano (PU) — selecionados por sua contribuição significativa para o fluxo global de resíduos plásticos (2022). Além disso, foram

consideradas trinta e cinco amostras de biomassa de diferentes origens, de modo a representar uma ampla faixa de composições imediatas e elementares, abrangendo resíduos agrícolas e industriais relevantes ao contexto brasileiro.

Os dados da análise imediata para carbono fixo (CF), teor de umidade (U), matéria volátil (MV) e cinzas (CZ) foram normalizados para um total de 100 %, e o mesmo procedimento foi aplicado à análise elementar, que incluiu carbono (C), hidrogênio (H), oxigênio (O), nitrogênio (N) e enxofre (S), todos expressos em base mássica como apresentado nas Tabela 4 e Tabela 5.

Os principais parâmetros operacionais considerados foram a razão de equivalência (ER) e a temperatura (T). A ER foi definida como a razão entre o ar fornecido e o ar estequiométrico necessário para a combustão parcial da matéria-prima, e os intervalos desses parâmetros foram estabelecidos com base em dados da literatura (Ajorloo et al., 2022b; Gao, Y. et al., 2023; Serrano; Golpour; Sánchez-Delgado, 2020; Tian et al., 2025).

Um total de 3.000 pontos amostrais foi gerado utilizando Amostragem por Hipercubo Latino (HCL) para garantir uma distribuição uniforme ao longo do espaço experimental e evitar aglomerações ou lacunas. A amostragem considerou T, ER e as proporções de plástico atribuídas a cada par biomassa-plástico previamente definido, determinando assim as propriedades fixas do conjunto de dados (Tian et al., 2025). A Tabela 3 apresenta os limites de entrada utilizados no simulador.

Tabela 3 – Parâmetros de entrada e faixas operacionais utilizadas nas simulações em PRO/II para a co-gaseificação biomassa-plástico.

Parâmetro	Mínimo	Máximo	Média	Parâmetro	Mínimo	Máximo	Média
U (%)	0,00	33,00	8,45	C (%)	33,76	90,20	52,11
CF (%)	0,00	27,34	12,80	H (%)	3,10	13,85	6,59
MV (%)	51,86	99,98	73,51	O (%)	0,00	55,23	39,17
CZ (%)	0,00	21,22	5,22	N (%)	0,59	9,95	1,93
ER (–)	0,25	0,45	0,35	S (%)	0,00	1,75	0,20
% Plástico	0,00	100,00	50,00	T (°C)	650,00	1000,00	825,00

Fonte: O autor (2025).

Tabela 4 –Dados de análise imediata e elementar dos plásticos.

Nome	U (%)	CF (%)	MV (%)	CZ (%)	C (%)	H (%)	O (%)	N (%)	S (%)	Ref.
Polietileno (PE)	0,0000	0,0200	99,9800	0,0000	85,9800	11,2000	2,4400	0,2100	0,1700	(Chen, S. et al., 2015)
Polipropileno (PP)	0,0000	0,5000	99,5000	0,0000	85,5600	13,8500	0,5900	0,0000	0,0000	(Li, Jinhua et al., 2023)
Poliestireno (PS)	0,0000	0,0000	99,8000	0,2000	90,2004	8,4970	1,3026	0,0000	0,0000	(Encinar; González, 2008)
Politereftalato de Etileno (PET)	0,2100	5,1000	94,6900	0,0000	62,1699	4,3336	33,4659	0,0306	0,0000	(Choi; Jeong; Kim, 2021)
Poliuretano (PU)	0,5999	1,4899	97,9102	0,0000	65,6900	8,2800	21,6600	4,2000	0,1700	(Jeong et al., 2022)

Fonte: O autor (2025).

Tabela 5 – Dados de análise imediata e elementar das biomassas.

Nome	U (%)	CF (%)	MV (%)	CZ (%)	C (%)	H (%)	O (%)	N (%)	S (%)	Ref.
Casca de Café	9,3382	12,9646	75,4306	2,2665	42,5662	6,2118	51,2220	0,0000	0,0000	(Ayorloo et al., 2022b)
Palha de Arroz	8,5048	10,1966	76,0860	5,2126	50,7479	6,0897	42,9487	0,2137	0,0000	(Ayorloo et al., 2022b)
Madeira de Seringueira	6,9767	14,8837	73,3023	4,8372	50,9567	6,5458	42,2961	0,2014	0,0000	(Jayah et al., 2003)
Sabugo de Milho	13,7931	16,5517	69,0517	0,6034	47,6000	6,1000	45,7800	0,5200	0,0000	(Biagini; Barontini; Tognotti, 2016)
Chlorella Vulgaris	9,1735	16,1853	72,7157	1,9255	52,1000	6,5000	30,9000	9,9500	0,5500	(Tian et al., 2025)
Bagaço de Azeitona	7,4074	9,6296	78,0556	4,9074	55,9763	6,2116	37,2186	0,4912	0,1023	(Tian et al., 2025)
Casca de Semente de Mamona	3,2695	19,2300	75,4885	2,0120	44,2300	5,4900	50,0600	0,2200	0,0000	(Neme; Gonfa; Masi, 2022)

Casca de Durião	4,3978	16,8816	72,0140	6,7066	60,3100	8,4700	28,0600	3,0600	0,1000	(Neme; Gonfa; Masi, 2022)
Caroço de Pêssego	12,3263	10,6068	66,3001	10,7668	37,3600	5,6000	55,2300	1,5900	0,2200	(Zinla et al., 2021)
Casca de Vagem de Cacau	5,5333	22,3134	69,6318	2,5215	40,7241	6,9607	48,0748	3,9404	0,3000	(García et al., 2012)
Caroço de Ameixa	7,3559	3,7058	67,7228	21,2155	48,2200	6,6000	44,1400	0,8700	0,1700	(García et al., 2012)
Caroço de Nectarina	8,3662	19,4264	70,5581	1,6494	48,5700	6,2200	44,4800	0,5000	0,2300	(García et al., 2012)
Caroço de Cereja	7,5786	21,1645	70,2403	1,0166	48,5700	6,2100	44,6000	0,4300	0,1900	(García et al., 2012)
Pellets de Beterraba	7,0373	13,1356	79,0183	0,8088	38,9400	5,2300	54,1300	1,1900	0,5100	(García et al., 2012)
Casca de Cacau	11,1111	13,3333	67,5556	8,0000	43,2500	5,8900	47,9300	2,6400	0,2900	(García et al., 2012)
Semente de Canola	8,0882	19,3382	63,4191	9,1544	44,2000	6,5000	43,9000	5,4000	0,0000	(Haykiri-Acma; Yaman, 2009)
Casca de Coco	14,3000	4,9000	77,0000	3,8000	46,0146	6,0406	47,7548	0,1900	0,0000	(Vitidsant; Chaiprasert, 2009)
Talos de Algodão	10,5311	13,1013	57,9658	18,4018	46,2435	6,7712	44,3467	1,3458	1,2928	(Samadi; Ghobadian; Nosrati, 2020)
Talos de Sorgo	10,0153	21,3714	63,5472	5,0661	45,7055	6,8542	44,3939	1,3010	1,7453	(Samadi; Ghobadian; Nosrati, 2020)
Caule de Algodão	14,5591	22,3428	58,4330	4,6651	48,7472	6,0364	43,8497	1,1390	0,2278	(Guo, B. et al., 2001)

Casca de Semente de Girassol	10,5000	16,7000	71,8000	1,0000	76,0000	3,1000	19,4000	1,5000	0,0000	(Casoni; Gutierrez; Volpe, 2019)
Casca de Arroz	7,9000	15,5000	72,3000	4,3000	49,0679	3,7921	46,4249	0,6256	0,0894	(Loha; Chattopadhyay; Chatterjee, 2011)
Spirulina Sp.	5,7493	17,0594	75,2121	1,9793	39,2600	6,1100	47,4100	6,6500	0,5700	(Chaiwong et al., 2013)
Casca Macia de Pistache	9,9500	14,9900	55,5400	19,5200	45,5300	5,5600	47,1700	1,7400	0,0000	(Yin C. Y., 2011)
DDGS	8,6145	12,3152	66,7550	12,3152	52,2734	7,1689	34,7727	4,9839	0,8012	(Yin C. Y., 2011)
Semente de Açaí	9,2500	8,6900	67,8500	14,2100	47,6476	6,4064	45,1652	0,7808	0,0000	(Rambo; Schmidt; Ferreira, 2015)
Talos de Banana	9,2547	11,7421	75,4458	3,5574	38,9610	5,4346	54,7852	0,8192	0,0000	(Rambo; Schmidt; Ferreira, 2015)
Capim-Elefante	11,7195	16,3384	71,3327	0,6094	41,9204	5,2001	50,8534	2,0262	0,0000	(Rambo; Schmidt; Ferreira, 2015)
Casca de Soja	11,3368	8,9900	72,4524	7,2209	45,0445	6,7007	45,3545	2,9003	0,0000	(Rambo; Schmidt; Ferreira, 2015)
Palha de Cana-De-Açúcar	7,4716	9,9714	70,5654	11,9915	43,0754	5,9601	50,7586	0,2059	0,0000	(Jorapur; Rajvanshi, 1995)
Casca de Avelã	8,5623	6,8028	83,5623	1,0726	50,8014	5,2039	42,5948	1,3999	0,0000	(Neves et al., 2011)
Torta de Soja	33,0000	9,9700	51,8600	5,1700	55,8918	6,5736	28,2442	9,2904	0,0000	(Neves et al., 2011)

Semente de Cártamo	9,4403	27,3403	61,8128	1,4066	49,5052	6,8969	40,5979	3,0000	0,0000	(Neves et al., 2011)
Bagaço de Sorgo	9,0335	14,2067	70,6881	6,0717	68,3273	8,6435	22,8091	0,0800	0,1401	(Miranda; Cardoso; Ataíde, 2012)
Casca de Algodão	5,9974	13,1604	78,0222	2,8201	50,4004	8,3982	39,7998	1,4016	0,0000	(Erdem; Gündüz Han; Midilli, 2024)

Fonte: O autor (2025).

4.2. Simulação de Processo (PRO/II)

O processo de co-gaseificação foi simulado utilizando o simulador de processos em regime estacionário AVEVA PRO/II™, conforme esquematizado na Figura 16. Embora o PRO/II seja aplicado com maior frequência a sistemas petroquímicos ou de refino, sua estrutura modular permite representar de forma confiável as etapas físico-químicas envolvidas na gaseificação. O modelo incorporou balanços rigorosos de massa e energia, combinados com módulos de reação configurados por meio de blocos FORTRAN Calculator. Essa abordagem permitiu impor restrições estequiométricas baseadas em elementos e realizar ajustes empíricos de temperatura (Larkin et al., 2016; Lee et al., 2014). Neste trabalho, ela foi empregada para construir uma estrutura de modelagem de processos em múltiplos estágios, composta por secagem, pirólise, gaseificação e uma etapa de correção por equilíbrio restrito.

Para a modelagem do processo de gaseificação, foram adotadas as seguintes premissas (Ayorloo et al., 2022a; Aydin; Yucel; Sadikoglu, 2017; Erdem; Gündüz Han; Midilli, 2024; Ranjan et al., 2023):

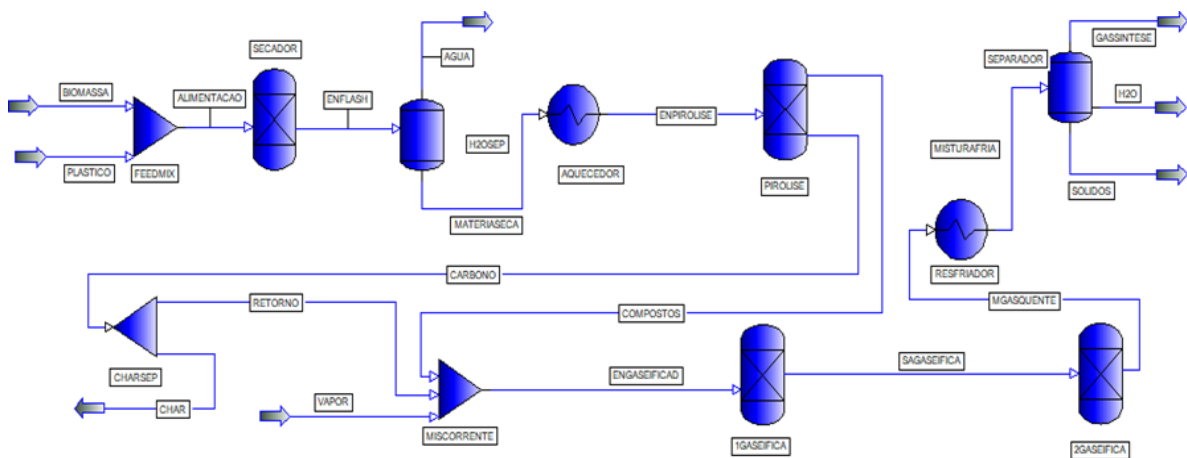
- O processo foi modelado em regime estacionário e sob condições isotérmicas.
- Todos os componentes seguem a equação de estado de Peng–Robinson (PR).
- Perdas de pressão e de calor ao longo do processo foram desprezadas.
- Biomassa e plásticos foram introduzidos como compostos não convencionais, definidos a partir das análises imediata e elementar, com vazão total de alimentação fixa em 100 kg h⁻¹.
- Durante a pirólise, esses compostos não convencionais foram convertidos em H₂, O₂, C, N₂ e S, de acordo com suas composições elementares.
- A gaseificação considerou como principais espécies gasosas H₂, CO₂, CO, CH₄, N₂, H₂O, NH₃ e H₂S.
- As cinzas foram tratadas como inertes, o carbono residual como carbono puro

proporcional ao teor de CF, e a formação de alcatrão foi negligenciada.

- O gás de síntese final foi obtido em base seca, contendo H_2 , CO_2 , CO , CH_4 e N_2 .

O processo de gaseificação foi modelado em quatro etapas principais: secagem, pirólise, gaseificação e purificação. O processo se inicia com a secagem da alimentação, na qual parte das cinzas já é incorporada, realizada em um reator de conversão (RConv) a $200\text{ }^\circ\text{C}$ para remover completamente a umidade. Em seguida, a alimentação é aquecida até a temperatura de operação do gaseificador e enviada ao pirólisador, também modelado como um reator de conversão. Nessa etapa, ocorre a decomposição térmica, com conversão completa dos compostos não convencionais em compostos convencionais. O carbono gerado sai em uma corrente separada para representar a formação de coque, em proporção ao teor de CF. Um bloco Calculator programado em FORTRAN controlou essas saídas, ajustando as vazões de acordo com as propriedades da matéria-prima.

Figura 16 – Diagrama de processo no AVEVA PRO/II da co-gaseificação biomassa-plástico (secagem, pirólise, gaseificação e equilíbrio final)



Fonte: O autor (2025).

O simulador forneceu as frações molares de H_2 , CO , CO_2 , CH_4 e N_2 . A partir dessas saídas, o rendimento de gás de síntese (GY), o poder calorífico inferior (LHV) e a razão H_2/CO foram calculados usando as correlações representadas pelas Eqs. (5)–(7):

$$GY \left(\frac{Nm^3}{Kg} \right) = \frac{\text{vazão volumétrica de gás produzido} \left(\frac{Nm^3}{h} \right)}{\text{vazão mássica de alimentação} \left(\frac{Kg}{h} \right)} \quad (5)$$

$$LHV \left(\frac{MJ}{Nm^3} \right) = 0,108 \cdot H_2(\%) + 0,126 \cdot CO(\%) + 0,358 \cdot CH_4(\%) \quad (6)$$

$$\frac{H_2}{CO} = \frac{\text{fração molar de } H_2 \text{ em base seca } \left(\frac{\text{mol}}{\text{mol}}\right)}{\text{fração molar de } CO \text{ em base seca } \left(\frac{\text{mol}}{\text{mol}}\right)} \quad (7)$$

4.3. Variáveis-alvo e Métricas Estatísticas

As variáveis-alvo para o aprendizado de máquina foram H_2 , CO , CO_2 , GY , LHV e H_2/CO . Para avaliar o desempenho e a confiabilidade do modelo de ML e validar os dados simulados, foram aplicadas métricas estatísticas clássicas para problemas de regressão.

O coeficiente de determinação (R^2), Eq. (8), mede a qualidade do ajuste entre valores previstos e observados, sendo ideal quando próximo de 1. O erro quadrático médio (RMSE), Eq. (9), quantifica o desvio entre os valores previstos e observados, atribuindo maior peso a erros de maior magnitude, enquanto o erro absoluto médio (MAE), Eq. (10), estima a diferença absoluta média entre valores simulados e previstos. Nas Eqs. (8), (9) e (10), os símbolos y_i^{exp} , y_i^{pred} e \bar{y}^{exp} representam, respectivamente, os valores experimentais, previstos e a média experimental para cada instância i , considerando o número total de observações m .

Para RMSE e MAE, valores próximos de zero indicam boa concordância. O RMSE foi utilizado para comparar a composição do gás de síntese prevista pelo simulador com dados experimentais, enquanto, para o modelo preditivo de ML, o R^2 foi adotado como métrica principal de desempenho, com RMSE e MAE empregados como indicadores complementares.

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - y_i^{pred})^2}{\sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - \bar{y}^{exp})^2} \quad (8)$$

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (y_i^{exp} - y_i^{pred})^2} \quad (9)$$

$$MAE = \frac{\sum_{i=1}^n |y_i^{exp} - y_i^{pred}|}{m} \quad (10)$$

4.4. Modelo de Aprendizado de Máquina

Árvores de decisão com gradient boosting foram implementadas utilizando o algoritmo XGBoost para prever a composição do gás de síntese e indicadores-chave de desempenho a partir do conjunto de dados de simulação. O XGBoost foi selecionado por sua alta precisão preditiva, regularização embutida e eficiência computacional (Chen, T.; Guestrin, 2016;

Devasahayam; Albijanic, 2024; Elmaz; Yücel; Mutlu, 2020; Paramasivam; Alruqi; Ağbulut, 2025; Wade, 2020). O desenvolvimento do modelo foi realizado em Python (Google Colab) com as bibliotecas NumPy, scikit-learn e Optuna. Os hiperparâmetros otimizados incluíram `n_estimators`, `learning_rate`, `max_depth`, `subsample`, `colsample_bytree`, `gamma`, `reg_alpha` e `reg_lambda`. A otimização Bayesiana com Optuna foi conduzida por 200 iterações para identificar a melhor configuração.

4.5. Interpretabilidade e Otimização

Embora métodos de ensemble frequentemente superem outros modelos de ML em desempenho, sua complexidade pode dificultar a compreensão do processo de decisão (Ascher; Wang et al., 2022). Para mitigar essa limitação, empregam-se técnicas de interpretabilidade: elas aumentam a transparência, fortalecem a confiança, promovem responsabilização e auxiliam na depuração eficiente e na seleção de variáveis (Ascher et al., 2022; Azadvar; Tavakoli, 2024; Qi et al., 2024). Entre essas técnicas, SHapley Additive exPlanations (SHAP) destaca-se como uma abordagem flexível que fornece tanto entendimento global do modelo quanto explicações locais (em nível de instância), quantificando a importância das variáveis e suas interações (Lundberg; Allen; Lee, 2017).

A análise SHAP, contudo, limita-se a elucidar a importância relativa das variáveis de processo, não sendo capaz de identificar diretamente condições operacionais ótimas. Essa limitação motiva o emprego de técnicas de otimização numérica. Nesse contexto, os problemas de otimização foram formulados utilizando o algoritmo de Evolução Diferencial (ED) (Ali; Kajee-Bagdadi, 2009; Virtanen et al., 2020), acoplado aos modelos substitutos XGBoost treinados. As variáveis de decisão consideradas foram a fração mássica de plástico na mistura (α), a razão de equivalência (ER) e a temperatura (T).

Dois estratégias complementares de otimização foram implementadas. Na primeira, foram definidos seis problemas de otimização com um único objetivo, visando à maximização de H_2 , CO, rendimento de gás de síntese, poder calorífico inferior (LHV) e da razão H_2/CO , bem como à minimização de CO_2 . Na segunda estratégia, foi realizada uma otimização específica por tipo de plástico, na qual a produção de hidrogênio foi maximizada individualmente para cada polímero, com o objetivo de identificar o par biomassa-plástico mais sinérgico, juntamente com as correspondentes condições operacionais ótimas.

Os problemas de otimização foram submetidos a restrições fisicamente coerentes. A fração mássica de plástico foi limitada ao intervalo de 0–100 % em massa, a razão de equivalência ao intervalo de 0,25–0,45 e a temperatura à faixa de 650–1000 °C. Como a otimização evolutiva

pode naturalmente conduzir as soluções para regiões extremas do espaço de entrada, todas as soluções candidatas foram adicionalmente verificadas por meio de um critério de domínio de aplicabilidade (AD) baseado na distância de Mahalanobis.

O otimizador de Evolução Diferencial foi implementado utilizando a biblioteca SciPy, com um máximo de 100.000 iterações e sem etapa de polimento local. O tamanho da população foi variado sistematicamente entre 10 e 70 indivíduos para as otimizações globais e entre 10 e 90 indivíduos para as otimizações específicas por tipo de plástico para avaliar a robustez da convergência, e cada otimização foi repetida cinco vezes. As soluções ótimas representativas foram selecionadas como aquelas mais próximas do valor mediano da função objetivo ao longo das repetições, assegurando resultados estatisticamente estáveis.

A cada iteração, a população do algoritmo explorou diferentes combinações entre pares biomassa-plástico, associadas a distintas condições operacionais (T e ER). Para cada solução candidata, as propriedades elementares e imediatas dos componentes foram combinadas linearmente de acordo com a fração mássica de mistura, resultando no vetor de características [C, H, O, U, CF, ER, CZ, T], que foi então avaliado pelo modelo substituto XGBoost. Esse procedimento permitiu que a evolução da população fosse guiada pelas misturas e condições com melhor desempenho preditivo, mantendo consistência físico-química ao longo do processo de otimização.

Considerando que a otimização evolutiva pode naturalmente direcionar soluções candidatas para os limites do espaço de treinamento, uma avaliação do domínio de aplicabilidade foi incorporada para garantir a confiabilidade das soluções otimizadas. O domínio de aplicabilidade define a região do espaço de descritores na qual as previsões do modelo podem ser consideradas confiáveis, distinguindo interpolação de (Pérez-Santín et al., 2023; Sahigara et al., 2012). Esse aspecto é particularmente crítico em estudos orientados por otimização, nos quais algoritmos evolutivos podem explorar combinações extremas de variáveis de entrada e conduzir naturalmente as soluções para os limites do espaço de treinamento (Kar; Roy; Leszczynski, 2018).

Neste trabalho, o domínio de aplicabilidade foi avaliado por meio de um critério baseado na distância de Mahalanobis, que quantifica a distância multivariada entre os pontos candidatos e o centróide do conjunto de dados de treinamento no espaço de características padronizado, levando em conta as correlações entre os descritores (Sahigara et al., 2012). O limite do domínio de aplicabilidade foi definido utilizando o intervalo de confiança de 99 % da distribuição qui-quadrado com oito graus de liberdade, correspondentes às oito variáveis de entrada do modelo, resultando em um valor limite de 4,48. Esse critério foi aplicado como uma etapa de verificação

pós-otimização, garantindo que todas as soluções geradas pelo algoritmo de Evolução Diferencial permanecessem dentro da região válida de interpolação.

5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1. Validação do Modelo de Gaseificação do PRO/II

Para avaliar a precisão e a confiabilidade da abordagem de modelagem proposta, as composições simuladas do gás de síntese foram comparadas com dados experimentais reportados na literatura. Três estudos independentes foram utilizados como referência (vide Tabela 6) — Olgun; Ozdogan; Yinesor, (2011), Cho; Mun; Kim, (2013), e Fazil; Kumar; Mahajani, (2022) — representando matérias-primas distintas: biomassa (cavacos de madeira), plásticos (uma mistura de PP, PE, PET e outros) e uma mistura biomassa-plástico (resíduos de jardim com PE). As simulações foram realizadas sob as mesmas condições operacionais descritas nesses estudos, correspondendo à temperatura e à razão de equivalência. Os valores de RMSE resultantes foram 3,13; 5,84; e 3,83, respectivamente, consistentes com valores reportados por outros autores (Ajourloo et al., 2022a; Ranjan et al., 2023; Salisu et al., 2023). Esses resultados demonstram boa concordância entre as composições previstas e experimentais do gás de síntese, confirmando a validade do modelo de simulação.

Para demonstrar ainda mais a versatilidade da estrutura de modelagem proposta, três experimentos computacionais adicionais foram realizados utilizando vapor como agente gaseificante (vide Tabela 7. Esses casos foram selecionados a partir de estudos experimentais independentes da literatura, incluindo — Liu et al., (2022), Lopez et al., (2015) e Erkiaga et al., (2013), de modo a abranger matérias-primas quimicamente distintas, a saber: biomassa (madeira de Pinus), plásticos (HDPE) e uma mistura biomassa-plástico (madeira de Pinus com HDPE).

Embora o foco principal deste estudo seja a gaseificação conduzida com ar, os conjuntos de dados experimentais publicados para operação com ar ainda são limitados. A inclusão de casos de gaseificação a vapor, portanto, cumpre um duplo propósito: (i) fornecer validação suplementar do modelo de equilíbrio PRO/II sob diferentes atmosferas gaseificantes e (ii) evidenciar a capacidade do PRO/II de representar com precisão sistemas de gaseificação em geral, para além das condições específicas de operação com ar.

Tabela 6 – Comparação entre as composições simuladas e experimentais do gás de síntese para validação do modelo.

Condição	Cavacos de Madeira T = 860 °C; ER = 0,25		Resíduos de Jardim:PE (5/95) T=720 °C; ER = 0,29		Mistura de Resíduos Plásticos T=810 °C; ER = 0,45	
Composto	Experimento (mol/mol%)	PRO/II	Experimento (mol/mol%)	PRO/II	Experimento (mol/mol%)	PRO/II
H ₂	13,44	18,44	11,71	12,74	19,61	13,73
CO	22,96	22,75	18,6	17,22	10,11	19,53
CO ₂	10,64	11,78	17,75	11,40	9,88	3,77
CH ₄	2,48	1,08	1,46	2,87	2,24	1,56
N ₂	50,48	45,93	50,48	55,76	58,17	61,28
RMSE	–	3,13	–	3,83	–	5,84

Fonte: O autor (2025).

Tabela 7 – Comparação entre as composições simuladas e experimentais do gás de síntese para validação do modelo utilizando vapor como agente gaseificante.

Condição	Madeira de Pinus T = 820 °C; S/F = 1		Madeira de Pinus:HDPE (50/50) T=900 °C; S/F = 1		HDPE T=900 °C; S/F = 1	
Composto	Experimento (mol/mol%)	PRO/II	Experimento (mol/mol%)	PRO/II	Experimento (mol/mol%)	PRO/II
H ₂	50,80	54,91	56,00	62,30	59,00	66,48
CO	29,20	27,97	28,00	32,62	29,00	29,65
CO ₂	17,10	13,39	8,00	2,94	1,90	0,42
CH ₄	3,60	3,35	6,00	2,12	6,00	3,45
RMSE	–	2,84	–	5,04	–	4,03

Fonte: O autor (2025).

Essas simulações adicionais (Tabela 7) reforçam que a abordagem de modelagem pode ser estendida de forma confiável para agentes alternativos e cenários operacionais distintos. De modo geral, os resultados indicam que a abordagem de modelagem captura com sucesso as tendências globais do processo de gaseificação, preservando tanto a ordem de grandeza quanto a direção dos efeitos das variáveis operacionais. Assim, embora não deva ser empregada como uma ferramenta de predição numérica exata, a simulação oferece confiabilidade suficiente para orientar análises de cenários e apoiar o planejamento de condições operacionais, confirmando sua validade como recurso complementar aos dados experimentais disponíveis.

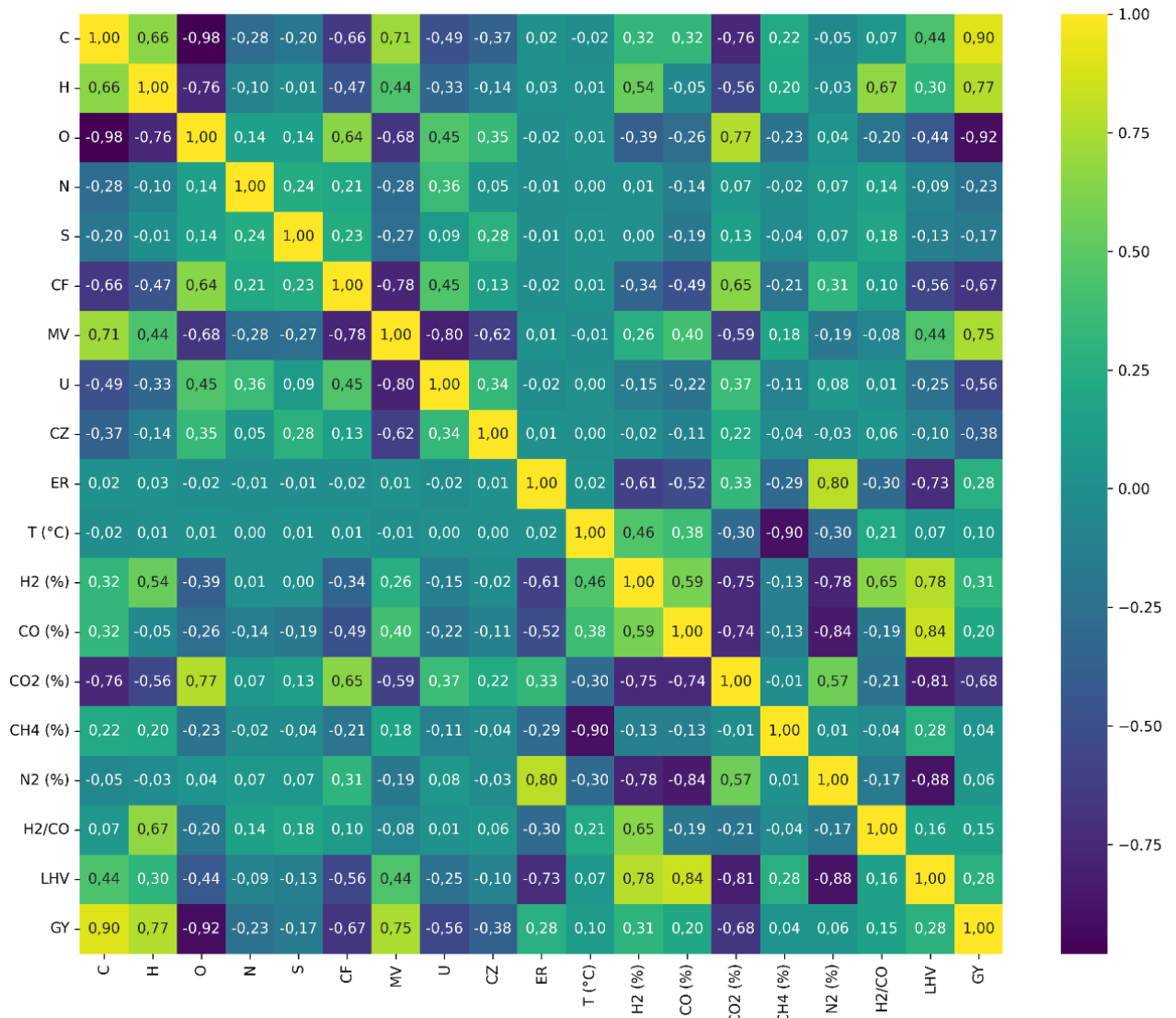
5.2. Análise de Dados e Modelagem com XGBoost

Uma matriz de correlação de Pearson (Figura 17) foi utilizada para examinar as relações entre entradas e saídas. Dentro de cada conjunto composicional — elemental (C, H, O, N, S) e imediato (CF, MV, U, CZ) — surgem fortes (anti)correlações devido à restrição de fechamento (soma igual a 100%). No conjunto elemental, N e S apresentam fraca associação com as variáveis-alvo, enquanto as correlações são mais pronunciadas entre as variáveis da análise imediata. O planejamento por Hipercubo Latino reduziu correlações lineares entre entradas, de modo que os efeitos do processo aparecem principalmente nas saídas — mais notadamente T-CH₄ (negativa) e ER-N₂ (positiva), com a tendência esperada de diluição ER-LHV em operação com ar (Dhrioua et al., 2022; Gao, Y. et al., 2023; Meng; Meng; Zhang, 2018). As não linearidades e interações são quantificadas posteriormente por meio de SHAP, que utilizamos para corroborar esses padrões (Lundberg et al., 2020). Dada a correlação mútua entre as variáveis de saída, as métricas são apresentadas por variável-alvo, e a razão H₂/CO também é reconstruída a partir dos valores de H₂ e CO previstos pelo modelo como uma verificação adicional de robustez.

Para o ajuste do modelo XGBoost, N e S foram excluídas devido à sua utilidade preditiva limitada com relação às variáveis-alvo, e MV foi removida porque não é utilizada como entrada explícita no simulador e apresenta alta colinearidade com outras variáveis imediatas — reduzindo assim redundância sem perda de informação.

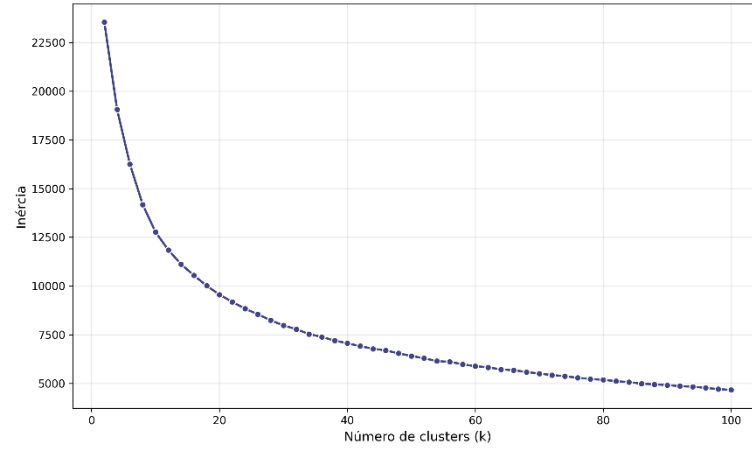
A escolha de k no algoritmo K-means não teve como objetivo identificar um “número natural de clusters”, mas sim definir um nível de granularidade que evitasse vazamento de distância entre os subconjuntos de treinamento, validação e teste. A análise da inércia utilizando o Método do Cotovelo, Figura 18 (a), não apresentou um cotovelo bem definido, mas indicou uma redução acentuada nos ganhos além de $k \approx 60$. O Índice de Silhueta, Figura 19 (b), mostrou que a coesão intra-cluster permanece baixa e relativamente estável para $k > 10$, um resultado esperado devido à natureza contínua da distribuição amostral. Por sua vez, o Índice de Davies–Bouldin, Figura 18 (c), indicou melhoria progressiva com o aumento de k , estabilizando-se entre 70 e 100 clusters.

Figura 17 – Matriz de correlação de Pearson entre variáveis de entrada e saídas do gás de síntese (características e alvos do modelo).

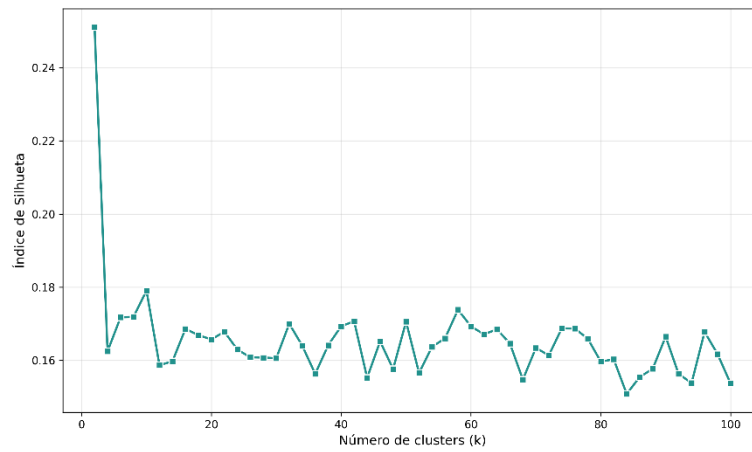


Fonte: O autor (2025).

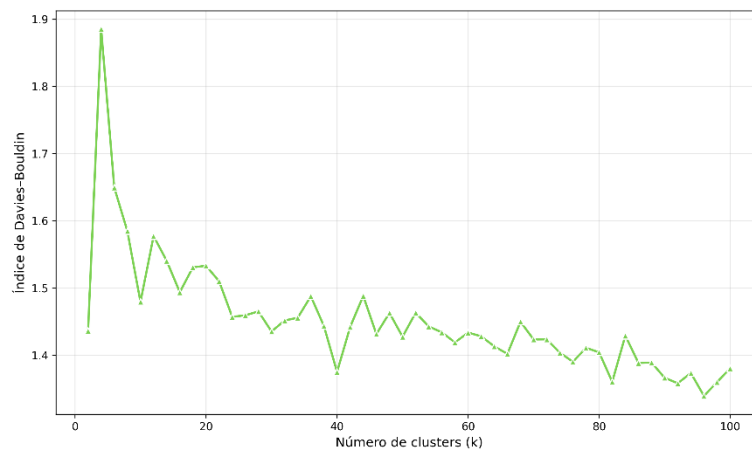
Figura 18 – Índices de validação de agrupamento para determinação do número de clusters (k): (a) Método do Cotovelo (Inércia), (b) Índice de Silhueta, (c) Índice de Davies–Bouldin.



(a)



(b)



(c)

Fonte: O autor (2025).

A Figura 19 e a Tabela 8 avaliam quantitativamente a separação estatística entre os subconjuntos de treinamento, validação e teste. As distâncias para o vizinho mais próximo (Figura 19) revelam que as amostras de validação e teste estão, em média, entre uma e duas unidades padronizadas afastadas dos dados de treinamento, com uma cauda assimétrica à direita que se estende até ≈ 5 . Esse padrão demonstra um grau de sobreposição parcial, suficiente para fins de interpolação, mas garante que os subconjuntos externos ocupem regiões distintas do espaço de descritores.

Métricas complementares baseadas em distância sustentam essa interpretação. Os valores de *Maximum Mean Discrepancy* (MMD) de 1,66 para validação→treino e 1,05 para teste→treino indicam um deslocamento moderado a elevado nas médias das variáveis, confirmando que ambos os subconjuntos diferem estatisticamente da distribuição de treinamento. Em contraste, os valores de Energy Distance ($\approx 0,107$ para ambas as comparações) permanecem baixos, sugerindo divergência controlada sem desconexão completa. Em conjunto, essas medidas demonstram independência distributiva sem separação excessiva, preservando a continuidade estatística necessária para uma generalização robusta do modelo.

De maneira geral, a combinação de MMD, Energy Distance e análises de vizinho mais próximo confirma que a estratégia de particionamento baseada em clusters minimizou efetivamente o vazamento de distância, ao mesmo tempo em que manteve condições realistas de interpolação para o treinamento, validação e teste do modelo. Isso garante que o desempenho preditivo reportado reflita uma generalização genuína, e não artefatos decorrentes de proximidade estatística.

Tabela 8 – Estatísticas de separação entre os subconjuntos de dados utilizando as métricas 1-NN, MMD e Energy Distance.

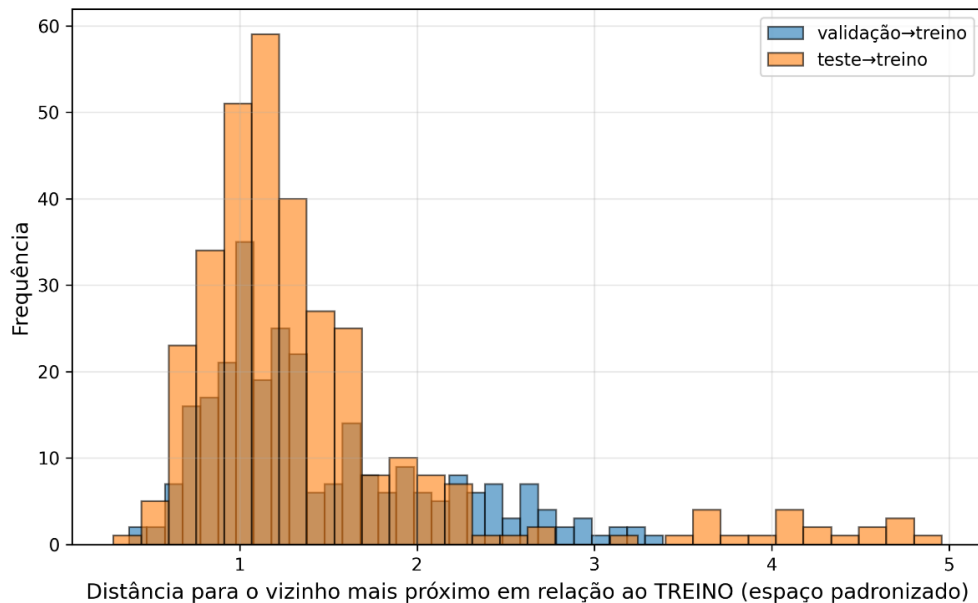
Conjunto	m	média	dp	mediana	p90	p95	máx	MMD	Energy Distance
validação→treino	273	1,4488	0,6435	1,2440	2,4487	2,7379	3,3850	1,6585	0,1071
teste→treino	323	1,4217	0,8267	1,1821	2,1205	3,6876	4,9572	1,0526	0,1069

Fonte: O autor (2025).

Com base nesses resultados, adotou-se $k = 77$ como um compromisso adequado: suficientemente alto para capturar nuances da variabilidade composicional e garantir separação entre os conjuntos de dados, sem fragmentar excessivamente as amostras nem comprometer sua robustez estatística. A separação quantitativa dos subconjuntos foi confirmada: as distâncias 1-NN entre teste e treinamento apresentaram mediana = 1,18 e p90 = 2,12 (Tabela 8), com

distribuições deslocadas para a direita tanto para validação quanto para teste (Figura 19). Além disso, $MMD = 1,05$ e $Energy\ Distance = 0,107$ (Tabela 8) reforçam a distinção entre os subconjuntos, confirmando vazamento de distância mínimo e partições estatisticamente independentes.

Figura 19 – Distribuição das distâncias para o vizinho mais próximo das amostras de validação e teste em relação ao conjunto de treinamento no espaço padronizado de características.

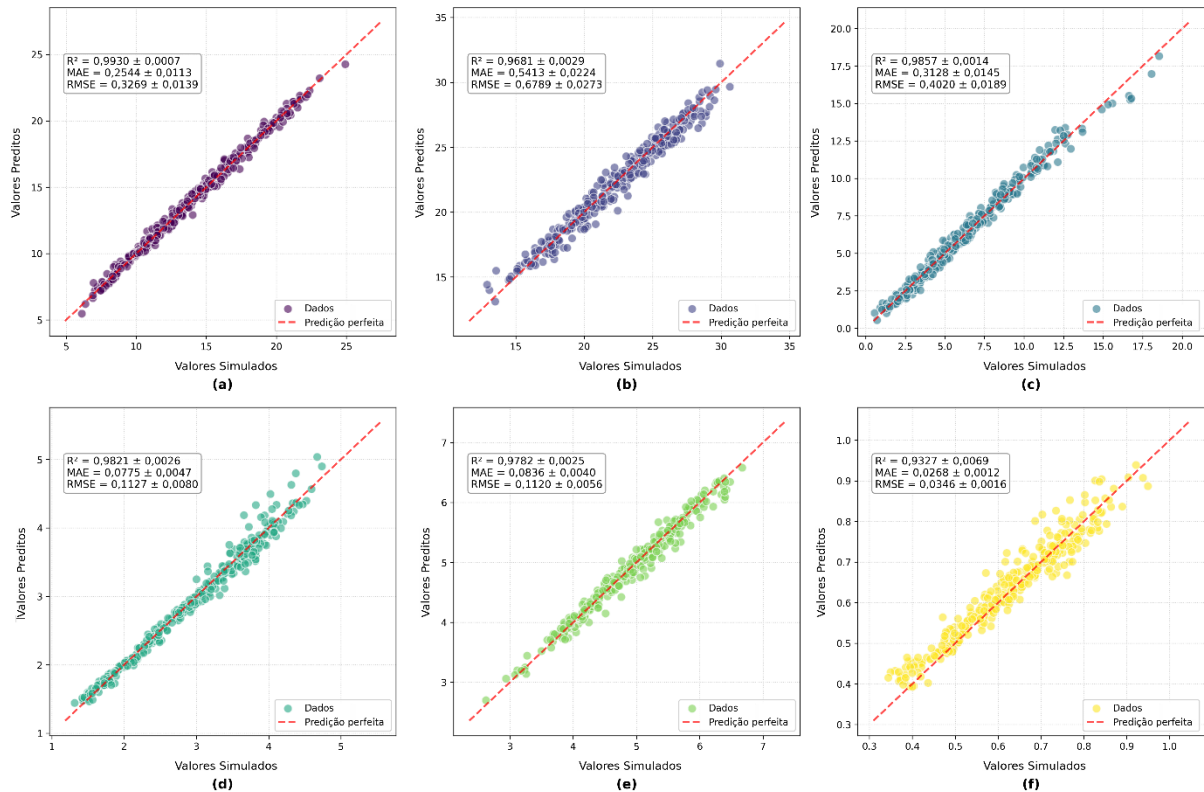


Fonte: O autor (2025).

A Figura 20 apresenta a comparação entre os valores simulados e previstos para os parâmetros de gaseificação. A linha tracejada representa o alinhamento perfeito entre valores observados e previstos, enquanto os pontos coloridos mostram a dispersão dos dados. Quanto mais próximos os pontos estiverem da linha, melhor o desempenho preditivo. Com exceção da razão H_2/CO , os dados estão bem distribuídos ao redor da linha, indicando a aplicabilidade das predições, conforme corroborado pelos valores de R^2 superiores a 0,9650 no conjunto de teste.

De modo geral, o modelo alcançou $R^2 = 0,9886$ no treinamento e $R^2 = 0,9805$ no teste, com um mínimo de 0,94 entre as diferentes variáveis de saída, confirmando boa capacidade de generalização. Vale destacar a importância das etapas anteriores — como a construção e o pré-processamento do conjunto de dados, cujas limitações e desvios em relação à realidade foram anteriormente mencionados — bem como a definição adequada da divisão treino/teste, pois, essas escolhas influenciam diretamente a confiabilidade dos resultados.

Figura 20 – Comparação entre os valores previstos pelo XGBoost e os valores simulados para: (a) composição de H₂ (%), (b) composição de CO (%), (c) composição de CO₂ (%), (d) rendimento de gás de síntese (Nm³ kg⁻¹), (e) PCI (MJ Nm⁻³) e (f) razão H₂/CO obtidos no AVEVA PRO/II.



Fonte: O autor (2025).

5.3. Interpretabilidade e Projeções

Para interpretar o comportamento do modelo de aprendizado de máquina e elucidar suas previsões, empregou-se a análise SHAP (Figura 21). Essa abordagem produz dois tipos de gráficos: um gráfico de importância média, que estabelece uma classificação das variáveis mais influentes a partir dos valores absolutos médios de SHAP, e um gráfico de impacto, que mostra se a influência de cada variável é positiva ou negativa. Nos gráficos, a distribuição dos pontos e suas cores (amarelo para valores elevados e roxo para valores baixos) indicam como a variação em uma característica afeta as saídas previstas. Essa análise dupla é essencial para transformar as previsões de modelos complexos do tipo “caixa-preta” (black-box) em informações compreensíveis e aplicáveis ao processo industrial.

A análise da Figura 21 (a-b) mostra que ER, temperatura e teor de H (%) são os fatores mais determinantes para a fração volumétrica de H₂ (|SHAP| médio = 2,28; 1,46; e 1,54, respectivamente). O aumento da temperatura e do teor de H (%) favorece sua formação, enquanto valores mais elevados de ER exercem efeito oposto. A magnitude dos valores de SHAP indica que a ER contribui cerca de 1,5 vez mais do que a temperatura ou o teor de H

(%), estabelecendo o suprimento de ar como a principal variável de controle, enquanto os efeitos térmicos e composicionais desempenham papéis secundários, porém comparáveis. A relevância expressiva da ER está associada à forte influência do agente gaseificante: a substituição do ar por oxigênio puro ou vapor, por exemplo, pode elevar o limite superior de H₂ de aproximadamente 25% para cerca de 60%, em razão da introdução de uma fonte adicional de hidrogênio (vapor d'água) e do deslocamento do equilíbrio químico de reações como a de deslocamento de água-gás (Song et al., 2022).

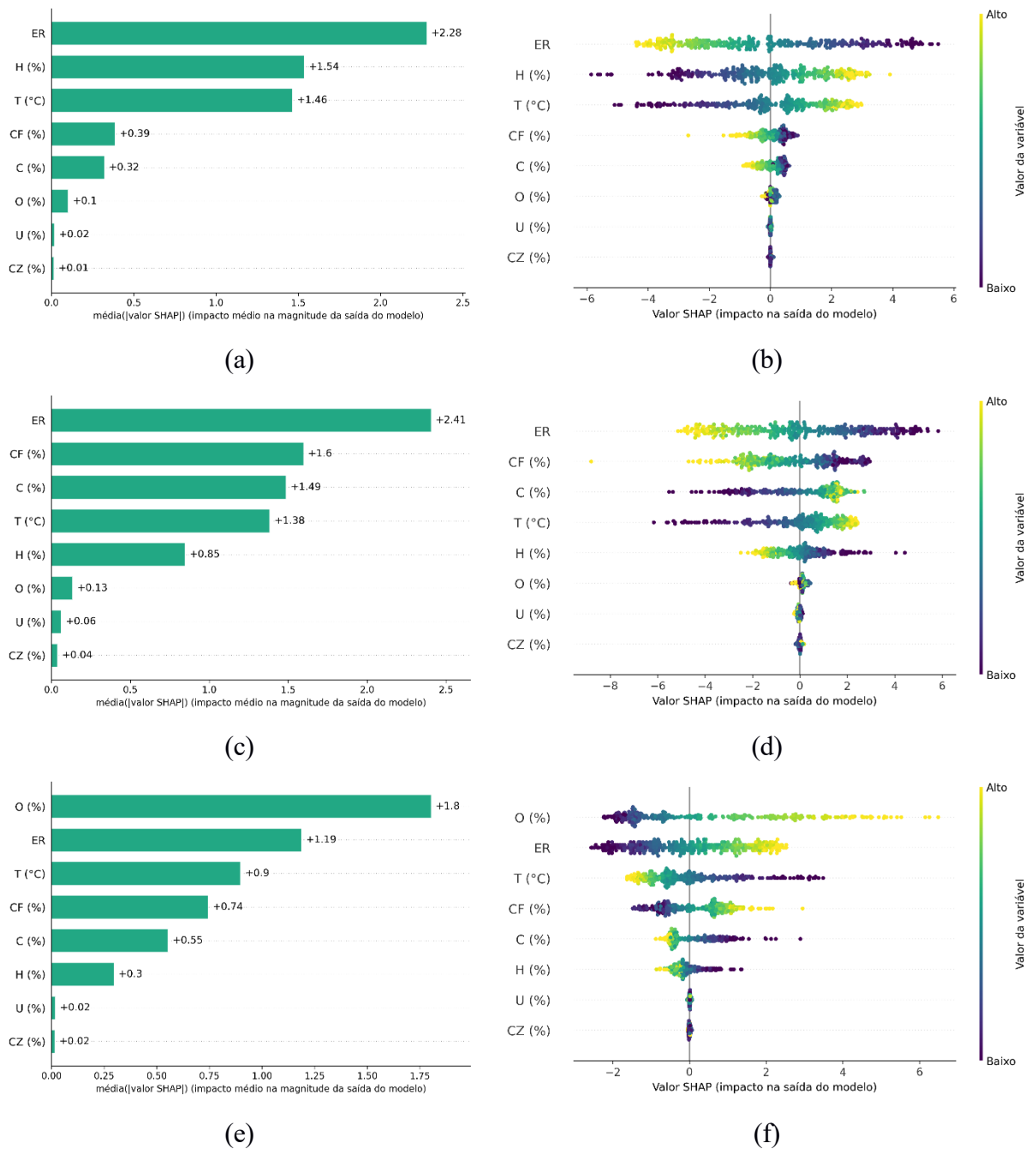
Na Figura 21 (c-d), os principais fatores que impactam a fração volumétrica de CO são ER, CF (%) e C (%), com |SHAP| médio igual a 2,41; 1,60; e 1,49, respectivamente. Valores mais elevados de ER tendem a deslocar os valores de SHAP para a região negativa, e sua maior magnitude, cerca de 1,5 vez superior à das outras duas variáveis, indica que o suprimento de ar exerce influência dominante, uma vez que essas condições intensificam a combustão e reduzem a disponibilidade de CO, que passa a ser mais consumido em reações como a de Boudouard. Por outro lado, FC (%) e C (%) controlam a quantidade efetiva de carbono disponível: o carbono fixo remove parte do carbono antes da pirólise para a formação de coque, enquanto maiores teores de carbono na biomassa compensam essa perda, favorecendo a formação de CO.

A fração volumétrica de CO₂ na Figura 21 (e-f) é principalmente governada por O (%), ER e T, com valores médios absolutos de SHAP de aproximadamente 1,80; 1,19; e 0,90, respectivamente. Como o CO₂ se forma sequencialmente a partir do CO, o oxigênio presente na matéria-prima fornece CO como precursor e favorece essa rota. A maior contribuição de SHAP associada ao teor de O (%) destaca seu papel dominante, superando o da ER em cerca de 1,5 vez e o da temperatura em aproximadamente duas vezes. O efeito da ER segue a mesma lógica discutida para o CO, porém em sentido oposto, enquanto temperaturas mais baixas intensificam a formação de CO₂ devido ao caráter exotérmico da reação.

De forma integrada, os gráficos de resumo da análise SHAP na Figura 21 revelam uma interação antagonista consistente entre ER e temperatura, que governa a distribuição de H₂, CO e CO₂. Temperaturas mais elevadas deslocam as previsões em direção a maiores frações de H₂ e CO ao favorecer vias endotérmicas, incluindo a reação de Boudouard, as reações água-gás primária e secundária, as reações de reforma a vapor e reforma seca do metano, bem como o equilíbrio da reação de deslocamento água-gás. Em contraste, o aumento da ER promove rotas oxidativas, intensificando a combustão do carbono, do CO e do H₂, além do efeito de diluição pelo nitrogênio, o que reduz as frações de H₂ e CO e favorece a formação de CO₂. Essa competição explica a pronunciada relação de compromisso entre CO e CO₂ observada nas distribuições de SHAP, uma vez que condições que aumentam a disponibilidade de CO como

intermediário limitam simultaneamente sua conversão em CO₂, enquanto regimes mais ricos em oxigênio aceleram a oxidação do CO e deslocam o sistema em direção a estados de maior grau de oxidação.

Figura 21 – Análise de importância das variáveis pelo método SHAP (valores médios absolutos) e gráficos de resumo do modelo XGBoost: (a–b) composição de H₂ (%), (c–d) composição de CO (%), e (e–f) composição de CO₂ (%).



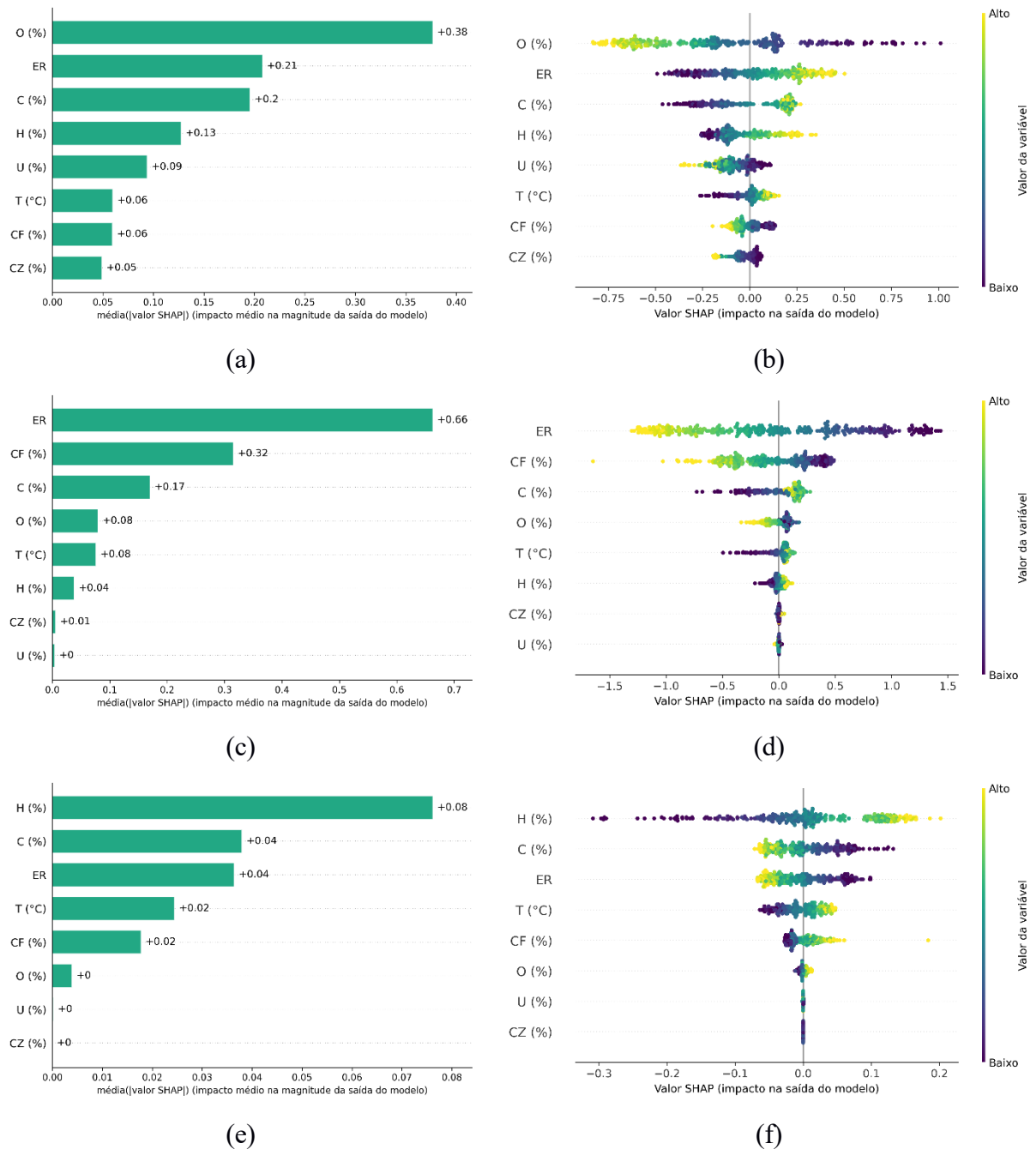
Fonte: O autor (2025).

Para o rendimento de gás de síntese na Figura 22 (a-b), os fatores determinantes são O (%), ER e C (%), com valores médios de |SHAP| iguais a 0,38, 0,21 e 0,20, respectivamente. O aumento do teor de oxigênio reduz a qualidade do gás, comportamento capturado pela análise SHAP por meio da contribuição dominante de O (%), que é aproximadamente duas vezes maior que as de ER e C (%), em consonância com relatos de que os plásticos superam a biomassa devido ao seu menor teor de oxigênio (Halba; Thengane; Arora, 2023). Em contraste, valores maiores de ER favorecem a formação de produtos gasosos, e valores mais altos de C (%) aumentam o potencial de geração por permitirem a formação de três dos quatro principais constituintes.

Com relação ao poder calorífico inferior na Figura 22 (c-d), ER, CF (%) e C (%) são predominantes, com valores médios de |SHAP| de 0,66, 0,32 e 0,17, respectivamente. Embora o aumento da ER promova a produção de gás, seu efeito líquido sobre o LHV é negativo, pois ele eleva as frações de N₂ e CO₂, que atuam como diluentes e reduzem a energia disponível. A maior contribuição de SHAP associada à ER, cerca de duas vezes superior à de FC (%) e quase quatro vezes maior que a de C (%), evidencia seu papel dominante no controle dos efeitos de diluição energética. O aumento de CF (%) também reduz o LHV ao diminuir a formação de combustíveis dependentes de carbono — os principais contribuintes para o valor energético — enquanto o efeito positivo de C (%) segue a mesma lógica discutida para o rendimento de gás.

A razão H₂/CO na Figura 22 (e-f) é fortemente influenciada por H (%), ER e C (%), com valores médios absolutos de SHAP de aproximadamente 0,08; 0,04 e 0,04, respectivamente, refletindo os padrões observados para H₂ (Figura 21 a-b) e CO (Figura 21 c-d): maiores teores de H (%) aumentam a formação de H₂ e elevam a razão; C (%) mais baixo favorece o aumento da razão pelo mesmo motivo; e valores crescentes de ER dificultam a formação de ambos os componentes, produzindo um efeito líquido negativo — embora menos pronunciado porque H₂ e CO diminuem simultaneamente. Essas observações são consistentes com Qi et al., (2024) para biomassa e resíduos sólidos urbanos e, em conjunto, confirmam a ER como um fator decisivo de desempenho — reforçando a importância da escolha adequada do agente gaseificante.

Figura 22 – Análise de importância das variáveis pelo método SHAP (valores médios absolutos) e gráficos de resumo do modelo XGBoost: (a–b) rendimento do gás de síntese ($\text{Nm}^3 \text{kg}^{-1}$), (c–d) poder calorífico inferior (LHV, MJ Nm^{-3}) e (e–f) razão H_2/CO .



Fonte: O autor (2025).

Uma percepção adicional emerge da análise conjunta das Figura 21 e Figura 22, que evidencia uma interação condicional entre ER e o teor de carbono ao longo de diferentes métricas de desempenho. Para métricas extensivas, como o rendimento de gás de síntese, ambos os parâmetros atuam de forma sinérgica, uma vez que o aumento do suprimento de ar intensifica a conversão global, enquanto maiores teores de carbono elevam o potencial de geração. Em

contrapartida, para saídas seletivas (CO, CO₂, LHV e razão H₂/CO), seus efeitos divergem: a ER controla a intensidade de oxidação e os efeitos de diluição, enquanto a disponibilidade de carbono sustenta a formação de intermediários e a qualidade energética. Esse comportamento condicional explica por que ER e C podem atuar tanto no mesmo sentido quanto em sentidos opostos, dependendo da variável de saída considerada, evidenciando que a composição da matéria-prima, isoladamente, é insuficiente para garantir desempenho sem um regime de oxidação compatível.

Para identificar combinações de matérias-primas e condições operacionais que maximizem o desempenho do processo, empregou-se a ED como estratégia de otimização. Os pontos ótimos identificados pelo algoritmo de ED foram verificados em relação ao domínio de aplicabilidade do modelo XGBoost (abordagem baseada em distância de Mahalanobis (Pérez-Santín et al., 2023; Sahigara et al., 2012)) para assegurar que todas as otimizações fossem realizadas dentro da região válida de interpolação dos dados de treinamento. Todas as misturas otimizadas apresentaram distâncias de Mahalanobis abaixo do limite de confiança de 99 % (4,48), confirmando que as soluções de ED permaneceram dentro do domínio de aplicabilidade do modelo. Resultados detalhados da verificação do AD são apresentados na Figura 23.

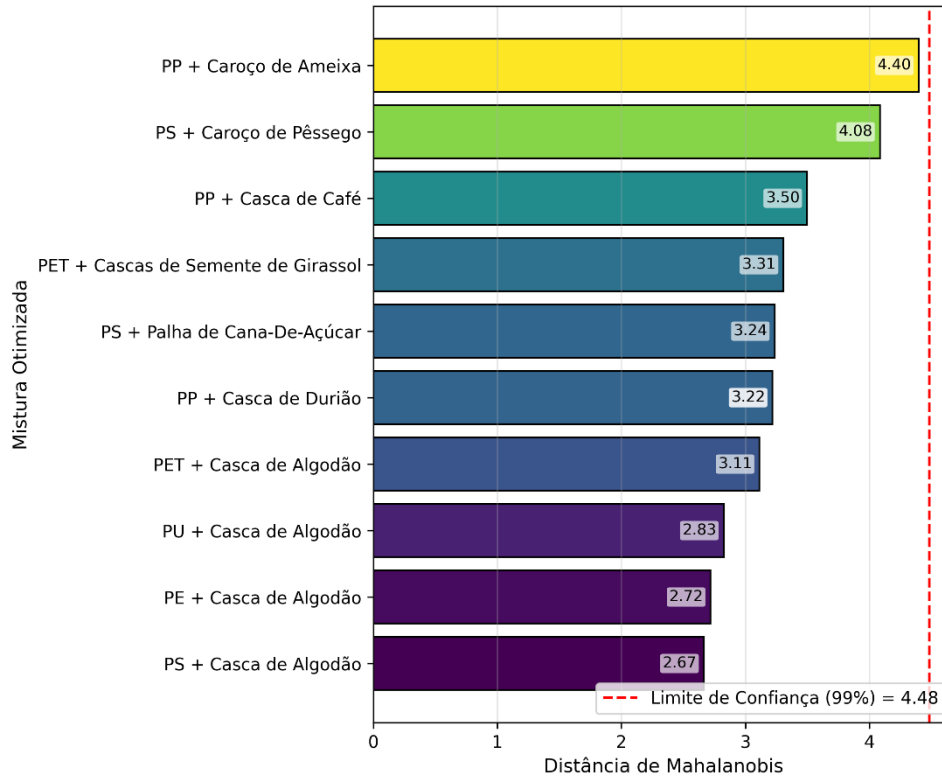
O domínio de aplicabilidade do modelo XGBoost foi avaliado utilizando um critério baseado na distância de Mahalanobis. Essa abordagem quantifica a distância multivariada entre cada ponto otimizado proposto pelo algoritmo de Evolução Diferencial e o centróide do conjunto de treinamento no espaço padronizado de variáveis. O limite do AD foi definido pelo intervalo de confiança de 99 % da distribuição qui-quadrado com p graus de liberdade (igual ao número de variáveis de entrada), o que resultou em um limiar de 4,48 neste estudo.

Todas as misturas otimizadas apresentaram distâncias de Mahalanobis abaixo desse limiar, confirmando que cada ponto gerado pela ED está dentro da região válida de interpolação do modelo. Conseqüentemente, todas as propriedades previstas correspondem a estimativas estatisticamente confiáveis e dentro do domínio, e não a extrapolações. A representação gráfica de cada mistura otimizada e suas respectivas posições em relação ao limite de confiança de 99 % é mostrada na Figura 23.

Vale destacar que soluções otimizadas que se aproximam do limite do domínio de aplicabilidade tendem a estar associadas a maior incerteza preditiva, uma vez que o modelo passa progressivamente do regime de interpolação para o de extrapolação. No presente estudo, contudo, a verificação explícita do domínio de aplicabilidade confirmou que todas as soluções geradas pelo algoritmo de Evolução Diferencial permaneceram bem dentro da região válida do

modelo, minimizando assim o risco de previsões não confiáveis ou excessivamente confiantes (Pérez-Santín et al., 2023; Sahigara et al., 2012).

Figura 23 – Domínio de aplicabilidade avaliado por meio da distância de Mahalanobis.



Fonte: O autor (2025).

Cinco cenários de objetivo único foram formulados — maximizar H_2 , CO, GY, LHV e H_2/CO , e minimizar CO_2 — conforme resumido na Tabela 9. Os resultados indicam que cada métrica responde de maneira diferente às condições operacionais e às combinações biomassa-plástico. Embora o PP predomine entre os pares de melhor desempenho, a composição ótima da mistura varia substancialmente entre os diferentes objetivos. No cenário de máximo H_2 (PP + casca de durião), o desempenho é impulsionado por uma alta fração de plástico combinada com alta temperatura e baixa ER, resultando em $H_2 = 28,08 \%$, $H_2/CO \approx 1,04$, $GY = 4,32 \text{ Nm}^3 \text{ kg}^{-1}$ e um LHV moderado de $6,63 \text{ MJ Nm}^{-3}$.

Tabela 9 – Resultados da otimização para as variáveis-alvo (ED): objetivos, matérias-primas ótimas, condições e resultados.

Alvo	Par	Condições	Predição do Resultado	Composição
H ₂ (Máx)	PP + Casca de Durião	<ul style="list-style-type: none"> • 72,97% plástico • ER: 0,253 • T: 983,86°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 28,08 • CO (%): 24,95 • CO₂ (%): 0,13 • GY (Nm³/kg): 4,32 • LHV (MJ/Nm³): 6,63 • H₂/CO: 1,04 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 78,73% • H: 12,40% • O: 8,02% • U: 1,19% • CF: 4,93% • CZ: 1,81%
CO (Máx)	PET + Cascas de Semente de Girassol	<ul style="list-style-type: none"> • 90,05% plástico • ER: 0,250 • T: 980,19°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 15,39 • CO (%): 38,96 • CO₂ (%): 0,80 • GY (Nm³/kg): 2,57 • LHV (MJ/Nm³): 6,79 • H₂/CO: 0,39 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 63,55% • H: 4,21% • O: 32,07% • U: 1,23% • CF: 6,25% • CZ: 0,10%
CO ₂ (Mín)	PS + Palha de Cana-De-Açúcar	<ul style="list-style-type: none"> • 98,67% plástico • ER: 0,305 • T: 998,78°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 18,96 • CO (%): 28,61 • CO₂ (%): 0,00 • GY (Nm³/kg): 4,57 • LHV (MJ/Nm³): 5,81 • H₂/CO: 0,62 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 89,57% • H: 8,46% • O: 1,96% • U: 0,10% • CF: 0,13% • CZ: 0,36%
GY (Máx)	PP + Casca de Café	<ul style="list-style-type: none"> • 99,61% plástico • ER: 0,449 • T: 985,37°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 16,58 • CO (%): 21,37 • CO₂ (%): 2,14 • GY (Nm³/kg): 6,51 • LHV (MJ/Nm³): 4,66 • H₂/CO: 0,78 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 85,39% • H: 13,82% • O: 0,79% • U: 0,04% • CF: 0,55% • CZ: 0,01%
LHV (Máx)	PP + Caroço de Ameixa	<ul style="list-style-type: none"> • 36,90% plástico • ER: 0,252 • T: 816,68°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 23,69 • CO (%): 28,99 • CO₂ (%): 1,52 • GY (Nm³/kg): 2,81 • LHV (MJ/Nm³): 7,02 • H₂/CO: 0,83 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 62,00% • H: 9,28% • O: 28,07% • U: 4,64% • CF: 2,52% • CZ: 13,39%
H ₂ /CO (Máx)	PP + Caroço de Pêssego	<ul style="list-style-type: none"> • 4,01% plástico • ER: 0,271 • T: 650,01°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 10,16 • CO (%): 7,34 • CO₂ (%): 15,61 • GY (Nm³/kg): 1,29 • LHV (MJ/Nm³): 3,14 • H₂/CO: 1,25 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 42,71% • H: 7,02% • O: 46,20% • U: 5,1% • CF: 21,42% • CZ: 2,43%

Fonte: O autor (2025).

Ainda sobre a Tabela 9, para o máximo CO (PET + casca de semente de girassol), o elevado teor de oxigênio — proveniente tanto da biomassa quanto do PET, o plástico mais rico em oxigênio — determina o resultado; nessas condições, a razão H_2/CO cai para 0,39, o que pode limitar aplicações que exigem maior teor de hidrogênio, enquanto um LHV ligeiramente mais alto sugere que a maior fração de CO compensa a menor contribuição de H_2 apesar de um rendimento volumétrico inferior.

No cenário de mínimo CO_2 , PS com palha de cana combinou um teor moderado de oxigênio com um alto teor de carbono. Em execuções anteriores, o algoritmo de ED ocasionalmente extrapolava para regiões não físicas do espaço de resposta, levando a valores ligeiramente negativos de CO_2 . Para evitar isso, uma restrição de não negatividade foi posteriormente imposta a todas as saídas durante a otimização, garantindo que o algoritmo explorasse apenas regiões fisicamente significativas do modelo preditivo. A inclusão dessa restrição de não negatividade corrigiu o problema com sucesso, forçando as predições de CO_2 a zero nesses casos. Esse ajuste confirma que a minimização de CO_2 ocorre próximo a regimes de alta temperatura e limitação de oxigênio.

Para o máximo rendimento de gás de síntese, obtido com PP e casca de café, uma ER elevada junto com alta temperatura possibilitou a maior produção volumétrica ($6,51 \text{ Nm}^3 \text{ kg}^{-1}$). Isso, entretanto, ocorreu à custa de uma redução acentuada do LHV, ilustrando o característico compromisso entre quantidade e qualidade na produção de gás de síntese.

No cenário de máximo LHV, a mistura de PP com caroço de ameixa apresentou a maior densidade energética do gás ($7,02 \text{ MJ Nm}^{-3}$), apesar do baixo rendimento volumétrico ($2,81 \text{ Nm}^3 \text{ kg}^{-1}$). Isso mostra que, em termos de energia útil por unidade de volume, misturas com maior fração de biomassa podem superar composições altamente ricas em plástico, tradicionalmente associadas a valores mais elevados de LHV.

Por fim, a maior razão H_2/CO foi obtida para PP com caroço de pêssego, sob uma baixa fração de plástico. Isso sugere que, entre as combinações analisadas, misturas ricas em biomassa podem proporcionar razões H_2/CO mais favoráveis do que cenários dominados por plástico — potencialmente vantajoso para processos catalíticos que requerem maior seletividade em direção ao hidrogênio.

Como em muitos estudos de co-gaseificação em que maximizar H_2 é o objetivo principal, também construímos um cenário dedicado para cada tipo de plástico, a fim de avaliar seu desempenho quando restrito àquela categoria de matéria-prima. Observamos que, com exceção do PET, todos os plásticos apresentaram sinergia com pelo menos uma biomassa, embora em diferentes proporções de mistura. Esse comportamento está alinhado aos achados de (Robinson

et al., 2016), que, ao estudar madeira e PET, concluíram que gaseificar somente madeira foi mais eficiente do que o caso misto.

Em termos de produção de H₂, a sequência de desempenho foi: PP > PE > PU ≈ PS > PET. Essa hierarquia é consistente com (Cao et al., 2020), que investigaram quatro plásticos combinados com lignina de soda e também identificaram desempenho relativo superior de PE em relação a PS. A análise das razões H/C e O/C sustenta essa tendência: matérias-primas com H/C mais alto e O/C mais baixo favoreceram maiores teores de H₂, em concordância com a literatura.

Além desse ranqueamento comparativo, os resultados de otimização podem ser racionalizados à luz da química das matérias-primas e das restrições termodinâmicas fundamentais que governam a gaseificação com ar. A predominância de misturas baseadas em polipropileno em múltiplos objetivos de otimização está associada principalmente à sua elevada razão H/C e ao conteúdo intrínseco praticamente nulo de oxigênio, características que favorecem a formação de H₂ e CO e suprimem a formação de CO₂ sob condições pobres em oxigênio.

Esse comportamento é consistente com as análises imediata e elementar apresentadas na Tabela 9, nas quais o PP apresenta o maior teor de hidrogênio (13,85 % em massa) e a menor fração de oxigênio (0,59 % em massa) entre os plásticos considerados. Em contraste, plásticos ricos em oxigênio, como o PET, deslocam intrinsecamente o equilíbrio em direção a produtos de oxidação, limitando seu desempenho em objetivos orientados à produção de hidrogênio (Islam, 2020; Mishra; Ong; Lin, 2023)

A associação preferencial observada entre biomassa e plástico específicos reflete uma complementaridade composicional. As biomassas presentes nas soluções otimizadas (Tabela 9, Tabela 10 e Figura 23) apresentam, em geral, teores moderados de carbono fixo e baixas frações de cinzas, fornecendo carbono reativo sem promover retirada excessiva por formação de carvão nem diluição inerte significativa. Em contrapartida, biomassas com maiores teores de oxigênio ou cinzas penalizam a qualidade do gás ao favorecer a formação de CO₂ e reduzir a eficiência efetiva de conversão. Essa tendência é consistente com observações anteriores em sistemas de co-gaseificação biomassa-plástico (Gao, Y. et al., 2023; Halba; Thengane; Arora, 2023).

Os níveis quase nulos de CO₂ observados sob determinadas condições ótimas decorrem de regimes de alta temperatura e baixa disponibilidade de oxigênio, nos quais vias de redução de CO₂ — em especial a reação de Boudouard — são termodinamicamente favorecidas, deslocando o carbono para a formação de CO no equilíbrio (Janajreh et al., 2021). Em paralelo, o compromisso entre rendimento de gás de síntese e poder calorífico inferior (LHV),

evidenciado nos resultados de otimização, reflete uma limitação intrínseca da gaseificação com ar: o aumento da razão de equivalência intensifica a produção global de gás, mas reduz simultaneamente a densidade energética em razão da maior diluição por N₂ e da formação de CO₂, uma restrição bem estabelecida em sistemas baseados em ar (Dhrioua et al., 2022; Meng; Meng; Zhang, 2018).

Tabela 10 – Otimização da produção de H₂ para cada tipo de plástico: par biomassa ótimo, condições operacionais (T e ER) e métricas previstas do gás de síntese.

Par	Condições	Predição do Resultado	Composição
PE + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • 29,77% plástico • ER: 0,252 • T: 986,26°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 26,28 • CO (%): 28,51 • CO₂ (%): 1,55 • GY (Nm³/kg): 2,95 • LHV (MJ/Nm³): 6,72 • H₂/CO: 0,90 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 60,99% • H: 9,23% • O: 28,68% • U: 4,21% • CF: 9,25% • CZ: 1,98%
PP + Casca de Durião	<ul style="list-style-type: none"> • 72,97% plástico • ER: 0,253 • T: 983,86°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 28,08 • CO (%): 24,95 • CO₂ (%): 0,13 • GY (Nm³/kg): 4,32 • LHV (MJ/Nm³): 6,63 • H₂/CO: 1,04 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 78,73% • H: 12,40% • O: 8,02% • U: 1,19% • CF: 4,93% • CZ: 1,81%
PS + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • 18,76% plástico • ER: 0,254 • T: 988,39°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 24,16 • CO (%): 27,19 • CO₂ (%): 2,51 • GY (Nm³/kg): 2,66 • LHV (MJ/Nm³): 6,39 • H₂/CO: 0,84 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 57,87% • H: 8,42% • O: 32,58% • U: 4,87% • CF: 10,69% • CZ: 2,33%
PET + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • 0,25% plástico • ER: 0,252 • T: 983,89°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 23,45 • CO (%): 24,65 • CO₂ (%): 4,97 • GY (Nm³/kg): 2,11 • LHV (MJ/Nm³): 5,71 • H₂/CO: 0,92 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 50,43% • H: 8,39% • O: 39,78% • U: 5,98% • CF: 13,14% • CZ: 2,81%
PU + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • 45,58% plástico • ER: 0,255 • T: 989,75°C 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 24,30 • CO (%): 28,70 • CO₂ (%): 1,92 • GY (Nm³/kg): 2,65 • LHV (MJ/Nm³): 6,71 • H₂/CO: 0,81 	<ul style="list-style-type: none"> • C: 57,37% • H: 8,34% • O: 31,53% • U: 3,54% • CF: 7,84% • CZ: 1,53%

Fonte: O autor (2025).

A comparação entre as soluções ótimas obtidas por Evolução Diferencial e as predições do simulador PRO/II, apresentadas nas Tabela 11 e Tabela 12, evidencia boa consistência interna do modelo proposto, com valores de RMSE, em geral, reduzidos e compatíveis com a variabilidade esperada do sistema. Esse resultado indica que o modelo substituto é capaz de reproduzir, com boa fidelidade, as respostas do simulador, demonstrando que o algoritmo de otimização operou de forma eficiente dentro da superfície de resposta construída. De modo geral, observa-se boa concordância entre os valores previstos pela otimização e aqueles recalculados no simulador, especialmente para as variáveis H_2 , CO, GY e LHV, que apresentaram baixos erros relativos na maioria dos cenários, evidenciando a capacidade do algoritmo em identificar regiões ótimas consistentes e estáveis.

Em contrapartida, as maiores discrepâncias concentram-se na razão H_2/CO e em alguns cenários de CO_2 mais extremos, conforme também observado nas Tabela 11 e Tabela 12. Essa sensibilidade é esperada, uma vez que a razão H_2/CO é uma variável derivada de duas saídas do modelo, de modo que pequenas variações em H_2 e CO tendem a se propagar e amplificar o desvio final. Adicionalmente, a análise do XGBoost já indicava essa variável como a de menor aderência relativa, aparecendo como exceção na comparação entre valores previstos e simulados, embora o modelo tenha mantido desempenho global elevado, com R^2 superior a 0,965 para as demais variáveis.

No caso do CO_2 , as discrepâncias estão associadas principalmente a cenários em que essa variável assume valores muito baixos, próximos de zero. Nessas condições, pequenas diferenças absolutas entre os valores previstos e simulados se traduzem em erros relativos elevados, sem necessariamente indicar perda relevante de acurácia. Além disso, o CO_2 apresenta forte dependência do equilíbrio entre reações de oxidação e redução, o que torna sua resposta mais sensível a variações nas condições operacionais, sobretudo em regiões próximas aos limites do domínio analisado.

Tabela 11 – Comparativo dos Resultados de Otimização para as variáveis-alvo com os Simulados

Alvo	Par	Predição da Simulação	Erro Relativo (%)	RMSE
H ₂ (Máx)	PP + Casca de Durião	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 28,18 • CO (%): 25,21 • CO₂ (%): 0,24 • GY (Nm³/kg): 4,30 • LHV (MJ/Nm³): 6,59 • H₂/CO: 1,12 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 0,35 • CO: 1,03 • CO₂: 45,83 • GY: 0,47 • LHV: 0,61 • H₂/CO: 7,14 	0,1282
CO (Máx)	PET + Cascas de Semente de Girassol	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 16,07 • CO (%): 39,15 • CO₂ (%): 0,42 • GY (Nm³/kg): 2,55 • LHV (MJ/Nm³): 6,94 • H₂/CO: 0,41 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 4,23 • CO: 0,49 • CO₂: 90,48 • GY: 0,78 • LHV: 2,16 • H₂/CO: 4,88 	0,3337
CO ₂ (Mín)	PS + Palha de Cana-De-Açúcar	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 18,57 • CO (%): 27,73 • CO₂ (%): 0,23 • GY (Nm³/kg): 4,60 • LHV (MJ/Nm³): 5,73 • H₂/CO: 0,67 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 2,10 • CO: 3,17 • CO₂: 100 • GY: 0,65 • LHV: 1,40 • H₂/CO: 7,46 	0,4071
GY (Máx)	PP + Casca de Café	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 16,87 • CO (%): 21,07 • CO₂ (%): 2,45 • GY (Nm³/kg): 6,69 • LHV (MJ/Nm³): 4,53 • H₂/CO: 0,80 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 1,72 • CO: 1,42 • CO₂: 12,65 • GY: 2,69 • LHV: 2,87 • H₂/CO: 2,50 	0,2326
LHV (Máx)	PP + Carvão de Ameixa	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 23,56 • CO (%): 29,46 • CO₂ (%): 1,28 • GY (Nm³/kg): 2,69 • LHV (MJ/Nm³): 7,18 • H₂/CO: 0,80 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 0,55 • CO: 1,60 • CO₂: 18,75 • GY: 4,46 • LHV: 1,25 • H₂/CO: 3,75 	0,2306
H ₂ /CO (Máx)	PP + Carvão de Pêssego	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 10,10 • CO (%): 8,18 • CO₂ (%): 15,26 • GY (Nm³/kg): 1,35 • LHV (MJ/Nm³): 3,36 • H₂/CO: 1,24 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 5,05 • CO: 10,27 • CO₂: 2,29 • GY: 4,44 • LHV: 6,55 • H₂/CO: 0,81 	0,4345

Fonte: O autor (2025).

Tabela 12 – Comparativo dos Resultados de Otimização da produção de H₂ com os Simulados para cada tipo de plástico

Alvo	Par	Predição da Simulação	Erro Relativo (%)	RMSE
PE	PE + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 26,75 • CO (%): 28,16 • CO₂ (%): 1,46 • GY (Nm³/kg): 3,01 • LHV (MJ/Nm³): 6,61 • H₂/CO: 0,95 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 1,76 • CO: 1,24 • CO₂: 6,16 • GY: 1,99 • LHV: 1,66 • H₂/CO: 5,26 	0,2496
PP	PP + Casca de Durião	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 28,18 • CO (%): 25,21 • CO₂ (%): 0,24 • GY (Nm³/kg): 4,30 • LHV (MJ/Nm³): 6,59 • H₂/CO: 1,12 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 0,35 • CO: 1,03 • CO₂: 45,83 • GY: 0,47 • LHV: 0,61 • H₂/CO: 7,14 	0,1282
PS	PS + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 25,29 • CO (%): 27,86 • CO₂ (%): 2,38 • GY (Nm³/kg): 2,67 • LHV (MJ/Nm³): 6,37 • H₂/CO: 0,91 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 4,47 • CO: 2,40 • CO₂: 5,46 • GY: 0,37 • LHV: 0,31 • H₂/CO: 7,69 	0,5383
PET	PET + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 25,10 • CO (%): 24,54 • CO₂ (%): 4,58 • GY (Nm³/kg): 2,17 • LHV (MJ/Nm³): 5,88 • H₂/CO: 1,02 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 6,57 • CO: 0,45 • CO₂: 8,52 • GY: 2,76 • LHV: 2,89 • H₂/CO: 9,80 	0,6980
PU	PU + Casca de Algodão	<ul style="list-style-type: none"> • H₂ (%): 25,55 • CO (%): 28,96 • CO₂ (%): 1,82 • GY (Nm³/kg): 2,81 • LHV (MJ/Nm³): 6,56 • H₂/CO: 0,88 	<ul style="list-style-type: none"> • H₂: 4,89 • CO: 0,90 • CO₂: 5,49 • GY: 5,69 • LHV: 2,29 • H₂/CO: 7,95 	0,5304

Fonte: O autor (2025).

5.4. Limitações e Domínio de Aplicabilidade

A estrutura proposta baseia-se em simulações de equilíbrio e de equilíbrio restrito para a geração do conjunto de dados utilizado no treinamento dos modelos de aprendizado de máquina. Conforme amplamente reportado na literatura de gaseificação, tais abordagens não consideram explicitamente limitações cinéticas, formação de alcatrão, hidrodinâmica do reator ou perdas de calor e, portanto, podem superestimar os rendimentos de H₂ e CO sob condições

idealizadas, especialmente fora de regimes de alta temperatura (Ayorloo et al., 2022b; Ranjan et al., 2023).

Consequentemente, o modelo XGBoost desenvolvido neste estudo não representa o comportamento real de um reator, mas atua como um modelo substituto computacionalmente eficiente da superfície de resposta termodinâmica do PRO/II, preservando tendências fisicamente consistentes e viabilizando a exploração sistemática de cenários, análises de interpretabilidade e otimização em um amplo espaço operacional (Ascher; Wang et al., 2022; Qi et al., 2024).

Para evitar previsões extrapolativas, todos os resultados de otimização foram explicitamente restritos ao domínio de aplicabilidade do modelo, verificado por meio de um critério baseado na distância de Mahalanobis com nível de confiança de 99 %. Assim, a estrutura proposta deve ser interpretada como uma ferramenta de apoio ao projeto e de triagem para estudos de co-gaseificação orientados à produção de hidrogênio, e não como um substituto direto para validação experimental ou predição em escala industrial.

6. CONCLUSÃO

Este estudo demonstra a viabilidade de uma estrutura integrada que acopla modelagem computacional de processos (AVEVA PRO/II™) com aprendizado de máquina (XGBoost) para prever com precisão parâmetros de gaseificação para misturas biomassa-plástico. Os modelos preditivos alcançaram valores de R^2 acima de 0,98 no conjunto de teste (out-of-sample), indicando robustez e capacidade de generalização dentro do domínio operacional explorado. A análise SHAP esclareceu os fatores determinantes: razão de equivalência, temperatura e teor de hidrogênio são os principais motores da formação de H_2 , enquanto carbono fixo e carbono total desempenham papéis decisivos na geração de CO. A análise também revelou relações estruturais entre descritores da análise imediata e elementar, consistentes com a interdependência inerente dos dados composicionais.

Na prática, a estrutura proposta apoia o delineamento de cenários para co-gaseificação conduzida com ar, permitindo explorar combinações de matérias-primas e condições operacionais que maximizem a produção de H_2 e aprimorem a qualidade do gás de síntese. No entanto, limitações intrínsecas ao uso de dados simulados e às suposições simplificadoras do modelo de equilíbrio termodinâmico indicam que esses resultados devem ser interpretados como complementares às evidências experimentais, e não como predições exatas em escala industrial. Trabalhos futuros irão incorporar conjuntos de dados experimentais em maior escala

para ampliar a representatividade física, refinar a aplicabilidade sob restrições industriais e submeter os modelos a testes mais rigorosos em janelas operacionais expandidas e portfólios mais amplos de matérias-primas.

Disponibilidade dos dados. Os dados utilizados no treinamento, validação e teste do algoritmo também estão disponíveis no repositório GitHub Biomass_Plastic_Syngas_Model, em: https://github.com/VictorHXB/Biomass_Plastic_Syngas_Model.git.

Agradecimentos. Este estudo foi financiado em parte pela Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) – Brasil – Código de Financiamento 001. Os autores também agradecem o apoio financeiro da Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de Minas Gerais (FAPEMIG).

REFERÊNCIAS

ABDELRAHIM, Ashraf; BRACHI, Paola; RUOPPOLO, Giovanna; FRAIA, Simona Di; VANOLI, Laura. **Experimental and Numerical Investigation of Biosolid Gasification: Equilibrium-Based Modeling with Emphasis on the Effects of Different Pretreatment Methods.** *In: Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 59, n° 1, p. 299–307, 2020. ISSN: 0888-5885, DOI: 10.1021/acs.iecr.9b03902.

AJORLOO, Mojtaba; GHODRAT, Maryam; SCOTT, Jason; STREZOV, Vladimir. **Modelling and statistical analysis of plastic biomass mixture co-gasification.** *In: Energy*, v. 256, p. 124638, 2022a. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2022.124638.

_____. **Recent advances in thermodynamic analysis of biomass gasification: A review on numerical modelling and simulation.** *In: Journal of the Energy Institute*, v. 102, p. 395–419, 2022b. ISSN: 17439671, DOI: 10.1016/j.joei.2022.05.003.

_____. **Experimental analysis of the effects of feedstock composition on the plastic and biomass Co-gasification process.** *In: Renewable Energy*, v. 231, p. 120960, 2024. ISSN: 09601481, DOI: 10.1016/j.renene.2024.120960.

ALI, M.M.; KAJEE-BAGDADI, Z. **A local exploration-based differential evolution algorithm for constrained global optimization.** *In: Applied Mathematics and Computation*, v. 208, n° 1, p. 31–48, 2009. ISSN: 00963003, DOI: 10.1016/j.amc.2008.11.036.

ALLIANCE TO END PLASTIC WASTE, Roland Berger. **The Plastic Waste Management Framework. White paper by Roland Berger for the Alliance to End Plastic Waste.** 2023. Disponível em: <<https://endplasticwaste.org/en/our-stories/the-plastic-waste-management-framework>>. Acesso em: 24/set./25

AL-SALEM, S. M.; LETTIERI, P.; BAEYENS, J. **Recycling and recovery routes of plastic solid waste (PSW): A review.** *In: Waste Management*, v. 29, n° 10, p. 2625–2643, 2009. ISSN: 0956053X, DOI: 10.1016/j.wasman.2009.06.004.

ANEEL - AGÊNCIA NACIONAL DE ENERGIA ELÉTRICA. **Atlas de Energia Elétrica do Brasil**. 3 ed. Brasília, DF: TDA Comunicação, 2008. 233 p. ISBN: 9788587491107.

AQUIB ANSARI, Mohd; SINGH, Dushyant Kumar. **A Review of Machine Learning Approaches for Human Detection through Feature Based Classification**. *In: International Journal of Computing and Digital Systems*, v. 12, n° 1, p. 569–586, 2022. ISSN: 2210142X, DOI: 10.12785/ijcds/120146.

ARENA, Umberto. **Process and technological aspects of municipal solid waste gasification. A review**. *In: Waste Management*, v. 32, n° 4, p. 625–639, 2012. ISSN: 0956053X, DOI: 10.1016/j.wasman.2011.09.025.

ASCHER, Simon; SLOAN, William; WATSON, Ian; YOU, Siming. **A comprehensive artificial neural network model for gasification process prediction**. *In: Applied Energy*, v. 320, 2022. ISSN: 03062619, DOI: 10.1016/j.apenergy.2022.119289.

ASCHER, Simon; WANG, Xiaonan; WATSON, Ian; SLOAN, William; YOU, Siming. **Interpretable machine learning to model biomass and waste gasification**. *In: Bioresource Technology*, v. 364, p. 128062, 2022. ISSN: 09608524, DOI: 10.1016/j.biortech.2022.128062.

ASCHER, Simon; WATSON, Ian; YOU, Siming. **Machine learning methods for modelling the gasification and pyrolysis of biomass and waste**. *In: Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 155, p. 111902, 2022. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2021.111902.

AUSFELDER, Florian; BAZZANELLA, Alexis. **Hydrogen Science and Engineering: Materials, Processes, Systems and Technology**. *In: Hydrogen science and engineering: materials, processes, systems and technology*, p. 19–40, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1002/9783527674268.ch02>.

AYDIN, Ebubekir Siddik; YUCEL, Ozgun; SADIKOGLU, Hasan. **Development of a semi-empirical equilibrium model for downdraft gasification systems**. *In: Energy*, v. 130, p. 86–98, 2017. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2017.04.132.

BARBOSA, Anderson Henrique; FREITAS, Marcílio Sousa da Rocha;; NEVES, Francisco de Assis Das. **Confiabilidade estrutural utilizando o método de Monte Carlo e redes neurais.** *In: Revista Escola de Minas*, v. 58, p. 247–255, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0370-44672005000300011>.

BARROS, Thiago Vinícius; LOPEZ, Guilherme de Souza; SANTOS, Renivaldo José Dos; PARIZI, Marcela Prado Silva; CARDOZO-FILHO, Lucio; FERREIRA-PINTO, Leandro. **Gaseificação da Biomassa em Água Supercrítica como Tecnologia de Produção de Hidrogênio.** *In: Research, Society and Development*, v. 11, nº 9, 2022. DOI: 10.33448/rsd-v11i9.31296.

BARUAH, Dipal; BARUAH, D. C. **Modeling of biomass gasification: A review.** *In: Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 39, p. 806–815, 2014. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2014.07.129.

BASHIR, Muhammad Aamir; JI, Tuo; WEIDMAN, Jennifer; SOONG, Yee; GRAY, McMahan; SHI, Fan; WANG, Ping. **Plastic waste gasification for low-carbon hydrogen production: a comprehensive review.** *In: Energy Advances*, v. 4, nº 3, p. 330–363, 2025. ISSN: 27531457, DOI: 10.1039/d4ya00292j.

BENTÉJAC, Candice; CSÖRGŐ, Anna; MARTÍNEZ-MUÑOZ, Gonzalo. **A Comparative Analysis of XGBoost.** *In: ArXiv abs*, 2019. DOI: 10.1007/s10462-020-09896-5. Disponível em: <<http://arxiv.org/abs/1911.01914>>.

BHURSE, Roshan R.; GOPE, Prabuddha P.; YADAV, Himanshu; PRASAD, Kartik R.; CHAURASIA, Ashish S. **Syngas and hydrogen production from co-gasification of rice husk biomass and plastic waste mixture using Aspen Plus.** *In: Environment, Development and Sustainability*, v. 27, nº 7, p. 16033–16052, 2025. ISSN: 15732975, DOI: 10.1007/s10668-024-04571-z.

BIAGINI, Enrico; BARONTINI, Federica; TOGNOTTI, Leonardo. **Development of a bi-equilibrium model for biomass gasification in a downdraft bed reactor.** *In: Bioresource Technology*, v. 201, p. 156–165, 2016. ISSN: 18732976, DOI: 10.1016/j.biortech.2015.11.057.

BLOCK, C.; EPHRAIM, A.; WEISS-HORTALA, E.; MINH, D. Pham; NZIHOU, A.; VANDECASTEELE, C. **Co-pyrogasification of Plastics and Biomass, a Review.** *In: Waste and Biomass Valorization*, v. 10, n° 3, p. 483–509, 2019. ISSN: 1877265X, DOI: 10.1007/s12649-018-0219-8.

CAO, Changqing; BIAN, Ce; WANG, Gaoyun; BAI, Bin; XIE, Yupeng; JIN, Hui. **Co-gasification of plastic wastes and soda lignin in supercritical water.** *In: Chemical Engineering Journal*, v. 388, p. 124277, 2020. ISSN: 13858947, DOI: 10.1016/j.cej.2020.124277.

CASONI, Andrés I.; GUTIERREZ, Victoria S.; VOLPE, María A. **Conversion of sunflower seed hulls, waste from edible oil production, into valuable products.** *In: Journal of Environmental Chemical Engineering*, v. 7, n° 1, 2019. ISSN: 22133437, DOI: 10.1016/j.jece.2019.102893.

CHAE, Ho Jin; KIM, Jin Ho; LEE, Soo Chool; KIM, Hyo Sik; JO, Seong Bin; RYU, Jae Hong; KIM, Tae Young; LEE, Chul Ho; KIM, Se Jeong; KANG, Suk Hwan; KIM, Jae Chang; PARK, Myung June. **Catalytic technologies for CO hydrogenation for the production of light hydrocarbons and middle distillates.** *In: Catalysts*, v. 10, n° 1, 2020. ISSN: 20734344, DOI: 10.3390/catal10010099.

CHAIWONG, K.; KIATSIRIROAT, T.; VORAYOS, N.; THARARAX, C. **Study of bio-oil and bio-char production from algae by slow pyrolysis.** *In: Biomass and Bioenergy*, v. 56, p. 600–606, 2013. ISSN: 09619534, DOI: 10.1016/j.biombioe.2013.05.035.

CHAMPION, Wyatt M.; COOPER, C. David; MACKIE, Kevin R.; CAIRNEY, Paul. **Development of a chemical kinetic model for a biosolids fluidized-bed gasifier and the effects of operating parameters on syngas quality.** *In: Journal of the Air and Waste Management Association*, v. 64, n° 2, p. 160–174, 2014. ISSN: 21622906, DOI: 10.1080/10962247.2013.845619.

CHANNIWALA, S A; PARIKH, P P. **A unified correlation for estimating HHV of solid, liquid and gaseous fuel.** *In: Fuel*, v. 81, n° 8, p. 1051–1063, 2002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0016-2361\(01\)00131-4](https://doi.org/10.1016/S0016-2361(01)00131-4). Disponível em: <<http://www.fuel>>.

CHAWDHURY, M. A.; MAHKAMOV, K. **Development of a Small Downdraft Biomass Gasifier for Developing Countries.** *In: Journal of Scientific Research*, v. 3, n° 1, p. 51, 2010. ISSN: 2070-0237, DOI: 10.3329/jsr.v3i1.5613.

CHE, D., Liu, Q.; RASHEED, K.; TAO, X. **Decision tree and ensemble learning algorithms with their applications in bioinformatics.** *In: Software tools and algorithms for biological systems. Advances in Experimental Medicine and Biology*, New York, NY, p. 191–199, 2011. ISBN: 978-1-4419-7045-9, DOI: 10.1007/978-1-4419-7046-6. Disponível em: <<https://link.springer.com/10.1007/978-1-4419-7046-6>>.

CHEN, Heng; LU, Di; AN, Jizhen; QIAO, Shichao; DONG, Yuehong; JIANG, Xue; XU, Gang; LIU, Tong. **Thermo-Economic analysis of a novel biomass Gasification-Based power system integrated with a supercritical CO₂ cycle and a Coal-Fired power plant.** *In: Energy Conversion and Management*, v. 266, 2022. ISSN: 01968904, DOI: 10.1016/j.enconman.2022.115860.

CHEN, Shen; MENG, Aihong; LONG, Yanqiu; ZHOU, Hui; LI, Qinghai; ZHANG, Yanguo. **TGA pyrolysis and gasification of combustible municipal solid waste.** *In: Journal of the Energy Institute*, v. 88, n° 3, p. 332–343, 2015. ISSN: 17460220, DOI: 10.1016/j.joei.2014.07.007.

CHEN, Tianqi; GUESTRIN, Carlos. **XGBoost: A scalable tree boosting system.** *In: Proceedings of the ACM SIGKDD International Conference on Knowledge Discovery and Data Mining*, p. 785–794, 2016. ISBN: 9781450342322, DOI: 10.1145/2939672.2939785.

CHENG, Yi; EKICI, Ecrin; YILDIZ, Güray; YANG, Yang; COWARD, Brad; WANG, Jiawei. **Applied machine learning for prediction of waste plastic pyrolysis towards valuable fuel and chemicals production.** *In: Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, v. 169, p. 105857, 2023. ISSN: 01652370, DOI: 10.1016/j.jaap.2023.105857.

CHO, Min-Hwan; MUN, Tae-Young; KIM, Joo-Sik. **Production of low-tar producer gas from air gasification of mixed plastic waste in a two-stage gasifier using olivine combined with activated carbon.** *In: Energy*, v. 58, p. 688–694, 2013. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2013.06.021.

CHOI, Min Jun; JEONG, Yong Seong; KIM, Joo Sik. **Air gasification of polyethylene terephthalate using a two-stage gasifier with active carbon for the production of H₂ and CO.** *In: Energy*, v. 223, 2021. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2021.120122.

CIUFFI, Benedetta; CHIARAMONTI, David; RIZZO, Andrea Maria; FREDIANI, Marco; ROSI, Luca. **A critical review of SCWG in the context of available gasification technologies for plastic waste.** *In: Applied Sciences (Switzerland)*, v. 10, n° 18, 2020. ISSN: 20763417, DOI: 10.3390/APP10186307.

DASHTI, Amir; NOUSHABADI, Abolfazl Sajadi; RAJI, Mojtaba; RAZMI, Amir; CEYLAN, Selim; MOHAMMADI, Amir H. **Estimation of biomass higher heating value (HHV) based on the proximate analysis: Smart modeling and correlation.** *In: Fuel*, v. 257, 2019. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2019.115931.

DEVASAHAYAM, Sheila; ALBIJANIC, Boris. **Predicting hydrogen production from co-gasification of biomass and plastics using tree based machine learning algorithms.** *In: Renewable Energy*, v. 222, p. 119883, 2024. ISSN: 09601481, DOI: 10.1016/j.renene.2023.119883.

DHRIOUA, Maryem; GHACHEM, Kaouther; HASSEN, Walid; GHAZY, Ahmed; KOLSI, Lioua; BORJINI, Mohamed Naceur. **Simulation of Biomass Air Gasification in a Bubbling Fluidized Bed Using Aspen Plus: A Comprehensive Model Including Tar Production.** *In: ACS Omega*, v. 7, n° 37, p. 33518–33529, 2022. ISSN: 2470-1343, DOI: 10.1021/acsomega.2c04492.

EFREMOV, Cristina; LE, Thanh Tuan; PARAMASIVAM, Prabhu; RUDZKI, Krzysztof; OSMAN, Sameh Muhammad; CHAU, Thanh Hieu. **Improving syngas yield and quality from biomass/coal co-gasification using cooperative game theory and local interpretable model-agnostic explanations.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 96, p. 892–907, 2024. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.11.329.

ELMAZ, Furkan; YÜCEL, Özgün; MUTLU, Ali Yener. **Predictive modeling of biomass gasification with machine learning-based regression methods.** *In: Energy*, v. 191, 2020. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2019.116541.

ENCINAR, J. M.; GONZÁLEZ, J. F. **Pyrolysis of synthetic polymers and plastic wastes. Kinetic study.** *In: Fuel Processing Technology*, v. 89, n° 7, p. 678–686, 2008. ISSN: 03783820, DOI: 10.1016/j.fuproc.2007.12.011.

ERDEM, Kaan; GÜNDÜZ HAN, Duygu; MIDILLI, Adnan. **A parametric study on hydrogen production by fluidized bed co-gasification of biomass and waste plastics.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 52, p. 1434–1444, 2024. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.10.115.

ERKIAGA, Aitziber; LOPEZ, Gartzzen; AMUTIO, Mainer; BILBAO, Javier; OLAZAR, Martin. **Syngas from steam gasification of polyethylene in a conical spouted bed reactor.** *In: Fuel*, v. 109, p. 461–469, 2013. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2013.03.022.

FAZIL, A.; KUMAR, Sandeep; MAHAJANI, Sanjay M. **Downdraft co-gasification of high ash biomass and plastics.** *In: Energy*, v. 243, p. 123055, 2022. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2021.123055.

FUZIKI, Maria Eduarda Kounaris. **Estudo Comparativo do Gás Energético obtido pela Gaseificação de Biomassa em Reator de Leito Fluidizado Circulante Alotérmico e Autotérmico utilizando Modelo de Equilíbrio Não-Estequiométrico.** 2017. 86 p. Trabalho de Conclusão de Curso - Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Ponta Grossa, 2017.

GAGLIANO, Antonio; NOCERA, Francesco; PATANIA, Francesco; BRUNO, Maria; CASTALDO, Davide Giovanni. **A robust numerical model for characterizing the syngas composition in a downdraft gasification process.** *In: Comptes Rendus Chimie*, v. 19, n° 4, p. 441–449, 2016. ISSN: 18781543, DOI: 10.1016/j.crci.2015.09.019.

GAO, Xiaoyan; ZHANG, Yaning; BAO, Fubing; LI, Bingxi; ZHAO, Yijun; KE, Cunfeng; JIANG, Baocheng. **CFD modeling of sawdust gasification in a lab-scale entrained flow reactor based on char intrinsic kinetics. Part 1: Model development.** *In: Chemical Engineering and Processing - Process Intensification*, v. 125, p. 280–289, 2018. ISSN: 02552701, DOI: 10.1016/j.cep.2018.02.017.

GAO, Yali; WANG, Miao; RAHEEM, Abdul; WANG, Fuchen; WEI, Juntao; XU, Deliang; SONG, Xudong; BAO, Weina; HUANG, Ankui; ZHANG, Shu; ZHANG, Hong. **Syngas Production from Biomass Gasification: Influences of Feedstock Properties, Reactor Type, and Reaction Parameters.** *In: ACS Omega*, v. 8, n° 35, p. 31620–31631, 2023. ISSN: 2470-1343, DOI: 10.1021/acsomega.3c03050.

GARCÍA, Roberto; PIZARRO, Consuelo; LAVÍN, Antonio G.; BUENO, Julio L. **Characterization of Spanish biomass wastes for energy use.** *In: Bioresource Technology*, v. 103, n° 1, p. 249–258, 2012. ISSN: 09608524, DOI: 10.1016/j.biortech.2011.10.004.

GEORGE, Joel; ARUN, P.; MURALEEDHARAN, C. **Assessment of producer gas composition in air gasification of biomass using artificial neural network model.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 43, n° 20, p. 9558–9568, 2018. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2018.04.007.

GERBASE, Annelise Engel; REIS DE OLIVEIRA, Camila. **Reciclagem do Lixo de Informática: Uma Oportunidade para a Química.** *In: Química Nova*, v. 35, n° 7, p. 1486–1492, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422012000700035>.

GÉRON, Aurélien. **Hands-on machine learning with Scikit-Learn and TensorFlow: concepts, tools, and techniques to build intelligent systems.** 2 ed. Sebastopol, CA: O'Reilly Media, 2017.

GHARIBI, Amirreza; BABAZADEH, Reza; HASANZADEH, Rezgar. **Machine learning and multi-criteria decision analysis for polyethylene air-gasification considering energy and environmental aspects.** *In: Process Safety and Environmental Protection*, v. 183, p. 46–58, 2024. ISSN: 09575820, DOI: 10.1016/j.psep.2023.12.069.

GUO, Bing; LI, Dingkai; CHENG, Congming; LÜ, Zi-an; SHEN, Youting. **Simulation of biomass gasification with a hybrid neural network model.** *In: Bioresource Technology*, v. 76, n° 2, p. 77–83, 2001. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(00\)00106-1](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(00)00106-1).

GUO, Rui; ZHAO, Zhiqian; WANG, Tao; LIU, Guangheng; ZHAO, Jingyi; GAO, Dianrong. **Degradation state recognition of piston pump based on ICEEMDAN and XGBoost.** *In: Applied Sciences (Switzerland)*, v. 10, n° 18, 2020. ISSN: 20763417, DOI: 10.3390/APP10186593.

HALBA, Ankush; THENGANE, Sonal K.; ARORA, Pratham. **A Critical Outlook on Lignocellulosic Biomass and Plastics Co-Gasification: A Mini-Review.** *In: Energy & Fuels*, v. 37, n° 1, p. 19–35, 2023. ISSN: 0887-0624, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.2c02907.

HANTOKO, Dwi; YAN, Mi; PRABOWO, Bayu; SUSANTO, Herri; LI, Xiaodong; CHEN, Chong. **Aspen plus modeling approach in solid waste gasification.** *In: Current Developments in Biotechnology and Bioengineering: Waste Treatment Processes for Energy Generation.* [no place]: Elsevier, 2019. p. 259–281. ISBN: 9780444640833, DOI: 10.1016/B978-0-444-64083-3.00013-0.

HASTIE, Trevor; TIBSHIRANI, Robert; FRIEDMAN, Jerome. **The Elements of Statistical Learning.** 2 ed. Stanford, California: Springer, 2009.

HAWKINS, Douglas M. **The Problem of Overfitting.** *In: Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, v. 44, n° 1, p. 1–12, 2004. ISSN: 00952338, DOI: 10.1021/ci0342472.

HAYKIRI-ACMA, H.; YAMAN, S. **Thermogravimetric investigation on the thermal reactivity of biomass during slow pyrolysis.** *In: International Journal of Green Energy*, v. 6, n° 4, p. 333–342, 2009. ISSN: 15435075, DOI: 10.1080/15435070903106959.

HOPEWELL, Jefferson; DVORAK, Robert; KOSIOR, Edward. **Plastics recycling: Challenges and opportunities.** *In: Philosophical Transactions of the Royal Society B: Biological Sciences*, v. 364, n° 1526, p. 2115–2126, 2009. ISSN: 14712970, DOI: 10.1098/rstb.2008.0311.

ISLAM, Md Waliul. **Effect of different gasifying agents (steam, H₂O₂, oxygen, CO₂, and air) on gasification parameters.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 45, n° 56, p. 31760–31774, 2020. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2020.09.002.

JALILI, Mohammad; GHASEMPOUR, Roghayeh; AHMADI, Mohammad Hossein; CHITSAZ, Ata; HOLAGH, Shahriyar Ghazanfari. **An integrated CCHP system based on biomass and natural gas co-firing: Exergetic and thermo-economic assessments in the framework of energy nexus.** *In: Energy Nexus*, v. 5, 2022. ISSN: 27724271, DOI: 10.1016/j.nexus.2021.100016.

JANAJREH, Isam; ADEYEMI, Idowu; RAZA, Syed Shabbar; GHENAI, Chaouki. **A review of recent developments and future prospects in gasification systems and their modeling.** *In: Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 138, p. 110505, 2021. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2020.110505.

JAYAH, T. H.; AYE, Lu; FULLER, R. J.; STEWART, D. F. **Computer simulation of a downdraft wood gasifier for tea drying.** *In: Biomass and Bioenergy*, v. 25, n° 4, p. 459–469, 2003. ISSN: 09619534, DOI: 10.1016/S0961-9534(03)00037-0.

JENA, Monalisa; DEHURI, Satchidananda. **Decision tree for classification and regression: A state-of-the art review.** *In: Informatica (Slovenia)*, v. 44, n° 4, p. 405–420, 2020. ISSN: 18543871, DOI: 10.31449/INF.V44I4.3023.

JEONG, Yong-Seong; KIM, Jong-Woo; RA, Ho Won; SEO, Myung Won; MUN, Tae-Young; KIM, Joo-Sik. **Characteristics of Air Gasification of 10 Different Types of Plastic in a Two-Stage Gasification Process.** *In: ACS Sustainable Chemistry & Engineering*, v. 10, n° 14, p. 4705–4716, 2022. ISSN: 2168-0485, DOI: 10.1021/acssuschemeng.2c00251.

JORAPUR, Rajeev M; RAJVANSHI, Anil K. **Development of a sugarcane leaf gasifier for electricity generation.** *In: Biomass and Bioenergy*, v. 8, n° 2, p. 91–98, 1995. DOI: [https://doi.org/10.1016/0961-9534\(94\)00049-Y](https://doi.org/10.1016/0961-9534(94)00049-Y).

KAR, Supratik; ROY, Kunal; LESZCZYNSKI, Jerzy. **Applicability domain: A step toward confident predictions and decidability for QSAR modeling.** *In: Methods in Molecular Biology*. [no place]: Humana Press Inc., 2018. v. 1800, p. 141–169. ISSN: 10643745, DOI: 10.1007/978-1-4939-7899-1_6.

KAYDOUH, Marie Nour; HASSAN, Nissrine EL. **Thermodynamic simulation of the co-gasification of biomass and plastic waste for hydrogen-rich syngas production.** *In: Results in Engineering*, v. 16, 2022. ISSN: 25901230, DOI: 10.1016/j.rineng.2022.100771.

KERN, Stefan J.; PFEIFER, Christoph; HOFBAUER, Hermann. **Cogasification of Polyethylene and Lignite in a Dual Fluidized Bed Gasifier.** *In: Industrial & Engineering Chemistry Research*, v. 52, n° 11, p. 4360–4371, 2013. ISSN: 0888-5885, DOI: 10.1021/ie303453e.

KHUMALO, Nomadlozi Lucy; PATEL, Bilal. **Synergistic Effects of Biomass-polyethylene Co-gasification: A Simulation Approach.** *In: Periodica Polytechnica Chemical Engineering*, v. 69, n° 3, p. 445–456, 2025. ISSN: 15873765, DOI: 10.3311/PPch.39516.

KUMAR, Ajay; JONES, David D.; HANNA, Milford A. **Thermochemical biomass gasification: A review of the current status of the technology.** *In: Energies*, v. 2, n° 3, p. 556–581, 2009. ISSN: 19961073, DOI: 10.3390/en20300556.

KUMAR, Umesh; PAUL, Manosh C. **CFD modelling of biomass gasification with a volatile break-up approach.** *In: Chemical Engineering Science*, p. 413–422, 2019. ISSN: 00092509, DOI: 10.1016/j.ces.2018.09.038.

LAHAFFDOOZIAN, Mohammad; KHOSHKROUDMANSOURI, Hossein; ZEIN, Sharif H.; JALIL, A.A. **Hydrogen production from plastic waste: A comprehensive simulation and machine learning study.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 59, p. 465–479, 2024. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2024.01.326.

LARKIN, John; MACKEN, Nelson; SCHAFFER, Mark; ELKASABI, Yaseen; MULLEN, Charles A; BOATENG, Akwasi A; BJORNEBO, Lars; SPATARI, Sabrina. **A Process Simulation of Guayule Biorefining, including an Exergy Analysis.** *In: Energy Sustainability; American Society of Mechanical Engineers*, 2016. DOI: <https://doi.org/10.1115/ES2016-59084>. Acesso em: 28/jan./26.

LASA, Hugo De; SALAICES, Enrique; MAZUMDER, Jahirul; LUCKY, Rahima. **Catalytic steam gasification of biomass: Catalysts, thermodynamics and kinetics**. In: *Chemical Reviews*, v. 111, n° 9, p. 5404–5433, 2011. ISSN: 00092665, DOI: 10.1021/cr200024w.

LEE, Jae Chul; LEE, Hyeon Hui; JOO, Yong Jin; LEE, Chang Ha; OH, Min. **Process simulation and thermodynamic analysis of an IGCC (integrated gasification combined cycle) plant with an entrained coal gasifier**. In: *Energy*, v. 64, p. 58–68, 2014. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2013.11.069.

LEWIN, Caroline Smith; PRADELLE, Florian Alain Yannick. **Modelagem, simulação e otimização de um gaseificador de resíduos sólidos em operação co-corrente**. 2020. 125 p. Dissertação de Mestrado - Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2020.

LI, Jie; LI, Lanyu; TONG, Yen Wah; WANG, Xiaonan. **Understanding and optimizing the gasification of biomass waste with machine learning**. In: *Green Chemical Engineering*, v. 4, n° 1, p. 123–133, 2023. ISSN: 26669528, DOI: 10.1016/j.gce.2022.05.006.

LI, Jinhu; YE, Xinhao; BURRA, Kiran G.; LU, Wei; WANG, Zhiwei; LIU, Xuan; GUPTA, Ashwani K. **Synergistic effects during co-pyrolysis and co-gasification of polypropylene and polystyrene**. In: *Applied Energy*, v. 336, 2023. ISSN: 03062619, DOI: 10.1016/j.apenergy.2023.120750.

LI, Shouzhuang. **PET recycling via gasification-Influence of operating conditions on product distribution**. 2019. 84 p. Master's thesis - Aalto University, Gothenburg (Sweden), 2019. Disponível em: <<https://urn.fi/URN:NBN:fi:aalto-201908254879>>. Acesso em: 28/jan./26.

LIMA JÚNIOR, Gladson Euler. **Metamodelagem Kriging Dinâmica Aplicada em Trocadores de Calor**. 2019. 94 p. Dissertação de Mestrado - Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, 2019.

LIU, Zhibin; ZHAO, Chuankai; CAI, Longhao; LONG, Xinman. **Steady state modelling of steam-gasification of biomass for H₂-rich syngas production.** *In: Energy*, v. 238, 2022. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2021.121616.

LOHA, Chanchal; CHATTOPADHYAY, Himadri; CHATTERJEE, Pradip K. **Thermodynamic analysis of hydrogen rich synthetic gas generation from fluidized bed gasification of rice husk.** *In: Energy*, v. 36, n° 7, p. 4063–4071, 2011. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2011.04.042.

LOPEZ, Gartzzen; ARTETXE, Maite; AMUTIO, Maider; ALVAREZ, Jon; BILBAO, Javier; OLAZAR, Martin. **Recent advances in the gasification of waste plastics. A critical overview.** *In: Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 82, p. 576–596, 2018. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2017.09.032.

LOPEZ, Gartzzen; ERKIAGA, Aitziber; AMUTIO, Maider; BILBAO, Javier; OLAZAR, Martin. **Effect of polyethylene co-feeding in the steam gasification of biomass in a conical spouted bed reactor.** *In: Fuel*, v. 153, p. 393–401, 2015. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2015.03.006.

LORA, Electo Eduardo Silva; ANDRADE, Rubenildo Vieira; ÁNGEL, Juan Daniel Martinez; LEITE, Marco Antonio Haikal; ROCHA, Mateus Henrique; SALES, Cristina Ap^a. Vilas Bóas DE; AP^a. VILAS BÓAS GUALDRÓN; MENDOZA, Mónica Andrea Gualdrón; CORAL, Doris del Socorro Obando. **Gaseificação e pirólise para a conversão da biomassa em eletricidade e biocombustíveis.** *In: Biocombustíveis*. Rio de Janeiro: Integrada, 2012. v. 1, p. 411–498.

LUNDBERG, Scott M; ALLEN, Paul G; LEE, Su-In. **A Unified Approach to Interpreting Model Predictions.** *In: Advances in neural information processing systems*, v. 30, 2017. ISBN: 9781510860964, DOI: 10.5555/3295222.3295230. Acesso em: 28/jan./26.

LUNDBERG, Scott M.; ERION, Gabriel; CHEN, Hugh; DEGRAVE, Alex; PRUTKIN, Jordan M.; NAIR, Bala; KATZ, Ronit; HIMMELFARB, Jonathan; BANSAL, Nisha; LEE, Su-In. **From local explanations to global understanding with explainable AI for trees.** *In: Nature Machine Intelligence*, v. 2, n° 1, p. 56–67, 2020. ISSN: 2522-5839, DOI: 10.1038/s42256-019-0138-9.

MARCANTONIO, Vera; PAOLA, Luisa DI; FALCO, Marcello DE; CAPOCELLI, Mauro. **Modeling of Biomass Gasification: From Thermodynamics to Process Simulations.** *In: Energies*, v. 16, nº 20, 2023. ISSN: 19961073, DOI: 10.3390/en16207042.

MCKENDRY, Peter. **Energy production from biomass (part 2): conversion technologies.** *In: Bioresource technology*, v. v. 83, p. 47–54, 2002. DOI: [https://doi.org/10.1016/S0960-8524\(01\)00119-5](https://doi.org/10.1016/S0960-8524(01)00119-5).

MENG, Fanbin; MENG, Jun; ZHANG, Dalei. **Influence of higher equivalence ratio on the biomass oxygen gasification in a pilot scale fixed bed gasifier.** *In: Journal of Renewable and Sustainable Energy*, v. 10, nº 5, 2018. ISSN: 1941-7012, DOI: 10.1063/1.5040130.

MIRANDA, Mara Rúbia; CARDOSO, Cássia Regina; ATAÍDE, Carlos Henrique. **Physical and chemical characterization of sorghum bagasse.** *In: Materials Science Forum*, v. 727–728, p. 1683–1688, 2012. ISBN: 9783037854907, ISSN: 16629752, DOI: 10.4028/www.scientific.net/MSF.727-728.1683.

MISHRA, Rahul; ONG, Hwai Chyuan; LIN, Chi-Wen. **Progress on co-processing of biomass and plastic waste for hydrogen production.** *In: Energy Conversion and Management*, v. 284, p. 116983, 2023. ISSN: 01968904, DOI: 10.1016/j.enconman.2023.116983.

MOLINO, Antonio; LAROCCA, Vincenzo; CHIANESE, Simeone; MUSMARRA, Dino. **Biofuels production by biomass gasification: A review.** *In: Energies*, v. 11, nº 4, 2018. ISSN: 19961073, DOI: 10.3390/en11040811.

MONARD, Maria Carolina; BARANAUSKAS, José Augusto. **Conceitos sobre aprendizado de máquina, Sistemas Inteligentes, Fundamentos e Aplicações.** 1 ed. Barueri, SP: Manole Ltda, 2003a. v. 1, p. 39–56.

_____. **Indução de regras e árvores de decisão.** 1 ed. Barueri, SP: Editora Manole, 2003b. v. 1, p. 57–74.

NEME, Ibsa; GONFA, Girma; MASI, Chandran. **Preparation and characterization of activated carbon from castor seed hull by chemical activation with H₃PO₄**. In: *Results in Materials*, v. 15, 2022. ISSN: 2590048X, DOI: 10.1016/j.rinma.2022.100304.

NEMER, Leonardo Couceiro. **Modelagem do processo de gaseificação de biomassa empregando redes neuronais**. 2010. 65 p. Monografia - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2010.

NEVES, Daniel; THUNMAN, Henrik; MATOS, Arlindo; TARELHO, Luís; GÓMEZ-BAREA, Alberto. **Characterization and prediction of biomass pyrolysis products**. In: *Progress in Energy and Combustion Science*, v. 37, n° 5, p. 611–630, 2011. ISSN: 03601285, DOI: 10.1016/j.pecs.2011.01.001.

OLGUN, Hayati; OZDOGAN, Sibel; YINESOR, Guzide. **Results with a bench scale downdraft biomass gasifier for agricultural and forestry residues**. In: *Biomass and Bioenergy*, v. 35, n° 1, p. 572–580, 2011. ISSN: 09619534, DOI: 10.1016/j.biombioe.2010.10.028.

OZBAS, Emine Elmaslar; AKSU, Dogukan; ONGEN, Atakan; AYDIN, Muhammed Ali; OZCAN, H. Kurtulus. **Hydrogen production via biomass gasification, and modeling by supervised machine learning algorithms**. In: *International Journal of Hydrogen Energy*, v. 44, n° 32, p. 17260–17268, 2019. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2019.02.108.

PARAMASIVAM, Prabhu; ALRUQI, Mansoor; AĞBULUT, Ümit. **Experimental simulation and analysis of Acacia Nilotica biomass gasification with XGBoost and SHapley Additive Explanations to determine the importance of key features**. In: *Energy*, v. 327, 2025. ISSN: 18736785, DOI: 10.1016/j.energy.2025.136291.

PATRA, Tapas Kumar; SHETH, Pratik N. **Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-the-art review**. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 50, p. 583–593, 2015. ISSN: 18790690, DOI: 10.1016/j.rser.2015.05.012.

PAULA, Isabele Oliveira de. **Modelagem Termodinâmica e Otimização da Integração Energética de uma Planta Termelétrica de Ciclo Combinado com Sistema de Gaseificação**. 2025. 164 p. Tese de Doutorado - Universidade Estadual Paulista (Unesp), Ilha Solteira, SP, 2025.

PÉREZ-SANTÍN, Efrén; DE-LA-FUENTE-VALENTÍN, Luis; GARCÍA, Mariano González; BRAVO, Kharla Andreina Segovia; HERNÁNDEZ, Fernando Carlos López; SÁNCHEZ, José Ignacio López. **Applicability domains of neural networks for toxicity prediction**. In: *AIMS Mathematics*, v. 8, nº 11, p. 27858–27900, 2023. ISSN: 2473-6988, DOI: 10.3934/math.20231426.

PUIG-ARNAVAT, Maria; BRUNO, Joan Carles; CORONAS, Alberto. **Review and analysis of biomass gasification models**. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 14, nº 9, p. 2841–2851, 2010. ISSN: 13640321, DOI: 10.1016/j.rser.2010.07.030.

PUIG-GAMERO, M.; PIO, D.T.; TARELHO, L.A.C.; SÁNCHEZ, P.; SANCHEZ-SILVA, L. **Simulation of biomass gasification in bubbling fluidized bed reactor using aspen plus®**. In: *Energy Conversion and Management*, v. 235, p. 113981, 2021. ISSN: 01968904, DOI: 10.1016/j.enconman.2021.113981.

QI, Jingwei; WANG, Yijie; XU, Pengcheng; HU, Ming; HUHE, Taoli; LING, Xiang; YUAN, Haoran; CHEN, Yong. **Study on the Co-gasification characteristics of biomass and municipal solid waste based on machine learning**. In: *Energy*, v. 290, p. 130178, 2024. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2023.130178.

RAJASEKHAR REDDY, B.; VINU, R. **Feedstock Characterization for Pyrolysis and Gasification**. In: *Energy, Environment, and Sustainability*. [no place]: Springer Nature, 2018. p. 3–36. ISSN: 25228374, DOI: 10.1007/978-981-10-7335-9_1.

RAMBO, M. K.D.; SCHMIDT, F. L.; FERREIRA, M. M.C. **Analysis of the lignocellulosic components of biomass residues for biorefinery opportunities**. In: *Talanta*, v. 144, p. 696–703, 2015. ISSN: 00399140, DOI: 10.1016/j.talanta.2015.06.045.

RAMIREZ, Camila Silva Oliveira; GABRIEL DO AMARAL CRISPIM. **Avaliação comparativa entre as tecnologias químicas de gaseificação e pirólise aplicadas a resíduos plásticos**. 2022. 97 p. Trabalho de conclusão de curso - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2022.

RAMOS, Ana; MONTEIRO, Eliseu; SILVA, Valter; ROUBOA, Abel. **Co-gasification and recent developments on waste-to-energy conversion: A review**. In: *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 81, p. 380–398, 2018. ISSN: 18790690, DOI: 10.1016/j.rser.2017.07.025.

RANJAN, Nishant; YADAV, Narendra; SINGH, Harmanpreet; KUMAR, Sandeep; MAHAJANI, Sanjay M. **Modelling and simulation of autothermal downdraft co-gasification of biomass and plastic wastes using Aspen Plus**. In: *Energy Conversion and Management*, v. 297, p. 117714, 2023. ISSN: 01968904, DOI: 10.1016/j.enconman.2023.117714.

RAO, M. Mallikarjuna; BOTSA, Sathish Mohan; RAO, T. Prabhakara; GODDU, Srinivasa Rao; VIJAYASANTHI, C. **A comprehensive review on agricultural waste production and onsite management with circular economy opportunities**. In: *Discover Sustainability*, v. 5, nº 1, p. 288, 2024. ISSN: 2662-9984, DOI: 10.1007/s43621-024-00492-z.

RAUCH, Reinhard; HRBEK, Jitka; HOFBAUER, Hermann. **Biomass gasification for synthesis gas production and applications of the syngas**. In: *Wiley Interdisciplinary Reviews: Energy and Environment*, v. 3, nº 4, p. 343–362, 2014. ISSN: 2041840X, DOI: 10.1002/wene.97.

REY, J.R.C. **Avaliação Técnico-Econômica da Incorporação de Ciclos Combinados Associados à Gaseificadores de Leito Fluidizado Circulante no Setor Sucroalcooleiro**. 2018. 211 p. Tese de Doutorado - Universidade Estadual Paulista, Guaratinguetá, SP, 2018.

ROBINSON, T.; BRONSON, B.; GOGOLEK, P.; MEHRANI, P. **Comparison of the air-blown bubbling fluidized bed gasification of wood and wood–PET pellets**. In: *Fuel*, v. 178, p. 263–271, 2016. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2016.03.038.

RUMÃO, Adriano Sitônio. **Geração de Potência e Energia Elétrica a Partir da Gaseificação de Rejeitos de Biomassa**. 2013. 130 p. Tese de Doutorado - Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, PB, 2013.

SAHIGARA, Faizan; MANSOURI, Kamel; BALLABIO, Davide; MAURI, Andrea; CONSONNI, Viviana; TODESCHINI, Roberto. **Comparison of Different Approaches to Define the Applicability Domain of QSAR Models**. *In: Molecules*, v. 17, n° 5, p. 4791–4810, 2012. ISSN: 1420-3049, DOI: 10.3390/molecules17054791.

SALISU, Jamilu; GAO, Ningbo; QUAN, Cui; CHOI, Hang Seok; SONG, Qingbin. **Modeling of sustainable methanol production via integrated co-gasification of rice husk and plastic coupled with its prediction and optimization using machine learning and statistical-based models**. *In: Journal of the Energy Institute*, v. 120, 2025. ISSN: 17460220, DOI: 10.1016/j.joei.2025.102029.

SALISU, Jamilu; GAO, Ningbo; QUAN, Cui; YANIK, Jale; ARTIOLI, Nancy. **Co-gasification of rice husk and plastic in the presence of CaO using a novel ANN model-incorporated Aspen plus simulation**. *In: Journal of the Energy Institute*, v. 108, p. 101239, 2023. ISSN: 17439671, DOI: 10.1016/j.joei.2023.101239.

SAMADI, Seyed Hashem; GHOBADIAN, Barat; NOSRATI, Mohsen. **Prediction and estimation of biomass energy from agricultural residues using air gasification technology in Iran**. *In: Renewable Energy*, v. 149, p. 1077–1091, 2020. ISSN: 18790682, DOI: 10.1016/j.renene.2019.10.109.

SANSANIWAL, S. K.; PAL, K.; ROSEN, M. A.; TYAGI, S. K. **Recent advances in the development of biomass gasification technology: A comprehensive review**. *In: Renewable and Sustainable Energy Reviews*, v. 72, p. 363–384, 2017. ISSN: 18790690, DOI: 10.1016/j.rser.2017.01.038.

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**. *In: Fuel*, v. 266, p. 117021, 2020. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2020.117021.

SEZER, Senem; ÖZVEREN, Uğur. **Investigation of syngas exergy value and hydrogen concentration in syngas from biomass gasification in a bubbling fluidized bed gasifier by using machine learning.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 46, n° 39, p. 20377–20396, 2021. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2021.03.184.

SHALEV-SHWARTZ, S.; BEN-DAVID, S. **Understanding Machine Learning: From Theory to Algorithms.** *In: Cambridge University Press.* New York, NY: Cambridge University Press, 2014. 424 p. ISBN: 978-1-107-05713-5.

SIKARWAR, Vineet Singh; ZHAO, Ming; FENNELL, Paul S.; SHAH, Nilay; ANTHONY, Edward J. **Progress in biofuel production from gasification.** *In: Progress in Energy and Combustion Science*, v. 61, p. 189–248, 2017. ISSN: 03601285, DOI: 10.1016/j.pecs.2017.04.001.

SILVA, Julyane Carolina; OLIVEIRA, André Magno De; PIRES, Pedro Henrique; SILVA, Thuanye Peixoto; RODRIGUES, Márcia. **Reciclagem Energética: Uma Solução Inovadora para o Plástico Não Reciclável.** *In: e-xacta*, v. 4, n° 2, p. 87–96, 2011. ISSN: 1984-3151, DOI: <https://doi.org/10.18674/exacta.v4i2.346>.

SILVEIRA, Rafael Rodrigues. **Modelagem e Simulação de um Gaseificador de Biomassa.** 2022. 117 p. Trabalho de Conclusão de Curso - Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, 2022.

SOLANES, Aleix; RADUA, Joaquim. **Advances in Using MRI to Estimate the Risk of Future Outcomes in Mental Health - Are We Getting There?** *In: Frontiers in Psychiatry*, v. 13, 2022. ISSN: 16640640, DOI: 10.3389/fpsyt.2022.826111.

SPINACÉ, Márcia Aparecida da Silva; PAOLI, Marco Aurelio De. **A Tecnologia da Reciclagem de Polímeros.** *In: Química Nova*, v. 28, n° 1, p. 65–72, 2005. DOI: <https://doi.org/10.1590/S0100-40422005000100014>.

TIAN, Wende; ZHANG, Shuming; WANG, Shaochen; LIU, Bin; CUI, Zhe. **Biomass and waste plastics chemical looping co-gasification for hydrogen-electricity-DME conservation and recycling based on machine learning**. In: *Energy*, v. 318, p. 134868, 2025. ISSN: 03605442, DOI: 10.1016/j.energy.2025.134868.

TURMINA, Ágata Gloger. **Aprendizado de máquina aplicado à análise da operação de uma planta piloto para gaseificação de carvão mineral**. 2021. 81 p. Trabalho de conclusão de curso - Universidade Federal do Pampa, Bagé, RS, 2021.

UNITED NATIONS ENVIRONMENT PROGRAMME. **Global Waste Management Outlook 2024: Beyond an age of waste – Turning rubbish into a resource**. In: *UNEP*. 2024. Disponível em: <<https://www.unep.org/resources/global-waste-management-outlook-2024>>. Acesso em: 24/set./25

USAMA, Muhammad; QADIR, Junaid; RAZA, Aunn; ARIF, Hunain; YAU, Kok Lim Alvin; ELKHATIB, Yehia; HUSSAIN, Amir; AL-FUQAHA, Ala. **Unsupervised Machine Learning for Networking: Techniques, Applications and Research Challenges**. In: *IEEE Access*, v. 7, p. 65579–65615, 2019. ISSN: 21693536, DOI: 10.1109/ACCESS.2019.2916648.

VASSILEV, Stanislav V.; BAXTER, David; ANDERSEN, Lars K.; VASSILEVA, Christina G. **An Overview of the Chemical Composition of Biomass**. In: *Fuel*, v. 89, n° 5, p. 913–933, 2010. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2009.10.022.

VIRTANEN, Pauli; GOMMERS, Ralf; OLIPHANT, Travis E.; HABERLAND, Matt; REDDY, Tyler; COURNAPEAU, David; BUROVSKI, Evgeni; PETERSON, Pearu; WECKESSER, Warren; BRIGHT, Jonathan; WALT, Stéfan J. VAN DER; BRETT, Matthew; WILSON, Joshua; MILLMAN, K. Jarrod; MAYOROV, Nikolay; NELSON, Andrew R.J.; JONES, Eric; KERN, Robert; LARSON, Eric; CAREY, C. J.; POLAT, İlhan; FENG, Yu; MOORE, Eric W.; VANDERPLAS, Jake; LAXALDE, Denis; PERKTOLD, Josef; CIMRMAN, Robert; HENRIKSEN, Ian; QUINTERO, E. A.; HARRIS, Charles R.; ARCHIBALD, Anne M.; RIBEIRO, Antônio H.; PEDREGOSA, Fabian; MULBREGT, Paul VAN; VIJAYKUMAR, Aditya; BARDELLI, Alessandro Pietro; ROTHBERG, Alex; HILBOLL, Andreas; KLOECKNER, Andreas; SCOPATZ, Anthony; LEE, Antony; ROKEM, Ariel; WOODS, C. Nathan; FULTON, Chad; MASSON, Charles; HÄGGSTRÖM, Christian; FITZGERALD, Clark; NICHOLSON, David A.; HAGEN, David R.; PASECHNIK, Dmitrii V.; OLIVETTI, Emanuele;

MARTIN, Eric; WIESER, Eric; SILVA, Fabrice; LENDERS, Felix; WILHELM, Florian; YOUNG, G.; PRICE, Gavin A.; INGOLD, Gert Ludwig; ALLEN, Gregory E.; LEE, Gregory R.; AUDREN, Hervé; PROBST, Irvin; DIETRICH, Jörg P.; SILTERRA, Jacob; WEBBER, James T.; SLAVIČ, Janko; NOTHMAN, Joel; BUCHNER, Johannes; KULICK, Johannes; SCHÖNBERGER, Johannes L.; MIRANDA CARDOSO, José Vinícius DE; REIMER, Joscha; HARRINGTON, Joseph; RODRÍGUEZ, Juan Luis Cano; NUNEZ-IGLESIAS, Juan; KUCZYNSKI, Justin; TRITZ, Kevin; THOMA, Martin; NEWVILLE, Matthew; KÜMMERER, Matthias; BOLINGBROKE, Maximilian; TARTRE, Michael; PAK, Mikhail; SMITH, Nathaniel J.; NOWACZYK, Nikolai; SHEBANOV, Nikolay; PAVLYK, Oleksandr; BRODTKORB, Per A.; LEE, Perry; MCGIBBON, Robert T.; FELDBAUER, Roman; LEWIS, Sam; TYGIER, Sam; SIEVERT, Scott; VIGNA, Sebastiano; PETERSON, Stefan; MORE, Surhud; PUDLIK, Tadeusz; OSHIMA, Takuya; PINGEL, Thomas J.; ROBITAILLE, Thomas P.; SPURA, Thomas; JONES, Thouis R.; CERA, Tim; LESLIE, Tim; ZITO, Tiziano; KRAUSS, Tom; UPADHYAY, Utkarsh; HALCHENKO, Yaroslav O.; VÁZQUEZ-BAEZA, Yoshiki. **SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python**. In: *Nature Methods*, v. 17, n° 3, p. 261–272, 2020. ISSN: 15487105, DOI: 10.1038/s41592-019-0686-2.

VITIDSANT, Tharapong; CHAIPRASERT, Pattaraporn. **Promotion of Coconut Shell Gasification by Steam Reforming on Nickel-Dolomite**. In: *American Journal of Applied Sciences*, v. 6, n° 2, p. 332–336, 2009. ISSN: 1554-3641.

VOLTOLINI, Leonardo; LIMA, Fernando Arrais Romero Dias; REBELLO, Carine Menezes; ITABAIANA JR., Ivaldo; NOGUEIRA, Idelfonso B.R.; SECCHI, Argimiro Resende; SOUZA JR., Maurício B. DE. **Machine learning framework to predict product distribution of lignocellulosic biomass pyrolysis**. In: *Bioresource Technology*, v. 434, p. 132746, 2025. ISSN: 09608524, DOI: 10.1016/j.biortech.2025.132746.

WADE, Corey. **Hands-On Gradient Boosting with XGBoost and scikit-learn: Perform accessible machine learning and extreme gradient boosting with Python**. 1st ed. Birmingham-UK: Packt Publishing Limited, 2020. 1–310 p.

WADE, Corey.; GLYNN, Kevin. **Hands-On Gradient Boosting with XGBoost and scikit-learn: Perform accessible machine learning and extreme gradient boosting with Python**. Birmingham: Packt Publishing, 2020. v. 1. ISBN: 9781839218354.

WUEST, Thorsten; WEIMER, Daniel; IRGENS, Christopher; THOBEN, Klaus Dieter. **Machine learning in manufacturing: Advantages, challenges, and applications.** *In: Production and Manufacturing Research*, v. 4, n° 1, p. 23–45, 2016. ISSN: 21693277, DOI: 10.1080/21693277.2016.1192517.

XUE, Peixuan; CHEN, Tianlang; HUANG, Xiehan; HU, Qiang; HU, Junhao; ZHANG, Han; YANG, Haiping; CHEN, Hanping. **Prediction of syngas properties of biomass steam gasification in fluidized bed based on machine learning method.** *In: International Journal of Hydrogen Energy*, v. 49, p. 356–370, 2024. ISSN: 03603199, DOI: 10.1016/j.ijhydene.2023.08.259.

YIN C. Y. **Prediction of higher heating values of biomass from proximate and ultimate analyses.** *In: Fuel*, v. 90, n° 3, p. 1128–1132, 2011. ISSN: 00162361, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.fuel.2010.11.031>.

YOU, Siming; OK, Yong Sik; TSANG, Daniel C.W.; KWON, Eilhann E.; WANG, Chi Hwa. **Towards practical application of gasification: a critical review from syngas and biochar perspectives.** *In: Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, v. 48, n° 22–24, p. 1165–1213, 2018. ISSN: 15476537, DOI: 10.1080/10643389.2018.1518860.

ZHANG, Yuming; WAN, Lifeng; GUAN, Juntao; XIONG, Qing'An; ZHANG, Shu; JIN, Xin. **A Review on Biomass Gasification: Effect of Main Parameters on Char Generation and Reaction.** *In: Energy and Fuels*, v. 34, n° 11, p. 13438–13455, 2020. ISSN: 15205029, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.0c02900.

ZINLA, Désiré; GBAHA, Prosper; KOFFI, Paul Magloire E.; KOUA, Blaise K. **Characterization of rice, coffee and cocoa crops residues as fuel of thermal power plant in Côte d'Ivoire.** *In: Fuel*, v. 283, 2021. ISSN: 00162361, DOI: 10.1016/j.fuel.2020.119250.

Plastics Europe. Plastics – the Facts 2022. *In: Plastics Europe*. 2022. Disponível em: <https://plasticseurope.org/knowledge-hub/plastics-the-facts-2022/>. Acesso em: 24/set./25