



ESTUDO COMPUTACIONAL DA GASEIFICAÇÃO DE BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR EM UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO

Gabriel Lisbôa Verissimo

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Mecânica.

Orientadores: Albino José Kalab Leiroz

Manuel Emani de Carvalho Cruz

Rio de Janeiro

Março de 2014

ESTUDO COMPUTACIONAL DA GASEIFICAÇÃO DE BAGAÇO DE CANA-DE-
AÇÚCAR EM UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO

Gabriel Lisboa Verissimo

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM
ENGENHARIA MECÂNICA.

Examinada por:

Prof. Albino José Kalab Leiroz, Ph.D.

Prof. Manuel Ernani de Carvalho Cruz, Ph.D.

Prof. Amaro Gomes Barreto Jr., D.Sc.

Prof. Rodrigo Otávio de Castro Guedes, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL

MARÇO DE 2014

Verissimo, Gabriel Lisbôa

Estudo Computacional da Gaseificação de Bagaço de Cana-de-Açúcar em um Reator de Leito Fluidizado/ Gabriel Lisbôa Verissimo. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2014.

XXIV, 223 p.: il.; 29,7 cm.

Orientador: Albino José Kalab Leiroz

Manuel Ermani de Carvalho Cruz

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Mecânica, 2014.

Referências Bibliográficas: p. 188-203.

1. Biomassa. 2. Gaseificação. 3. Leito Fluidizado. 4. Simulação Euleriana I. Leiroz, Albino José Kalab *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Mecânica. III. Título.

“Estou convencido de que não devemos julgar os movimentos políticos por suas metas, mas apenas pelos meios que eles empregam para atingir essas metas”.

Werner Heisenberg

*Aos meus pais, Reinaldo e Sandra,
à minha irmã, Beatriz, e ao meu irmão,
Bernardo.*

AGRADECIMENTOS À ANP

Este trabalho foi realizado no contexto do Programa de Recursos Humanos da ANP, que forma profissionais especializados para a indústria do Petróleo e Gás Natural.

A participação dos alunos bolsistas em seminários, simpósios e congressos foi muito importante no sentido de aumentar o contato dos bolsistas com os reais atributos e dificuldades das indústrias de Petróleo e Gás Natural.

O autor gostaria de agradecer ao Programa de Recursos Humanos da ANP, em especial PRH-37 por auxiliar o desenvolvimento dos conhecimentos relativos às indústrias de hidrocarbonetos e à conclusão desta Dissertação de Mestrado.

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente aos meus pais, Reinaldo e Sandra, aos meus irmãos, Bernardo e Beatriz, e a toda minha família, que têm sempre me apoiado.

Aos meus orientadores, Albino José Kalab Leiroz e Manuel Ernani de Carvalho Cruz, pelos ensinamentos e pela confiança depositada durante todo o período do mestrado.

Gostaria também de agradecer ao Eng. Jean Monteiro de Pinho pela ajuda com o Linux e com o código MFIX. Seu conhecimento foi extremamente importante para a elaboração deste trabalho.

Agradeço também a todos os professores do Programa de Engenharia Mecânica com quem tive a oportunidade de assistir aulas, os quais me passaram os fundamentos necessários para desenvolver o trabalho aqui apresentado. Em especial ao Prof. Marcelo José Colaço por sua confiança em minha capacidade e seu convite para participar do Programa de Recursos Humanos da ANP ainda no começo do meu curso de mestrado.

Aos meus amigos do Laboratório de Máquinas Térmicas (LMT), Massoud, Cesar, Inoussa, Vinícius, Alex, Jorge, Daniel e Júlio pelos momentos de descontração e por discussões que também contribuíram para o andamento desta dissertação.

A todos os meus amigos pelos momentos de descontração fundamentais para realizar qualquer tarefa importante na vida.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

ESTUDO COMPUTACIONAL DA GASEIFICAÇÃO DE BAGAÇO DE CANA-DE-AÇÚCAR EM UM REATOR DE LEITO FLUIDIZADO

Gabriel Lisbôa Verissimo

Março/2014

Orientadores: Albino José Kalab Leiroz

Manuel Ernani de Carvalho Cruz

Programa: Engenharia Mecânica

O presente trabalho apresenta um estudo computacional do processo de gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar em um reator de leito fluidizado. O escoamento no interior do reator é descrito a partir de uma abordagem Euler-Euler. Um modelo de transição suave é utilizado para descrever o tensor de tensões da fase sólida. A modelagem cinética das reações químicas é realizada adaptando-se modelos disponíveis na literatura. A implementação do modelo foi realizada através do código MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchange*). É realizada uma análise da influência da utilização de domínios 2D na descrição do processo de gaseificação em leito fluidizado, o qual é intrinsecamente tridimensional. Um estudo sobre maneiras eficientes de se reduzir o tempo computacional das simulações também é apresentado. Além disso, é feita uma comparação entre a composição do gás produzido no processo de gaseificação com métodos de discretização de primeira ordem e de segunda ordem, e com a utilização de dois grupos de tolerâncias para os resíduos diferentes. Em relação aos parâmetros operacionais do gaseificador, é apresentada uma análise sobre a influência das vazões de oxigênio e de vapor, e da temperatura de parede considerada, sobre a composição dos gases produzidos. Por fim, diferentes agentes gaseificadores são comparados e as vantagens e desvantagens de cada um são brevemente analisadas. Uma análise dos resultados obtidos neste trabalho com resultados de outra modelagem valida a abordagem empregada.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

COMPUTATIONAL STUDY OF SUGARCANE BAGASSE GASIFICATION IN A
FLUIDIZED BED REACTOR

Gabriel Lisboa Verissimo

March/2014

Advisors: Albino José Kalab Leiroz
Manuel Emani de Carvalho Cruz

Department: Mechanical Engineering

A computational study on the sugar cane bagasse gasification process within a fluidized bed reactor is presented. Flow reactor is depicted assuming an Euler-Euler approach. The stress tensor of solid phase is described by a smooth transition model. Chemical kinetics models available in the literature are used to account the chemical reactions inside the reactor. Drying and pyrolysis process are considered instantaneous. The model is implemented in the free code MFIX (Multiphase Flow with Interphase eXchange). A comparison between the results obtained with the 2D rectangular and the 3D cylindrical domain is showed. A study of some ways to reduce the simulation computational time are also presented. Additionally comparisons between the results obtained with a first order and a second order discretization scheme, and with two different residual tolerance groups are realized. In relation to the gasifier operational parameters, it is presented an analysis about the oxygen and steam mass flow rates and wall temperatures influence over the raw gas composition. At least, different gasifying agents are compared and the advantages and drawbacks of each one are briefly analyzed. A comparison between the results obtained in that work with results available in literature obtained with another modelling approach is made to ensure the quality of the results.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivações para o Uso de Biocombustíveis	1
1.2	Fluidodinâmica Computacional em escoamentos Multifásicos Reativos	4
1.3	Propostas e Objetivos do Presente Trabalho.....	5
2	ESTADO DA ARTE	8
3	FUNDAMENTOS DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO	14
3.1	Breve História da Gaseificação no Mundo	14
3.2	Biomassa	16
3.3	O Processo de Gaseificação de Biomassa	17
3.3.1	Secagem	20
3.3.2	Pirólise.....	21
3.3.3	Reações de gaseificação ou gaseificação	24
3.3.4	Combustão	26
3.4	Classificação dos Reatores em Relação ao Padrão de Fluidização do Leito ...	27
3.4.1	Reatores de leito fixo	28
3.4.2	Reatores de leito fluidizado.....	31
3.4.3	Reatores de leito de arraste.....	37
3.5	Gás de Síntese e sua Importância na Indústria do Petróleo	39
4	MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO	43
4.1	Equações de Conservação.....	46
4.1.1	Conservação de massa	47
4.1.2	Conservação de quantidade de movimento	48
4.1.3	Conservação de energia interna	48
4.1.4	Conservação de espécies químicas.....	49
4.2	Relações Constitutivas	50
4.2.1	Equação de estado para a fase gás	50
4.2.2	Transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólidas	51
4.2.3	Transferência de quantidade de movimento entre diferentes fases	52
4.2.4	Tensor de tensões da fase gás.....	53
4.2.5	Tensor de tensão das fases sólidas.....	54
4.2.6	Transferência de calor entre fases.....	60

4.2.7	Condução de calor nas duas fases	61
4.2.8	Geração de energia via reações químicas	62
4.2.9	Taxa de formação e de consumo de espécies químicas.....	63
4.2.10	Conservação de energia granular.....	64
4.3	Condições Iniciais e de Contorno	65
4.3.1	Condições iniciais.....	65
4.3.2	Condições de contorno.....	66
5	MODELAGEM MATEMÁTICA DAS REAÇÕES QUÍMICAS.....	70
5.1	Secagem.....	70
5.2	Pirólise	71
5.3	Gaseificação.....	82
5.4	Combustão.....	86
6	DESCRIÇÃO DO PROGRAMA MFIX.....	90
6.1	Utilização do código	90
6.1.1	Arquivos de entrada.....	91
6.1.2	Arquivos de saída	93
6.2	Características Numéricas do MFIX	94
6.3	Eficiência de Paralelização e Escalabilidade do Código	97
6.4	Validação do Código MFIX	101
7	MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO.....	115
7.1	Descrição do Equipamento.....	115
7.2	Descrição da Geometria e das Condições de Contorno	118
7.3	Informações sobre as Situações Simuladas	122
7.4	Descrição dos Parâmetros e Modelos Numéricos Utilizados.....	126
8	RESULTADOS E ANÁLISE.....	129
8.1	Convergência de Malha e Comparação entre Simulações 2D e 3D	130
8.2	Redução do Tempo de Simulação.....	136
8.2.1	Comparação entre bibliotecas de paralelização MPI e avaliação da..... escalabilidade do problema	136
8.2.2	Avaliação de um procedimento para reduzir o tempo de computação	139
8.3	Avaliação do Impacto da Representação 2D em Regime Estacionário.....	142

8.4	Avaliação de Parâmetros Numéricos.....	147
8.5	Análise da Gaseificação de Bagaço com Misturas de Oxigênio e Vapor	156
8.5.1	Análise termofluidodinâmica	156
8.5.2	Composição dos gases produzidos	160
8.5.3	Análise da contribuição das reações modeladas	164
8.6	Gaseificação com Diferentes Agentes Gaseificadores	174
8.7	Avaliação da Qualidade dos Resultados Obtidos	180
9	CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	184
10	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	188
11	ANEXO 1 - DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES.....	204
11.1	Discretização das Equações de Transporte.....	204
11.1.1	Limitação dos métodos de discretização de segunda ordem	209
11.2	Particularidade das Equações de Quantidade de Movimento	214
11.3	Algoritmo de Eliminação Parcial (PEA).....	218
11.4	Derivação das Equações de Correção de Pressão e de Fração de Vazio	219

Lista de Figuras

Figura 1.1 - Consumo de energia no mundo desde 1820 (adaptado de TVERBERG, 2012).	1
Figura 1.2 – Distribuição geográfica das publicações sobre gaseificação de biomassa (adaptado de KIRKELS e VERBONG, 2011).	3
Figura 1.3 - Demanda de energia primária no mundo (adaptado do Relatório da Agência Internacional de Energia de 2010).	3
Figura 3.1 - Carro com um gerador de gás de madeira durante a Segunda Guerra Mundial (retirado de SIEDLECKI, 2011).	15
Figura 3.2 - Ilustração do processo de secagem da partícula de biomassa (adaptada de BAIN e BROER, 2011).	21
Figura 3.3 - Representação do processo de pirólise (retirado de PINHO, 2012).	23
Figura 3.4 - Faixa de aplicação de cada tipo de reator (retirado de PINHO, 2012).	27
Figura 3.5 - Gaseificador de leito fixo contracorrente (adaptado de SIEDLECKI, 2011).	28
Figura 3.6 - Gaseificador de leito fixo co-corrente (adaptado de SIEDLECKI, 2011).	30
Figura 3.7 - Diagrama de Geldart (retirado de FAN e ZU, 1998).	31
Figura 3.8 - Regimes de fluidização do escoamento gás-partícula (adaptado de GRACE <i>et al.</i> , 2006).	33
Figura 3.9 - Gaseificador de leito fluidizado borbulhante.	35
Figura 3.10 - Gaseificador de leito fluidizado circulante (alterado de PINHO, 2012).	36
Figura 3.11 - Gaseificador de leito de arraste e a distribuição da temperatura no reator (alterado de HIGMAN e van der BURGTH, 2008).	38
Figura 3.12 - Mercado do gás de síntese, dados referentes a 2006 (alterado de BOERRIGTER e RAUCH, 2006).	40
Figura 3.13 - Estimativa para o mercado de gás de síntese em 2040 (alterado de BOERRIGTER e RAUCH, 2006).	40
Figura 4.1 - Três fases do escoamento multifásico (retirado de PINHO, 2012).	45
Figura 4.2 - Tipos de escoamento (adaptado de VIDYAPATI, 2012).	55
Figura 4.3 - Função de amortecimento sigmoidal (adaptado de XIE <i>et al.</i> , 2008 ^a).	57

Figura 5.1 - Modelos cinéticos do processo de pirólise (adaptado de MORF, 2001).	72
Figura 5.2 - Esquema do modelo de pirólise proposto por PARK <i>et al.</i> (2010).	76
Figura 5.3 - Modelos de partículas. (a) Núcleo não exposto; (b) núcleo exposto. (Retirado de PINHO, 2012).	83
Figura 6.1 - Máquina com arquitetura de memória compartilhada (adaptado de TANENBAUM, 2000).	98
Figura 6.2 - Máquina com arquitetura de memória distribuída (adaptado de TANNENBAUM, 2000).	98
Figura 6.3 - Representação do domínio simulado por GERBER <i>et al.</i> (2010).	101
Figura 6.4 - Representação do esquema de pirólise da madeira: a) Pirólise primária; b) Pirólise secundária. (Retirado de PINHO <i>et al.</i> , 2012).	104
Figura 6.5 - Evolução da temperatura na saída do gaseificador através do tempo; a) Caso FSW; b) Caso NSW; (c) Caso NSW TS.	109
Figura 6.6 - Evolução das frações mássicas dos gases na saída do gaseificador através do tempo; a) Caso FSW; b) Caso NSW; (c) Caso NSW TS.	110
Figura 6.7 - Perfis axiais da fração de vazio no leito para os casos investigados.	112
Figura 6.8 - Perfis axiais de temperatura no gaseificador para os casos investigados.	113
Figura 7.1 – Diagrama P&I da planta piloto (retirado de PID Eng&Tech, 2012).	116
Figura 7.2 – Sistema de alimentação dos sólidos (retirado de PID Eng&Tech, 2012).	116
Figura 7.3 – Desenho do reator de leito fluidizado borbulhante (retirado de PINHO, 2012).	117
Figura 7.4 – Sistema de aquecimento externo (retirado de PINHO, 2012).	118
Figura 7.5 – Representação da geometria bidimensional do reator PID Eng&Tech com unidades em milímetros.	119
Figura 7.6 – Representação dos planos da entrada de biomassa e saída de gases com geometria 3D do reator.	120
Figura 8.1 – Representação das malhas; Malha 1 (a); Malha 2 (b).	130
Figura 8.2 – Representação da malha tridimensional.	132
Figura 8.3 – Fração mássica de H ₂ na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.	133
Figura 8.4 – Fração mássica de CO na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.	133

Figura 8.5 – Fração mássica de CH ₄ na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.	134
Figura 8.6 – Fração mássica de CO ₂ na saída do reator nos Casos 1(a) e 7(b).	134
Figura 8.7 – Temperatura na saída do gaseificador nos Casos 1(a) e 7(b).	135
Figura 8.8 – <i>Speedup</i> das duas bibliotecas de paralelização.	137
Figura 8.9 – Eficiência das duas bibliotecas de paralelização.	137
Figura 8.10 – Comparação entre os <i>speedups</i> obtidos com uma malha 2D e uma malha 3D.	138
Figura 8.11 – Comparação entre as eficiências obtidas com uma malha 2D e uma malha 3D.	138
Figura 8.12 - Comportamento da temperatura do leito de inertes em função do tempo; a) Procedimento 1; b) Procedimento 2.	140
Figura 8.13 - Comportamento da temperatura do gás na saída do reator em função do tempo; a) Procedimento 1; b) Procedimento 2.	141
Figura 8.14 - Comparação entre os dois procedimentos testados.	142
Figura 8.15 - Comportamento da temperatura do leito ao longo do tempo para as simulações 3D.	143
Figura 8.16 - Comportamento da temperatura dos gases na saída do gaseificador ao longo do tempo para as simulações 3D.	144
Figura 8.17 - Comportamento das frações mássicas das principais espécies químicas na saída do gaseificador nas situações 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.	144
Figura 8.18 - Perfis axiais da fração de vazio ao longo do leito para as representações 2D e 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.	146
Figura 8.19 - Perfis axiais da fração de vazio ao longo do leito para as representações 2D e 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.	146
Figura 8.20 – Campos de fração de vazio do reator no Caso 1 em regime estacionário utilizando o método FOU (a, b, c) e o método Superbee (d, e, f).	148
Figura 8.21 – Campos de fração de vazio do reator no Caso 7 em regime estacionário utilizando o método FOU (a, b, c) e o método Superbee (d, e, f).	149
Figura 8.22 - Diferença relativa entre a fração de vazio dos gases obtidas com os métodos FOU e Superbee ao longo do reator.	150
Figura 8.23 – Diferenças relativas das frações molares dos quatros principais componentes formados, com os métodos FOU e Superbee; a) CO; b) CO ₂ ; c) CH ₄ ; d) H ₂	152
Figura 8.24 – Diferença relativa das temperaturas dos gases obtidas com os métodos FOU e Superbee ao longo do reator.	153

Figura 8.25 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 1; b) Caso 2.	153
Figura 8.26 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 3; b) Caso 4.	154
Figura 8.27 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 7; b) Caso 8.	154
Figura 8.28 - Perfis axiais da fração de vazio no interior do gaseificador; a) T_{parede} de 973 K; b) T_{parede} de 1123 K.	157
Figura 8.29 - Campos de fração de vazio para diferentes casos (Continuação).	159
Figura 8.30 - Perfis axiais da temperatura dos gases ao longo do eixo vertical do gaseificador; a) T_{parede} de 973 K; b) T_{parede} de 1123 K.	160
Figura 8.31 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO ₂	165
Figura 8.32 – Perfis axiais das taxas de reação de deslocamento de água; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	165
Figura 8.33 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de monóxido de carbono; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	166
Figura 8.34 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de H ₂	167
Figura 8.35 – Perfis axiais das taxas de reação de reforma de metano; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	168
Figura 8.36 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de H ₂	168
Figura 8.37 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de O ₂	169
Figura 8.38 – Perfis das taxas de reação de oxidação de metano; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	170
Figura 8.39 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO.	171
Figura 8.40 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de char; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	172
Figura 8.41 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de H ₂ ; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	174
Figura 8.42 – Perfis axiais da fração molar de CH ₄ ; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.	176

Figura 8.43 – Perfil axial da taxa da reação de reforma de metano; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.....	176
Figura 8.44 – Perfil axial da taxa da reação de deslocamento de água; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.....	177
Figura 8.45 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO.	177
Figura 8.46 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de.....	178
Figura 8.47 - Comportamento da composição do gás produzido para diferentes razões de gaseificação; a) obtido com o MFIX, com $T_{parede} = 973$ K; b) obtido com o MFIX, com $T_{parede} = 1123$ K; c) previsto com o CSFMB.	182

Lista de Tabelas

Tabela 3.1 - Vantagens e desvantagens da utilização de diferentes agentes gaseificadores.....	19
Tabela 3.2 - Limites superiores para a concentração de alcatrão na utilização dos gases produzidos pela gaseificação de biomassa (adaptado de BASU, 2010).	22
Tabela 3.3 - Limites de velocidade superficial do agente fluidizante para diferentes padrões de fluidização.	34
Tabela 5.1 – Análise elementar do bagaço utilizado em fração mássica (livre de água e cinzas).	79
Tabela 5.2 – Análise imediata do bagaço utilizado em fração mássica.	79
Tabela 5.3 - Produtos da pirólise primária do bagaço de cana-de-açúcar (RODRIGUEZ <i>et al.</i> , 1987).	80
Tabela 5.4 - Composição do gás produzido na pirólise primária do bagaço de cana-de-açúcar de RODRIGUEZ <i>et al.</i> (1987).	80
Tabela 5.5 - Composição do gás produzido na pirólise primária do bagaço utilizada no modelo de pirólise.	81
Tabela 5.6 - Composição do gás produzido no craqueamento do alcatrão.	81
Tabela 5.7 - Composição dos voláteis utilizada para determinar os coeficientes da reação estequiométrica de pirólise.	81
Tabela 5.8 - Coeficientes de divisão.	82
Tabela 5.9 - Composição dos voláteis calculada.	82
Tabela 5.10 - Reações de combustão modeladas.	83
Tabela 5.11 - Taxas das reações de gaseificação heterogêneas.	84
Tabela 5.12 - Taxas das reações de gaseificação homogêneas.	85
Tabela 5.13 - Reações de combustão modeladas.	86
Tabela 5.14 - Taxas das reações de gaseificação homogêneas.	88
Tabela 6.1 – Seções do arquivo <i>mfix.dat</i>	92
Tabela 6.2 – Descrição das seções do arquivo <i>rrates.f</i>	93
Tabela 6.3 – Grandezas armazenadas nos arquivos <i>.SPX</i> (retirado de PINHO, 2012).	94
Tabela 6.4 - Modelos utilizados para descrever o comportamento das fases sólidas.	103
Tabela 6.5 - Parâmetros cinéticos para o processo de pirólise da madeira.	104
Tabela 6.6 - Composição dos gases produzidos nas duas etapas do processo de pirólise da madeira.	105

Tabela 6.7 - Modelagem cinética das reações homogêneas consideradas.....	106
Tabela 6.8 - Modelagem cinética das reações heterogêneas consideradas.	106
Tabela 6.9 - Resumo das condições de contorno do problema.....	107
Tabela 6.10 - Condições iniciais das simulações realizadas.	108
Tabela 6.11 - Propriedades das partículas sólidas.....	108
Tabela 6.12 - Parâmetros físicos das fases sólidas.	108
Tabela 6.13 - Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os obtidos no trabalho de referência.....	111
Tabela 6.14 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos neste trabalho e os obtidos no trabalho de referência.....	111
Tabela 6.15 - Faixa de valores experimentais relatados em GERBER <i>et al.</i> (2010)..	112
Tabela 7.1 – Submodelos das fases sólidas.	121
Tabela 7.2 – Resumo das situações investigadas.....	123
Tabela 7.3 – Velocidade superficial das situações investigadas.	124
Tabela 7.4 – Frações mássicas da corrente de gás na entrada de biomassa.	124
Tabela 7.5 – Condições de contorno.	125
Tabela 7.6 – Propriedades das partículas sólidas.....	125
Tabela 7.7 - Parâmetros físicos das fases sólidas.	126
Tabela 7.8 - Valores de alguns parâmetros numéricos utilizados nas simulações. ...	127
Tabela 8.1 – Informações referentes ao esforço computacional de cada simulação.	135
Tabela 8.2 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com os dois procedimentos.	141
Tabela 8.3 - Comparação entre a composição dos gases produzidos nos Casos 1 e 7.	145
Tabela 8.4 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com o método FOU e com o método Superbee.....	150
Tabela 8.5 – Fração molar de CH ₄ obtidas com o método FOU e com o método Superbee, e suas respectivas diferenças relativas.....	151
Tabela 8.6 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com diferentes tolerâncias.	155
Tabela 8.7 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator.....	161
Tabela 8.8 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator, em base seca e livre de alcatrão.	162
Tabela 8.9 - Parâmetros que avaliam a qualidade do gás produzido e a razão de gaseificação de cada caso.....	163
Tabela 8.10 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator, em base seca e livre de alcatrão.....	175

Tabela 8.11 - Parâmetros que avaliam a qualidade do gás produzido e a razão de gaseificação de cada caso.....	179
Tabela 8.12 - Comparação entre os Casos 1 e 2 com os resultados do CSFMB.	181
Tabela 8.13 - Comparação entre os Casos 3 e 4 com os resultados do CSFMB.	181
Tabela 8.14 - Comparação entre os Casos 5 e 6 com os resultados do CSFMB.	181
Tabela 8.15 - Comparação entre os Casos 7 e 8 com os resultados do CSFMB.	181
Tabela 8.16 - Comparação entre o poder calorífico do gás obtido nas simulações com o MFIX e CSFMB.	183
Tabela 8.17 - Diferença relativa entre o poder calorífico do gás obtido com o MFIX e com o CSFMB.	183

Lista de símbolos

a	Coeficiente estequiométrico variável da reação de combustão do carbono.	
A_j	Fator pré-exponencial para a reação j .	[s ⁻¹]
A	Coeficiente da expressão da condutividade térmica das fases sólidas.	
A_{pi}	Área da partícula pertencente a fase i .	[mm ²]
B	Coeficiente da expressão da condutividade térmica das fases sólidas.	
Ba	Número de Bagnold.	
\vec{c}_i	Vetor velocidade instantânea da fase i .	[m/s]
C_f	Coeficiente de atrito entre as fases sólidas.	
\vec{C}_i	Vetor flutuação de velocidade da fase i .	[m/s]
C_{pi}	Calor específico à pressão constante da fase i .	[J/kg.K]
d_{pm}	Diâmetro das partículas da fase sólida m .	[mm]
\vec{D}_i	Tensor taxa de deformação de fase i .	
D_{O_2}	Difusividade do oxigênio.	[m ² /s ⁻¹]
DWF	Fator de <i>downwind</i> para limitação de métodos de discretização de ordem superior.	
e_{mm}	Coeficiente de restituição devido as colisões entre as partículas.	
\tilde{E}_{aj}	Energia de ativação para a reação j .	[J/kmol]
E_{θ_m}	Energia Cinética Granular da fase m .	[m ² /s ²]
F_{il}	Coeficiente para calculo da força de arraste entre as fase i e l .	[kg/m ³ s]
\vec{g}	Vetor de aceleração gravitacional.	[m/s ²]
g_{0m}	Função de distribuição radial das partículas.	
HOR	Energia total liberada por todas as reações.	[J/kg]
hw_z	Coeficiente de transferência de calor na superfície z .	[W/m ² K]
h_x	Entalpia da espécie x .	[J/kg]
\bar{I}	Tensor identidade.	
\vec{I}_{il}	Transferência de quantidade de movimento entre as fase i e l .	
I_{2D}	Segundo invariante do tensor de tensões.	
\vec{J}_{in}	Vetor fluxo mássico da espécie n na fase i .	[kg/m ² s]
k_d	Coeficiente de transporte de massa através do filme de gás que envolve a partícula.	

k_{ej}	Constante de equilíbrio da reação j .	
k_j	Constante da reação.	[s ⁻¹]
$\dot{m}_{ar-real}$	Vazão mássica de ar utilizada no processo de gaseificação.	[kg/h]
$\dot{m}_{ar-teórico}$	Vazão mássica de ar necessária para oxidar completamente o combustível.	[kg/h]
m	Número de fases sólidas.	
M_w	Massa molecular da mistura fase gás.	[kg/kmol]
MW_n	Massa molecular da espécie n .	[kg/kmol]
\vec{n}	Vetor normal a superfície do contorno.	
n	Número de partículas da fase i por unidade de volume.	
n_{kij}	Coeficiente estequiométrico do elemento ki na reação j .	
n_p	Número de <i>threads</i> .	
n_x	Coeficiente estequiométrico da espécie x .	
N_i	Número de espécies químicas da fase i .	
Nu_m	Número de Nusselt.	
p	Número de processadores.	
P_i	Pressão da fase i .	[N/m ²]
Pr	Número de Prandtl.	
\vec{q}_i	Vetor fluxo de energia de calor para fase i .	[J/m ² s]
\vec{q}_{θ_m}	Vetor fluxo de energia granular.	
Q_B	Vazão mássica de biomassa.	[kg/h]
Q_{O_2}	Vazão mássica de oxigênio.	[kg/h]
Q_S	Vazão mássica de vapor.	[kg/h]
\tilde{R}	Constante universal dos gases.	[J/kmol.K]
R_{CM}	Tolerância para o resíduo das equações de continuidade e de quantidade de movimento.	
R_{esp}	Tolerância para o resíduo das equações de conservação de espécies químicas.	
R_T	Tolerância para o resíduo das equações de conservação de temperatura.	
Re_{pi}	Número de Reynolds para o escoamento em torno da partícula da fase i .	
R_{est}	Razão estequiométrica.	
R_{in}	Taxa de geração ou consumo de massa da espécie n da fase i .	[kg/m ³ s]
\tilde{r}_j	Taxa da reação j .	[kmol/m ³ s]
Sc	Número de Schmidt.	
Sh_{pi}	Número de Sherwood em torno da partícula da fase i .	

S_p	<i>Speedup</i> da paralelização.	
$\bar{\bar{S}}_i$	Tensor de tensões relativo a fase i .	[N/m ²]
t_1	Tempo de computação com processamento serial.	[s]
t_p	Tempo de computação com processamento paralelo.	[s]
T_i	Temperatura da fase i .	[K]
u_i	Componente da velocidade da fase i na direção x .	[m/s]
U	Velocidade superficial.	[m/s]
\vec{U}	Vetor velocidade na parede.	[m/s]
$U_{m,slug}$	Velocidade mínima para formação de <i>slug</i> .	[m/s]
U_{mb}	Velocidade de mínimo borbulhamento.	[m/s]
U_{mf}	Velocidade de mínima fluidização.	[m/s]
v_i	Componente da velocidade da fase i na direção y .	[m/s]
\vec{V}_i	Vetor velocidade média da fase i .	[m/s]
V_{rpi}	Valor absoluto da diferença de velocidade entre a velocidade da fase gás e a velocidade da fase i .	[m/s]
w_i	Componente da velocidade da fase i na direção z .	[m/s]
W_{gm}	Termo de transferência de energia entre as fase gás e a fase sólida m .	[J/m ³ s]
Y_{in}	Fração mássica da espécie n da fase i .	
Y_{win}	Fração mássica da espécie n da fase i no contorno.	
X_n	Fração molar da espécie n .	
Y_n	Fração mássica da espécie n .	

Letras Gregas

α_j	Ordem da reação j .	
β_j	Ordem da reação j .	
γ_{gm}	Coeficiente de transferência de calor entre a fase gás e a fase sólida m .	[J/K.m ³ s]
γ_{gm}^0	Coeficiente de correção.	[J/K.m ³ s]
γ_{Rm}	Coeficiente radiativo.	[J/K ⁴ m ³ s]
Γ_ϕ	Coeficiente de difusão da grandeza ϕ .	
δ_{θ_m}	Dissipação da energia granular provocada pelas colisões inelásticas entre as partículas sólidas.	
Δ_x	Comprimento da aresta do volume de controle na direção x .	[mm]
Δ_y	Comprimento da aresta do volume de controle na direção y .	[mm]
Δ_z	Comprimento da aresta do volume de controle na direção z .	[mm]

ΔH_i	Taxa de geração de energia devido as reações químicas da fase i .	[J/m ³ .s]
Δt	Passo de tempo.	[t]
Δx	Passo espacial na direção x .	[mm]
ε_i	Fração volumétrica da fase i .	
ε_g^*	Fração volumétrica crítica da fase gás.	
ε_s^*	Fração volumétrica crítica da fase sólida.	
η_p	Eficiência de paralelização.	
θ_m	Temperatura granular da fase sólida m .	[m ² /s ²]
κ_i	Condutividade térmica da fase i .	[J/m.K.s]
Λ_{rm}	Coeficiente da expressão de condutividade térmica das fases sólidas.	
μ_i	Viscosidade dinâmica da fase i .	[kg/m.s]
ν_i	Viscosidade volumétrica da fase i .	[m ³ /m.s]
ξ	Fator de convecção ponderado.	
ξ_n	Coeficiente de divisão para o cálculo da composição dos voláteis no modelo PETERSEN-RODRIGUEZ.	
ρ_i	Massa específica da fase i .	[kg/m ³]
ρ_i'	Massa específica efetiva da fase i .	[kg/m ³]
σ	Número de Courant.	
ϕ	Grandeza escalar ou vetorial qualquer.	
ϕ_{il}	Termo de transferência de energia granular entre diferentes fases sólidas.	
φ	Função de transição suave sigmoidal.	
Φ	Ângulo de atrito interno das partículas.	
∇	Operador gradiente.	
$\bar{\tau}_i$	Componente anisotrópico do tensor de tensões da fase i .	[N/m ²]
ω_i	Fator de sub-relaxação.	

Subscrito

d	Indica que o parâmetro refere-se a efeitos difusivos.
D	Refere-se aos valores a jusante do volume de controle central.
f	Refere-se aos valores nas faces do volume de controle.
g	Refere-se à fase gás.
i	Fase do escoamento.
j	Número da reação.
l	Fase do escoamento, onde $l \neq i$.
p	Refere-se as partículas.

sm	Refere-se à fase sólida m .
n	Espécie química.
w	Refere-se ao valor da grandeza no contorno.
U	Refere-se aos valores a montante do volume de controle central.

Sobrescrito

FOU	Refere-se aos termos calculados com o método de discretização FOU.
HO	Refere-se aos termos calculados com o método de discretização de ordem superior.
p	Refere-se ao escoamento granular plástico.
v	Refere-se ao escoamento granular viscoso.

1 INTRODUÇÃO

1.1 Motivações para o Uso de Biocombustíveis

Ao longo do século XX o mundo viveu uma enorme revolução tecnológica e social. O aumento da demanda por energia elétrica aumentou de forma muito acentuada, principalmente no período após a Segunda Guerra Mundial, como pode ser visto na Fig. 1.1. O baixo custo do barril de petróleo no período pós-guerra impulsionou a utilização deste combustível para a obtenção de energia pelos países mais desenvolvidos da época. Entretanto, durante a década de 70, ocorreram as duas primeiras crises mundiais do petróleo, em 1973 e em 1979, que aumentaram consideravelmente o preço do barril de petróleo. As crises evidenciaram uma dependência grande e preocupante de alguns países em relação ao petróleo. Logo, países da Europa e da América do Norte começaram a investir em formas alternativas de se obter energia (KIRKELS e VERBONG, 2011). No Brasil, foi desenvolvido o PROALCOOL, com o objetivo de reduzir esta dependência utilizando etanol proveniente da cana-de-açúcar em automóveis (TÁVORA, 2011).

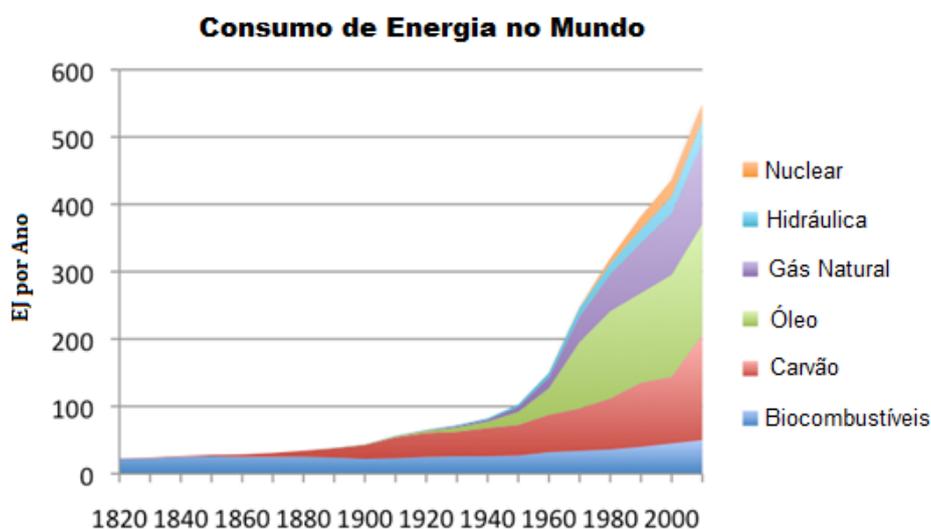


Figura 1.1 - Consumo de energia no mundo desde 1820 (adaptado de TVERBERG, 2012).

Embora decisiva para o incentivo a novas fontes de energia, a situação econômica não era o único motivo de preocupação em relação aos combustíveis derivados do petróleo. Ainda na década de 70, embora de forma esparsa, cientistas

começaram a discutir sobre os impactos ocasionados por emissões de determinados gases sobre o meio ambiente. Duas décadas depois, após vários encontros e relatórios internacionais, ocorreu no Rio de Janeiro em 1992 a Conferência das Nações Unidas sobre Meio Ambiente e Desenvolvimento (HENRIQUES, 2009).

No começo do século XXI, a preocupação com a poluição ambiental se difundiu com maior intensidade. O temor do chamado aquecimento global levou a uma grande pressão de parte da sociedade sobre os governantes para a redução da quantidade de poluentes emitidos. Dessa vez, somou-se a essa pressão a grande instabilidade política em países que possuem grandes reservas de petróleo (BASU, 2010). Com o crescente aumento na demanda por energia elétrica, ocorreu um grande aumento de investimento de pesquisas sobre fontes alternativas de energia.

Uma fonte renovável que tem recebido muita atenção é o processo de gaseificação, que pode ser aplicado tanto ao carvão mineral quanto em matéria-prima de origem vegetal como madeira e bagaço de cana, a chamada biomassa (HIGMAN e van der BURGT, 2008). É importante notar que a biomassa pode ser queimada diretamente em uma caldeira, o que também vem sendo feito em algumas plantas de geração de energia elétrica. Entretanto, existe uma série de vantagens de se utilizar os gases obtidos da biomassa através de um processo termoquímico (gaseificação, pirólise), dentre as quais é possível citar: o aumento do poder calorífico do combustível, remoção de enxofre e nitrogênio do combustível, facilidade de transporte, e a possibilidade de utilizar ciclos a gás ao invés de ciclos a vapor em plantas de geração elétrica de pequeno porte (BASU, 2010).

A utilização de biomassa como combustível ou como insumo para o processo de gaseificação, ao invés do carvão mineral, apresenta vantagens sociais, econômicas e ambientais. VAN LOO e KOPPEJAN (2008) afirmam que a biomassa é capaz de gerar mais empregos que o carvão, além de reduzir a dependência de combustíveis importados e ser menos agressiva ao meio ambiente, pois durante o crescimento das plantas, utilizadas como insumo, ocorre a absorção de dióxido de carbono.

O processo de gaseificação pode ser realizado em diferentes tipos de reatores, que são discutidos na Seç. 3.3. Entretanto, a gaseificação em reatores de leito fluidizado tem sido a preferencial para plantas de gaseificação de médio e grande portes, devido à possibilidade de gaseificadores de maior escala que os de leito fixo (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Este fato tem motivado diversos estudos sobre o comportamento do escoamento no interior dos reatores de leito fluidizado.

Na Fig. 1.2, é possível observar o crescente interesse na gaseificação através do aumento do número de publicações sobre o assunto, com o número de publicações nos países representados dobrando de 2001 para 2007. A Fig. 1.2 também mostra que

até a década de 1990 os Estados Unidos lideravam as publicações sobre gaseificação. Entretanto, a União Europeia ultrapassou o número de publicações dos Estados Unidos após 1992. Também deve ser destacado que o número de publicações no Japão e na China saltou de menos de 10 em 2001 para mais de 40 em 2007.

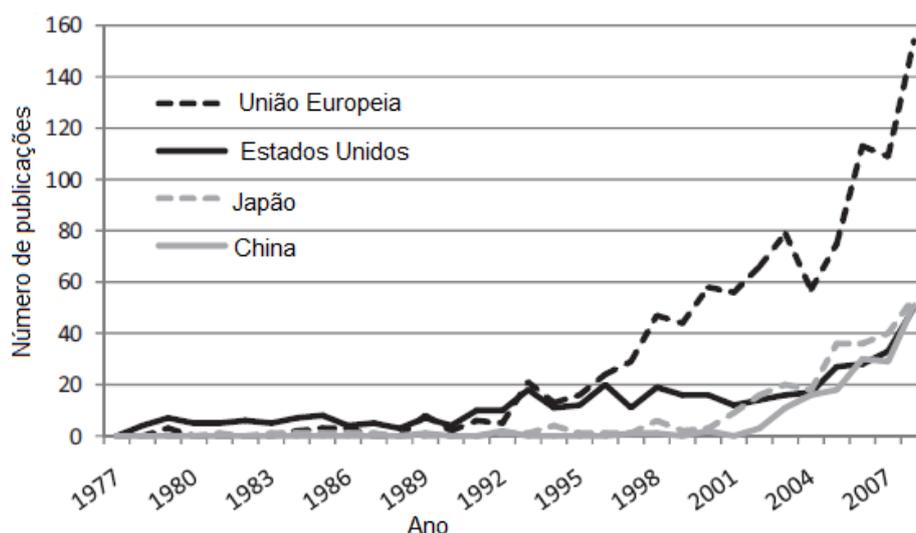


Figura 1.2 – Distribuição geográfica das publicações sobre gaseificação de biomassa (adaptado de KIRKELS e VERBONG, 2011).

Devido às motivações apresentadas aqui, é razoável esperar que o papel da biomassa na matriz energética mundial aumente. Esta expectativa é corroborada pela Agência Internacional de Energia, que incluiu em seu relatório de 2010 o gráfico da Fig. 1.3, mostrando a demanda de energia ao redor do mundo até 2010 e suas expectativas até 2035.

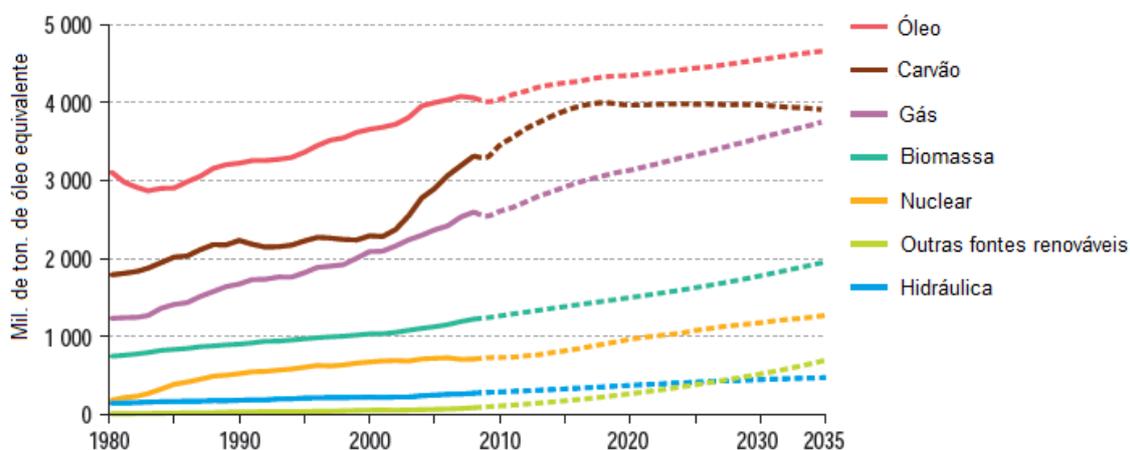


Figura 1.3 - Demanda de energia primária no mundo (adaptado do Relatório da Agência Internacional de Energia de 2010).

Observando a Fig. 1.3, é possível observar que existe a expectativa de que o aumento da utilização do carvão ocorra a um ritmo menor, enquanto que a utilização da biomassa se intensifique. No entanto, dado que a tecnologia do carvão é bem conhecida e como o processo de gaseificação de biomassa ainda não é utilizado em escala industrial, estudos sobre o processo de gaseificação de biomassa são fundamentais para que esta tendência se confirme.

1.2 Fluidodinâmica Computacional em escoamentos Multifásicos Reativos

Devido à grande quantidade de variáveis envolvidas no processo de gaseificação que afetam as reações químicas, como temperatura do leito, velocidade superficial do gás e distribuição do tamanho de partícula, a utilização de experimentos em reatores de grande escala é muita custosa (RAVELLI *et al.*, 2008). Dessa forma, os estudos computacionais tem se apresentado como uma opção bastante viável para o processo de gaseificação.

Dentre os estudos computacionais, os mais utilizados são os modelos cinéticos e termodinâmicos (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Entretanto, estes dois métodos possuem algumas desvantagens, decorrentes da grande dependência de correlações empíricas para determinar grandezas que seriam calculadas pelo método de fluidodinâmica computacional (BASU, 2010). A utilização de correlações empíricas para contabilizar os efeitos hidrodinâmicos do escoamento faz com que os dados obtidos sejam válidos apenas para situações próximas àquelas em que essas correlações foram desenvolvidas. Desta maneira alterações na geometria do gaseificador, ou no padrão de fluidização do leito podem reduzir a acurácia de algumas das correlações utilizadas.

Uma alternativa à utilização destes modelos empíricos são os modelos de fluidodinâmica computacional (CFD), que possuem como grande vantagem a sua generalidade de aplicações. Desta maneira, é possível simular diferentes condições de escoamento, em diferentes geometrias sem a necessidade de modificações drásticas na modelagem do problema (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Embora os modelos de CFD sejam utilizados há bastante tempo em diversas áreas da engenharia, sua utilização em problemas de escoamento multifásico reativo é relativamente nova (SINGH *et al.*, 2013).

O modelo de fluidodinâmica computacional requer um elevado esforço de processamento, o que tornou seu uso limitado a poucos supercomputadores durante vários anos (BLAZEK, 2001). O grande salto na velocidade de processamento dos computadores, ocorrido entre o final do século XX e o começo do XXI, revolucionou a história deste método (TANNEHILL *et al.*, 1997). Entretanto, a sua utilização na área de

gaseificação ainda é pequena, pois, devido à grande complexidade do problema, o tempo computacional necessário para realizar uma simulação ainda é relativamente muito elevado.

SINGH *et al.* (2013) afirmam que simulações de CFD representam uma das abordagens mais apropriadas para a predição de parâmetros críticos requeridos para controlar de forma eficiente a gaseificação. Devido a essas vantagens é de extrema importância a utilização deste método, em parceria com métodos experimentais, para ajudar tanto na otimização das condições operacionais quanto no desenvolvimento de novos gaseificadores.

Existem duas abordagens desenvolvidas para a aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional em escoamentos gás-partícula, o modelo Euler-Euler e o modelo Euler-Lagrange (RANADE, 2002). A principal diferença entre as duas abordagens consiste na forma em que cada uma delas descreve a fase sólida. Já no modelo Euler-Lagrange as partículas são acompanhadas individualmente, no modelo Euler-Euler é feita a hipótese de que o leito de partículas possui um comportamento semelhante ao de um fluido. Para um gaseificador com um leito de partículas denso o modelo Euler-Lagrange não é uma opção viável com a atual capacidade de processamento (SINGH *et al.*, 2013). O menor esforço computacional do modelo Euler-Euler acaba sendo uma de suas características mais atrativas. Mais detalhes sobre as vantagens e desvantagens de cada um dos modelos serão apresentados no Cap. 4, que trata da modelagem matemática do escoamento no interior do gaseificador.

Muitos dos estudos realizados utilizando o modelo Euler-Euler para descrever processos de gaseificação e de combustão em leitos fluidizados ignoram o comportamento tridimensional do escoamento, utilizando um domínio bidimensional (SINGH *et al.*, 2013). No Cap. 4 são feitas observações sobre a validade de se representar um escoamento tridimensional, utilizando uma simulação de domínio bidimensional, em situações de fluidização sem reações químicas e sem considerar efeitos térmicos. No Cap. 8 são apresentados alguns resultados comparativos entre uma geometria bidimensional e uma tridimensional para as situações investigadas nesta dissertação, levando-se em conta a equação de energia e reações químicas.

1.3 Propostas e Objetivos do Presente Trabalho

O Brasil é um país pioneiro na utilização de etanol a partir da cana-de-açúcar, além de grande produtor de açúcar. A cana moída possui aproximadamente 25% de bagaço de cana, acarretando em uma produção anual em torno de 78 milhões de toneladas de bagaço de cana no Brasil (CONAB, 2011). Este resíduo do processo de

moagem da cana tem sido utilizado como combustível em caldeiras de ciclos a vapor de pequeno porte, para suprir as necessidades energéticas do engenho. Mesmo sendo justificada na prática, a queima do bagaço de cana é ineficiente e destrutiva (MIRANDA, 2009). Uma das formas de se converter esse subproduto em um gás com poder calorífico maior é através do processo de gaseificação. Tendo em mente que a gaseificação em reatores de leito fluidizado borbulhante pode ser considerada extremamente promissora, como mostrado na Seç. 3.4, este tipo de leito foi escolhido para realizar este estudo.

O modelo de CFD é uma ferramenta econômica e efetiva para estudar os processos de combustão e de gaseificação em reatores de leito fluidizado (SINGH *et al.*, 2013). Este modelo começou a ser explorado para estes problemas apenas recentemente, logo existem ainda algumas adversidades a serem superadas. Dentre as principais dificuldades estão a modelagem do problema e o elevado esforço computacional necessário. Estas foram algumas das razões que motivaram o uso deste tipo de modelo neste estudo.

PINHO (2012) realizou um trabalho sobre a simulação fluidodinâmica do processo de gaseificação de bagaço de cana, utilizando ar como agente gaseificador. O autor usou uma abordagem Euler-Euler para descrever o processo de gaseificação de um escoamento monodisperso. Este trabalho foi focado na modelagem termoquímica do processo, utilizando diversos modelos padrões do código utilizado para descrever o problema fluidodinâmico. Uma série de simplificações também foi considerada, de maneira que o autor sugere um estudo sobre o impacto destas simplificações sobre os resultados. Dentre as principais simplificações citadas pelo autor destacam-se a utilização do domínio bidimensional e a consideração do sistema monodisperso.

No presente trabalho, além de abordar o impacto da utilização do domínio bidimensional sobre os resultados obtidos, os efeitos de alguns parâmetros numéricos, método de discretização dos termos convectivos e tolerância dos resíduos, também são investigados. Diferentemente de PINHO (2012), neste trabalho é utilizado um modelo de transição suave para descrever o tensor de tensões da fase sólida, seguindo a sugestão de XIE *et al.* (2008^a). Outras diferenças na modelagem do problema consistem na utilização de uma equação para contabilizar a condutividade térmica das fases sólidas e de um sistema polidisperso.

Outra questão importante analisada aqui é referente ao tempo de computação das simulações. PINHO (2012) relata que algumas simulações levaram em torno de 21 dias para serem concluídas em seu trabalho. Tempos elevados de simulação acabam desencorajando o uso de modelos de CFD para representar o processo de gaseificação em leitos fluidizados. Desta forma, a eficiência da paralelização e o número ideal de

threads para reduzir o tempo das simulações são analisados, assim como maneiras de reduzir o tempo de processamento utilizando simulações simplificadas como condição inicial.

Em relação às condições operacionais do reator, enquanto PINHO (2012) analisou a influência da razão de equivalência na gaseificação do bagaço de cana com ar, este trabalho analisa o processo de gaseificação de bagaço de cana utilizando uma mistura de oxigênio e vapor como agente gaseificador. Uma comparação com outros agentes gaseificadores também é apresentada. É realizada ainda uma discussão sobre a influência da temperatura de parede sobre a composição dos gases produzidos durante o processo de gaseificação.

Assim como PINHO (2012), a implementação do modelo e a solução das equações governantes é realizada utilizando o código aberto MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*).

Os principais objetivos deste trabalho são mostrados a seguir:

- i) Desenvolver uma modelagem capaz de representar o processo de gaseificação de bagaço de cana em reatores de leito fluidizado borbulhante, de maneira que seja possível prever a composição dos gases produzidos com um grau de acurácia aceitável.
- ii) Reduzir o tempo de simulação a partir do uso de computação paralela em um *cluster* de computadores, e/ou da utilização de uma condição inicial que reduza o transiente do processo simulado.
- iii) Estudar o impacto da utilização de um sistema de coordenadas retangulares 2D para descrever um problema intrinsecamente 3D.
- iv) Avaliar efeitos da escolha de métodos de discretização dos termos convectivos das equações de transporte e dos valores de tolerância dos resíduos das equações sobre os resultados das simulações.
- v) Avaliar efeitos da variação das vazões de oxigênio, de vapor e de biomassa sobre a composição dos gases produzidos e sobre o comportamento termofluidodinâmico do leito.
- vi) Avaliar a influência de diferentes condições de contorno de temperatura e, conseqüentemente, diferentes temperaturas de operação do leito sobre a simulação.
- vii) Analisar as vantagens de diferentes agentes gaseificadores sobre a composição dos gases produzidos no gaseificador.

2 ESTADO DA ARTE

Segundo TWIDELL e WEIR (2006), uma fonte de energia renovável é aquela onde a energia é obtida a partir de fluxos naturais e persistentes ocorrendo no ambiente de maneira imediata. Por outro lado, uma fonte de energia não renovável é aquela em que a energia é obtida a partir de reservatórios estáticos que permanecem escondidos a menos que sejam liberados pela interação com o homem. O carvão mineral se encaixa na definição de fonte não renovável, por isso é natural que, embora ainda seja abundante e apresente um preço estável, o processo de gaseificação venha sendo cada vez mais utilizado em biomassa, como madeira ou bagaço de cana, ao invés do carvão.

O grande potencial ainda não aproveitado da biomassa para a geração de energia elétrica tem motivado diversos estudos sobre o assunto desde a última década do século XX. Com o recente avanço da capacidade computacional, além do desenvolvimento de novas técnicas de discretização numérica e novos modelos para descrever os complexos processos físicos e químicos, é possível verificar um aumento do número de trabalhos publicados sobre a simulação numérica da termoquímica de conversão de biomassa (RAVELLI *et al.*, 2008).

Em WANG e YAN (2008^a) é realizada uma revisão sobre a aplicação da fluidodinâmica computacional em processos termoquímicos envolvendo a biomassa. Os autores apresentam uma visão geral sobre a modelagem do problema, comentando sobre todos os processos térmicos e fluidodinâmicos que precisam ser modelados. Além disso, é realizado um resumo dos principais modelos de turbulência e de radiação, assim como alguns modelos de devolatilização a serem implementados em modelos de CFD.

SINGH *et al.* (2013) publicaram um artigo de revisão sobre a modelagem dos processos de combustão e de gaseificação em leito fluidizado. São apresentadas as vantagens e desvantagens das diferentes abordagens para o problema, ou seja, Euleriana e Lagrangeana. Uma breve descrição matemática de cada modelo, além de submodelos de radiação e de turbulência é apresentada. Os autores avaliam que a aplicação de modelos de CFD em estudos de gaseificação e combustão ainda está em fase de desenvolvimento, e apresenta um campo que ainda pode ser muito explorado. A maioria dos trabalhos de fluidodinâmica computacional já publicados sobre combustão e gaseificação são apresentados. Alguns destes trabalhos são revistos a seguir com o objetivo de fornecer uma ideia do estágio atual dos modelos de CFD em

processos de gaseificação. Trabalhos referentes a pontos específicos da modelagem do problema são apresentados ao longo dos capítulos subsequentes.

SOFIALIDIS e FALTSI (2001) realizaram uma simulação fluidodinâmica tridimensional de um reator de leito fluidizado borbulhante, operando com madeira e com leito formado por areia. O código utilizado nessa simulação foi o FLUENT 5 e a validação da mesma foi realizada utilizando dados experimentais. Neste trabalho foi utilizado um modelo de pirólise que considera a divisão do reator em duas zonas, a de pirólise flamejante (FP), localizada na entrada do reator, e a de redução de *char* (CR), localizada acima da outra zona. Além disso, foi considerado que na primeira zona não existe formação de CO e H₂, e parte dos voláteis é craqueada em CH₄. Na segunda região ocorrem as reações heterogêneas entre o *char* e o restante dos voláteis. Para a descrição dos efeitos fluidodinâmicos, os autores adotaram uma abordagem Euler-Lagrange, com a utilização do modelo de turbulência κ - ϵ . De forma geral os resultados apresentaram concordância satisfatória com os dados experimentais, com exceção das emissões de CO e CO₂. Os autores observam que a modelagem adequada para o processo de pirólise é de extrema importância para a obtenção de resultados precisos.

Em YU *et al.* (2007) foi realizada a simulação do processo de gaseificação de carvão em um reator de leito fluidizado borbulhante, a partir de uma abordagem Euler-Euler. Os autores consideraram que a tensão resultante da fricção entre partículas poderia ser desprezada, a intensidade da colisão das partículas não varia com a temperatura, a radiação térmica pode ser desprezada e as partículas são isotérmicas. Os efeitos turbulentos foram contabilizados através do modelo κ - ϵ . Baseados em dados experimentais os autores modelaram os processos de secagem e de pirólise como instantâneos. Para a pirólise secundária foi utilizado um modelo estequiométrico. A composição dos gases produzidos foi comparada com dados experimentais para diferentes condições de operações, apresentando boa concordância.

WANG e YAN (2008^b) apresentaram uma modelagem fluidodinâmica tridimensional, a partir de uma abordagem Euler-Lagrange, para simular o processo de gaseificação do lodo de esgoto em um reator de leito fluidizado. A simulação foi realizada no *software* comercial FLUENT 6.1, e os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais disponíveis na literatura. A fase gás foi tratada como contínua, e alguns termos adicionais foram considerados nas equações de conservação para computar os efeitos causados pelas partículas sobre o gás. Os efeitos turbulentos no gás foram computados utilizando o modelo κ - ϵ . O processo de radiação térmica também foi modelado. Os autores trataram todo o alcatrão e hidrocarbonetos produzidos como CH₄. Os processos de secagem e de pirólise foram considerados instantâneos, com os

produtos da pirólise sendo calculados por meio de um modelo de equilíbrio. Os autores observaram uma forte influência da razão de equivalência e da temperatura da parede do reator sobre os gases produzidos. Além disso, foi possível afirmar que menores razões de equivalência ou maiores temperaturas favorecem uma maior produção de gás de síntese.

OEVERMANN *et al.* (2009) apresentaram uma modelagem fluidodinâmica bidimensional, baseado na abordagem Euler-Lagrange, para simular o processo de gaseificação da madeira em reatores de leito fluidizado utilizando o software aberto OpenFOAM. Os efeitos de turbulência foram computados utilizando um modelo de grandes escalas (LES), baseado na utilização do modelo de sub-malha de Smagorinsky. Os autores utilizaram método dos elementos discretos (DEM) com a hipótese de esferas lisas para descrever as colisões sofridas pelas partículas sólidas. Assim como WANG e YAN (2008^b), o processo de secagem foi considerado instantâneo. Os processos de pirólise e de gaseificação foram considerados a partir de modelos zero dimensional para cada partícula. A pirólise foi subdividida em duas etapas: pirólise primária e secundária, na qual é feita a hipótese de que todo o alcatrão produzido pela pirólise primária é craqueado. Além disso, foi considerado o encolhimento de cada partícula ao longo do tempo seguindo a metodologia adotada em DI BLASI (1996). Os resultados obtidos pelos autores apresentaram boa concordância com os dados experimentais. Os autores concluíram que a temperatura no interior do gaseificador não é sensível à taxa de biomassa que entra no reator, ao contrário das quantidades de H₂ e CO produzidas, que aumentam com o aumento da taxa de alimentação de combustível, como também foi encontrado em WANG e YAN (2008^b).

GERBER *et al.* (2010) utilizaram uma modelagem fluidodinâmica bidimensional, baseada na abordagem Euler-Euler para simular o processo da gaseificação da madeira no mesmo reator estudado por OEVERMANN *et al.* (2009). Para realizar esta simulação foi utilizado o código aberto MFIX. Os autores modelaram a fase sólida como três fases contínuas, uma formada pela madeira e as outras duas formadas por *char* com diâmetros de partícula diferentes. A temperatura granular foi calculada a partir de uma equação de transporte. Os autores afirmam que a utilização de um modelo de turbulência não possui grande influência sobre a composição dos gases de saída. O processo de secagem foi modelado da mesma forma que por OEVERMANN *et al.* (2009) e WANG e YAN (2008^b). A pirólise foi subdividida em pirólise primária, modelada seguindo a recomendação de GRONLI e MELLAEN (2000), e pirólise secundária, tratada por dois modelos diferentes. Os autores não consideraram os efeitos catalíticos das cinzas da madeira sobre as reações de pirólise e de gaseificação. Embora eles reconheçam a existência do comportamento catalisador das cinzas da biomassa, eles

relatam a inexistência de modelos cinéticos que levem em conta estes efeitos e que possam ser implementados em um modelo de CFD.

A comparação dos resultados numéricos de GERBER *et al.* (2010) com os dados experimentais se mostrou satisfatória. Os diferentes modelos de pirólise secundária apresentaram uma mudança na composição dos gases produzidos. Com isso, os autores concluem que o modelo de pirólise tem um grande efeito sobre a predição dos gases produzidos no processo de gaseificação. Deve ser observado que, apesar de ter sido realizada a simulação de 200 segundos de operação do reator, a simulação não atingiu o regime estacionário para todas as variáveis do processo.

No ano de 2010, LI e colaboradores apresentaram um modelo de fluidodinâmica computacional tridimensional Euler-Euler para simular a gaseificação do carvão em um reator de leito fluidizado circulante, de escala laboratorial. O problema foi implementado no código aberto MFX usando um sistema computacional de elevado desempenho. A cinética química utilizada neste trabalho foi o modelo C3M. O objetivo deste trabalho foi analisar a influência dos métodos numéricos de discretização e do refinamento da malha sobre a fluidodinâmica do escoamento. Os resultados indicaram que os esquemas de primeira ordem foram pouco sensíveis ao refinamento da malha, enquanto que os de ordem mais elevada se mostraram mais sensíveis ao tamanho da malha. Além disso, a utilização do método de segunda ordem provocou um impacto maior no tempo de simulação nos casos de malha mais refinada. LI *et al.* (2010) concluíram que é necessário utilizar métodos de discretização de segunda ordem e malhas suficientemente refinadas para obter resultados precisos. Entretanto, deve-se considerar também o tempo gasto nestas simulações, e a aparente dualidade entre precisão e tempo de simulação.

Em XUE *et al.* (2011) foram realizadas simulações fluidodinâmicas bidimensionais do processo de pirólise rápida de biomassa, em um reator de leito fluidizado borbulhante, utilizando um modelo Euler-Euler no código aberto MFX. Os autores simularam a pirólise da biomassa formada apenas por celulose e do bagaço de cana, apresentando o bagaço como uma mistura de celulose, hemicelulose e lignina. Foi utilizada uma equação algébrica para calcular a temperatura granular. Os resultados obtidos mostraram que a presença da lignina provoca uma maior formação de *char* e uma menor formação de alcatrão.

CORNEJO e FARIAS (2011) realizaram a simulação tridimensional do processo de gaseificação de carvão em um reator de leito fluidizado, através de uma abordagem Euler-Euler. O leito do reator foi considerado como sendo formado apenas por partículas de combustível. Os autores adotaram algumas hipóteses simplificadoras para tratar o problema e reduzir o tempo computacional da simulação. Ou seja, foi considerado que

a intensidade das colisões não depende da temperatura das partículas, os efeitos radiativos podem ser desprezados, as partículas de carvão são consideradas esferas isotérmicas e inelásticas, a secagem e a volatilização são instantâneas e as cinzas e seu efeito catalítico podem ser desprezados. Os efeitos turbulentos dos escoamentos foram computados utilizando o modelo de turbulência κ - ϵ . As reações heterogêneas foram calculadas utilizando o modelo KDSRM (*Kinetic/Diffusion Surface Reaction Model*). Em relação às reações homogêneas, os autores consideraram que a taxa de mistura turbulenta regem estas reações. Os resultados obtidos foram comparados com os experimentais e obtiveram uma boa concordância, com exceção da quantidade de metano formado, onde o desvio ultrapassou 70%.

PINHO *et al.* (2012) realizaram uma simulação bidimensional do processo de gaseificação de madeira em um reator de leito fluidizado borbulhante, através de uma abordagem Euler-Euler. Os autores estudaram o mesmo problema abordado por GERBER *et al.* (2010), entretanto utilizaram a hipótese de que a energia granular é dissipada localmente e que os efeitos de convecção e difusão de temperatura granular poderiam ser desprezados. Dessa forma, os autores utilizaram uma expressão algébrica, sugerida por SYAMLAL (1993), para calcular a temperatura granular. Os resultados obtidos foram comparados com os encontrados por GERBER *et al.* (2010) e apresentaram boa concordância, indicando que a utilização das hipóteses sobre a energia granular não apresentam forte influência sobre a predição dos gases produzidos.

XIE *et al.* (2012) realizaram a modelagem Euler-Lagrange tridimensional do processo de gaseificação de resíduos florestais em um reator de leito fluidizado. A equação de quantidade de movimento da fase sólida foi obtida através de uma equação de transporte para a função de distribuição de partículas, seguindo o modelo MP-PIC (*Multiphase Particle-in-Cell*). O leito foi considerado como sendo formado por três tipos diferentes de partículas, areia, *char* e cinzas. Os processos de secagem e de pirólise foram considerados instantâneos. Os resultados apresentaram uma concordância melhor para as situações em que a temperatura do leito era maior.

Embora a gaseificação com misturas de oxigênio e água possua grandes vantagens comparada com a utilização do ar, nenhum dos trabalhos consultados considerou a gaseificação com este agente gaseificador, como será feito no presente trabalho. Além disso, todos os trabalhos revistos consideraram a secagem como sendo um processo instantâneo. Por outro lado, em relação à modelagem do processo de pirólise e dos efeitos turbulentos, os trabalhos da literatura se dividiram bastante. Enquanto alguns consideraram a pirólise como sendo instantânea (YU *et al.*, 2007; CORNEJO e FARÍAS, 2011; PINHO *et al.*, 2012), outros a modelaram utilizando

modelos cinéticos (WANG e YAN, 2008^b; OEVERMAN *et al.*, 2009; GERBER *et al.*, 2010). Detalhes sobre a modelagem utilizada neste trabalho são mostrados nos Caps. 4 e 5.

3 FUNDAMENTOS DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO

3.1 Breve História da Gaseificação no Mundo

Entre os séculos XVII e XVIII o processo de pirólise de madeira para a produção de carvão vegetal era extremamente utilizado para a produção de ferro, mas o gás produzido no processo apenas seria utilizado alguns séculos mais tarde. Na Inglaterra, o desmatamento descontrolado das florestas para a obtenção deste carvão vegetal ocasionou um grave problema ambiental, além de provocar uma grande redução da produção de ferro por falta de madeira (HIGMAN e van der BURGT, 2008). A alternativa encontrada foi a utilização do carvão mineral para a produção de coque.

Em 1812, com a criação da Companhia de Gás, Luz e Coque de Londres, a pirólise de carvão se tornou um processo comercial, no qual o gás produzido era utilizado principalmente para iluminação e aquecimento (HIGMAN e van der BURGT, 2008; BASU, 2010). Este gás se tornou o combustível gasoso mais utilizado no mundo na primeira metade da Revolução Industrial (SREEDHARAN, 2012).

No começo do século XX, a utilização do bulbo elétrico para iluminação começou a reduzir a necessidade do gás de pirólise, embora este ainda fosse utilizado para o aquecimento e para cozinhar. Posteriormente a descoberta do gás natural praticamente extinguiu a utilização do gás de pirólise. O gás natural, além de ser mais barato do que o gás proveniente do carvão, ainda possui um poder calorífico mais elevado. Estes fatores contribuíram diretamente para a substituição do gás derivado do carvão pelo gás natural (HIGMAN e van der BURGT, 2008).

Apesar da baixa importância industrial, foi durante as primeiras décadas do século XX que os principais processos de gaseificação foram desenvolvidos. Entretanto, a gaseificação só começaria a ser vista como uma forma de geração de energia durante a Segunda Guerra Mundial. Quando o petróleo ficou escasso na Europa devido a guerra, alguns países passaram a utilizar a gaseificação de carvão ou de madeira como uma forma de obtenção de combustíveis sintéticos para motores de combustão interna e processos químicos, utilizando o processo de Fischer-Tropsch (BASU, 2010). Na Alemanha, mais de 90% dos combustíveis utilizados durante a Segunda Guerra Mundial eram provenientes do processo de gaseificação de carvão ou de madeira (SIEDLECKI, 2011). O chamado gás de madeira era utilizado nos

automóveis, através do processo de gaseificação em um reator de leito fixo co-corrente (Seç. 3.4). Um exemplo de como era acoplado o gaseificador ao automóvel pode ser visto na Fig. 3.1.



Figura 3.1 - Carro com um gerador de gás de madeira durante a Segunda Guerra Mundial (retirado de SIEDLECKI, 2011).

Depois da Segunda Guerra Mundial, quando o petróleo do Oriente Médio voltou a ser abundante e barato na Europa, o processo de gaseificação teve, novamente, sua importância reduzida, pelo menos até a década de 1970. Embora SIEDLECKI (2011) destaque que alguns países europeus, como a Suécia, continuaram a investir em novas tecnologias de gaseificação e as incluíram em planos estratégicos emergenciais, a maioria dos países parou de investir nesta tecnologia.

Em 1973 ocorreu a Primeira Crise do Petróleo que elevou significativamente o preço do barril de petróleo. Nesta época a dependência de todos os países do petróleo do Oriente Médio era muito grande, de forma que a crise mostrou certa fragilidade da economia mundial, o que motivou o começo de uma busca por novas fontes de energia (REZAIYAN e CHEREMISINOFF, 2005).

Aliado ao fator econômico começava a surgir movimentos preocupados com os danos causados pelas emissões dos combustíveis fósseis tradicionais, como carvão e óleos derivados do petróleo. Em 1972, em uma Conferência das Nações Unidas sobre o Ambiente Humano, foram discutidas pela primeira vez as relações entre desenvolvimento e meio ambiente. Esta conferência serviu de base para uma série de discussões que culminariam na “Rio-92” (HENRIQUES, 2009), o que acabou alertando a população mundial para o risco da utilização descontrolada dos combustíveis tradicionais, e iniciando uma pressão política por parte da sociedade sobre os líderes

mundiais. Começava a tentativa de utilizar fontes de energia renováveis em detrimento das não renováveis.

3.2 Biomassa

A biomassa é um material orgânico que pode ser derivado de vegetais e de animais. Uma definição precisa de biomassa é difícil de ser fornecida, devido à grande diversidade de materiais que se enquadram nesta classe. Entretanto, BASU (2010) recomenda a utilização da definição sugerida pela Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre a Mudança Climática (UNFCCC). Esta definição estabelece que biomassa é o material orgânico não-fossilizado e biodegradável originado de plantas, animais e micro-organismos, podendo incluir produtos, subprodutos, resíduos e sobras provenientes da agricultura e de florestas, assim como as frações orgânicas não fossilizadas e biodegradáveis dos resíduos industriais e municipais.

A partir desta definição, é possível dividir a biomassa em dois grupos:

- (i) Biomassa virgem: inclui basicamente madeiras, plantas e folhas.
- (ii) Biomassa residual: inclui resíduos sólidos ou líquidos de animais e esgotos, assim como gases de aterros sanitários.

Do ponto de vista da composição química, DI BLASI (2008) define a biomassa virgem como um material constituído de uma mistura majoritária de celulose, hemicelulose e lignina, com uma pequena percentagem de minerais e cinzas, de modo que as proporções e suas estruturas químicas variam entre os diferentes tipos de biomassa. A celulose é o material orgânico mais encontrado na natureza, podendo ser considerada um polímero de glucose longo com elevado grau de polimerização. A hemicelulose é uma mistura de polissacarídeos de cadeias menores com estrutura ramificada, e sua composição depende do tipo de biomassa (STRINGEL, 2011). Já a lignina é um complexo polímero de fenil-propano altamente ramificado, que atua como uma matriz polimérica, sendo responsável pela ligação entre as fibras de celulose adjacentes (PINHO, 2012).

A biomassa possui ainda uma certa quantidade de minerais e de metais alcalinos, que podem variar dependendo da origem da biomassa. Estes resíduos não orgânicos formam as cinzas provenientes do processo de oxidação da biomassa. Embora o teor de cinzas da biomassa seja menor do que no carvão mineral, dependendo de sua composição, essas cinzas podem causar influências significativas sobre a utilização da biomassa (BASU, 2010).

É importante notar que o carbono da biomassa provém do dióxido de carbono da atmosfera através do processo da fotossíntese. Dessa forma, quando a biomassa é queimada ou digerida, ocorre a recirculação de CO₂ na atmosfera, de maneira que não ocorre adição de CO₂ na atmosfera (TWIDELL e WEIR, 2006). Embora o poder calorífico da biomassa seja menor do que o do carvão, devido a um grande teor de voláteis e de oxigênio, ela tem a grande vantagem de apresentar baixos teores de nitrogênio molecular e de enxofre (DI BLASI, 2008).

Em BASU (2010) é visto que uma importante forma de se classificar os combustíveis sólidos é segundo a razão atômica do combustível, mais especificamente as razões de oxigênio-carbono, O/C, e hidrogênio-carbono, H/C. Uma justificativa para o menor poder calorífico da biomassa pode ser obtida analisando sua razão atômica. A biomassa apresenta uma elevada razão de H/C, maior do que a do carvão, o que aumenta o poder calorífico do combustível. Entretanto, a razão O/C também é muito elevada na biomassa e, uma vez que o oxigênio não produz energia durante a combustão e ainda colabora para a formação da água, o poder calorífico da biomassa acaba se reduzindo relativamente ao carvão.

3.3 O Processo de Gaseificação de Biomassa

O processo de gaseificação é uma transformação termoquímica onde um material sólido, líquido ou gás, tal como biomassa e resíduos sanitários, é convertido em produtos gasosos, quando submetido a um tratamento térmico sob elevada temperatura na presença de um agente gaseificador (ENGVALL *et al.*, 2011). Este processo ainda gera um resíduo sólido, chamado de *char* (algumas vezes também chamado de carbonizado), que é formado majoritariamente por carbono, além de um produto condensável, chamado de alcatrão (*tar*), que é formado por cadeias de hidrocarbonetos de baixa massa molecular e hidrocarbonetos de cadeias aromáticas com elevada massa molecular (LI e SUZUKI, 2009). A presença deste produto condensável é indesejável para a grande maioria das utilizações do gás resultante do processo de gaseificação, sendo a redução ou destruição deste um dos maiores desafios para o desenvolvimento comercial da gaseificação de biomassa (DAYTON *et al.*, 2011). A composição do gás produzido, assim como a quantidade de alcatrão e de *char* produzidos, depende significativamente de três fatores: o tipo de gaseificador, a composição da matéria-prima utilizada e o agente gaseificador.

Em relação ao tipo de gaseificador utilizado, existem diversas maneiras de se classificar os diferentes modelos de gaseificadores existentes. BAIN e BROER (2011) destacam duas formas de classificação habitualmente empregadas. A primeira

considera o modo em que a energia é fornecida ao gaseificador. Desta forma, os gaseificadores são divididos em dois grupos, os de oxidação parcial, que utilizam ar ou oxigênio como agente gaseificador, e os de aquecimento indireto, que não utilizam gases oxidantes como agente gaseificador, necessitando de aquecimento externo. A segunda leva em conta a condição de fluidização do leito, dividindo os gaseificadores, normalmente, em três grupos: gaseificadores de leito fixo, de leito fluidizado e de leito de arraste. Os reatores de leito fluidizado são subdivididos em reatores de leito fluidizado borbulhante (BFB) e reatores de leito fluidizado circulante (CFB). A classificação levando em conta o padrão de fluidização do leito, por ser mais empregada, é detalhada na Seç. 3.4, assim como alguns fundamentos de fluidização necessários para se compreender esta classificação.

No que concerne a matéria-prima utilizada no processo de gaseificação, a biomassa, virgem e residual, e o carvão mineral são normalmente utilizados. Embora a biomassa produza um gás mais limpo, devido ao baixo teor de enxofre, e seja considerada um combustível com emissões de gases poluentes menos agressivos ao meio ambiente, sua utilização em larga escala ainda encontra algumas dificuldades. Em comparação com o carvão a biomassa é mais difícil de ser armazenada, devido a sua decomposição natural. Adicionalmente ela produz mais substâncias ácidas do que o carvão, devido a uma maior concentração de íons metálicos, e possui uma densidade energética menor do que a do carvão (LONG e WANG, 2011).

Deve ser observado ainda que a presença de metais alcalinos e alcalinos terrosos na composição da biomassa pode afetar significativamente os processos de pirólise e de gaseificação do *char* (KEOWN *et al.* 2008), além de provocar diversos problemas no gaseificador (BASU, 2010). A volatilização desses materiais inorgânicos provocam alguns problemas graves, e constituem um dos grandes problemas da gaseificação de biomassa. Estes materiais podem reagir com outros gases do gaseificador e formar ácidos, provocando problemas de corrosão, ou formarem metais volatilizados que acabam condensando nos equipamentos de remoção de alcatrão, localizados na saída do gaseificador.

Quanto aos agentes gaseificadores, destaca-se a utilização de ar, oxigênio, vapor de água, e misturas entre quaisquer dos três. O ar, por estar disponível em grandes escalas no ambiente é o agente gaseificador mais utilizado (HUYNH e KONG, 2013). Entretanto, o elevado teor de N₂ presente no ar colabora para uma grande concentração de N₂ no gás de síntese, o que acaba reduzindo o poder calorífico do gás (GIL *et al.*, 1999; BASU, 2010), podendo ser problemático para algumas aplicações (BAIN e BROER, 2011). A utilização tanto de O₂ quanto de vapor eleva o poder calorífico do gás. Entretanto, se uma quantidade muito elevada de O₂ for utilizada, ocorrerá uma

intensificação da produção de dióxido de carbono em detrimento do monóxido de carbono, o que acaba reduzindo o poder calorífico do gás.

A principal desvantagem da utilização do vapor é a necessidade de aquecer o leito a temperaturas elevadas, em um intervalo de 700 - 850°C (KUMAR *et al.*, 2009), utilizando uma fonte externa de aquecimento. A utilização de uma mistura de O₂ e vapor acaba com a necessidade de aquecimento externo, além de continuar produzindo um gás com elevado poder calorífico e rico em H₂ e CO. Entretanto, o custo de obtenção de oxigênio é elevado, gerando um custo operacional significativo (GIL *et al.*, 1997), o que consiste em uma das grandes dificuldades de se utilizar esta mistura em gaseificadores de grande escala (HUYNH e KONG, 2013). Um resumo das principais vantagens e desvantagens de cada agente gaseificador pode ser visto na Tab. 3.1.

Tabela 3.1 - Vantagens e desvantagens da utilização de diferentes agentes gaseificadores.

	Vantagens	Desvantagens
Ar	<ul style="list-style-type: none"> • Grande disponibilidade • Baixo custo de operação • Teor moderado de particulado e alcatrão, dependendo do tipo de gaseificador 	<ul style="list-style-type: none"> • Elevada concentração de N₂ • Baixo poder calorífico do gás produzido
Oxigênio	<ul style="list-style-type: none"> • Pode produzir gás com elevado poder calorífico • Reduzido teor de particulados e de alcatrão no gás produzido 	<ul style="list-style-type: none"> • Elevado custo de operação • Elevadas temperaturas de gaseificação • Necessidade de uma planta de separação do ar
Vapor	<ul style="list-style-type: none"> • Pode produzir gás com elevado poder calorífico • Produz gás com elevada concentração de H₂ 	<ul style="list-style-type: none"> • Necessita de uma fonte de aquecimento externa • Elevado custo de operação • Produz um gás com elevado teor de alcatrão

A razão entre a vazão de combustível e a vazão de agente gaseificador é um importante parâmetro que influencia os produtos de gaseificação (BASU, 2010). Este parâmetro possui expressões diferentes para cada tipo de agente gaseificador utilizado. Quando ar ou oxigênio são utilizados, utiliza-se a chamada razão de equivalência (ER)

para relacionar a quantidade de matéria-prima inserida no gaseificador com a quantidade de oxidante fornecido, a qual é definida por TURNS (2000) como:

$$ER \triangleq \frac{(A/C)_{est}}{(A/C)} \quad (3.1)$$

onde (A/C) é a razão ar-combustível real e $(A/C)_{est}$ é a razão ar-combustível estequiométrica.

Quando vapor de água é o agente gaseificador, é utilizada a razão de vapor para biomassa (S/B). Por fim, quando uma mistura de oxigênio e vapor é utilizada, a chamada razão de gaseificação (GR) é normalmente empregada. Estas grandezas são definidas por GIL *et al.* (1999), respectivamente, como:

$$S/B \triangleq \frac{Q_{H_2O}}{Q_B} \quad (3.2)$$

$$GR \triangleq \frac{Q_{O_2} + Q_{H_2O}}{Q_B} \quad (3.3)$$

onde Q_{H_2O} , Q_B e Q_{O_2} são, respectivamente, as vazões mássicas de vapor, de biomassa e de O_2 .

O processo de gaseificação é normalmente dividido em quatro etapas: secagem, pirólise, combustão e gaseificação, que podem ocorrer simultaneamente no interior do reator, mas em locais diferentes, dependendo do tipo de reator utilizado. Cada uma dessas etapas é abordada a seguir.

3.3.1 Secagem

O processo de secagem consiste na retirada da água da biomassa, como ilustrado na Fig. 3.2. Esta etapa do processo de gaseificação pode afetar significativamente a eficiência da gaseificação, pois a energia consumida pelo processo de secagem não é recuperada (SOUZA-SANTOS, 2004). Visto que o teor de umidade da biomassa, de maneira geral, é elevado, em determinadas situações um processo de secagem deve ser realizado antes da biomassa ser inserida no reator. Esta prática é necessária uma vez que é recomendável a utilização da biomassa com um teor de umidade na faixa entre 10 e 20% (BASU, 2010). Em relação ao bagaço de cana, WHITE *et al.* (2011) relatam uma faixa entre 44% e 56% de umidade presente no bagaço

de cana fresco, de maneira que é necessária a redução deste percentual antes de sua utilização.

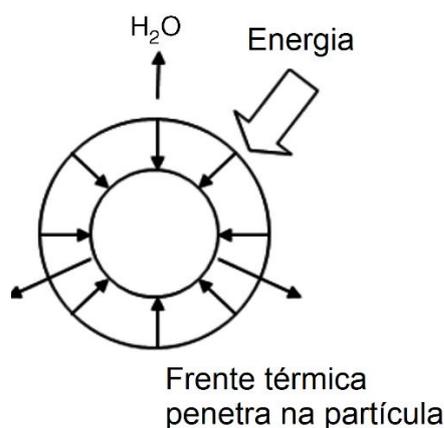


Figura 3.2 - Ilustração do processo de secagem da partícula de biomassa (adaptada de BAIN e BROER, 2011).

BASU (2010) relata a existência de dois tipos de umidade na biomassa, denominadas de umidade livre e umidade residual. A primeira se refere a água presente no interior dos poros e entre as superfícies das paredes das partículas de biomassa. Por outro lado, a segunda está relacionada com a água presente na estrutura química da biomassa, através de ligações químicas. Desta forma, mesmo que haja um processo de secagem antes de inserir a biomassa no gaseificador, é possível que ainda exista um teor de umidade, que só será separado no processo de pirólise, quando ocorrerá alterações químicas na biomassa, como será visto na próxima seção.

3.3.2 Pirólise

A pirólise é um processo de decomposição termoquímica de biomassa, na ausência de agentes oxidantes, em um conjunto de produtos sólidos, líquidos e gasosos. Ela representa uma possível rota de conversão termoquímica, resultando na produção de diversos componentes químicos (DI BLASI, 2008). Durante o processo de gaseificação, a matéria-prima utilizada sofre o processo de pirólise logo após o processo de secagem. Esta etapa do processo de gaseificação começa a ocorrer após a partícula atingir uma temperatura específica para a qual as ligações moleculares das longas cadeias de hidrocarbonetos começam a serem quebradas em moléculas menores de gases e voláteis. Este comportamento se torna progressivamente mais rápido à medida que a temperatura da partícula aumenta, até que todas as grandes moléculas de

hidrocarbonetos se decompõem (BAIN e BROER, 2011). Diversos autores estabelecem que este processo termina antes que a temperatura da partícula atinja o valor de 500 °C (e.g., DI BLASI, 2008; BAIN e BROER, 2011; NEVES *et al.* 2011).

Os produtos da pirólise são o *char*, o alcatrão e gases permanentes. O *char* é o resíduo sólido do processo da pirólise e, segundo afirma BASU (2010), sua composição possui aproximadamente 85% de teor de carbono. Para facilitar a modelagem do *char*, a maioria dos estudos publicados (e.g., YU *et al.*, 2007; WANG e YAN, 2008^b; GÓMEZ-BÁREA e LECKNER, 2010; GERBER *et al.*, 2010; PINHO, 2012) tem utilizado a hipótese de que o *char* é formado unicamente por carbono, desprezando elementos reativos como o oxigênio e o hidrogênio.

O alcatrão é formado por gases condensáveis e, quando condensado, dá origem ao chamado bio-óleo, que é um líquido escuro e viscoso constituído basicamente por uma complexa mistura de hidrocarbonetos condensáveis, aromáticos e poli-aromáticos, além de um percentual de água (PINHO, 2012). O alcatrão, dependendo da utilização final do gás produzido, é extremamente indesejado, pois pode causar desde entupimento de tubulações e de filtros, até a erosão em turbinas à gás, devido a formação de fuligem ocasionada de sua combustão (DAYTON *et al.*, 2011). Na Tab. 3.2 é possível observar o limite do teor de alcatrão para algumas situações.

Tabela 3.2 - Limites superiores para a concentração de alcatrão na utilização dos gases produzidos pela gaseificação de biomassa (adaptado de BASU, 2010).

Aplicação	Teor de alcatrão [g/Nm³]
Combustão direta	Não tem especificação de limite
Produção de gás de síntese	0,1
Turbina à gás	0,05 – 5
Motores de combustão interna	50 – 100
Transporte em tubulações	50 - 500 para compressor
Células combustíveis	<1,0

Os gases permanentes são, em sua maioria, gases como CH₄, CO, CO₂, H₂, dentre outros hidrocarbonetos leves não condensáveis (NEVES *et al.*, 2011). Entretanto, podem existir alguns gases indesejados como H₂S e NH₃, que precisam ser removidos do gás produzido, dependendo da utilização final do gás (DAYTON *et al.*, 2011).

DI BLASI (2008) afirma que a quantidade de um dos produtos pode ser favorecida com a variação da temperatura de pirólise, da pressão no reator e da taxa de aquecimento. O processo da pirólise pode ser classificado em relação à taxa de aquecimento como pirólise lenta e pirólise rápida (BASU, 2010).

A pirólise lenta consiste em uma taxa de aquecimento moderada até uma temperatura em torno de 600 °C. Neste processo o tempo de residência da biomassa no interior do reator é longo, favorecendo a formação de *char*. A pirólise rápida consiste em uma taxa de aquecimento rápida o suficiente para que a biomassa atinja a temperatura de pirólise antes de começar sua decomposição térmica (BASU, 2010). Neste processo o tempo de residência da biomassa no interior do reator é pequeno e, dependendo da temperatura atingida, pode ocorrer o favorecimento da produção de bio-óleo ou de gases.

Após terminada a degradação térmica das partículas de biomassa, se a temperatura no interior do gaseificador for suficientemente elevada tem início um processo chamado de pirólise secundária, ou craqueamento térmico do alcatrão. Este processo é semelhante ao da pirólise das partículas sólidas, também chamada de pirólise primária. Ou seja, na pirólise secundária as cadeias de hidrocarbonetos do alcatrão são quebradas e reagrupadas, produzindo uma quantidade de *char*, de gases permanentes e de um alcatrão refratário ou residual.

A temperatura necessária para a ocorrência do craqueamento térmico do alcatrão é mais elevada do que àquela necessária para a ocorrência da pirólise primária, variando entre 400 °C e 900 °C, de acordo com DI BLASI (2008). O processo de pirólise é ilustrado na Fig. 3.3, enquanto que as reações (R.1) e (R.2) podem representar, respectivamente, a pirólise primária e a pirólise secundária.

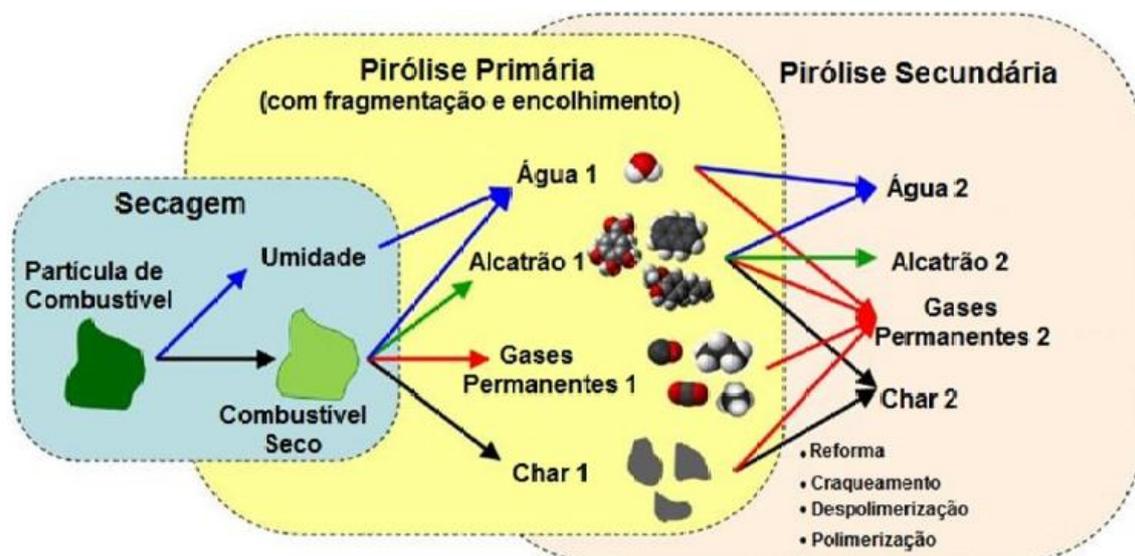
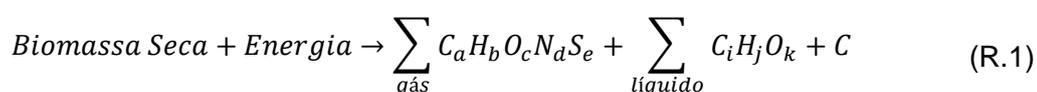
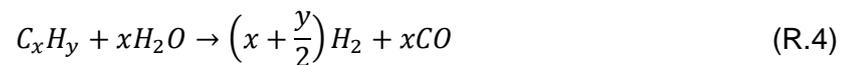
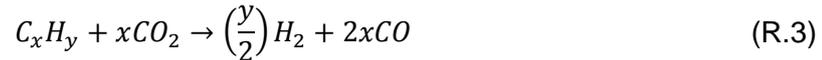


Figura 3.3 - Representação do processo de pirólise (retirado de PINHO, 2012).





Reações de reforma de alcatrão, na presença de CO₂ e de vapor de água são relatadas em BASU (2010). GÓMEZ-BÁREA e LECKNER (2010) apresentam vários modelos cinéticos para essas reações, que podem ser representadas por:



BASU (2010) afirma que a reação de reforma com CO₂ costuma ocorrer apenas com o uso de catalisadores, enquanto que a reforma com H₂O pode ocorrer em gaseificadores utilizando vapor como agente gaseificador.

A pirólise pode ser classificada em pirólise lenta e rápida dependendo da taxa de aquecimento utilizada. Uma vez que taxas de aquecimento reduzidas favorecem a formação de *char*, a pirólise lenta é normalmente utilizada quando se quer obter *char*. Por outro lado, taxas de aquecimento mais elevadas podem favorecer a formação de bio-óleo e de gases.

3.3.3 Reações de gaseificação ou gaseificação

A definição de gaseificação dada por PEPIOT *et al.* (2010) considera que a gaseificação é a completa despolimerização da biomassa em gases na presença de um meio com uma quantidade de oxigênio limitada, a uma elevada temperatura. As reações de gaseificação, ou simplesmente gaseificação, ocorrem após a pirólise e as reações consistem em reações heterogêneas entre o *char* e os gases presentes no interior do reator e homogêneas de reforma entre os gases formados na etapa de pirólise e os gases resultantes das reações heterogêneas.

HIGMAN e van der BURGT (2008) afirmam que as reações de gaseificação heterogêneas são as reações mais lentas do processo de gaseificação e, por este motivo, são elas as grandes responsáveis pela taxa total de conversão do *char* em gases. Com relação a esta observação, DI BLASI (2009) afirma que condicionar a

pirólise a fornecer uma grande quantidade de voláteis e uma pequena quantidade de *char* é um meio de melhorar a capacidade do gaseificador.

A seguir são representadas as principais reações de gaseificação que ocorrem nesta etapa, supondo que o *char* é formado apenas por carbono (HIGMAN e van der BURGT, 2008; BASU, 2010, PINHO, 2012).

i) Reações Heterogêneas

i.1) Reação de gaseificação com vapor



i.2) Reação de Boudouard



i.3) Reação de metanação



ii) Reações Homogêneas

ii.1) Reação de deslocamento da água



ii.2) Reação de reforma do metano



É importante notar que, se todas as equações heterogêneas atingissem o equilíbrio químico, todo o carbono presente no *char* seria convertido em gases. Contudo, de maneira geral, o tempo de contato entre o *char* e os reagentes gasosos para elevadas temperaturas é insuficiente para que o equilíbrio seja alcançado, o que acarreta no aparecimento do *char* nos produtos da gaseificação (BAIN e BROER, 2011).

Observando as reações de gaseificação (R5 – R9) é possível notar que elas são em geral endotérmicas, logo necessitam de uma determinada quantidade de energia para ocorrerem. Essa energia é proveniente da combustão, etapa que será descrita a seguir. Também é possível observar que a reação de metanação é exotérmica e

também contribui para o fornecimento de energia para o leito. Entretanto, deve-se ponderar que a contribuição da reação de metanação é normalmente desprezível, devido a pequena quantidade de hidrogênio presente no leito do gaseificador (BAIN e BROER, 2011) e a sua baixa taxa de reação.

3.3.4 Combustão

A combustão pode ser definida como uma reação exotérmica rápida que libera uma considerável quantidade de energia térmica (TURNS, 2000). Esta etapa é de extrema importância para o processo de gaseificação autotérmico, pois é a responsável por fornecer a quantidade de energia necessária para que as demais etapas ocorram. As reações de combustão tipicamente consideradas são mostradas a seguir:

i) Reações Heterogêneas

i.1) Oxidação completa do carbono



i.2) Oxidação parcial do carbono



ii) Reações Homogêneas

ii.1) Oxidação do monóxido de carbono



ii.2) Oxidação do metano



ii.3) Oxidação do hidrogênio



Como pode ser visto acima, assim como nas reações de gaseificação, as reações de combustão também se dividem em reações heterogêneas e homogêneas. Neste caso, as reações heterogêneas são as chamadas reações de oxidação completa (R.10) e incompleta (R.11) do carbono. As reações de oxidação, de maneira geral, possuem taxas de reação algumas ordens de grandeza maior do que as reações de gaseificação (HIGMAN e van der BURGT, 2008; DI BLASI, 2009; BASU, 2010), descritas na seção anterior. Segundo BASU (2010), as taxas das reações de oxidação de carbono são tão velozes que grande parte do oxigênio é consumido por estas reações, deixando pouco oxigênio livre para as demais reações de oxidação. Deve ser observado ainda que a pequena quantidade de oxigênio limita as reações de combustão as regiões próximas as entradas do agente oxidante.

3.4 Classificação dos Reatores em Relação ao Padrão de Fluidização do Leito

Os reatores utilizados nos processos de gaseificação são divididos em relação ao tipo de leito como: reatores de leito fixo ou móvel, reatores de leito fluidizado e reatores de leito de arraste. Esses tipos de reatores ainda podem ser subdivididos dependendo do funcionamento de cada um deles.

É importante observar que a escolha do tipo de reator adequado a ser utilizado depende fundamentalmente da escala da planta que se quer construir e do tipo de matéria-prima que será utilizada (SOUZA-SANTOS, 2004). A Fig. 3.4 pode ser utilizada para se ter uma ideia da faixa de operação de cada tipo de reator. Esta figura mostra que os reatores de leito fixo são ideais para operarem em pequenas escalas, enquanto que os reatores de leito de arraste servem para aplicações de grande escala. Por outro lado, os reatores de leito fluidizado se apresentam como opção para operações de média e grande escala.

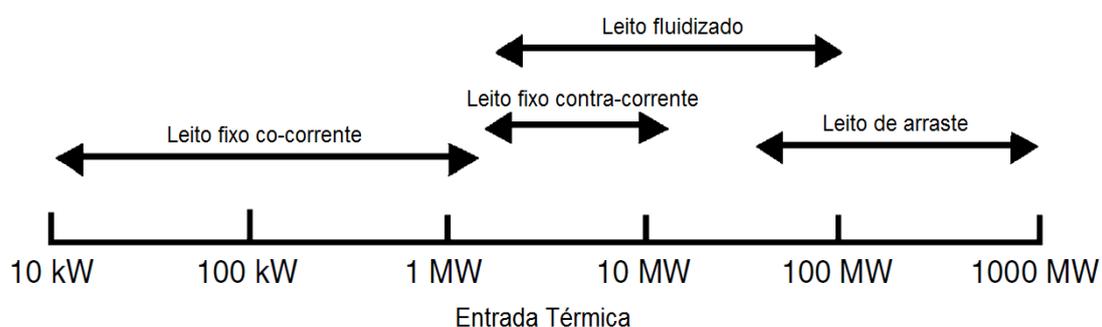


Figura 3.4 - Faixa de aplicação de cada tipo de reator (retirado de PINHO, 2012).

3.4.1 Reatores de leito fixo

Os gaseificadores de leito fixo podem ser construídos com custos extremamente baixos em pequenas dimensões, o que consiste em uma de suas principais vantagens (BASU, 2010). Por este motivo este tipo de gaseificador é o mais comum atualmente. Entretanto, o fato dos reatores de leito fixo operarem apenas para pequenas cargas tem incentivado formas de viabilizar os reatores de leito fluidizado e de arraste, que são ideais para operarem em escala industrial. Os reatores de leito fixo podem ser subdivididos a partir da direção na qual as correntes de combustível e de oxidante escoam, como reatores contracorrente e reatores co-corrente.

Os gaseificadores contracorrente são o tipo de gaseificador mais antigo e simples de ser construído, de maneira que ele ainda tem sido amplamente utilizado para a gaseificação de carvão e, em menor escala, para gaseificação de biomassa (CENBIO, 2002). Um esquema do funcionamento deste tipo de reator, assim como uma estimativa da distribuição de temperatura ao longo do reator são mostrados na Fig. 3.5.

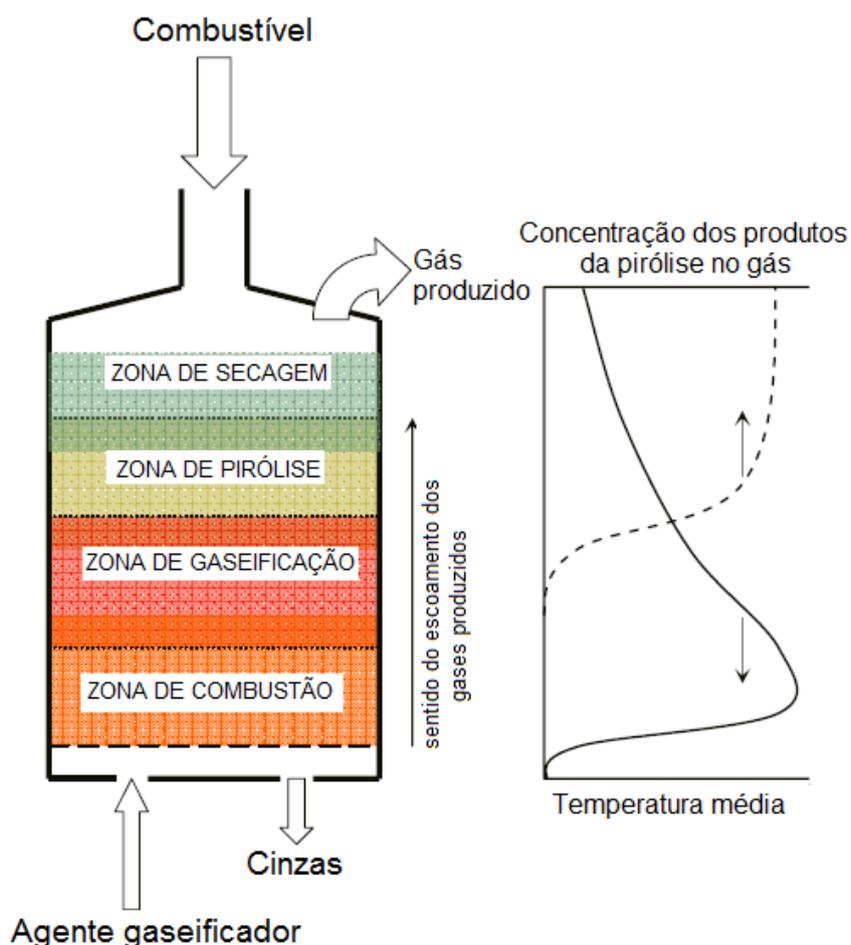


Figura 3.5 - Gaseificador de leito fixo contracorrente (adaptado de SIEDLECKI, 2011).

Como mostrado na Fig. 3.5, nos gaseificadores contracorrente as partículas de combustível são injetadas pela região superior do reator, enquanto que o ar é injetado pela região inferior. À medida que o combustível vai se movendo, no sentido oposto ao da corrente de gás, as partículas vão passando pelas etapas de secagem, pirólise, gaseificação e combustão. Embora na Fig. 3.5 as regiões em que cada uma das etapas ocorre esteja bem definida, é necessário observar que estas fronteiras não são bem definidas. Logo, é possível que o interior de uma partícula esteja sofrendo secagem, enquanto que suas regiões mais externas estejam sendo pirolisadas (SOUZA-SANTOS, 2004).

Nestes gaseificadores, a remoção das cinzas é realizada comumente com o uso de uma grelha rotatória no fundo do reator, enquanto que os gases produzidos saem pela parte superior do reator. O fato da região de combustão estar localizada próxima do local de retirada de cinzas reduz a possibilidade das cinzas fundirem e causarem problemas de entupimento de tubos, prejudicando a operação do gaseificador, como ocorre em reatores co-corrente. Desta forma, os reatores contracorrente podem ser considerados praticamente insensíveis ao teor de cinzas do combustível (SIEDLECKI, 2011).

Contudo, o fato dos gases produzidos não chegarem próximos das zonas mais quentes do gaseificador provoca uma produção de alcatrão muito elevada quando comparado com os demais tipos de reatores, da ordem de 50.000 mg/Nm^3 . Desta forma, os gases produzidos por estes gaseificadores devem sofrer processos de retirada de alcatrão para utilização em turbinas à gás e motores de combustão interna e produção de gás de síntese. Já para queima direta em caldeiras, este processo não se faz necessário (BAIN e BROER, 2011).

Nos reatores co-corrente o combustível e o agente gaseificador escoam no mesmo sentido. Embora o sentido do escoamento possa ser de baixo para cima ou de cima para baixo, a maioria dos reatores co-corrente operam com o fluxo direcionado para baixo (SIEDLECKI, 2011), como mostrado na Fig. 3.6. Neste caso, o combustível é inserido pelo topo do reator e o agente gaseificador no meio do reator e, à medida que as partículas vão escoando para baixo, elas vão sofrendo as etapas de secagem, pirólise, combustão e gaseificação.

Na situação mostrada na Fig. 3.6, tanto os gases quanto as cinzas são retiradas do reator pela região inferior. Deve-se observar que, nesta situação, os produtos da pirólise cruzam a zona de combustão do reator. Esta característica faz com que grande parte do alcatrão produzido seja queimada, o que reduz significativamente a concentração do alcatrão nos produtos da gaseificação (BASU, 2010; GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010). Por outro lado, estas mesmas características tornam estes

gaseificadores extremamente dependentes do teor de umidade. Se a biomassa possuir um teor de umidade acima de 20%, é possível que ocorra dificuldades para a ocorrência da secagem e da pirólise, ocasionando um aumento no teor de alcatrão (CENBIO, 2002).

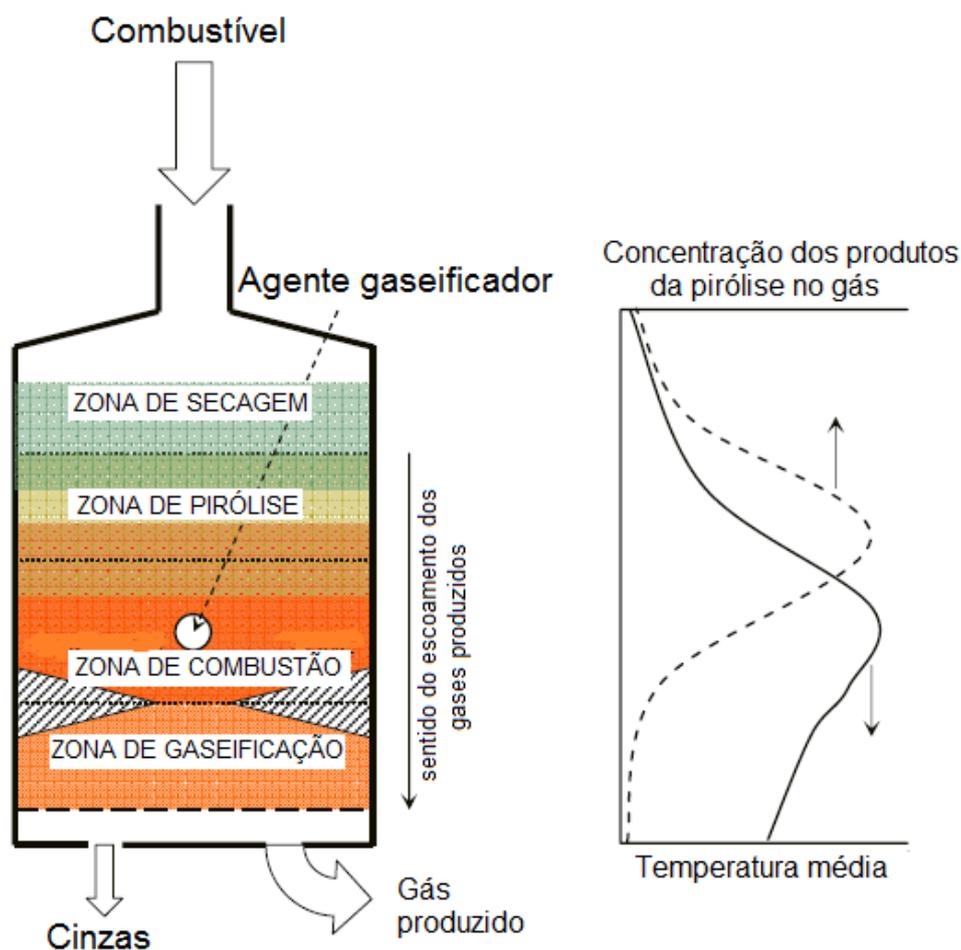


Figura 3.6 - Gaseificador de leito fixo co-corrente (adaptado de SIEDLECKI, 2011).

Além do teor de umidade o teor de cinzas também constitui um limitador para estes reatores co-corrente, uma vez que elevadas temperaturas na região de combustão podem provocar fundição das cinzas e, conseqüentemente, problemas operacionais.

A grande vantagem dos gaseificadores co-corrente é seu baixo teor de alcatrão. Por este motivo ele é ideal para ser utilizado em conjunto com um motor de combustão interna, que necessita de baixos teores de alcatrão. Adicionalmente, estes reatores possuem pequeno porte, o que justifica a escolha por estes gaseificadores durante a Segunda Guerra Mundial, como mostrado na Fig. 3.1.

3.4.2 Reatores de leito fluidizado

Os reatores de leito fluidizado operam de maneira que as partículas de combustível são fluidizadas utilizando um gás. Uma corrente de gás é inserida na parte inferior do reator de maneira que o leito de partículas passa a possuir várias características típicas de um fluido (GRACE *et al.*, 2006).

Este tipo de reator pode ser subdividido em dois subgrupos: reatores de leito fluidizado borbulhante (LFB) e reatores de leito fluidizado circulante (LFC). A diferença básica entre estes dois tipos de reatores reside no fato de os reatores LFC possuírem recirculação das partículas, o que eleva o tempo de residência das partículas no leito e, conseqüentemente, melhora a eficiência da conversão de carbono (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010).

Antes de comentar sobre as características e peculiaridades dos dois tipos de reatores de leito fluidizado, é necessário entender o processo de fluidização, assim como os diferentes padrões de fluidização. Um leito de partículas é dito fluidizado quando um fluxo gasoso, inserido na parte inferior do leito, possui uma velocidade suficiente para que o arrasto possa contrabalancear o peso das partículas, dessa forma por definição as partículas do leito possuem velocidade nula (GIDASPOW, 1994). A velocidade mínima necessária para que o leito seja fluidizado é chamada de velocidade mínima de fluidização (U_{mf}). É possível obter diferentes padrões de fluidização variando apenas a velocidade superficial do agente fluidizante, U acima da velocidade mínima de fluidização.

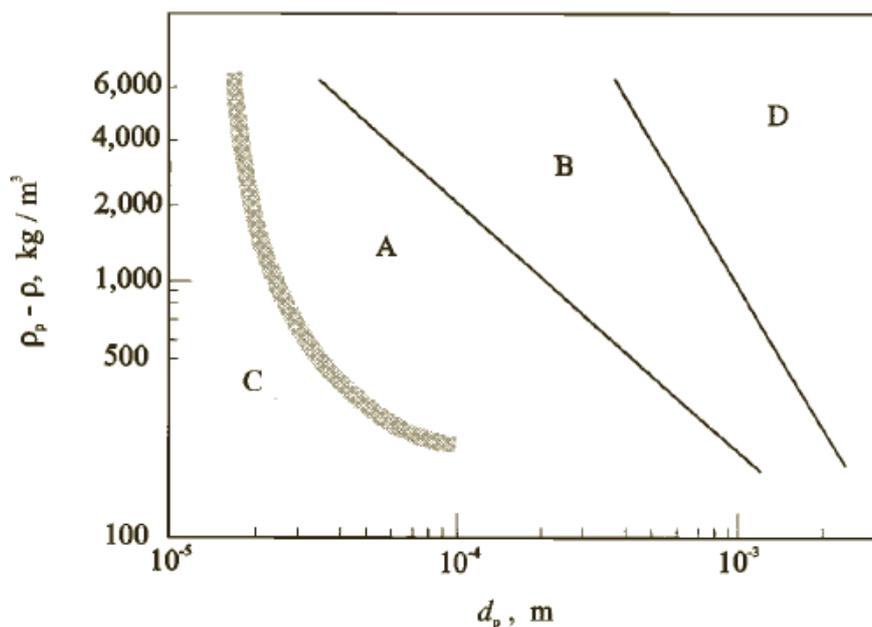


Figura 3.7 - Diagrama de Geldart (retirado de FAN e ZU, 1998).

Entretanto, o comportamento da fluidização de um determinado conjunto de partículas não depende apenas da velocidade superficial do gás fluidizante, mas também das características do material. GELDART (1973) dividiu os materiais particulados em quatro grupos, considerando o diâmetro médio e massa específica das partículas. Além de apresentar uma discussão sobre as características de cada grupo, o autor também apresenta uma formulação matemática para classificar cada um dos grupos. Esta formulação deu origem ao diagrama de Geldart, mostrado na Fig. 3.7, que permite identificar o grupo ao qual um determinado conjunto de partículas pertence, conhecendo apenas a massa específica do gás fluidizante (ρ_g) e do material particulado (ρ_p), e o diâmetro médio das partículas (d_p).

As partículas do grupo A possuem uma faixa de diâmetros médios entre 30 e 100 μm , pequena massa específica ($\rho_p < 1400 \text{ kg/m}^3$) e possuem uma grande facilidade para serem fluidizadas.

O grupo B é formado por partículas com diâmetros médios entre 40 e 500 μm , e massa específica situada entre 400 e 1400 kg/m^3 . Normalmente a areia utilizada para ajudar na fluidização em determinadas situações, faz parte do grupo B (GIDASPOW, 1994).

O grupo C contém as partículas de menor diâmetro ($d_p < 20 \mu\text{m}$), e é caracterizado pelo comportamento altamente coesivo dessas partículas, o que dificulta a fluidização das partículas pertencentes a este grupo. Esta dificuldade é causada pelo fato das forças entre as partículas, tais como as forças de van der Waals, forças capilares e forças eletrostáticas dominarem as forças fluidodinâmicas (FAN e ZU, 1998).

Finalmente, as partículas do grupo D possuem diâmetros elevados, superiores a 500 μm , e normalmente são utilizadas em reatores que contenham jato. Um leito fluidizado com partículas deste grupo possui grandes bolhas e taxas de mistura inferior às taxas dos grupos A e B (GRACE *et al.*, 2006).

Na Fig. 3.8 estão representados padrões de fluidização que as partículas dos grupos A, B e D podem apresentar, dependendo da velocidade superficial do agente fluidizante.

O leito é dito fixo nos casos em que a velocidade do agente gaseificador entrando no reator é inferior à velocidade de mínima fluidização. Neste caso o leito não está fluidizado, de maneira que o gás inserido atravessa o leito como se este fosse um objeto poroso. Dessa forma, as partículas do leito não se movem e são sustentadas pela placa distribuidora de gás, localizada na parte inferior do leito.

Quando a condição de mínima fluidização é atingida ($U = U_{mf}$) o leito se expande e as partículas começam a se movimentar de maneira mais intensa, sem o

aparecimento de bolhas. Esta situação ocorre apenas quando partículas do grupo A estão sendo utilizadas. Para os grupo B e D assim que a velocidade superficial do agente fluidizante alcança a velocidade de mínima fluidização o processo de formação de bolhas tem início.

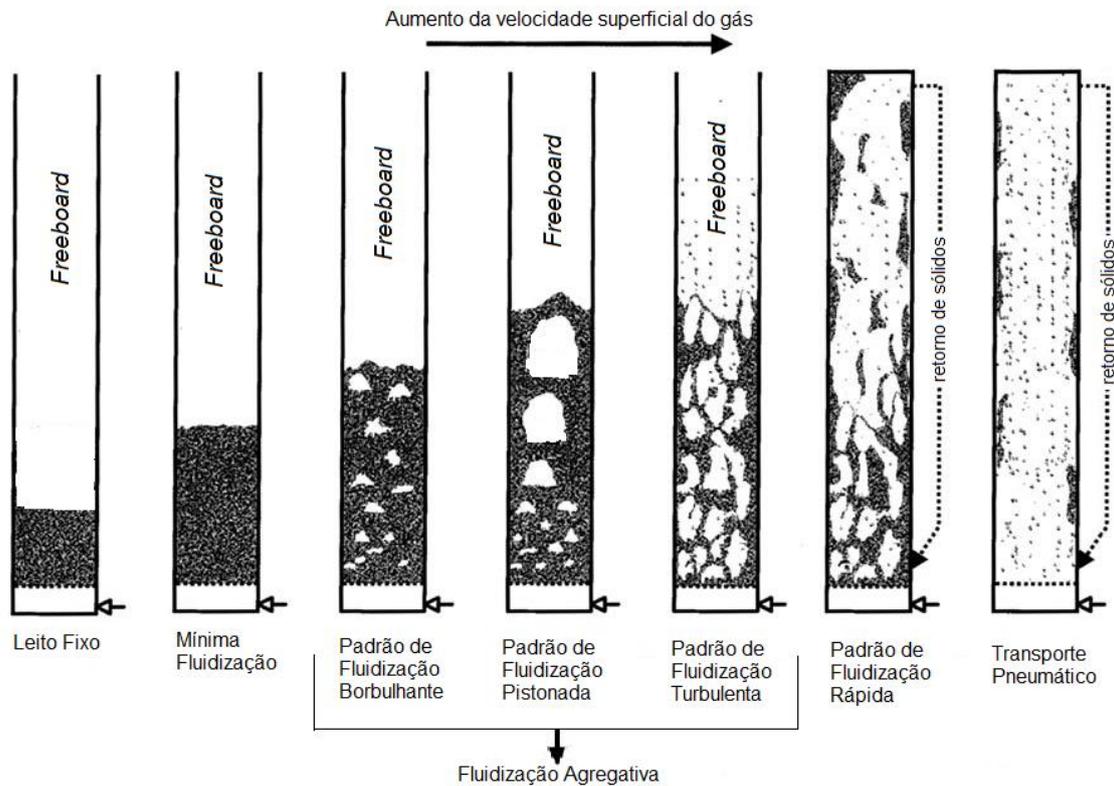


Figura 3.8 - Regimes de fluidização do escoamento gás-partícula (adaptado de GRACE *et al.*, 2006).

Em situações em que $U \geq U_{mb}$, onde U_{mb} é a velocidade mínima de borbulhamento, o leito opera em regime de borbulhamento. Nesta situação, o leito apresenta uma expansão maior com a existência dos fenômenos de coalescência e quebra de bolhas (FAN e ZU, 1998). Estes fenômenos ajudam a elevar de maneira significativa as taxas de mistura e de transferência de calor no interior do leito. Note que para as partículas do grupo A, $U_{mb} > U_{mf}$, enquanto que para as partículas dos grupos B e D, $U_{mb} = U_{mf}$. Outra observação sobre este padrão de fluidização consiste na identificação de duas fases distintas na região do leito, a fase de emulsão, formada por partículas sólidas fluidizadas, e a fase de bolhas, formada por gases.

Em leitos com pequeno diâmetro e razão altura/diâmetro do leito elevadas, as partículas dos grupos A, B e D podem sofrer fluidização com padrão de escoamento pistonado, quando a velocidade superficial do agente fluidizante for maior do que uma

velocidade mínima para formação de *slug* ($U \geq U_{m,slug}$). Os *slugs* são bolhas cujos diâmetros são maiores do que a metade do diâmetro do leito (GRACE *et al.*, 2006). Eles são formados a partir da coalescência de bolhas, que aumenta à medida que a velocidade superficial dos gases aumenta.

Se a intensidade da velocidade superficial continuar aumentando, chegará um momento em que as bolhas ao invés de coalescer irão explodir, o que diminui o tamanho médio das bolhas. Neste caso, a região chamada de *freeboard*, localizada acima do leito de partículas, passa a sofrer com uma presença elevada de partículas, de maneira que a fronteira entre as regiões do leito e do *freeboard* passa a ser bastante difusa (JAKOBSEN, 2008). Esta situação é chamada de fluidização turbulenta, e é vista como um padrão de transição entre a fluidização de leito denso e a fluidização de leito disperso.

Os demais padrões da Fig. 3.8 são padrões de fluidização dispersos, que ocorrem para velocidades tão elevadas que as bolhas desaparecem do leito. O padrão de fluidização rápida tem início quando a interface entre o leito de partículas e a região do *freeboard* torna-se indistinguível. Nesta situação existe a formação de aglomerados de partículas que se movem para baixo nas regiões próximas às paredes do reator, enquanto que o gás e as partículas arrastadas se movem para cima no meio do reator, com várias partículas sendo jogadas para fora do reator (JAKOBSEN, 2008). Para o padrão de transporte pneumático a velocidade é tão intensa que todas as partículas são jogadas para fora do leito.

Tabela 3.3 - Limites de velocidade superficial do agente fluidizante para diferentes padrões de fluidização.

Leito Fixo	$U < U_{mf}$
Leito Fluidizado	$U_{mf} \leq U < U_{mb}$
Leito Fluidizado Borbulhante	$U \geq U_{mb}$
Leito Pistonado	$U \geq U_{m,slug}$

Na Tab. 3.3 estão indicados os limites para a velocidade superficial do agente fluidizante segundo a definição dos padrões de escoamento da Fig. 3.8. Uma discussão mais profunda acerca do problema da fluidização, assim como expressões para calcular os valores de U_{mf} , U_{mb} e $U_{m,slug}$ podem ser encontradas em FAN e ZU (1998) e GRACE *et al.* (2006).

Nos reatores LFB o agente gaseificador é introduzido pela região inferior do reator, com velocidade inferior a 2,0 m/s, ou seja, longe da condição de fluidização

turbulenta. A biomassa é alimentada a partir de uma entrada lateral, localizada acima de uma placa distribuidora, usada para distribuir o gás de entrada de maneira uniforme no reator. Os gases deixam o reator pela região superior, enquanto que as cinzas são removidas pela parte inferior, como pode ser visto na Fig. 3.9.

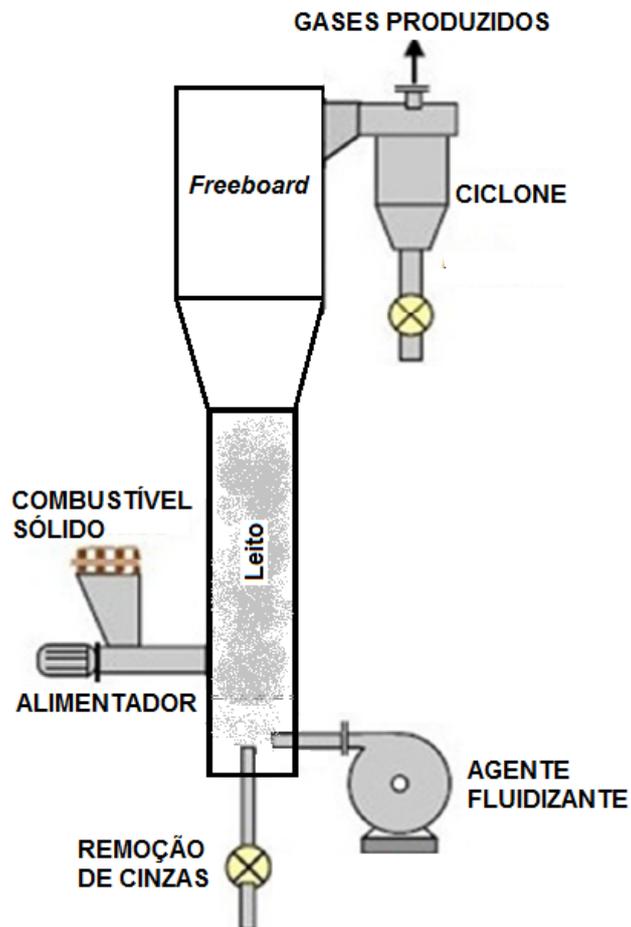


Figura 3.9 - Gaseificador de leito fluidizado borbulhante.

A explosão das bolhas próximas a região do *freeboard* provoca o lançamento de partículas sólidas para a região do *freeboard*. Normalmente a região do *freeboard* possui uma área de seção transversal maior do que na região do leito, com o intuito de ajudar no retorno das partículas para o leito (BAIN e BROER, 2011). No entanto, apenas as partículas maiores, com velocidades terminais inferiores a velocidade superficial do gás ascendente, retornam ao leito. Contudo, a maioria das partículas sólidas que chegam a região do *freeboard* acabam sofrendo o processo de elutriação, que consiste no arrasto dessas partículas para fora do reator, junto com a corrente de gases produzidos (SOUZA-SANTOS, 2004).

A temperatura de operação dos reatores LFB é limitada pela temperatura de fusão das cinzas do combustível utilizado. Uma vez que as cinzas começam a se fundir

e a formar partículas maiores, pode ocorrer até mesmo uma defluidização do leito. Dessa forma, os gaseificadores LFB operam, normalmente, com temperaturas inferiores a 900°C (SIEDLECKI, 2011).

Os reatores LFC, como ilustrado na Fig. 3.10, são compostos por um *riser*, onde ocorre a injeção de combustível e de agente oxidante, um separador ciclone, localizado na saída do *riser*, o *downcommer*, que é um recipiente que ajuda na regulação da taxa de recirculação das partículas, além da placa distribuidora presente também nos reatores LFB (FAN e ZHU, 1998). O sistema de injeção de biomassa e de agente gaseificador é similar ao dos reatores LFB, como pode ser visto pelas Figs. 3.9 e 3.10. Todavia, estes reatores operam com velocidades superiores, normalmente entre 3 e 10 m/s, com padrões de fluidização rápida ou de transporte pneumático. Dessa forma, grande parte do material do leito, ou até mesmo todo ele, é arrastado para fora do *riser*, onde o separador ciclone faz com que os gases deixem o ciclo do gaseificador, enquanto que os sólidos são inseridos no *downcommer* para serem recirculados no *riser*.

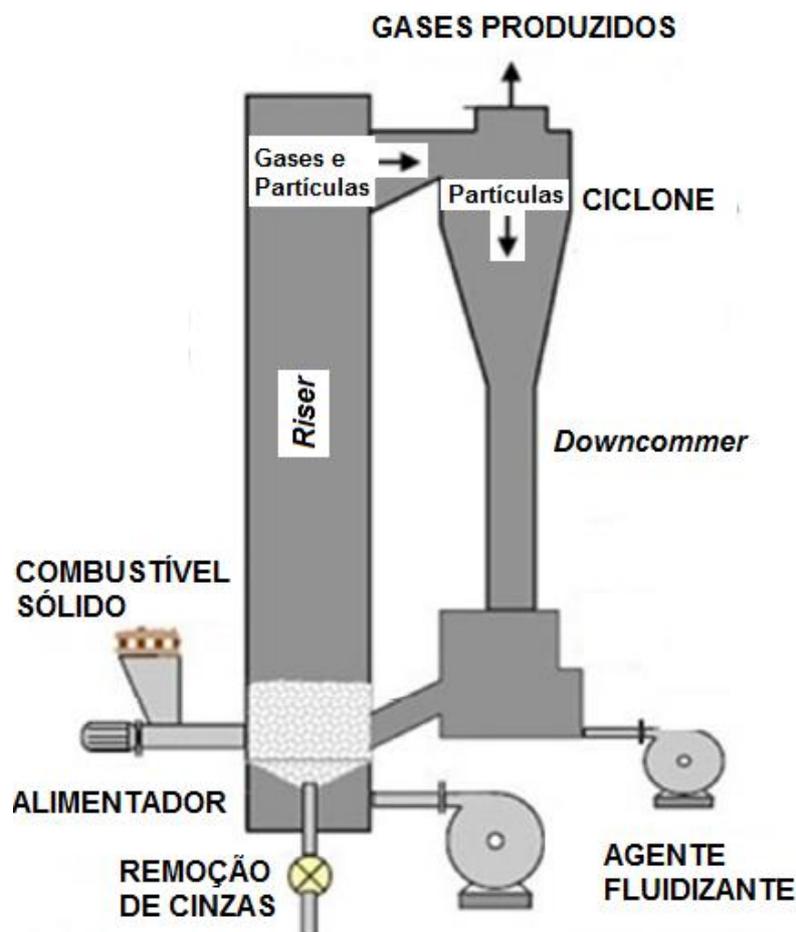


Figura 3.10 - Gaseificador de leito fluidizado circulante (alterado de PINHO, 2012).

Quando comparado com os gaseificadores de leito fixo, os gaseificadores de leito fluidizado, de maneira geral, possuem a vantagem de poderem operar com cargas mais elevadas. Além disso, estes gaseificadores possuem uma característica única, devido a vigorosa taxa de mistura tanto nos reatores LFB quanto nos LFC, existe a possibilidade de se utilizar um grande número de combustíveis diferentes, ou uma mistura entre diferentes combustíveis (BASU, 2010). Outra vantagem é a possibilidade de utilização de catalisadores no leito dos reatores fluidizados, com o objetivo de reduzir os teores de alcatrão e outros poluentes, como o enxofre, e aumentar a quantidade de H₂ e CO nos gases produzidos (GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010).

Comparando os reatores LFC e LFB é possível notar que os reatores LFC possuem a vantagem de trabalharem com vazões maiores e produzirem um gás, de maneira geral, com uma menor quantidade de alcatrão e de material particulado (BAIN e BROER, 2011). Além disso, as bolhas dos reatores LFB facilitam as reações de combustão homogêneas, devido à reduzida difusividade do oxigênio entre as bolhas e a emulsão. Dessa forma, as reações de combustão heterogêneas são prejudicadas, o que reduz a eficiência de conversão do gaseificador (BASU, 2010). Como os reatores LFC não possuem bolhas, este problema não existe para esses reatores.

Por outro lado, os reatores LFB possuem a vantagem de trabalharem com uma condição praticamente isotérmica no leito, devido as elevadas taxas de mistura das partículas e de transferência de calor e massa. Esta condição permite um controle maior sobre a temperatura do processo de gaseificação. Além disso, a necessidade de se utilizar um separador ciclone com equipamentos adicionais para realizar o retorno dos sólidos ao reator eleva os custos de investimento dos reatores LFC, frente aos reatores LFB (ALAUDDIN *et al.*, 2010).

3.4.3 Reatores de leito de arraste

Este tipo de reator opera com a corrente de combustível e a de agente gaseificador sendo inseridas, com elevadas velocidades, no mesmo local e escoando com mesma direção e sentido. Na Fig. 3.11 pode ser vista uma ilustração do funcionamento de reatores de leito de arraste com injeção dos reagentes na região superior do reator e saída de gases na região inferior. No entanto, também existem reatores em que combustível e agente gaseificador são inseridos na região inferior e deixam o reator pela região superior.

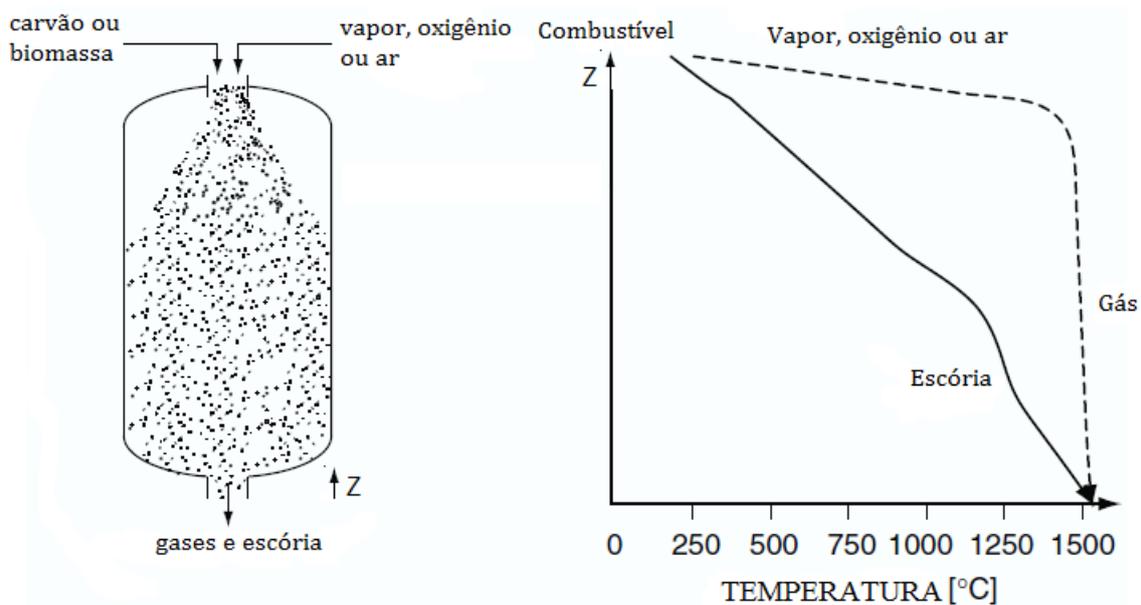


Figura 3.11 - Gaseificador de leito de arraste e a distribuição da temperatura no reator (alterado de HIGMAN e van der BURGTH, 2008).

Devido às elevadas velocidades do escoamento, o tempo de residência das partículas no interior do reator é muito curto. Logo, existe a necessidade de se operar com temperaturas muito elevadas, normalmente acima da temperatura de fusão das cinzas, e com partículas de combustível extremamente pequenas, com o objetivo de garantir uma taxa de conversão satisfatória (HIGMAN e van der BURGT, 2008).

O reator de leito de arraste é ideal para produzir grandes quantidades de gás, uma vez que existe a possibilidade de trabalharem com uma carga muito maior do que a dos demais tipos de reatores. Outra vantagem é o fato do gás produzido ser praticamente livre de alcatrão, graças às elevadas temperaturas no interior do reator, superiores a 1000 °C (BASU, 2010). Uma de suas desvantagens é a necessidade de utilizar materiais que resistam a elevadas temperaturas para construir o gaseificador, o que acaba encarecendo a planta.

Estes gaseificadores foram desenvolvidos inicialmente para operar com carvão (SIEDLECKI, 2011) e apresentam duas dificuldades principais para sua utilização com biomassa. A primeira delas está relacionada à dificuldade de se pulverizar determinadas biomassas até o tamanho de partícula necessário, devido a composição fibrosa da biomassa. A segunda é a elevada agressividade das cinzas fundidas de biomassa quando comparadas às cinzas do carvão mineral, o que reduz o tempo útil do gaseificador. Devido a estas duas limitações seu uso tem sido muito mais comum com carvão do que com biomassa (BASU, 2010).

3.5 Gás de Síntese e sua Importância na Indústria do Petróleo

O gás produzido pelo processo de gaseificação é composto por diversos componentes, como CO, CH₄, CO₂, H₂ e N₂, além de possuir a presença de materiais particulados e de alcatrão. Normalmente esses gases são denominados como gás de síntese, embora este termo se refira a uma mistura de gases predominantemente formada por H₂ e CO produzida através da gaseificação de uma matéria-prima rica em carbono na presença de oxigênio e vapor, seguido pela retirada de CO₂ dos gases (DAYTON *et al.*, 2011).

O gás de síntese possui diversas aplicações, dentre as quais se destacam a produção de amônia, hidrogênio e combustíveis líquidos, queima direta para geração de energia elétrica e matéria-prima para a indústria química (BOERRIGTER e RAUCH, 2006). Diferentes aplicações de gás de síntese requerem diferentes concentrações dos componentes do gás.

Os principais parâmetros utilizados para se avaliar a qualidade do gás produzido é através da fração molar de H₂ e de CO (H₂ + CO) e através da razão molar H₂/CO. Normalmente, elevadas razões de H₂/CO são desejadas para a produção de amônia e de hidrogênio, enquanto que para a síntese de gasolina esta razão deve estar em um intervalo entre 0,5 e 1,0, e para a síntese de metanol em torno de 2,0 (BASU, 2010). Elevadas concentrações de H₂ + CO são desejadas para a utilização do gás na indústria química e para a produção de combustíveis líquidos (van der DRIFT e BOERRIGTER, 2006).

Atualmente, o gás de síntese proveniente da gaseificação de carvão e resíduos de óleos, ou proveniente do gás natural tem dominado o mercado de gás de síntese (van der DRIFT e BOERRIGTER, 2006). Este domínio ocorre devido à necessidade de superar alguns desafios relacionados à gaseificação de biomassa. Principalmente desafios relacionados à presença de algumas impurezas como metais alcalinos, enxofre e compostos clorídricos presentes na biomassa (ENGVALL *et al.*, 2011).

As Figs. 3.12 e 3.13 mostram, respectivamente, as principais aplicações do gás de síntese em 2006 e a estimativa para 2040, segundo BOERRIGTER e RAUCH (2006). Essas figuras mostram que a principal aplicação do gás de síntese tem sido o processamento de amônia para produção de fertilizantes. A segunda aplicação majoritária é a obtenção de hidrogênio a partir do gás de síntese, principalmente para processos de hidrogenação em refinarias de petróleo (BOERRIGTER e RAUCH, 2006). No entanto, existe uma perspectiva de que a utilização do gás de síntese proveniente da biomassa para fabricação de combustíveis e para uso na indústria química ganhe força nos próximos anos. Na Fig. 3.13 é possível ver que existe uma estimativa de que

o gás de síntese proveniente da biomassa venha a dominar o mercado de gás de síntese no futuro.

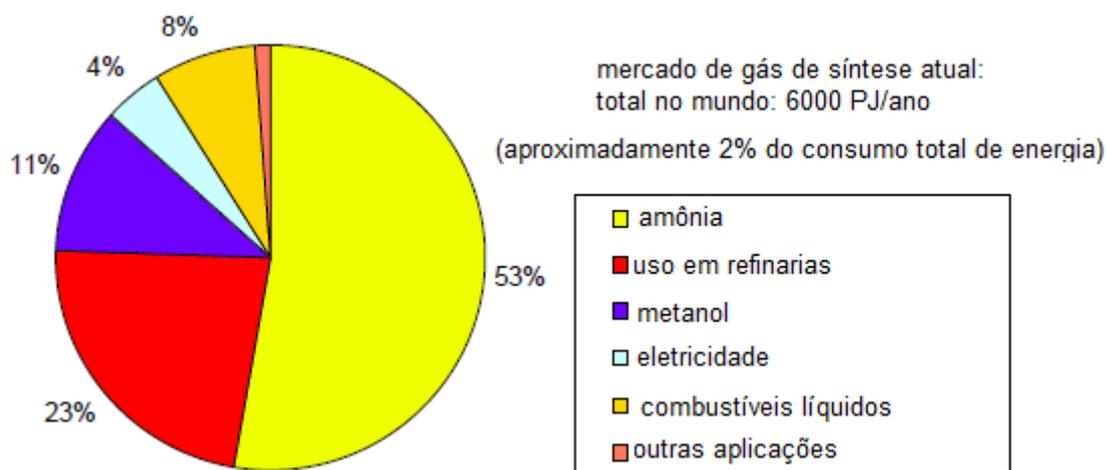


Figura 3.12 - Mercado do gás de síntese, dados referentes a 2006 (alterado de BOERRIGTER e RAUCH, 2006).

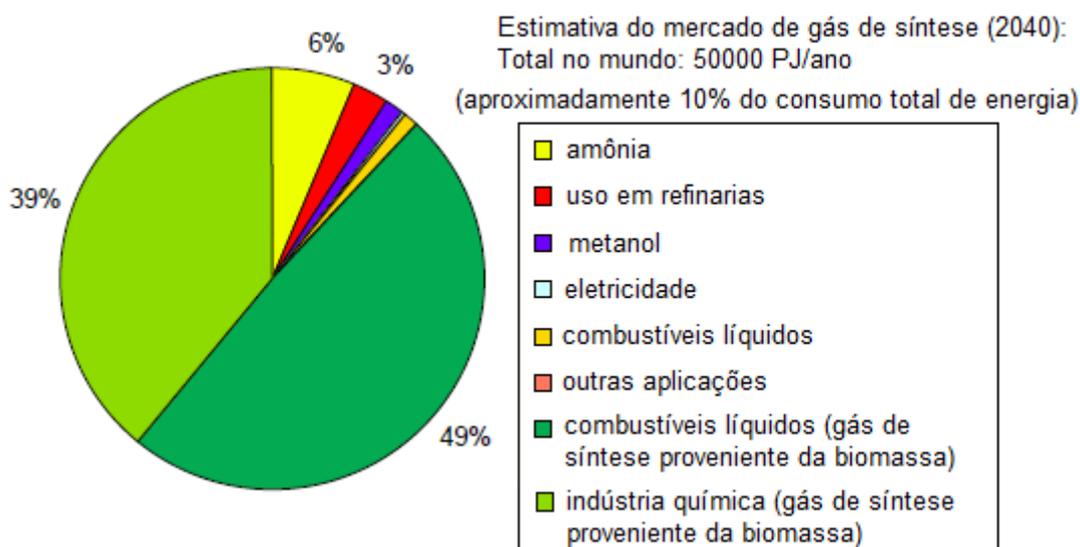


Figura 3.13 - Estimativa para o mercado de gás de síntese em 2040 (alterado de BOERRIGTER e RAUCH, 2006).

BOERRIGTER e RAUCH (2006) analisaram que o grande potencial do mercado de gás de síntese está associado ao fato de aproximadamente 30% do consumo de energia primária no mundo estar relacionado a combustíveis para transportes e com a indústria química. Os autores afirmam que como a biomassa é a única fonte renovável de energia que contém carbono, é esperado que o gás de síntese derivado da biomassa será fundamental para a produção de combustíveis renováveis.

ZHANG (2010) realiza uma revisão de tecnologias de conversão de gás de síntese em combustíveis automotivos. O autor também estima uma maior participação do gás de síntese proveniente da biomassa na produção de combustíveis líquidos. Ele afirma que, embora em países em desenvolvimento combustíveis como etanol e biodiesel continuem sendo vantajosos, em países industrializados a obtenção de combustíveis automotivos via gaseificação é mais vantajosa. O autor afirma que a principal vantagem da obtenção de combustíveis via processo de gaseificação reside no fato deste processo não competir com a terra utilizada para a plantação de alimentos, uma vez que resíduos de origem agrícola, florestal e industrial podem ser utilizados no processo de gaseificação. Entretanto, o autor reconhece que ainda é preciso uma maior compreensão do processo de gaseificação de biomassa para que esta tecnologia se difunda.

ENGVALL *et al.* (2011) revisa algumas maneiras de se aumentar a concentração de H₂ e de CO presentes no gás produzido pelo processo de gaseificação de biomassa e de reduzir a presença de impurezas em reatores de leito fluidizados pressurizados, para o uso do gás produzido na geração de combustíveis líquidos. Os autores reconhecem que ainda não existe nenhuma experiência de produção de combustíveis automotivos a partir da gaseificação de biomassa em grande escala. Principalmente devido às dificuldades atuais do processo de gaseificação de biomassa, como problemas com a limpeza do gás produzido e com a escalabilidade dos processos de gaseificação.

Em 2011, KIRKELS e VERBONG apresentaram um estudo comparativo entre a gaseificação de biomassa e de carvão, avaliando o estágio de desenvolvimento atual das duas tecnologias. Os autores basearam suas análises no número de patentes e de estudos realizados sobre gaseificação de carvão e de biomassa desde 1980, em conjunto com o comportamento do mercado dessas tecnologias para avaliar os processos. A gaseificação de carvão não é considerada por eles como uma tecnologia madura, porém os autores constatam que ela já possui uma participação significativa em escala comercial no mercado. A utilização de reatores de arrasto de grande porte é a justificativa apontada pelos autores para essa consolidação no mercado. Por outro lado, a gaseificação de biomassa em grande escala está em um estágio muito inicial. Embora reatores de leito fixo de pequeno porte tenham sido instalados em zonas rurais de países em desenvolvimento, a gaseificação de biomassa ainda não possui a escala necessária para competir com o carvão. Além disso, os autores concluem que ou a gaseificação de biomassa tem recebido menos investimentos do que a de carvão, ou as pesquisas envolvendo a gaseificação de biomassa tem sido realizadas por países com

menores recursos para pesquisa, e com pouco potencial de mercado, como Suécia e Finlândia.

Após a análise destes trabalhos está claro que o processo de gaseificação tem capacidade de impactar significativamente a indústria de petróleo. A grande diversidade de aplicações para os produtos do processo de gaseificação constituem um dos seus grandes trunfos. Contudo, também está claro que ainda é preciso algum tempo para que a tecnologia de gaseificação de biomassa esteja madura o suficiente para ser utilizada em escala industrial.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA DO ESCOAMENTO

Na Seq. 1.4 é comentado que a modelagem do escoamento gás-partícula pode ser realizada utilizando uma abordagem Euler-Euler ou Euler-Lagrange. O método Euler-Euler consiste na utilização de variáveis de campo para todas as fases, fluída e particulada.

No modelo Euler-Euler a fase particulada é tratada como contínua e interpenetrante, interagindo com a fase gás, também contínua (RANADE, 2002). Quando esta abordagem é utilizada surgem termos de interação desconhecidos nas equações governantes de ambas as fases, ocasionando um problema de fechamento do conjunto de equações. ENWALD *et al.* (1996) identificam três tipos de leis de fechamento que são utilizadas para modelar estes termos adicionais, e as classifica como:

- (i) Leis Topológicas: descrevem a distribuição espacial de quantidades específicas das fases. São necessárias algumas vezes para descrever a distribuição espacial de uma variável do escoamento.
- (ii) Leis Constitutivas: descrevem propriedades físicas das fases usando axiomas ou dados experimentais. São necessárias para modelar o tensor de tensões viscosas, assim como algumas propriedades de ambas as fases como viscosidade dinâmica, pressão, condutividade térmica, dentre outras. Para a fase sólida podem ser modeladas utilizando dados experimentais, ou através da Teoria Cinética de Escoamentos Granulares, como demonstrado em GIDASPOW (1994) e em JAKOBSEN (2008).
- (iii) Leis de Transferência: descrevem as interações entre as fases gás e particulada, e entre diferentes fases sólidas. São modeladas com o uso de equações empíricas para descrever a interação entre as fases ocorrendo pela interface.

No modelo Euler-Lagrange a posição e o estado de cada partícula individual são acompanhados através do tempo e do espaço, através da integração das equações de movimento, energia e massa para cada partícula do sistema (OEVERMANN *et al.*,

2009). Normalmente, quando esta abordagem é utilizada, os campos de escoamento da fase fluída são obtidos usando o modelo Euleriano. Dependendo do grau de acoplamento do escoamento, as soluções de ambas as fases podem interagir entre si, de maneira que se torna necessária a adoção de um procedimento de solução iterativa (RANADE, 2002).

As grandes vantagens do modelo Euler-Lagrange são sua capacidade de prever com exatidão a trajetória de cada partícula e o controle sobre fenômenos em nível de partícula, como a redução do diâmetro da partícula devido às reações químicas (RANADE, 2002). No entanto, no leito de um reator industrial, ou até mesmo laboratorial, podem existir milhares ou milhões de partículas suspensas, acarretando em um custo computacional que torna esse tipo de simulação praticamente inviável. Os estudos utilizando a abordagem Euler-Lagrange normalmente utilizam poucas partículas no leito, ou simulam apenas alguns segundos de operação do reator.

Por outro lado, o modelo Euler-Euler requer um esforço computacional consideravelmente menor em leitos com muitas partículas, além de fornecer campos médios de escoamento, os quais são convenientes para facilitar decisões quantificáveis para o desenvolvimento de novos gaseificadores (YU *et al.*, 2007). No entanto, como ele necessita de algumas correlações empíricas ou semi-empíricas para o fechamento das equações, é necessário realizar validações com dados experimentais dos modelos escolhidos (HERZOG *et al.*, 2012).

RANADE (2002) afirma que o modelo Euler-Euler é ideal para leitos densos, ou seja, quando a fração volumétrica das partículas é elevada (>10%), a qual corresponde ao caso dos reatores de leito fluidizado. Já para leitos dispersos, caso dos reatores de leito de arraste, o modelo Euler-Lagrange é recomendado.

Mesmo utilizando o modelo Euler-Euler a modelagem de um problema de gaseificação ou combustão em um reator de leito fluidizado tridimensional acarreta em um tempo de simulação extremamente elevado. Por esta razão a maioria dos estudos realizados sobre estes assuntos utiliza um domínio bidimensional.

XIE *et al.* (2008^a) questionaram a validade desta metodologia, uma vez que existem fenômenos inerentemente tridimensionais agindo sobre o leito fluidizado. Desta forma, os autores apresentaram um estudo analisando a influência do sistema de coordenadas escolhido, cartesiano ou cilíndrico, e do número de dimensões utilizadas, ou seja, bidimensional (2D) ou tridimensional (3D), sobre o escoamento isotérmico sem reações químicas em um leito fluidizado, usando uma abordagem Euler-Euler. Foram avaliados três diferentes padrões de fluidização: borbulhante, pistonado e turbulento. Os autores relataram que o sistema de coordenadas cilíndrico 2D apresentou resultados não físicos, devido à hipótese de axissimetria inerente a este sistema. Além disso, este

trabalho demonstrou que é válido utilizar um sistema de coordenadas cartesianas 2D para prever a fluidização de partículas em um reator cilíndrico ou retangular operando em regime borbulhante. Entretanto, os autores ressaltam que para os demais padrões de fluidização é necessário tomar cuidados adicionais. Já que o aumento da velocidade superficial do gás aumenta a contribuição dos termos não axiais do escoamento, ignorados na formulação 2D, os erros em relação à formulação 3D também aumentam. Além de comparar os resultados obtidos com as diferentes formulações o tempo necessário para cada simulação também é apresentado. Dessa maneira, é possível notar, como já era esperado, que as simulações tridimensionais são muito mais trabalhosas e caras, o que tem inviabilizado este tipo de simulação. Deve ser observado que os autores não consideraram as equações de energia e nem reações químicas.

Segundo PINHO (2012) uma forma simples de se modelar o escoamento durante o processo de gaseificação em um reator LFB, consiste em considerar que as partículas de combustível sólidas se transformam rapidamente em *char*, e o encolhimento das partículas pode ser desprezado. Logo, considerando a existência de partículas de um material inerte, o leito de partículas é formado apenas por duas fases sólidas e uma fase gás, como representado na Fig. 4.1. A sugestão de PINHO (2012) é considerada neste trabalho.

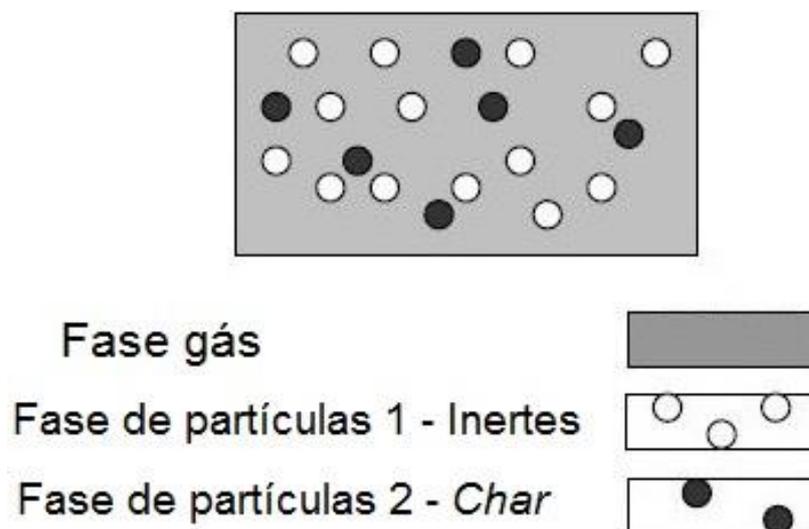


Figura 4.1 - Três fases do escoamento multifásico (retirado de PINHO, 2012).

Este capítulo está dividido em duas seções. Na primeira são apresentadas as equações de conservação que governam o escoamento. Na segunda seção são apresentadas relações constitutivas para modelar alguns termos das equações de conservação, incluindo as Leis Constitutivas e as Leis de Transferência.

4.1 Equações de Conservação

Utilizando uma abordagem Euler-Euler, as equações de conservação de um escoamento multifásico podem ser deduzidas utilizando uma aproximação por média de Reynolds (ENWALD *et al.*, 1997), ou a partir da teoria de mistura, como descrito em GIDASPOW (1994). As equações apresentadas a seguir foram desenvolvidas utilizando a aproximação por média de Reynolds. Quando esta metodologia é adotada as variáveis do escoamento são promediadas sobre um volume de controle grande o suficiente em relação ao tamanho das partículas, e pequeno quando comparado com todo o domínio estudado (VUN, 2010).

GIDASPOW (1994) desenvolveu dois modelos de equações para um escoamento gás-partícula, chamados de modelos A e B. Ambos consideram a mesma equação de continuidade. Entretanto, no modelo A as equações de conservação de quantidade de movimento contém o campo de pressão da fase fluída para as equações de ambas as fases. Já no modelo B o campo de pressão da fase fluída não é representado nas equações de conservação de quantidade de movimento da fase sólida. VUN (2010) afirma que os modelos A e B fornecem resultados idênticos, de maneira que a principal diferença entre eles é a dificuldade de convergência quando o modelo B é utilizado. Atualmente o modelo A é mais comumente utilizado, inclusive no presente trabalho. As equações de conservação para o modelo A são apresentadas ao longo deste capítulo.

Antes de apresentar as equações governantes é necessário definir o conceito de uma variável chamada fração de volume. Esta definição baseia-se no fato das fases contínuas do escoamento serem interpenetrantes. Porém, não é possível que mais de uma fase i ocupe uma mesma posição no espaço em um determinado tempo. Considerando a notação utilizada em SYAMLAL *et al.* (1993), a fração de mistura da fase gasosa é ε_g e a da fase particulada é ε_{sm} , onde m é o número da fase sólida. Logo, pela definição de fração de volume é possível escrever:

$$\varepsilon_g + \sum_{m=1}^M \varepsilon_{sm} = 1 \quad (4.1)$$

onde M é o número total de fases sólidas. Desta forma, é possível definir uma massa específica efetiva para a fase gás, $\rho_{g'}$, e para a fase sólida, $\rho_{s'm}$, como:

$$\rho_{g'} \triangleq \varepsilon_g \rho_g \quad (4.2a)$$

$$\rho_{sm} \triangleq \varepsilon_{sm} \rho_{sm} \quad (4.2b)$$

Utilizando estas definições é possível derivar as equações de conservação para todas as fases do escoamento. No entanto, a dedução das equações não será realizada neste trabalho. Nas próximas seções é feita a apresentação das equações consideradas na modelagem do problema, assim como comentários sobre os termos destas equações e escolhas de modelos de fechamento. Explicações mais detalhadas sobre a dedução das equações apresentadas podem ser encontradas em ENWALD *et al.* (1996) e em JAKOBSEN (2008).

4.1.1 Conservação de massa

A equação de conservação de massa da fase gasosa é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_g \rho_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{V}_g) = \sum_{n=1}^{N_g} R_{gn} \quad (4.3)$$

A equação de conservação de massa da fase sólida é:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_{sm} \rho_{sm}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{V}_{sm}) = \sum_{n=1}^{N_{sm}} R_{smn} \quad (4.4)$$

O primeiro termo à esquerda das Eqs. (4.3) e (4.4) representam a taxa de acúmulo de massa por unidade de volume, enquanto que o segundo termo representa o fluxo líquido convectivo de massa. Os termos $\sum_{n=1}^{N_g} R_{gn}$ e $\sum_{n=1}^{N_{sm}} R_{smn}$ representam a transferência de massa entre fases devido a processos químicos e físicos, onde N_g é o número de espécies na fase gasosa, N_{sm} é o número de espécies na fase particulada, R_{gn} é a taxa de geração da espécie gasosa n e R_{smn} é a taxa de geração da espécie n da fase sólida m .

4.1.2 Conservação de quantidade de movimento

A equação de conservação de quantidade de movimento para a fase gasosa é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g \vec{V}_g) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \vec{V}_g \vec{V}_g) = \nabla \cdot (\bar{\bar{S}}_g) + \varepsilon_g \rho_g \vec{g} - \sum_{m=1}^M \vec{I}_{gm} \quad (4.5)$$

onde o primeiro e o segundo termos da Eq. (4.5) representam, respectivamente, a variação temporal local e o fluxo líquido convectivo de quantidade de movimento por unidade de volume. O segundo termo do lado direito da Eq. (4.5) representa a influência da força gravitacional sobre a fase gasosa, o termo $\bar{\bar{S}}_g$ é o tensor de tensões da fase gasosa e o termo \vec{I}_{gm} é a força de interação representando a transferência de quantidade de movimento entre a fase gasosa e a fase sólida m .

Para as fases sólidas a equação de conservação de movimento é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{V}_{sm}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{V}_{sm} \vec{V}_{sm}) = \varepsilon_{sm} \nabla \cdot \bar{\bar{S}}_{sm} + \varepsilon_{sm} \rho_{sm} \vec{g} + \vec{I}_{gm} - \sum_{m=1}^M \vec{I}_{ml} \quad (4.6)$$

sendo que os termos do lado esquerdo da Eq. (4.6) possuem o mesmo significado que os termos correspondentes da equação para a fase gasosa, Eq. (4.5). O termo $\bar{\bar{S}}_{sm}$ é o tensor de tensões da fase sólida, \vec{I}_{ml} representa a interação entre as fases sólidas e o segundo termo do lado direito da Eq. (4.6) representa a força gravitacional atuando sobre a fase sólida.

4.1.3 Conservação de energia interna

Seguindo a abordagem de SYAMLAL e PANNALA (2011), são feitas algumas hipóteses simplificadoras em relação à equação de conservação de energia. As considerações realizadas são enumeradas a seguir:

- (i) Os efeitos do aumento da energia interna devido à dissipação viscosa e à transferência de quantidade de movimento entre as fases são considerados desprezíveis,
- (ii) A transferência de energia direta entre as diferentes fases sólidas é desprezada.

Dessa forma, a equação de conservação de energia interna da fase gás pode ser escrita como:

$$\varepsilon_g \rho_g C_{pg} \left(\frac{\partial T_g}{\partial t} + \vec{V}_g \cdot \nabla T_g \right) = -\nabla \cdot \vec{q}_g + \sum_{m=1}^M W_{gm} - \Delta H_g + \gamma_{Rg} (T_{Rg}^4 - T_g^4) \quad (4.7)$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação representa a variação local temporal de energia interna e o segundo termo representa o fluxo líquido convectivo de energia interna. O termo $\nabla \cdot \vec{q}_g$ representa o fluxo de calor difusivo na fase gás, ΔH_g é a energia gerada pelas reações químicas que ocorrem na fase gás. O segundo termo do lado direito da equação representa a transferência de energia entre as fases gás e sólida e o último termo representa a transferência de energia por radiação. O termo C_{pg} é o calor específico à pressão constante da fase gás, W_{gm} representa a transferência de calor entre a fase gás e a respectiva fase sólida m e γ_{Rg} é o coeficiente de transferência de calor por radiação da fase gás. Por fim, os termos T_g e T_{Rg} são, respectivamente, a temperatura da fase gás e a temperatura de radiação da fase gás.

A equação de conservação de energia interna das fases sólidas é dada por:

$$\varepsilon_{sm} \rho_{sm} C_{psm} \left(\frac{\partial T_{sm}}{\partial t} + \vec{V}_{sm} \cdot \nabla T_{sm} \right) = -\nabla \cdot \vec{q}_{sm} - W_{gm} - \Delta H_m + \gamma_{Rm} (T_{Rm}^4 - T_{sm}^4) \quad (4.8)$$

onde os termos do lado esquerdo e o primeiro, terceiro e quarto termo da Eq. (4.8) representam para a fase sólida interações similares aquelas dos termos correspondentes da Eq. (4.7). A grandeza γ_{Rm} corresponde ao coeficiente de transferência de calor por radiação da fase sólida m .

A modelagem dos termos referentes a energia gerada pelas reações químicas é de fundamental importância para problemas de simulação de problemas termoquímicos, como no caso do processo de gaseificação. Estes termos dependem da modelagem cinética das reações ocorrendo no interior do gaseificador. Devido à importância e complexidade dessa modelagem ela é explicada no Cap. 5.

4.1.4 Conservação de espécies químicas

A equação de conservação de espécies químicas para a fase gás pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_g \rho_g Y_{gn}) + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g Y_{gn} \vec{V}_g) = \nabla \cdot \vec{J}_{gn} + R_{gn} \quad (4.9)$$

e para as espécies da fase sólida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_{sm} \rho_{sm} Y_{smn}) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sm} \rho_{sm} Y_{sm} \vec{V}_{sm}) = \nabla \cdot \vec{J}_{mn} + R_{smn} \quad (4.10)$$

onde o primeiro termo à esquerda das Eqs. (4.9) e (4.10) representam a taxa de acúmulo da espécie gasosa n ou da espécie sólida m , enquanto que o segundo termo representa a taxa líquida de fluxo das espécies por convecção. Os termos $\nabla \cdot \vec{J}_{gn}$ e $\nabla \cdot \vec{J}_{mn}$ correspondem, respectivamente, à difusão da espécie gasosa n e da espécie n da fase sólida m . Os termos Y_{gn} , \vec{J}_g e R_{gn} são, respectivamente, a fração mássica, o vetor fluxo mássico da espécie n e a taxa de geração ou de consumo da espécie n da fase gás. Os termos Y_{smn} , \vec{J}_{mn} e R_{smn} são, de maneira análoga, a fração mássica, o vetor fluxo mássico da espécie n e a taxa de geração ou de consumo da espécie n da fase sólida m . Deve ser observado que os termos R_{gn} e R_{smn} são calculados a partir de modelos de cinética química que são discutidos no Cap. 5.

4.2 Relações Constitutivas

Para possibilitar o fechamento do equacionamento do problema é necessário definir algumas relações constitutivas. As relações constitutivas descritas a seguir incluem tanto Leis Constitutivas quanto Leis de Transferência.

4.2.1 Equação de estado para a fase gás

Considerando que a fase gasosa pode ser representada como um gás ideal, a equação de estado da fase gasosa pode ser escrita como:

$$\rho_g = \frac{P_g M_w}{\bar{R} T_g} \quad (4.11)$$

onde P_g é a pressão da fase gás, M_w é a massa molecular da mistura de gases, \bar{R} é a constante universal dos gases perfeitos e T_g é a temperatura absoluta.

4.2.2 Transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólidas

Considerando apenas os efeitos provocados pela força de arrasto, devido às diferenças de velocidade entre as fases, pela força de empuxo causada por gradientes de pressão na fase gasosa e pela transferência de massa entre as fases, SYAMLAL *et al.* (1993) sugere a Eq. (4.12) para modelar o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases gás e sólida:

$$\vec{I}_{gm} = -\varepsilon_{sm} \nabla P_g - F_{gm} (\vec{V}_{sm} - \vec{V}_g) + R_{0m} (\xi_{0m} \vec{V}_{sm} + \bar{\xi}_{0m} \vec{V}_g) \quad (4.12)$$

onde o primeiro termo do lado direito da equação representa a força de empuxo e o segundo termo a força de arraste entre a fase sólida e a fase gás. O terceiro termo representa a transferência de quantidade de movimento devido à transferência de massa entre a fase gasosa e a fase sólida.

Os termos ξ_{0m} e $\bar{\xi}_{0m}$ são calculados por:

$$\xi_{0m} = \begin{cases} 1 & \rightarrow \text{para } R_{0m} < 0 \\ 0 & \rightarrow \text{para } R_{0m} \geq 0 \end{cases} \quad (4.13a)$$

$$\bar{\xi}_{0m} = 1 - \xi_{0m} \quad (4.13b)$$

O termo F_{gm} é o coeficiente de arrasto entre as fases gás e sólida. Segundo SYAMLAL e PANNALA (2011), este termo pode ser modelado com o auxílio de dados experimentais ou com um modelo baseado em simulações de Lattice-Boltzmann. BEETSTRA *et al.* (2007) desenvolveram uma expressão para o coeficiente de arrasto, a partir de simulações de Lattice-Boltzmann. O autor inicialmente desenvolveu uma equação para escoamentos monodispersos e, posteriormente, fez algumas alterações para gerar uma expressão válida para escoamentos polidispersos. As comparações realizadas com os outros métodos mais tradicionais, como as expressões de Ergun e de Wen e Yu, sugerem resultados mais precisos quando a nova expressão é utilizada. A expressão desenvolvida em BEETSTRA *et al.* (2007) para o coeficiente de arrasto é dada por:

$$F_{gm} = 180 \frac{\mu_g}{d_{pm}^2} \frac{(1 - \varepsilon_g)^2}{\varepsilon_g} + 18 \frac{\mu_g}{d_{pm}^2} \varepsilon_g^3 (1 - \varepsilon_g) \left(1 + 1.5 \sqrt{1 - \varepsilon_g}\right) + 0.31 \frac{\left[\frac{1}{\varepsilon_g} + 3\varepsilon_g(1 - \varepsilon_g) + 8.4Re_m^{-0.343}\right]}{\left[1 + 10^{3(1-\varepsilon_g)}Re_m^{-0.5-2(1-\varepsilon_g)}\right]} \quad (4.14)$$

onde μ_g é a viscosidade dinâmica da fase gás, d_{pm} é o diâmetro das partículas da fase sólida m e Re_m é o número de Reynolds, que pode ser calculado por:

$$Re_m = \frac{d_{pm} |\vec{V}_{sm} - \vec{V}_g| \rho_g}{\mu_g} \quad (4.15)$$

As três forças consideradas na Eq. (4.12) não são as únicas interações entre as fases. Algumas dessas contribuições são as forças de Basset, que depende da história do movimento da partícula através do fluido, de Saffman, que representa a força de sustentação sobre as partículas, de Magnus, que contabiliza a força gerada pela rotação das partículas, dentre outras. SYAMLAL *et al.* (1993) considera que estas forças são menos importantes para o escoamento do que as três contribuições consideradas. Contudo, JAKOBSEN (2008) observa que, embora as contribuições destas forças aparentemente sejam pequenas em escoamentos com borbulhamento, ainda existe pouco conhecimento sobre a influência destes termos sobre o escoamento. O pouco conhecimento sobre a formulação destas contribuições também é um dos argumentos que SYAMLAL (1993) usa para desprezar estes termos em sua formulação. Para mais detalhes sobre algumas destas outras forças recomenda-se os trabalhos de ENWALD *et al.* (1996), FAN e ZU (2005) e JAKOBSEN (2008).

4.2.3 Transferência de quantidade de movimento entre diferentes fases sólidas

Em relação à transferência de quantidade de movimento entre as fases sólidas, SYAMLAL e PANNALA (2011) afirmam que, como existe menos conhecimento a cerca deste termo, é mais seguro supor que o principal responsável pela variação da quantidade de movimento por interação entre as fases sólidas é o arrasto decorrente da diferença de velocidade das partículas. Dessa forma, SYAMLAL e PANNALA (2011) utilizam uma expressão levando em conta apenas o arrasto entre as fases sólidas, a qual é dada por:

$$\vec{I}_{ml} = -F_{sml}(\vec{V}_{sl} - \vec{V}_{sm}) \quad (4.16)$$

Para o coeficiente de arrasto para entre as fases sólidas, F_{sml} , é utilizada a expressão derivada em SYAMLAL (1987) utilizando a teoria cinética, dada por:

$$F_{sml} = \frac{3(1 + e_{lm}) \left(\frac{\pi}{2} + C_f \frac{\pi^2}{8} \right) \rho_{sl} \rho_{sm} (d_{pl} + d_{pm})^2 g_{0lm} |\vec{v}_{sm} - \vec{v}_{sl}|}{2\pi(\rho_{sl} d_{pl}^3 + \rho_{sm} d_{pm}^3)} \quad (4.17)$$

onde e_{lm} é o coeficiente de restituição entre as diferentes fases sólidas, C_f é o coeficiente de fricção entre essas fases, ρ_{sk} , d_{pk} e \vec{v}_{sk} , são, respectivamente, a massa específica, o diâmetro das partículas e o vetor velocidade referentes à fase sólida k . O termo g_{0lm} é a chamada função de distribuição radial no contato, que pode ser vista como o aumento da probabilidade de colisões entre as partículas à medida que a concentração da fase sólida aumenta (RANADE, 2002). De forma que, para um leito disperso, g_{0lm} vale um, e quando o leito está muito denso, de maneira que o movimento das partículas é impossibilitado, g_{0lm} assume um valor infinito (RANADE, 2002; VAN WACHEN, 2003). A expressão utilizada para este termo foi a equação derivada em LEBOWITZ (1964) para uma mistura de esferas rígidas, que é a equação padrão do programa MFI. Esta equação é dada por:

$$g_{0lm} = \frac{1}{\varepsilon_g} + \frac{3d_{pl}d_{pm}}{\varepsilon_g^2(d_{pl} + d_{pm})} \sum_{k=1}^M \frac{\varepsilon_{sk}}{d_{pk}} \quad (4.18)$$

4.2.4 Tensor de tensões da fase gás

A derivação de uma equação para o tensor de tensões da fase gasosa é realizada da mesma forma que para um escoamento monofásico de um fluido (PINHO, 2012). Primeiramente é considerado que o tensor de tensões pode ser dividido em duas partes, um tensor isotrópico, representando um esforço normal sobre um elemento de fluido, e um tensor anisotrópico, representando um esforço provocado pela deformação sobre um elemento de fluido (BATCHELOR, 1967). Dessa forma, é possível escrever o tensor de tensões da fase gás como:

$$\bar{\bar{s}}_g = -P_g \bar{\bar{I}} + \bar{\bar{\tau}}_g \quad (4.19)$$

sendo que \bar{I} é o tensor identidade e $\bar{\tau}_g$ é o tensor de tensões viscosas. Considerando que o gás se comporta como um fluido newtoniano, o tensor de tensões viscosas pode ser dado por:

$$\bar{\tau}_g = 2 \varepsilon_g \mu_g \bar{D}_g + \varepsilon_g \nu_g \text{tr}(\bar{D}_g) \bar{I} \quad (4.20)$$

onde ν_g é a viscosidade volumétrica da fase gás e \bar{D}_g é o tensor taxa de cisalhamento da fase gás, considerado calculado por:

$$\bar{D}_g = \frac{1}{2} [\nabla \vec{V}_g + (\nabla \vec{V}_g)^T] \quad (4.21)$$

4.2.5 Tensor de tensão das fases sólidas

Considerando um comportamento newtoniano para a fase sólida, a modelagem do tensor de tensões dessa fase pode ser feita de maneira similar ao do tensor de tensões da fase gás (ENWALD *et al.*, 1996). Logo, é possível escrever que:

$$\bar{S}_{sm} = -P_{sm} \bar{I} + \bar{\tau}_{sm} \quad (4.22)$$

Entretanto, para a fase sólida a concentração de partículas pode alterar os termos que governam a Eq. (4.22). Logo, para uma pequena concentração de partículas, o tensor de tensões é dominado pela colisão entre as partículas, de maneira que modelos constitutivos para esta situação são bem descritos pela Teoria Cinética de Escoamentos Granulares (VIDYAPATI, 2012).

Para uma concentração muito elevada de partículas, o movimento das partículas é restringido, e o tensor de tensões é governado pela fricção entre as partículas. Na segunda situação devem ser utilizados modelos empíricos baseados na teoria da plasticidade e na mecânica dos sólidos para o fechamento das equações (van WACHEN e ALMSTEDT, 2003). Existem três padrões de escoamento, definidos com base nas propriedades reológicas dos materiais em suspensão. Para diferenciar as três situações FAN e ZU (1998) usaram o número de Bagnold, definido como:

$$Ba \triangleq \lambda_\varepsilon^{1/2} \frac{d_p^2 \rho_p}{\mu} \left(\frac{dU}{dy} \right) \quad (4.23)$$

onde λ_ε é um parâmetro relacionado à fração volumétrica da fase sólida. A Fig. 4.2 ilustra os três tipos possíveis de escoamento para um conjunto de partículas em suspensão.

FAN e ZU (1998) classificam as três situações da seguinte forma:

- (i) Escoamento Viscoso: $Ba < 40$.
- (ii) Escoamento Plástico: $Ba > 450$.
- (iii) Escoamento Intermediário ou de Transição: $40 < Ba < 450$.

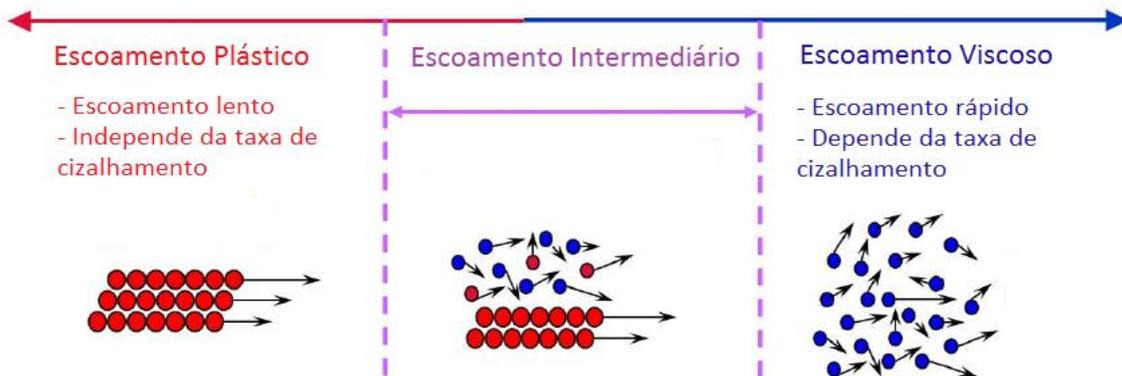


Figura 4.2 - Tipos de escoamento (adaptado de VIDYAPATI, 2012).

O regime de transição é governado por uma combinação de mecanismos, os quais dependem das propriedades das partículas e do escoamento, e ainda não foram completamente compreendidos (VIDYAPATI, 2012). Por este motivo os modelos mais utilizados para descrever este termo desconsideram a transição entre os escoamentos plástico e viscoso.

MAKKAWI e OCONE (2005) identificaram a existência de três modelagens presentes na literatura para o tensor de tensões da fase sólida, em situações envolvendo o escoamento de transição. Essas modelagens são classificadas de modelos aditivos, modelos de troca e modelos de transição suave.

Os modelos aditivos consideram que o tensor de tensões da fase sólida aumenta a partir das contribuições cinéticas, colisionais e friccionais agindo separadamente (SAVAGE *et al.*, 1983 *apud* MAKKAWI e OCONE, 2005). Desta forma, estes modelos consideram que, para um determinado valor da fração de vazio, o tensor de tensões é calculado através da soma das contribuições. Nos modelos de troca, para valores de fração de vazio (ε_g) superiores a fração de empacotamento crítico (ε_g^*), é feita uma comparação entre as grandezas das contribuições. Então, a contribuição dominante é utilizada para representar o tensor de tensões. Por fim, os modelos de transição suave

consideram uma função de transição que evita descontinuidades no tensor de tensões da fase sólida em situações nas quais escoamentos plásticos e viscosos coexistem.

SYAMLAL *et al.* (1993) desenvolveu um modelo de troca, que considera apenas os efeitos colisionais e cinéticos nas regiões onde $\varepsilon_g > \varepsilon_g^*$, e apenas os efeitos friccionais nas demais regiões. Os efeitos colisionais e cinéticos são calculados a partir de modelos da Teoria Cinética de Escoamentos Granulares (TCEG), enquanto que os efeitos friccionais são calculados utilizando o modelo friccional proposto por SCHAEFFER (1987), o chamado modelo de Schaeffer.

SRIVASTAVA e SUNDARESAN (2003) desenvolveram um modelo aditivo, calculando as contribuições friccionais a partir de uma modificação do modelo de Schaeffer. O modelo proposto por estes autores é capaz de contabilizar flutuações na taxa de cisalhamento, considerando o modelo de Prakash e Rao para calcular o tensor de tensões da fase sólida nas regiões de escoamento intermediário.

Em TARDOS *et al.* (2003) foi desenvolvido um modelo de transição suave capaz de descrever com grande precisão o escoamento intermediário. O modelo foi desenvolvido a partir da abordagem de SAVAGE (1998), e consiste em uma expressão para a tensão média que se reduz para o limite de escoamento plástico quando as flutuações tendem a zero. Por outro lado, no limite das grandes flutuações, o modelo descreve o escoamento viscoso.

PANNALA *et al.* (2009) utilizaram o princípio dos métodos de transição suave no modelo de SYAMLAL (1993). Dessa maneira, os autores desenvolveram funções de “amortecimento” para a região de transição entre as duas condições críticas de escoamento. As funções de “amortecimento” sugeridas pelos autores são funções de ponderação não-lineares do tipo sigmoideal e de tangente hiperbólica. Devido à ausência de teorias de escoamentos granulares mais rigorosas para o escoamento de transição, os autores aconselham a utilização deste modelo heurístico.

XIE *et al.* (2008^a) afirmam que o modelo de transição suave é ideal para descrever situações como as encontradas em leitos fluidizados, com variações bruscas entre regiões de escoamento viscoso e plástico. Os autores afirmam ainda que os modelos de transição suave são capazes de acelerar a convergência do problema quando comparado ao modelo de SYAMLAL *et al.* (1993), devido ao fim das descontinuidades entre as regiões, como pode ser visto na Fig. 4.3. SYAMLAL e PANNALA (2011), também apontam a necessidade de se utilizar modelos para a região de transição em situações de leito fluidizado. Logo, seguindo as sugestões de XIE *et al.* (2008^a) e SYAMLAL e PANNALA (2011), optou-se por utilizar o modelo desenvolvido por PANNALA *et al.* (2009) para descrever o tensor de tensões da fase sólida.

A função de transição utilizada para separar o escoamento friccional do viscoso é uma função sigmoïdal definida por PANNALA *et al.* (2009) como:

$$\varphi(\varepsilon_g) = \left[1 + 100^{(\varepsilon_g - \varepsilon_g^*) / (\varepsilon_u - \varepsilon_l)} \right]^{-1} \quad (4.24)$$

onde $\varphi(\varepsilon_u) = 0.9$, $\varphi(\varepsilon_l) = 0.1$, $\varepsilon_l = 0.99\varepsilon_g^*$ e $\varepsilon_u = 1.01\varepsilon_g^*$.

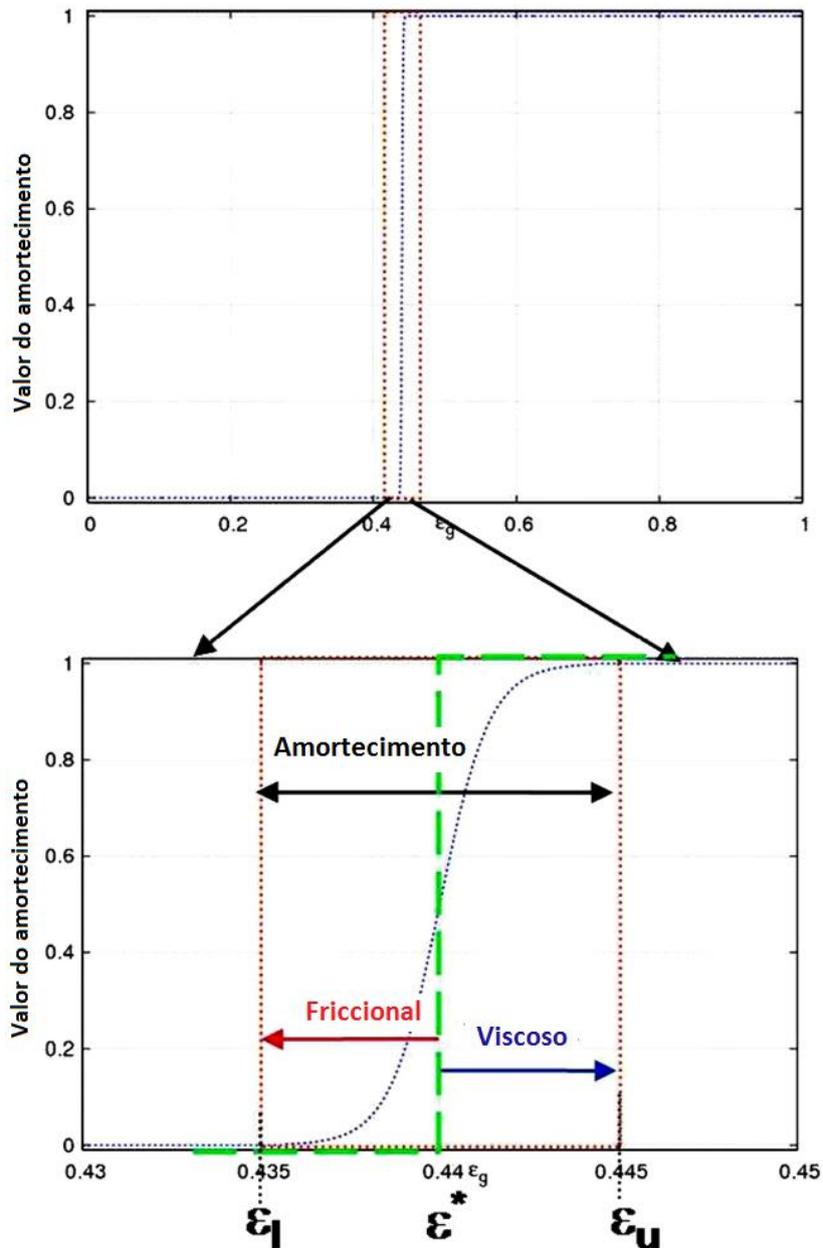


Figura 4.3 - Função de amortecimento sigmoïdal (adaptado de XIE *et al.*, 2008^a).

Considerando a Eq.(4.22), o tensor de tensões viscosas e a pressão da fase sólida são então dados, respectivamente, por:

$$\bar{\tau}_{sm} = \begin{cases} \varphi(\varepsilon_g)\bar{\tau}_{sm}^v + [1 - \varphi(\varepsilon_g)]\bar{\tau}_{sm}^p & \text{se } \varepsilon_g < \varepsilon_u \\ \bar{\tau}_{sm}^v & \text{se } \varepsilon_g \geq \varepsilon_u \end{cases} \quad (4.25a)$$

$$P_{sm} = \begin{cases} \varphi(\varepsilon_g)P_{sm}^v + [1 - \varphi(\varepsilon_g)]P_{sm}^p & \text{se } \varepsilon_g < \varepsilon_u \\ P_{sm}^v & \text{se } \varepsilon_g \geq \varepsilon_u \end{cases} \quad (4.25b)$$

onde $\bar{\tau}_{sm}^p$ e $\bar{\tau}_{sm}^v$ são os tensores de tensões viscosas da fase sólida m para os escoamentos plástico e viscoso, respectivamente. Os termos P_{sm}^p e P_{sm}^v são as pressões da fase sólida m para os escoamentos plástico e viscoso, respectivamente.

Para descrever as colisões entre as partículas em escoamentos granulares viscosos e modelar o tensor de tensões da fase sólida, é utilizada uma teoria cinética modificada para partículas lisas, inelásticas e esféricas desenvolvida por LUN *et al.* (1984). Utilizando esta abordagem é definida uma temperatura granular, θ_m , como:

$$\frac{3}{2}\theta_m \triangleq E_{\theta_m} \quad (4.26)$$

onde E_{θ_m} é a energia granular, que é definida como a energia cinética específica contida na velocidade flutuante de uma partícula (RANADE, 2002; van der HOEF *et al.*, 2006; JAKOBSEN, 2008). A energia granular é definida por:

$$E_{\theta_m} \triangleq \frac{1}{2}\bar{C}_m^2 \quad (4.27)$$

sendo que \bar{C}_m é a flutuação instantânea da velocidade \vec{c}_m da fase sólida m , ou seja:

$$\vec{c}_m = \vec{V}_{sm} + \vec{C}_m \quad (4.28)$$

Utilizando o conceito da TCEG é possível obter equações para calcular a pressão e a viscosidade granulares para o padrão de escoamento viscoso, em função da temperatura granular. Considerando que a teoria desenvolvida por LUN *et al.* (1984) pode ser estendida para escoamentos granulares com mais de uma fase sólida (SYAMLAL *et al.*, 1993), a pressão granular em escoamento viscoso pode ser dada por:

$$P_{sm}^v = K_{1m}\varepsilon_{sm}^2\theta_m \quad (4.29)$$

onde o termo K_{1m} é definido na Seç. 4.2.10.

Como foi feita a hipótese de que a fase sólida se comporta como um fluido newtoniano, o tensor anisotrópico, $\bar{\tau}_{sm}^v$, pode ser escrito como:

$$\bar{\tau}_{sm}^v = 2 \mu_{sm}^v \bar{D}_{sm} + \lambda_{sm}^v tr(\bar{D}_{sm}) \bar{I} \quad (4.30)$$

sendo que as viscosidades volumétrica e dinâmica, e o tensor taxa de cisalhamento da fase sólida m são dados, respectivamente, por:

$$\lambda_{sm}^v = K_{2m} \varepsilon_{sm} \sqrt{\Theta_m} \quad (4.31a)$$

$$\mu_{sm}^v = K_{3m} \varepsilon_{sm} \sqrt{\Theta_m} \quad (4.31b)$$

$$\bar{D}_{sm} = \frac{1}{2} [\nabla \vec{V}_{sm} + (\nabla \vec{V}_{sm})^T] \quad (4.31c)$$

onde os coeficientes K_{2m} e K_{3m} são calculados através de relações algébricas com os parâmetros do escoamento, e são definidos na Seç. 4.2.10.

O aumento das tensões no escoamento plástico é ocasionado pela fricção entre as partículas, que é descrita através de modelos fenomenológicos ao invés de modelos mecanicistas, como no caso do escoamento viscoso (SYAMLAL *et al.*, 1993). A pressão da fase sólida é descrita segundo o modelo de JENIKE (1987), expresso como:

$$P_{sm}^p = \varepsilon_{sm} 10^{25} (\varepsilon_g^* - \varepsilon_g)^{10} \quad (4.32)$$

O tensor de tensões da fase sólida m em um escoamento plástico é descrito por SCHAEFFER (1987) para uma única fase. BENYAHIA *et al.* (2012) adaptaram este modelo para mais de uma fase sólida, obtendo uma equação dada por:

$$\bar{\tau}_{sm}^p = 2 \mu_{sm}^p \bar{D}_{sm} \quad (4.33)$$

e a viscosidade da fase sólida m para escoamento plástico é obtida por:

$$\mu_{sm}^p = \min \left[\frac{10^{25} (\varepsilon_g^* - \varepsilon_g)^{10} \sin(\Phi) (1 - \varepsilon_g)}{\sqrt{4I_{2D}} \sum_1^M \varepsilon_{sm}}, \mu_s^{max} \right] \quad (4.34)$$

onde μ_s^{max} é uma constante de valor 1000 poise, e I_{2D} é o segundo invariante do tensor de tensões, que pode ser expresso como:

$$I_{2D} = \frac{1}{6} \left[(D_{s,11} - D_{s,22})^2 + (D_{s,22} - D_{s,33})^2 + (D_{s,33} - D_{s,11})^2 \right] + D_{s,12}^2 + D_{s,23}^2 + D_{s,31}^2 \quad (4.35)$$

4.2.6 Transferência de calor entre fases

A transferência de calor entre as fases gás e sólidas pode ser modelada, em função da diferença de temperatura entre as fases, como:

$$W_{gm} = \gamma_{gm} (T_{sm} - T_g) \quad (4.36)$$

sendo que T_{sm} e T_g são, respectivamente, as temperaturas da fase sólida m e da fase gás, γ_{gm} é o coeficiente de transferência de energia entre a fase gás e a respectiva fase sólida m . SYAMLAL e PANNALA (2011) utilizam a expressão derivada por BIRD *et al.* (2006) para calcular γ_{gm} , com uma correção, dada pelo coeficiente γ_{gm}^0 , para incluir o efeito da transferência de massa entre as duas fases. Logo, γ_{gm} é obtido por:

$$\gamma_{gm} = \frac{C_{pg} R_{gm}}{\exp \left[\frac{C_{pg} R_{gm}}{\gamma_{gm}^0} \right] - 1} \quad (4.37)$$

onde R_{gm} é a taxa de transferência de massa da fase sólida m para a fase gás.

O coeficiente de correção, γ_{gm}^0 , é calculado como:

$$\gamma_{gm}^0 = \frac{6 \kappa_g \varepsilon_{sm} Nu_m}{d_{pm}^2} \quad (4.38)$$

e κ_g é a condutividade térmica da fase gás e Nu_m é o número de Nusselt, determinado a partir da equação proposta por GUNN (1978):

$$Nu_m = (7 - 10\varepsilon_g + 5\varepsilon_g^2)(1 + 0,7Re_m^{0,2}Pr^{1/3}) + (1,33 - 2,4\varepsilon_g + 1,2\varepsilon_g^2)Re_m^{0,7}Pr^{1/3} \quad (4.39)$$

O número de Reynolds, Re_m , foi definido na Eq. (4.15), enquanto que o número de Prandtl, Pr , é definido por:

$$Pr \triangleq \frac{C_{pg}\mu_g}{\kappa_g} \quad (4.40)$$

4.2.7 Condução de calor nas duas fases

Considerando que tanto a fase gás como a fase sólida obedecem a lei de Fourier, é possível escrever o fluxo de calor de ambas as fases como:

$$\vec{q}_g = -\varepsilon_g \kappa_g \nabla T_g \quad (4.41a)$$

$$\vec{q}_{sm} = -\varepsilon_{sm} \kappa_{sm} \nabla T_{sm} \quad (4.41b)$$

onde κ_g e κ_{sm} são, respectivamente, a condutividade térmica das fases gás e sólida.

O fenômeno de transferência de calor entre partículas é complexo e de grande dificuldade para a formulação do problema, envolvendo condutância de contato, condução através da camada limite de gás ao redor das partículas, e radiação (SYAMLAL, 1985). Todos estes fatores dificultam a modelagem da condutividade térmica da fase sólida, que difere significativamente da condutividade térmica do material das partículas. SYAMLAL e PANNALA (2011) desprezaram os efeitos da radiação e obtiveram a seguinte expressão para a condutividade térmica da fase sólida:

$$\kappa_{sm} = \frac{\kappa_g}{\sqrt{1-\varepsilon_g}} [7,26 \times 10^{-3} A + (1 - 7,26 \times 10^{-3}) A_{rm}] \quad (4.42)$$

onde o termo A_{rm} e os demais coeficientes do modelo são mostrados a seguir:

$$A_{rm} = \frac{2}{(1 - B/A)} \left[\frac{(A - 1) B}{(1 - B/A)^2 A} \ln \left(\frac{A}{B} \right) - \frac{B - 1}{1 - (B/A)} - \frac{(B + 1)}{2} \right] \quad (4.43a)$$

$$A = \frac{\kappa_{pm}}{\kappa_g} \quad (4.43b)$$

$$B = 1,25 \left(\frac{1 - \varepsilon_g}{\varepsilon_g} \right)^{10/9} \quad (4.43.c)$$

e κ_{pm} é a condutividade do material que compõe as partículas do leito.

4.2.8 Geração de energia via reações químicas

As expressões para contabilizar o calor das reações heterogêneas deve levar em conta a diferença de temperatura entre as fases gás e sólido, a partir de um particionamento dos processos de reação para cada fase. Como a mediação das equações fluidodinâmicas, necessária para derivar as equações de conservação, não possuem qualquer informação a respeito da interface gás-sólido, este particionamento acaba sendo arbitrário (SUN, 2007). Entretanto, SYAMLAL *et al.* (1993) observa que este particionamento deve ser realizado com algum embasamento físico. Dessa forma, a energia gerada e consumida por todas as reações envolvendo as fases sólidas são contabilizadas nas equações de energia da fase sólida. Por outro lado, todas as reações homogêneas são contabilizadas na equação de energia da fase gás.

A geração de energia na reação de conservação de energia da fase gás e da fase sólida são dadas, respectivamente, por:

$$\Delta H_g = \sum_{i=1}^m (h_{rgi} \tilde{r}_{gi} MW_n) \quad (4.44a)$$

$$\Delta H_s = \sum_{i=1}^m (h_{rsi} \tilde{r}_{smi} MW_n) \quad (4.44b)$$

sendo que \tilde{r}_{gi} e \tilde{r}_{smi} são, respectivamente, a taxa de decomposição dos reagentes da reação homogênea e heterogênea i . Os termos h_{rgi} e h_{rsi} são, respectivamente, a energia liberada pela reação homogênea e heterogênea i . Já o termo MW_n é a massa molecular do componente n .

Para ilustrar o cálculo da energia liberada pelas reações considere que estão ocorrendo n reações na fase k . Dessa forma, as taxas de decomposição das n reações são dadas por \tilde{r}_j , e a energia liberada por todas as reações é denotada por HOR . Além disso, definindo o subscrito Pi como referente aos produtos da reação e subscrito Ri como referente aos reagentes, é possível escrever que:

$$HOR = \sum_{j=1}^n h_{rj} \quad (4.45a)$$

$$h_{rj} = (n_{Pi}h_{Pi}MW_{Pi} - n_{Ri}h_{Ri}MW_{Ri})\tilde{r}_j \quad (4.45b)$$

onde n_x , MW_x e h_x são o coeficiente estequiométrico, a massa molecular e a entalpia das espécies Pi e Ri . A entalpia h_x é calculada considerando as entalpias de formação e a temperatura das espécies químicas. A taxa de decomposição da reação j é calculada por:

$$\tilde{r}_j = k(T)[Xi]^{\alpha_j}[Yi]^{\beta_j} \quad (4.46)$$

Os termos α_j e β_j da Eq. (4.46) equivalem à ordem de cada reação j , enquanto que o termo $k(T)$ é a constante da reação. Considerando que a constante da reação obedece à fórmula de Arrhenius, é possível escrever:

$$k(T) = A_j \exp\left(-\frac{\tilde{E}_{aj}}{\tilde{R}T_i}\right) \quad (4.47)$$

em que A_j é o fator pré-exponencial para a reação j , \tilde{E}_{aj} é a energia de ativação da reação j , \tilde{R} é a constante universal dos gases e T_i é a temperatura do meio em que a reação ocorre. As constantes A_j e E_{aj} são obtidas empiricamente. Detalhes sobre a utilização dessas constantes para as reações consideradas neste trabalho são fornecidos no Cap. 5.

4.2.9 Taxa de formação e de consumo de espécies químicas

A formação e o consumo das espécies químicas são considerados nas equações de conservação de espécies através dos termos fontes R_{gn} e R_{smn} . Esses termos são calculados por:

$$R_k = MW_k \sum_{ki=1}^M \sum_{j=1}^N (n_{kij}\tilde{r}_j) \quad (4.48)$$

onde k corresponde a fase em que ocorre a reação, n_{kij} é o coeficiente estequiométrico do elemento kij na reação j e \tilde{r}_j é a taxa de consumo dos reagentes da reação j .

4.2.10 Conservação de energia granular

A equação de conservação de energia granular é derivada utilizando a teoria cinética de escoamentos granulares, como pode ser visto em GIDASPOW (1994) e JAKOBSEN (2008), e é escrita por SYAMLAL *et al.* (1993) como:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{2} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_{sm} \rho_{sm} \Theta_m) + \nabla \cdot (\varepsilon_{sm} \rho_{sm} \Theta_m \vec{V}_{sm}) \right] \\ & = \bar{\bar{S}}_{sm} : \nabla \vec{V}_{sm} - \nabla \cdot \vec{q}_{\Theta_m} - \gamma_{\Theta_m} + \phi_{gm} + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq m}}^M \phi_{lm} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Os termos do lado esquerdo da Eq. (4.49) representam, respectivamente, a taxa de variação local e o fluxo líquido convectivo de energia granular. O termo $\bar{\bar{S}}_{sm} : \nabla \vec{V}_{sm}$ representa a geração de energia granular devido aos efeitos do tensor de tensões da fase sólida, $\nabla \cdot \vec{q}_{\Theta_m}$ é o fluxo de energia granular devido aos efeitos difusivos, γ_{Θ_m} é a dissipação de energia granular devido às colisões inelásticas, ϕ_{gm} representa a transferência de energia granular entre a fase gás e a fase sólida m e o último termo do lado direito da equação representa a transferência de energia granular entre as fases sólidas do escoamentos.

Considerando que a energia granular é dissipada localmente, as contribuições convectivas e difusivas podem ser desprezadas e apenas os termos de geração e dissipação são significativos. SYAMLAL (1987) obteve uma expressão algébrica para a equação de energia granular, dada por:

$$\Theta_m = \left\{ \frac{K_{1m} \varepsilon_{sm} \text{tr}(\bar{\bar{D}}_{sm}) + \sqrt{K_{1m}^2 \text{tr}^2(\bar{\bar{D}}_{sm}) \varepsilon_{sm}^2 + 4 K_{4m} \varepsilon_{sm} [K_{2m} \text{tr}^2(\bar{\bar{D}}_{sm}) + 2 K_{3m} \text{tr}(\bar{\bar{D}}_{sm}^2)]}}{2 \varepsilon_{sm} K_{4m}} \right\}^2 \quad (4.50)$$

onde os coeficientes K_{1m} , K_{2m} , K_{3m} e K_{4m} são dados por:

$$K_{1m} = 2(1 + e_{mm}) \rho_g g_{0mm} \quad (4.51a)$$

$$K_{2m} = 4 \frac{d_{pm}\rho_m(1 + e_{mm})\varepsilon_m g_{0mm}}{3\sqrt{\pi}} - \frac{2}{3}K_{3m} \quad (4.51b)$$

$$K_{3m} = \frac{d_{pm}\rho_m}{2} \left\{ \frac{\sqrt{\pi}}{3(3 - e_{mm})} [0,5(3e_{mm} + 1) + 0,4(1 + e_{mm})(3e_{mm} - 1)\varepsilon_m g_{0mm}] \right. \\ \left. + \frac{8\varepsilon_m g_{0mm}(1 + e_{mm})}{5\sqrt{\pi}} \right\} \quad (4.51c)$$

$$K_{4m} = \frac{12(1 - e_{mm}^2)\rho_m g_{0mm}}{d_{pm}\sqrt{\pi}} \quad (4.51d)$$

onde e_{mm} é o coeficiente de restituição devido às colisões entre as partículas e g_{0mm} é a função de distribuição radial das partículas. Valores de e_{mm} entre 0,9 e 0,95 são normalmente utilizados (PINHO, 2012).

4.3 Condições Iniciais e de Contorno

Para se obter uma solução única de qualquer equação diferencial parcial (EDP), é necessário um conjunto de condições suplementares para determinar a função arbitrária resultante da integração da EDP (HOFFMAN, 2000). O conjunto de equações de conservação apresentado na Seq. 4.1 não possui solução analítica, de maneira que sua solução deve ser feita numericamente. Independente da metodologia numérica adotada para resolver estas equações, é necessário especificar condições iniciais e de contorno fisicamente consistentes e compreender o papel de cada uma delas no algoritmo numérico (VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

4.3.1 Condições iniciais

A condição inicial representa o valor de uma determinada grandeza no instante $t = 0$ s, ou simplesmente o passo inicial de um método iterativo. Em determinadas situações o escoamento durante o regime transiente é de interesse da simulação. Para estas situações é fundamental uma condição inicial fisicamente fiel à realidade. Por outro lado, nas situações em que apenas o resultado final é desejado, a condição inicial não necessita ser baseada em condições reais, pois quanto mais próxima da solução

final do problema estiver a condição inicial, mais rápido será obtida o resultado desejado (BLAZEK, 2001).

Nos casos de escoamentos multifásicos o problema jamais irá atingir o regime permanente, apresentando oscilações com o tempo em torno de um valor médio de uma determinada grandeza. Este regime é algumas vezes chamado de regime pseudo-permanente, ou estacionário. É interessante notar que uma grandeza pode atingir este estado estacionário, enquanto outras grandezas ainda estão em regime transiente.

4.3.2 Condições de contorno

Na modelagem de reatores químicos é importante delimitar o domínio físico apropriado para isolar o sistema desejado das vizinhanças (RANADE, 2002). De maneira que é necessário conhecer ou estimar, com base no comportamento físico do escoamento, o comportamento das grandezas físicas nas fronteiras da região delimitada para se obter a solução do problema. HOFFMAN (2000) define quatro tipos de condições de contorno, para equações diferenciais parciais, de uma maneira geral como:

- (i) Condição de contorno de Dirichlet: quando o valor da grandeza é prescrito ao longo do contorno,

$$\phi_w = \phi_0, \quad \text{na parede} \quad (4.52)$$

onde ϕ é uma grandeza qualquer.

- (ii) Condição de contorno de Neumann: quando o gradiente normal de uma variável é especificado ao longo do contorno,

$$c \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w = q_{\phi_w}, \quad \text{na parede} \quad (4.53)$$

onde c é uma constante, \vec{n} é o vetor normal à condição de contorno e q_{ϕ_w} é o fluxo de ϕ através do contorno.

- (iii) Condição de contorno de Robin: quando a condição imposta no contorno for uma combinação linear das condições de Dirichlet e de Neumann,

$$c_1 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w + c_2 \phi_w = c_3 \phi_0, \quad \text{na parede} \quad (4.54)$$

onde c_1 , c_2 e c_3 são constantes.

- (iv) Condição de contorno mista: quando algumas partes do contorno possuem diferentes condições de contorno, por exemplo:

$$\begin{aligned} c_1 \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w + c_2 \phi_w &= c_3 \phi_0, & \text{na região 1 da parede.} \\ c \left(\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}} \right)_w &= q_{\phi_w}, & \text{na região 2 da parede.} \end{aligned} \quad (4.55)$$

Em problemas de mecânica dos fluídos computacional normalmente é utilizada uma nomenclatura diferente para designar as condições de contorno.

4.3.2.1 Condição de entrada

É a condição de contorno através da qual a vizinhança se comunica com o domínio da solução (RANADE, 2002). Normalmente, as condições de entrada são conhecidas, de maneira que é possível afirmar que a condição de Dirichlet é utilizada na entrada para todas as variáveis.

4.3.2.2 Condição de saída

FAN e ZHU (1998) relatam a existência de três tipos de condições de saída: escoamento completamente desenvolvido na saída, escoamento com elevado número de Peclet próximo a saída e saída com corrente livre. A condição de escoamento completamente desenvolvido na saída é a mais comumente encontrada na literatura e corresponde a utilizar uma condição de Neumann com fluxo de ϕ igual a zero.

4.3.2.3 Condição de parede

Em um escoamento multifásico existem três possibilidades de condições de contorno para a equação de conservação de quantidade de movimento, que estão listadas a seguir:

- (i) Condição de não-escorregamento: a componente tangencial da velocidade na parede é zero. É comumente empregada para a fase fluída em paredes consideradas rígidas.

$$v = 0 \quad (4.56)$$

onde v é a componente tangencial da velocidade na parede.

- (ii) Condição de livre-escorregamento: a componente normal da velocidade na parede e o gradiente de velocidade normal à parede são iguais a zero. É normalmente empregada em escoamentos monofásicos quando a delimitação do contorno não é uma parede sólida:

$$u = 0 \quad (4.57a)$$

$$\frac{\partial \vec{U}}{\partial \vec{n}} = 0 \quad (4.57b)$$

onde u é a componente normal à parede e \vec{U} é o vetor velocidade na parede.

- (iii) Condição de escorregamento parcial: foi desenvolvida por JOHNSON e JACKSON (1987) (*apud* SYAMLAL *et al.*, 1993) para contabilizar os efeitos de fricção e de colisão entre as partículas e a parede sólida do domínio considerado. Quando esta condição é utilizada, a equação de conservação de energia granular deve ser resolvida.

Para a fase gás a condição de não-escorregamento é normalmente empregada. Já para a fase sólida não existe uma condição de contorno universal, de maneira que são encontrados na literatura trabalhos utilizando cada uma das três condições citadas acima.

Para a equação de temperatura são utilizadas as condições de Dirichlet, de Neuman e Robin, dependendo da situação. Para as equações de espécies a condição de Neuman é empregada em situações onde a parede é rígida, com fluxo igual a zero.

4.3.2.4 Condições de simetria e periódicas

Em situações em que ocorre uma simetria do escoamento ou exista um processo repetitivo provocado pela natureza de um equipamento, é possível reduzir o tamanho do domínio computacional através de condições de contorno especiais (RANADE, 2002). Estas condições de contorno fictícias ajudam a simplificar situações específicas. No caso de uma simetria do escoamento, a condição de simetria pode ser imposta. Esta condição impõe que a componente normal da velocidade e os gradientes normais à superfície imaginária são iguais a zero.

Quando a geometria física do problema considerado ou o padrão do escoamento esperado possui uma natureza repetitiva, uma condição de contorno cíclica, ou periódica, pode ser utilizada para reduzir o domínio computacional (RANADE, 2002). A aplicação de uma condição cíclica impõe que o valor de todas as variáveis em uma superfície 1 é igual ao das variáveis na superfície 2, ou seja:

$$\phi_{S1} = \phi_{S2} \quad (4.58)$$

onde ϕ_{S1} e ϕ_{S2} correspondem, respectivamente, as variáveis na superfície 1 e 2.

5 MODELAGEM MATEMÁTICA DAS REAÇÕES QUÍMICAS

Os termos fontes das equações de conservação de massa, de espécies químicas e de temperatura, descritas no capítulo anterior, dependem da modelagem cinética das reações do processo. Normalmente, esta modelagem consiste na escolha correta dos parâmetros da equação de Arrhenius, Eq. (4.47), e da ordem da reação para o cálculo da taxa da reação, Eq. (4.46). Cada etapa do processo de gaseificação é comentada separadamente ao longo deste capítulo.

5.1 Secagem

Sob condições atmosféricas de pressão, a temperatura de ebulição da água é de 100 °C. Esta temperatura é muito menor do que a faixa de temperaturas típicas utilizadas no processo de gaseificação em leito fluidizado, tipicamente entre 700 e 900 °C (PINHO, 2012). Como as taxas de transferência de energia nesses reatores é muito elevada e as partículas são, normalmente, muito pequenas (i.e., <0,5 mm), as partículas de biomassa injetadas no gaseificador atingem rapidamente temperaturas bem acima dos 100 °C.

MEHRABIAN *et al.* (2012) lista três formas de se modelar o processo de secagem rápida, os modelos térmicos, de equilíbrio e de cinética química. Os modelos de cinética química consiste na utilização da equação de Arrhenius, Eq. (4.47), para calcular a taxa da reação de secagem. Os modelos de equilíbrio se baseiam na hipótese de que a água sob forma de vapor e de líquido na fase gás estão em equilíbrio termodinâmico. Por fim, os modelos térmicos consideram uma temperatura fixa para a ocorrência da evaporação. Os modelos de cinética química são considerados os mais estáveis. Entretanto, eles são extremamente sensíveis às condições utilizadas para se obter os parâmetros do modelo, o que acaba limitando sua utilização. Por outro lado, os modelos de equilíbrio precisam ser ajustados com dados experimentais, o que também limita sua utilização. Dessa forma, os autores sugerem a utilização de modelos térmicos para modelar a secagem.

Devido ao rápido aumento da temperatura da partícula depois que ela entra no reator, a hipótese de que a evaporação da água das partículas de biomassa ocorre

instantaneamente após a entrada desta no reator parece ser uma boa aproximação. Esta hipótese foi utilizada em todos os trabalhos pesquisados que utilizaram simulações termofluidodinâmicas para analisar o processo de gaseificação, tanto de biomassa quanto de carvão, em reatores de leito fluidizado.

Contudo, é preciso observar que quando a hipótese de secagem instantânea é considerada a simulação deixa de computar a energia necessária para a ocorrência do processo de secagem. Logo, é esperado que as temperaturas obtidas modelando a secagem como um processo instantâneo sejam maiores do que na situação real. Quanto maior o teor de umidade da partícula maior deve ser a diferença entre a simulação e a situação real.

Neste trabalho, considera-se que a biomassa sofre um pré-tratamento, tal que a umidade do combustível é pequena, logo a hipótese de secagem instantânea pode ser utilizada. Esta hipótese é implementada no código através da injeção de uma corrente de vapor junto com a corrente de bagaço de cana, a uma temperatura de 100 °C.

5.2 Pirólise

O fato da pirólise ser um processo complexo, envolvendo vários fenômenos físicos e químicos (STRINGEL, 2011), torna a modelagem desta etapa a mais complicada dentre todas as etapas do processo de gaseificação. Existem diversos estudos sobre a modelagem tanto da pirólise lenta quanto da pirólise rápida, porém não existe na literatura nenhum modelo universalmente aceito e capaz de prever com precisão aceitável a pirólise de todos os tipos de biomassa normalmente utilizadas. Devido as elevadas taxas de transferência de energia e de massa nos reatores de leito fluidizado, o processo de pirólise nestes reatores pode ser considerado um processo de pirólise rápida (VENDERBOSCH e PRINS, 2011).

Na literatura são encontrados três tipos de modelos de pirólise, os modelos cinéticos, de energia de ativação distribuída e estruturais (SOUZA-SANTOS, 2004). Os modelos cinéticos podem ser subdivididos em três grupos: modelos de reação global de passo único, modelos de reações paralelas e modelos de reações competitivas, os quais são representados na Fig. 5.1.

Os modelos de reação global de passo único consideram uma taxa de reação única para o processo de pirólise. Embora este método possa ser implementado facilmente ele possui uma série de desvantagens. Dentre as quais está o fato do modelo não fazer distinção entre voláteis e gases, assim como da composição destes componentes (MORF, 2001; SOUZA-SANTOS, 2004). Além disso, este tipo de modelo não considera a variação das quantidades de voláteis e de *char* formados com o

aumento da temperatura, uma vez que a quantidade dos produtos é fixada para todas as temperaturas (DI BLASI, 2008; STRINGEL, 2011).

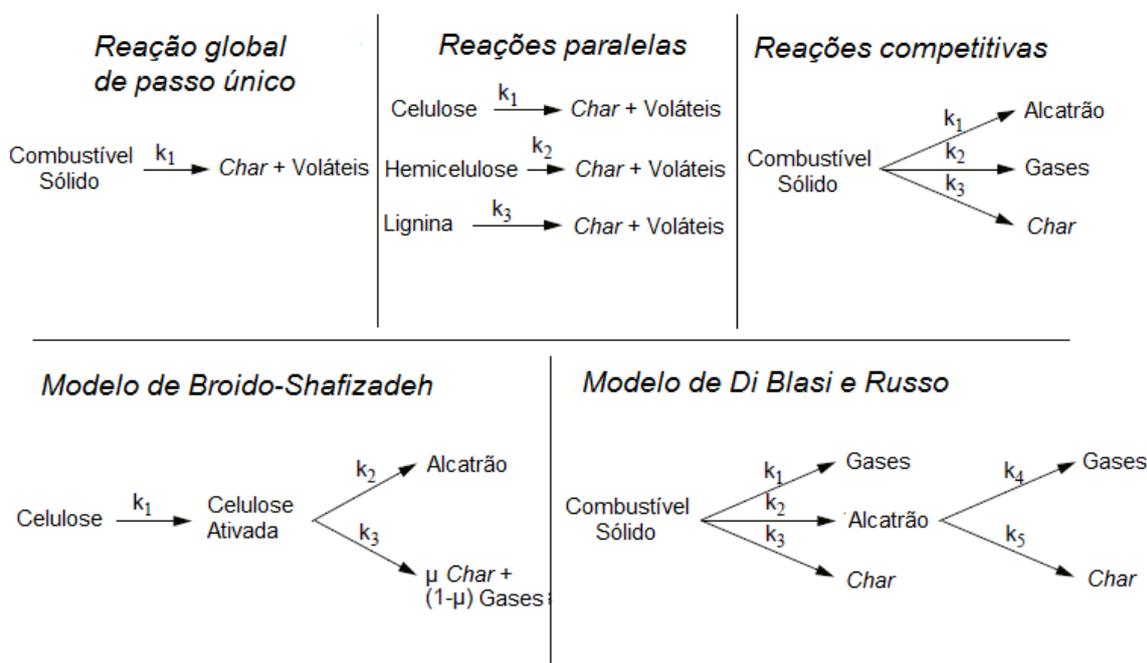


Figura 5.1 - Modelos cinéticos do processo de pirólise (adaptado de MORF, 2001).

Os modelos de reações competitivas utilizam um coeficiente de reação para a produção de cada um dos produtos, o que possibilita contabilizar o efeito da temperatura sobre a quantidade de alcatrão, gases e *char* formados. No entanto, estes modelos não possuem informações sobre a composição do alcatrão e dos gases formados. É necessário observar ainda que esta abordagem permite que, sob determinadas condições, ocorra a conversão total da biomassa em apenas um dos produtos, em detrimento dos demais (MORF, 2001), o que não é verificado na realidade. Deve-se notar que o modelo de Di Blasi e Russo, representado na Fig. 5.1, é considerado um modelo de reações competitivas que inclui o processo de craqueamento do alcatrão, através da utilização de duas reações de passo único para contabilizar a geração de *char* e de gases.

O modelo com reações paralelas, também chamado de modelo de superimposição, considera as reações de decomposição para os três principais constituintes da biomassa, celulose, hemicelulose e lignina. Estes componentes, por possuírem estruturas moleculares diferentes entre si, possuem uma cinética de pirólise bastante diferente, assim como a temperatura na qual se inicia o processo de pirólise. A celulose se decompõe em uma faixa de temperatura entre 240 e 350 °C, a hemicelulose entre 200 e 260 °C e a lignina entre 280 e 500 °C (PARK *et al.*, 2010).

Dessa forma, este mecanismo é capaz de capturar a influência da temperatura sobre cada um dos três principais constituintes da biomassa.

A principal vantagem apontada do modelo de superimposição é que ele não dependeria da biomassa utilizada para se calcular os coeficientes cinéticos, ou seja, ele poderia ser utilizado para qualquer biomassa, desde que se conhecesse a quantidade de cada um dos seus três constituintes. No entanto, esta suposta universalidade do modelo é constantemente questionada, pois ele não leva em conta a interação entre esses constituintes, embora alguns trabalhos tenham obtido resultados aceitáveis com tais modelos (STRINGEL, 2011). Além disso, KEOWN *et al.* (2008) identificaram que o processo de pirólise é influenciado pela presença de metais alcalinos e de alcalinos terrosos. Esta influência não foi considerada em nenhum dos modelos de pirólise encontrados na literatura.

Na literatura foram encontrados modelos cinéticos de reações competitivas capazes de descrever o processo de pirólise da madeira. Todavia, nenhum modelo cinético para a pirólise de bagaço de cana-de-açúcar foi encontrado. Logo, foi necessário buscar na literatura uma alternativa para representar o processo de pirólise do bagaço de cana-de-açúcar. Uma breve revisão de literatura, com alguns dos trabalhos consultados mais relevantes, é apresentada a seguir. Para mais informações sobre o processo de pirólise de biomassa é sugerido o trabalho de DI BLASI (2008), que consiste em uma revisão ampla da modelagem deste processo.

BRADBURY *et al.* (1979) estudaram o processo de decomposição térmica da celulose. Os autores avaliaram que, em temperaturas baixas, esse processo possui uma fase de iniciação, que é chamada de ativação da celulose. O modelo de Broido-Shafizadeh, mostrado na Fig. 5.1, consiste na utilização deste passo de ativação da celulose antes de sua decomposição térmica.

Em RODRIGUEZ *et al.* (1987) foi realizado um estudo experimental da pirólise de bagaço de cana em um reator de leito fluidizado borbulhante, com o objetivo de se determinar a possibilidade de se utilizar o bagaço para obtenção de um gás com poder calorífico relevante em aplicações industriais. Os autores analisaram os efeitos do tamanho de partícula, do teor de umidade e da temperatura do leito sobre os produtos da pirólise e sobre a composição dos gases produzidos.

Os resultados obtidos em RODRIGUEZ *et al.* (1987) mostram uma influência pequena do tamanho de partícula sobre a composição dos gases. Por outro lado, a temperatura apresenta uma forte influência sobre a formação de gases, alcatrão e *char*, e sobre a composição dos gases. Temperaturas maiores aumentam a quantidade de gases produzidos e reduzem as quantidades de alcatrão e de *char* formados. Por fim, é relatado que o teor de umidade do bagaço possui uma forte influência sobre a

quantidade de H₂ e de CO presentes no gás produzido. Os autores sugerem que este impacto pode ser justificado pela intensificação da reação de deslocamento de água (R.8), com a formação de H₂ e de CO₂ e consumo de CO e H₂O.

STUBINGTON e AIMAN (1994) realizaram um estudo da pirólise do bagaço de cana sob elevadas taxas de aquecimento e obtiveram um conjunto de dados para ser utilizado em modelos de dinâmica dos fluídos computacional. Os autores investigaram o efeito de diferentes tamanhos de partículas, taxas de aquecimento, tempo de residência e umidade do meio e do bagaço sobre a pirólise primária e secundária.

MILLER e BELLAN (1997) abordaram a pirólise a partir do modelo de superimposição dos principais constituintes da biomassa, e estenderam o modelo de Broido-Shafizadeh para a hemicelulose e a lignina. Um modelo para o craqueamento do alcatrão formado na pirólise primária também é apresentado. Os autores dividiram as partículas em dois grupos, as micropartículas, com diâmetro menor do que 1 mm, e as macro partículas, com diâmetros maiores do que 1 mm. Eles afirmam que a pirólise das micropartículas pode ser descrita apenas por modelos cinéticos, enquanto que para as macropartículas é necessário incluir os efeitos difusivos na modelagem.

No mesmo ano, VÁRHEGYI *et al.* (1997) realizaram um estudo da pirólise da celulose, hemicelulose e da lignina do bagaço de cana. Os autores utilizaram dados experimentais para obter coeficientes cinéticos para a decomposição dos principais componentes da biomassa utilizando modelos de passo único, reações sucessivas, paralelas e concorrentes, utilizando taxas de aquecimento reduzidas (2 °C min⁻¹) e elevadas (50-80 °C min⁻¹), com temperaturas baixas (menores que 350 °C). Os parâmetros obtidos estão bastante próximos dos obtidos por outros autores que utilizaram outras biomassas para estudar a decomposição térmica da lignina, da celulose e da hemicelulose. Além disso, ao contrário do trabalho de MILLER e BELLAN (1997), os autores sugerem que o passo de ativação do modelo de Broido Shafizadeh deve ser suprimido da modelagem da devolatilização dos três principais constituintes da biomassa com o aumento da temperatura final do processo.

CHEN *et al.* (1998) também apresentaram um modelo para a pirólise de biomassa de maneira geral. Entretanto, ao invés de utilizarem o modelo de superimposição, foi realizada uma adaptação no modelo FG-DVC, utilizado para a pirólise do carvão, com o intuito de usá-lo com biomassa. Os autores relatam a necessidade de se realizar algumas correções adicionais, além da validação do modelo em situações com elevadas taxas de aquecimento. Essas correções são necessárias devido às diferenças entre os processos de pirólise do carvão e da biomassa, como destacado por LI (2013).

Em 1999, ÓRFÃO e colaboradores apresentaram um modelo de pirólise de biomassa usando o esquema de reações paralelas, ilustrado na Fig. 5.1. O modelo segue a recomendação de VÁRHEGYI *et al.* (1997), ou seja, as reações de ativação dos constituintes da biomassa não são consideradas. ÓRFÃO *et al.* (1999) também apresentam uma comparação entre a pirólise em meio inerte (N₂) e na presença de um meio oxidante (ar). Em uma atmosfera oxidante a decomposição térmica da celulose, da hemicelulose e da lignina sofrem algumas alterações. Uma delas é a antecipação da temperatura na qual a pirólise dos dois primeiros constituintes começa. Outro efeito é a diminuição da faixa de temperatura na qual pirólise da lignina ocorre.

ZANZI *et al.* (2001) estudaram a influência da quantidade de vapor presente no processo de pirólise de biomassa. Os testes foram realizados em um reator de leito fixo com diferentes biomassas, incluindo o bagaço de cana. Foram utilizadas taxas de aquecimento lentas com temperaturas finais elevadas. Os resultados mostraram um aumento da produção de voláteis e de gases à medida que a quantidade de vapor inserida no reator aumentava.

CAMARGO (2006) estudou a pirólise de cana de açúcar em um reator de leito fluidizado. O autor analisou a importância da temperatura do reator, da altura do leito, da presença de catalisador e da presença de vapor, não apenas sobre a quantidade de alcatrão e gases formados, mas também sobre a composição destes componentes. Assim como ZANZI *et al.* (2001), ele também relata um aumento da quantidade de gases produzidos com a elevação do teor de vapor no interior do reator. No entanto, o autor observou uma redução da produção de voláteis com a elevação do teor de vapor no interior do gaseificador. Outros efeitos reportados do teor de vapor sobre a pirólise do bagaço foram o aumento da quantidade de H₂ produzida, redução da fração sólida dos produtos da pirólise, do CH₄ e do CO₂, além do aumento de compostos poliaromáticos no alcatrão.

No ano seguinte, HOSOYA *et al.* (2007) apresentaram um estudo analisando os efeitos da interação entre celulose e hemicelulose e celulose e lignina durante o processo de pirólise da madeira. Os autores observaram uma forte interação entre a celulose e a lignina, podendo causar alterações na composição dos produtos da pirólise. A interação entre celulose e hemicelulose foi significativamente menor, podendo até mesmo ser desprezada. A interação entre os constituintes da biomassa durante a pirólise é uma das críticas feitas aos modelos de superimposição, que desprezam estas interações (STRINGEL, 2011).

Em PÜTÜN *et al.* (2008) foi estudado o processo de pirólise de biomassa em um reator de leito fixo sob a influência de catalisadores e de vapor de água. Os autores observaram um aumento da quantidade de gases e de alcatrão produzidos com a

inclusão de vapor no reator, da mesma forma que em ZANZI *et al.* (2001) e em CAMARGO (2006). Os resultados ainda mostram uma maior concentração de compostos oxigenados no alcatrão formado na pirólise com presença de água. Outra observação relevante é o fato dos catalisadores possuírem uma importância maior com a inclusão do vapor no meio.

O trabalho de MANYÀ e ARAUZO (2008) apresenta um novo modelo cinético, baseado na superimposição dos principais constituintes da biomassa, para a pirólise de micropartículas de bagaço de cana, para condições isotérmicas. As reações de decomposição térmica de cada componente são modeladas como paralelas de passo único. Assim como os demais modelos deste tipo, os produtos da pirólise são caracterizados como alcatrão, gases e *char*. PINHO (2012) avalia que este modelo não é adequado para o processo de pirólise em gaseificadores, uma vez que as condições de pirólise não podem ser consideradas isotérmicas.

RANZI *et al.* (2008) analisaram o processo de pirólise primária e secundária, e desenvolveram um novo modelo de decomposição térmica de biomassa baseado no princípio da superimposição. Ao contrário dos demais modelos comentados anteriormente, os autores utilizaram um modelo cinético bastante elaborado com a decomposição de cada componente dependendo de um passo inicial de ativação, e reações de múltiplos passos sucessivas e paralelas. A grande contribuição deste trabalho é que o modelo utilizado prevê a composição tanto dos gases quanto do alcatrão formado durante a pirólise. No entanto, a utilização deste modelo em simulações de CFD parece não ser praticável, devido ao elevado número de componentes químicos utilizados pelo modelo.

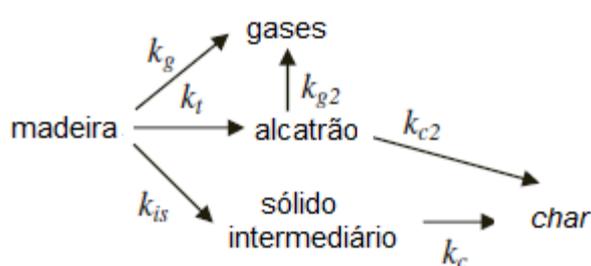


Figura 5.2 - Esquema do modelo de pirólise proposto por PARK *et al.* (2010).

PARK *et al.* (2010) desenvolveram um novo modelo para descrever o processo de pirólise da madeira, baseado no modelo de Kilzer-Broido. O modelo utiliza três reações endotérmicas paralelas produzindo alcatrão, gases e um composto sólido intermediário, como representado na Fig. 5.2. A contribuição deste trabalho reside na consideração das entalpias de reação do processo de pirólise, levando em conta ainda

a diferença entre as reações de formação de voláteis e as de formação de *char*, identificadas na literatura (e.g. MOK e ANTAL, 1983; HASELI *et al.*, 2011), respectivamente, como endotérmicas e exotérmicas.

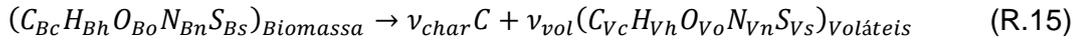
No ano seguinte, HASELI *et al.* (2011) propuseram um modelo de reações competitivas, levando em conta a variação da entalpia de reação da pirólise com a temperatura. Um valor médio da entalpia da decomposição primária da madeira, incluindo a formação de voláteis e de *char*, foi obtida como sendo igual a 25 kJ/kg. Embora os resultados tenham sido satisfatórios os autores recomendam que a entalpia de reação de cada uma das três reações competitivas seja contabilizada separadamente. Os autores ainda afirmam que a modelagem do processo de craqueamento de alcatrão não é fundamental para melhorar a capacidade de predição do modelo, ao contrário do que é defendido por alguns autores (e.g. MILLER e BELLAN, 1997; PARK *et al.*, 2010).

Em MALIGER *et al.* (2011) foi apresentado um estudo sobre os efeitos de diferentes composições de bagaço de cana sobre a pirólise. Os autores utilizam amostras de bagaço cultivados em diferentes tipos de solo. Uma análise destas amostras revela que a composição do bagaço depende do tipo de solo e das condições nas quais a cana é cultivada. No entanto, o perfil de decomposição térmica de todas as amostras foi semelhante. Além disso, os autores afirmam que, devido às interações entre os principais constituintes da biomassa, a melhor maneira de se modelar a pirólise seria através de uma reação global.

PINHO (2012) propôs dois modelos para descrever o processo de decomposição térmica do bagaço de cana-de-açúcar. Ambos os modelos consideram que a pirólise pode ser modelada como um processo instantâneo. Para o primeiro modelo, chamado de modelo RODRIGUEZ-MILLER, o autor utilizou o trabalho de RODRIGUEZ *et al.* (1987) para obter a composição dos gases na pirólise primária. Além disso, foi utilizado o modelo cinético proposto por MILLER e BELLAN (1997) para contabilizar os efeitos da pirólise secundária. O segundo modelo, chamado de modelo PETERSEN-RODRIGUEZ, é um modelo estequiométrico baseado na equação da pirólise de resíduos sanitários, desenvolvida em PETERSEN e WERTHER (2005). PINHO (2012) sugere a utilização do modelo PETERSEN-RODRIGUEZ por considerar a variação da composição elementar do bagaço de cana, enquanto que o modelo de RODRIGUEZ-MILLER considera uma composição geral para a biomassa.

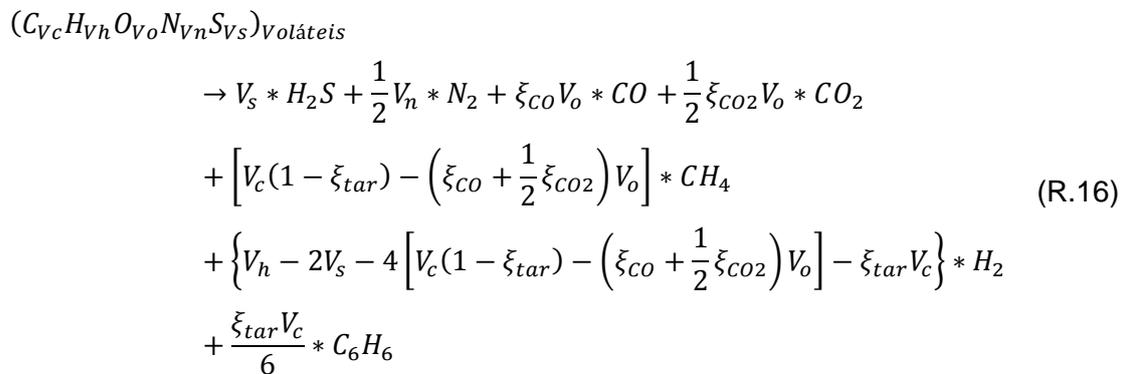
Devido à ausência de um modelo cinético específico para o bagaço de cana, optou-se por utilizar o modelo sugerido por PINHO (2012). A simplicidade e a capacidade de contabilizar a diferença na composição elementar do bagaço de cana utilizado foram levados em conta nessa escolha. Como comentado anteriormente, o

modelo PETERSEN-RODRIGUEZ utiliza a equação estequiométrica desenvolvida por PETERSEN e WERTHER (2005), dada por:



onde o termo $(C_{Bc}H_{Bh}O_{Bo}N_{Bn}S_{Bs})_{Biomassa}$ representa a molécula equivalente de biomassa e o termo $(C_{Vc}H_{Vh}O_{Vo}N_{Vn}S_{Vs})_{Voláteis}$ a molécula equivalente de voláteis formados durante a pirólise.

O modelo de PETERSEN-RODRIGUEZ considera ainda que os voláteis são decompostos segundo a seguinte reação estequiométrica:



sendo que para obter os coeficientes ξ_{CO} , ξ_{CO_2} e ξ_{tar} , é necessário a utilização de dados experimentais do processo de pirólise. Na ausência destes dados experimentais, PINHO (2012) utilizou os dados do trabalho de RODRIGUEZ *et al.* (1987), para uma temperatura de pirólise de 650 °C para obtenção destes parâmetros. Em seguida, considerou que estes parâmetros seriam válidos também para o bagaço considerado em seu trabalho.

Neste trabalho, o modelo PETERSEN-RODRIGUEZ é adotado com uma pequena diferença de implementação em relação a PINHO (2012). No trabalho de RODRIGUEZ *et al.* (1987) fica claro que o aumento da temperatura do leito influencia a composição dos gases formados durante o processo de pirólise. Ou seja, se a temperatura do leito for muito maior do que a temperatura utilizada para calcular os coeficientes do modelo, os resultados da simulação podem deixar de ser representativos. Deve-se observar ainda que esta diferença deve residir no fato das taxas de aquecimento da partícula serem maiores quando a temperatura do leito é maior. Como os casos simulados apresentam uma grande diferença na temperatura de parede, optou-se por calcular a composição dos gases de pirólise para duas

temperaturas, 700 °C e 850 °C, ao invés de considerar apenas uma temperatura, como feito por PINHO (2012).

A composição do bagaço utilizado é a mesma utilizada por PINHO (2012). A análise elementar e imediata referente ao bagaço são apresentadas, respectivamente, nas Tabs. 5.1 e 5.2.

Tabela 5.1 – Análise elementar do bagaço utilizado em fração mássica (livre de água e cinzas).

C (%)	51,22
H (%)	6,63
O (%)	41,36
N (%)	0,45
S (%)	0,34

Tabela 5.2 – Análise imediata do bagaço utilizado em fração mássica.

Umidade (%)	4,26
Voláteis (%)	77,99
Carbono fixo (%)	11,03
Cinzas (%)	6,72

Utilizando a análise elementar apresentada na Tab. 5.1, é possível obter a molécula de biomassa equivalente do bagaço de cana normalizada em relação ao carbono, $CH_{1,55263}O_{0,60559}N_{0,00752}S_{0,00247}$. Considerando que o *char* pode ser representado por carbono puro, utilizando a análise elementar do bagaço livre de cinzas e umidade, e obtendo a massa molecular da molécula de biomassa equivalente, é possível obter os coeficientes $v_{char} = 0,24189$ e $v_{vol} = 0,75811$ presentes na reação (R.15). Conhecendo estes coeficientes e utilizando o princípio de conservação de massa, é possível obter a molécula equivalente dos voláteis, dada por $C_{0,75811}H_{1,55263}O_{0,60559}N_{0,00752}S_{0,00247}$.

Para obtenção dos coeficientes de divisão, ξ_{CO} , ξ_{CO2} e ξ_{tar} , da reação de decomposição dos voláteis (R.16), foram utilizados os dados experimentais do processo de pirólise do bagaço de cana para as temperaturas do leito de 700 °C e de 850 °C, mostrados nas Tabs. 5.3 e 5.4. Para reduzir o número de espécies monitoradas, PINHO (2012) sugere que as frações mássicas de C_2H_6 , C_2H_4 e C_2H_2 sejam adicionadas à fração mássica de CH_4 . Adicionalmente, para contabilizar a água retida nas ligações químicas, a água pode ser considerada como um dos componentes do gás da pirólise

primária, cuja composição para as duas temperaturas consideradas é mostrada na Tab. 5.5.

Tabela 5.3 - Produtos da pirólise primária do bagaço de cana-de-açúcar (RODRIGUEZ *et al.*, 1987).

	Y_i [%] para T_{leito} de 700 °C	Y_i [%] para T_{leito} de 850 °C
Char	10,6	7,1
Gás	46,2	61,6
Alcatrão	15,7	5,7
Umidade	27,4	25,6

Tabela 5.4 - Composição do gás produzido na pirólise primária do bagaço de cana-de-açúcar de RODRIGUEZ *et al.* (1987).

	X_i [%] para T_{leito} de 700 °C	X_i [%] para T_{leito} de 850 °C
H ₂	19,3	22,6
CO	43,6	43,1
CH ₄	16,5	16,9
CO ₂	15,2	12,1
C ₂ H ₆	1,7	1,3
C ₂ H ₄	3,3	3,7
C ₂ H ₂	0,4	0,3

Para contabilizar os efeitos do craqueamento de alcatrão, PINHO (2012) seguiu a sugestão de BOROSON *et al.* (1989) para o processo de pirólise de madeira. Esta sugestão consiste na presença de 22% em fração mássica de alcatrão nos produtos do craqueamento do alcatrão. Desta forma, o procedimento adotado foi utilizar a composição da Tab. 5.5, excluindo a água e incluindo 22% de alcatrão, representado neste trabalho como C₆H₆. Todavia deve ser observado que o alcatrão é formado por inúmeras substâncias, cujas taxas de formação dependem de parâmetros como temperatura do leito e quantidade de vapor no reator, como mostrado por CAMARGO (2006). A composição dos gases produzidos no craqueamento do alcatrão, em base molar, pode ser vista na Tab. 5.6.

Tabela 5.5 - Composição do gás produzido na pirólise primária do bagaço utilizada no modelo de pirólise.

	X_i [%] para T_{leito} de 700 °C	X_i [%] para T_{leito} de 850 °C
H ₂	10,6	14,6
CO	24,0	27,8
CH ₄	14,4	17,0
CO ₂	8,4	7,8
H ₂ O	42,6	32,8

Tabela 5.6 - Composição do gás produzido no craqueamento do alcatrão.

	X_i [%] para T_{leito} de 700 °C	X_i [%] para T_{leito} de 850 °C
H ₂	17,1	20,2
CO	38,6	38,4
CH ₄	23,2	23,5
CO ₂	13,5	10,8
C ₆ H ₆	7,5	7,1

Utilizando a composição dos gases produzidos na pirólise primária (Tab. 5.5) e no craqueamento de alcatrão (Tab. 5.6), em conjunto com a decomposição primária dos produtos (Tab. 5.3), é obtida a composição dos voláteis do bagaço de cana utilizado no trabalho de RODRIGUEZ *et al.* (1987), mostrado na Tab. 5.7. As moléculas equivalentes dos voláteis da Tab. 5.7 são $C_{0,90205}H_{1,45273}O_{0,69776}$, para a temperatura do leito de 700 °C, e $C_{0,80973}H_{1,47009}O_{0,64275}$ para a temperatura do leito de 850 °C. Dessa forma, substituindo as moléculas equivalentes em (R.16), e utilizando a composição dos gases da Tab. 5.7, são obtidos os coeficientes de divisão para as duas temperaturas do leito, como mostrado na Tab. 5.8.

Tabela 5.7 - Composição dos voláteis utilizada para determinar os coeficientes da reação estequiométrica de pirólise.

	X_i [%] para T_{leito} de 700 °C	X_i [%] para T_{leito} de 850 °C
H ₂	18,2	21,6
CO	41,1	41,2
CH ₄	24,7	25,2
CO ₂	14,4	11,6
C ₆ H ₆	1,7	0,5

Tabela 5.8 - Coeficientes de divisão.

	T_{leito} de 700 °C	T_{leito} de 850 °C
ξ_{CO}	0,58871	0,64025
ξ_{CO_2}	0,41129	0,35975
ξ_{tar}	0,11165	0,03781

Substituindo os coeficientes da Tab. 5.8, e utilizando a molécula equivalente de voláteis para o bagaço de cana utilizado neste trabalho em (R.16), é calculada a composição dos voláteis produzidos pela pirólise da biomassa em questão, como pode ser visto na Tab. 5.9.

Tabela 5.9 - Composição dos voláteis calculada.

	X_i [%] para T_{leito} de 700 °C	X_i [%] para T_{leito} de 850 °C
N ₂	0,4	0,4
H ₂	33,3	28,4
CO	34,3	37,5
CH ₄	18,5	22,5
CO ₂	12,0	10,5
C ₆ H ₆	1,4	0,5
H ₂ S	0,2	0,2

5.3 Gaseificação

As reações de gaseificação consideradas neste trabalho são mostradas na Tab. 5.10. Nesta tabela, as três primeiras reações são heterogêneas e as duas últimas homogêneas. A modelagem das reações heterogêneas varia de modelos extremamente elaborados e difíceis de serem implementados ao modelo de fluido dinâmica computacional, e modelos menos complexos com implementação mais fácil. Esta complexidade está diretamente relacionada com a maneira na qual o comportamento das partículas de *char* será descrito ao longo do processo, os chamados modelos de partículas. SOUZA-SANTOS (2004) divide estes modelos em dois grupos, mostrados na Fig. 5.3 e detalhados a seguir:

- (a) Núcleo não exposto: conforme as reações heterogêneas vão ocorrendo, uma camada de material inerte é formada ao redor do núcleo das partículas de *char*. Como o gás se difunde através desse material as reações continuam ocorrendo, porém a partícula nunca está diretamente em contato com o meio.

- (b) Núcleo exposto: considera que, imediatamente após a formação do material inerte, o choque entre as partículas desintegra esta camada de material. Desta maneira, o núcleo está sempre em contato direto com o meio.

Tabela 5.10 - Reações de combustão modeladas.

Nome da Reação	Reação
Reação de Gaseificação com Vapor	$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$
Reação de Boudouard	$C + CO_2 \rightarrow 2CO$
Reação de Metanação	$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$
Reação de Deslocamento Gás-Água	$CO + H_2O \leftrightarrow H_2 + CO_2$
Reação de Reforma de Metano	$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$

Deve-se observar que, segundo os dois modelos de partícula o diâmetro do núcleo das partículas de *char* não se modificam. No entanto, alguns autores (e.g. GÓMEZ-BAREA e LECKNER, 2010) afirmam que as partículas de *char* sofrem uma redução de diâmetro devido às reações de gaseificação e oxidação, ou choques entre partículas. GÓMEZ-BAREA e LECKNER (2010) apresentam modificações destes modelos levando em conta diminuição das partículas de *char* à medida que a reação acontece. Devido ao elevado grau de agitação e de colisões entre as partículas em um leito fluidizado, o modelo de núcleo exposto parece estar mais próximo da situação real.

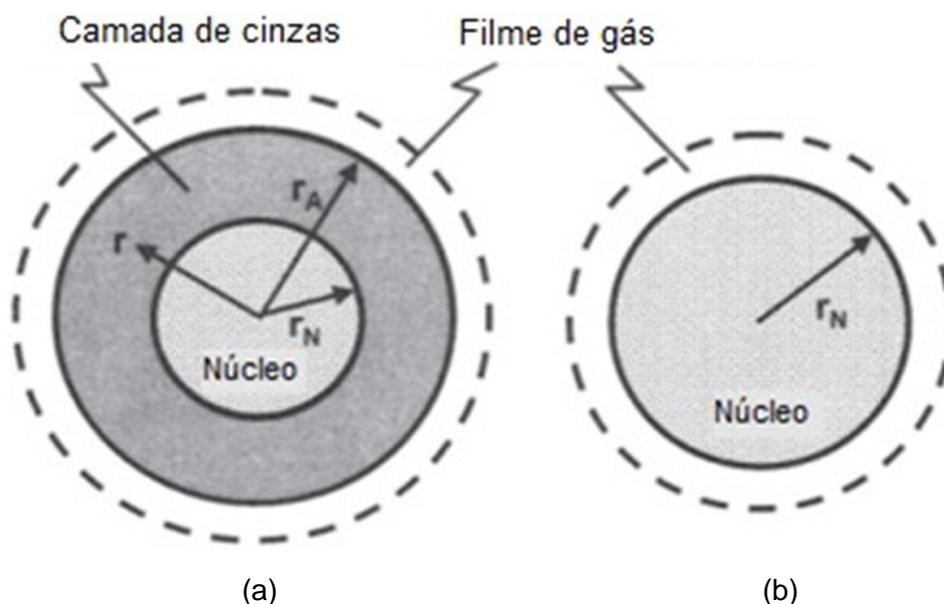


Figura 5.3 - Modelos de partículas. (a) Núcleo não exposto; (b) núcleo exposto. (Retirado de PINHO, 2012).

Segundo PINHO (2012), a utilização de uma abordagem Euler-Euler impõe uma certa limitação a escolha do modelo de partícula. Primeiramente, como a formação de cinzas não está sendo levada em conta, a formação desta camada ao redor das partículas de *char* não seria possível. Além disso, existe o fato das partículas não estarem sendo discretizadas individualmente, e sim a partir de campos das variáveis. Dessa maneira, a variação do tamanho das partículas seria de difícil implementação.

Uma das maneiras de se contabilizar a variação do diâmetro das partículas de *char* é a partir da consideração de fases sólidas com diâmetros de partículas diferentes, como sugerido em RANADE (2002). Entretanto, a introdução de novas fases sólidas aumenta o número de equações diferenciais parciais a serem resolvidas, elevando o custo computacional da simulação. Por outro lado, a hipótese de que o tamanho das partículas não se alteram já foi realizada por outros autores (e.g. YU *et al.*, 2007; LI *et al.* 2010; PINHO, 2012), mostrando ser uma opção viável.

Estabelecido o modelo de partícula, deve ser considerada a cinética química para descrever a reação. DI BLASI (2009) e BASU (2010) descrevem as reações de gaseificação heterogêneas a partir de modelos cinéticos de múltiplos passos. Contudo, a utilização de um modelo de cinética simples de passo único tem sido comum em trabalhos de fluidodinâmica computacional. PINHO (2012) ressalta que a inclusão de outros passos não dificulta a implementação do código utilizada, porém eleva o custo computacional da simulação. Dessa forma, neste trabalho são adotados modelos de cinética simples de passo único para descrever as reações de gaseificação heterogêneas, como mostrado na Tab. 5.11.

Tabela 5.11 - Taxas das reações de gaseificação heterogêneas.

Reação	Taxa de Reação	$A_i [s^{-1}]$
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$\tilde{r}_1 = -A_{pi} * n_{pi} * k_1 * [H_2O]$	3,42
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	$\tilde{r}_2 = -A_{pi} * n_{pi} * k_2 * [CO_2]$	3,42
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$\tilde{r}_3 = -A_{pi} * n_{pi} * k_3 * [H_2]$	$3,42 * 10^{-3}$

Os coeficientes A_{pi} e n_{pi} , são, respectivamente, a área de uma partícula e o número total de partículas no reator, e são calculados por

$$A_{pi} = \frac{\pi d_{pi}^2}{4} \quad (5.1a)$$

$$n_{pi} = \frac{2(1 - \varepsilon_g)}{\pi * d_{pi}^3} \quad (5.1b)$$

Deve-se ressaltar que estes coeficientes são necessários para transformar a taxa de reação de taxa superficial, normalmente encontrado na literatura, para taxa volumétrica, como deve ser utilizada no MFIX (PINHO, 2012). No cálculo das taxas de reação de combustão heterogênea estes coeficientes também são utilizados.

As reações homogêneas de gaseificação consideradas neste trabalho são as reações de deslocamento gás-água e de reforma de metano, de maneira que as reações de reforma de alcatrão são desprezadas. A reação de deslocamento gás-água é tratada por diversos autores (e.g. SOUZA-SANTOS, 2004; BASU, 2010, dentre outros) como a única reação reversível para as condições normalmente encontradas em processos de gaseificação.

GÓMEZ-BAREA e LECKNER (2010) ressaltam que, em reatores de leito fluidizado de pequena escala, esta reação não atinge o equilíbrio químico. Dessa forma, os autores sugerem que a melhor maneira de modelar esta reação é considerando que ela é cineticamente limitada, e aconselham o uso do modelo cinético proposto por BIBA *et al.*, (1978) (*apud* SOUZA-SANTOS, 1989). Este modelo já teve sua capacidade preditiva testada por vários trabalhos, e foi utilizado neste trabalho. A representação deste modelo é mostrada na Tab. 5.12.

Tabela 5.12 - Taxas das reações de gaseificação homogêneas.

Reação	Taxa de Reação	A_i [s ⁻¹]	\tilde{E}_{ai} [kJ/mol]
$CO + H_2O$ $\leftrightarrow H_2 + CO_2$	$\tilde{r}_4 = -k_4 * \left\{ [CO] * [H_2O] - \frac{[CO_2] * [H_2]}{k_{e4}} \right\}$ $k_{e4} = 0,0265 * \exp[3958/T_g]$	2,78*10 ⁶	12,554
$CH_4 + H_2O$ $\rightarrow CO + 3H_2$	$\tilde{r}_5 = -k_5 * [CH_4] * [H_2O]$	3*10 ⁸	125

Em relação a reação de reforma de metano existe uma certa divergência quanto a sua necessidade. GÓMEZ-BAREA e LECKNER (2010) afirmam que esta reação é tão lenta sob condições normalmente encontradas em gaseificadores de leito fluidizado borbulhante que elas parecem possuir uma importância bem menor do que as demais reações, quando não são utilizados catalisadores no leito. Muitos trabalhos, sobre gaseificação de madeira (OERVERMAN *et al.*, 2009; GERBER *et al.* 2010) e de carvão (YU *et al.*, 2007; LI *et al.*, 2010; CORNEJO e FARÍAS, 2011), desprezaram a

contribuição da reforma de metano, utilizando a mesma hipótese que GÓMEZ-BAREA e LECKNER (2010). Contudo, XIE *et al.* (2012) consideraram a reforma de metano para a gaseificação da madeira. Além disso, PINHO (2012) constatou que a reação de reforma de metano possui uma influência significativa sobre a predição da composição dos gases produzidos na gaseificação do bagaço de cana, recomendando seu uso.

No presente trabalho optou-se por seguir a sugestão de PINHO (2012), e a reação de reforma de metano é implementada utilizando o modelo cinético proposto por JONES e LINDSTEDT (1988), mostrado na Tab. 5.12. Deve-se notar ainda que na presente dissertação o vapor é um dos agentes gaseificadores, ao contrário dos demais trabalhos encontrados na literatura. Logo, é esperado que a intensidade da reação de reforma de metano seja maior do que nos casos em que o agente gaseificante é o ar, uma vez que a taxa da reação depende da concentração de água no reator. Dessa forma, nas situações estudadas aqui a reação de reforma de metano apresenta um papel ainda mais importante do que nos casos estudados por PINHO (2012), como mostrado no Cap. 8.

5.4 Combustão

A etapa da combustão é a responsável por fornecer a energia necessária para as demais etapas ocorrerem, no caso de gaseificação autotérmica. Além disso, a elevada intensidade das reações de oxidação também influencia diretamente na composição dos gases produzidos, como mostrado no Cap. 8. Dessa forma, a modelagem correta das reações de oxidação pode impactar não apenas na cinética das demais reações, via temperatura do leito, mas também diretamente na composição dos gases produzidos.

Tabela 5.13 - Reações de combustão modeladas.

Nome da Reação	Reação
Oxidação de <i>char</i>	$C + aO_2 \rightarrow (2 - 2a)CO + (2a - 1)CO_2$
Oxidação de Monóxido de Carbono	$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$
Oxidação de Hidrogênio	$H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$
Oxidação de Metano	$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$
Oxidação Parcial de Benzeno	$C_6H_6 + 3O_2 \rightarrow 6CO + 3H_2$

Na Tab. 5.13 são mostradas as reações de oxidação consideradas neste trabalho. A primeira reação mostrada nesta tabela é a única reação de oxidação

heterogênea considerada, chamada de reação de oxidação de *char*. Esta reação é descrita utilizando um coeficiente estequiométrico, a , que varia em função da temperatura, como em SOUZA-SANTOS (1987), PETERSEN e WERTHER (2005) e PINHO (2012). A modelagem do coeficiente a é realizada da mesma maneira que em PINHO (2012), ou seja, seguindo a equação obtida em ARTHUR (1951),

$$a = \frac{2 + A * \exp\left[-\frac{E}{RT}\right]}{2\left(A * \exp\left[-\frac{E}{RT}\right] + 1\right)} \quad (5.2)$$

onde os parâmetros A , E e R da equação são dados, respectivamente, por $10^{3,4}$, 12400 cal/mol e 1,987 cal/mol K.

Assim como para as reações de gaseificação heterogêneas, um modelo de núcleo exposto, sem variação do tamanho das partículas de *char*, é utilizado para representar a reação de oxidação de *char*. No que concerne a taxa de reação da oxidação de *char*, foi utilizada uma expressão que contabiliza efeitos cinéticos e difusivos, como realizado em GERBER *et al.* (2010) e PINHO (2012). Logo, a taxa de consumo de carbono é escrita como:

$$\tilde{r}_6 = -A_{pi} * n_{pi} * \frac{(k_d * k_6)}{(k_d + k_6)} * [O_2] \quad (5.3)$$

sendo que k_6 é o coeficiente que contabiliza os efeitos cinéticos e é calculado seguindo a lei de Arrhenius, Eq. (4.47). Os coeficientes da Eq. (5.3) são dados por $A_6 = 1,04 * 10^3 \text{ s}^{-1}$ e $\tilde{E}_{ai} = 8,31447 \text{ J mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$. Os efeitos de transporte através da película de gás envolvendo a partícula são contabilizados pela constante k_d , calculada por:

$$k_d = \frac{Sh_{pi} D_{O_2}}{d_{pi}} \quad (5.4)$$

onde D_{O_2} é a difusividade do oxigênio e Sh_{pi} é o número de Sherwood, calculados, respectivamente, segundo as sugestões de DESAI e WEN (1978) e GUNN (1978), ou seja:

$$D_{O_2} = 4,26 * \left(\frac{T_g}{1800}\right)^{1,75} * \left(\frac{1}{p_g}\right) \quad (5.5a)$$

$$Sh_{pi} = (7 - 10\varepsilon_g + 5\varepsilon_g^2) * \left(1 + 0,7Re_p^{0,2}Sc^{\frac{1}{3}}\right) + (1,33 - 2,4\varepsilon_g + 1,2\varepsilon_g^2)Re_{pi}^{0,7}Sc^{\frac{1}{3}} \quad (5.5b)$$

O número de Schmidt e o número de Reynolds para o escoamento em torno de uma partícula da fase i são dados, respectivamente, por:

$$Sc = \frac{\mu_g}{\rho_g * D_{O_2}} \quad (5.6a)$$

$$Re_{pi} = \frac{V_{rpi}d_{pi}\rho_g}{\mu_g} \quad (5.6b)$$

Os parâmetros utilizados na modelagem das reações de oxidação homogêneas são apresentados na Tab. 5.14. As taxas de oxidação de CO e de CH₄ foram retiradas do trabalho de DRYER (1972), enquanto que a taxa de oxidação de H₂ foi retirada do trabalho de MITANI e WILLIAMS (1980) e a taxa de oxidação parcial de benzeno do trabalho de PETERSEN e WERTHER (2005).

Tabela 5.14 - Taxas das reações de gaseificação homogêneas.

Reação	Taxa de Reação	A_i [s ⁻¹]	\tilde{E}_{ai} [kJ/mol]
$CO + 0,5O_2 \rightarrow CO_2$	$\tilde{r}_7 = -k_7[CO][O_2]^{0,25}[H_2O]^{0,5}$	$3,98*10^{14}$	167,269
$H_2 + 0,5O_2 \rightarrow H_2O$	$\tilde{r}_8 = -k_8[H_2][O_2]$	$2,196*10^{12}$	109,138
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	$\tilde{r}_9 = -k_9[CH_4]^{0,7}[O_2]^{0,8}$	$1,58*10^{13}$	202,387
$C_6H_6 + 3O_2 \rightarrow 6CO + 3H_2$	$\tilde{r}_{10} = -k_{10}[C_6H_6][O_2]$	$1,58*10^{12}$	202,641

Na literatura são encontradas muitas referências relatando a existência de um efeito catalítico das cinzas da biomassa sobre o processo de gaseificação em reatores de leito fluidizado (e.g. DI BLASI, 2009; LI, 2013). A modelagem das reações de gaseificação não consideraram os efeitos catalíticos das cinzas do bagaço de cana, por não terem sido encontrados na literatura nenhum modelo cinético que leva em conta estes efeitos catalíticos e que pudesse ser implementado no modelo utilizado. GERBER *et al.* (2010) também reconhecem a existência desses efeitos catalíticos, porém relatam que muito pouco é conhecido sobre a influência quantitativa destes efeitos sobre os parâmetros cinéticos das reações. Desta forma, os autores relatam que

não foi possível levar em conta os efeitos catalíticos das cinzas em sua modelagem. Os resultados obtidos pelos autores, porém, se aproximaram dos resultados experimentais.

6 DESCRIÇÃO DO PROGRAMA MFIX

O programa MFIX (*Multiphase Flow with Interphase eXchanges*) é um código aberto que começou a ser desenvolvido em 1991 no Laboratório de Tecnologia de Energia (NETL – *National Energy Technology Laboratory*) do Departamento de Energia dos Estados Unidos, com o objetivo de desenvolver uma ferramenta capaz de modelar reatores de leito fluidizado, tais como gaseificadores (SYAMLAL *et al.*, 2008). A modelagem termofluidodinâmica utilizada permite a descrição dos fenômenos de transporte e de reações químicas em escoamentos multifásicos densos ou dispersos.

O código é composto por diversas sub-rotinas escritas em Fortran e foi desenvolvido primeiramente para ser executado com um sistema operacional Linux, embora atualmente também seja possível utilizar o código em Windows. A modelagem termofluidodinâmica utilizadas pelo código é descrita no Cap. 4. As características numéricas são brevemente comentadas neste capítulo e no Anexo 1. Deve-se observar que o código permite a utilização de dois sistemas de coordenadas, retangular e cilíndrico, bidimensional e tridimensional, com malhas regulares ou irregulares.

É possível notar um aumento do número de trabalhos desenvolvidos com o auxílio do MFIX nos últimos anos. Esta ocorrência se deve a alguns fatores fundamentais, dentre os quais o mais relevante parece ser o fato dele ser um código aberto. SYAMLAL *et al.* (2008) aponta duas vantagens dos códigos abertos frente aos programas de simulação fluidodinâmica computacional fechados. A primeira delas reside justamente no fato dos códigos abertos serem gratuitos, permitindo que qualquer pesquisador possa reproduzir resultados da literatura, contribuindo para um compartilhamento maior do conhecimento. A segunda vantagem é o fato do usuário ter condições de acessar e modificar qualquer sub-rotina do código. Logo, é possível identificar erros no código e até mesmo testar diferentes sub-modelos que ainda não foram implementados.

6.1 Utilização do código

O código MFIX é composto por várias sub-rotinas escritas em Fortran, onde estão implementados todos os modelos disponibilizados. Dados como condições de contorno, condições iniciais, propriedades das fases, número de fases sólidas, número e propriedades das espécies químicas gasosas, definição da malha, dentre outros, são definidos em um arquivo de texto, chamado de *mfix.dat*. Para especificar seu problema

o usuário deve primeiramente criar uma pasta na área de trabalho de seu computador. Em seguida, deve ser criado um arquivo *mfix.dat* dentro desta pasta, obedecendo a nomenclatura do código. O usuário pode acessar qualquer uma das sub-rotinas para fazer alterações. No entanto, ao invés de alterar os arquivos diretamente na pasta do MFIX é recomendável copiar a sub-rotina que será alterada para dentro da pasta criada.

Para realizar a compilação de todas as rotinas do código deve ser utilizado o comando *make* do Linux. Desta forma, o arquivo *makefile*, disponível em uma das pastas do MFIX, gera uma série de perguntas ao usuário, para definir a arquitetura computacional utilizada, compila o código e cria um arquivo executável. Deve-se notar que o código automaticamente identificará e realizará a compilação das sub-rotinas existentes na pasta criada, em detrimento das sub-rotinas padrão do programa, presentes na pasta do MFIX.

6.1.1 Arquivos de entrada

Por não possuir uma interface gráfica, todas as informações referentes ao problema devem ser fornecidas através de arquivos de entrada. Dentre os arquivos de entrada utilizados neste trabalho estão o *mfix.dat*, e algumas sub-rotinas do código (*calc_k_s.f* e *rrates.f*). O arquivo *mfix.dat* pode ser dividido em seções, para facilitar seu preenchimento. A função de cada uma dessas seções pode ser visualizada na Tab. 6.1.

Uma sub-rotina fundamental na modelagem deste trabalho é o arquivo *rates.f*, onde é realizada a implementação dos modelos de cinética química e calculados os termos fontes inseridos nas equações de conservação de massa e de energia. Deve ser observado que o código MFIX não possui nenhum modelo de cinética química implementado. Logo, cabe ao usuário definir a modelagem cinética na sub-rotina *rates.f*. Este arquivo também é dividido em seções, cujas funções são mostradas na Tab. 6.2.

Na sub-rotina *calc_k_s.f* é introduzida a condutividade térmica de uma única partícula da fase sólida. De maneira que o cálculo da condutividade térmica das fases sólidas, via Eq. (4.42), é realizado nesta sub-rotina.

Informações sobre outras sub-rotinas podem ser encontradas em SYAMLAL (1994), onde é apresentada uma breve descrição das principais sub-rotinas do código.

Tabela 6.1 – Seções do arquivo *mfix.dat*.

Nome da seção	Parâmetros definidos na seção
<i>RUN CONTROL</i>	<p>Diversos parâmetros sobre a simulação a ser realizada são definidos nesta seção, dentre os quais se destacam:</p> <ul style="list-style-type: none"> i. Sistema de unidades ii. Tempo inicial e final iii. Passo de tempo iv. Equações a serem resolvidas v. Utilização de sub-rotinas vi. Tipo de corrida (nova ou de recuperação)
<i>NUMERICAL PARAMETERS</i>	<p>Nesta seção são especificados os parâmetros e os métodos numéricos para a solução das equações, tais como:</p> <ul style="list-style-type: none"> i. Fatores de sub-relaxação ii. Número máximo de iterações iii. Método de discretização dos termos convectivos das equações governantes
<i>PHYSICAL PARAMETERS</i>	<p>São especificados parâmetros físicos do problema, dentre os quais se encontram:</p> <ul style="list-style-type: none"> i. Coeficiente de restituição para colisões entre partículas ii. Coeficiente de atrito entre as fases sólidas
<i>GEOMETRY</i>	<p>São inseridas as informações referentes à geometria do problema e à malha utilizada.</p>
<i>GAS</i>	<p>São especificados o número e o nome das espécies gasosas consideradas.</p>
<i>PARTICLE</i>	<p>São especificados o número de fases sólidas modeladas, o número e o nome das espécies químicas de cada fase sólida. O diâmetro e a massa específica das fases sólidas e a fração de vazio de empacotamento do leito também são definidas.</p>
<i>INITIAL CONDITIONS</i>	<p>São especificadas as condições iniciais para todas as equações consideradas no modelo.</p>
<i>BOUNDARY CONDITIONS</i>	<p>São definidas a localização e o tipo de todas as condições de contorno do problema.</p>
<i>OUTPUT CONTROL</i>	<p>São definidas os parâmetros referentes aos arquivos de saída do programa.</p>

Tabela 6.2 – Descrição das seções do arquivo *rrates.f*.

Seção	Descrição das seções
1	São calculadas as taxas de todas as reações considerados no modelo
2	São calculadas as taxas de formação e de consumo de todas as espécies gasosas e sólidas.
3	São calculadas as taxas de transferência entre as fases modeladas.
4	São calculadas as taxas de energia produzidas por cada uma das reações consideradas.

6.1.2 Arquivos de saída

Durante a execução do código são gerados dois arquivos de texto, que possuem informações sobre a execução e a configuração da rodada (*.LOG* e *.OUT*), e doze arquivos binários, onde são armazenadas as informações sobre as variáveis do problema (*.SP1*, *.SP2*, *.SP3*, *.SP4*, *.SP5*, *.SP6*, *.SP7*, *.SP8*, *.SP9*, *.SPA*, *.SPB* e *.RES*).

No arquivo *.LOG* é realizado o armazenamento de todas as informações sobre o andamento da simulação. Nele é possível verificar informações referentes a convergência do problema, assim como mensagens de erros ocorridos durante a execução do código.

O arquivo *.OUT* possui todas as informações a respeito do problema resolvido, incluindo as informações padrão do código que o usuário não inseriu no arquivo *mfix.dat*. Detalhes sobre a geometria do domínio e sobre os tipos de condições de contorno também estão disponíveis neste arquivo.

O arquivo *.RES* é um arquivo binário de precisão dupla onde são salvas todas as informações necessárias para reiniciar as simulações. O intervalo de atualização deste arquivo é definido pelo usuário no *mfix.dat*.

Os demais arquivos de saída (*.SPX*) são arquivos binários de precisão simples que armazenam dados referentes aos campos das variáveis monitoradas pelo MFIX. As variáveis armazenadas por cada um desses arquivos são mostradas na Tab. 6.3. Informações adicionais sobre os arquivos de saída podem ser obtidas em SYAMLAL *et al.* (1994).

Tabela 6.3 – Grandezas armazenadas nos arquivos .SPX (retirado de PINHO, 2012).

.SPX	Variáveis armazenadas
.SP1	Fração de vazio
.SP2	Pressão do gás, pressão da fase sólida
.SP3	Velocidade da fase gás
.SP4	Velocidade das fases sólidas
.SP5	Massa específica a granel da fase sólida ($\rho_{sm}\epsilon_{sm}$)
.SP6	Temperatura das fases gás e sólidas
.SP7	Frações mássicas para as fases gás e sólidas
.SP8	Temperatura granular
.SP9	Quantidades escalares definidas pelo usuário
.SPA	Taxas de reação
.SPB	Grandezas de modelos de turbulência

6.2 Características Numéricas do MFIX

As equações governantes, apresentadas no Cap. 4, são discretizadas utilizando o método de volumes finitos. O primeiro passo para a utilização do método de volumes finitos consiste na divisão do domínio de interesse em pequenos volumes de controle. Em seguida as equações de conservação são integradas sobre estes volumes de controle, obtendo-se equações discretizadas para as equações governantes. A grande vantagem do método de volumes finitos reside no fato da solução obtida satisfazer os princípios de conservação de massa, quantidade de movimento e energia para qualquer grupo de volumes de controle sobre todo o domínio (PATANKAR, 1980).

A principal dificuldade na resolução das equações governantes de qualquer problema envolvendo escoamento de fluidos reside na não-linearidade da equação de conservação de quantidade de movimento. Dessa forma, é necessário obter alguma forma de realizar uma linearização das equações discretizadas de quantidade de movimento. Uma das formas mais utilizadas é a combinação das equações de continuidade e de quantidade de movimento para a obtenção de uma equação para a pressão do escoamento (RANADE, 2002). Dentre os métodos desenvolvidos utilizando este princípio, chamados de métodos de acoplamento velocidade-pressão, o mais comumente empregado é o método SIMPLE, apresentado em PATANKAR (1980). O método SIMPLE utiliza um procedimento iterativo para calcular o campo de velocidades, partindo de uma estimativa inicial para o campo de pressões. Este procedimento é realizado através de uma correção para os campos de velocidade e de pressão,

calculadas a cada iteração, até que as equações de conservação de quantidade de movimento e de continuidade sejam satisfeitas.

Entretanto, alguns autores (e.g. SYAMLAL, 1998; RANADE, 2002; DARTEVELLE, 2005; van der HOEF *et al.* 2006; JAKOBSEN, 2008) afirmam que, devido às grandes diferenças entre o escoamento monofásico, para o qual o método SIMPLE foi desenvolvido, e o escoamento multifásico, são necessárias algumas modificações no método SIMPLE. Dentre estas modificações estão a obtenção de uma equação de correção para a fração volumétrica da fase sólida e o desacoplamento dos termos de interação entre fases das equações de quantidade de movimento e de energia. Para o desacoplamento da interação entre as fases, SYAMLAL (1998) recomenda a utilização do Algoritmo de Eliminação Parcial (PEA). No Anexo 1 é realizada uma explicação da discretização das equações governantes no código MFIX. Para detalhes adicionais sobre esse tópico recomenda-se a leitura de SYAMLAL (1998) e DARTEVELLE (2005).

A utilização do método SIMPLE para a fase sólida de um escoamento multifásico ocasiona dificuldades de convergência do processo iterativo (SYAMLAL, 1998). Uma das alternativas para contornar este problema e acelerar a taxa de convergência para o escoamento multifásico é a utilização de uma equação de correção de fração volumétrica da fase sólida. Para a fase fluída, a equação de correção de pressão é utilizada. Desta forma, a compressibilidade do fluído é calculada diretamente, motivo pelo qual a convergência do algoritmo melhora consideravelmente (van der HOEF *et al.*, 2006).

O algoritmo utilizado para resolver o problema é descrito por SYAMLAL (1998) como mostrado a seguir:

1. Cálculo das propriedades físicas, coeficientes de transferência, e taxas de reações.
2. Cálculo dos campos de velocidade estimados (u_m^* , v_m^* e w_m^*) baseados no campo de pressão atual (P_g^*).
3. Cálculo da correção de pressão da fase fluída (P_g').
4. Atualização do campo de pressão da fase fluída, utilizando um fator de sob relaxação, ω_{pg} , ou seja, $P_g = P_g^* + \omega_{pg}P_g'$.
5. Cálculo das correções dos campos de velocidade da fase fluída, a partir da correção de pressão calculada no passo 3, e atualização dos campos de velocidade, $u_m = u_m^* + \omega_{ug}u_m'$.
6. Cálculo dos gradientes de pressão ($\partial P_m / \partial \varepsilon_m$) para uso na equação de correção da fração volumétrica da fase sólida.

7. Cálculo da correção de fração volumétrica da fase sólida, ε'_m .
8. Atualização das frações volumétricas da fase sólida, $\varepsilon_m = \varepsilon_m^* + \omega_{ps}\varepsilon'_m$.
9. Cálculo das correções de velocidade das fases sólidas e atualização dos campos de velocidade das fases sólidas, $u_s = u_s^* + \omega_{us}u'_s$.
10. Cálculo da fração de vazio: $\varepsilon_g = 1 - \sum_{m \neq 0} \varepsilon_m$.
11. Cálculo da pressão da fase sólida a partir da equação de estado $P_m = P_m(\varepsilon_m)$.
12. Cálculo dos campos de temperatura e de fração mássica das espécies químicas.
13. Análise da convergência do procedimento, através da avaliação dos resíduos calculados no passos 2, 3, 5 e 9. Se o critério de convergência estabelecido não for satisfeito, as iterações continuam a partir do passo 2. Por outro lado, se este critério for obedecido, o próximo passo de tempo é calculado repetindo o procedimento a partir do passo 1.

Os coeficientes de sub-relaxação, utilizados durante a atualização das grandezas, são necessários como forma de tentar evitar divergências durante o procedimento iterativo (PATANKAR, 1980). Entretanto, o fator de sub-relaxação de atualização da fração volumétrica da fase sólida (passo 8), é utilizado apenas em regiões em que existe um elevado grau de empacotamento dos sólidos, ou seja:

$$\omega_{ps} = \begin{cases} 1, & \text{se } \varepsilon_g < \varepsilon_{ct} \\ 0 < \omega_{ps} < 1, & \text{se } \varepsilon_g > \varepsilon_{ct} \end{cases} \quad (6.1)$$

onde ε_{ct} é a fração de vazio de empacotamento. Para as demais grandezas, isto é, temperatura e frações mássicas dos gases, também existe a necessidade de utilização de fatores de sub-relaxação.

É importante observar que quanto menor o fator de sub-relaxação mais estável é a convergência do problema, porém o tempo necessário para a convergência aumenta. Desta forma, existe um conflito entre estabilidade de convergência e tempo de computação que deve ser levada em conta. Infelizmente, não existem maneiras de se estimar um valor ideal para os coeficientes de sub-relaxação para todas as situações. Por conseguinte, este valor deve ser encontrado para cada problema.

As expressões para as correções de pressão e de fração volumétrica da fase sólida são derivadas detalhadamente por SYAMLAL (1998). No Anexo 1 é realizado um breve resumo sobre a derivação destas equações. Para mais detalhes sobre a

discretização das equações governantes de escoamentos multifásicos recomenda-se os trabalhos de SYAMLAL (1998), DARTVELLE (2005) e JAKOBSEN (2008).

6.3 Eficiência de Paralelização e Escalabilidade do Código

Antes de comentar sobre as capacidades de paralelização do código, são necessários alguns comentários sobre computação paralela. A computação paralela consiste na execução simultânea de várias tarefas computacionais em um sistema computacional (KNIGHT, 1996). O uso da paralelização na resolução de problemas de fluidodinâmica computacional é um dos grandes responsáveis pela redução do tempo computacional da simulação de problemas complexos de engenharia (DELIS e MATHIOUDAKIS, 2009). Para que um código possa ser executado usando computação paralela é necessário que a arquitetura de *hardware* da máquina onde o código será executado permita o paralelismo e que o código use diretivas MPI (*Message Package Interface*) ou OpenMP, as quais serão responsáveis pela divisão das tarefas computacionais.

TANENBAUM (2000) classifica quatro diferentes tipos de arquiteturas de *hardware*:

- i) SISD (*Single Instruction stream operating on a Single Data stream*): é um computador sequencial padrão.
- ii) SIMD (*Single Instruction stream operating on Multiple Data stream*): quando um conjunto de processadores executa a mesma instrução em diferentes conjuntos de dados.
- iii) MIMD (*Multiple Instruction streams operating on Multiple Data streams*): é quando um conjunto de diferentes processadores pode executar um ou vários programas com um ou diferentes conjuntos de dados.
- iv) MISD (*Multiple Instruction streams operating on a Single Data*): é quando muitas unidades funcionais executam operações diferentes sobre os mesmos dados.

Segundo GUERRERO (2000), a arquitetura MIMD é a mais versátil e popular, dentre as arquiteturas atuais e pode ser subdividida em três grupos, de acordo com o sistema de distribuição de memória utilizado. O primeiro grupo é formado pelos computadores que utilizam um sistema de memória compartilhada. Neste grupo, os processadores ou multiprocessadores compartilham uma memória global. A representação de uma máquina de memória compartilhada é mostrada na Fig. 6.1.

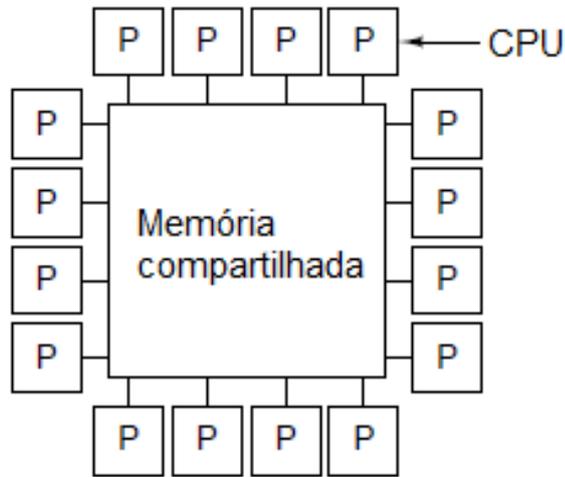


Figura 6.1 - Máquina com arquitetura de memória compartilhada (adaptado de TANENBAUM, 2000).

O segundo grupo é formado por máquinas que utilizam um sistema de memória distribuída. Neste grupo, os processadores possuem seus próprios espaços de memória individuais. Desta maneira, um processador só pode acessar a memória de outro processador utilizando uma rede. A grande vantagem dos sistemas de memória distribuída é que, para um mesmo número de processadores que um sistema de memória compartilhada, o custo computacional é significativamente menor. A representação de uma máquina utilizando a arquitetura de memória distribuída é mostrada na Fig. 6.2.

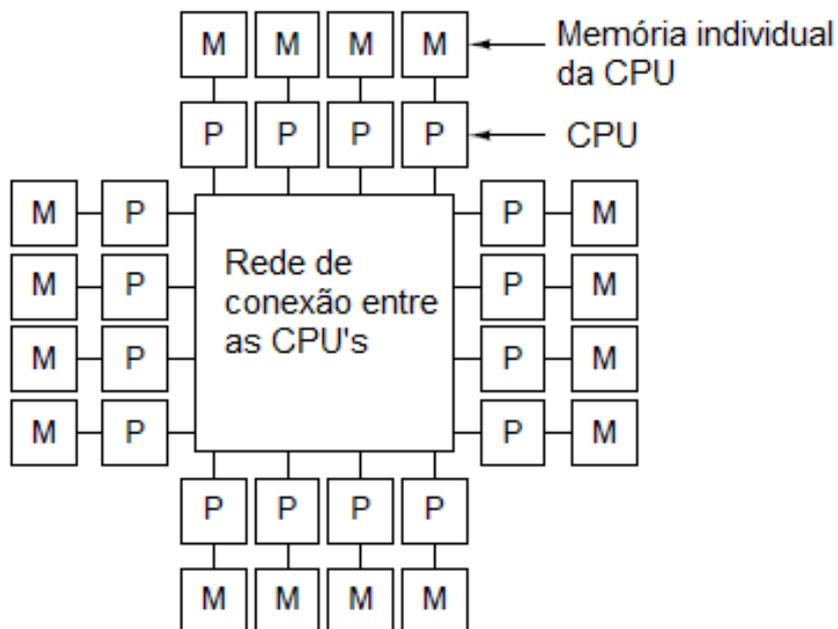


Figura 6.2 - Máquina com arquitetura de memória distribuída (adaptado de TANNENBAUM, 2000).

O último grupo, conhecido como NUMA (*Non-Uniform Memory Access*), possui uma arquitetura híbrida, utilizando algumas características dos outros grupos. Neste último caso todos os processadores possuem seus próprios espaços de memória, porém eles podem acessar dados armazenados em qualquer local do sistema.

Além das diferentes arquiteturas de *hardware*, IGNÁCIO e FILHO (2002) apontam a necessidade de uma camada de *software* capaz de distribuir os processos do programa para serem executados em diferentes locais simultaneamente. Os autores também afirmam que estes *softwares* são bibliotecas especializadas no tratamento da comunicação entre processos e sincronização de processos concorrentes. Estas bibliotecas também são classificadas de acordo com a maneira que o *software* paraleliza as tarefas, ou seja, com arquitetura de memória distribuída ou compartilhada (DONGARRA *et al.*, 2003). Dentre os *softwares* que possuem o princípio de memória compartilhada destaca-se o OpenMP. Dentre os *softwares* que utilizam memória distribuída, destacam-se aqueles baseados no princípio de trocas de mensagens, como o MPI (*Message Passing Interface*) e o PVM (*Parallel Virtual Machine*).

O OpenMP é um conjunto de diretivas, rotinas de biblioteca e variáveis de ambiente para programação em paralelo em máquinas de memória compartilhada (JIN *et al.*, 2011). As diretivas do OpenMP permitem que o usuário especifique em que local do computador o paralelismo pode ocorrer, deixando um pequeno nível de implementação para o compilador (CHORLEY e WALKER, 2010).

A biblioteca MPI é um padrão de interface para a troca de mensagens em máquinas paralelas com memória distribuída. No padrão MPI, uma aplicação é constituída por um ou mais processos que se comunicam, acionando-se funções para o envio e o recebimento de mensagens entre os processos (IGNÁCIO e FILHO, 2002). Segundo JIN *et al.* (2011) as principais vantagens da biblioteca MPI são suas elevadas performance e portabilidade. A biblioteca PVM possui os mesmos princípios que a MPI, porém IGNÁCIO e FILHO (2002) afirmam que a biblioteca MPI possui mais recursos do que a PVM e, por esta razão, é a mais utilizada.

Para quantificar as vantagens da paralelização do código são utilizados os parâmetros chamados de *speedup* (S_p) e eficiência de paralelização (η_p). O *speedup*, definido pela Eq. (6.2), é a razão entre o tempo necessário para executar um programa com processamento serial (t_1) e o tempo necessário com processamento paralelo (t_p). A eficiência da paralelização, definida pela Eq. (6.3), é a razão entre o *speedup* e o número de processos nos quais o programa foi dividido (p).

$$S_p \triangleq \frac{t_1}{t_p} \quad (6.2)$$

$$\eta_p \triangleq \frac{S_p}{p} \quad (6.3)$$

Outro termo normalmente empregado para avaliar a capacidade de paralelização de um código é a escalabilidade. A escalabilidade de um código é usada para descrever a capacidade de um algoritmo de manter valores de eficiência próximos de um a medida que o número de processos aumenta (GUERRERO, 2000). É necessário observar que todos os códigos possuem ao menos uma parte que não pode ser paralelizado. Logo, mesmo que um número infinito de processadores sejam utilizados, ainda existirá uma parcela do tempo computacional gasto que não irá sofrer influência do número de processos divididos. Contudo, se o tamanho do problema aumentar a parte serial cresce menos que a parte paralelizável do código, elevando os *speedups* possíveis (GUERRERO, 2000).

Todavia, DONGARRA *et al.* (2003) aponta que existe um problema ainda mais grave do que o grau de paralelismo do código. Este problema consiste na transferência de dados entre os diferentes processos executados simultaneamente. É necessário observar que, por exemplo, em uma simulação fluidodinâmica, a próxima iteração só irá iniciar depois que todos os processos da iteração anterior se encerrarem e enviarem as informações desta iteração para os demais processos. Portanto, dependendo do tamanho do problema a ser resolvido, o tempo de troca de dados entre os processadores pode prejudicar a escalabilidade do código.

O código MFIX possui diretivas OpenMP e MPI, que possibilitam o uso de processamento paralelo na execução do código. PANNALA *et al.* (2003) observaram o *speedup* do código MFIX utilizando estas duas diretivas. Os autores utilizaram um problema 3D com mais de um milhão de elementos na malha como *benchmark*. Os resultados obtidos mostraram que a paralelização realizada com o sistema de memória distribuída, com diretivas MPI, obteve uma escalabilidade superior ao sistema de memória compartilhada, com diretivas OpenMP. No entanto, existem diferentes tipos de implementação de MPI, dependendo da biblioteca de paralelização utilizada. As duas principais são a MPICH2 e a OpenMPI. Os autores não especificaram qual das duas bibliotecas foram utilizadas.

6.4 Validação do Código MFIX

A validação da utilização do código é feita reproduzindo o trabalho de GERBER *et al.* (2010). Estes autores realizaram um estudo sobre o processo de gaseificação da madeira em um reator de leito fluidizado borbulhante, utilizando a abordagem Euler-Euler. A modelagem dos autores também foi implementada no código MFIX. Logo, a modelagem matemática do problema é basicamente a mesma apresentada no Cap. 4, enquanto que a discretização das equações governantes seguem as considerações apresentadas na Seç. 6.2. No entanto, a modelagem do processo de pirólise utilizada no trabalho de GERBER *et al.* (2010) considerou um modelo cinético.

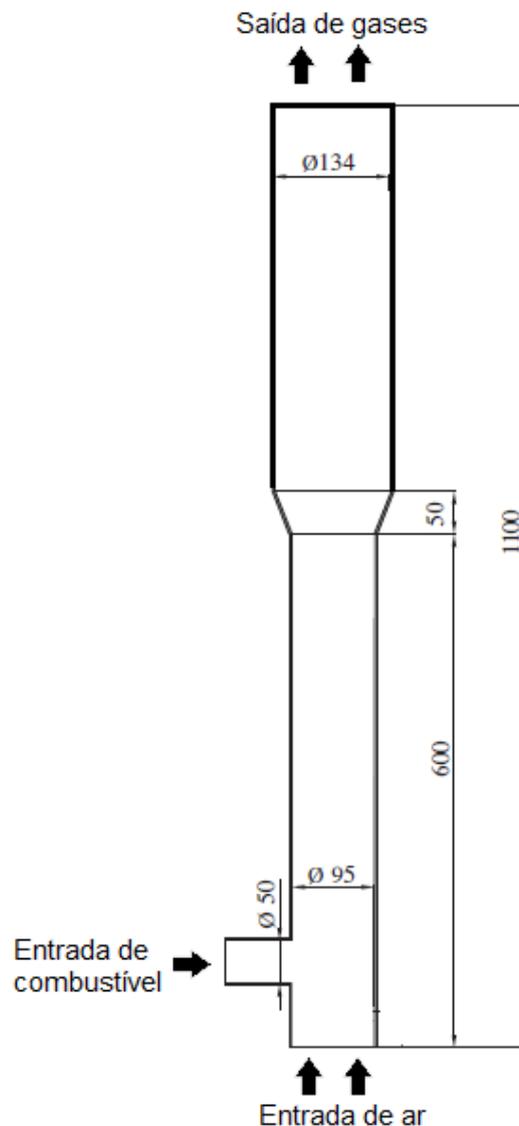


Figura 6.3 - Representação do domínio simulado por GERBER *et al.* (2010).

O gaseificador estudado em GERBER *et al.* (2010) é um reator de escala laboratorial instalado no Instituto de Engenharia de Energia localizado no Instituto de Engenharia de Berlim. A região do leito possui uma altura de 600,0 mm e um diâmetro interno de 95,0 mm, enquanto que a região do *freeboard* possui 450,0 mm de altura e um diâmetro interno igual a 134,0 mm. Uma região cônica de 50,0 mm conecta a região do leito com a do *freeboard*. O reator é envolvido por resistências elétricas com potência de 3,6 kW que são capazes de aquecer o gaseificador. Após a entrada de ar existe uma placa distribuidora, que ajuda a distribuir a vazão de ar igualmente ao longo da seção transversal de entrada do gaseificador.

A simulação realizada também utilizou o sistema de coordenadas retangulares 2D para representar o gaseificador. No domínio simulado o agente gaseificador (ar) entra pela região inferior do gaseificador, enquanto que a madeira é inserida por uma entrada de 50,0 mm de diâmetro. Os gases produzidos deixam o reator pelo topo do gaseificador, como ilustrado na Fig. 6.3.

Uma diferença em relação ao trabalho de GERBER *et al.* (2010) com outros trabalhos da literatura é o fato do leito de partículas ser formado apenas por partículas de *char*, sem a presença de nenhum material inerte ou catalisador. Os autores consideraram três fases sólidas, a madeira e dois tipos de *char*, com diâmetros diferentes. Esta modelagem acaba acarretando em um esforço computacional maior, uma vez que todas as fases sólidas envolvidas sofrem reações químicas (GERBER *et al.*, 2010).

Em relação à modelagem matemática apresentada no Cap. 4, o trabalho original de GERBER *et al.* (2010) foi modelado resolvendo a equação de conservação de energia granular e usando um modelo aditivo para contabilizar os efeitos friccionais, colisionais e cinéticos sobre o tensor de tensões da fase sólida. Adicionalmente, o modelo de Princeton foi utilizado para calcular a contribuição das tensões friccionais e a correlação de arrasto utilizada foi a correlação padrão do programa MFIX, ou seja, a correlação de Syamlal e O'Brien. Deve ser observado que os autores não informaram as condições de contorno referentes a equação diferencial parcial de energia granular, dificultando a reprodução exata do trabalho.

Tendo em vista a ausência de informações sobre a condição de contorno para a energia granular, PINHO *et al.* (2012) resolveram o mesmo problema que GERBER *et al.* (2010) utilizando a equação algébrica da energia granular. O modelo de Princeton modificado usado por GERBER *et al.* (2010) só pode ser implementado no MFIX se a equação diferencial parcial de energia granular for resolvida. Então, no trabalho de PINHO *et al.* (2012) existiu a necessidade de se utilizar um outro modelo para contabilizar os efeitos friccionais e colisionais no reator. Os resultados obtidos por

PINHO *et al.* (2012) apresentaram concordância com aqueles obtidos no trabalho GERBER *et al.* (2010), indicando a validade da utilização da equação algébrica para o cálculo da energia granular.

Devido a impossibilidade de se reproduzir o trabalho de GERBER *et al.* (2010) de maneira idêntica, o presente trabalho utiliza as simplificações feitas em PINHO *et al.* (2012). Adicionalmente são realizadas uma simulação com o modelo de transição suave e outra idêntica à efetuada por PINHO *et al.* (2012), com condições de contorno para a equação de conservação de quantidade de movimento diferentes das utilizadas por estes autores. Na Tab. 6.4 é possível observar as diferenças entre as modelagens utilizadas para descrever o tensor de tensões da fase sólida em GERBER *et al.* (2010), em PINHO *et al.* (2012) e no presente trabalho. As diferenças em relação a condição de contorno utilizada são apresentadas após a discussão sobre os modelos cinéticos.

Tabela 6.4 - Modelos utilizados para descrever o comportamento das fases sólidas.

Opção de Modelo	Modelo Selecionado		
	GERBER <i>et al.</i> , 2010	PINHO <i>et al.</i> , 2012	Presente trabalho
Relação Constitutiva	Modelo de Princeton modificado	Modelo de Schaeffer	Modelo de Transição Suave
Empacotamento crítico (ε_s^*)	0,35	0,35	0,35
Modelo de tensões de atrito	$\varepsilon_s > \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo de Schaeffer $\varepsilon_s \leq \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo de Princeton	$\varepsilon_s > \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo de Schaeffer $\varepsilon_s \leq \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo viscoso	$\varepsilon_s > \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo de Schaeffer $\varepsilon_s \leq \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo viscoso
Correlações de arraste	Modelo de Syamlal e O'Brien	Modelo de Syamlal e O'Brien	Modelo de Syamlal e O'Brien

Em relação à modelagem cinética do processo de gaseificação, a etapa de secagem foi modelada como instantânea nos três trabalhos, da mesma maneira que realizado nesta dissertação. Por outro lado, os autores não consideraram a pirólise como instantânea, e utilizaram um modelo cinético para a descrição do processo de pirólise da madeira. O modelo utilizado, descrito por GRONLI e MELAAEN (2000), é representado na Fig. 6.4 e consiste na divisão do processo de pirólise em duas etapas: pirólise primária e craqueamento de alcatrão (ou pirólise secundária).

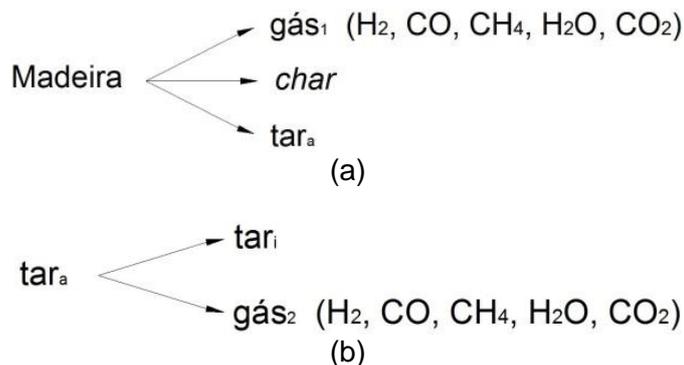


Figura 6.4 - Representação do esquema de pirólise da madeira: a) Pirólise primária; b) Pirólise secundária. (Retirado de PINHO *et al.*, 2012).

A pirólise primária consiste na decomposição da madeira em *char*, alcatrão ativo (*tar_a*) e gases não condensáveis (*gás₁*), enquanto que na pirólise secundária o alcatrão ativo é craqueado em gases não condensáveis (*gás₂*) e alcatrão inerte (*tar_i*). Os autores ainda optaram por somar as frações mássicas de todos os outros hidrocarbonetos à fração mássica de CH₄, reduzindo assim o número de espécies químicas investigadas. Dessa forma, as 10 espécies químicas investigadas são O₂, N₂, H₂, CH₄, CO, CO₂, H₂O, *tar_a* e *tar_i*.

Tabela 6.5 - Parâmetros cinéticos para o processo de pirólise da madeira.

Produto	Taxa de reação [mol/m ³ s]	A_i [s ⁻¹]	\tilde{E}_{ai} [kJ/mol]
<i>gás₁</i>	$\tilde{r}_{p1} = k_{p1}[BM]$	$1,43 \cdot 10^4$	88,6
<i>Char</i>	$\tilde{r}_{p2} = k_{p2}[BM]$	$7,43 \cdot 10^5$	106,5
<i>tar_a</i>	$\tilde{r}_{p3} = k_{p3}[BM]$	$4,13 \cdot 10^6$	112,7
<i>gás₂</i>	$\tilde{r}_{p4} = k_{p4}[tar_a]$	$2,3 \cdot 10^4$	80,0
<i>tar_i</i>	$\tilde{r}_{p4} = k_{p4}[tar_a]$	$2,3 \cdot 10^4$	80,0

A principal vantagem do modelo cinético proposto por GRONLI e MELAAEN (2000) é sua capacidade de gerar diferentes quantidades de gases, alcatrão e *char* em função da temperatura. Por outro lado, a desvantagem deste modelo é que ele não é capaz de variar a composição dos gases formados com a temperatura, já que a composição dos gases formados na pirólise é modelada como constante (PINHO, 2012). As taxas de formação dos produtos da pirólise podem ser vistas na

Tab. 6.5. Nesta tabela, BM denota biomassa, k_{pi} é a constante da reação, A_i é o fator pré-exponencial e \tilde{E}_{ai} a energia de ativação.

As frações mássicas de $gás_2$ e tar_i produzidas na pirólise secundária foram retiradas do trabalho de BOROSON e HOWARD (1989) e correspondem, respectivamente, a 0,78 e 0,22. As composições do $gás_1$ e do $gás_2$ consideradas por GERBER *et al.* (2010) são mostradas, em fração molar, na Tab. 6.6. Os autores ainda consideraram um peso molecular de 128 g/mol para a madeira e para os dois tipos de alcatrão modelados (tar_a e tar_i).

Tabela 6.6 - Composição dos gases produzidos nas duas etapas do processo de pirólise da madeira.

Espécie	Gás ₁ (fração molar %)	Gás ₂ (fração molar %)
H ₂	30,5	23,5
CO	18,5	54,6
CH ₄	6,7	15,0
H ₂ O	27,4	0,0
CO ₂	16,9	6,9

As reações homogêneas modeladas por GERBER *et al.* (2010) foram a reação de deslocamento de água (R.8) e as reações de oxidação de monóxido de carbono (R.12), de hidrogênio (R.13) e de metano (R.14). A taxa da reação de deslocamento de água foi modelada de acordo com o modelo de BIBA *et al.* (1978) (*apud* SOUZA-SANTOS, 1989). As taxas das reações de oxidação de monóxido de carbono e de metano foram modeladas seguindo a sugestão de DRYER (1972). Por fim, a modelagem da taxa da reação de oxidação de hidrogênio foi realizada usando o modelo descrito em MITANI e WILLIAMS (1980). Os modelos cinéticos das reações homogêneas são idênticos aos descritos no Cap. 5, e são mostrados na Tab. 6.7.

Duas observações devem ser feitas em relação à comparação entre a modelagem das reações homogêneas do trabalho de GERBER *et al.* (2010) e a utilizada nesta dissertação. A primeira é que em GERBER *et al.* (2010) não foi modelada a reação de reforma de metano, uma vez que os autores consideram que sua contribuição seria desprezível. A segunda é que os autores consideraram calores de reação constantes, ao contrário do que é feito neste trabalho, onde os calores de reação variam com a temperatura.

Tabela 6.7 - Modelagem cinética das reações homogêneas consideradas.

Reação	Taxa de Reação	A_i [s ⁻¹]	\tilde{E}_{ai} [kJ/mol]
$CO + H_2O$ $\leftrightarrow H_2 + CO_2$	$\tilde{r}_4 = -k_4 * \left\{ [CO] * [H_2O] - \frac{[CO_2] * [H_2]}{k_{e4}} \right\}$ $k_{e4} = 0,0265 * \exp[3958/T_g]$	2,78*10 ⁶	12,554
$CO + 0,5O_2$ $\rightarrow CO_2$	$\tilde{r}_7 = -k_7[CO][O_2]^{0,25}[H_2O]^{0,5}$	3,98*10 ¹⁴	167,269
$H_2 + 0,5O_2$ $\rightarrow H_2O$	$\tilde{r}_8 = -k_8[H_2][O_2]$	2,196*10 ¹²	109,138
$CH_4 + 2O_2$ $\rightarrow CO_2 + 2H_2O$	$\tilde{r}_9 = -k_9[CH_4]^{0,7}[O_2]^{0,8}$	1,58*10 ¹³	202,387

As reações heterogêneas consideradas foram as reações de gaseificação com vapor (R.5), de Bouduard (R.6), de metanação (R.7) e oxidação completa do carbono (R.10). As reações heterogêneas de gaseificação são todas tratadas a partir de modelos cinéticos sugeridos por HOBBS (1992). Já a reação de oxidação completa de carbono é modelado segundo ROSS e DAVIDSON (1981) (*apud* PINHO *et al.*, 2012). As taxas das reações heterogêneas são mostradas na Tab. 6.8.

Tabela 6.8 - Modelagem cinética das reações heterogêneas consideradas.

Reação	Taxa de Reação	A_i [s ⁻¹]	\tilde{E}_{ai} [kJ/mol]
$C + H_2O$ $\rightarrow CO + H_2$	$\tilde{r}_{11} = -k_{11}[H_2O]$	3,42	129,698
$C + CO_2$ $\rightarrow 2CO$	$\tilde{r}_{12} = -k_{12}[CO_2]$	3,42	129,698
$C + 2H_2$ $\rightarrow CH_4$	$\tilde{r}_{13} = -k_{13}[H_2]$	3,42*10 ⁻³	129,698
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	$\tilde{r}_{14} = -[(k_{14} + k_d)/(k_{14} * k_d)][O_2]$ $k_d = (Sh * D_g)/d_p$ $Sh = 2 + 0,6 * Re_p^{\frac{1}{2}} * Sc^{1/3}$	1,58*10 ¹²	202,641

A taxa da reação de oxidação completa de carbono é resultante de uma mistura de efeitos cinéticos e difusivos (GERBER *et al.*, 2010). Os efeitos cinéticos são contabilizados a partir da constante da reação, k_{14} , enquanto que os efeitos difusivos são levados em conta através do termo k_d . A expressão do coeficiente k_d depende dos números de Reynolds (Re), de Sherwood (Sh) e de Schmidt (Sc), assim como do

diâmetro da partícula (d_p) e do coeficiente de difusividade do gás (D_g), o qual foi considerado $2,08 \cdot 10^{-4}$ m²/s em ROSS e DAVIDSON (1981) (*apud* PINHO *et al.*, 2012).

A discretização do domínio resultou em uma malha de 20x160 elementos, sendo que o espaçamento na direção x foi de 0,6785 cm e na direção y de 0,6875 cm. Tanto em GERBER *et al.* (2010) quanto em PINHO *et al.* (2012) não foram feitos comentários sobre os métodos de discretização utilizados ou sobre a tolerância dos resíduos das equações. Desta forma, optou-se por utilizar o método de segunda ordem Superbee, utilizando a correção deferida para limitar o método, com os valores padrão das tolerâncias.

As condições de contorno e iniciais, retiradas dos trabalhos de GERBER *et al.* (2010) e de PINHO *et al.* (2012), são mostradas nas Tabs. 6.9 e 6.10. No entanto, com a intenção de avaliar o efeito da condição de contorno da equação de conservação de quantidade de movimento sobre os resultados, foi considerada a condição de não deslizamento nas paredes, diferentemente da condição considerada nestes dois trabalhos. Dessa forma, três simulações foram realizadas para a validação do uso do código. A primeira reproduz exatamente o trabalho de PINHO *et al.* (2012), e é denominada aqui de Caso FSW. A segunda é idêntica a primeira, com exceção da condição de contorno da equação de quantidade de movimento, modelada como condição de não deslizamento. Esta segunda simulação é denominada aqui de Caso NSW. Por fim, a terceira simulação possui duas diferenças em relação à modelagem proposta por PINHO *et al.* (2012). Além da condição de contorno de não deslizamento, um modelo de transição suave é utilizado para calcular o termo de tensão de tensões da fase sólida. Esta terceira simulação é denominada de Caso NSW TS.

Tabela 6.9 - Resumo das condições de contorno do problema.

Condições de Contorno					
Entrada de Combustível		Entrada de Ar		Paredes	
$V_{madeira}$	0,035 cm/s	V_{ar}	25,0 cm/s	T_{leito}	970,0 K
$T_{madeira}$	423,15 K	T_{ar}	670,0 K	T_{freeb}	570,0 K
V_{H_2O}	8,406 cm/s	p_g	1 atm	V_g	Condição de não deslizamento
T_{H_2O}	423,15 K			V_s	Condição de não deslizamento
Y_{H_2O}	1				
p_g	1 atm				

A condição de contorno utilizada para a equação de conservação de energia foi à de temperatura prescrita em todas as paredes. A temperatura de 970 K foi considerada nas paredes da região do leito e da região cônica, enquanto que uma temperatura de 570 K foi considerada para as paredes da região do *freeboard*. Como a secagem foi considerada instantânea, foi estabelecido que 10% do valor da vazão de entrada de madeira é formada por uma corrente de água.

Como condição inicial foi considerado que o reator se encontra em repouso e cheio de N_2 , à pressão atmosférica e com uma altura do leito igual a 35,0 cm, como mostrado na Tab. 6.10. As propriedades das partículas sólidas são apresentadas na Tab. 6.11, enquanto que os parâmetros adimensionais referentes ao comportamento das fases sólidas são apresentados na Tab. 6.12.

Tabela 6.10 - Condições iniciais das simulações realizadas.

Condições Iniciais					
T_g	1020,0 K	$T_{s,char1}$	1020,0 K	$T_{s,char2}$	1020, 0 K
p_g	1 atm	$V_{s,char1}$	0,0 cm/s	$V_{s,char2}$	0,0 cm/s
V_g	0,0 cm/s	$\varepsilon_{s,char1}$	0,325	$\varepsilon_{s,char2}$	0,325
Y_{N_2}	1	$\varepsilon_{s,madeira}$	0,0		
ε_g	0,35	h_{leito}	35,0 cm		

Tabela 6.11 - Propriedades das partículas sólidas.

Propriedades das partículas sólidas				
$\rho_{s,madeira}$	585,0 kg/m ³	$\rho_{s,char}$	450 kg/m ³	
$d_{s,madeira}$	4,0 mm	$d_{s,char1}$	2,0 mm	$d_{s,char2}$ 1,5 mm
$cp_{madeira}$	2380 J/kg K	cp_{char}	800 J/kg K	
$\lambda_{madeira}$	0,158 W/m K	λ_{char}	0,107 W/m K	

Tabela 6.12 - Parâmetros físicos das fases sólidas.

Parâmetros físicos	
e_{mm}	0,8
Φ	30,0
C_f	0,1

As simulações foram executadas até o tempo de 200 s de operação do gaseificador. Na Fig. 6.5, é mostrado o comportamento da temperatura de saída dos gases nas três situações investigadas. É possível observar que a oscilação da temperatura é muito maior nas situações com condição de contorno de não-eskorregamento. A Fig. 6.5 também indica que as temperaturas de saída dos gases nas três simulações realizadas podem não ter atingido o regime estacionário.

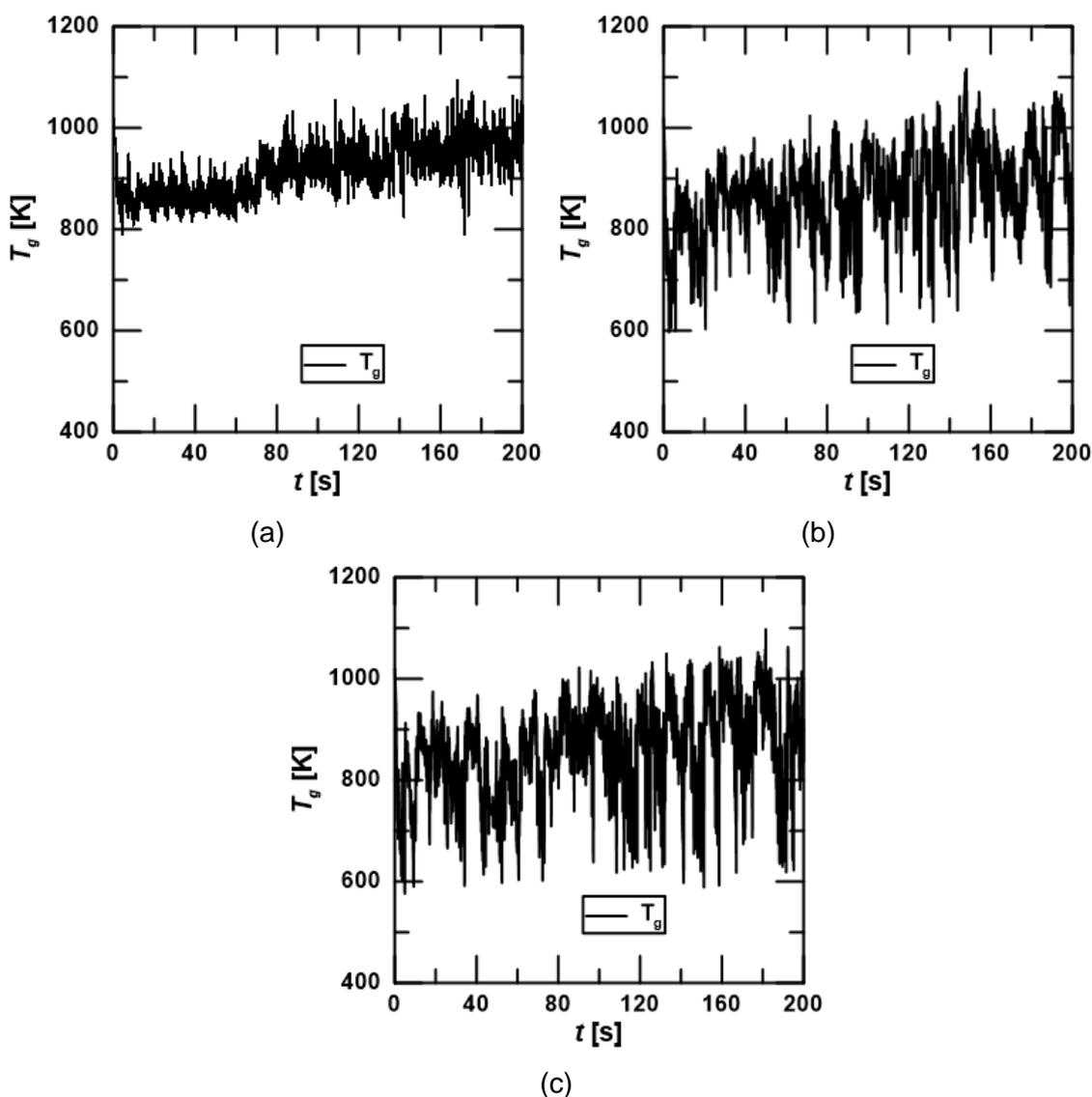


Figura 6.5 - Evolução da temperatura na saída do gaseificador através do tempo; a) Caso FSW; b) Caso NSW; (c) Caso NSW TS.

Já na Fig. 6.6 é possível observar o comportamento das espécies químicas em função do tempo. Nota-se que as espécies químicas apresentam oscilações menores do que as apresentadas pela temperatura. As frações mássicas de H_2 e CO nos Casos FSW, Fig. 6.6 (a), e NSW, Fig. 6.6 (b), parecem não ter atingido o regime estacionário.

Entretanto, as demais frações mássicas desses dois casos parecem ter se estabilizado. Já na Fig. 6.6 (c) todas as grandezas mostradas aparentam ter atingido o regime estacionário

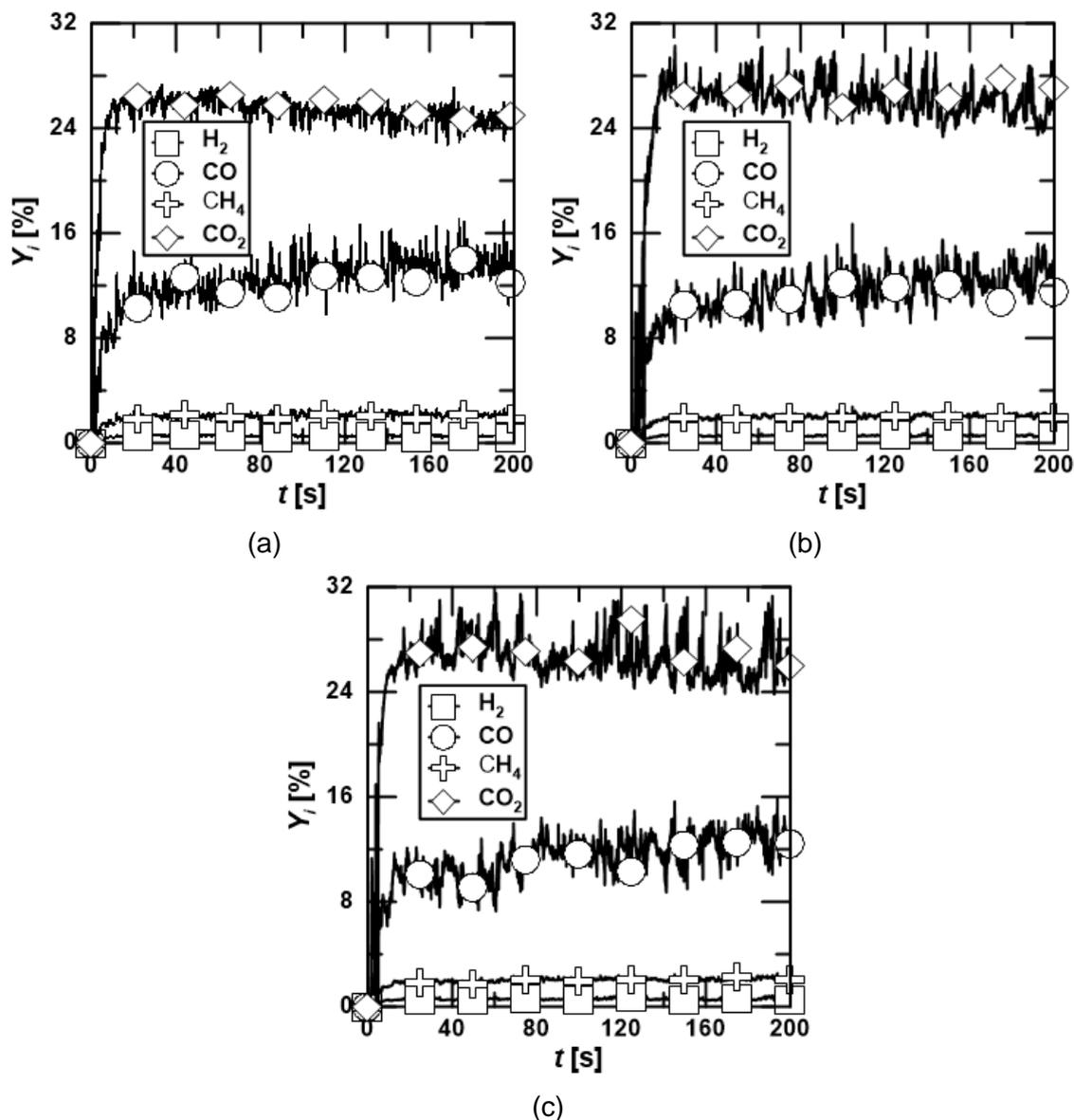


Figura 6.6 - Evolução das frações mássicas dos gases na saída do gaseificador através do tempo; a) Caso FSW; b) Caso NSW; (c) Caso NSW TS.

Após verificar o comportamento transiente das principais grandezas de interesse no processo de gaseificação, as grandezas serão avaliadas utilizando valores médios para os últimos 20 s da simulação. Na Tab. 6.13 é mostrada a composição média dos gases e a temperatura na saída do gaseificador obtidas nas três simulações e os resultados obtidos por GERBER *et al.* (2010). As diferenças relativas das três

simulações realizadas neste trabalho em relação ao resultados obtidos por GERBER *et al.* (2010) são apresentadas na Tab. 6.14.

A Tab. 6.13 mostra que, com exceção da temperatura, todos os resultados foram bem parecidos com os obtidos no trabalho de referência. A Tab. 6.14 mostra que as maiores diferenças relativas ocorreram para a fração mássica de H₂O para as três modelagens testadas, chegando a 23,6% de diferença no caso da modelagem com condição de não-escorregamento e modelo de transição suave (NSW TS). A temperatura de saída neste caso também alcançou uma diferença relativa bastante significativa, correspondente a 8,8%.

Tabela 6.13 - Comparação dos resultados obtidos neste trabalho com os obtidos no trabalho de referência.

Caso	X_{N2} [%]	X_{H2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH4} [%]	X_{H2O} [%]	X_{CO2} [%]	T_{saída} [K]
NSW	51,67	7,90	13,13	3,76	5,61	16,77	921,41
NSW TS	50,84	8,64	13,15	3,89	5,18	17,00	883,56
FSW	51,99	7,24	13,75	3,73	5,95	16,18	968,94
GERBER <i>et al.</i> (2010)	51,42	7,60	13,90	3,60	6,77	15,80	969,00

Tabela 6.14 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos neste trabalho e os obtidos no trabalho de referência.

Caso	Dif_{R,N2} [%]	Dif_{R,H2} [%]	Dif_{R,CO} [%]	Dif_{R,CH4} [%]	Dif_{R,H2O} [%]	Dif_{R,CO2} [%]	Dif_{R,T} [%]
NSW	0,5	3,9	5,6	4,3	17,1	6,1	4,9
NSW TS	1,1	13,7	5,4	8,0	23,6	8,3	8,8
FSW	1,1	4,7	1,1	3,7	12,1	2,4	0,0

No trabalho de GERBER *et al.* (2010) também foram apresentadas faixas dos valores experimentais obtidos no processo de gaseificação de madeira no reator modelado, sob as mesmas condições de contorno consideradas, apresentadas na Tab. 6.15. É possível observar que todos os valores obtidos neste trabalho se encontram dentro da faixa de valores experimentais. Ademais, GERBER *et al.* (2010) relataram que o valor de temperatura obtido, 969 K, era superior a faixa das temperaturas medidas, como pode ser observado na Tab. 6.15. A observação das Tabs. 6.13 e 6.15 também revela que a modelagem com condição de parede de não-escorregamento resultou em temperaturas de saída dentro da faixa obtida experimentalmente. Além disso, a

modelagem com transição suave gerou uma temperatura de saída ainda menor do que a obtida sem o modelo de transição suave. Logo, é possível concluir que a modelagem sugerida neste trabalho está gerando resultados de acordo com os dados experimentais apresentados em GERBER *et al.* (2010).

Tabela 6.15 - Faixa de valores experimentais relatados em GERBER *et al.* (2010).

	Valor mínimo	Valor máximo
X_{CO} [%]	13,00	21,00
X_{CO_2} [%]	13,00	17,00
X_{H_2} [%]	7,00	11,00
X_{CH_4} [%]	2,00	6,00
X_{N_2} [%]	48,00	52,00
$T_{saída}$ [K]	759,00	921,00

Para entender melhor o impacto da condição de contorno e do modelo de transição suave é necessário analisar os perfis das frações de vazio e da temperatura dos gases ao longo do reator. Na Fig. 6.7 são mostrados os perfis de fração de vazio ao longo da altura do leito do gaseificador para os três casos investigados. É possível observar que a condição de não escorregamento, representada no gráfico por NSW, reduz a altura média de expansão do leito. Além disso, o fato dos valores das simulações com condição de não escorregamento possuírem valores de fração de vazio menores indica que a formação de bolhas com esta condição de contorno é menor. Por outro lado, o modelo de transição suave não afetou significativamente a fração de vazio no leito.

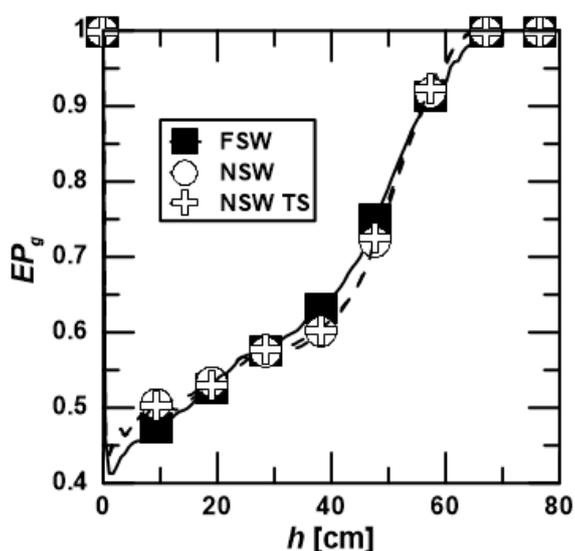


Figura 6.7 - Perfis axiais da fração de vazio no leito para os casos investigados.

Na Fig. 6.8 são mostrados os perfis de temperatura dos gases ao longo do reator para as três situações investigadas. Esta figura indica que a temperatura do leito não parece ser significativamente afetada pela mudança da condição de contorno ou pelo uso do modelo de transição suave. Todavia, a influência da condição de contorno sobre a temperatura na região do *freeboard* é significativa.

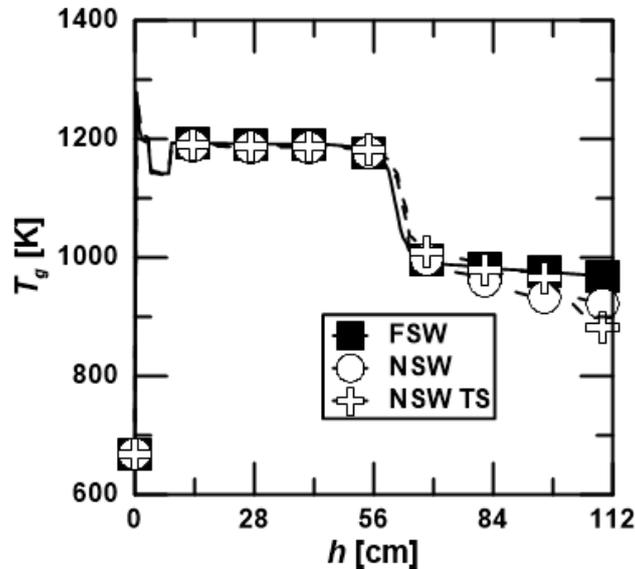


Figura 6.8 - Perfis axiais de temperatura no gaseificador para os casos investigados.

Também pode ser observado na Fig. 6.8 que a temperatura no leito é em torno de 200 K maior do que a temperatura na região do *freeboard*. Logo, a diferença de temperatura mostrada na Tab. 6.12 deve ser ocasionada pelas partículas de *char*, a uma temperatura elevada, que são arrastadas para a região do *freeboard*. Estas partículas acabam elevando a temperatura do gás no *freeboard*. Como utilizando a condição de não escorregamento este arrasto de partículas pelas paredes do reator não ocorre, as temperaturas com esta condição de contorno acabam sendo menores. Analisando os dados experimentais de GERBER *et al.* (2010), é possível afirmar que de fato a modelagem com condição de contorno de não-escorregamento parece ser mais apropriada para descrever o processo de gaseificação em reatores de leito fluidizado borbulhante.

A utilização do modelo de transição suave ajuda a reduzir a temperatura dos gases na saída, como pode ser visto tanto na Fig. 6.8, como na Tab. 6.12. Contudo, as razões para este comportamento não estão claras. Um estudo mais profundo sobre este tema seria necessário para explicar de maneira sucinta as causas deste comportamento.

Os resultados apresentados nesta seção mostram uma proximidade com aqueles obtidos a partir da modelagem proposta na literatura (e.g. GERBER *et al.*, 2010; PINHO *et al.*, 2012). Logo, é possível concluir que a modelagem utilizada neste trabalho é válida.

7 MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO PROCESSO

O gaseificador modelado neste trabalho faz parte de uma planta piloto em escala de laboratório instalada no Centro de Pesquisas e Desenvolvimento Leopoldo Américo Miguez de Mello (Cenpes/PETROBRAS). Na primeira seção deste capítulo alguns dos equipamentos da planta são descritos, enquanto que na segunda seção é apresentada a implementação do problema no código MFIX. Por fim, na terceira seção são avaliados parâmetros físicos e numéricos utilizados.

7.1 Descrição do Equipamento

A unidade de gaseificação estudada é representada na Fig. 7.1. A planta foi projetada para operar usando bagaço de cana como biomassa e ar, oxigênio, vapor ou misturas destes como agentes de gaseificação a pressão ambiente. Esta unidade é formada por três módulos, chamados Módulo 1, 2 e 3

No Módulo 1 estão incluídos os sistemas de alimentação tanto dos agentes gaseificadores quanto dos sólidos. O sistema de alimentação de agente gaseificador permite a utilização de ar, nitrogênio, oxigênio, vapor de água ou uma mistura entre quaisquer desses componentes como agente gaseificador. As linhas de alimentação de cada um destes componentes possui controladores de vazão mássica, permitindo que o operador regule as vazões de cada componente. As linhas de ar, oxigênio e nitrogênio possuem resistências elétricas acopladas a um sistema de controle, permitindo o aquecimento destes gases até uma faixa de temperatura de 350-400 °C. A alimentação de vapor de água é realizada utilizando uma bomba e um evaporador que também permite o aquecimento da água até uma faixa de 350-400 °C.

O sistema de alimentação dos sólidos contém dois fusos, um dosador e outro de alimentação, o qual efetivamente realiza a alimentação da biomassa no reator (PINHO, 2012). Os fusos estão conectados ao tanque onde a biomassa é armazenada, como pode ser visto na Fig. 7.2.

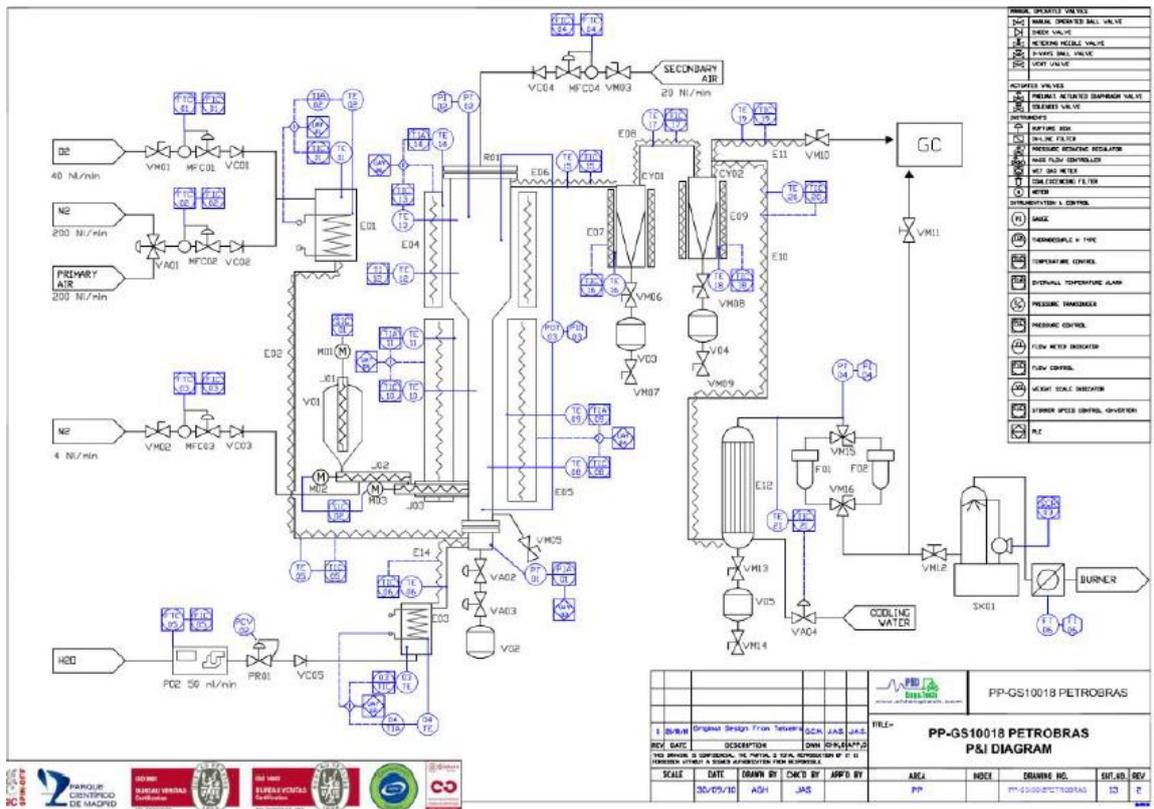


Figura 7.1 – Diagrama P&I da planta piloto (retirado de PID Eng&Tech, 2012).

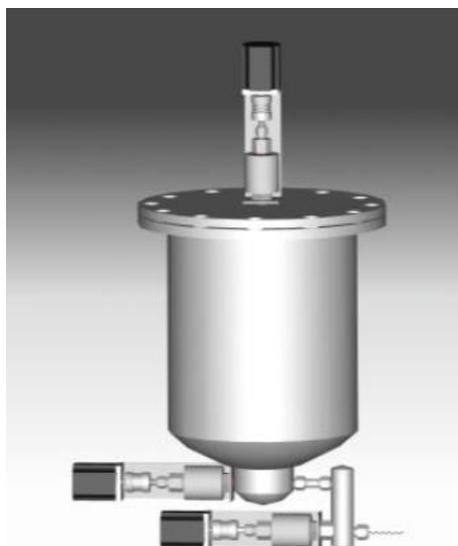


Figura 7.2 – Sistema de alimentação dos sólidos (retirado de PID Eng&Tech, 2012).

O Módulo 2 é formado pelo reator de leito fluidizado borbulhante, que é dividido em duas regiões, chamadas de leito e de *freeboard*, e pode ser visualizado na Fig. 7.3. A região do leito fica na parte inferior do reator e é onde são inseridas a biomassa e o agente gaseificador. Esta região possui um diâmetro interno de 82,8 mm e uma altura de 850,0 mm. Após o local de entrada dos agentes gaseificadores existe um distribuidor

que direciona o fluxo de gás de maneira homogênea por toda a seção transversal do reator. Esta equalização do fluxo de agente gaseificador ajuda na fluidização das partículas do leito. A região do *freeboard* possui uma altura de 535,0 mm e 134,5 mm de diâmetro interno. A parte inferior do *freeboard* é formada por uma região cônica, de 127,0 mm de altura, que serve de fronteira entre o leito e o *freeboard*.

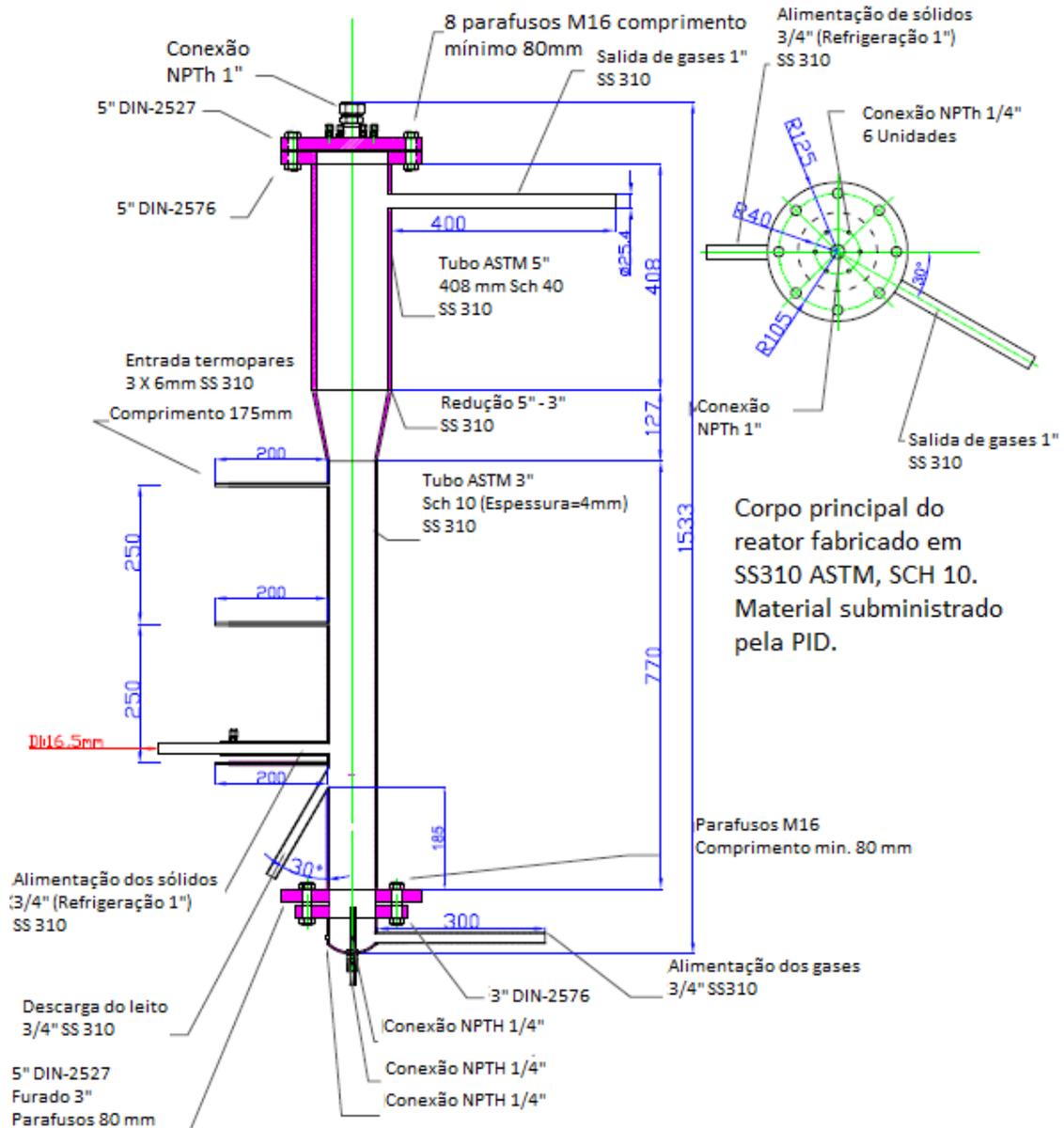


Figura 7.3 – Desenho do reator de leito fluidizado borbulhante (retirado de PINHO, 2012).

Em torno de todo o reator ainda existem duas resistências elétricas capazes de aquecer o gaseificador. Estas resistências estão conectadas a alguns termopares instalados ao longo do reator, de maneira que elas podem ser utilizadas para controlar a temperatura no seu interior. Uma dessas resistências está localizada em volta da

região do leito, enquanto que a outra está localizada em volta da região do *freeboard*. O comprimento e a potência das resistências podem ser vistos na Fig. 7.4.



Figura 7.4 – Sistema de aquecimento externo (retirado de PINHO, 2012).

O Módulo 3 não entra na parte de modelagem do problema. Ele consiste de dois ciclones em série para a remoção de pequenas partículas e de alcatrão elutriados do reator, filtros e um analisador de gases. Ambos os ciclones possuem um sistema de aquecimento para evitar a condensação da água e do alcatrão. Após a retirada das impurezas e da análise da composição dos gás produzido, os gases inflamáveis são queimados em um queimador.

7.2 Descrição da Geometria e das Condições de Contorno

Neste trabalho, embora a maioria das situações simuladas possuam uma geometria bidimensional de coordenadas retangulares, algumas simulações com uma geometria tridimensional de coordenadas cilíndricas são testadas. O objetivo é realizar uma comparação entre os resultados e o tempo computacional das simulações bidimensionais e tridimensionais.

Nos casos com coordenadas retangulares 2D, a malha é constituída por intervalos I_{\max} e J_{\max} nas direções x e y , com comprimentos diferentes, e por um único intervalo na direção Z , com dimensão correspondente a uma unidade de comprimento do sistema de unidades utilizado. A representação da geometria do problema com a localização das condições de contorno e a divisão das paredes do reator em quatro regiões pode ser visualizada na Fig. 7.5. Deve-se notar que na formulação do problema o distribuidor, localizado na parte inferior do reator, não foi modelado numericamente. Para considerar o efeito do distribuidor sobre o escoamento foi considerado que os agentes gaseificadores entram no reator com um perfil de velocidade plano.

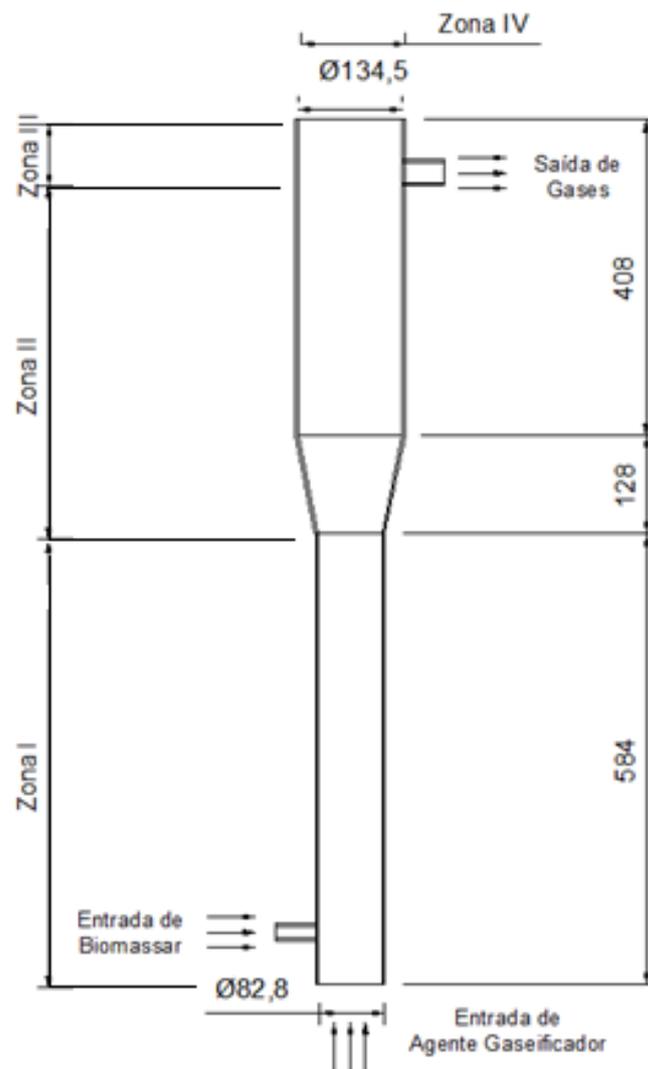


Figura 7.5 – Representação da geometria bidimensional do reator PID Eng&Tech com unidades em milímetros.

Nos casos com coordenadas cilíndricas 3D, a malha é constituída por intervalos I_{\max} , J_{\max} e K_{\max} nas direções r , y , e θ . A representação da geometria é similar ao do

caso 2D, contudo as condições de contorno da entrada de biomassa e de saída do reator não estão no mesmo plano, como representado na Fig. 7.6.

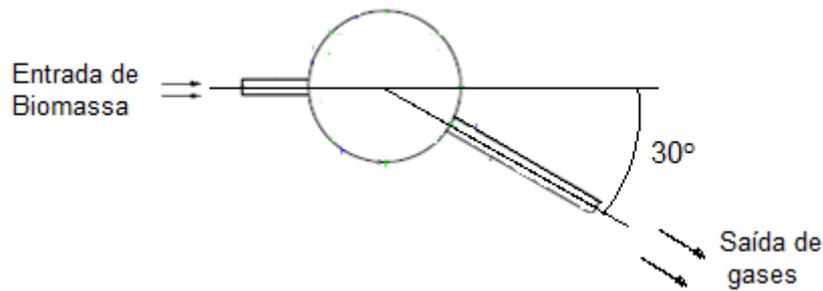


Figura 7.6 – Representação dos planos da entrada de biomassa e saída de gases com geometria 3D do reator.

O sistema de coordenadas cilíndricas 2D, axissimétrico, também poderia ser modelado no programa. Contudo, XIE *et al.* (2008^a) afirmam que a utilização deste sistema de coordenadas induz um processo de formação de bolhas que não é físico, desaconselhando seu uso.

A situação 3D corresponde ao gaseificador real. Entretanto, a utilização de uma geometria 3D acarreta em um tempo de computação extremamente elevado. Em contrapartida, o sistema de coordenadas cartesianas 2D necessita de um esforço computacional significativamente menor, embora algumas alterações devam ser realizadas na modelagem do problema.

PINHO (2012) afirma que o fundamental para a utilização do sistema de coordenadas retangulares 2D é manter a velocidade superficial do gás e a razão entre as vazões de biomassa e de agente gaseificador iguais às da situação 3D. Para respeitar estas duas restrições, primeiramente foram calculadas as velocidades superficiais dos agentes gaseificadores das situações 3D, utilizando as vazões de entrada dos agentes gaseificadores:

$$U = \frac{Q_{ag,gas-3D}}{\rho_{ag,gas} A_{ent-3D}} \quad (7.1)$$

Em seguida, estas velocidades foram utilizadas para calcular as vazões de entrada dos gases nas situações 2D:

$$Q_{ag,gas-2D} = \rho_{ag,gas} A_{ent-2D} U \quad (7.2)$$

Por fim, conhecendo a vazão mássica de entrada dos agentes gaseificadores dos casos 2D e a razão entre as vazões de agente gaseificante e de biomassa no caso 3D, foi assegurada a mesma razão para os casos 2D:

$$\frac{Q_{ag,gas-2D}}{Q_{biom-2D}} = \frac{Q_{ag,gas-3D}}{Q_{biom-3D}} \quad (7.3)$$

Com a geometria já determinada, condições de contorno para todas as equações governantes descritas na Seç. 4.1 devem ser impostas. Considerando as equações de conservação de quantidade de movimento, condições de contorno de não deslizamento e impenetrabilidade foram impostas para todas as paredes do gaseificador, seguindo a sugestão de PINHO (2012). Nas regiões de entrada do gaseificador as velocidades são prescritas. Na condição de saída do reator é considerada a pressão atmosférica.

Os submodelos utilizados para descrever o comportamento fluidodinâmico das fases sólidas são mostrados na Tab. 7.1. Mais detalhes sobre os submodelos da Tab. 7.1 podem ser encontrados na Seç. 4.2.

Tabela 7.1 – Submodelos das fases sólidas.

Opção de Modelo	Modelo Selecionado
Relação Constitutiva	Modelo de Transição Suave
Empacotamento crítico (ε_s^*)	0,42
Modelo de tensões de atrito	$\varepsilon_s > \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo de Schaeffer $\varepsilon_s \leq \varepsilon_s^* \rightarrow$ Modelo viscoso
Correlações de arraste	Modelo BVK

Em relação às equações de conservação de energia, com o intuito de avaliar também os efeitos da variação da temperatura do leito, foram consideradas condições de contorno de temperatura prescrita nas paredes em que existem resistências elétricas, como no trabalho de GERBER *et al.* (2010). Nas regiões de parede em que não existem resistências elétricas foi modelada uma perda de energia para o ambiente, calculada por PINHO (2012). Deve-se ressaltar ainda que ocorreram erros nas simulações quando a condição de contorno de fluxo prescrito foi utilizada, mesmo com fluxos extremamente pequenos. A condição de temperatura prescrita também é utilizada nas condições de entrada de biomassa e de agente gaseificador.

Para as equações de conservação de espécies químicas nas paredes é utilizada uma condição de impenetrabilidade, enquanto que nas regiões de entrada uma condição de valor prescrito das frações mássicas dos gases é considerada. Quando o

ar é utilizado como agente gaseificador são especificados valores de 0,233 e 0,767 para as frações mássicas de O_2 e N_2 , respectivamente, na região de entrada dos agentes gaseificadores. As situações investigadas neste trabalho incluem casos com misturas entre diferentes agentes gaseificadores, com proporções distintas. Logo, para cada situação valores diferentes das frações mássicas são calculados a partir das vazões mássicas de cada agente gaseificador. Para a região de entrada de biomassa são utilizadas as frações mássicas do gás de pirólise calculadas pelo modelo de pirólise PETERSEN-RODRIGUEZ, descrito na Seq. 5.2.

7.3 Informações sobre as Situações Simuladas

No presente trabalho foram realizadas simulações para avaliar a influência da mistura entre vapor e oxigênio e da temperatura de parede sobre a qualidade e o poder calorífico do gás de síntese. Inicialmente foi realizada uma breve comparação entre os casos 2D e 3D, assim como uma avaliação da escalabilidade do código utilizado e uma análise referente a alguns parâmetros numéricos. Além disso, é realizada um estudo da influência de cada uma das reações modeladas sobre a predição da composição do gás formado, com o objetivo de explicitar quais reações estão sendo mais relevantes e sofrendo mais influência dos parâmetros estudados.

Os casos que envolvem misturas entre O_2 e vapor de água como agente gaseificador foram escolhidos utilizando uma faixa de valores típicos da razão entre vapor e biomassa (S/B), entre 0,4 a 1,2, e da razão de gaseificação (GR), entre 0,66 e 1,74. Para a obtenção destes valores, a vazão de bagaço de cana foi mantida constante e igual a 0,8 kg/h, enquanto que as vazões de oxigênio e de vapor foram variadas, respectivamente, de 0,21 kg/h até 0,43 kg/h e de 0,32 kg/h até 0,96 kg/h. Para as temperaturas de parede também foram utilizados valores tipicamente encontrados em processos de gaseificação em reatores de leito fluidizado borbulhante (973 K – 1123 K).

Também foram realizadas simulações usando ar, ar enriquecido com O_2 e ar misturado com vapor de água. Nestas situações as vazões de agente gaseificador utilizadas foram escolhidas de maneira a manter uma vazão mássica de O_2 igual a 0,21 kg/h em todas estas simulações. De modo a garantir esta restrição, os casos com ar e ar misturado com vapor correspondem a situações com razão de equivalência (ER) igual a 0,15. O caso com ar enriquecido com oxigênio corresponde à situação com ER = 0,20. O percentual de concentração volumétrico de O_2 presente no caso com ar enriquecido, e de vapor no caso com adição de vapor ao ar, correspondem, respectivamente, a 36,5% e 16%. A vazão de bagaço de cana e as temperaturas de parede utilizadas foram

as mesmas das situações descritas no parágrafo anterior. Um resumo das situações descritas pode ser visualizado na Tab. 7.2.

Para os casos 3D basta transformar os valores das vazões de biomassa e de agente gaseificador para o sistema CGS e implementar estes valores no código, através do arquivo *mfix.dat*, com exceção da vazão de biomassa que será detalhada adiante. Contudo, nas situações 2D é necessário garantir a mesma condição de fluidização e razão entre as vazões de biomassa e de agente gaseificador da situação 3D para a nova geometria. Com este objetivo, primeiramente deve-se obter a velocidade superficial dos agentes gaseificadores em todas as situações investigadas. Após a obtenção destes valores, mostrados na Tab. 7.3, a vazão mássica dos agentes gaseificadores da situação 2D deve ser calculada. Como a razão entre as vazões de biomassa e de agente gaseificador é conhecida, é possível obter a vazão de sólidos no caso 2D.

Tabela 7.2 – Resumo das situações investigadas.

Casos	Agente Gaseificador	Q_{Ar} [kg/h]	Q_{O_2} [kg/h]	Q_s [kg/h]	ER	S/B	GR	T_{parede} [K]
1	O ₂ + Vapor	-----	0,210	0,320	0,18	0,40	0,66	973
2	O ₂ + Vapor	-----	0,210	0,320	0,18	0,40	0,66	1123
3	O ₂ + Vapor	-----	0,210	0,960	0,18	1,20	1,46	973
4	O ₂ + Vapor	-----	0,210	0,960	0,18	1,20	1,46	1123
5	O ₂ + Vapor	-----	0,430	0,320	0,36	0,40	0,94	973
6	O ₂ + Vapor	-----	0,430	0,320	0,36	0,40	0,94	1123
7	O ₂ + Vapor	-----	0,430	0,960	0,36	1,20	1,74	973
8	O ₂ + Vapor	-----	0,430	0,960	0,36	1,20	1,74	1123
9	O ₂ + Vapor	-----	0,320	0,640	0,27	0,80	1,20	973
10	O ₂ + Vapor	-----	0,320	0,640	0,27	0,80	1,20	1123
11	Ar	0,901	-----	-----	0,18	-----	-----	973
12	Ar	0,901	-----	-----	0,18	-----	-----	1123
13	Ar + O ₂	0,417	0,113	-----	0,18	-----	-----	973
14	Ar + O ₂	0,417	0,113	-----	0,18	-----	-----	1123
15	Ar + Vapor	0,901	-----	0,164	0,18	0,21	-----	973
16	Ar + Vapor	0,901	-----	0,164	0,18	0,21	-----	1123

Tabela 7.3 – Velocidade superficial das situações investigadas.

Casos	Velocidade Superficial do Agente Gaseificador [cm/s]
1 e 2	6,46
3 e 4	16,38
5 e 6	8,27
7 e 8	17,87
9 e 10	12,16
11 e 12	8,96
13 e 14	5,14
15 e 16	9,48

Deve ser observado que para obter a velocidade superficial dos agentes gaseificadores foi utilizada a vazão mássica total dos gases entrando no reator. Para diferenciar as situações da Tab. 7.2, basta obter as frações mássicas dos agentes gaseificadores utilizados, a partir das vazões mássicas apresentadas nesta mesma tabela.

Como os processos de secagem e de pirólise foram considerados instantâneos, deve-se dividir a vazão de biomassa calculada em uma corrente formada por *char* e uma formada por gases, a qual inclui a água proveniente do processo de secagem. A composição da corrente gasosa inserida na entrada de biomassa é mostrada na Tab. 7.4, enquanto que as vazões mássicas das correntes de gás e de *char* são, respectivamente, 0,28072 g/s e 0,00376 g/s.

Tabela 7.4 – Frações mássicas da corrente de gás na entrada de biomassa.

	Y_i [%] para T_{leito} de 700 °C	Y_i [%] para T_{leito} de 850 °C
O ₂	0,0	0,0
N ₂	0,5	0,5
H ₂	3,2	2,7
CO	46,1	50,2
CH ₄	14,2	17,2
H ₂ O	5,2	5,2
CO ₂	25,3	22,1
C ₆ H ₆	5,1	1,7
H ₂ S	0,4	0,4

As demais condições de contorno, assim como os coeficientes de transferência de calor utilizados nas regiões em que é modelada a perda de energia para o ambiente são apresentadas na Tab. 7.5. Nesta tabela, os coeficientes de transferência de calor, hw_{zona3} e hw_{zona4} foram calculados em PINHO (2012). A temperatura de entrada do bagaço de cana foi considerada 373,15 K, devido à hipótese de secagem instantânea. Dessa forma, está sendo considerado que a temperatura de vaporização da água em condições de pressão atmosférica é atingida instantaneamente. A consideração da temperatura de entrada dos agentes gaseificadores levou em conta as informações sobre o sistema de aquecimento dos gases, comentada na Seç. 7.1. Foi considerado que os agentes gaseificantes são aquecidos até 673,15 K

Tabela 7.5 – Condições de contorno.

Condições de Contorno			
Entrada de Combustível		Paredes do reator sem resistências	
$T_{gás}$	373,15 K	T_{amb}	303,15 K
T_{char}	373,15 K	hw_{zona3}	16,1183 W/m ² K
Entrada de Agente Gaseificador		hw_{zona4}	11,2324 W/m ² K
$T_{ag,gas}$	673,15 K	Paredes do reator com resistências	
Y_i	$Q_i/Q_{ag,gas}$	T_{parede}	973 K ou 1123 K

As propriedades das partículas sólidas são mostradas na Tab. 7.6 e os parâmetros físicos das fases sólidas na Tab. 7.7. Na Tab. 7.6, o diâmetro e a massa específica do material inerte foram fornecidos pelo Cenpes. O diâmetro do *char* foi considerado o mesmo que o diâmetro do bagaço de cana, também fornecido pela Cenpes. As demais propriedades foram retiradas do trabalho de PINHO (2012).

Tabela 7.6 – Propriedades das partículas sólidas.

Propriedades das partículas sólidas			
$d_{s-inertes}$	0,384 mm	d_{s-char}	0,200 mm
$\rho_{s-inertes}$	1300 kg/m ³	ρ_{s-char}	250 kg/m ³
$cp_{s-inertes}$	800 J/kg K	cp_{s-char}	231,34 J/kg K
$\lambda_{s-inertes}$	0,3279 W/m K	λ_{s-char}	0.1047 W/m K

Tabela 7.7 - Parâmetros físicos das fases sólidas.

Parâmetros físicos	
e_{mm}	0,9
Φ	30,0
C_f	0,1

Na Tab. 7.7, para o coeficiente de restituição de colisão entre partículas, e_{mm} , foi usado o mesmo valor que PINHO (2012). Para o ângulo de fricção interno, Φ , e para o coeficiente de atrito entre as fases sólidas, C_f , foram utilizados os valores padrão do MFIX.

Como o objetivo do trabalho é investigar o regime estacionário do problema, optou-se por utilizar condições iniciais que reduzissem o regime transiente das simulações realizadas. Por isso optou-se por utilizar a temperatura da parede como condição inicial da equação de conservação de energia e um campo de velocidade e de frações mássicas para as equações de conservação de quantidade de movimento e de espécies químicas. A obtenção dos campos do escoamento é detalhada na Seq. 8.2, onde a utilização de uma condição inicial de valores constantes para todas as grandezas é comparada com a utilização de campos próximos do regime estacionário.

7.4 Descrição dos Parâmetros e Modelos Numéricos Utilizados

Em se tratando de modelos numéricos, a descrição física correta do problema não garante resultados coerentes. A escolha de modelos e parâmetros numéricos podem acarretar variações significativas nos resultados de simulações, ou até mesmo ocasionar erros na execução do código. Dentre os parâmetros que podem influenciar os resultados do problema encontram-se o tamanho dos elementos da malha, o tamanho dos passos de tempo, os métodos de discretização dos termos convectivos das equações governantes e os resíduos mínimos para determinar a convergência do processo iterativo.

A influência da malha sobre os resultados é analisada na Seq. 8.1. Para reduzir o tempo computacional optou-se pela utilização de um passo de tempo variável durante as simulações. O menor e o maior passo de tempo possíveis definidos são, respectivamente, 10^{-3} e 10^{-10} , embora na maioria das simulações o menor passo de tempo necessário tenha sido da ordem de 10^{-5} .

O método de discretização mais comumente utilizado, devido a sua simplicidade e grande estabilidade, é o método *Upwind* de primeira ordem (FOU), detalhado no Anexo 1. Diversos autores (e.g. MINETO, 2009; GUENTHER e SYAMLAL, 2001) já mostraram que os métodos de primeira ordem não conseguem descrever o processo de formação de bolhas de maneira realista, sendo recomendado o uso de métodos de ordem superior para simulações de processos em que existe formação de bolhas. Entretanto, a utilização de métodos de segunda ordem acaba elevando significativamente o tempo computacional necessário para realizar a simulação. Para evitar tempos de simulação proibitivos e obter resultados de ordem superior, RANADE (2002) sugere que o método de primeira ordem FOU seja utilizado durante o regime transiente do escoamento, e um método de segunda ordem seja utilizado durante o regime pseudo-permanente do escoamento. Desta maneira, as simulações consideradas foram simuladas durante 400 s com o método FOU e durante os 50 s finais com o método de segunda ordem Superbee.

Tabela 7.8 - Valores de alguns parâmetros numéricos utilizados nas simulações.

Parâmetro	Descrição	Valor
R_{CM}	Continuidade + Conservação de Momentum	10^{-4*}
R_{esp}	Conservação de Espécies	10^{-6*}
R_T	Conservação de Temperatura	10^{-6*}
ω_1	Fator de sub-relaxação da continuidade da fase gás	0,8*
ω_2	Fator de sub-relaxação da fração volumétrica da fase sólida	0,5
ω_3	Fator de sub-relaxação das equações de conservação de momentum na direção x das fases gás e sólidos	0,5
ω_4	Fator de sub-relaxação das equações de conservação de momentum na direção y das fases gás e sólidos	0,5
ω_6	Fator de sub-relaxação da equação de conservação de temperatura das fases gás e sólidos	0,8
ω_7	Fator de sub-relaxação das equações de conservação de espécies	1,0

*Os casos 5 e 6 apresentaram dificuldades de convergência, por isso foram utilizados os valores padrão do MFIX para os resíduos e um fator de sub-relaxação da continuidade de 0,5 para estes dois casos.

Os resíduos padrão do código MFIX para as equações de continuidade e de quantidade de movimento e para as demais equações escalares são, respectivamente, 10^{-3} e 10^{-4} . Os valores de 10^{-4} para o resíduo da equação de continuidade + quantidade

de movimento e 10^{-6} para os resíduos das demais equações são utilizados neste trabalho. Comparações entre os dois conjuntos de resíduos indicam a necessidade de se utilizar os valores de resíduo propostos, como mostrado no Cap. 8. No entanto, deve-se ressaltar que a redução do valor dos resíduos também pode elevar o tempo de computação do código. Novamente com o objetivo de evitar um esforço computacional muito elevado, a mesma metodologia utilizada em relação aos métodos de discretização de segunda ordem foi utilizada.

Um fator que influencia diretamente a convergência do processo iterativo são os fatores de sub-relaxação das equações de conservação. Estes fatores não influenciam os resultados convergidos, porém podem reduzir ou elevar o número de iterações necessárias para obter os resultados convergidos. Os fatores de sub-relaxação e os valores dos resíduos das equações considerados neste trabalho são mostrados na Tab. 7.8.

8 RESULTADOS E ANÁLISE

Os resultados das simulações realizadas neste trabalho são apresentados e analisados neste capítulo. Antes de uma análise física do problema estudado, são realizadas avaliações a respeito de alguns parâmetros numéricos do problema. Resultados referentes à influência do tamanho de malha sobre os resultados e as diferenças provocadas pela utilização do sistema de coordenadas retangulares 2D em comparação com o sistema 3D de coordenadas cilíndricas são apresentados na Seç. 8.1. Em seguida, na Seç. 8.2 são avaliadas formas de reduzir o tempo computacional das simulações, incluindo uma avaliação da escalabilidade do código utilizado e uma comparação entre duas diferentes bibliotecas de paralelização MPI (MPICH 1.4.3 e OpenMPI 1.6.3). O uso de diferentes condições iniciais para reduzir o tempo computacional também é analisado. Na Seç. 8.3 é investigada a influência da escolha dos métodos de discretização e das tolerâncias utilizadas sobre os resultados.

Depois de terminada as análises referentes aos aspectos numéricos é apresentada a análise física do problema através das simulações, realizada nas Seçs. 8.4 e 8.5. Primeiramente é realizada uma análise sobre o comportamento termofluidodinâmico do leito, seguido por uma análise termoquímica ao longo do gaseificador, para as situações em que o agente gaseificador são misturas de vapor e O_2 . A análise termoquímica inclui uma avaliação percentual da contribuição de cada reação para produção e consumo dos principais componentes formados no gaseificador.

Após a análise do comportamento químico e termofluidodinâmico do gaseificador é realizada uma investigação da qualidade dos gases produzidos para diferentes misturas de agentes gaseificadores. O poder calorífico inferior (PCI), a quantidade de gás de síntese ($H_2 + CO$) e a razão H_2/CO são utilizadas para definir as vantagens de cada agente gaseificador, assim como a influência do oxigênio e do vapor sobre a composição dos gases produzidos.

Por fim, alguns dos resultados obtidos neste trabalho são comparados com resultados da literatura obtidos com o programa CSFMB, com o objetivo de avaliar a qualidade dos resultados apresentados. É necessário ressaltar ainda que todos os resultados apresentados, com exceção dos gráficos em função do tempo, são obtidos a partir da média dos últimos 20 s das simulações. Esta média é considerada como sendo o valor das grandezas durante o regime estacionário de operação do gaseificador.

8.1 Convergência de Malha e Comparação entre Simulações 2D e 3D

O estudo de convergência de malha apresentado a seguir utilizou duas malhas 2D diferentes, a primeira com 32x229 elementos e a segunda com 64x458 elementos, mostradas na Fig. 8.1. A primeira malha foi gerada seguindo a sugestão de PINHO (2012). O espaçamento da malha com 32x229 elementos na direção x é de 4,14 mm, e na direção y é de 4,0 mm no leito e 8,0 mm no *freeboard*. FERZIGER (2002) ressalta a necessidade de reduzir as dimensões dos volumes de controle pela metade em um teste de convergência de malha, respeitando sempre a distribuição inicial da malha. Logo, seguindo esta recomendação, a malha com 64x458 elementos foi obtida dividindo os espaçamentos da primeira malha pela metade, acarretando em uma malha com quatro vezes mais volumes de controle do que a original.

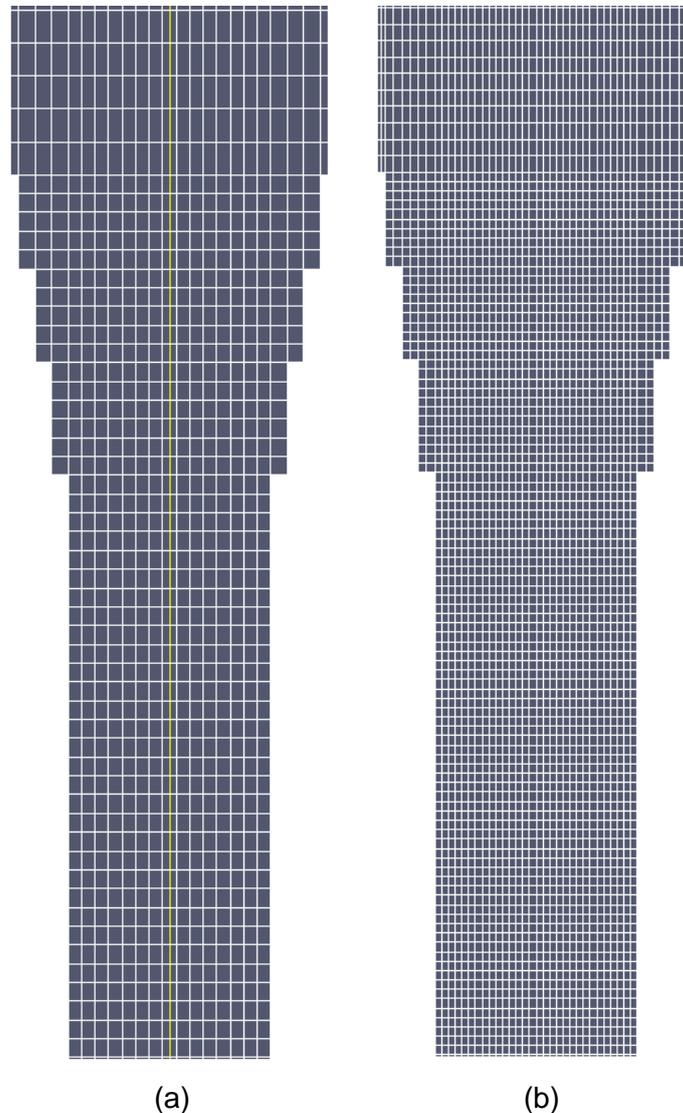


Figura 8.1 – Representação das malhas; Malha 1 (a); Malha 2 (b).

Devido ao elevado custo computacional das simulações envolvendo a malha com 64x458 volumes, a análise do impacto das malhas foi realizada utilizando simulações de 60 s, que não atingiram o regime estacionário. No entanto, mesmo sem atingir o regime estacionário, é possível avaliar se a independência de malha foi atingida.

Deve-se notar ainda que para um estudo de convergência espacial as simulações devem em princípio serem executadas com passos de tempo constantes, uma vez que variações no passo de tempo seriam diferentes de uma malha para outra. Contudo, simulações preliminares mostraram que, nas situações estudadas, as situações com passo de tempo fixo geram resultados muito próximos das simulações com passo de tempo variável, com a maior diferença relativa obtida para a fração mássica de CH₄ sendo da ordem de 2%. As simulações preliminares mostraram ainda que a utilização do passo de tempo variável reduziu pela metade o tempo necessário para realizar as simulações.

Para realização do teste de convergência de malha foram utilizados os Casos 1 e 7, definidos na Tab. 7.2. É preciso observar que não seria necessária a utilização de dois casos para estudar a convergência da malha. Entretanto, XIE *et al.* (2008^b) afirmam que, à medida que a velocidade superficial dos gases aumenta, a simulação com sistemas de coordenadas 2D passa a apresentar diferenças maiores em relação ao caso 3D. Desta forma, optou-se por incluir na análise a situação com maior velocidade superficial (Caso 7) na convergência de malha e fazer a comparação entre as modelagens 2D e 3D nestes dois casos.

A malha 3D foi gerada após uma análise preliminar da convergência das malhas 2D. Foi utilizada uma malha com 16x229x12 volumes que é mostrada na Fig. 8.2. O espaçamento da malha 3D nas direções r e z são idênticos aos das direções x e y da malha 2D com 32x229 volumes. Na direção azimutal (θ) novamente foi seguida uma sugestão de XIE *et al.* (2008^a), que recomendam a utilização de 12 volumes nesta direção.

Para os dois casos investigados as duas malhas 2D apresentam resultados muito próximos, como pode ser visto nas Figs. 8.3 - 8.7. Nestas figuras também estão representados os resultados referentes à malha 3D utilizada, que também estão bastante próximos dos resultados obtidos com as malhas 2D.

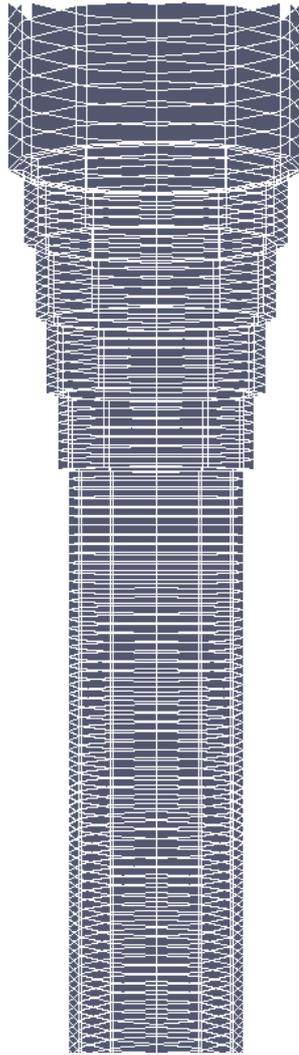


Figura 8.2 – Representação da malha tridimensional.

Nas Figs. 8.3 – 8.6 são mostradas as frações mássicas de H_2 , CO , CH_4 e CO_2 , respectivamente, na saída do reator ao longo do tempo. Observando estas figuras é possível notar que as duas malhas 2D utilizadas estão produzindo frações mássicas semelhantes aquelas da situação 3D, para os dois casos avaliados. Além disso, pode-se observar que, ao contrário do que imaginado inicialmente, o Caso 1 apresenta resultados mais distantes do caso 3D do que o Caso 7. Por exemplo, é possível observar que na Fig. 8.4 (a), a fração mássica de CO do Caso 1 tridimensional tende a se estabilizar em um valor ligeiramente maior do que nos casos 2D. Por outro lado, as Figs. 8.5 (a) e 8.6 (a) mostram que as frações mássicas de CH_4 e de CO_2 tendem a ser menores no Caso 1 tridimensional. Por outro lado, as frações mássicas de CO , CH_4 e CO_2 no Caso 7 estão mais próximas para as duas malhas 2D e a malha 3D.

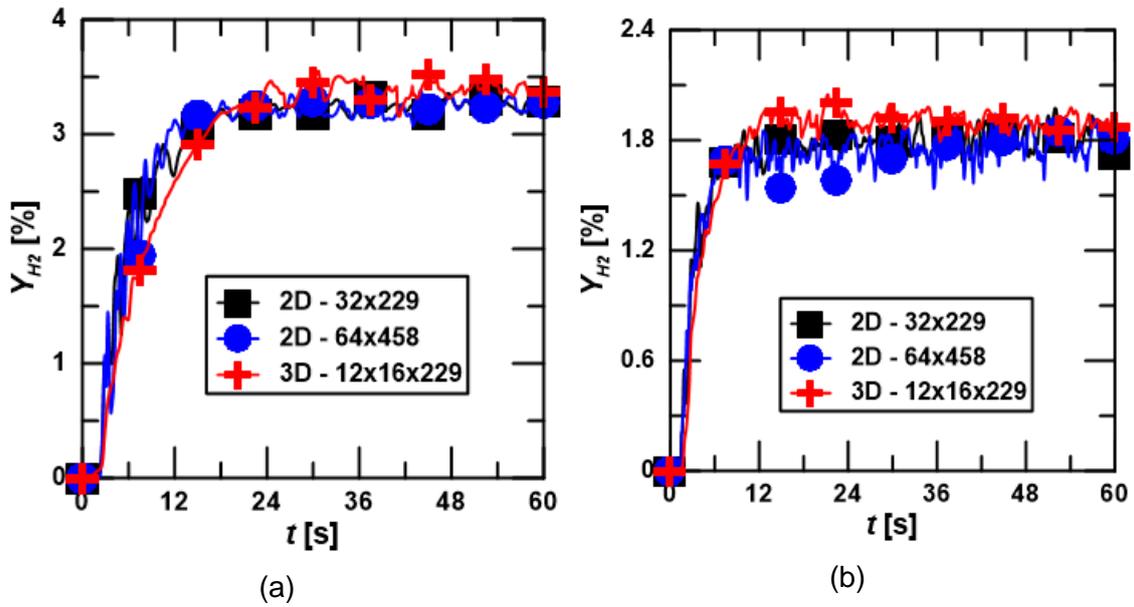


Figura 8.3 – Fração mássica de H₂ na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.

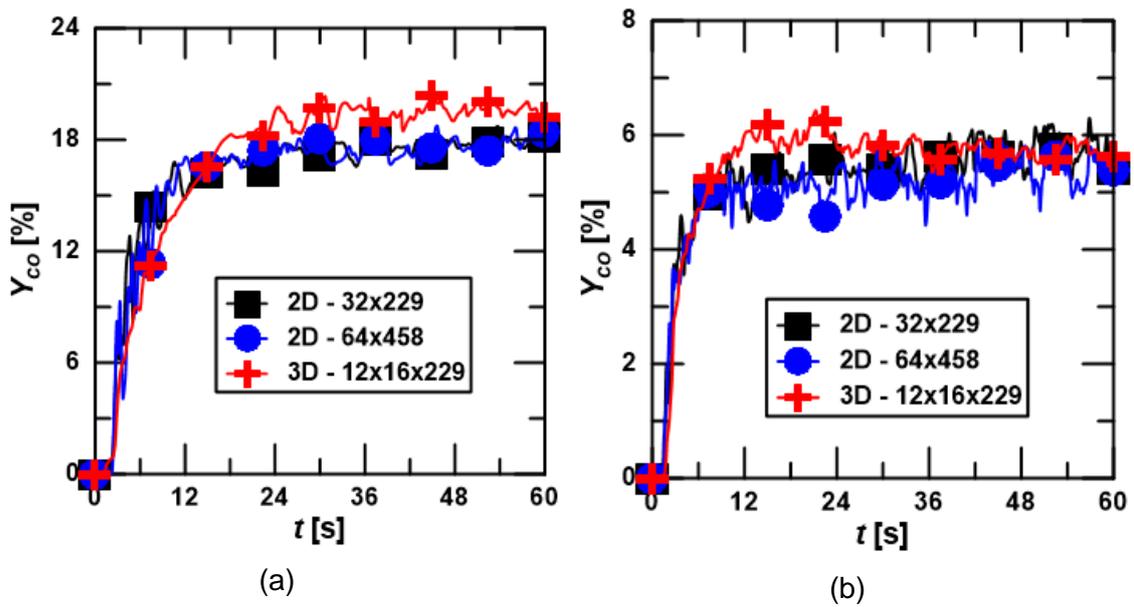


Figura 8.4 – Fração mássica de CO na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.

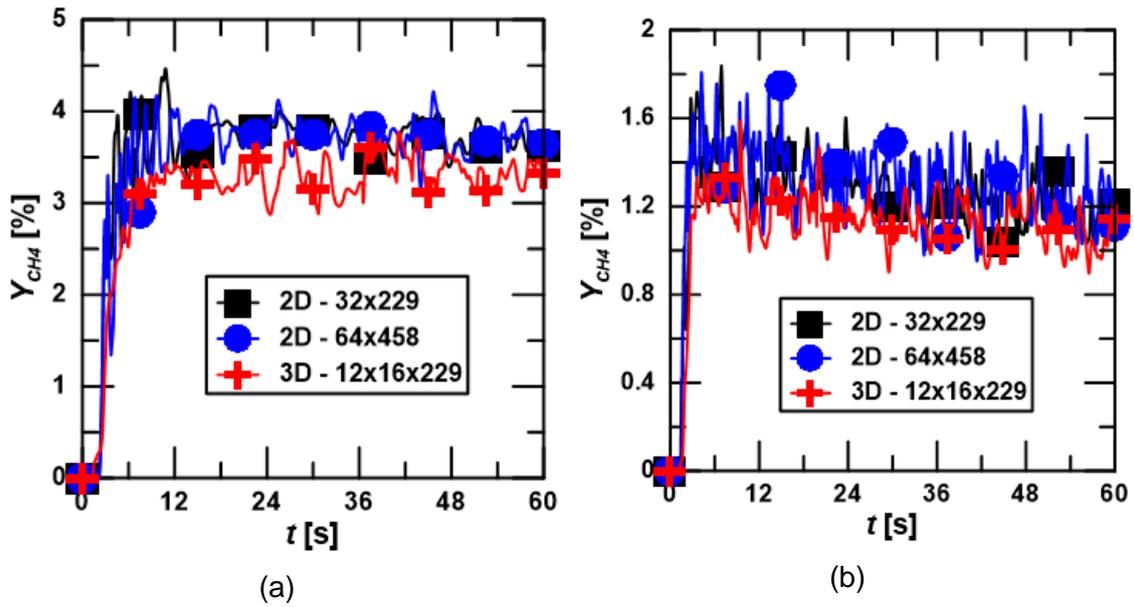


Figura 8.5 – Fração mássica de CH₄ na saída do reator; a) Caso 1; b) Caso 7.

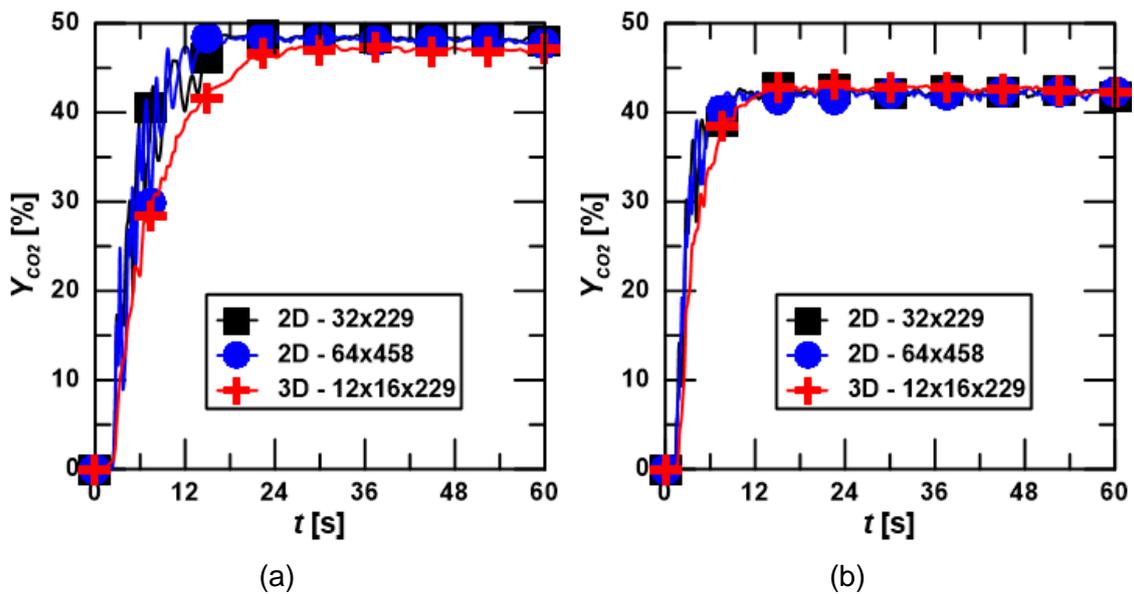


Figura 8.6 – Fração mássica de CO₂ na saída do reator nos Casos 1(a) e 7(b).

A Fig. 8.7 mostra que as temperaturas dos gases de saída obtida com o modelo 3D estão visivelmente diferentes do que as temperaturas obtidas com o modelo 2D em ambos os casos investigados. No Caso 1 a temperatura da representação 3D é maior do que a temperatura obtida com as duas malhas 2D. Por outro lado, no Caso 7 a temperatura de saída dos gases obtida com a malha 3D é menor do que a obtida com as malhas 2D. Entretanto, como os valores de temperatura são elevados, as diferenças relativas entre as duas situações são menores do que as referentes às frações mássicas.

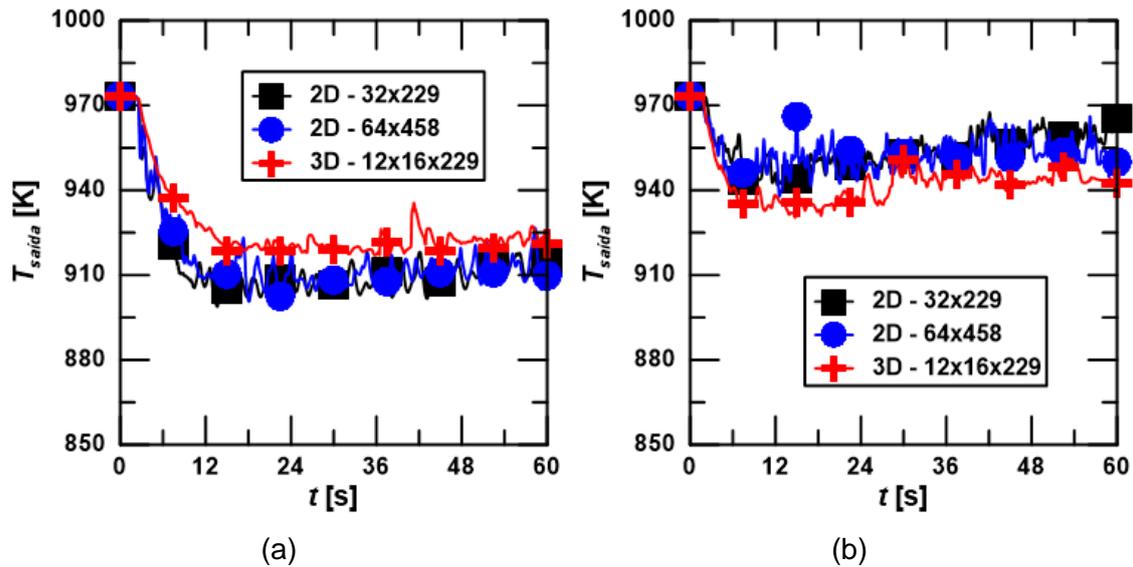


Figura 8.7 – Temperatura na saída do gaseificador nos Casos 1(a) e 7(b).

Todas as simulações descritas nesta seção foram realizadas em um *cluster* com 19 processadores XEONs, cada um com 24 CPUs. Em todas as simulações foram utilizados 12 *threads*, e o tempo gasto por cada simulação é mostrado na Tab. 8.1. Nesta tabela, é possível observar que as simulações com a malha de 32x229 elementos são, aproximadamente, 6 vezes mais rápidas do que as simulações com a malha de 64x458 elementos e 12 vezes mais rápidas em comparação com a malha 3D utilizada. A Tab. 8.1 ajuda a mostrar, quantitativamente, a principal vantagem da representação 2D para as simulações de problemas envolvendo escoamentos multifásicos com reações químicas, que é a grande redução no tempo de simulação.

Tabela 8.1 – Informações referentes ao esforço computacional de cada simulação.

Caso	Malha	Tempo simulado [s]	Tempo gasto aproximado [dias]
1	32x229	60	1
1	64x458	60	6
1	12x16x229	60	12
7	32x229	60	1
7	64x458	60	5
7	12x16x229	60	10

Os resultados considerados até o presente momento indicam que as duas malhas bidimensionais testadas geram resultados muito próximos, mostrando que a independência dos resultados em relação a malha 2D utilizada foi alcançada. Além disso, a representação 2D parece produzir resultados bastante próximos aos da

representação 3D. Entretanto, uma análise mais profunda sobre as diferenças entre as malhas 2D e 3D é realizada na Seq. 8.3.

8.2 Redução do Tempo de Simulação

A redução do tempo de simulação é uma questão fundamental para a utilização de simulações fluidodinâmicas em gaseificadores de escala industrial. A utilização de processamento paralelo é uma das principais maneiras de se atingir este objetivo (FERZIGER, 2002). Com o intuito de se melhorar o entendimento sobre a eficiência da paralelização do código MFIX, nas próximas seções são apresentadas uma comparação entre duas bibliotecas de paralelização MPI e uma avaliação da escalabilidade do código. Além disso, é analisada uma maneira de acelerar o regime transiente do problema, reduzindo o tempo computacional necessário para realizar as simulações.

8.2.1 Comparação entre bibliotecas de paralelização MPI e avaliação da escalabilidade do problema

Neste trabalho optou-se por utilizar uma biblioteca de paralelização do tipo MPI. As duas bibliotecas disponíveis testadas nesta dissertação foram a MPICH2 1.4.3 e a OpenMPI 1.6.3. Para avaliar qual das duas é mais eficiente no presente trabalho foram realizadas simulações com ambas, utilizando de 2 a 24 *threads*. Foram simulados 3 s do Caso 1 para realizar esta comparação. Para cada número de *threads* quatro simulações foram realizadas e uma média aritmética foi utilizada para obter o tempo médio da simulação. Com o intuito de calcular os *speedups* da paralelização, também foram realizadas rodadas com processamento serial. Deve ser observado que uma *thread* pode ser interpretada como o número de partes em que o processo é dividido e executado simultaneamente.

Na Fig. 8.8 é apresentado o *speedup* obtido com cada uma das bibliotecas, em relação ao número de *threads* (n_p) utilizadas. Observando a Fig. 8.8, é possível notar que ambas as bibliotecas de paralelização apresentam uma melhor performance quando 12 *threads* são utilizadas para realizar as simulações. Além disso, também é possível observar que a biblioteca MPICH2 1.4.3 apresenta um *speedup* superior ao da biblioteca OpenMPI 1.6.3 à medida que se aumenta o número de *threads* utilizadas.

A Fig. 8.9 mostra a eficiência de paralelização das duas bibliotecas utilizadas. Nesta figura é possível observar que a eficiência de paralelização obtida com a

biblioteca MPICH2 é melhor do que a obtida com a biblioteca OpenMPI em todas as situações, com exceção da situação com 4 *threads*. Entretanto, a Fig. 8.9 também mostra que a situação de melhor *speedup* corresponde a uma eficiência inferior a 50%. Estas pequenas eficiências, independentemente da biblioteca utilizada, revelam que para o problema estudado o código MFIX não possui uma boa escalabilidade.

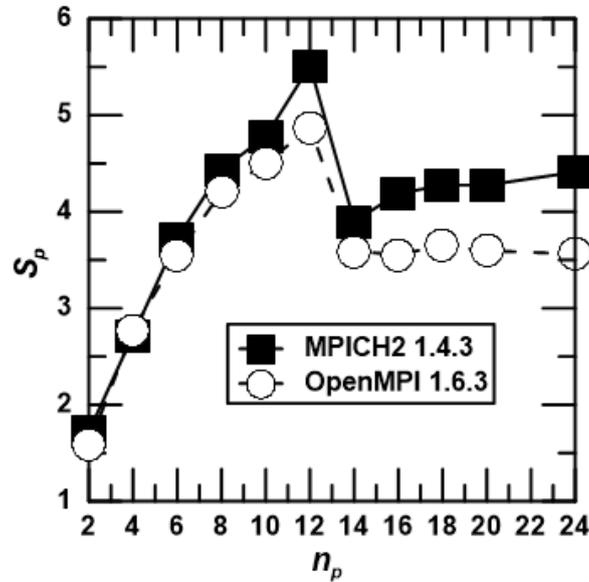


Figura 8.8 – *Speedup* das duas bibliotecas de paralelização.

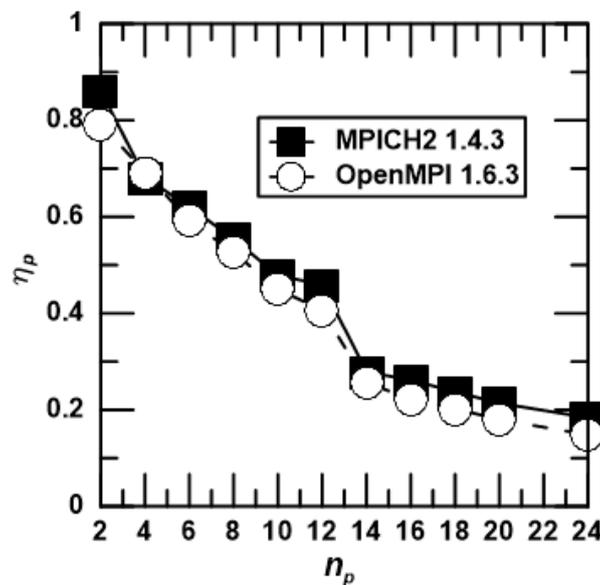


Figura 8.9 – Eficiência das duas bibliotecas de paralelização.

Existem duas possíveis justificativas para a existência desta falta de escalabilidade. A primeira é que o código não é escalável, e que um aperfeiçoamento das rotinas de paralelização deve ser realizado. A segunda é que a quantidade de

volumes utilizadas é tão pequena que o problema não é escalável, uma vez que com menos elementos na malha a parte paralelizável do código se torna menor, assim como a eficiência de paralelização (FERZIGER, 2002).

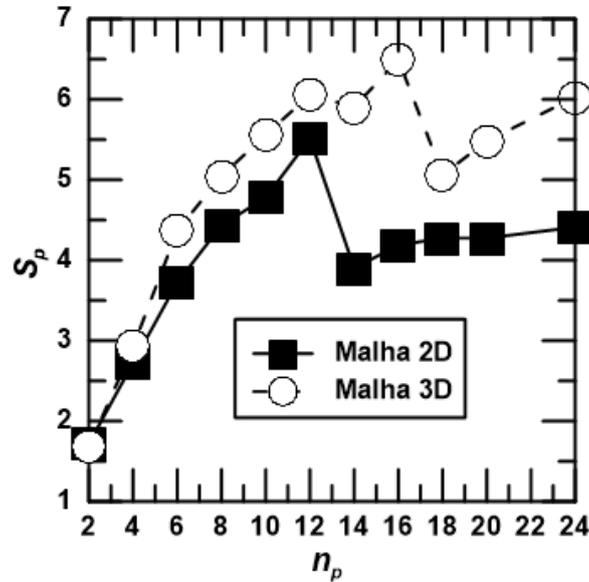


Figura 8.10 – Comparação entre os *speedups* obtidos com uma malha 2D e uma malha 3D.

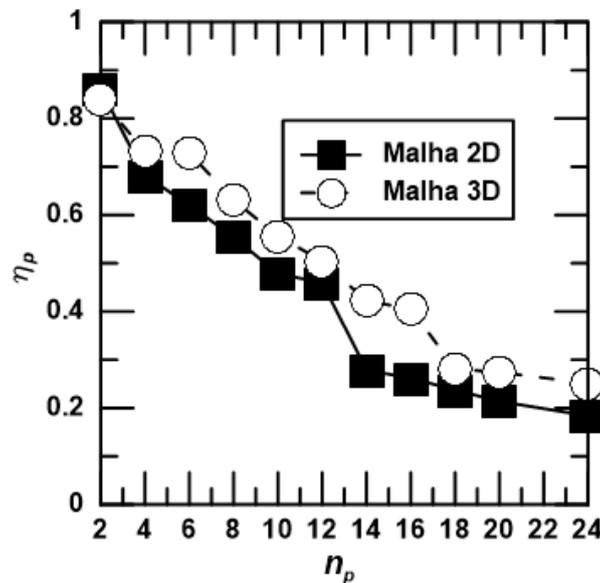


Figura 8.11 – Comparação entre as eficiências obtidas com uma malha 2D e uma malha 3D.

Para avaliar as duas hipóteses foram realizados testes, com a biblioteca MPICH2, para o Caso 1 utilizando uma malha 3D, que possui um número de elementos seis vezes maior. Os resultados, mostrados nas Figs. 8.10 e 8.11, mostram que para o caso de geometria 3D o *speedup* e a eficiência são melhores do que quando uma

geometria 2D é usada. Além disso, é possível observar também que o maior *speedup* no caso 3D corresponde à situação em que 16 *threads* foram utilizadas. Ou seja, é esperado que para problemas maiores, isto é, com um número maior de elementos da malha, os *speedups* obtidos sejam maiores e que o número de *threads* para uma rodada mais rápida também seja maior. Por outro lado, o fato do problema não ser escalável em nenhuma das duas situações, geometrias 2D e 3D, revela que o código não é escalável.

É recomendável realizar algumas simulações preliminares para determinar o número ideal de *threads* a ser utilizado. Se o problema resolvido possuir uma malha próxima à dos valores analisados neste trabalho (malha 2D com 7328 elementos e malha 3D com 43968 elementos), pode-se utilizar o mesmo número de *threads* utilizados aqui (12 e 16, respectivamente). Em relação à biblioteca de paralelização recomenda-se o uso da biblioteca MPICH2. Todas as simulações 2D apresentadas nas próximas seções foram realizadas utilizando 12 *threads*, enquanto que as simulações 3D foram executadas com 12 *threads*. A biblioteca de paralelização utilizada é a MPICH2.

8.2.2 Avaliação de um procedimento para reduzir o tempo de computação

Após determinada a biblioteca de paralelização mais eficiente e o número de *threads* ótimo para a redução do tempo computacional, é analisada uma forma de reduzir o tempo computacional modificando a condição inicial. Ao invés de considerar como condição inicial que o reator está cheio de N_2 e que a velocidade inicial dos gases é aproximadamente a velocidade mínima de fluidização, como em PINHO (2012) e GERBER *et al.* (2010), são utilizadas simulações simples para fornecer campos de velocidade e de espécies químicas. A temperatura inicial utilizada foi a temperatura da parede do respectivo caso. As duas metodologias testadas são chamadas de Procedimento 1 e Procedimento 2.

O Procedimento 1 consiste em realizar uma simulação de 40 s de operação do reator sem resolver as equações de energia e desconsiderando as reações químicas. Em seguida, são simulados mais 10 s de operação do reator considerando as reações químicas, porém sem resolver as equações de energia. Dessa forma, todo o escoamento foi considerado isotérmico com uma temperatura igual à temperatura de parede do respectivo caso. Por fim, são simulados 400 s de operação do reator resolvendo todas as equações de conservação e considerando as reações químicas, sendo que os últimos 50 s foram simulados com o método Superbee.

Já no Procedimento 2, é realizada a simulação direta de 500 s de operação do gaseificador. No segundo procedimento é considerada que a velocidade inicial dos gases é a velocidade mínima de fluidização para o material inerte. Para as equações de espécies químicas é considerado que o reator está inicialmente cheio de N_2 . Em relação as equações de energia, é considerada uma temperatura igual à temperatura definida nas paredes para todo o gaseificador. Novamente os últimos 50 s são simulados utilizando o método Superbee. Para realizar a comparação entre os dois procedimentos são analisados os Casos 1 e 7 como casos base.

Nas Figs. 8.12 e 8.13 é possível observar, respectivamente, o comportamento das temperaturas do leito de inertes e dos gases na saída do gaseificador em função do tempo de operação do reator. É possível notar nestas figuras que tanto a temperatura dos gases na saída quanto a temperatura do leito de inertes nos dois casos, com os dois procedimentos atingiram o regime pseudo-permanente.

Também é possível observar nas Figs. 8.12 e 8.13 que o Caso 1, com velocidade superficial menor, atingiu o regime pseudo-permanente antes do Caso 7. É necessário observar que algumas grandezas do escoamento podem atingir o regime estacionário e outras não. No entanto, nas situações analisadas, todas as grandezas de interesse do escoamento estão em regime estacionário. Outra observação a ser feita é que com o Procedimento 1 o tempo de operação em regime transiente foi menor do que com o Procedimento 2. Esta tendência indica que as simulações preliminares geraram campos das grandezas do escoamento mais adequados do que a consideração de campos com valores constantes ao longo do gaseificador.

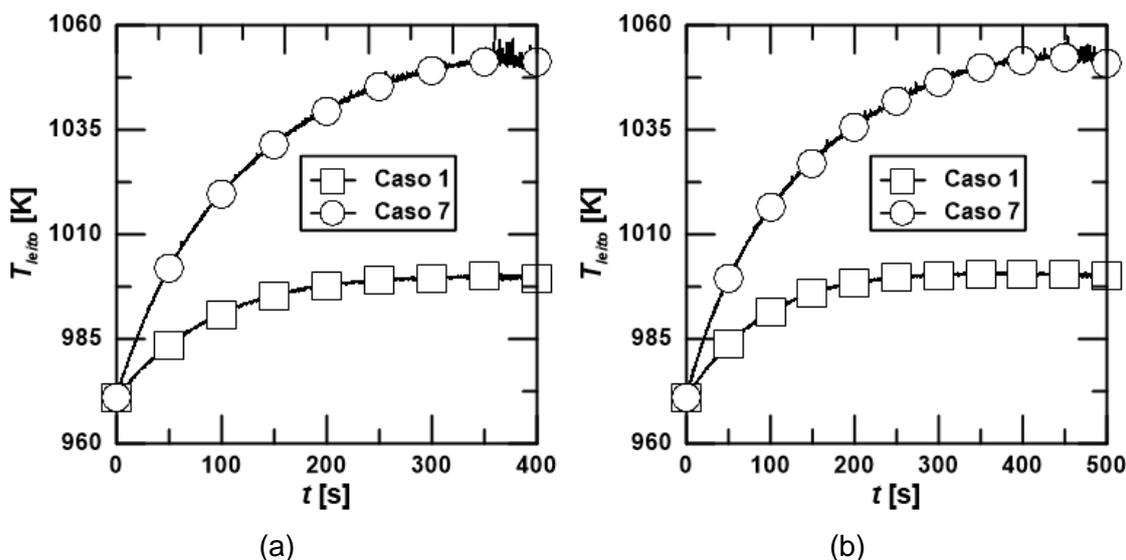


Figura 8.12 - Comportamento da temperatura do leito de inertes em função do tempo; a) Procedimento 1; b) Procedimento 2.

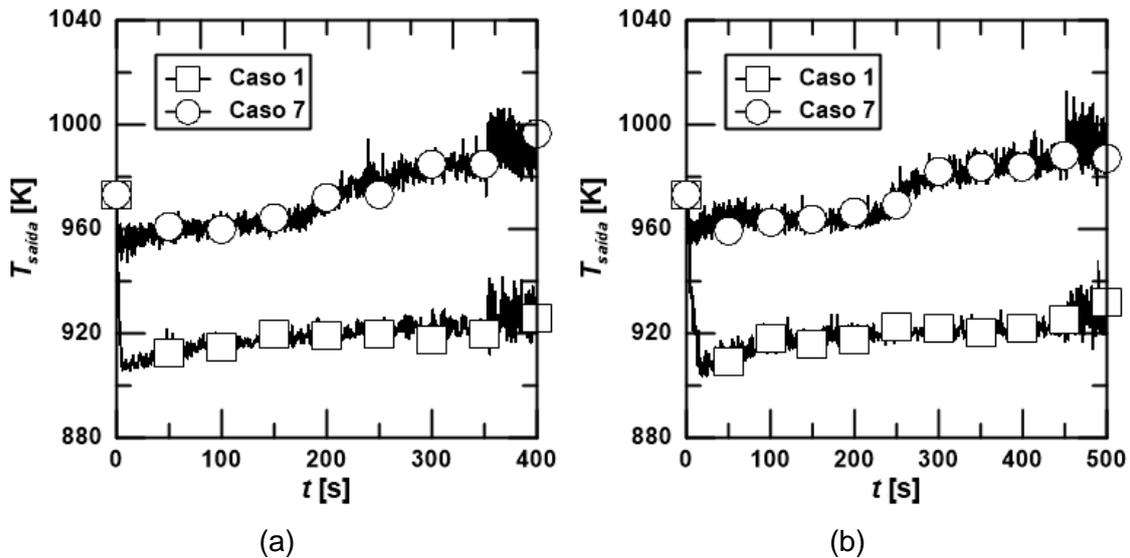


Figura 8.13 - Comportamento da temperatura do gás na saída do reator em função do tempo; a) Procedimento 1; b) Procedimento 2.

Na Tab. 8.2 é avaliada a diferença dos resultados obtidos com os dois procedimentos. Esta tabela mostra que a diferença dos resultados obtidos na saída do gaseificador entre os dois procedimentos para o Caso 1 é inferior ou igual a 1%. No Caso 7 a única diferença relativa que ultrapassa 1% é aquela referente à fração molar de CH_4 , enquanto que no Caso 1 a maior diferença relativa é de 2,6%, como pode ser visto na Tab. 8.2. Logo, pode-se concluir que ambos os procedimentos atingiram o regime de operação estacionário do gaseificador.

Tabela 8.2 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com os dois procedimentos.

Caso	Dif_{r,H2} [%]	Dif_{r,CO} [%]	Dif_{r,CH4} [%]	Dif_{r,CO2} [%]	Dif_{r,Tsaida} [%]	Dif_{r,Tleito} [%]
1	0,2	1,0	0,5	0,2	0,1	0,0
7	0,1	0,7	2,6	0,1	0,2	0,1

Na Fig. 8.14 são mostrados os tempos totais de computação com os dois procedimentos investigados. Esta figura indica que o Caso 1 acarretou em um custo computacional menor do que o Caso 7. Além disso, a Fig. 8.14 também revela que o Procedimento 1 resultou em uma redução do tempo computacional, em comparação com o Procedimento 2. Esta redução foi maior no Caso 1 (em torno de 16%) do que no Caso 7 (em torno de 13%).

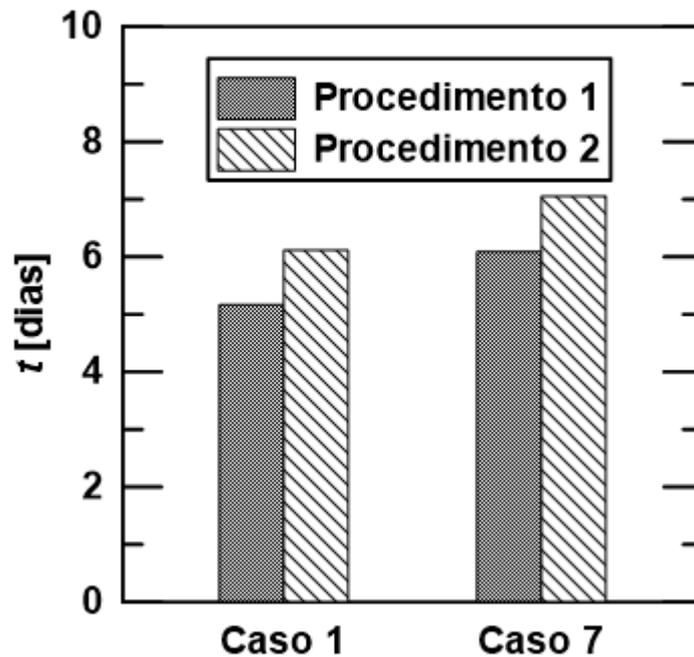


Figura 8.14 - Comparação entre os dois procedimentos testados.

Uma redução entre 13% e 16% do tempo computacional é bastante relevante, principalmente para este tipo de problema com tempos de simulações da ordem de alguns dias. Desta forma, a utilização de simulações preliminares simplificadas como condição inicial é indicada para reduzir o tempo transiente da simulação e, conseqüentemente, o esforço computacional global. Além disso, é possível ainda observar que em situações com menores velocidades de fluidização este procedimento é ainda mais eficiente.

8.3 Avaliação do Impacto da Representação 2D em Regime Estacionário

A comparação entre os resultados transientes obtidos com domínios 2D e 3D, realizada na Seç 8.1, indica um comportamento bastante parecido entre as duas situações. Nesta seção, o objetivo é avaliar a capacidade preditiva de um domínio 2D em regime pseudo-permanente, em comparação com um domínio 3D. Primeiramente, foi realizada a simulação dos Casos 1 e 7, utilizando o Procedimento 1 descrito na Seç. 8.2. Após a conclusão destas simulações, foi verificado que a temperatura do leito estava em torno de 1000 K no Caso 1 e 1050 K no Caso 7. Optou-se por considerar uma temperatura inicial de 1000 K para a simulação tridimensional dos dois casos. Desta forma, foi possível obter resultados próximos do regime estacionário para os Casos 1 e 7, simulando os mesmos 60 s de operação do gaseificador das situações apresentadas na Seç. 8.1. Os resultados das simulações 3D obtidas nessas simulações

são então comparados aos resultados para os Casos 1 e 7 simulados com o domínio 2D.

A Fig. 8.15 mostra que a temperatura do leito nos dois casos ainda não é plenamente estacionária. Contudo, em ambos os casos a temperatura atingida parece estar bem próxima da temperatura do leito no regime estacionário. Comparando a Fig. 8.15 com a Fig. 8.12, é possível observar que no Caso 1 a temperatura do leito nas situações 2D e 3D estão muito próximas. Por outro lado, no Caso 7, a temperatura do leito na situação 2D é cerca de 40 K superior. Esta diferença de temperatura na situação com maior velocidade superficial (Caso 7) já era esperada, uma vez que XIE *et al.* (2008^b) mostraram que a elevação da velocidade dos gases aumenta a importância dos termos não axiais, que são desprezados com a utilização do domínio 2D.

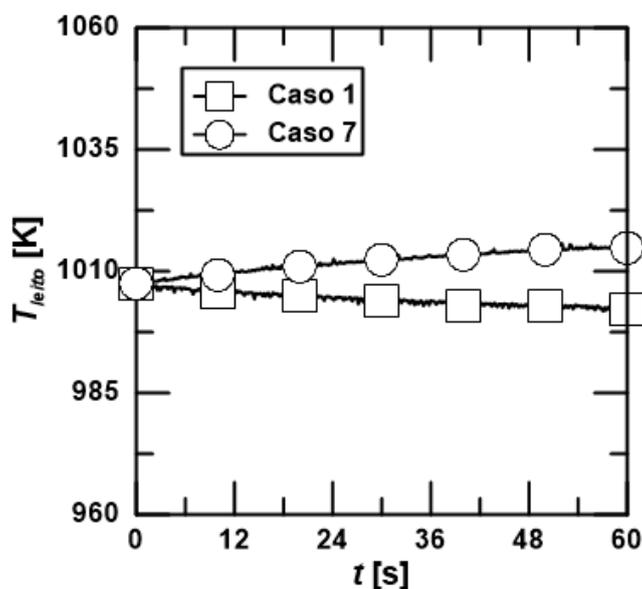


Figura 8.15 - Comportamento da temperatura do leito ao longo do tempo para as simulações 3D.

Na Fig. 8.16 é mostrado o comportamento da temperatura dos gases na saída do reator. Ao contrário da temperatura do leito, a temperatura dos gases de saída parece já ter atingido o regime pseudo-permanente nas duas situações 3D mostradas na Fig. 8.16. Novamente a temperatura final do Caso 1 com uma representação 3D está próxima daquela obtida com uma representação 2D, enquanto que no Caso 7 existe uma diferença em torno de 40 K.

Já na Fig. 8.17 é mostrada a variação temporal das frações mássicas das principais espécies de interesse presentes na saída do gaseificador para os Casos 1 e

7, respectivamente. A Fig. 8.17 revela também que as frações mássicas dos Casos 1 e 7 atingiram o regime pseudo-permanente.

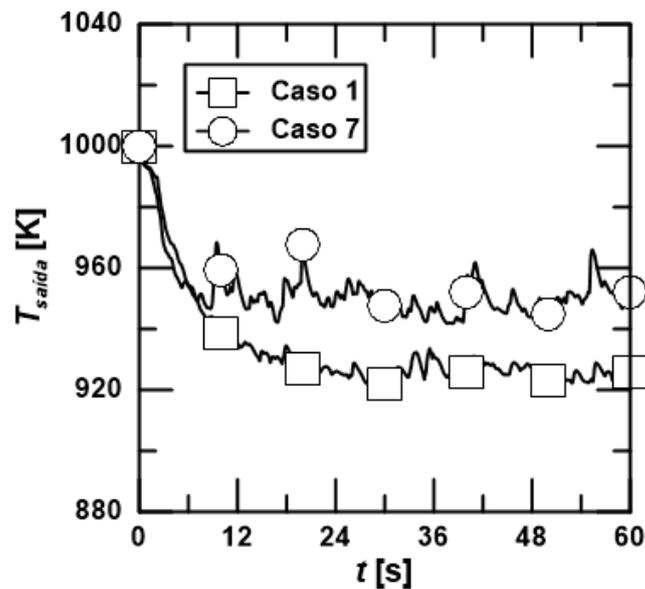


Figura 8.16 - Comportamento da temperatura dos gases na saída do gaseificador ao longo do tempo para as simulações 3D.

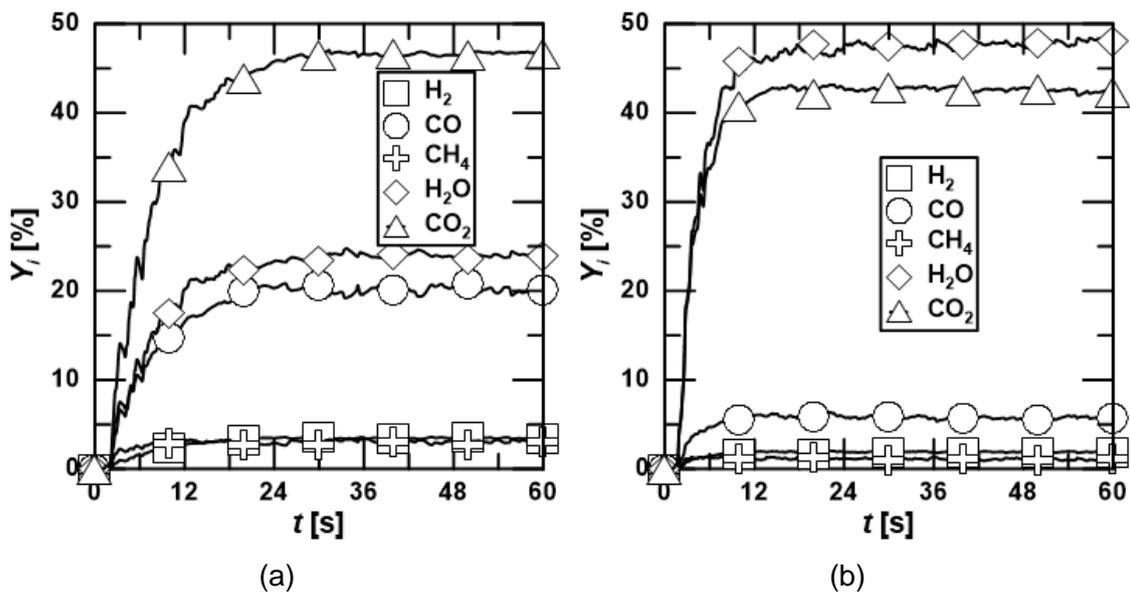


Figura 8.17 - Comportamento das frações mássicas das principais espécies químicas na saída do gaseificador nas situações 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.

Como a fração mássica das espécies químicas das situações simuladas com a representação 3D estão em regime pseudo-permanente, é possível fazer uma comparação da composição dos gases de saída obtidos com as representações 2D e 3D, como mostrado na Tab. 8.3. A diferença relativa entre as frações molares dos gases

mostra que, novamente, as maiores diferenças ocorrem para o Caso 7. Entretanto, com exceção do CH₄, com diferença relativa de 39,0%, e do CO, com diferença relativa de 13,3%, a composição dos gases no Caso 7 com as duas representações não divergem de maneira significativa. No Caso 1, a maior diferença relativa foi de 3,2% para a fração molar de CH₄, mostrando que a representação 2D é extremamente eficaz para prever a composição dos gases produzidos em situações com velocidade superficial dos gases típica de escoamentos fluidizados borbulhantes.

As diferenças mais acentuadas na composição dos gases para o Caso 7 devem estar relacionadas diretamente com a diferença de temperatura no interior do reator. Note que no Caso 7 com representação 3D, a fração molar de CH₄ foi maior do que na representação 2D. É mostrado nas seções subsequentes que a temperatura afeta significativamente a reação de reforma de metano. Logo, como as temperaturas no reator são menores com a representação 3D, a reação de reforma está menos intensa, e uma menor quantidade de CH₄ está sendo consumida.

Tabela 8.3 - Comparação entre a composição dos gases produzidos nos Casos 1 e 7.

	Caso 1 2D	Caso 1 3D	Dif, [%]	Caso 7 2D	Caso 7 3D	Dif, [%]
X _{N2} [%]	0,2	0,2	1,2	0,1	0,1	1,9
X _{H2} [%]	34,1	33,9	0,5	19,7	19,4	1,8
X _{CO} [%]	14,5	14,1	3,2	4,8	4,2	13,3
X _{CH4} [%]	3,9	3,9	1,1	0,8	1,3	39,0
X _{H2O} [%]	25,7	26,3	2,5	55,2	55,0	0,4
X _{CO2} [%]	20,9	21,0	0,1	19,2	19,7	3,0
X _{C6H6} [%]	0,6	0,6	1,9	0,1	0,2	2,5
X _{H2S} [%]	0,1	0,1	1,2	0,1	0,1	1,9

Para avaliar a diferença entre as duas representações sobre o comportamento do leito são analisados os perfis axiais da fração de vazio ao longo do leito e da temperatura dos gases ao longo de todo o gaseificador. Na Fig. 8.18 são mostrados os perfis de fração de vazio no leito das quatro situações investigadas. É possível notar que existe um comportamento semelhante entre as situações 2D e 3D, porém algumas diferenças podem ser observadas. Tanto no Caso 1 quanto no Caso 7 a representação 2D parece induzir uma maior formação de bolhas no leito, fazendo com que a fração de vazio nesta representação seja maior do que aquela obtida com o domínio 3D, até a altura de 50 cm, como pode ser visto na Fig. 8.18. Em relação à altura de expansão do

leito, nos dois casos observados as representações 2D e 3D acarretaram expansões do leito praticamente iguais.

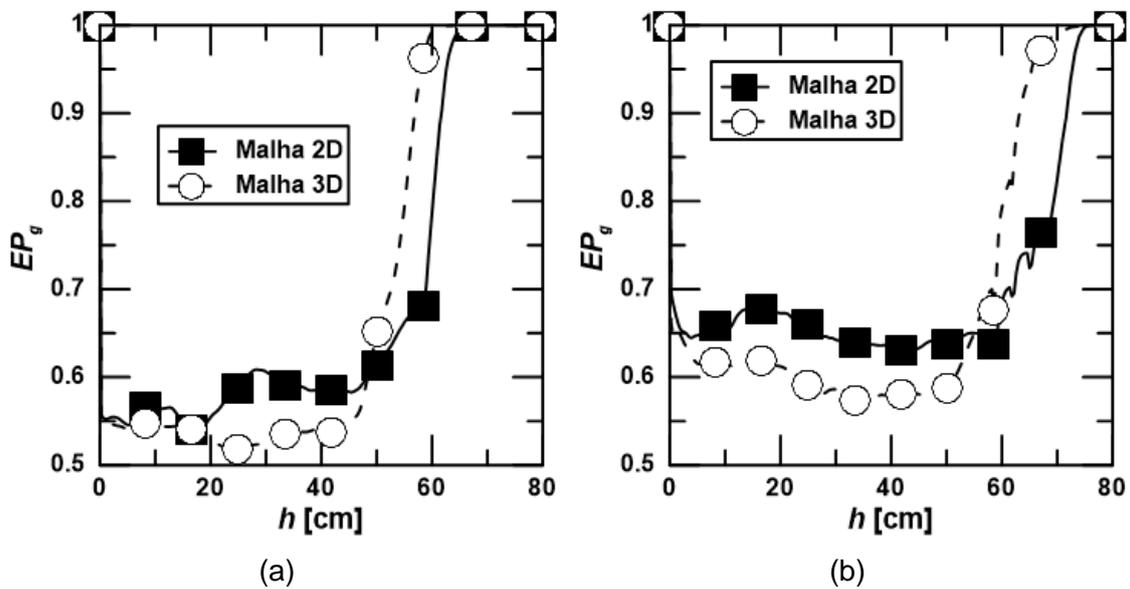


Figura 8.18 - Perfis axiais da fração de vazio ao longo do leito para as representações 2D e 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.

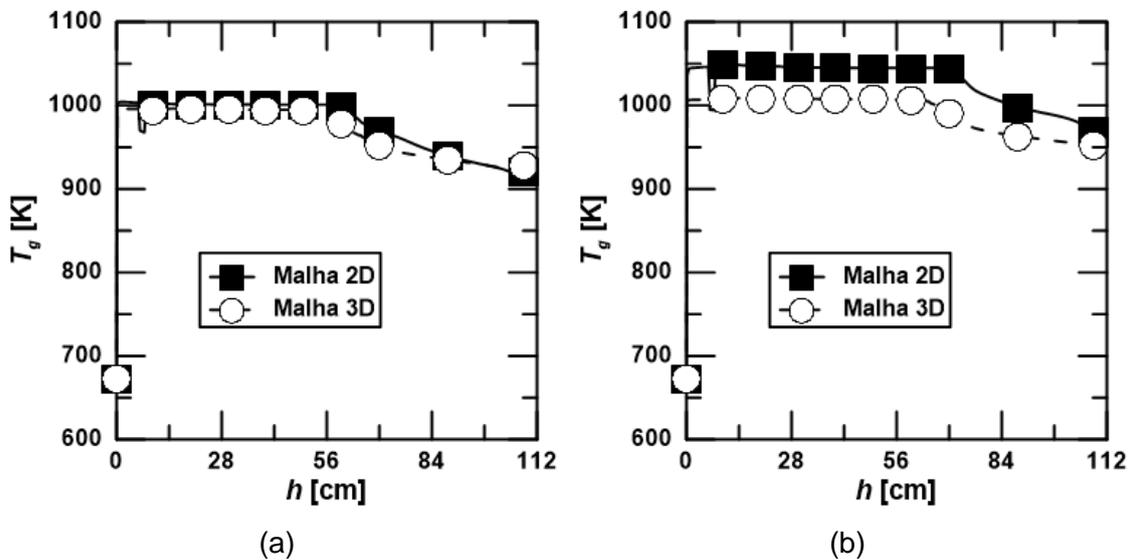


Figura 8.19 - Perfis axiais da fração de vazio ao longo do leito para as representações 2D e 3D; a) Caso 1; b) Caso 7.

Na Fig. 8.19 são mostrados os perfis axiais da temperatura dos gases ao longo do reator. A Fig. 8.19 (a) mostra que o comportamento da temperatura dos gases ao longo do gaseificador no Caso 1 é bem parecido para as duas representações. Os valores da temperatura no Caso 1 também são bastante próximos. Por outro lado, a Fig. 8.19 (b) mostra que a temperatura dos gases ao longo do reator no Caso 7 é menor

na representação 3D, como já havia sido visto nas Figs. 8.15 e 8.16. Em relação aos perfis nas duas representações é possível verificar que eles são qualitativamente bastante parecidos.

Quando a representação 2D é utilizada, existe uma queda na temperatura na região de entrada do combustível sólido, o qual se encontra a uma temperatura menor. Na representação 3D, esta redução de temperatura não é perceptível nos perfis axiais. Outra diferença é em relação à queda de temperatura na região do *freeboard*, a qual é ligeiramente superior na representação 2D do que na 3D, para ambos os casos mostrados na Fig. 8.19.

Apesar da elevada diferença relativa na concentração de CH_4 nos gases produzidos no Caso 7, com maior velocidade superficial dos gases, os resultados indicam uma concordância satisfatória entre as representações 2D e 3D. Principalmente na situação com menor velocidade superficial dos gases, onde os comportamentos dos perfis da fração de vazio e da temperatura são similares nas duas representações e a diferença relativa na composição dos gases é muito pequena, inferior a 3,5% para todos os componentes. O fato de ambas as representações acarretarem em perfis de fração volumétrica de gases e de temperaturas semelhantes e de obterem expansões da altura do leito praticamente iguais mostra que a representação 2D é capaz de descrever corretamente detalhes térmicos e fluidodinâmicos do escoamento. Logo, é possível concluir que informações relevantes acerca do processo de gaseificação em leito fluidizado borbulhante podem ser obtidas através de simulações 2D, principalmente para velocidades superficiais dos gases baixas (menores que a velocidade mínima para a formação de *slugs*).

8.4 Avaliação de Parâmetros Numéricos

Alguns autores (e.g. SYAMLAL, 1997; GUENTHER e SYAMLAL, 2001; MINETO, 2009) já demonstraram que a utilização do método de discretização de primeira ordem FOU não descreve bem o processo de formação de bolhas em escoamentos gás-sólido. Nas Figs. 8.20 e 8.21 é possível observar os campos de fração de vazio, para os Casos 1 e 7, com o método FOU e com o método Superbee. A observação dessas figuras mostra que a difusividade numérica do método FOU não permite que a bolha seja bem definida na simulação, como já observado em GUENTHER e SYAMLAL (2001) e MINETO (2009). Para contornar este problema, esses autores sugerem a utilização de um método de segunda ordem, ou a utilização de malhas extremamente refinadas.

A utilização de malhas muito refinadas acaba ocasionando simulações com um tempo de computação longo e inviável. Logo, a utilização de um esquema de discretização de segunda ordem pode ser vista como a melhor maneira de obter uma representação mais acurada do processo de formação de bolhas. A diferença na representação das bolhas com os dois métodos de discretização, para os Casos 1 e 7, pode ser vista nas Figs. 8.20 e 8.21. A observação destas figuras expõe o mesmo comportamento relatado na literatura, com bolhas bem definidas quando utilizado o método Superbee, enquanto que as fronteiras das bolhas formadas com a utilização do método FOU são de difícil identificação. Também deve ser reportado que a utilização do método Superbee ocasionou uma expansão maior do leito em todas as situações analisadas nesta seção.

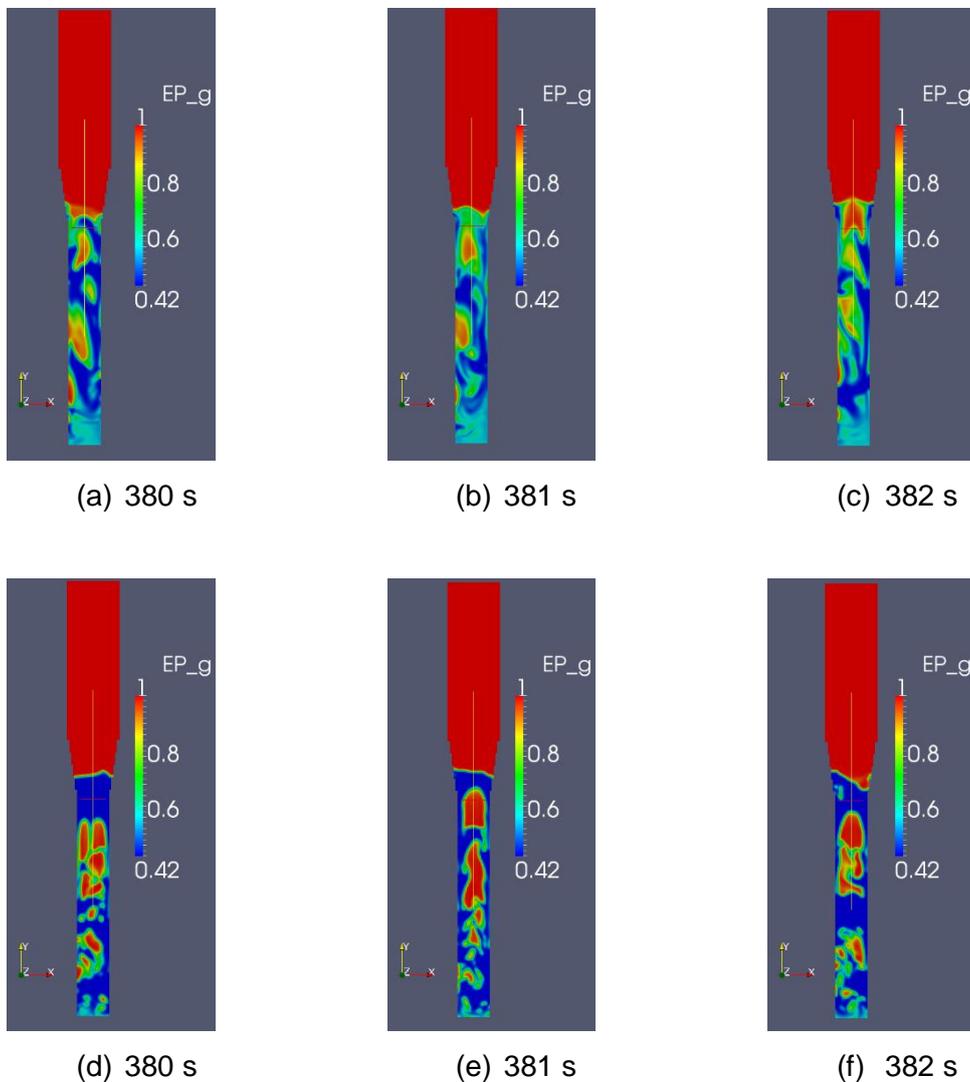


Figura 8.20 – Campos de fração de vazio do reator no Caso 1 em regime estacionário utilizando o método FOU (a, b, c) e o método Superbee (d, e, f).

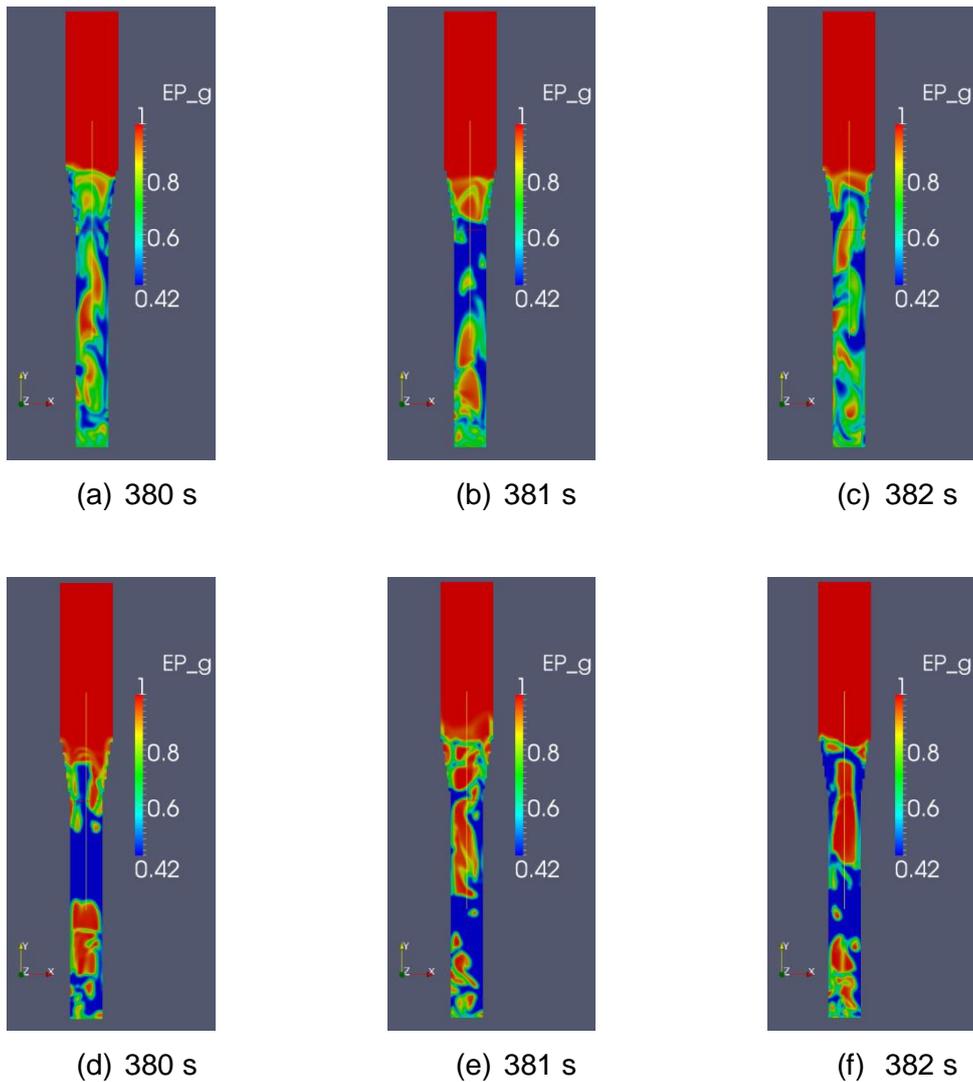


Figura 8.21 – Campos de fração de vazio do reator no Caso 7 em regime estacionário utilizando o método FOU (a, b, c) e o método Superbee (d, e, f).

A Fig. 8.22 mostra as diferenças relativas entre os perfis de fração de vazio obtidos com os métodos FOU e Superbee. Esta figura evidencia a diferença no processo de formação de bolhas com os dois métodos de discretização, principalmente pelas diferenças na região de alimentação de biomassa. A Fig. 8.22 também mostra grandes diferenças relativas na região próxima a 60 cm de altura. Esta é a região de fronteira entre o leito e o *freeboard*. A maior diferença relativa nesta região ocorre devido às diferenças entre as alturas de expansão do leito com os métodos FOU e Superbee.

Deve-se observar que os trabalhos que abordaram as diferenças entre os métodos de discretização de primeira e de segunda ordem consideraram o processo de formação de bolhas sem levar em conta efeitos térmicos e reações químicas. De maneira que não foram encontrados estudos sobre o impacto destes métodos de

discretização sobre a composição dos gases formados e nem sobre a temperatura ao longo do reator.

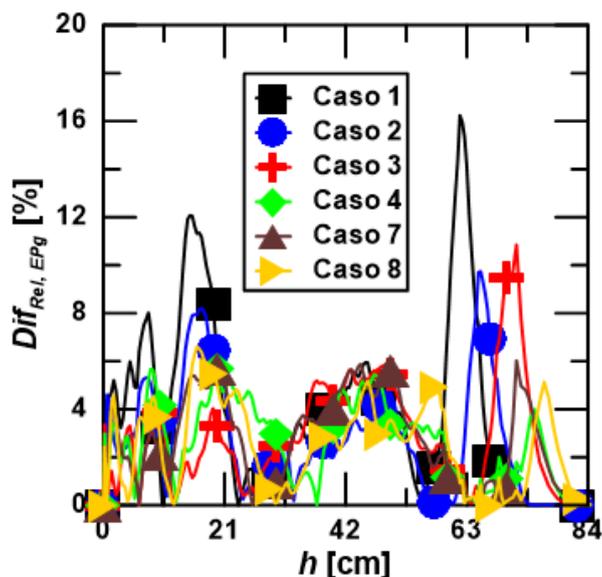


Figura 8.22 - Diferença relativa entre a fração de vazio dos gases obtidas com os métodos FOU e Superbee ao longo do reator.

Na Tab. 8.4 é possível observar a diferença relativa na fração molar de alguns dos gases que saem do reator utilizando os dois métodos. Como é modelado que o N_2 e o H_2S não reagem no interior do gaseificador, nenhum dos dois é apresentado na Tab. 8.4. A observação desta tabela revela que, apesar de elevadas diferenças relativas em relação à fração molar de CH_4 (chegando a 43,2% no Caso 4), a diferença entre os dois métodos de discretização foi bastante pequena, sendo inferior a 5% para os outros componentes.

Tabela 8.4 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com o método FOU e com o método Superbee.

Caso	Dif_{r,H2} [%]	Dif_{r,CO} [%]	Dif_{r,CH4} [%]	Dif_{r,H2O} [%]	Dif_{r,CO2} [%]	Dif_{r,C6H6} [%]
1	0,0	1,0	5,8	2,5	1,0	4,1
2	1,1	1,4	13,5	3,0	3,3	1,3
3	1,0	2,7	1,3	0,8	0,2	1,7
4	0,8	0,5	43,2	1,0	1,4	3,4
7	1,8	1,3	6,0	0,8	0,4	0,2
8	0,6	1,1	41,8	0,4	0,0	2,7

Observando mais atentamente a Tab. 8.4 é possível notar que as maiores diferenças relativas ocorrem para os casos com temperatura de parede de 850 °C

(Casos 2, 4 e 8). É mostrado nas próximas seções que os casos com maior temperatura de parede produzem pequenas quantidades de CH₄ e que as reações de oxidação e de reforma de metano são extremamente sensíveis à temperatura do meio. Logo, como a fração molar de CH₄ é menor nesses casos, como mostrado na Tab. 8.5, as diferenças relativas são maiores.

Tabela 8.5 – Fração molar de CH₄ obtidas com o método FOU e com o método Superbee, e suas respectivas diferenças relativas.

Caso	FOU	Superbee	Dif _{r,CH₄} [%]
1	4,2	4,0	5,8
2	0,5	0,6	13,5
3	2,1	2,1	1,3
4	0,2	0,2	43,2
7	0,9	0,9	6,0
8	0,0	0,0	41,8

A Fig. 8.23 mostra as diferenças relativas entre os dois métodos de discretização sobre a fração molar das principais espécies químicas formadas no gaseificador. A análise começa na altura de 35 cm, pois nas regiões próximas à condição de contorno de entrada de biomassa as frações molares das espécies analisadas são muito pequenas, ocasionando diferenças relativas muito elevadas. A análise das diferenças relativas ao longo do gaseificador é uma maneira de avaliar o quanto a escolha do método de discretização influencia o comportamento das frações molares no interior do gaseificador.

Observando a Fig. 8.23, é possível notar uma pequena diferença relativa ao longo do reator (< 6%), com exceção da diferença referente à fração molar de CH₄. Também é possível observar que, de maneira geral, as diferenças relativas na região do *freeboard* são menores do que na região do leito. Além disso, a Fig. 8.23 (d) mostra que as diferenças relativas da fração molar de H₂ apresentam um pico na região de transição entre o leito e o *freeboard*. Em relação às frações molares dos demais componentes representados na Fig. 8.23, este comportamento não é observado. Este pico pode ser causado pela diferença nas taxas das reações homogêneas na região do leito e na região do *freeboard*. Como a altura de expansão do leito é influenciada pelo método de discretização utilizado, a diferença nas taxas das reações aumenta na região de transição. O fato de apenas a fração molar de H₂ apresentar este pico indica que o H₂ sofre uma influência maior das reações homogêneas do que os demais componentes.

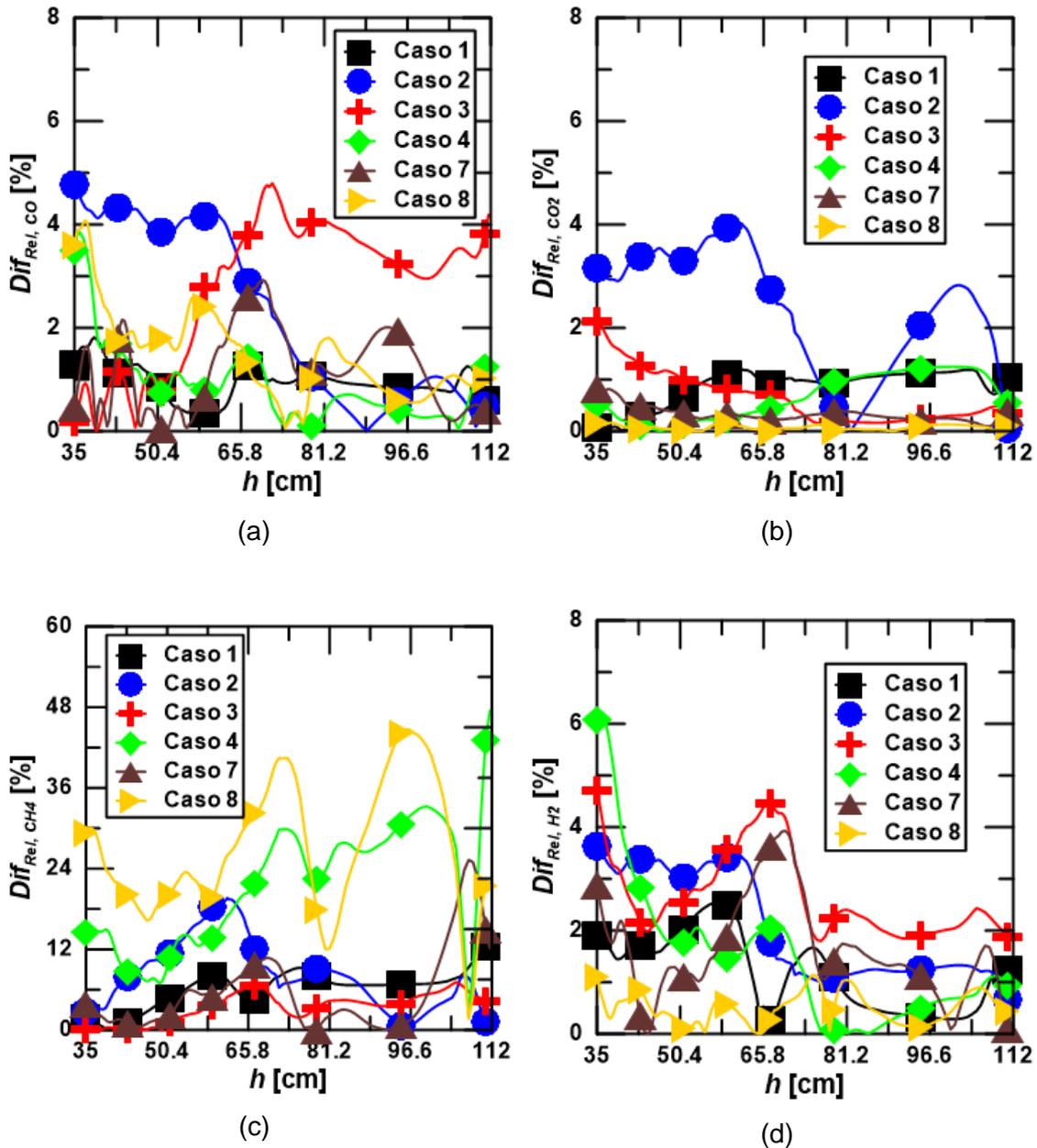


Figura 8.23 – Diferenças relativas das frações molares dos quatro principais componentes formados, com os métodos FOU e Superbee; a) CO; b) CO₂; c) CH₄; d) H₂.

A influência do método de discretização sobre a temperatura dos gases pode ser visualizada na Fig. 8.24, onde é mostrada a diferença relativa entre as temperaturas dos gases obtidas com os métodos FOU e Superbee ao longo do reator. Observando a Fig. 8.24, é possível notar que, com exceção dos Casos 7 e 8, a diferença relativa aumenta na região do *freeboard*. Comparando as Figs. 8.23 e 8.24 é possível observar que mesmo com diferenças relativas de temperatura maiores na região do *freeboard* no Caso 2, as diferenças relativas referentes às frações molares das espécies químicas são menores nesta região.

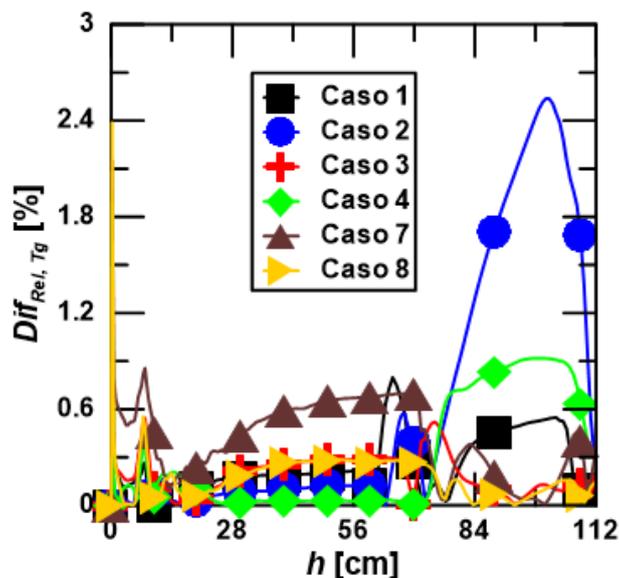


Figura 8.24 – Diferença relativa das temperaturas dos gases obtidas com os métodos FOU e Superbee ao longo do reator.

Embora pequenas, as diferenças de temperatura ocasionadas pelo método de discretização influenciam significativamente a concentração de CH_4 nos gases de saída. A Fig. 8.24 mostra que a diferença relativa entre a temperatura obtida com os dois métodos de discretização é maior no Caso 2. Deve-se notar que o Caso 2 foi a única situação na qual a fração molar de CH_4 foi maior quando o método Superbee foi utilizado, como mostrado na Tab. 8.5.

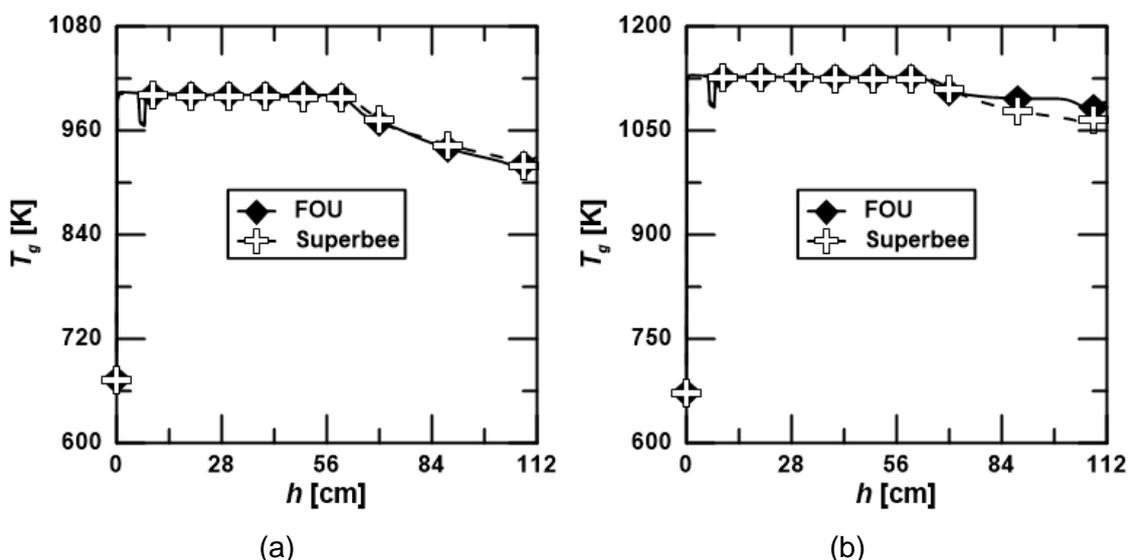


Figura 8.25 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 1; b) Caso 2.

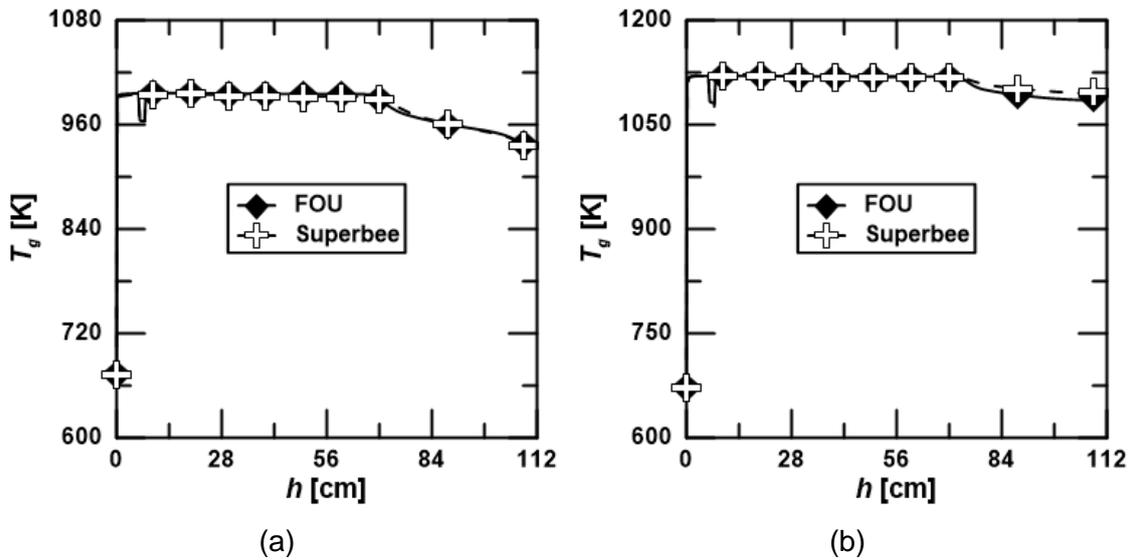


Figura 8.26 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 3; b) Caso 4.

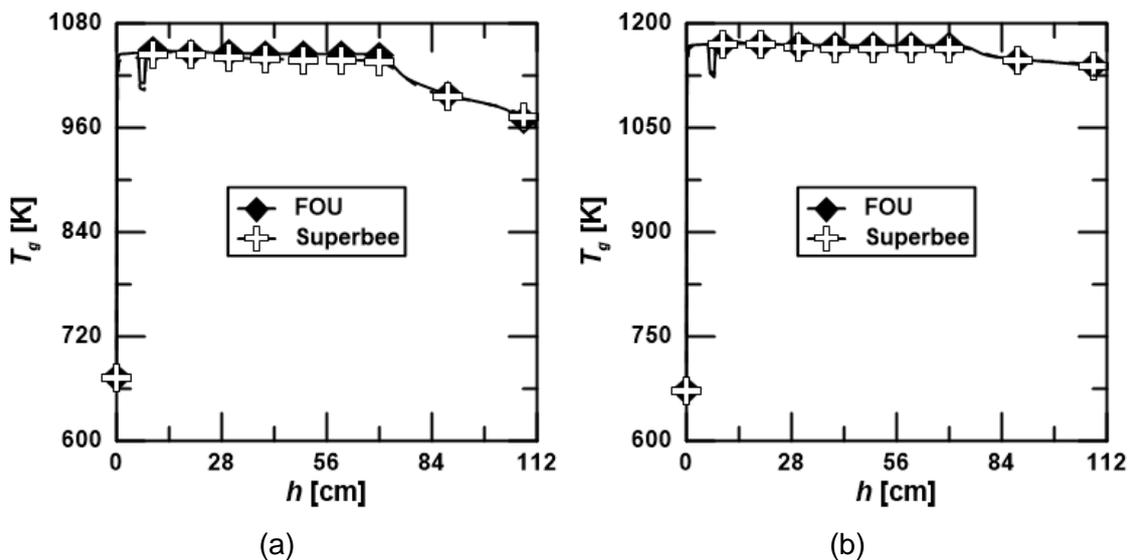


Figura 8.27 – Perfis axiais de temperatura do gás com diferentes métodos de discretização; a) Caso 7; b) Caso 8.

Observando os perfis de temperatura mostrados nas Figs. 8.25 - 8.27 é possível notar que o Caso 2 é o único no qual o método FOU acarreta em uma temperatura maior em toda a região do *freeboard*. Como a reação de reforma do metano é extremamente sensível à temperatura do meio, esta pequena diferença de temperatura parece estar ocasionando, nesta situação específica, a diferença na fração molar de CH_4 .

A Tab. 8.6 mostra os valores das diferenças relativas das frações molares dos componentes do gás na saída do gaseificador em regime estacionário entre os dois grupos de tolerâncias analisados. De maneira geral, a Tab. 8.6 revela que o aumento da tolerância dos resíduos não provoca grandes alterações na composição do gás

produzido. Com exceção das diferenças relativas referente às frações molares de CO, de C₆H₆ e de CH₄ no Caso 8, respectivamente, 6,1%, 8,1% e 23,7%. As diferenças relativas dos demais casos foram inferiores a 6%.

Tabela 8.6 – Diferenças relativas entre os resultados obtidos com diferentes tolerâncias.

Caso	Dif_{r,H2} [%]	Dif_{r,CO} [%]	Dif_{r,CH4} [%]	Dif_{r,H2O} [%]	Dif_{r,CO2} [%]	Dif_{r,C6H6} [%]
1	0,1	1,5	1,7	1,2	0,1	1,7
2	0,4	1,6	4,0	1,9	0,9	1,8
3	1,2	3,8	1,6	1,4	0,9	5,3
4	0,2	1,1	2,4	0,4	0,1	1,9
7	1,8	2,1	3,7	1,8	0,8	5,9
8	3,6	6,1	23,7	2,5	0,5	8,1

As diferenças entre os perfis de temperaturas obtidos com os dois grupos de tolerâncias foram ainda menores do que a diferença encontrada na comparação entre os métodos FOU e Superbee. Entretanto, deve-se relatar que o uso de tolerâncias mais apertadas provocou uma expansão maior do leito nos seis casos analisados nesta seção.

As comparações de parâmetros numéricos mostram que a escolha do método de discretização e a utilização de valores reduzidos das tolerâncias dos resíduos afetam apenas suavemente a temperatura dos gases no reator e a composição dos gases na saída do reator, de maneira geral. A diferença relativa para a maioria dos parâmetros investigados é menor do que 6%. A única exceção é a fração molar de CH₄ que acaba sendo mais influenciada do que os demais parâmetros do escoamento pelos fatores numéricos. Além disso, a altura de expansão do leito também é influenciada pelos parâmetros numéricos investigados.

Como as diferenças relativas da fração molar de CH₄ atingiu valores superiores a 10% em todas as situações com temperatura de parede elevadas e devido às diferenças na altura de expansão do leito, é recomendável a utilização de um método de segunda ordem para a realização de simulações com temperaturas acima dos 800 °C. No entanto, a utilização de tolerâncias mais apertadas pode não ser tão decisiva, em relação à composição dos gases na saída. Deve-se lembrar que a utilização de tolerâncias menores, assim como de métodos de segunda ordem, eleva o esforço computacional das simulações.

Por outro lado, os resultados desta seção também indicam que análises sobre o comportamento das grandezas do escoamento no leito exige a utilização tanto de métodos de discretização de segunda ordem, como de tolerâncias mais apertadas, principalmente devido às diferenças na altura de expansão do leito. Para reduzir o tempo de computação o regime transiente do escoamento é realizado com o método FOU e com as tolerâncias padrão do MFIX. Apenas a parte final da simulação é realizada com o método Superbee e tolerâncias menores. Esta é uma estratégia eficiente de se obter resultados com boa acurácia em tempos muito menores.

8.5 Análise da Gaseificação de Bagaço com Misturas de Oxigênio e Vapor

Nesta seção é realizada a análise da gaseificação do bagaço de cana para diferentes misturas de O_2 e vapor. As dez situações investigadas são mostradas na Tab. 7.2. A análise foi dividida em três partes. A primeira referente ao comportamento térmico e fluidodinâmico do leito de inertes. A segunda avalia a composição dos gases formados em cada uma das simulações, assim como a qualidade e a quantidade de gás de síntese formado. Por fim, na terceira parte, a contribuição de cada uma das reações modeladas é avaliada para investigar os efeitos do oxigênio, do vapor de água e da temperatura do leito sobre as reações e os gases formados.

8.5.1 Análise termofluidodinâmica

O comportamento fluidodinâmico do leito do reator pode ser observado na Fig. 8.28. As Figs. 8.28 (a) e (b) mostram os perfis de fração de vazio das situações com temperaturas de parede correspondentes a, respectivamente, 973 K e 1123 K. Analisando essas figuras, é possível ver que a extensão do leito é significativamente diferente de um caso para outro. Além disso, os resultados sugerem que a temperatura do leito possui uma grande influência sobre o seu comportamento. Comparando os casos de mesma vazão de agente gaseificador observa-se que com o aumento da temperatura do leito ocorre uma expansão maior do leito de inertes.

As vazões de agente gaseificador também afetam o comportamento do leito, uma vez que o aumento da vazão eleva a velocidade superficial dos gases. As oscilações da curva de fração de vazio após a altura de 60 cm, para os casos com maior vazão, indicam um padrão de escoamento pistonado, como mostrado em XIE *et al.* (2008^a). Também é importante observar que esta diferença do comportamento do leito pode alterar as taxas de mistura e de reações no leito, o que torna mais difícil

fazer uma análise apenas da influência das quantidades de O_2 e de vapor no agente gaseificador.

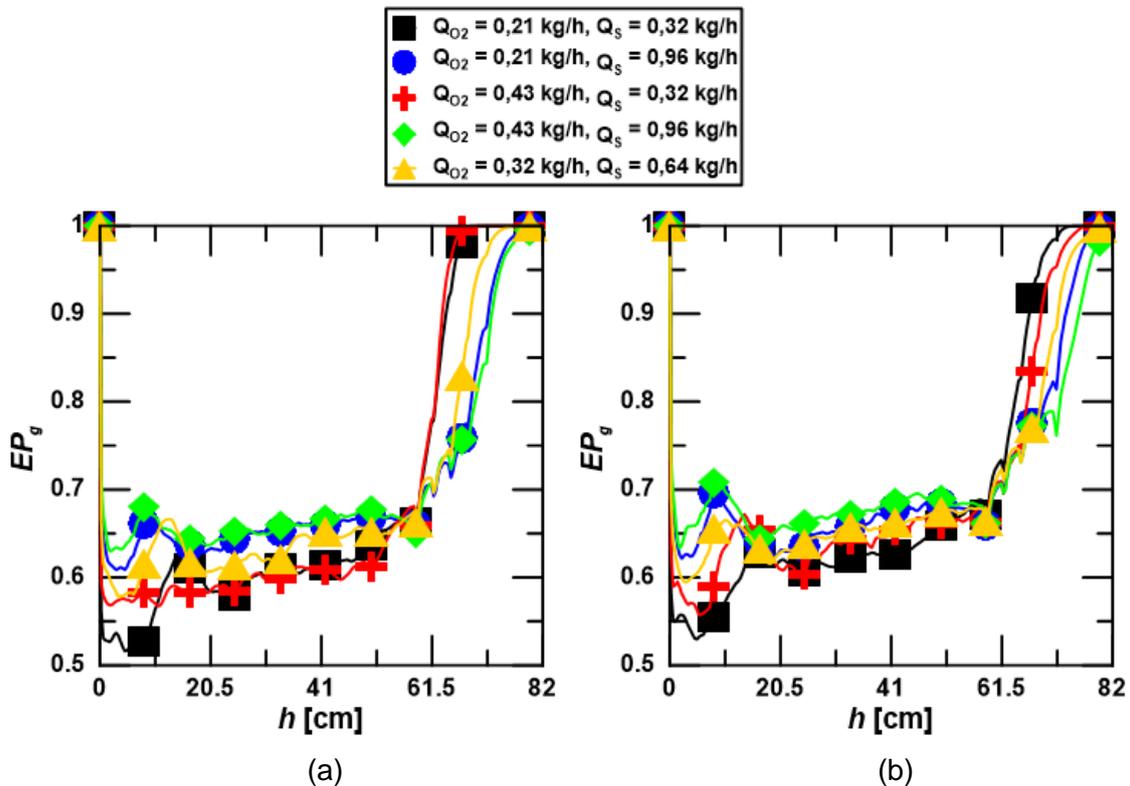
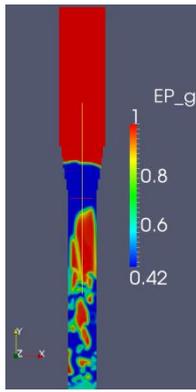
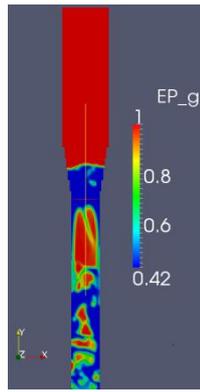


Figura 8.28 - Perfis axiais da fração de vazio no interior do gaseificador; a) T_{parede} de 973 K; b) T_{parede} de 1123 K.

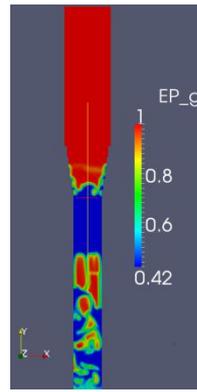
Na Fig. 8.29 estão representados os campos de fração de vazio para alguns dos casos simulados, em determinados instantes de tempo. Apenas os Casos 2, 4, 6, 8 e 10 estão representados nestas figuras, pois os casos com mesma vazão de agente gaseificador possuem um comportamento do leito semelhante. Observando a Fig. 8.29 é possível notar que, nos casos 4 e 10, o escoamento aparenta estar em regime de transição entre o borbulhante e o pistonado. Estas suposições se baseiam na alternância entre bolhas alongadas ocupando praticamente todo o diâmetro do leito, típicas do escoamento pistonado, e bolhas menores, comuns no escoamento borbulhante. No Caso 8, que possui a maior vazão de agente gaseificador e, portanto, a maior velocidade superficial, é possível observar bolhas muito grandes estourando na região do *freeboard*, Fig. 8.29 (n - q). Este padrão de formação de bolhas, típico de regimes de escoamento pistonado, colabora com o aumento da instabilidade no gaseificador, podendo gerar situações de vibrações indesejadas durante sua operação (FAN e ZU, 1998).



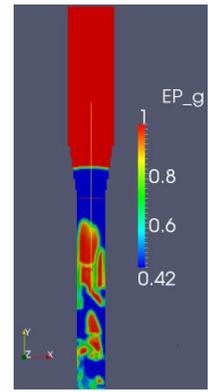
(a) Caso 2, 400s.



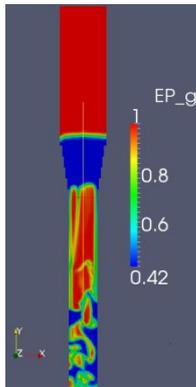
(b) Caso 2, 420s.



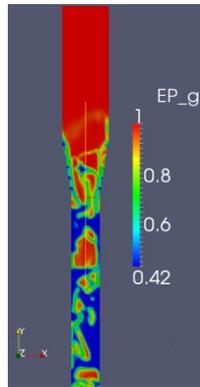
(c) Caso 2, 440s.



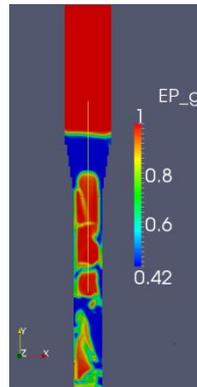
(d) Caso 2, 450s.



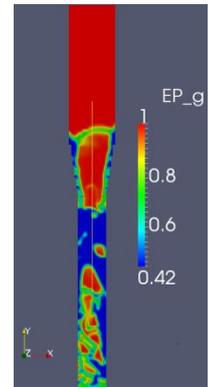
(e) Caso 4, 400s.



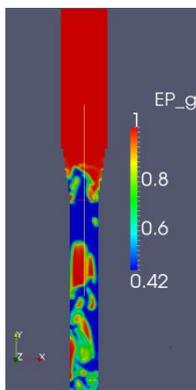
(f) Caso 4, 420s.



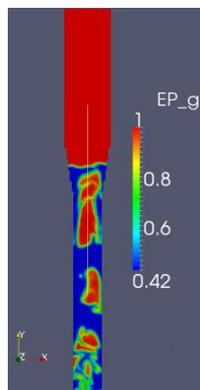
(g) Caso 4, 440s.



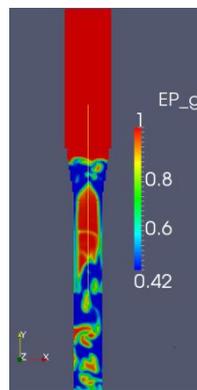
(h) Caso 4, 450s.



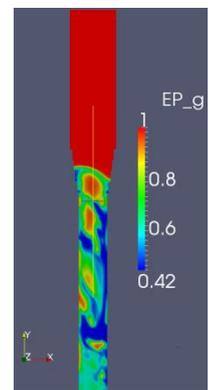
(i) Caso 6, 400s.



(j) Caso 6, 420s.



(l) Caso 6, 440s.



(m) Caso 6, 450s.

Figura 8.29 - Campos de fração de vazio para diferentes casos.

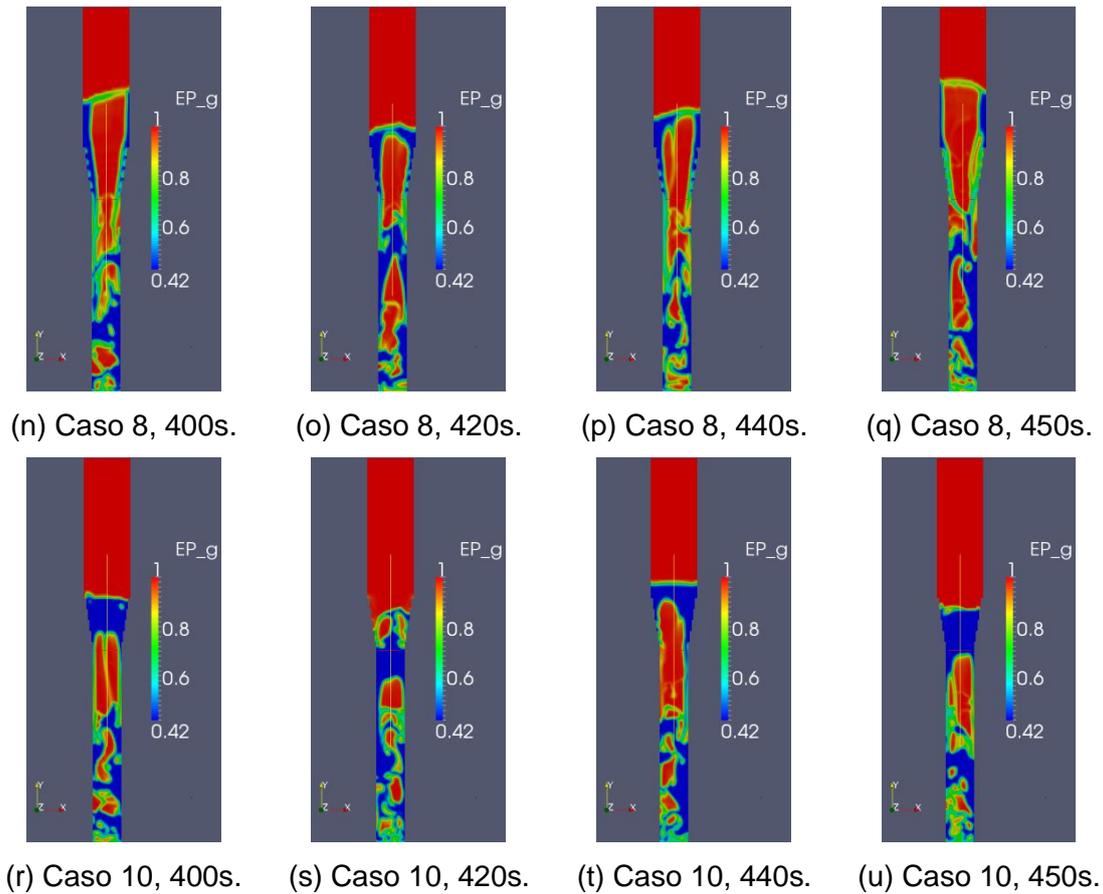


Figura 8.29 - Campos de fração de vazio para diferentes casos (Continuação).

Observando os perfis de temperatura na Fig. 8.30, é possível notar que os casos com maior vazão de O_2 ocasionaram temperaturas maiores no leito. Além disso, para uma mesma vazão de oxigênio, as temperaturas do leito foram ligeiramente superiores nas situações em que a vazão de vapor foi de 0,96 kg/h. Por outro lado, na região do *freeboard* as temperaturas das situações com vazão de vapor de 0,96 kg/h foram maiores. Este comportamento pode ser explicado observando as Figs. 8.28 (a) e (b), e notando que a região do leito está mais expandida nos casos com maior vazão de vapor (0,96 kg/h), para uma mesma temperatura de parede e vazão de O_2 . Logo, os gases nestas situações permanecem com as elevadas temperaturas do leito até uma altura maior do que nos casos com menor vazão de vapor (0,32 kg/h). Além disso, a velocidade com que os gases entram no *freeboard* também aumenta, o que reduz o seu tempo de permanência na região do *freeboard*.

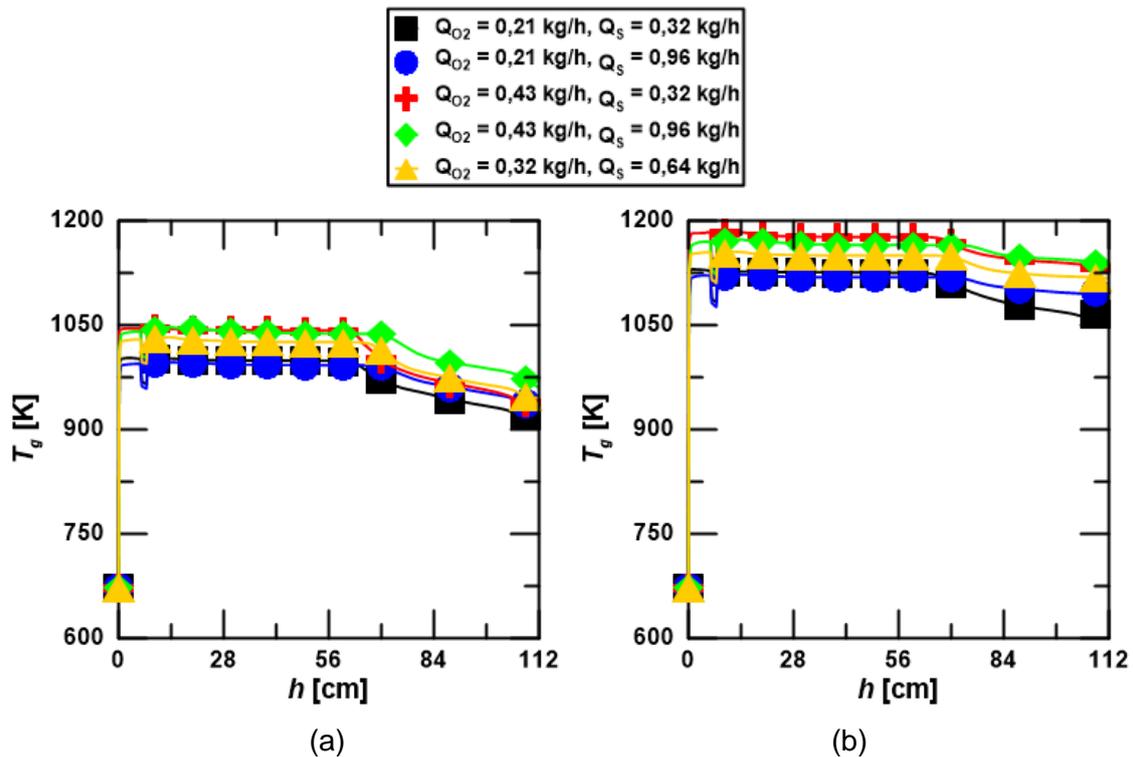


Figura 8.30 - Perfis axiais da temperatura dos gases ao longo do eixo vertical do gaseificador; a) T_{parede} de 973 K; b) T_{parede} de 1123 K.

8.5.2 Composição dos gases produzidos

A composição do gás produzido, em fração molar, para todos os casos é mostrada na Tab. 8.7. A observação desta tabela torna possível uma avaliação da influência da vazão de O_2 , da vazão de vapor de água e da temperatura do leito sobre a composição do gás produzido.

A Tab. 8.7 mostra uma forte influência da temperatura do leito sobre a composição dos gases produzidos. Com a elevação da temperatura, ocorre um aumento da produção de H_2 e de CO , enquanto que as quantidades produzidas de CH_4 , de água, de CO_2 e de alcatrão sofrem redução. Pode-se ainda verificar que a menor produção de CO ocorreu nos casos em que a vazão de vapor foi máxima, o que indica uma influência inibidora da água em relação à produção de CO . O mesmo pode ser dito em relação ao aumento da vazão de O_2 sobre a quantidade de H_2 produzida.

Em relação ao CH_4 , um aumento de temperatura reduz significativamente a quantidade de CH_4 no gás produzido. Esta tendência é ocasionada pelo aumento da reação de reforma de metano no leito do gaseificador, como será detalhado adiante. Entretanto, o aumento do teor de O_2 também parece influenciar significativamente a quantidade de CH_4 produzida. Este comportamento pode estar ligado à intensificação

da reação de combustão de metano no leito com o aumento da vazão de oxigênio injetada. Esta influência também será discutida na seção referente à análise das taxas das reações.

A quantidade de água presente no gás também é reduzida com o aumento da temperatura. A razão para este padrão parece estar vinculada à intensificação da reação de reforma de metano. O aumento da vazão de O_2 injetado tem influência contrária ao da temperatura, aumentando a quantidade de água presente na saída do reator.

Tabela 8.7 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator.

Caso	X_{N_2} [%]	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH_4} [%]	X_{H_2O} [%]	X_{CO_2} [%]	$X_{C_6H_6}$ [%]	X_{H_2S} [%]
1	0,2	34,1	14,5	3,9	25,7	20,9	0,6	0,1
2	0,2	39,1	23,6	0,6	21,7	14,4	0,2	0,1
3	0,1	25,1	4,8	2,0	50,8	16,7	0,3	0,1
4	0,1	29,6	9,2	0,2	46,4	14,3	0,1	0,1
5	0,2	26,8	12,9	2,2	31,8	25,7	0,3	0,1
6	0,2	27,8	19,7	0,0	32,5	19,6	0,1	0,1
7	0,1	19,7	4,7	0,8	55,2	19,2	0,1	0,1
8	0,1	21,0	7,9	0,0	53,9	17,0	0,1	0,1
9	0,1	27,0	8,0	1,6	42,4	20,5	0,3	0,1
10	0,1	30,0	13,7	0,1	39,6	16,7	0,1	0,1

Em relação à fração molar de H_2 , o comportamento normalmente encontrado na literatura (GIL *et al.* 1999) é de um aumento na quantidade de H_2 formado com o aumento da vazão de vapor. À primeira vista o comportamento das frações molares de H_2 pode parecer diferente do usualmente encontrado na literatura. Entretanto, deve-se observar que os dados apresentados em trabalhos experimentais apresentam apenas a composição dos gases em base seca e livre de alcatrão. A Tab. 8.8 mostra a composição do gás formado na base encontrada na literatura. Observando a Tab. 8.8 é possível verificar que o comportamento das frações molares de H_2 é semelhante ao encontrado em GIL *et al.* (1997) e GIL *et al.* (1999) para a gaseificação de madeira de pinheiro, com um aumento da fração molar de H_2 acompanhado o aumento da vazão de vapor.

A avaliação da influência da razão de gaseificação, e da razão entre o número de mols de O_2 e de vapor inseridos no reator é realizada através da observação da

Tab. 8.9. Esta tabela mostra a quantidade de gás de síntese formado (H_2+CO), a razão H_2/CO e o PCI do gás produzido em cada caso.

Observando a Tab. 8.9 e comparando os casos com a mesma quantidade de vapor com vazões de oxigênio diferentes, é possível observar que com o aumento da vazão de oxigênio o PCI do gás produzido reduz significativamente. Este comportamento é igual ao observado por outros autores (e.g. GIL *et al.*,1997; GIL *et al.*,1999; CASTELLANOS, 2012), e pode ser justificado pela intensificação da queima de gases com PCI útil.

Tabela 8.8 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator, em base seca e livre de alcatrão.

Caso	X_{H2}	X_{CO}	X_{CH4}	X_{CO2}
1	46,3	20,0	5,4	28,4
2	50,2	30,7	0,8	18,3
3	51,5	10,2	4,2	34,2
4	55,4	17,5	0,3	26,8
5	39,7	19,1	3,2	38,0
6	41,5	29,3	0,0	29,2
7	44,5	10,8	1,9	42,8
8	46,0	17,8	0,0	36,1
9	47,2	14,0	2,8	35,9
10	49,3	22,9	0,1	27,7

Ainda na Tab. 8.9, é possível observar a aparente dualidade entre a quantidade de gás de síntese produzida e a qualidade do gás de síntese, relatada em WANG e YAN (2009). Ou seja, nos casos em que a quantidade de gás de síntese (H_2+CO) formada é maior a relação entre a quantidade de hidrogênio e de monóxido de carbono (H_2/CO) é menor. A Tab. 8.9 também mostra que o aumento da temperatura provoca um aumento na quantidade de gás de síntese liberado e, seguindo a dualidade qualidade-quantidade, uma redução da razão H_2/CO .

A Tab. 8.9 indica que o aumento da vazão de água parece reduzir a quantidade de gás de síntese produzida. A Tab. 8.8 mostra que o aumento da quantidade de vapor reduziu a quantidade de CO produzida e elevou a quantidade de H_2 produzida. Contudo, mesmo com o aumento da quantidade de H_2 produzido a quantidade de gás de síntese foi reduzida em torno de 10%, como pode ser visto comparando os Casos 1 e 3 com os Casos 2 e 4, e os Casos 5 e 7 com os Casos 6 e 8. A razão H_2/CO também sofre uma

grande influência da vazão de vapor inserida no reator, com um aumento de praticamente 50% com o aumento da vazão de vapor de 0,32 kg/h (Casos 1, 2, 5 e 6) para 0,96 kg/h (Casos 3, 4, 7 e 8).

Tabela 8.9 - Parâmetros que avaliam a qualidade do gás produzido e a razão de gaseificação de cada caso.

Caso	GR	X_{H_2O}/X_{O_2}	PCI (MJ/kg)	H₂+CO	H₂/CO
1	0,66	2,71	10,65	66,3	2,32
2	0,66	2,71	12,08	80,9	1,64
3	1,46	8,13	9,55	61,7	5,07
4	1,46	8,13	10,41	72,9	3,17
5	0,94	1,32	7,53	58,8	2,08
6	0,94	1,32	9,68	70,8	1,41
7	1,74	3,97	6,13	55,3	4,14
8	1,74	3,97	7,43	63,8	2,58
9	1,20	3,56	8,36	61,3	3,36
10	1,20	3,56	9,43	72,2	2,16

O aumento da vazão de O₂ ocasiona uma tendência inversa àquela do aumento de vazão de vapor em relação à razão H₂/CO, com a redução deste parâmetro. Além disso, existe uma redução da quantidade de gás de síntese produzida, como pode ser concluído comparando os Casos 1 e 2 com os Casos 5 e 6, e os Casos 3 e 4 com os Casos 7 e 8.

O fato da razão H₂/CO aumentar junto com o aumento da razão molar entre o vapor e o O₂ inseridos no reator mostra que este parâmetro exerce uma influência maior sobre a razão H₂/CO do que a razão de gaseificação. Esta tendência também foi encontrada por GIL *et al.* (1997). A Tab. 8.9 mostra ainda que nos casos com razão de gaseificação e razão H₂O/O₂ iguais, com temperaturas de parede diferentes, a razão H₂/CO foi maior nos casos de menor temperatura (973 K). Este comportamento é o inverso do comportamento encontrado por GIL *et al.* (1997), mas está de acordo com a tendência encontrada por WANG e YAN (2008^b) e WANG e YAN (2009), para gaseificação de resíduo de esgoto.

Em WANG e YAN (2008^b), os autores identificam que tanto a quantidade de CO, como a de H₂, aumentam com o aumento da temperatura do leito, devido à intensificação das reações de Bouduard, de reforma de metano e de gaseificação com vapor. Além disso, eles afirmam que a queda da razão H₂/CO ocorre devido a um aumento maior da quantidade de CO produzida, ocasionado pela reação de Bouduard.

Na próxima subseção os efeitos das vazões de vapor e de oxigênio, assim como da temperatura de parede sobre a composição e a qualidade dos gases produzidos, mostrados nas Tabs. 8.8 e 8.9, são analisados de maneira mais detalhada.

8.5.3 Análise da contribuição das reações modeladas

Para auxiliar no estudo da influência das vazões de agente gaseificante e da temperatura de parede sobre a composição dos gases produzidos, a contribuição percentual de cada reação para a formação e consumo das principais espécies investigadas é realizada. Esta análise percentual foi realizada utilizando os valores dos termos fontes das equações de espécies químicas. Foram calculadas as contribuições de cada reação para o termo fonte das principais espécies químicas e, em seguida, foi obtida a contribuição percentual de cada uma das reações de gaseificação e de oxidação para a formação e consumo das espécies investigadas.

O primeiro parâmetro investigado é a vazão mássica de oxigênio inserida no reator. A Tab. 8.8 mostra que o aumento da vazão mássica de O_2 reduz a concentração molar de H_2 e de CH_4 nos gases produzidos, e aumenta a concentração molar de CO_2 . Na literatura este comportamento é normalmente associado com a intensificação das reações de oxidação homogêneas (e.g. GIL *et al.*, 1997; LV *et al.*, 2004). Entretanto, as reações homogêneas de gaseificação (reação de deslocamento de água e reação de reforma de metano) parecem também exercer uma influência significativa sobre as concentrações molares dos gases investigados.

Na Fig. 8.31 é mostrada a contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO_2 . Esta figura mostra que a reação de oxidação de monóxido de carbono é a mais importante reação para a produção de CO_2 , seguida pelas reações de oxidação de *char* e de metano, exceto para os Casos 1, 3 e 4. Nesses três casos específicos a reação de deslocamento de água avançada é dominante, e contribui mais para a produção de CO_2 do que as reações de oxidação de *char* e de metano.

As Figs. 8.32 (a) e (b) mostram os perfis axiais da taxa da reação de deslocamento de água para as situações investigadas com temperaturas de parede de 973 K e 1123 K, respectivamente. É possível observar que a taxa da reação de deslocamento de água é positiva ao longo de toda a região do leito do gaseificador apenas nos Casos 1, 3 e 4, o que significa que a reação de deslocamento de água avançada é maior do que a taxa reversa nesta região. Para as demais situações, as taxas da reação de deslocamento de água são negativas na região do leito (Fig. 8.32). Logo, para os demais casos (2, 5, 6, 7, 8, 9 e 10) a reação de deslocamento de água

reversa é dominante no leito. Por outro lado, na região do *freeboard* as taxas da reação de deslocamento de água foram positivas e próximas a zero em todas as situações estudadas (Fig. 8.32).

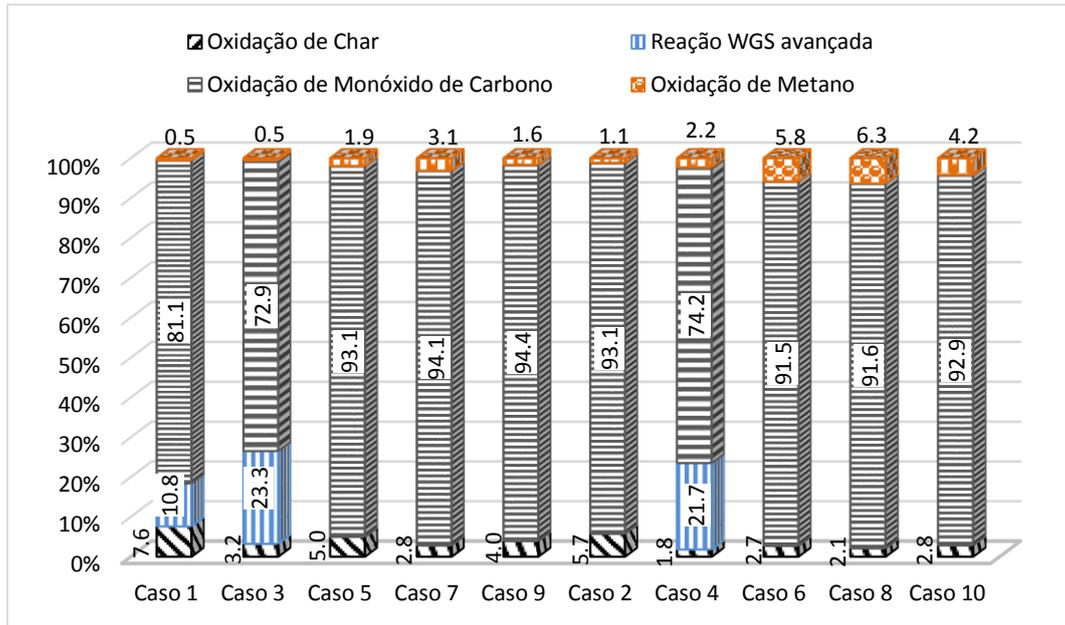


Figura 8.31 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO₂.

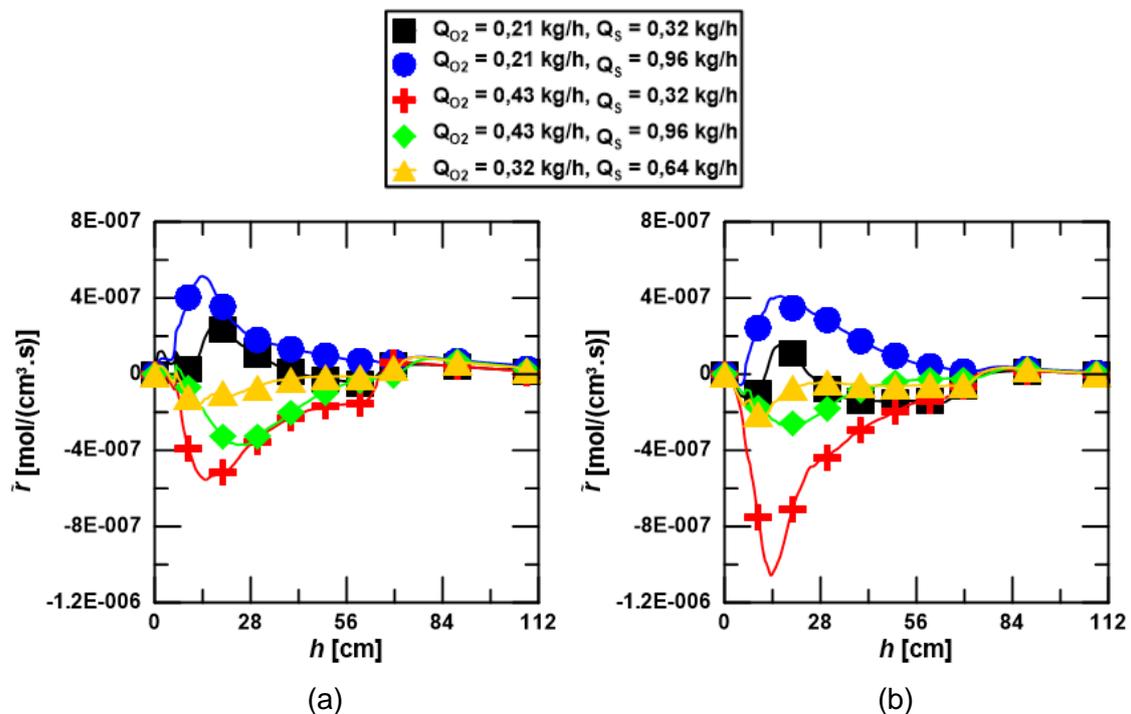


Figura 8.32 – Perfis axiais das taxas de reação de deslocamento de água; a) $T_{parede} = 973 \text{ K}$; b) $T_{parede} = 1123 \text{ K}$.

Nas Figs. 8.33 (a) e (b) são apresentados os perfis axiais das taxas da reação de oxidação de monóxido de carbono para as temperaturas de parede de 973 K e 1123 K, respectivamente. É possível observar nestas figuras que os casos com vazão de oxigênio menor ($Q_{O_2} = 0,21$ kg/h) possuem as menores taxas da reação de oxidação de monóxido de carbono. Também é possível observar que, à medida que a vazão de oxigênio aumenta, a taxa da reação de oxidação do monóxido de carbono também aumenta. Então, o aumento já reportado da fração molar de CO_2 ocasionado pelo aumento da vazão de O_2 pode ser relacionado com a intensificação da reação de monóxido de carbono.

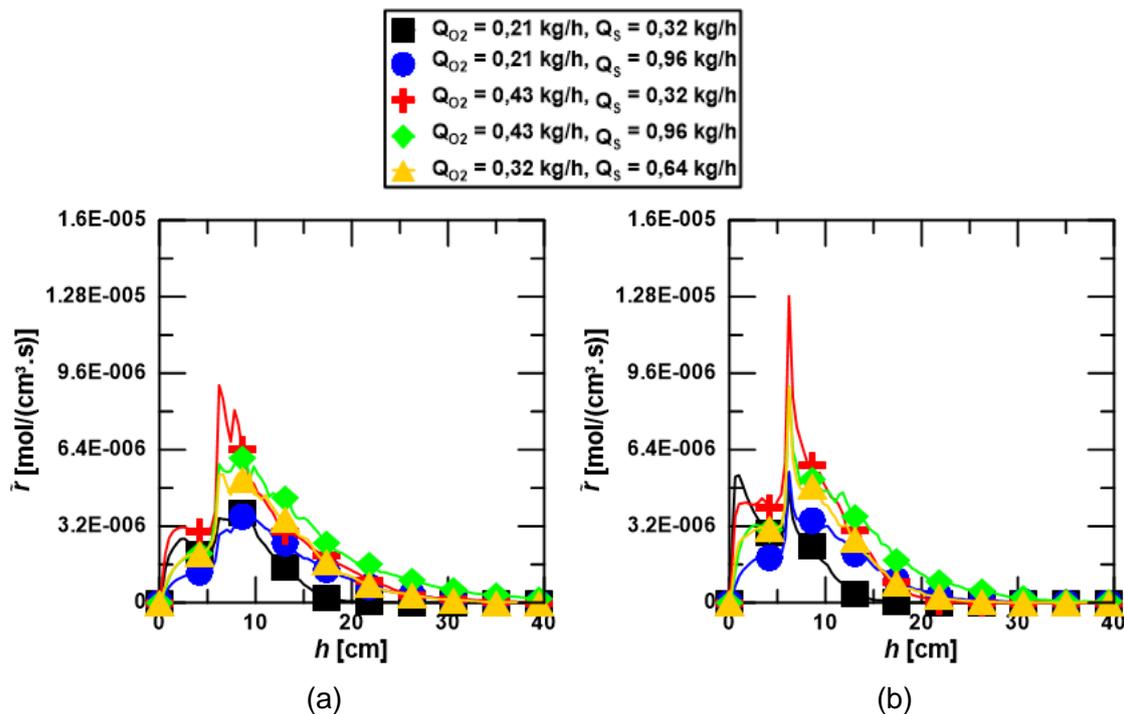


Figura 8.33 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de monóxido de carbono; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

A Fig. 8.34 mostra a contribuição percentual das reações para a formação de H_2 . Observando esta figura, é possível notar que a mais importante reação para a produção de H_2 é a reação de reforma de metano, entre 72,8% (Caso 3) e 99,6% (Caso 2), com uma pequena contribuição da reação de oxidação parcial de benzeno, entre 0,3% (Caso 2) e 7,0% (Caso 7). A contribuição da reação de deslocamento de água para a produção de H_2 se limita aos Casos 1, 3 e 4.

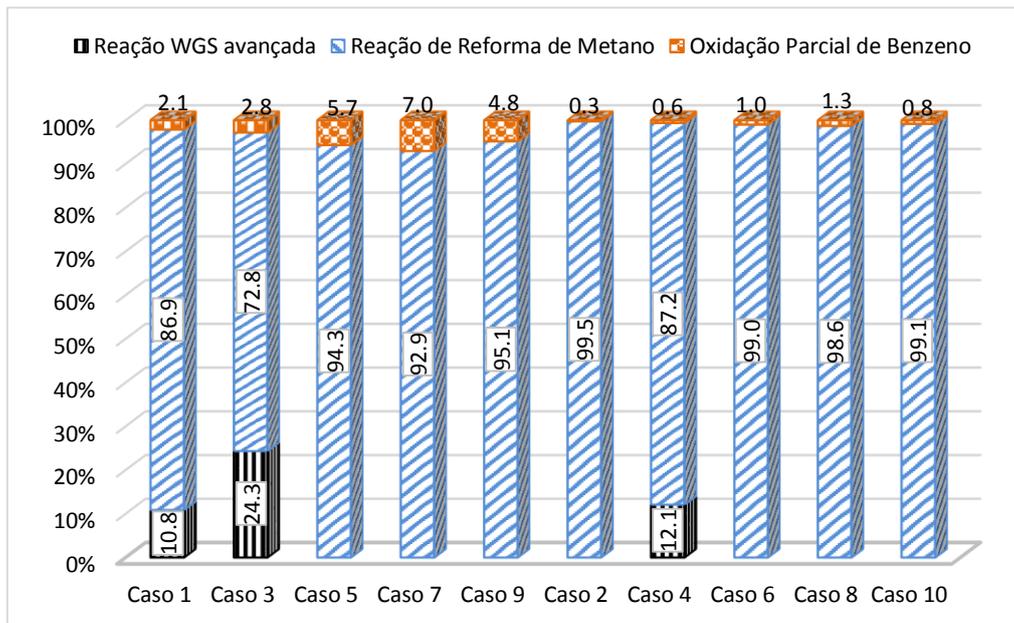


Figura 8.34 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de H_2 .

Os resultados da Fig. 8.35 mostram que para $Q_{O_2} = 0,21$ kg/h (Casos 1, 2, 3 e 4) a taxa da reação de reforma de metano é menor do que para os demais casos, em que a vazão de O_2 é maior, na região do leito. Na região do *freeboard* as taxas com $T_{parede} = 973$ K são menores do que na região do leito e possuem valores muito próximos em todas as situações analisadas. Já nas situações com $T_{parede} = 1123$ K, as taxas da reação de reforma de metano para os casos com $Q_{O_2} = 0,21$ kg/h, na região do *freeboard*, são levemente superiores às dos demais casos.

Na Fig. 8.36 são mostradas as contribuições percentuais das reações para o consumo de H_2 no gaseificador. É possível observar que a reação heterogênea de metanação não foi representada nesta figura, pois a contribuição percentual calculada desta reação para o consumo de H_2 foi muito pequena. Observando a Fig. 8.36, nota-se que, com exceção do Caso 2, todas as demais situações com $Q_{O_2} = 0,21$ kg/h (Casos 1, 3 e 4) possuem apenas a reação de oxidação de hidrogênio consumindo H_2 .

Por outro lado, nos casos com vazão de oxigênio superior a reação de deslocamento de água também está consumindo H_2 . O fato de apenas nesses casos ocorrerem a existência de mais uma reação reduzindo a quantidade de H_2 no gaseificador já ajudaria a explicar a redução da fração molar de H_2 com o aumento da vazão de O_2 . Contudo, a comparação entre os Casos 2 e 6 precisa ser melhor explicada, uma vez que no Caso 2 a reação de deslocamento de água também está consumindo H_2 .

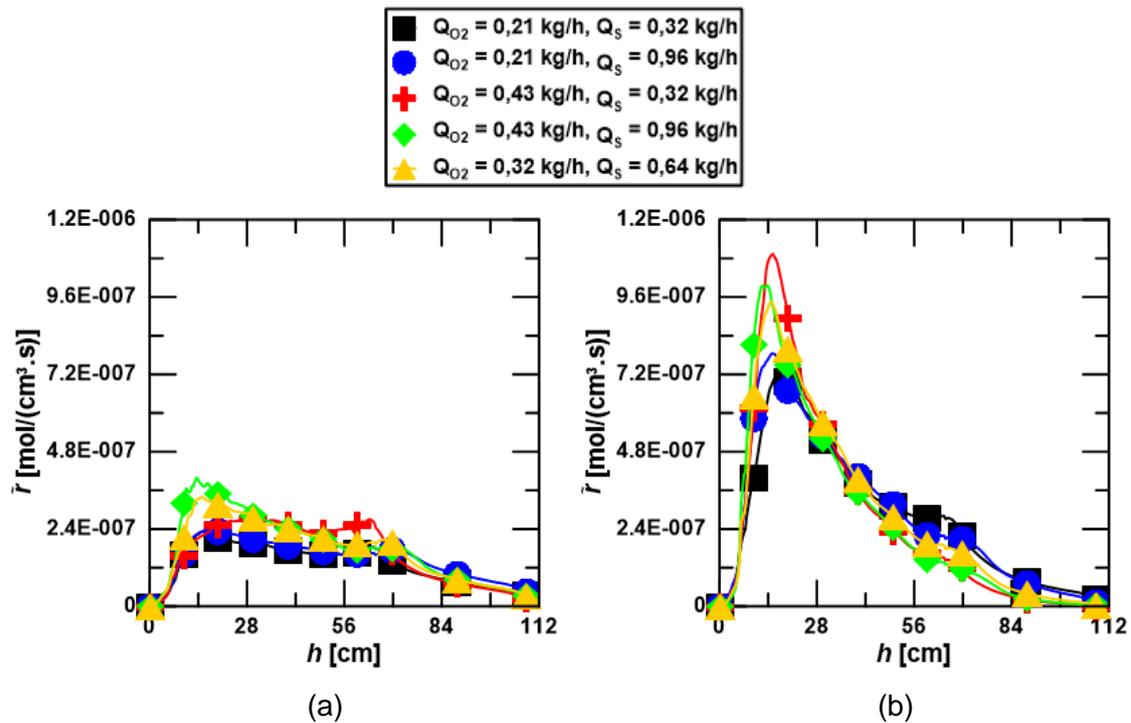


Figura 8.35 – Perfis axiais das taxas de reação de reforma de metano; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

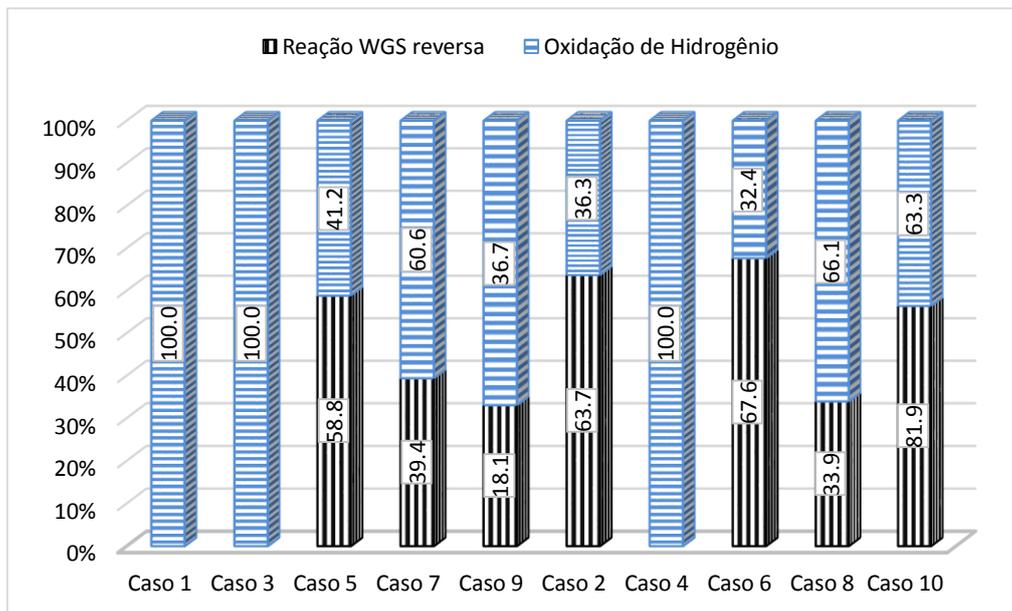


Figura 8.36 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de H_2 .

Na Fig. 8.37, é possível observar as contribuições de cada reação para o consumo de O_2 . Nessa figura, é possível observar que para o Caso 2, 4,1% do O_2 é queimado pela reação de oxidação de hidrogênio, enquanto que no Caso 6, 9,0% do O_2 inserido é queimado por esta reação de oxidação. Observando que a massa de O_2

inserida no reator no Caso 6 (0,43 kg/h) é maior do que no Caso 2 (0,21 kg/h), é possível concluir que existe uma quantidade maior de O₂ sendo queimado na reação de oxidação de hidrogênio. Como este comportamento se repete na comparação das demais situações, está claro que a redução da fração molar de H₂ com o aumento da vazão de O₂ é provocado pela intensificação da reação de oxidação de hidrogênio.

O consumo de CH₄ está ligado às reações de reforma e de oxidação de metano. A única reação que produz CH₄ é a reação de metanação, porém a taxa de CH₄ produzida por esta reação, encontrada nos casos analisados, é da ordem de 10⁻⁹ – 10⁻¹⁰ g cm³/s. Logo, a principal fonte de CH₄ parece ser a reação de pirólise. Como o modelo de pirólise utilizado não considera influência dos agentes gaseificadores sobre o processo de pirólise, o comportamento da fração molar de CH₄ nos casos estudados deve ser explicado analisando as reações que consomem CH₄. O comportamento da taxa da reação de reforma do metano já foi analisado, e pode ser visto na Fig. 8.35.

O aumento da vazão de O₂ sobre as taxas da reação de reforma de metano parece ser pouco significativo quando comparado aos efeitos provocados sobre a taxa da reação de oxidação de metano, como mostrado na Fig. 8.38. Esta figura mostra os perfis axiais da taxa da reação de oxidação de metano para as situações analisadas, e expõe que, com o aumento da vazão de O₂, a intensidade da reação de oxidação do metano aumenta consideravelmente. Logo, a reação de oxidação de metano parece ser a principal responsável pela redução da fração molar de CH₄ nos gases produzidos com o aumento de Q_{O2}.

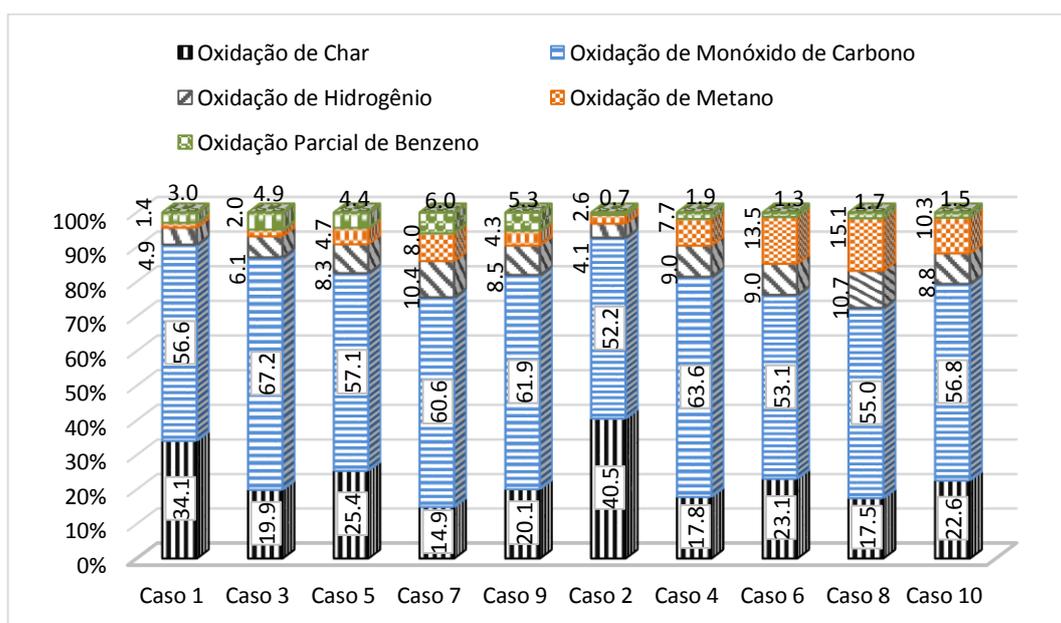


Figura 8.37 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de O₂.

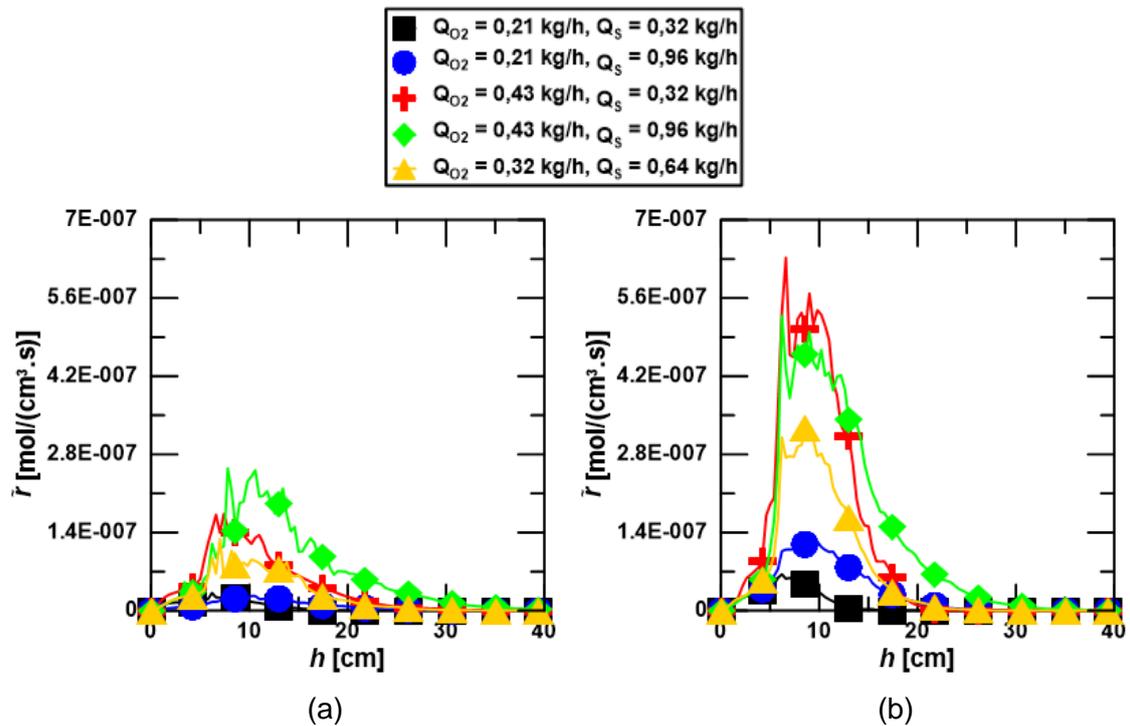


Figura 8.38 – Perfis das taxas de reação de oxidação de metano; a) $T_{parede} = 973\text{ K}$; b) $T_{parede} = 1123\text{ K}$.

Em contraste com os demais componentes, a concentração de CO no gás produzido não parece ser muito afetada pela vazão mássica de O_2 . A maior diferença relativa na fração molar de CO entre as situações com mesma vazão de vapor e temperatura de parede, e vazões de O_2 diferentes, mostrada na Tab. 8.8, ocorre entre os Casos 2 (30,7%) e 6 (29,3%). A Fig. 8.39 mostra a contribuição percentual das reações de oxidação de *char*, oxidação de metano, oxidação parcial de benzeno e, com exceção dos Casos 1, 3 e 4, de deslocamento de água para a formação de CO no gaseificador. Ao contrário do CH_4 e do H_2 que possuem uma reação com contribuição muito maior do que as demais para a formação destes componentes, a Fig. 8.39 mostra que as reações de oxidação de *char* e de reforma de metano possuem contribuições percentuais muito próximas. Além disso, nos Casos 5 e 6 a reação de deslocamento de água também contribui de maneira equivalente a estas duas reações. Desta forma, é necessário analisar a influência do aumento da vazão de O_2 sobre estas três reações para entender a pequena variação apresentada pela fração molar de CO.

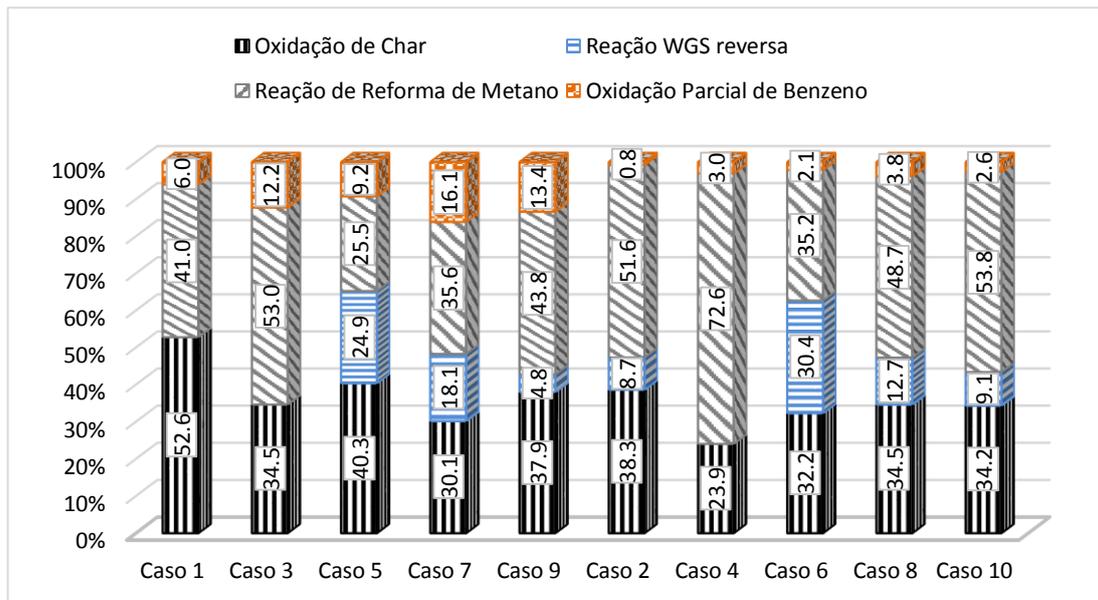


Figura 8.39 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO.

O aumento da vazão de O_2 provoca um aumento do coeficiente estequiométrico de CO na reação de oxidação de char, devido à elevação da temperatura do leito (Eq. 5.2), além de elevar a taxa da reação de oxidação de char, como mostrado na Fig. 8.40. Adicionalmente, a reação de deslocamento de água começa a contribuir para a formação de CO quando o valor da vazão mássica de O_2 é aumentado, como pode ser visto na Fig. 8.39. Contudo, a taxa da reação de oxidação de monóxido de carbono aumenta com a adição de mais O_2 , o que parece contrabalancear os efeitos das reações de deslocamento de água e de oxidação de char. Consequentemente, a fração molar de CO parece não variar com a variação de Q_{O_2} , como mostrado na Tab. 8.8.

Na Tab. 8.8 é possível observar uma redução nas frações molares de CO e de CH_4 com o aumento da vazão de vapor, enquanto que as concentrações de H_2 e de CO_2 aumentam. Este comportamento é o mesmo observado por outros autores (e.g. GIL *et al.*, 1997; LV *et al.*, 2004; BOERRIGTER e RAUCH, 2006).

A redução da quantidade de CO nos gases produzidos é explicada pelos perfis axiais das taxas das reações de deslocamento de água (Fig. 8.32) e de oxidação de char (Fig. 8.40). A Fig. 8.40 mostra que a reação de oxidação de char se torna mais lenta com o aumento da vazão de vapor. Como esta reação de oxidação contribui significativamente para a formação de CO, como pode ser visto na Fig. 8.39, a redução das taxas da reação de oxidação de char contribui para reduzir a quantidade de CO formado. Além disso, é possível observar na Fig. 8.32 que nas situações com $Q_{O_2} = 0,43$ kg/h a taxa de deslocamento de água reversa é dominante, e a produção de CO está sendo favorecida. Entretanto, o aumento de Q_S de 0,32 kg/h para 0,96 kg/h

reduz a intensidade desta reação, fazendo com que menos CO seja produzido. Por outro lado, quando $Q_{O_2} = 0,21$ kg/h, em geral, a taxa da reação de deslocamento de água é positiva, contribuindo para o consumo de CO. Ademais, com o aumento de Q_s a reação de deslocamento se intensifica, assim como o consumo de CO. Dessa forma, em todas as situações o aumento da vazão de vapor contribui para a redução da quantidade de CO no gás produzido.

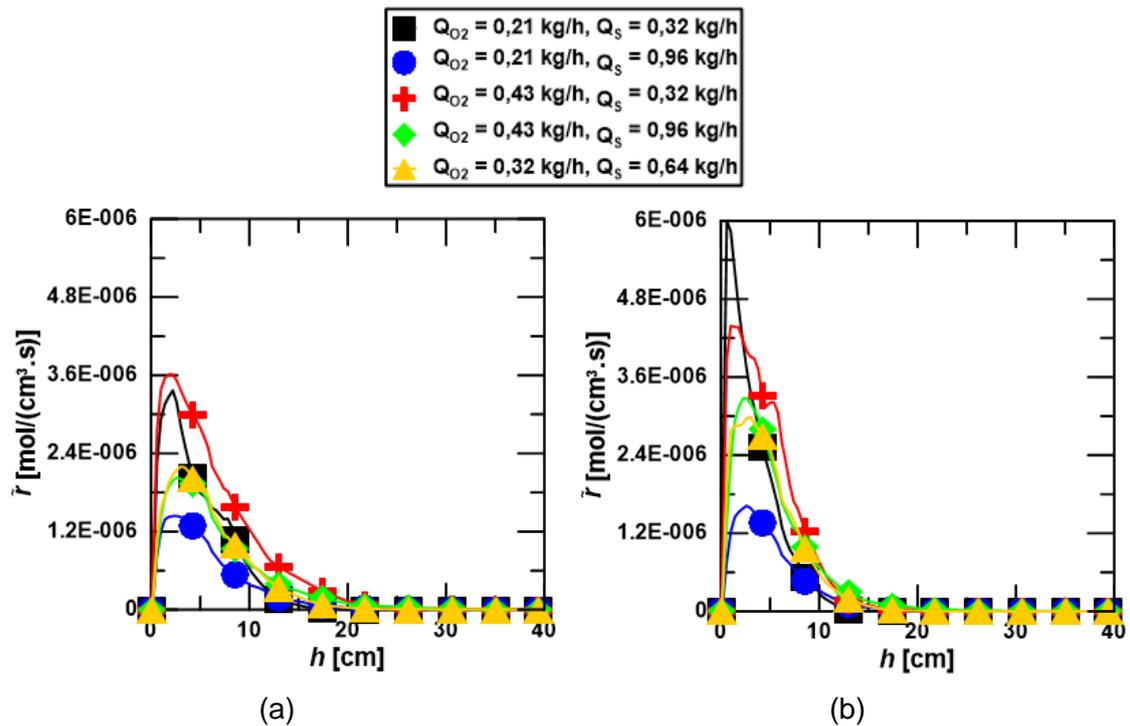


Figura 8.40 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de *char*; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

Toda a explicação sobre a influência da adição de vapor sobre a reação de deslocamento de água, assim como sua influência para a redução da fração molar de CO, também é válida para explicar o aumento da fração molar de H_2 com a elevação da vazão mássica de vapor. Entretanto, as pequenas variações sobre as taxas da reação de reforma de metano (Fig. 8.35), embora pouco perceptíveis na produção de CO, são bastante significativas na produção de H_2 (HUYNH e KONG, 2013). Afinal, deve-se lembrar que a reação de reforma de metano produz 3 mols de H_2 e apenas 1 mol de CO. Logo, é possível concluir que a pequena elevação das taxas de reforma de metano com a adição de vapor contribuem não apenas para o aumento da fração molar de H_2 , mas também para a pequena redução da quantidade de CH_4 presente nos gases produzidos.

A explicação para o aumento da fração molar de CO_2 com a elevação de Q_s , mostrado na Tab. 8.8, necessita de um olhar atento sobre as reações. A variação de Q_s de 0,21 kg/h para 0,43 kg/h sobre a reação de deslocamento de água favorece o aumento da concentração de CO_2 , da mesma forma que para o H_2 . Adicionalmente, deve-se notar que a redução das taxas de oxidação de *char* aumentam a quantidade de O_2 queimado pelas outras reações de oxidação, como pode ser observado comparando as Figs. 8.40 e 8.37. A Fig. 8.37 mostra que para uma mesma vazão de O_2 , a elevação da vazão de vapor aumenta a contribuição percentual das reações de oxidação de monóxido de carbono e de metano. Como a Fig. 8.31 mostra que a reação mais importante para a formação de CO_2 é a reação de oxidação de monóxido de carbono, está claro que o aumento do teor de CO_2 com o aumento de Q_s está relacionado a esta reação.

Com o aumento da temperatura da parede a concentração de CO e de H_2 presentes no gás de síntese formado aumentam, como mostra a Tab. 8.8. A Fig. 8.39 mostra que a temperatura provoca grande influência sobre a reação de deslocamento de água, que passa a contribuir significativamente para a produção de CO com o aumento da temperatura da parede. Adicionalmente, as Figs. 8.35 e 8.40 mostram que as taxas das reações de reforma de metano e de oxidação de *char*, respectivamente, sofrem um aumento significativo com a elevação da temperatura da parede. Desta forma, o aumento de CO parece estar relacionado com a intensificação das taxas de reforma de metano e de oxidação de *char*, e com o comportamento da reação de deslocamento de água para $T_{\text{parede}} = 1123 \text{ K}$. Em relação a elevação da fração molar de H_2 , a Fig. 8.34 mostra que, para os casos com $T_{\text{parede}} = 1123 \text{ K}$ (Casos 2, 4, 6, 8 e 10), mais de 98% do H_2 foi produzido pela reação de reforma de metano. Como esta reação produz 3 mols de H_2 , e sofreu uma grande intensificação com o aumento de T_{parede} (Fig. 8.35), é possível atribuir a elevação da fração molar de H_2 à reação de reforma de metano.

A intensificação da reação de reforma de metano também contribui significativamente para a redução da fração molar de CH_4 com o aumento da temperatura, sendo esta a principal responsável pelo consumo de CH_4 . Entretanto, deve-se ressaltar que a reação de oxidação de metano também aumenta significativamente com o aumento de T_{parede} , como pode ser visto na Fig. 8.38.

A redução da fração molar de CO_2 produzida com o aumento de T_{parede} não é muito clara, como destacado por GIL *et al.* (1997). Entretanto, a metodologia utilizada aqui ajuda a entender este comportamento. A Fig. 8.33 revela que a influência da temperatura de parede sobre a reação de oxidação de monóxido de carbono não é tão significativa. Entretanto, as demais reações de oxidação sofrem uma influência bastante

significativa com o aumento de T_{parede} , como pode ser visto nas Figs. 8.38, 8.40 e 8.41. Conseqüentemente, a quantidade de O_2 queimada pela reação de oxidação de monóxido de carbono se reduz, como pode ser visto na Fig. 8.37. Como, com exceção dos Casos 1, 3 e 4, a reação de oxidação de monóxido de carbono contribui com mais de 90% do CO_2 formado (Fig. 8.31), está claro que a diminuição da quantidade de O_2 queimada pela reação de monóxido de carbono está diretamente ligada a redução de CO_2 .

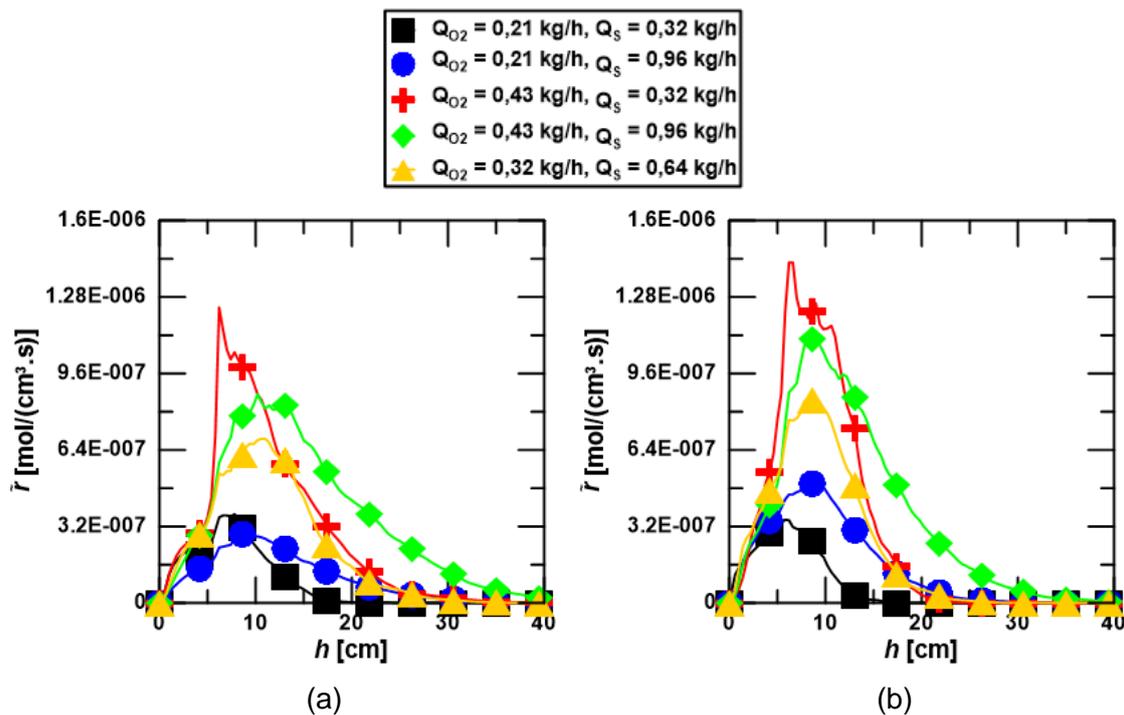


Figura 8.41 – Perfis axiais das taxas de reação de oxidação de H_2 ; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

8.6 Gaseificação com Diferentes Agentes Gaseificadores

Com o objetivo de explicitar as diferenças entre a utilização de diferentes agentes gaseificadores foram realizadas algumas simulações com ar, ar enriquecido com oxigênio e ar misturado com vapor. As condições de vazão de agente gaseificador e de temperatura de parede desses casos são mostradas na Tab. 7.2. Deve-se ressaltar que esses casos adicionais (Casos 11 - 16) possuem uma vazão mássica de oxigênio igual àquela dos Casos 1 e 2. Dessa forma, é possível avaliar a influência do N_2 e do vapor de água sobre a composição dos gases e sobre o comportamento das reações químicas.

Na Tab. 8.10 é mostrada a composição molar em base seca e livre de alcatrão, do gás produzido nos Casos 1, 2, 11, 12, 13, 14, 15 e 16. É possível notar que a presença de N₂ nos casos em que uma mistura de oxigênio e vapor foi utilizada (Casos 1 e 2) é muito menor do que nas demais situações, onde o ar foi utilizado. Esta pequena presença de N₂ ocorre porque todo o N₂ presente é proveniente do bagaço de cana, enquanto que nos demais casos a maior parte do N₂ vem do ar. Esta grande quantidade de N₂ acaba reduzindo o PCI do gás produzido (GIL *et al.*, 1999; BASU, 2010), assim como a quantidade de gás de síntese e a razão H₂/CO, como será visto a seguir.

Tabela 8.10 - Composição em fração molar do gás produzido na saída do reator, em base seca e livre de alcatrão.

Casos	X_{N2} [%]	X_{H2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH4} [%]	X_{CO2} [%]
1	0,3	46,3	19,7	5,3	28,4
2	0,2	50,2	30,3	0,8	18,5
11	40,8	18,0	19,8	7,4	13,9
12	37,4	23,3	26,6	4,0	8,7
13	23,7	24,5	26,5	8,5	16,8
14	21,0	30,9	34,7	3,9	9,6
15	39,0	22,2	16,2	6,3	16,4
16	35,5	28,1	23,2	2,4	10,8

Em relação à quantidade de CH₄ presente no gás produzido, a observação da Tab. 8.10 mostra que a presença de vapor de água reduz o teor de CH₄. Na Fig. 8.42 é mostrada o perfil axial da fração molar de CH₄. Nesta figura é possível observar que a diminuição da fração molar de CH₄ ocorre praticamente ao longo de todo o reator. Como a única reação que consome CH₄ ao longo de todo o reator é a reação de reforma de metano, cujo comportamento pode ser visto na Fig. 8.43, é possível atribuir a redução de CH₄ à reforma de metano.

A Tab. 8.10 também mostra que a fração molar de H₂ e de CO₂ são significativamente menores quando a gaseificação é realizada com ar puro ou com misturas de ar com O₂ e vapor. A fração molar de CO, na gaseificação com ar, se mantém em uma faixa bastante próxima à faixa das situações em que a gaseificação ocorre com uma mistura de O₂ e vapor. Para a mistura de ar enriquecido com O₂ a fração molar de CO é ligeiramente superior, enquanto que na gaseificação com ar e vapor, a fração molar de CO é ligeiramente inferior.

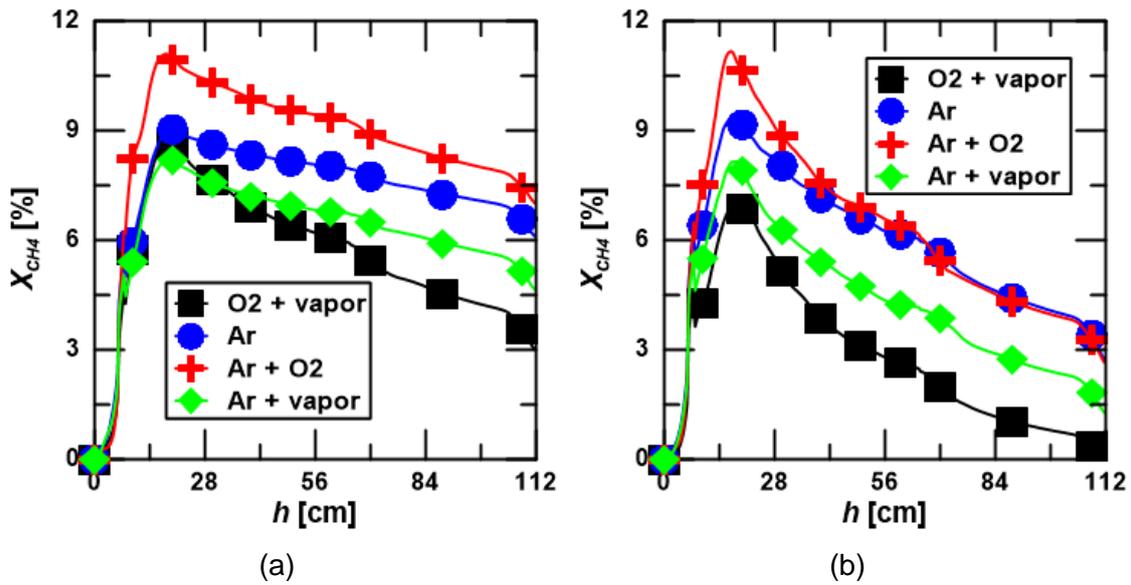


Figura 8.42 – Perfis axiais da fração molar de CH₄; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

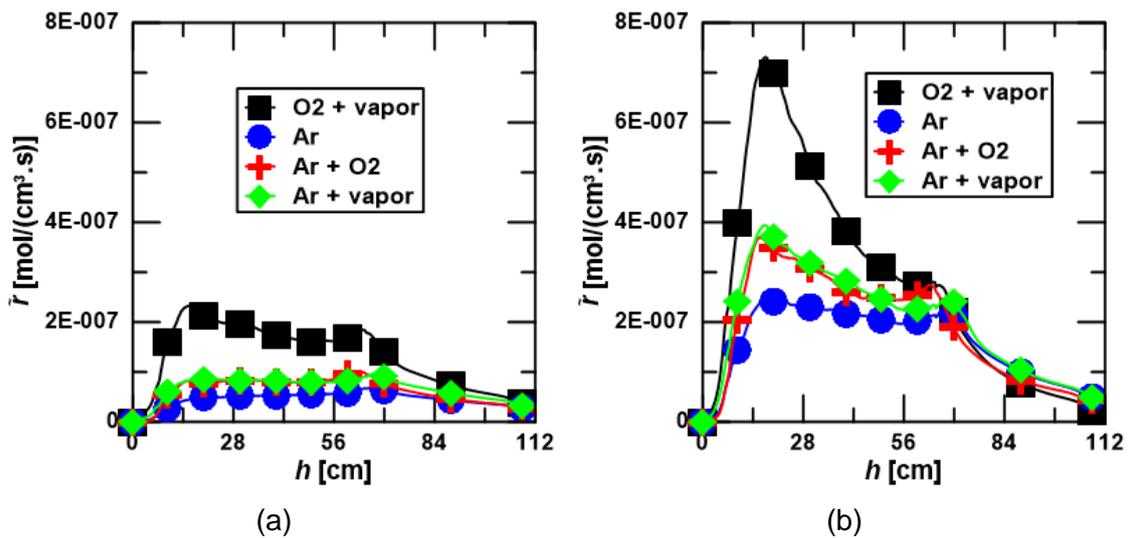


Figura 8.43 – Perfil axial da taxa da reação de reforma de metano; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

Na Fig. 8.43 é possível observar que a taxa da reação de reforma de metano da situação com O₂ e vapor é muito superior às taxas dos demais casos, com outros agentes gaseificadores. Logo, a quantidade de H₂ e de CO formada pela reação de reforma de metano é menor nos casos em que o ar é um agente gaseificador. Além disso, a Fig. 8.44 mostra que, nos casos em que o ar está presente, a reação de deslocamento de água está ocorrendo no sentido reverso, ou seja, consumindo H₂ e CO₂ e produzindo CO e H₂O. Dessa forma, a formação de CO e o consumo de H₂ e CO₂ estão sendo claramente favorecidos nas situações em que o ar é um agente gaseificador. Já na Fig. 8.45 é possível observar que a reação de deslocamento de água

para a formação de CO chega a ser a principal responsável pela formação de CO nas situações com temperatura de parede mais elevada (1123 K), em que o ar é um dos agentes gaseificadores.

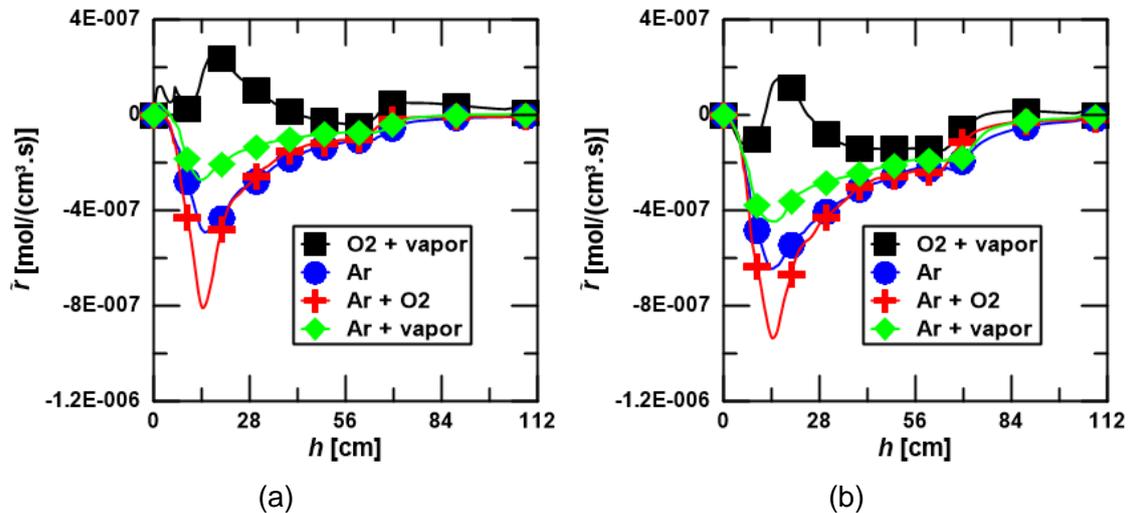


Figura 8.44 – Perfil axial da taxa da reação de deslocamento de água; a) $T_{parede} = 973$ K; b) $T_{parede} = 1123$ K.

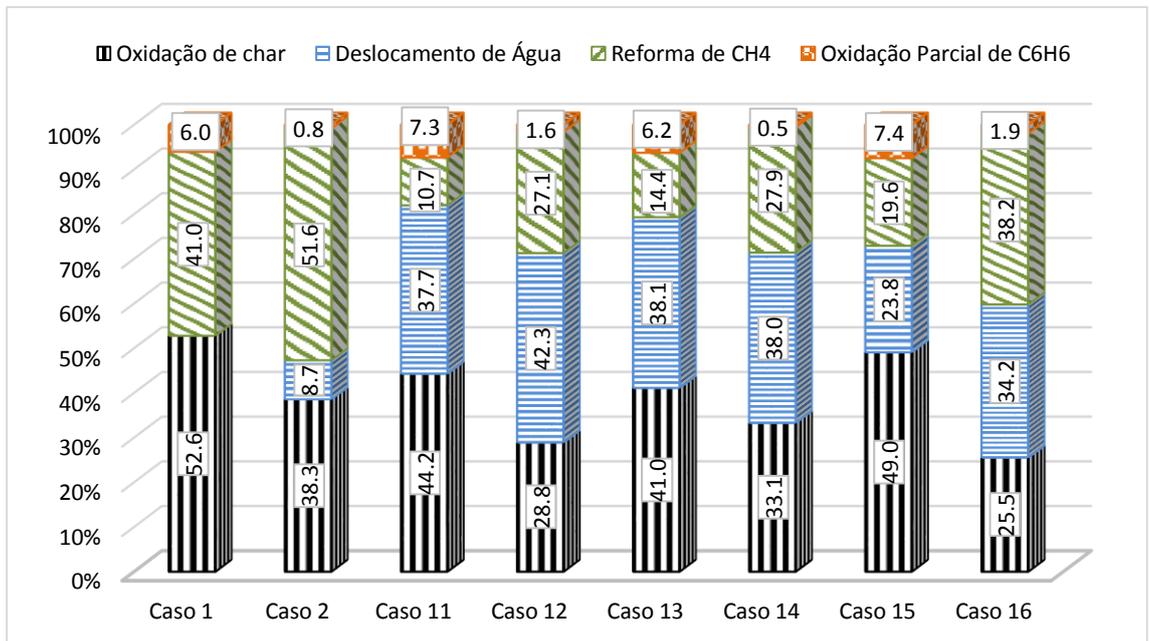


Figura 8.45 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a produção de CO.

Na Fig. 8.46 são apresentadas as contribuições percentuais das reações de oxidação para consumo de O_2 . Analisando esta figura torna-se claro que as reações de oxidação não parecem sofrer um grande efeito do N_2 e do vapor, principalmente com $T_{parede} = 973$ K. Com a temperatura de parede de 1123 K a reação de oxidação de

metano passa a queimar mais O_2 nas situações em que o ar é um dos agentes gaseificadores (Casos 12, 14 e 16), do que quando o agente gaseificador é a mistura entre O_2 e vapor (Caso 2). Este comportamento pode estar relacionado com a menor disponibilidade de CH_4 quando a mistura O_2 e vapor é usada, uma vez que a reação de reforma de metano é mais intensa nesta situação. O fato desta diferença percentual aumentar com a elevação da temperatura de parede ocorre devido ao fato das reações de oxidação e de reforma de metano sofrerem uma influência maior da temperatura do meio do que as demais reações.

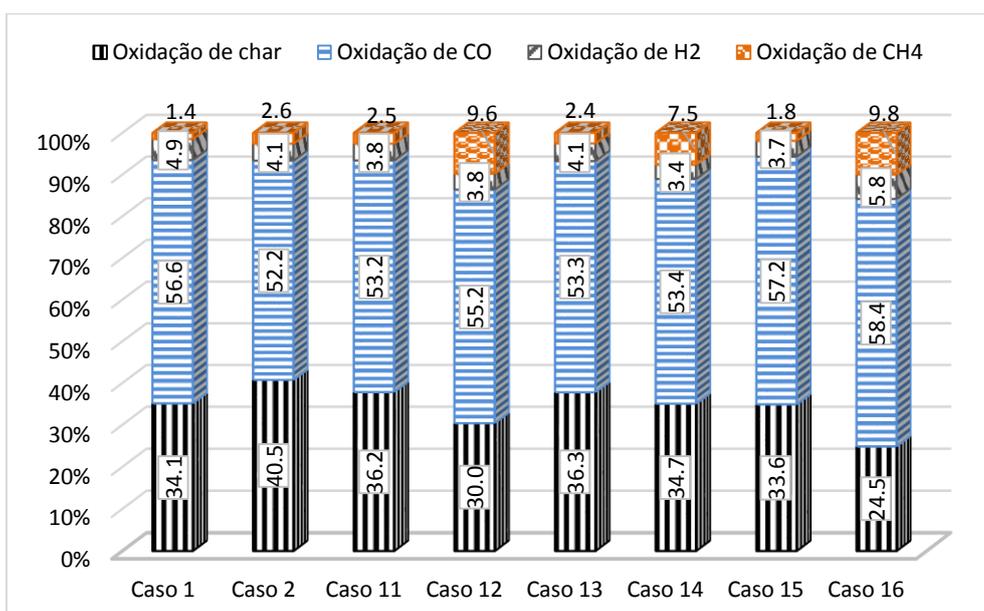


Figura 8.46 – Contribuição percentual de cada uma das reações para a consumo de O_2 .

Em relação à qualidade dos gases produzido, é possível ver na Tab. 8.11 que o gás produzido com a mistura entre O_2 e vapor (Casos 1 e 2) possui PCI e quantidade de gás de síntese superior aos dos demais casos, da mesma maneira que encontrado na literatura por outros autores (e.g. GIL *et al.*, 1999; RAFIDAH *et al.*, 2011) para diferentes biomassas. Além disso, as situações em que o vapor foi um dos agentes gaseificadores foram as únicas a produzir um gás com razão H_2/CO superior a unidade. Todavia, quando a mistura de vapor e ar é usada a quantidade de gás de síntese produzida (38,4% e 51,3%) é muito menor do que quando o oxigênio é utilizado junto com o vapor de água (66,3% e 80,9%). A única situação em que a quantidade de gás de síntese produzida foi semelhante aos Casos 1 e 2 foi o Caso 14, com $H_2 + CO = 65,6\%$. Também é possível observar na Tab. 8.11 que as situações com temperatura de parede mais elevadas (Casos 2, 12, 14 e 16) produzem um gás com

PCI e quantidade superiores de gás de síntese, porém com razões H₂/CO menores. O mesmo comportamento das razões de H₂/CO também foi observado em RAFIDAH *et al.* (2011) para o processo de gaseificação de madeira e folhas de palmeira.

Tabela 8.11 - Parâmetros que avaliam a qualidade do gás produzido e a razão de gaseificação de cada caso.

Caso	PCI [MJ/kg]	H₂+CO [%]	H₂/CO
1	10,65	66,3	2,32
2	12,08	80,9	1,64
11	6,46	37,8	0,91
12	7,17	49,9	0,87
13	8,69	51,1	0,92
14	9,69	65,6	0,89
15	6,21	38,4	1,37
16	6,90	51,3	1,21

Para uma mesma temperatura de parede, os casos com ar misturado com vapor (Casos 15 e 16) produziram o gás com menor PCI dentre todos os agentes gaseificadores investigados, 6,21 e 6,90 MJ/kg. Já a gaseificação com ar produziu um gás com PCI ligeiramente superior, 6,46 MJ/kg e 7,17 MJ/kg. Logo, é possível afirmar que, em relação ao PCI, a utilização de ar ou de uma mistura de ar com vapor não é recomendável. Se o objetivo do processo de gaseificação de bagaço for produzir um gás com elevado PCI, a gaseificação com ar enriquecido com oxigênio e com uma mistura entre O₂ e vapor deve ser utilizada, com temperaturas elevadas no leito (acima dos 973 K). Por outro lado, se o objetivo do processo de gaseificação for obter um gás com altas razões H₂/CO, então a gaseificação com ar misturado com vapor pode ser uma alternativa, embora a gaseificação com uma mistura de O₂ e vapor produza razões H₂/CO superiores. Deve-se ressaltar ainda que temperaturas mais elevadas produzem menores razões H₂/CO.

Por fim, se existir a necessidade de se produzir um gás rico em H₂ e CO, a melhor alternativa é a utilização de uma mistura de O₂ com vapor a elevadas temperaturas (acima de 973 K). Nesta situação, a utilização de ar enriquecido com O₂ só produz quantidades equivalentes com temperaturas superiores (acima dos 1123 K) as utilizadas na gaseificação com O₂ e vapor. No entanto, temperaturas tão elevadas podem causar problemas estruturais no gaseificador, dependendo do material do qual ele é feito.

O comportamento obtido dos agentes gaseificadores é semelhante ao já reportado na literatura para outros tipos de biomassa (e.g. GIL *et al.*, 1999; LV *et al.*, 2004; BASU, 2010; RAFIDAH *et al.* 2011; HUYNH e KONG, 2013). As recomendações feitas aqui levam em conta apenas a qualidade dos gases produzidos. Para uma aplicação comercial deve-se levar em conta também os custos de operação com cada um dos agentes gaseificadores investigados. Por exemplo, uma das grandes dificuldades em se operar uma planta de gaseificação com O₂ puro é o fato do elevado custo de obtenção de O₂. Logo, a utilização de grandes quantidades de O₂ como agente gaseificador encarecem o custo de operação da planta. Tendo o custo de obtenção de O₂ em mente, a gaseificação com ar enriquecido com O₂ pode ser uma boa opção. É importante lembrar que nas situações consideradas a massa de O₂ inserida no gaseificador foi igual, porém uma grande parcela do O₂ presente no caso com ar enriquecido com O₂ foi proveniente do ar. Então, a quantidade de O₂ puro é menor no caso com ar enriquecido com vapor, o que, possivelmente, geraria um custo de operação menor do que a gaseificação com misturas de O₂ e vapor, para obter um gás com PCI elevado. Desta forma, os dados apresentados aqui devem ser analisados juntamente com uma análise de custo da utilização de cada um dos agente gaseificadores.

8.7 Avaliação da Qualidade dos Resultados Obtidos

Para avaliar a qualidade dos resultados obtidos neste trabalho, os resultados de alguns dos Casos simulados são comparados nesta seção com os resultados obtidos pelo código CSFMB, disponíveis em ARAKAKI (2013). O CSFMB é um código comercial que utiliza correlações empíricas para contabilizar os efeitos hidrodinâmicos do escoamento e um modelo de cinética mais elaborado para as reações químicas. Este código já foi validado para diversos tipos de biomassa, incluindo o bagaço de cana (CASTELLANOS, 2012). Dessa forma, na ausência de resultados experimentais, a comparação com os resultados obtidos pelo CSFMB é uma alternativa adequado.

ARAKAKI (2013) realizou simulações de um gaseificador do mesmo tipo modelado neste trabalho, utilizando as mesmas vazões de O₂ e de vapor para o bagaço de cana-de-açúcar. A única diferença consiste na condição de parede, que no trabalho de referência foi considerada adiabática. Devido à diferença na condição de contorno de temperatura, optou-se por comparar os gases produzidos com as duas temperaturas de parede, para se ter uma estimativa se os resultados deste trabalho estão compatíveis com os de ARAKAKI (2013), como mostrado nas Tabs. 8.12-15. Além disso, a variação

das principais espécies químicas em função da razão de gaseificação obtidas com os dois programas são apresentados nas Figs. 8.47 (a)-(c). O poder calorífico inferior dos gases produzidos em base seca e livre de cinzas e de alcatrão obtido pelo dois modelos é comparado na Tab. 8.16.

Tabela 8.12 - Comparação entre os Casos 1 e 2 com os resultados do CSFMB.

	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH_4} [%]	X_{H_2O} [%]	X_{CO_2} [%]
CSFMB	41,3	9,2	1,0	21,0	26,9
Caso 1	34,1	14,5	3,9	25,7	20,9
Caso 2	39,1	23,6	0,6	21,7	14,4

Tabela 8.13 - Comparação entre os Casos 3 e 4 com os resultados do CSFMB.

	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH_4} [%]	X_{H_2O} [%]	X_{CO_2} [%]
CSFMB	26,3	7,7	0,6	49,0	16,1
Caso 3	25,1	4,8	2,0	50,8	16,7
Caso 4	29,6	9,2	0,2	46,4	14,3

Tabela 8.14 - Comparação entre os Casos 5 e 6 com os resultados do CSFMB.

	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH_4} [%]	X_{H_2O} [%]	X_{CO_2} [%]
CSFMB	28,0	16,5	0,7	31,8	22,5
Caso 5	26,8	12,9	2,2	31,8	25,7
Caso 6	27,8	19,7	0,0	32,5	19,6

Tabela 8.15 - Comparação entre os Casos 7 e 8 com os resultados do CSFMB.

	X_{H_2} [%]	X_{CO} [%]	X_{CH_4} [%]	X_{H_2O} [%]	X_{CO_2} [%]
CSFMB	18,5	4,6	0,0	57,0	19,6
Caso 7	19,7	4,7	0,8	55,2	19,2
Caso 8	21,0	7,9	0,0	53,9	17,0

As Tabs. 8.12-15 mostram que os resultados obtidos com o MFIX possuem valores próximos daqueles obtidos pelo CSFMB. Como a condição de temperatura na parede é diferente, não é possível fazer uma avaliação direta entre os dois modelos. Todavia, é possível realizar uma comparação em relação à sensibilidade dos dois modelos, com a variação da razão de gaseificação (GR).

A Fig. 8.47 mostra que a variação da composição dos gases com a variação da razão de gaseificação obtidas com o MFIX é muito semelhantes à obtida em ARAKAKI (2013) com o CSFMB. Esta semelhança indica a capacidade do modelo utilizado em contabilizar os efeitos da variação da mistura entre vapor e oxigênio sobre a composição dos gases produzidos na gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar.

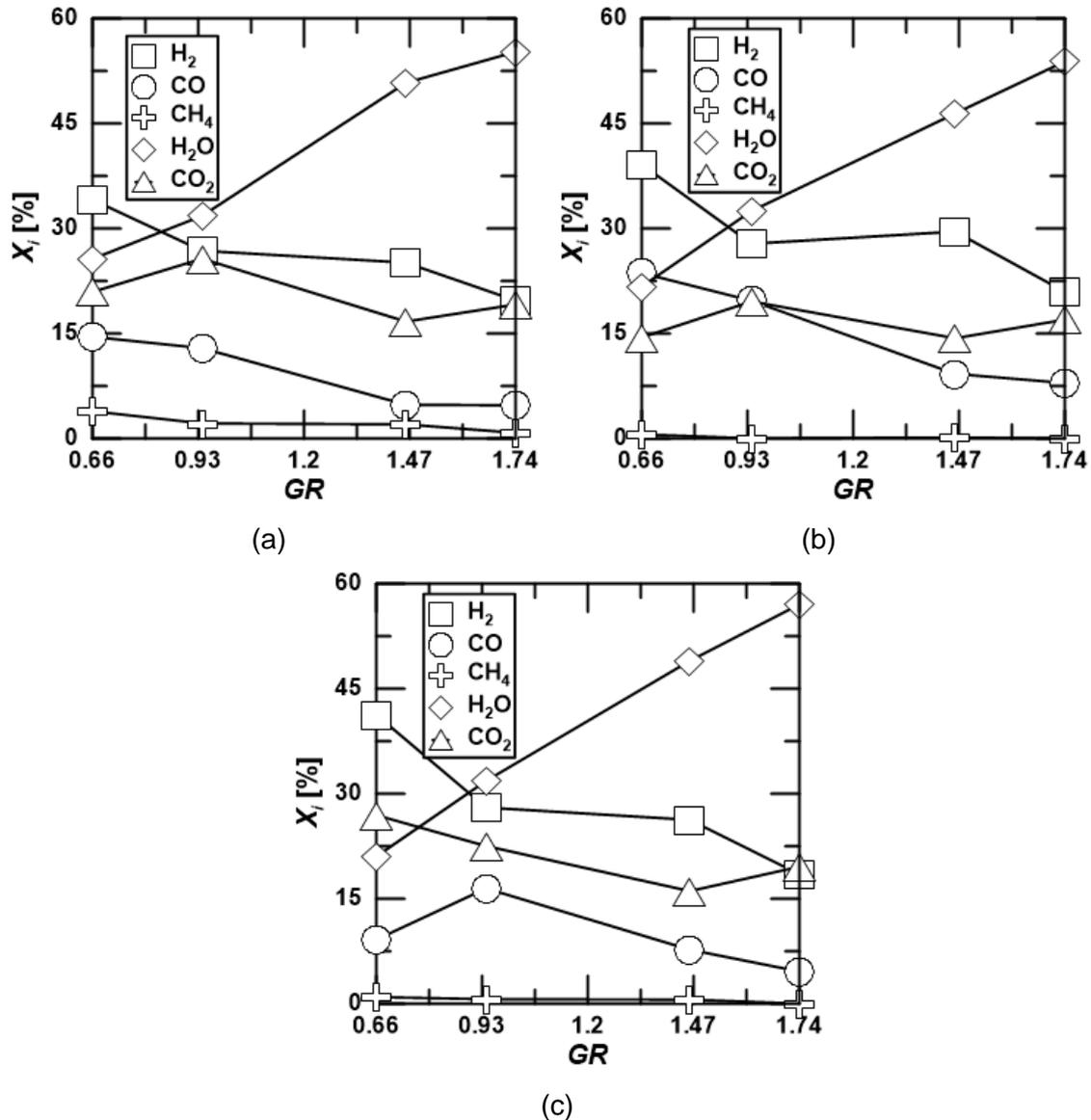


Figura 8.47 - Comportamento da composição do gás produzido para diferentes razões de gaseificação; a) obtido com o MFIX, com $T_{parede} = 973$ K; b) obtido com o MFIX, com $T_{parede} = 1123$ K; c) previsto com o CSFMB.

Por fim, na comparação entre os poderes caloríficos obtidos, as Tabs. 8.16 e 8.17 mostram que com a temperatura de parede menor, o PCI do gás obtido com o MFIX está muito próximo daquele obtido com o CSFMB. Contudo, o MFIX possui uma

tendência a sobre-estimar os valores do PCI do gás produzido durante o processo de gaseificação, como fica evidente após a observação da Tab. 8.16.

Tabela 8.16 - Comparação entre o poder calorífico do gás obtido nas simulações com o MFIX e CSFMB.

Razão de Gaseificação	PCI - CSFMB [MJ/kg]	PCI - MFIX – $T_{parede} = 973\text{ K}$ [MJ/kg]	PCI - MFIX – $T_{parede} = 1123\text{ K}$ [MJ/kg]
0,66	8,67	10,65	12,08
0,94	7,88	7,52	9,68
1,46	9,14	9,55	10,41
1,74	5,64	6,13	7,43

Tabela 8.17 - Diferença relativa entre o poder calorífico do gás obtido com o MFIX e com o CSFMB.

Razão de Gaseificação	Diferença relativa - PCI MFIX $T_{parede} = 973\text{ K}$ [%]	Diferença relativa - PCI MFIX $T_{parede} = 1123\text{ K}$ [%]
0,66	22,9	39,3
0,94	4,6	22,9
1,46	4,5	13,9
1,74	8,7	31,7

A comparação com o CSFMB revela uma concordância entre os resultados obtidos com as duas diferentes metodologias. Mesmo com um modelo de cinética química mais simplificado, a modelagem utilizada neste trabalho foi capaz de fornecer resultados úteis, o que mostra a adequação do modelo utilizado para a obtenção de resultados úteis para fins de engenharia.

9 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste trabalho foram analisadas algumas questões importantes na área de simulação termofluidodinâmica de processos de gaseificação. Dentre as quais se destaca a influência da utilização de um domínio 2D de coordenadas retangulares para descrever o processo de gaseificação em leito fluidizado. Desta forma, foram comparados resultados obtidos em um domínio 2D com os obtidos em um domínio 3D para duas velocidades superficiais de agente gaseificador diferentes. Os resultados indicaram que a utilização de um domínio de coordenadas retangulares 2D não acarreta em grandes diferenças quantitativas com relação à composição, a temperatura dos gases produzidos na saída do reator e a expansão do leito. Logo, a representação 2D pode ser efetivamente utilizada para avaliar a composição dos gases formados em um gaseificador de leito fluidizado borbulhante. Entretanto, as diferenças entre os resultados obtidos com as duas representações aumentam com a elevação da velocidade de entrada dos gases.

Outro assunto abordado neste trabalho diz respeito a alguns parâmetros numéricos utilizados na resolução das equações governantes do problema. O primeiro parâmetro avaliado é o método de discretização dos termos convectivos das equações governantes. O segundo é a tolerância definida para os resíduos das equações governantes.

Os resultados indicam que, de maneira geral, as tolerâncias não causam grandes impactos na composição dos gases produzidos, nas situações consideradas. Por outro lado, o uso do método de discretização de ordem superior parece exercer uma influência maior sobre a composição dos gases na saída do gaseificador, principalmente para a fração molar de CH_4 . No entanto, para uma análise do comportamento das grandezas ao longo do leito do gaseificador, existe a necessidade da utilização de um método de discretização de segunda ordem e de tolerâncias de 10^{-4} para a equação da continuidade e da quantidade de movimento e de 10^{-6} para as demais equações. Esta necessidade surge principalmente devido as diferenças na altura de expansão do leito provocadas por estes parâmetros.

Além dos parâmetros numéricos, também são investigadas maneiras de reduzir o tempo computacional necessário para a realização das simulações. Primeiramente, é analisada a melhor biblioteca de paralelização MPI para executar as simulações com o MFIX em um *cluster* de alto desempenho, assim como a escalabilidade do código. Os

resultados mostram que a biblioteca MPICH2 1.4.3 permite uma redução maior do tempo computacional e que o número de *threads* em paralelo utilizadas para acelerar o código MFIX depende do tamanho da malha utilizada. Em seguida, são analisadas duas condições iniciais diferentes, em uma tentativa de reduzir o regime transiente dos problemas investigados e, conseqüentemente, reduzir o tempo de computação. É mostrado que a utilização de campos de grandezas gerados em simulações mais simples ajuda na redução do transiente do problema, gerando uma redução do tempo computacional em torno de 13% e 16% nos casos estudados aqui.

Também é realizada uma análise sobre o impacto da variação das vazões de O₂ e de vapor, assim como da temperatura de parede sobre os gases produzidos no processo de gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar. A análise termofluidodinâmica dessas situações mostra que a elevação da temperatura de parede aumenta a altura de expansão do leito, além de intensificar a formação de bolhas. A análise fluidodinâmica também mostra que algumas das situações investigadas apresentam um padrão de escoamento pistonado.

Em seguida, os impactos das variáveis investigadas sobre a predição da composição dos gases produzidos é realizada juntamente com uma análise da contribuição de cada reação modelada para a composição final dos gases. Os resultados mostram que o aumento da vazão mássica de O₂ não influencia significativamente a fração molar de CO, porém reduz as frações molares de H₂ e de CH₄ e aumenta a de CO₂. Além disso, é encontrada uma redução da quantidade de gás de síntese (H₂+CO) produzido e da razão H₂/CO. O poder calorífico inferior do gás produzido também se reduz com o aumento da quantidade de O₂ inserida no reator.

A elevação da vazão mássica de vapor acaba provocando uma elevação das quantidades de H₂ e de CO₂ produzidas, com redução do teor de CO e do CH₄. O aumento da vazão de vapor também eleva a razão H₂/CO dos gases produzidos e reduz a quantidade de gás de síntese formado e o poder calorífico dos gases produzidos.

Em relação à temperatura de parede, é identificado um aumento da produção de H₂ e de CO, com redução de CO₂ e de CH₄ com a elevação das temperaturas no gaseificador. Também é observado um aumento do poder calorífico e da quantidade de gás de síntese formada, com uma redução da razão H₂/CO, em decorrência da elevação da temperatura de parede.

De maneira geral, os resultados indicam que a gaseificação de bagaço de cana com temperaturas maiores no leito favorecem a obtenção de uma maior quantidade gás de síntese, com um poder calorífico maior e uma menor razão H₂/CO. Já o aumento da vazão de vapor reduz o poder calorífico do gás produzido, assim como a quantidade de gás de síntese produzido. Contudo, as razões H₂/CO são maiores quando a vazão de

vapor é maior. Por fim, o aumento da vazão de O_2 ocasiona uma concentração maior de CO_2 no gás produzido, acarretando em uma quantidade menor de gás de síntese, com menor poder calorífico e razões de H_2/CO .

Uma análise da importância percentual de cada uma das reações consideradas é realizada com o objetivo de identificar o papel das reações modeladas na formação dos componentes do gás produzido no processo de gaseificação do bagaço de cana. É identificado que as principais responsáveis pela formação de CO são as reações de oxidação de *char* e de reforma de metano, o CO_2 é majoritariamente produzido pela reação de oxidação de monóxido de carbono, enquanto que, na maioria dos casos investigados, mais de 90% do H_2 produzido é proveniente da reação de reforma de metano.

Um estudo do processo de gaseificação de bagaço de cana com diferentes agentes gaseificadores também é apresentado. O estudo mostra que a gaseificação com misturas de O_2 e vapor produz um gás com qualidade superior à dos demais agentes gaseificadores. Contudo, dependendo do uso desejado para o gás produzido, outros agentes gaseificadores, tais como ar, ar enriquecido com O_2 e ar misturado com vapor, também podem ser utilizados.

Os resultados indicam que se a utilização final do gás produzido requer um gás com elevado poder calorífico ou uma grande quantidade de gás de síntese, a gaseificação com ar enriquecido também pode ser uma boa opção, de preferência com temperaturas da ordem dos 1123 K. Se o objetivo for um gás com razão H_2/CO superior a um, então a utilização do ar com vapor pode ser uma opção viável. A utilização do ar puro produz gases com qualidade inferior aos gases produzidos com os demais agentes gaseificadores testados. No entanto, é observado que deve-se sempre fazer uma análise do custo de operação com os diferentes agentes gaseificadores. Como o ar é o agente gaseificador mais facilmente obtido ele não pode ser descartado.

Por fim, é realizada uma comparação entre os resultados obtidos neste trabalho e os obtidos em ARAKAKI (2013) utilizando o programa CSFMB. Os resultados apresentam uma boa concordância para a maioria dos casos comparados. Embora os resultados obtidos com o MFIX tenham sobre estimado o poder calorífico dos gases produzidos, em comparação com os resultados do CSFMB, a variação da composição dos gases em função da razão de gaseificação é muito parecida.

Este trabalho se propôs a investigar o impacto de parâmetros numéricos e da descrição do domínio sobre os resultados do processo, além de buscar maneiras de reduzir o tempo computacional das simulações. Entretanto, muitas questões importantes no desenvolvimento de uma ferramenta capaz de prever com grande acurácia, não apenas a composição dos gases produzidos, mas também o

comportamento das grandezas ao longo do leito durante o processo de gaseificação, ainda não foram estudadas. Tratando-se particularmente da gaseificação do bagaço de cana-de-açúcar, um dos grandes gargalos é a inexistência de um modelo cinético para descrever a pirólise específica do bagaço de cana. Seria interessante uma comparação do modelo estequiométrico instantâneo, com um modelo cinético genérico, como o utilizado por MILLER e BELLAN (1997).

Outras questões importantes que são normalmente ignoradas em trabalhos de fluidodinâmica computacional e poderiam ser temas de trabalhos futuros é a formação de cinzas e a existência de seus efeitos catalizadores, assim como a composição do alcatrão formado. O alcatrão formado durante o processo de pirólise da biomassa é um dos grandes responsáveis pela dificuldade da utilização da biomassa para gaseificação em grandes escalas (ENGVALL *et al.*, 2011). Logo, a utilização de uma composição do alcatrão mais próxima da real pode ser considerado um avanço significativo.

Outra simplificação utilizada neste trabalho diz respeito a consideração de uma partícula de *char* de diâmetro constante. Uma sugestão de trabalho futuro seria a comparação de resultados obtidos levando em conta uma redução do tamanho de *char* com as reações de gaseificação, com resultados obtidos para um diâmetro de *char* constante. Utilizando a abordagem Euler-Euler, uma forma de contabilizar esta redução da partícula de *char* é usando fases sólidas de *char* com diâmetros diferentes. Se a abordagem Euler-Lagrange for utilizada, modelos de partícula poderiam ser utilizados na redução das partículas à medida que elas reagissem com os voláteis.

Em relação à modelagem fluidodinâmica do problema, uma avaliação do impacto da utilização de modelos de turbulência sobre os gases produzidos e sobre o comportamento termofluidodinâmico é necessária. Na revisão bibliográfica apresentada alguns trabalhos consideraram modelo de turbulência e outros não. Todavia, nenhum estudo comparativo com a utilização destes modelos foi realizado.

10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALAUDDIN, Z. A. B. Z.; LAHIJANI, P.; MOHAMMADI, M. **Gasification of lignocellulosic biomass in fluidized beds for renewable energy development: A review.** Renewable and Sustainable Energy Reviews 14. p. 2852-2862. 2010.

ARAKAKI, M.T.V.F.N. **Análise do Processo de Gaseificação do Bagaço de Cana-de-açúcar em Equipamento de Leito Fluidizado Borbulhante.** Monografia, Escola de Química/Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, Brasil. 2013.

ARTHUR, J.R. **Reactions Between Carbon and Oxygen.** Transactions of the Faraday Society 47(0). p. 164-178. 1951.

BAIN, R.L.; BROER, K. **Gasification.** Em: Brown, R.C. **Thermochemical Processing of Biomass**, 1 ed., Cap. 3, West Sussex, Reino Unido, John Wiley & Sons Ltd. 2011.

BASU, P. **Biomass gasification and pyrolysis – Practical Design.** Ed. Academic Press. Burlington, MA. 376 p. 2010.

BATCHELOR, G.K. **An Introduction to Fluid Dynamics.** Ed. Cambridge University Press. Cambridge. 3ª Ed. 615 p. 2000.

BEETSTRA, R.; van der HOEF, M.A.; KUIPERS, J.A.M. **Numerical study of segregation using a new drag force correlation for polydisperse systems derived from lattice-Boltzmann simulations.** Chemical Engineering Science 62. p. 246-255. 2007.

BENYAHIA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. **Summary of MFIx Equations 2012-1.** URL <https://mfix.netl.doe.gov/documentation/MFIxEquations2012-1.pdf>. January 2012.

BIBA, V.; MACÁK, J.; KLOSE, E.; MALECHA, J. **Mathematical Model for the Gasification of Coal under Pressure.** Industrial and Engineering Chemistry Process Design and Development 17(1). p. 92-98. 1978.

BIRD, R.B.; STEWART, W.E.; LIGHTFOOT, E.N. **Transport Phenomena**. Ed. John Wiley & Sons. Nova Iorque, NY. 905 p. 2006.

BLAZEK, J. **Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications**. Ed. Elsevier. Oxford, Reino Unido. 460 p. 2001.

BOERRIGTER, H.; RAUCH, R. **Syngas production and utilization**. Em: Knoef, H.A.M. **Handbook Biomass Gasification**, 1 ed., Cap. 10, Enschede, Holanda, Biomass Technology Group (BTG). 2005.

BOROSON, M.L.; HOWARD, J.B.; LONGWELL, J.P.; PETERS, W.A. **Product Yields and Kinetics from the Vapor Phase Cracking of Wood Pyrolysis Tars**. AIChE Journal 35(1). p. 120-128. 1989.

BRADBURY, A. G. W.; SAKAI, Y.; SHAFIZADEH, F. **A Kinetic Model for Pyrolysis of Cellulose**. Journal of Applied Polymer Science 23. p. 3271-3280. 1979.

BRAUN, M. P. S.; MINETO, A. T.; NAVARRO, H. A.; CABEZAS-GÓMEZ, L.; SILVA, R. C. **The effect of numerical diffusion and the influence of computational grid over gas-solid two-phase flow in a bubbling fluidized bed**. Mathematical and Computer Modelling 52. p. 1390-1402. 2010.

CAMARGO, F. L. **Estudo da Pirólise Rápida de Bagaço de Cana em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante**. Tese de D.Sc. Universidade Estadual de Campinas (UNICAMP), Campinas, SP, Brasil. 2006.

CASTELLANOS, A.B.V. **Análise Unidimensional Detalhada da Gaseificação de Bagaço de Cana em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante**. Dissertação de M.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2012.

CENTRO NACIONAL DE REFERÊNCIA EM BIOMASSA (CENBIO). **Estado da Arte – Comparação entre Tecnologias de Gaseificação de Biomassa Existentes no Brasil e no Exterior e Formação de Recursos Humanos na Região Norte**. 108 p. 2002.

CHEN, Y.; CHARPENAY, S.; JENSEN, A.; WÓJTOWICZ, M.A. **Modeling of Biomass Pyrolysis Kinetics**. Symposium (International) on Combustion 27(1). p. 1327-1334. 1998.

CHORLEY, M. J.; WALKER, D. W. **Performance analysis of a hybrid MPI/OpenMP application on multi-core clusters.** Journal of Computational Science 1(3). p. 168-174. 2010.

COMPANHIA NACIONAL DE ABASTECIMENTO (CONAB). **A Geração Termoelétrica com a Queima do Bagaço de Cana-de-Açúcar no Brasil.** 160 p. 2011.

CORNEJO, P.; FARÍAS, O. **Mathematical modeling of coal gasification in a fluidized bed reactor using an Eulerian granular description.** International Journal of Chemical Reactor Engineering 9. 2011.

DARWISH, M. S.; MOUKALLED, F. H. **Normalized Variable and Space Formulation Methodology for high-Resolution Schemes.** Numerical Heat Transfer 26(1). p. 79-96. 1994.

DARTEVELLE, S. **Hydrodynamic and Thermodynamic Models, and Numerical Techniques.** Los Alamos, Novo México, U.S. Los Alamos National Laboratory, 2005.

DARTEVELLE, S. **From Model Conception to Verification and Validation, A Global Approach to Multiphase Navier-Stoke Models with an Emphasis on Volcanic Explosive Phenomenology.** Los Alamos, Novo México, U.S. Los Alamos National Laboratory, 2007.

DAYTON, D.C.; TURK, B.; GUPTA, R. **Syngas Cleanup, Conditioning, and Utilization.** Em: Brown, R.C. **Thermochemical Processing of Biomass**, 1 ed., Cap. 4, West Sussex, Reino Unido, John Wiley & Sons Ltd. 2011.

DELIS, A.I.; MATHIOUDAKIS, E.N. **A finite volume method parallelization for the simulation of free surface shallow water flows.** Mathematics and Computers in Simulation 79. p. 3339-3359. 2009.

DESAI, P.R.; WEN, C.Y. **Computer Modeling of the Merc Fixed Bed Gasifier.** Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy, 1978.

DI BLASI, C. **Heat, momentum and mass transport through a shrinking biomass particle exposed to thermal radiation.** Chemical Engineering Science 51. p. 1121-1132. 1996.

DI BLASI, C. **Modeling chemical and physical processes of wood and biomass pyrolysis.** Progress in energy and combustion science 34(1). p. 47-90. 2008.

DI BLASI, C. **Combustion and Gasification Rates of Lignocellulosic Chars.** Progress in Energy and Combustion Science 35(2). p. 121-140. 2009.

DONGARRA, J.; KENNEDY, K.; WHITE, A. **Introduction.** Em: Dongarra, J.; Foster, I.; Fox, G.; Gropp, W.; Kennedy, K.; Torczon, L.; White, A. **Source Book of Parallel Computing**, 1 ed., Cap. 1, São Francisco, Estados Unidos, Morgan Kaufmann Publishers. 2003.

DRYER, F.I. **High Temperature Oxidation of Carbon Monoxide and Methane in a Turbulent Flow Reactor.** Air Force Office of Scientific Research, Scientific Report, Princeton University, Princeton, Estados Unidos, 1972.

ENGVALL, K.; KUSAR, H.; SJÖSTRÖM, K.; PETTERSSON, L.J. **Upgrading of Raw Gas from Biomass and Waste Gasification: Challenges and Opportunities.** Topics in Catalysis 54. p. 949-959. 2011.

ENWALD, H.; PEIRANO, E.; ALMSTEDT, A.-E. **Eulerian Two-Phase Flow Theory Applied to Fluidization.** International Journal of Multiphase Flow 22 (complementar). p. 21-66. 1996.

FAN, L.S.; ZHU, C. **Principles of Gas-Solid Flows.** Ed. Cambridge University Press. Cambridge, UK. 576 p. 1998.

FERZIGER, J.H.; PERIC, M. **Computational Methods for Fluid Dynamics.** Ed. Springer. Berlim, Alemanha. 426 p. 2002.

GELDART, D. **Types of Gas Fluidization.** Powder Technology 7. p. 285-292. 1973.

GERBER, S.; BEHRENDT, F.; OEVERMANN, M. **An Eulerian modeling approach of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor using char as bed material.** Fuel 89(10). p. 2903-2917. 2010.

GIDASPOW, D. **Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions.** Ed. Academic Press. San Diego, CA. 469 p. 1994.

GIL, J.; AZNAR, M.P.; CABALLERO, M.A.; FRANCÉS, E.; CORELLA, J. **Biomass Gasification in Fluidized Bed at Pilot Scale with Steam-Oxygen Mixtures. Product Distribution for Very Different Operating Conditions.** Energy and Fuels (11)6. p. 1109-1118. 1997.

GIL, J.; CORELLA, J.; AZNAR, M.P.; CABALLERO, M.A. **Biomass gasification in atmospheric and bubbling fluidized bed: Effect of the type of gasifying agent on the product distribution.** Biomass and Bioenergy 17. p. 389-403. 1999.

GÓMEZ-BAREA, A.; LECKNER, B. **Modeling of biomass gasification in fluidized bed.** Progress in Energy and Combustion Science 36(4). p. 444-509. 2010.

GRACE, J.R.; LECKNER, B.; ZHU, J.; CHENG, Y. **Fluidized Beds.** Em: Crowe, C.T. **Multiphase Flow Handbook**, 1 ed., Cap. 5, Boca Raton, Estados Unidos, CRC Press. 2006.

GRONLI, M.G.; MELAAEN, M.C. **Mathematical Model for Wood Pyrolysis – Comparison of Experimental Measurements with Model Predictions.** Energy & Fuels 14(4). p. 791-800. 2000.

GUENTHER, C.; SYAMLAL, M. **The effect of numerical diffusion on simulation of isolated bubbles in a gas-solid fluidized bed.** Power Technology 116. p. 142-154. 2001.

GUERRERO, M.S. **Parallel multigrid algorithms for computational fluid dynamics and heat transfer.** Tese de D.Sc. Universidade Politécnic da Catalúnia. Terrasa, Estiu, Espanha. 2000.

GUNN, D.J. **Transfer of heat or mass to particles in fixed and fluidized beds.** Int. J. Heat Mass Transfer 21(4). p. 467-476. 1978.

HAMZEHEI, M. **Study of Hydrodynamics and Heat Transfer in the Fluidized Bed Reactors.** Em: Belmiloudi, A. **Heat Transfer - Mathematical Modelling, Numerical Methods and Information Technology**, 1 ed., Cap. 14, Rijeka, Croácia, InTech. 2011.

HASELI, Y.; van OIJEN, J.A.; de GOEY, L.P.H. **Modeling biomass particle pyrolysis with temperature-dependent heat of reactions.** Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 90. p. 140-154. 2011.

HENRIQUES, R.M. **Potencial para Geração de Energia Elétrica no Brasil com Resíduos de Biomassa Através da Gaseificação.** Tese de D.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2009.

HERZOG, N.; SCHREIBER, M.; EGBERS, C.; KRAUTZ, H.J. **A comparative study of different CFD-codes for numerical simulation of gas-solid fluidized bed hydrodynamics.** Computers and Chemical Engineering 39. p. 41-46. 2012.

HIGMAN, C.; van der BURGT, M. **Gasification.** Gulf Professional Publishing/Elsevier Science. Burlington, MA. 2008.

HOBBS, M. L.; RADULOVIC, P. T.; SMOOT, L. D. **Modeling Fixed-Bed Coal Gasifiers.** AIChE Journal 38 (5). p. 681-702. 1992.

HOFFMAN, K.A.; CHIANG, S.T. **Computational Fluid Dynamics – Volume I.** Wichita, KS. 500 p. 2000.

HOSOYA, T.; KAWAMOTO, H.; SAKA, S. **Cellulose-Hemicellulose and Cellulose-Lignin Interactions in Wood Pyrolysis at Gasification Temperature.** Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 80 (1). p. 118-125. 2007.

HUYNH, C.V.; KONG, S.C. **Performance characteristics of a pilot-scale biomass gasifier using oxygen-enriched air and steam.** Fuel 103. p. 987-996.2013.

IGNÁCIO, A.A.V.; FILHO, V.J.M.F. **MPI: Uma Ferramenta para Implementação Paralela.** Pesquisa. Operacional 22(1). p. 105-116. 2002.

JAKOBSEN; H.A. **Chemical Reactor Modelling – Multiphase Reactive Flows.** Ed. Springer. Berlim, Alemanha. 1296 p. 2008.

JIN, H.; JESPERSEN, D.; MEHROTRA, P.; BISWAS, R.; HUANG, L.; CHAPMAN, B. **High performance computing using MPI and OpenMP on multi-core parallel systems.** Parallel Computing 37. p. 562-575. 2011.

JONES, W.P.; LINDSTEDT, R.P. **Global Reactions Schemes for Hydrocarbon Combustion**. Combustion and Flame 73(3). p. 233-249. 1988.

JOHNSON, P. C.; JACKSON, R. **Frictional-collisional constitutive relations for granular materials, with applications to plane shearing**. Journal of Fluid Mechanics 176. p. 67-93. 1987.

KEOWN, D.M.; HAYASHI, J.I.; LI, C.Z. **Effects of volatile-char interactions on the volatilization of alkali and alkaline earth metallic species during the pyrolysis of biomass**. Fuel 87. p. 1187-1194. 2008.

KNIGHT, D.D. "Parallel Computing in Computational Fluid Dynamics". Em: **AGARD Conference Proceedings AGARD CP**, Cap. 3, pp. 1-14, Paris, Abril. 1996.

KIRKELS, A.F.; VERBONG, G.P.J. **Biomass gasification: Still promising? A 30-year global overview**. Renewable and Sustainable Energy Reviews 15. p. 471-481. 2011.

KUMAR, A.; JONES, D.D.; HANNA, M.A. **Thermochemical Biomass Gasification: A Review of the Current Status of the Technology**. Energies 2. p. 556-581. 2009.

LEBOWITZ, J. L. **Exact solution of generalized Percus-Yevick equation for a mixture of hard spheres**. Physical Review 133. p. 895-899. 1964.

LEONARD, B.P.; MOKHTARI, S. **Beyond First-Order Upwinding: The Ultra-Sharp Alternative for Non-Oscillatory Steady-State Simulation of Convection**. International Journal for Numerical Methods in Engineering 30. p. 729-766. 1990.

LI, C.Z. **Importance of volatile-char interactions during the pyrolysis and gasification of low-rank fuels – A review**. Fuel 112. p. 609-623. 2013.

LI, C.; SUZUKI, K. **Tar property, analysis, reforming mechanism and model for biomass gasification – An overview**. Renewable and Sustainable Energy Reviews 13. p. 594-604. 2009.

LI, T.; GEL, A.; SYAMLAL, M.; GUENTHER, C.; PANNALA, S. **High-resolution simulations of coal injection in a gasifier**. Industrial & Engineering Chemistry Research. 49(21). p. 10767-10779. 2010.

LONG, H.A.; WANG, T. "Case studies for biomass/coal co-gasification in IGCC applications". Em: **Proceedings of ASME Turbo Expo**, pp. 1-15, Vancouver, Junho. 2011.

LV, P. M.; XIONG, Z. H.; CHANG, J.; WU, C. Z.; CHEN, Y.; ZHU, J. X. **An experimental study on biomass air-steam gasification in a fluidized bed**. Bioresource Technology 95. p. 95-101. 2004.

MAKKAWI, Y.; OCONE, R. **Modelling the Particle Stress at the Dilute-intermediate-dense Flow Regimes: A Review**. KONA – Powder and Technology 23. 49-63. 2005.

MALIGER, V.R.; DOHERTY, W.O.S.; FROST, R.L.; MOUSAVION, P. **Thermal Decomposition of Bagasse: Effect of Different Sugar Cane Cultivars**. Ind. Eng. Chem. Res. 50(2). p. 791-798. 2011.

MANYÀ, J.J.; ARAUZO, J. **An Alternative Kinetic Approach to Describe the Isothermal Pyrolysis of Micro-Particles of Sugar Cane Bagasse**. Chemical Engineering Journal 139(3). p. 549-561. 2008.

MEHRABIAN, R.; ZAHIROVIC, S.; SCHARLER, R.; OBERNBERGER, I.; KLEDITZSCH, S.; WIRTZ, S.; SCHERER, V.; LU, H.; BAXTER, L. L. **A CFD model for thermal conversion of thermally thick biomass particles**. Fuel Processing Technology 95. p. 96-108. 2012.

MINETO, A.T. **Simulação Numérica de Escoamentos Gás-Sólido em Leito Fluidizado Borbulhante Utilizando a Teoria Cinética dos Escoamentos Granulares**. Dissertação de M. Sc. UNESP, Bauru, Brasil. 2009.

MILLER, R.S.; BELLAN, J. **A generalized biomass pyrolysis model based on superimposed cellulose, hemicellulose and lignin kinetics**. Combustion Science and Technology 126 (1-6). p. 97-137. 1997.

MIRANDA, I.C. **Aproveitamento Energético a partir de Resíduos de Biomassa: Bagaço e Palha de Cana-de-Açúcar**. Dissertação de M.Sc. Universidade Federal do Rio de Janeiro (UFRJ), Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2009.

MITANI, T.; WILLIAMS, F.A. **Studies of Cellular Flames in Hydrogen-Oxygen-Nitrogen Mixtures.** Combustion and Flame 39(2). p. 169-190. 1980.

MOK, W.S.L.; ANTAL, M.J. **Effects of pressure on biomass pyrolysis. II. Heats of reaction of cellulose pyrolysis,** Thermochimica Acta 68 (2–3). p. 165–186. 1983.

MORF, P.O. **Secondary Reactions of Tar during Thermochemical Biomass Conversion.** Tese de D.Sc. Instituto Federal de Tecnologia de Zurique, Zurique, Suíça. 2001.

NEVES, D.; THUNMAN, H.; MATOS, A.; TARELHO, L.; GÓMEZ-BAREA, A. **Characterization and prediction of biomass pyrolysis products.** Progress in Energy and Combustion Science 37(5). p. 611-630. 2011.

OEVERMANN, M.; GERBER, S.; BEHRENDT, F. **Euler-Lagrange/DEM simulation of wood gasification in a bubbling fluidized bed reactor.** Particuology 7(4). p. 307-316. 2009.

ÓRFÃO, J.J.M.; ANTUNES, F.J.A.; FIGUEIREDO, J.L. **Pyrolysis kinetics of lignocellulosic materials-three independent reactions model.** Fuel 78. p. 349-358. 1999.

PANNALA, S.; D'AZEVEDO, E.; SYAMLAL, M. **Hybrid (OpenMP and MPI) parallelization of MFIX: A multiphase CFD code for modeling fluidized beds.** Proceedings of the 2003 ACM Symposium on Applied Computing – SAC03. Melbourne, FL. 2003.

PANNALA, S.; DAW, C.S.; FINNEY, C.E.A.; BENYAHIA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J. "Modeling the Collisional-Plastic Stress Transition for Bin Discharge of Granular Material". Em: **Proceedings of the 6th International Conference on Micromechanics of Granular Media**, vol. 1145, pp. 657-660, Golden, CO, Estados Unidos, Julho. 2009.

PARK, W.C.; ATREYA, A.; BAUM, H.R. **Experimental and theoretical investigation of heat and mass transfer processes during wood pyrolysis.** Combustion and Flame 157. p. 481-494. 2010.

PATANKAR, S.V. **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Ed. Hemisphere Publishing Corporation. – Estados Unidos, 214 p. 1980.

PEPIOT, P.; DIBBLE, C.J.; FOUST, T.D. **Computational Fluid Dynamics Modeling of Biomass Gasification and Pyrolysis**. Em: Nimlos, M.R., Crowley, M.F. (eds), **Computational Modelling in Lignocellulosic Biofuel Production** vol. (1052). Ed. Oxford University Press, pp. 273-298, 2010.

PETERSEN, I.; WERTHER, J. **Experimental investigation and modeling of gasification of sewage sludge in the circulating fluidized bed**. Chemical Engineering and Processing: Process Intensification 44(7). p. 717-736. 2005.

PID Eng & Tech. **User Manual. Process Integral Development Eng&Tech. GABI-0. Gasification Plant. PETROBRAS**. PID Eng&Tech. 98 p. 2012.

PINHO, J.M.; VILLAMIL-CASTELLANOS, A.B.; LEIROZ, A.J.K.; CRUZ, M.E. **Descrição Euleriana do Processo de Gaseificação de Biomassa em Reatores de Leito Fluidizado Borbulhante**. *Congresso Nacional de Engenharia Mecânica (2012)*. 0565. São Luís-Brasil. Agosto de 2012.

PINHO, J. **Simulação Euleriana da Gaseificação de Bagaço de Cana-de-Açúcar em Reator de Leito Fluidizado Borbulhante**. Dissertação de M.Sc. COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil. 2012.

PÜTÜN, E.; ATES, F.; PÜTÜN, A. E. **Catalytic pyrolysis of biomass in inert and steam atmospheres**. Fuel 87. p. 815-824. 2008.

RAFIDAH, J.; SAKANISHI, K.; MIYAZAWA, T.; NOR, M.Y.M.; ASMA, I.W.; MAHANIM, S.M.A.; SHARARUDDIN, H.; PUAD, E. **Effects of different gasifying agents on syngas production from oil palm trunk**. Journal of Tropical Forest Science 23(3). p. 282-288. 2011.

RANADE, V.V. **Chemical Reactor Engineering**. Ed. Academic Press. San Diego, CA. 474 p. 2002.

RANZI, E.; CUOCI, A.; FARAVELLI, T.; FRASSOLDATI, A.; MIGLIAVACCA, G.; PIERUCCI, S.; SOMMARIVA, S. **Chemical Kinetics of Biomass Pyrolysis**. Energy & Fuels 22 (6). p. 4292-4300. 2008.

RAVELLI, S.; PERDICHIZZI, A.; BARIOGOZZI, G. **Description, applications and numerical modelling of bubbling fluidized bed combustion in waste-to-energy plants**. Progress in Energy and Combustion Science (34). p. 224-253.

REZAIYAN, J.; CHEREMISINOFF, N. P. **Gasification Technologies: A Primer for Engineers and Scientists**. Ed. CRC Press, Taylor & Francis Group. Boca Raton, FL. 360 p. 2005.

RODRIGUEZ, R.; MAGNE, P.; DEGLISE, X. **Sugar Cane Bagasse as a Feedstock for an Industrial Fast Pyrolysis Process Under Development**. Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 12 (3-4). p. 301-318. 1987.

ROSS, I.B.; DAVIDSON, J.F. **The Combustion of Carbon Particles in a Fluidized Bed**. Trans. Ind. Chem. Eng. 59. p. 108-114. 1981.

SAVAGE, S. B. **Analyses of slow high-concentration flows of granular materials**. Journal of Fluid Mechanics 377. p. 1-26. 1998.

SCHAEFFER, D.G. **Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow**. Journal of Differential Equations 66(1). p. 19-50. 1987.

SREEDHARAN, V. **CFD Analysis of Coal and Heavy Oil Gasification for Syngas Production**. Tese de Ph.D. Universidade de Aalborg, Aalborg, Dinamarca. 2012.

SIEDLECKI, M. **On the gasification of biomass in a steam-oxygen blown CFB gasifier with the focus on gas quality upgrading: technology background, experiments and mathematical modeling**. Tese de D.Sc. Universidade de Tecnologia de Delft, Delft, Holanda. 2011.

SINGH, R.I.; BRINK, A.; HUPA, M. **CFD modeling to study fluidized bed combustion and gasification**. Applied Thermal Engineering 52. p. 585-614. 2013.

SOFIALIDIS, D.; FALSTI, O. **Simulation of Biomass Gasification in Fluidized Beds Using Computational Fluid Dynamics Approach**. *Thermal Science* 5 (2). p. 95-105. 2001.

SOUZA, M.P. **Efeitos numéricos na simulação de escoamentos gás-sólidos em leito fluidizado borbulhante utilizando a teoria cinética dos escoamentos granulares**. Dissertação de M.Sc. UNESP, Bauru, SP, Brasil. 2009.

SOUZA-SANTOS, M.L. **Comprehensive modeling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers**. *Fuel*. 68. p. 1507-1521. 1989.

SOUZA-SANTOS, M.L. **Modelling and simulation of bed-bed boilers and gasifiers for carbonaceous solids**. Tese D.Sc. Universidade de Sheffield, United Kingdom, Inglaterra. 1987.

SOUZA-SANTOS, M.L. **Solid Fuels Combustion and Gasification**. Ed. Marcel Dekker, Inc. New York, NY. 400 p. 2004.

SRIVASTAVA, A.; SUNDARESAN, S. **Analysis of a Frictional-Kinetic Model for Gas-Particle Flow**. *Powder Technology* 129(1-3). p. 72-85. 2003.

STRINGEL, S.S. **High Temperature Gasification of Millimetric Wood Particles Between 800 °C and 1400 °C**. Tese de D.Sc. Universidade de Toulouse, Toulouse, França. 2011.

STUBINGTON, F.; AIMAN, S. **Pyrolysis Kinetics of Bagasse at High Heating Rates**. *Energy & Fuels* 8 (1). p. 194-203. 1994.

SUN, J. **Multiscale modeling of segregation in granular flows**. Tese de Ph.D. Universidade do Estado de Iowa, Ames, Iowa, Estados Unidos. 2007.

SYAMLAL, M. **Higher Order Discretization Methods for the Numerical Simulation of Fluidized Beds**. *Annual meeting of the AIChE (1997)*. Los Angeles, Estados Unidos. Novembro de 1997.

SYAMLAL, M. **Multiphase Hydrodynamics of Gas-Solids Flow**. Tese de Ph.D. Instituto de Tecnologia de Illinois, Chicago, Illinois, Estados Unidos. 1985.

SYAMLAL, M. **MFIX Documentation Numerical Technique**. Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy, 1998.

SYAMLAL, M. **MFIX Documentation User's Manual**. Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy, 1994.

SYAMLAL, M. **The Particle-Particle Drag Term in a Multiparticle Model of Fluidization – Topical Report**. Morgantown, West Virginia, U.S. Morgantown Energy Technology Center, 1987.

SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T.J.; BENYAHIA, S.; GEL, A.; PANNALA, S. **Open-Source Software in Computational Research: A Case Study**. Modelling and Simulation in Engineering. p. 1-10. 2008.

SYAMLAL, M.; PANNALA, S. **Multiphase Continuum Formulation for Gas-Solids Reacting Flows**. Em: Pannala, S.; Syamlal, M.; O'Brien, T.J., **Computational Gas-Solids Flows and Reacting Systems: Theory, Methods and Practice**, 1 ed., Cap. 1, Hershey, Estados Unidos, Engineering Science Reference. 2011.

SYAMLAL, M.; ROGERS, W.; O'BRIEN, T.J. **MFIX Documentation Theory Guide**. Morgantown, West Virginia, U.S. Department of Energy, 1993.

TÁVORA, F.L. **História e Economia dos Biocombustíveis no Brasil**. Centro de Estudos da Consultoria do Senado, 2011. ISSN 1983-0645.

TANENBAUM, A.S. **Structured Computer Organization**. Ed. Prentice-Hall Nova Jersey, Estados Unidos, 553 p. 2000.

TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. **Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer**. Ed. Taylor & Francis. Washington, DC. 782 p. 1997.

TARDOS, G. I.; MCNAMARA, S.; TALU, I. **Slow and intermediate flow of a frictional bulk powder in the Couette geometry**. Powder Technology 131. p. 23-29. 2003.

TURNER, S.R., 2000, **An Introduction to Combustion: Concepts and Applications**. Ed. McGraw-Hill Science. Singapura, 676 p. 2002.

TVERBERG, G. **World Energy Consumption Since 1820 in Charts**. URL http://science.kennesaw.edu/~bsetzer/our_finite_world/World%20Energy%20Consumption%20Since%201820%20in%20Charts%20%E7%A7%20Our%20Finite%20World.pdf. Março. 2012.

TWIDELL, J.; WEIR, T. **Renewable energy resources**. Ed. Taylor & Francis, New York, NY. 464 p. 2006.

van der DRIFT, A.; BOERRIGTER, H. **Synthesis gas from biomass for fuels and chemicals**. Em: Relatório ECN-C—06-001, Biomass, Coal and Environmental Research (ECN), Amsterdã, 2006.

van der HOEF, M.A.; YE, M.; van SINT ANNALAND, M.; ANDREWS, A. T.; SUNDARESAN, S.; KUIPERS, J.A. **M. Multi-scale modeling of gas-fluidized beds**. *Advances in Chemical Engineering* 31. p. 65-149. 2006.

van LOO, S.; KOPPEJAN, J. **The Handbook of Biomass Combustion and Co-firing**. Ed. Earthscan. Londres, Reino Unido. 465 p. 2008.

van WACHEN, B.G.M.; ALMSTEDT, A.E. **Methods for multiphase computational fluid dynamics**. *Chemical Engineering Journal* 96. p. 81-98. 2003.

VÁRHEGYI, G.; ANTAL, M.J.; JAKAB, E.; SZABÓ, P. **Kinetic modeling of biomass pyrolysis**. *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis* 42. p. 73-87. 1997.

VENDERBOSCH, R.H.; PRINS, W. **Fast Pyrolysis**. Em: Brown, R.C. **Thermochemical Processing of Biomass**, 1 ed., Cap. 5, West Sussex, Reino Unido, John Wiley & Sons Ltd. 2011.

VERSTEEG, H.K.; MALALASEKERA, W. **An Introduction to Computational Fluid Dynamics**. Ed. Pearson. Harlow, Inglaterra. 503 p. 2007.

VIDYAPATI, V. **Constitutive modeling of dense granular flow based on discrete element method simulations**. Tese de Ph.D. Universidade do Estado de Iowa, Ames, Iowa, Estados Unidos. 2012.

- VUN, S. W. **Computational Fluid Dynamics Modelling of Dense Rheology and Freeboard Gas Velocity Fields in a Fluidised Bed.** Tese de Ph.D. Universidade de Tecnologia de Swinburne, John St., Hawthorn, Austrália. 2010.
- WANG, Y. YAN, L. **CFD Studies on Biomass Thermochemical Conversion.** International Journal of Molecular Sciences 9. p. 1108-1130. 2008^a.
- WANG, Y.; YAN, L. **CFD modeling of a fluidized bed sewage sludge gasifier for syngas.** Asia-Pacific Journal of Chemical Engineering 3(2). p. 161-170. 2008^b.
- WANG, Y.; YAN, L. **CFD based combustion model for sewage sludge gasification in a fluidized bed.** Front. Chem. Eng. China 3(2). p. 138-145. 2009.
- WHITE, J.E.; CATALLO, W.J.; LEGENDRE, B.L. **Biomass pyrolysis kinetics: A comparative critical review with relevant agricultural residue case studies.** Journal of Analytical and Applied Pyrolysis 91. p. 1-33. 2011.
- XIE, N.; BATTAGLIA, F.; PANNALA, S. **Effects of using two- versus three-dimensional computational modeling of fluidized beds: Part I, hydrodynamics.** Powder Technology 182. p. 1-13. 2008^a.
- XIE, N.; BATTAGLIA, F.; PANNALA, S. **Effects of using two- versus three-dimensional computational modeling of fluidized beds: Part II, budget analysis.** Powder Technology 182. p. 1-13. 2008^b.
- XIE, J.; ZHONG, W.; JIN, B.; SHAO, Y.; LIU, H. **Simulation on gasification of forestry residues in fluidized beds by Eulerian-Lagrangian approach.** Bioresource Technology 121. p. 36-46. 2012.
- XUE, Q.; HEINDEL, T.J.; FOX, R.O. **A CFD Model for Biomass Fast Pyrolysis in Fluidized-Bed Reactors.** Chemical Engineering Science 66(11). p. 2440–2452. 2011.
- YU, L.; LU, J.; ZHANG, X.; ZHANG, S. **Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF).** Fuel 86(5-6). p. 722-734. 2007.

ZANZI, R.; BAI, X.; CAPDEVILA, P.; BJÖRNBOM, E. **Pyrolysis of biomass in presence of steam for preparation of activated carbon, liquid and gaseous products.** *6th World Congress of Chemical Engineering.* Melbourne-Australia. Setembro de 2001.

ZHANG, W. **Automotive fuels from biomass via gasification.** *Fuel Processing Technology* 91. p. 866-876. 2010.

11 ANEXO 1 - DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES GOVERNANTES

11.1 Discretização das Equações de Transporte

As equações governantes que regem o escoamento reativo de um leito fluidizado foram apresentadas no Cap. 4. Ao invés de se discretizar todas as equações já apresentadas, será considerada a equação de transporte para uma grandeza geral ϕ , que pode representar velocidade, temperatura, fração mássica, ou, no caso da equação da continuidade, ser igual a um. A equação de conservação para a grandeza ϕ é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m \phi) + \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m \phi) = \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi) + R_\phi \quad (\text{A.1})$$

onde o primeiro termo do lado esquerdo da equação representa o acúmulo da propriedade ϕ no volume de controle, e é chamado de termo transiente, enquanto que o segundo representa a convecção da propriedade ϕ . O primeiro termo do lado direito da equação representa a difusão da propriedade ϕ e o segundo termo representa um termo fonte dessa propriedade.

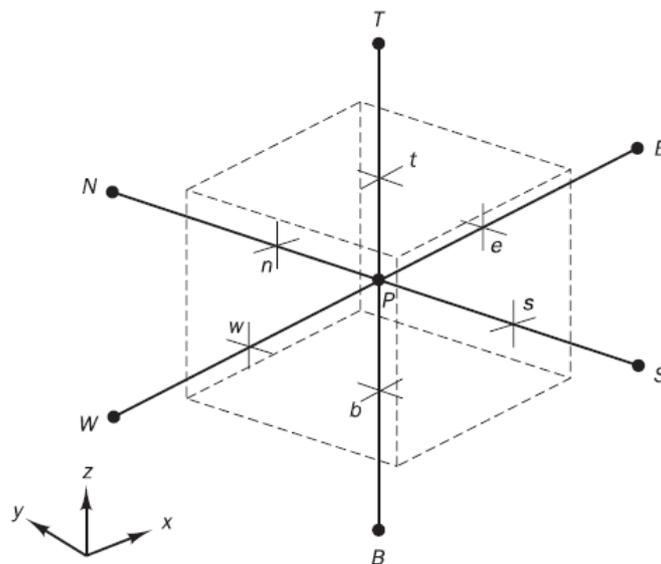


Figura A1. 1 - Célula tridimensional com seus pontos vizinhos (retirado de VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007).

Utilizando o método dos volumes finitos e integrando a Eq. (A1.1) em relação ao volume de controle mostrado na Fig. A1.1, obtém-se:

$$\int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P dV + \int_{v.c.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} \phi)_P dV = \int_{v.c.} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)_P dV + \int_{v.c.} R_{\phi P} dV \quad (A1.2)$$

A integração do termo transiente fornece:

$$\int_{v.c.} \frac{\partial}{\partial t} (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P dV \approx [(\varepsilon_m \rho_m \phi)_P - (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P^0] \frac{\Delta V}{\Delta t} \quad (A1.3)$$

onde o ΔV é o volume da célula, Δt é o passo de tempo e o sobrescrito 0 denota um valor referente ao passo de tempo anterior.

Antes de realizar a integração do termo fonte é necessário fazer a sua linearização, como descrito em PATANKAR (1980):

$$R_{\phi P} = \bar{R}_{\phi P} - R'_{\phi P} \phi_P \quad (A1.4)$$

e a integração do termo fonte é dada por:

$$\int_{v.c.} R_{\phi P} dV \approx \bar{R}_{\phi P} \Delta V - R'_{\phi P} \phi_P \Delta V \quad (A1.5)$$

A integração do termo difusivo é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{v.c.} \nabla \cdot (\Gamma_\phi \nabla \phi)_P dV &\approx \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e A_e - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_w A_w + \\ &+ \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_n A_n - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_s A_s + \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_t A_t - \left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right)_b A_b \end{aligned} \quad (A1.6)$$

Os fluxos difusivos são calculados através de interpolação linear (PATANKAR, 1980; VERSTEEG e MALALASEKERA, 2007). Por simplicidade será apresentado a seguir apenas o termo referente à face leste da célula do volume de controle:

$$\left(\Gamma_\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)_e \approx (\Gamma_\phi)_e \frac{(\phi_E - \phi_P)}{\Delta x_e} \quad (A1.7)$$

sendo que Δx_e é a distância entre os pontos P e E , mostrados na Fig. A1.1.

Em PATANKAR (1980), é mostrado que os coeficientes de difusão devem ser calculados por uma média harmônica entre os valores dos coeficientes nos centros dos nós vizinhos. Novamente apresentando apenas o coeficiente da face leste, é possível escrever:

$$(\Gamma_\phi)_e = \frac{(\Gamma_\phi)_P (\Gamma_\phi)_E}{f_e (\Gamma_\phi)_P + (1 - f_e) (\Gamma_\phi)_E} \quad (A1.8)$$

onde f_e é definido por:

$$f_e = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_P + \Delta x_E} \quad (A1.9)$$

O termo Δx_P é o espaçamento da célula do volume de controle centrada no ponto P .

Por fim, a integração do termo convectivo é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} \phi)_P dV \approx & (\varepsilon_m \rho_m \phi)_e (u_m)_e A_e - (\varepsilon_m \rho_m \phi)_w (u_m)_w A_w + \\ & + (\varepsilon_m \rho_m \phi)_n (v_m)_n A_n - (\varepsilon_m \rho_m \phi)_s (v_m)_s A_s + (\varepsilon_m \rho_m \phi)_t (w_m)_t A_t + \\ & - (\varepsilon_m \rho_m \phi)_b (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (A1.10)$$

Notando que os valores de $\varepsilon_m \rho_m \phi$ nas faces não são conhecidos, torna-se necessário o desenvolvimento de uma expressão capaz de calcular estes valores em função dos pontos discretos conhecidos. A forma de escrever estes termos é de fundamental importância para a qualidade dos resultados que serão obtidos, para casos onde os efeitos convectivos são dominantes (SOUZA, 2009).

A forma mais empregada para obter os termos convectivos consiste na utilização do método *Upwind* de Primeira Ordem, ou, como é mais comumente referido, método FOU (DARTEVELLE, 2007). As grandes vantagens deste método consistem no fato dele ser incondicionalmente estável e de ser de fácil implementação, reduzindo o tempo computacional (BRAUN *et al.* 2010). Em contrapartida, esse método possui uma elevada difusão numérica, o que reduz a acurácia dos resultados (HOFFMAN, 2001; GUENTHER e SYAMLAL, 2001; MALALASEKERA, 2007; BRAUN *et al.*, 2010).

Uma alternativa normalmente empregada para melhorar a acurácia dos resultados consiste na utilização de métodos de ordem superior para calcular os termos convectivos das equações de transporte (MALALASEKEERA, 2007). No entanto, em escoamentos que possuem número de Peclet local muito elevado, aliados a gradientes muito intensos, os métodos de ordem superior tendem a oscilar, gerando resultados não físicos (DARWISH e MOUKALED, 1994; FERZIGER, 2002). Para limitar os resultados obtidos pelos métodos de ordem superior, LEONARD e MOKHTARI (1990) desenvolveram a ideia de um limitador universal como função de um valor normalizado de ϕ .

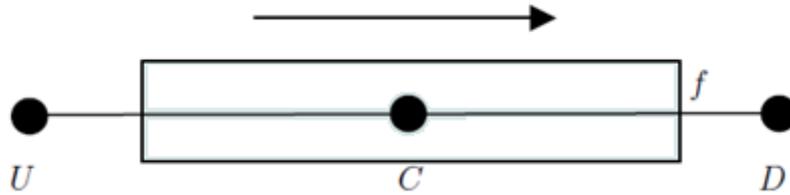


Figura A1. 2 - Nomenclatura dos pontos da malha em relação à posição dos pontos (retirado de SOUZA, 2009).

Usando a notação de SYAMLAL (1998), representada na Fig. A1.2, o valor normalizado da grandeza ϕ pode ser escrito como:

$$\tilde{\phi} = \frac{\phi - \phi_U}{\phi_D + \phi_U} \quad (\text{A1.11})$$

SYAMLAL (1998) lista quatro restrições para que o limitador universal na face f satisfaça as condições de monotonicidade necessárias para que o método seja limitado:

O valor de ϕ_f deve estar entre ϕ_C e ϕ_D , logo:

$$\tilde{\phi}_C \leq \tilde{\phi}_f \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{\phi}_C \leq 1 \quad (\text{A1.12})$$

Esta condição inclui o caso especial em que $\phi_C = \phi_D$, no qual $\phi_f = \phi_C = \phi_D$. Dessa forma, tem-se que:

$$\tilde{\phi}_f = 1 \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_C = 1 \quad (\text{A1.13})$$

Se $\phi_C = \phi_U$, tem-se que $\phi_f = \phi_C = \phi_U$. Então:

$$\tilde{\phi}_f = 0 \quad \text{para} \quad \tilde{\phi}_c = 0 \quad (\text{A1.14})$$

Para evitar não unicidade quando $\tilde{\phi}_c \rightarrow 0$, é necessário que:

$$\tilde{\phi}_f = \frac{\tilde{\phi}_c}{c} \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{\phi}_c \leq c \quad (\text{A1.15})$$

onde c é uma constante. Se houver variação temporal, c é a direção normal do número de Courant, definido como:

$$\sigma \triangleq \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad (\text{A1.16})$$

sendo que u é a componente da velocidade na direção x e Δx é o passo espacial na direção x .

Para comportamentos não monótonos ($\tilde{\phi}_c \leq 0$ ou $\tilde{\phi}_c \geq 1$), o limitador não impõe qualquer restrição, além daquela na qual as interpolações devem ser contínuas com respeito a $\tilde{\phi}_c$, ou seja, $\tilde{\phi}_f$ é a curva que deve passar pelos pontos (0,0) e (1,1) com $\partial \tilde{\phi}_f / \partial \tilde{\phi}_c > 0$ e finita.

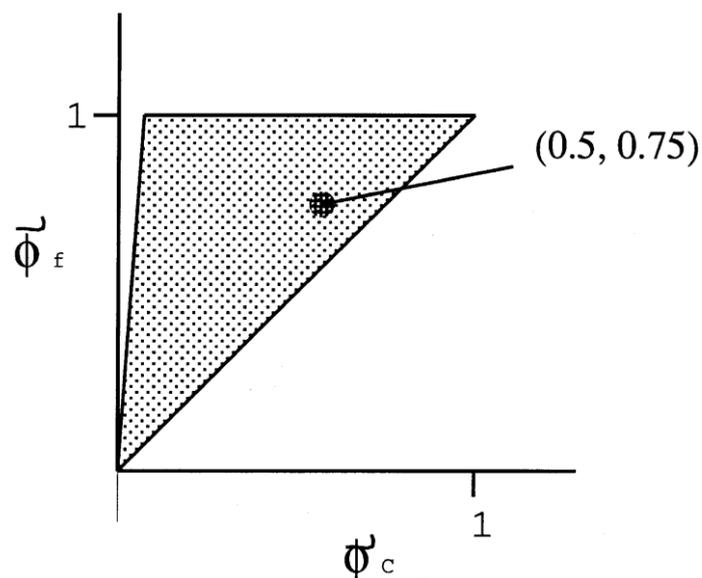


Figura A1. 3 - Diagrama de variável normalizada (retirado de GUENTHER e SYAMLAL, 2001).

As restrições impostas podem ser observadas graficamente através do diagrama de variável normalizada (NVD), mostrado na Fig. A1.3. Qualquer método de ordem

superior deve produzir um valor de ϕ_f que passe pela região sombreada da Fig. A1.3 para evitar oscilações (GUENTHER e SYAMLAL, 2001). Além disso, VERSTEEG e MALALASEKERA (2007) afirmam que uma condição necessária e suficiente para que um método seja de segunda ordem é que a função representativa de ϕ_f passe pelo ponto (0.5,0.75).

11.1.1 Limitação dos métodos de discretização de segunda ordem

Existem duas formas de limitar os métodos de segunda ordem, evitando oscilações não físicas. A primeira delas envolve a utilização de fator para realizar a limitação do método de ordem superior. A segunda utiliza uma combinação entre os métodos de ordem superior e de primeira ordem, de maneira a aliar a estabilidade e a limitação dos métodos de primeira ordem com a acurácia dos métodos de ordem superior. Ambas as maneiras de limitar os métodos de discretização de ordem superior são detalhados a seguir.

11.1.1.1 Fator de limitação *Downwind*

Uma forma de limitar os métodos de ordem superior de maneira implícita é através da utilização do fator de *Downwind*, ou simplesmente DWF (SOUZA, 2009). A grande vantagem da utilização do fator DWF consiste na manutenção do sistema septadiagonal obtido da discretização das equações (SYAMLAL, 1998). GUENTHER e SYAMLAL (2001) definem o fator DWF como:

$$\text{DWF} \triangleq \frac{\phi_f - \phi_c}{\phi_D - \phi_c} = \frac{\tilde{\phi}_f - \tilde{\phi}_c}{1 - \tilde{\phi}_c} \quad (\text{A1.17})$$

Dessa forma, as restrições para o limitador universal podem ser escritas como:

$$0 \leq \text{DWF} \leq 1 \quad \text{para} \quad 0 \leq \tilde{\phi}_c \leq 1 \quad (\text{A1.18})$$

Uma vez determinado o valor de DWF, o valor de ϕ_f é obtido reescrevendo a Eq. (A1.17) como:

$$\phi_f = \text{DWF} \phi_D + (1 - \text{DWF}) \phi_c \quad (\text{A1.19})$$

Com o objetivo de facilitar a inserção deste fator no código de solução do problema, é definido um fator de convecção ponderado, ξ , a partir do fator DWF, o qual pode ser calculado uma vez sem necessidade de verificação adicional na direção do fluxo (SOUZA, 2009). Este fator é normalmente definido como:

$$\xi \triangleq \begin{cases} DWF, & u \geq 0 \\ 1 - DWF, & u < 0 \end{cases} \quad (A1.20)$$

Então, o valor de ϕ na face leste passa a ser dado por:

$$\phi_e = \xi_e \phi_E + \bar{\xi}_e \phi_P \quad (A1.21)$$

onde $\bar{\xi}_f = 1 - \xi_f$ e $f = e, w, n, s, t$, ou b . Para as demais faces as equações obtidas são semelhantes a Eq. (A1.21).

O termo convectivo passa então a ser escrito como:

$$\begin{aligned} \int_{V.C.} \nabla \cdot (\varepsilon_m \rho_m v_{mi} \phi) dV &\approx [\xi_e (\varepsilon_m \rho_m \phi)_E + \bar{\xi}_e (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P] (u_m)_e A_e \\ &- [\xi_w (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_w (\varepsilon_m \rho_m \phi)_W] (u_m)_w A_w \\ &+ [\xi_n (\varepsilon_m \rho_m \phi)_N + \bar{\xi}_n (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P] (v_m)_n A_n \\ &- [\xi_s (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_s (\varepsilon_m \rho_m \phi)_S] (v_m)_s A_s \\ &+ [\xi_t (\varepsilon_m \rho_m \phi)_T + \bar{\xi}_t (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P] (w_m)_t A_t \\ &- [\xi_b (\varepsilon_m \rho_m \phi)_P + \bar{\xi}_b (\varepsilon_m \rho_m \phi)_B] (w_m)_b A_b \end{aligned} \quad (A1.22)$$

Substituindo as Eqs. (A1.3), (A1.5-7) e (A1.22) na Eq. (A1.2), obtém-se uma equação da forma:

$$a_p \phi_p = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_p \quad (A1.23)$$

onde o termo S_p retém a contribuição dos termos transientes e da integral do termo fonte linearizado, e os subscritos nb representam E, W, N, S, T e B.

SYAMLAL (1998) recomenda que, antes de utilizar a Eq. (A1.23) para calcular o valor de ϕ , sejam realizadas algumas manipulações matemáticas envolvendo a equação da continuidade. O objetivo destas manipulações é evitar grandes variações

nos valores de ϕ_f , potencialmente induzidos por pequenos desbalanceamentos de massa, os quais podem ocorrer durante o processo iterativo (DARTEVELLE, 2007).

Entretanto, antes de realizar este procedimento algumas alterações no termo fonte da equação da continuidade são importantes. De acordo com SYAMLAL (1998) a inclusão do termo fonte da equação da continuidade ($\sum_l R_{lm}$) dificulta a convergência do código, elevando o tempo de computação do problema. Além disso, sua inclusão no coeficiente central desestabiliza as iterações quando $\sum_l R_{lm} < 0$. Logo, é necessário reescrever este termo de maneira que sua contribuição para o coeficiente a_p não seja negativa. Utilizando a definição da função colchete, tem-se que:

$$\llbracket R \rrbracket = \begin{cases} 0, & R \leq 0 \\ R, & R > 0 \end{cases} \quad (\text{A1.24})$$

Da Eq. (A1.24) segue que:

$$R = \llbracket R \rrbracket - \llbracket -R \rrbracket \quad (\text{A1.25})$$

Logo, o termo de transferência de massa na interface pode ser escrito como:

$$\phi_p \sum_l R_{lm} = \phi_p \left[\left[\sum_l R_{lm} \right] \right] - \phi_p \left[\left[- \sum_l R_{lm} \right] \right] \quad (\text{A1.26})$$

Agora é possível utilizar o procedimento descrito por SYAMLAL (1998) e DARTEVELLE (2007), o qual é detalhado a seguir:

- (i) Obter a forma discretizada da equação da continuidade, a qual é obtida da mesma forma que a derivação da Eq. (A1.23),
- (ii) Multiplicar a equação da continuidade por ϕ_p ,
- (iii) Subtrair a Eq. (A1.23) da equação obtida no passo 2.

Após a aplicação do passo (iii) do procedimento descrito acima, é obtida uma equação de mesma forma que a Eq. (A1.23). No entanto, os coeficientes desta nova equação são diferentes dos coeficientes da Eq. (A1.23). Estes coeficientes são mostrados a seguir:

$$a_E = D_e - \xi_e (\varepsilon_m \rho_m)_E (u_m)_e A_e \quad (\text{A1.27a})$$

$$a_W = D_w + \bar{\xi}_w (\varepsilon_m \rho_m)_w (u_m)_w A_w \quad (\text{A1.27b})$$

$$a_N = D_n - \bar{\xi}_n (\varepsilon_m \rho_m)_n (v_m)_n A_n \quad (\text{A1.27c})$$

$$a_S = D_s + \bar{\xi}_s (\varepsilon_m \rho_m)_s (v_m)_s A_s \quad (\text{A1.27d})$$

$$a_T = D_t - \bar{\xi}_t (\varepsilon_m \rho_m)_t (w_m)_t A_t \quad (\text{A1.27e})$$

$$a_B = D_b + \bar{\xi}_b (\varepsilon_m \rho_m)_b (w_m)_b A_b \quad (\text{A1.27f})$$

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_\phi \Delta V + \left[\sum_l R_{lm} \right] \Delta V \quad (\text{A1.27g})$$

$$S_P = a_P^0 \phi_P^0 + \bar{R}_\phi \Delta V + \phi_P \left[- \sum_l R_{lm} \right] \Delta V \quad (\text{A1.27h})$$

$$a_P^0 = \frac{(\varepsilon_m \rho_m)_P^0}{\Delta t} \Delta V \quad (\text{A1.27i})$$

$$D_f = (\Gamma_\phi)_f \frac{A_f}{\Delta x_f} \quad (\text{A1.27j})$$

onde $f = e, w, n, s, t$ ou b .

11.1.1.2 Método da correção deferida

O método DWF possui uma ênfase maior nos valores das variáveis à jusante do que nos valores à montante da célula da malha, o que, em alguns casos, pode dificultar a convergência da solução (DARTEVELLE, 2005). Outra forma de limitar os métodos de ordem superior é através da utilização da correção deferida, que utiliza as propriedades de estabilidade de um método de primeira ordem, normalmente o método FOU, para obter um sistema algébrico idêntico ao dado pela Eq. (A1.23) (GUENTER e SYAMLAL, 2001). Após a solução deste sistema, com a utilização de um método de primeira ordem, alguns termos fontes são adicionados para capturar a precisão dos métodos de ordem superior (DARTEVELLE, 2007), ou seja, a Eq. (A1.23) é reescrita como:

$$a_P \phi_P = \sum_{nb} a_{nb} \phi_{nb} + S_P + S_{DC} \quad (A1.28)$$

A Equação (A1.28) é obtida através da soma e subtração dos termos de convecção discretizados com o método FOU, com os termos de convecção discretizados com um método de ordem superior. Dessa maneira, a diferença entre os termos obtidos pelo método FOU, com os termos obtidos pelo método de ordem superior, são combinados no último termo da Eq. (A1.28). Por outro lado, os termos discretizados com o método FOU aparecem implicitamente nos coeficientes a_P e a_{nb} (GUENTHER e SYAMLAL, 2001). Logo, o termo fonte adicional, S_{DC} , pode ser escrito como:

$$\begin{aligned} S_{DC} = & (\varepsilon_m \rho_m)_w (\phi_w^{FOU} - \phi_w^{HO}) (u_m)_w A_w - (\varepsilon_m \rho_m)_e (\phi_e^{FOU} - \phi_e^{HO}) (u_m)_e A_e \\ & (\varepsilon_m \rho_m)_s (\phi_s^{FOU} - \phi_s^{HO}) (v_m)_s A_s - (\varepsilon_m \rho_m)_n (\phi_n^{FOU} - \phi_n^{HO}) (v_m)_n A_n \\ & (\varepsilon_m \rho_m)_b (\phi_b^{FOU} - \phi_b^{HO}) (w_m)_b A_b - (\varepsilon_m \rho_m)_t (\phi_t^{FOU} - \phi_t^{HO}) (w_m)_t A_t \end{aligned} \quad (A1.29)$$

onde os sobrescritos *FOU* e *HO* denotam, respectivamente, os termos derivados com o método FOU e com um método de ordem superior.

É importante notar que, quando houver convergência, os termos derivados com o método FOU, presentes nos coeficientes a_P e a_{nb} , vão se cancelar com os termos presentes em S_{DC} . Dessa maneira, quando a convergência for atingida, não existirá nenhuma contribuição líquida dos termos ϕ_f^{FOU} na Eq. (A1.28), em que $f = e, w, n, s, t$ ou b . Logo, a solução convergida possuirá a precisão do método de ordem superior utilizado.

Considerando a notação da Fig. A1.2, os termos ϕ_f^{FOU} e ϕ_f^{HO} podem ser escritos, respectivamente, como:

$$\phi_f^{FOU} = \begin{cases} \phi_C, & \text{se } u_m \geq 0 \\ \phi_D, & \text{se } u_m < 0 \end{cases} \quad (A1.30a)$$

$$\phi_f^{HO} = \xi_f \phi_D + \check{\xi}_f \phi_C \quad (A1.30b)$$

em que o fator de ponderação ξ_f é calculado pela Eq. (A1.20) e o fator de ponderação $\check{\xi}_f$ é dado por $\check{\xi}_f = 1 - \xi_f$. Deve-se observar ainda que, adotando a notação utilizada na Eq. (A1.29) e ilustrada na Fig. (A1.1), $f = e, w, n, s, t$ ou b , com D e C iguais a P, E, W, N, S, T ou B .

11.2 Particularidade das Equações de Quantidade de Movimento

As equações de conservação da quantidade de movimento possuem algumas diferenças em relação as demais equações de conservação. Os termos do tensor de tensões, presente nas equações de conservação de quantidade de movimento, correspondem, basicamente, ao termo difusivo da equação de conservação para a grandeza geral ϕ . Entretanto, como a equação de quantidade de movimento é uma equação vetorial, este termo possui complicações adicionais em relação ao termo difusivo da Eq. (A1.1). Além disso, as equações também contém uma contribuição da pressão, a qual não possui correspondência na Eq. (A1.1). Esta contribuição é normalmente tratada como uma força de superfície, de maneira que ela pode ser integrada da mesma maneira que a utilizada para a equação de conservação geral. Contudo, devido ao elevado grau de acoplamento entre a pressão e a equação de continuidade, o tratamento deste termo e a distribuição das variáveis na malha possuem um importante papel na construção de uma solução acurada e estável (JAKOBSEN, 2008).

A discretização das equações de quantidade de movimento utiliza uma malha defasada em relação à malha das grandezas escalares, como a pressão. A principal vantagem de se utilizar uma malha defasada é a obtenção de um forte acoplamento entre as velocidades e a pressão, o que ajuda a evitar problemas de convergência e oscilações nos campos de pressão e velocidade (PATANKAR, 1980).

A equação de conservação de quantidade de movimento na direção x , para uma fase m , pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\varepsilon_m \rho_m u_m) + \frac{\partial}{\partial x}(\varepsilon_m \rho_m u_m u_m) = -\varepsilon_m \frac{\partial P_m}{\partial x} \\ + \frac{\partial \tau_m}{\partial x} + \varepsilon_m \rho_m g_x + I_{g_s}^x + \sum_{m,x} S_{u_m} \end{aligned} \quad (A1.31)$$

sendo que $I_{g_s}^x$ é o termo que contabiliza as interações com as demais fases k e $\sum_{m,x} S_{u_m}$ é um termo fonte que contabiliza termos adicionais tais como os termos decorrentes da utilização de um sistema de coordenadas cilíndricas para a discretização das equações. Para mais detalhes sobre este termo fonte é recomendado o trabalho de SYAMLAL (1998).

Na Fig. A1.4 é representada uma malha utilizada para discretizar a equação de conservação de quantidade de movimento na direção x . Nesta figura, os termos referentes a velocidade são armazenados nos pontos denotados com letras minúsculas,

enquanto que as demais grandezas são armazenadas nos pontos denotados com letras maiúsculas. Deve ser destacado que a notação da Fig. 6.4 será adotada ao longo desta seção.

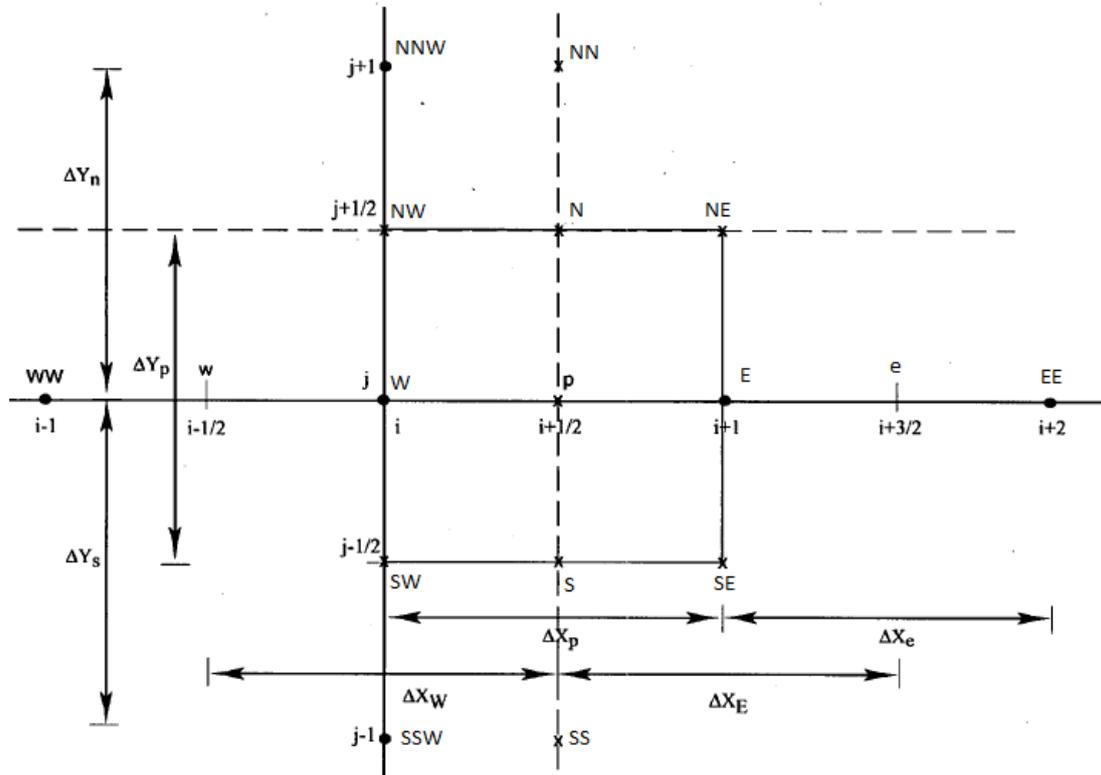


Figura A1. 4 - Volume de controle para a equação de quantidade de movimento na direção x (adaptado de DARTEVELLE, 2005).

A derivação do termo transiente da Eq. (A1.31) é exatamente similar ao realizado para a grandeza geral, ϕ , sendo necessária apenas a substituição de ϕ por u_m na Eq. (A1.3). Para calcular os termos convectivos das equações de conservação de quantidade de movimento utilizando uma malha defasada é necessário obter as componentes da velocidade nos pontos E, W, N, S, B e T. Estas componentes são obtidas calculando a média aritmética dos valores das componentes da velocidade nos pontos vizinhos (SYAMLAL, 1998). Logo, considerando a Eq. (A1.31) obtém-se:

$$(u_m)_E = f_E(u_m)_p + (1 - f_E)(u_m)_e \quad (A1.32a)$$

$$(v_m)_N = f_p(v_m)_{NW} + (1 - f_p)(v_m)_{NE} \quad (A1.32b)$$

O valor da grandeza $\varepsilon_m \rho_m$ no ponto central, e a viscosidade, μ_m , no ponto N, são calculados de maneira similar, respectivamente, como:

$$(\varepsilon_m \rho_m)_p = f_p (\varepsilon_m \rho_m)_p + (1 - f_p) (\varepsilon_m \rho_m)_E \quad (\text{A1.33a})$$

$$(\mu_m)_N = f_p (\mu_m)_{NW} + (1 - f_p) (\varepsilon_m \rho_m)_E \quad (\text{A1.33b})$$

onde os termos f_E e f_p são calculados por:

$$f_E = \frac{\Delta x_e}{\Delta x_p + \Delta x_e} \quad (\text{A1.34a})$$

$$f_p = \frac{\Delta x_E}{\Delta x_W + \Delta x_E} \quad (\text{A1.34b})$$

A integração do termo referente a pressão na Eq. (A1.31) é dada por:

$$\int_{v.c.} \left(\varepsilon_m \frac{\partial P_m}{\partial x} \right)_p dV = (\varepsilon_m)_p \left[(P_g)_E - (P_g)_W \right] A_p \quad (\text{A1.35})$$

em que $A_p = \Delta V / \Delta x_p$.

A integração do termo referente a tensão viscosa é dada por:

$$\begin{aligned} \int_{v.c.} \left(\frac{\partial \tau_m}{\partial x} \right)_p dV &= \int_{v.c.} \left(\frac{\partial 2\mu_m D_{m,xx}}{\partial x} + \frac{\partial 2\mu_m D_{m,xy}}{\partial x} + \frac{\partial 2\mu_m D_{m,xz}}{\partial x} \right)_p dV \\ &+ \int_{v.c.} \left(\frac{\partial v_m \text{tr}(\bar{D}_m)}{\partial x} \right)_p dV \end{aligned}$$

ou, rearranjando os termos da equação:

$$\begin{aligned} \int_{v.c.} \left(\frac{\partial \tau_m}{\partial x} \right)_p dV &= \left\{ [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_e - [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_w \right\} A_p \\ &+ (\mu_m)_E \frac{(u_m)_e - (u_m)_p}{\Delta x_E} A_E - (\mu_m)_W \frac{(u_m)_p - (u_m)_w}{\Delta x_W} A_W \\ &+ (\mu_m)_N \frac{(u_m)_{NN} - (u_m)_p}{\Delta y_N} A_N - (\mu_m)_S \frac{(u_m)_p - (u_m)_{SS}}{\Delta y_S} A_S \\ &+ (\mu_m)_t \frac{(u_m)_{TT} - (u_m)_p}{\Delta z_T} A_T - (\mu_m)_b \frac{(u_m)_p - (u_m)_{BB}}{\Delta z_B} A_B \end{aligned} \quad (\text{A1.36})$$

e os termos ν_m e \bar{D}_m são, respectivamente, a viscosidade volumétrica e o tensor de cisalhamento da fase m .

O termo referente as interações entre as fases pode ser escrito como (DARTEVELLE, 2005):

$$I_{gs}^x = \beta_{gs}(u_{sm} - u_g) \quad (A1.37)$$

em que o subscrito sm denota as fases sólidas, e o termo β_{gs} é um coeficiente que representa todos os termos de interação entre as fases. A integração da Eq. (A1.37) fornece:

$$\int_{V.C.} (I_{gs}^x)_p dV = \beta_{gs}(u_g - u_s)_p \quad (A1.38)$$

A equação discretizada da equação de conservação de quantidade de movimento da fase m na direção x pode então ser escrita por:

$$a_P(u_m)_P = \sum_{nb} a_{nb}(u_m)_{nb} + b_P + [\beta_{gs}(u_m - u_k)_p] \Delta V \quad (A1.39)$$

e os coeficientes da Eq. (A1.39) são dados por:

$$a_e = D_E - \xi_E(\varepsilon_m \rho_m)_e (u_m)_E A_E \quad (A1.40a)$$

$$a_w = D_W + \bar{\xi}_W(\varepsilon_m \rho_m)_w (u_m)_W A_W \quad (A1.40b)$$

$$a_n = D_N - \xi_N(\varepsilon_m \rho_m)_n (v_m)_N A_N \quad (A1.40c)$$

$$a_s = D_S + \bar{\xi}_S(\varepsilon_m \rho_m)_s (v_m)_S A_S \quad (A1.40d)$$

$$a_t = D_T - \xi_T(\varepsilon_m \rho_m)_t (w_m)_T A_T \quad (A1.40e)$$

$$a_b = D_B + \bar{\xi}_B(\varepsilon_m \rho_m)_b (w_m)_B A_B \quad (A1.40f)$$

$$a_P = \sum_{nb} a_{nb} + a_P^0 + R'_{u_m} \Delta V + \left[\sum_l R_{lm} \right] \Delta V + S' \quad (A1.40g)$$

$$b_p = a_p^0 u_m^0 + \bar{R}_{u_m} \Delta V + u_m \left[- \sum_l R_{lm} \right] \Delta V + (\varepsilon_m \rho_m)_e g_x \Delta V \quad (\text{A1.40h})$$

$$+ \left\{ [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_e - [\lambda_m \text{tr}(\bar{D}_m)]_w \right\} A_p + \bar{S} - (\varepsilon_m)_p [(P_m)_E - (P_m)_W] A_p$$

$$a_p^0 = \frac{(\varepsilon_m \rho_m)_p^0}{\Delta t} \Delta V \quad (\text{A1.40i})$$

$$D_F = (\mu_m)_F \frac{A_F}{\Delta x_F} \quad (\text{A1.40j})$$

e $F = E, W, N, S, B$ ou T , g_x corresponde à aceleração gravitacional na direção x . Os termos S' e \bar{S} podem conter as contribuições que aparecem devido a utilização de um sistema de coordenadas cilíndricas e das tensões cisalhantes. É importante observar que para a fase gás $\varepsilon_{sm} = 0$, logo o último termo da Eq. (A1.39) só será diferente de zero para as fases sólidas.

11.3 Algoritmo de Eliminação Parcial (PEA)

Os coeficientes de interação entre as fases acoplam as velocidades e as temperaturas de todas as fases, de maneira que qualquer procedimento iterativo possuirá uma taxa de convergência muito lenta. Independente do algoritmo utilizado para resolver os sistemas de equações, é necessário realizar uma manipulação das equações discretizadas para eliminar a presença da velocidade da outra fase destas equações (RANADE, 2002; van der HOEF *et al.*, 2006; JAKOBSEN, 2008). Um dos métodos utilizados para realizar este desacoplamento é o Algoritmo de Eliminação Parcial (PEA). A utilização deste algoritmo melhora consideravelmente as propriedades de convergência do problema.

Para exemplificar o funcionamento do método PEA, será considerado um caso bifásico com uma fase gás ($m = g$) e uma fase sólida ($m = s$). Dessa forma, a Eq. (A1.39) pode ser reescrita, para cada fase, como:

$$(a_g)_p (u_g)_p = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g)_{nb} + b_g + [\beta_{gs} (u_s - u_g)_p] \Delta V \quad (\text{A1.41a})$$

$$(a_s)_P(u_s)_P = \sum_{nb} (a_s)_{nb}(u_s)_{nb} + b_s + [\beta_{gs}(u_g - u_s)_p] \Delta V \quad (A1.41b)$$

O algoritmo consiste nas soluções das Eq. (A1.41a) e (A1.41b), respectivamente, para os termos $(u_g)_p$ e $(u_s)_p$. Em seguida essas expressões são substituídas nas próprias Eqs. (A1.41b) e (A1.41a), obtendo:

$$\begin{aligned} \left[(a_g)_P + \frac{(a_s)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_g)_P &= \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g)_{nb} + b_g \\ &+ \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s)_{nb} + b_s \right] \end{aligned} \quad (A1.42a)$$

$$\begin{aligned} \left[(a_s)_P + \frac{(a_g)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_s)_P &= \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s)_{nb} + b_s \\ &+ \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g)_{nb} + b_g \right] \end{aligned} \quad (A1.42b)$$

O desacoplamento é realizado calculando o último termo das Eqs. (A1.40a) e (A1.40b) utilizando os valores da iteração anterior. O procedimento adotado pode ser expandido para desacoplar equações em problemas com mais de duas fases. No entanto, nestas situações é necessária a utilização de uma matriz de inversão para realizar a eliminação parcial de maneira efetiva (SYAMLAL, 1998). Além disso, o desacoplamento não é total, o que pode causar dificuldades de convergência em algumas situações (DARTEVELLE, 2005).

11.4 Derivação das Equações de Correção de Pressão e de Fração de Vazio

As equações discretizadas de quantidade de movimento para as fases gás e sólidas são dadas, respectivamente por:

$$(a_g)_P(u_g)_P = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g)_{nb} + b_g + [\beta_{gs}(u_s - u_g)_p] \Delta V \quad (A1.43a)$$

$$(a_s)_P(u_s)_P = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s)_{nb} + b_s + [\beta_{gs}(u_g - u_s)_p] \Delta V \quad (A1.43b)$$

Considerando primeiramente a fase gás deve-se notar que, inicialmente, as equações discretizadas de quantidade de movimento são calculadas utilizando o campo de pressões, P_g^* , e de fração de vazão, ε_g^* , do passo anterior. Desta forma, campos de velocidade estimados para as fases gás e sólidas são obtidos por:

$$\left[(a_g)_p + \frac{(a_s)_p \Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_p + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_g^*)_p = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g^*)_{nb} + b_g + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_p + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s^*)_{nb} + b_s \right] \quad (A1.44a)$$

$$\left[(a_s)_p + \frac{(a_g)_p \Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_p + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u_s^*)_p = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u_s^*)_{nb} + b_s + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_p + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_g)_{nb} (u_g^*)_{nb} + b_g \right] \quad (A1.44b)$$

Os valores calculados (u_m^*) diferem dos valores reais por uma correção, logo os valores reais são calculados por (HAMZEHEI, 2011):

$$(u_m)_e = (u_m^*)_e + (u'_m)_e \quad (A1.45a)$$

$$(P_m)_E = (P_m^*)_E + (P'_m)_E \quad (A1.45b)$$

Substituindo as Eqs. (A1.43a) e (A1.43b) nas Eqs. (A1.44a) e (A1.44b), e desprezando as contribuições dos termos convectivos, assim como a pressão da fase sólida, é possível obter equações aproximadas para a correção do campo de velocidade das fases como:

$$\left[(a_g)_p + \frac{(a_s)_p \Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_p + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u'_g)_p = \sum_{nb} (a_g)_{nb} (u'_g)_{nb} + b_g + \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_s)_p + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_s)_{nb} (u'_s)_{nb} + b_s \right] \quad (A1.46a)$$

$$\left[(a_s)_P + \frac{(a_g)_P \Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \right] (u'_s)_P = \sum_{nb} (a_s)_{nb} (u'_s)_{nb} + b_s \quad (A1.46b)$$

$$+ \frac{\Delta V \beta_{gs}}{(a_g)_P + \Delta V \beta_{gs}} \left[\sum_{nb} (a_g)_{nb} (u'_g)_{nb} + b_g \right]$$

Substituindo as equações acima, e equações similares para as demais componentes da velocidade na equação de continuidade da fase gás, é obtida uma equação para a correção de pressão expressa como:

$$a_P (P'_g)_P = \sum_{nb} a_{nb} (P'_g)_{nb} + b \quad (A1.47)$$

e os coeficientes da equação são dados por:

$$a_E = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_e \right\} d_{ge} A_e \quad (A1.48a)$$

$$a_W = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w \right\} d_{gw} A_w \quad (A1.48b)$$

$$a_N = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_n \right\} d_{gn} A_n \quad (A1.48c)$$

$$a_S = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_S \bar{\xi}_s \right\} d_{gs} A_s \quad (A1.48d)$$

$$a_T = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_T \xi_t + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_t \right\} d_{gt} A_t \quad (A1.48e)$$

$$a_B = \left\{ (\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_b + (\varepsilon_g \rho_g)_B \bar{\xi}_b \right\} d_{gb} A_b \quad (A1.48f)$$

$$a_P = a_E + a_W + a_N + a_S + a_T + a_B \quad (A1.48g)$$

$$\begin{aligned}
b = & \left\{ \left[\frac{(\varepsilon_g \rho_g)_P - (\varepsilon_g \rho_g)_P^0}{\Delta t} \right] \Delta V + [(\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_e] u_{ge}^* A_e \right. \\
& + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w] u_{gw}^* A_w \\
& \left. + [(\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_P \bar{\xi}_n] u_{gn}^* A_n + [(\varepsilon_g \rho_g)_P \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_S \bar{\xi}_s] \right\}
\end{aligned} \tag{A1.48h}$$

Em relação a correção de fração volumétrica, é necessário a utilização de uma equação de estado para a pressão da fase sólida, de forma:

$$P_m = P_m(\varepsilon_m) \tag{A1.49}$$

Esta metodologia considera a compressibilidade da fase sólida, definida pela Eq. (A1.50), diretamente na obtenção do campo de fração volumétrica, o que ocasiona uma melhora na taxa de convergência do procedimento.

$$K_m \triangleq \frac{\partial P_m}{\partial \varepsilon_m} \tag{A1.50}$$

A velocidade real da fase sólida também é calculada pela Eq. (A1.45a). Já a correção de velocidade para a fase sólida, u'_s , relacionada com a correção do campo de pressão por:

$$(u'_s)_e = e_e [(P'_s)_P - (P'_s)_E] \tag{A1.51}$$

Sendo que e_e é uma constante de proporcionalidade.

A fração volumétrica também pode ser expressa em termos de um valor estimado e de um valor de correção, ou seja, é possível escrever que:

$$(\varepsilon_m)_e = (\varepsilon_m^*)_e + (\varepsilon'_m)_e \tag{A1.52}$$

Integrando a equação da continuidade para a fase sólida, utilizando as Eqs. (A1.45a), (A1.51) e (A1.52), é possível obter uma equação para a correção de fração volumétrica de forma:

$$a_p(\varepsilon'_{ms})_p = \sum_{nb} a_{nb}(\varepsilon'_{ms})_{nb} + b \quad (\text{A1.53})$$

e os coeficientes da equação são dados por:

$$a_E = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_e^* e_e(K_m)_E - \xi_e(\rho_{ms})_E(u_{ms}^*)_e]A_e \quad (\text{A1.53a})$$

$$a_W = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_w^* e_w(K_m)_W + \bar{\xi}_w(\rho_{ms})_W(u_{ms}^*)_w]A_w \quad (\text{A1.53b})$$

$$a_N = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_n^* e_n(K_m)_N - \xi_n(\rho_{ms})_N(v_{ms}^*)_n]A_n \quad (\text{A1.53c})$$

$$a_S = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_s^* e_s(K_m)_S + \bar{\xi}_s(\rho_{ms})_S(v_{ms}^*)_s]A_s \quad (\text{A1.53d})$$

$$a_T = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_t^* e_t(K_m)_T - \xi_t(\rho_{ms})_T(w_{ms}^*)_t]A_t \quad (\text{A1.53e})$$

$$a_B = [(\rho_{ms}\varepsilon_{ms})_b^* e_b(K_m)_B + \bar{\xi}_b(\rho_{ms})_B(w_{ms}^*)_b]A_b \quad (\text{A1.53f})$$

$$a_p = (\rho_{ms})_p [\bar{\xi}_e(u_{ms}^*)_e A_e - \xi_w(u_{ms}^*)_w A_w + \bar{\xi}_n(v_{ms}^*)_n A_n - \xi_s(v_{ms}^*)_s A_s + \bar{\xi}_t(w_{ms}^*)_t A_t - \xi_b(w_{ms}^*)_b A_b] \quad (\text{A1.53g})$$

$$b = \left\{ \left[\frac{(\varepsilon_g \rho_g)_p - (\varepsilon_g \rho_g)_p^0}{\Delta t} \right] \Delta V + [(\varepsilon_g \rho_g)_E \xi_e + (\varepsilon_g \rho_g)_p \bar{\xi}_e] u_{ge}^* A_e + [(\varepsilon_g \rho_g)_p \xi_w + (\varepsilon_g \rho_g)_W \bar{\xi}_w] u_{gw}^* A_w + [(\varepsilon_g \rho_g)_N \xi_n + (\varepsilon_g \rho_g)_p \bar{\xi}_n] u_{gn}^* A_n + [(\varepsilon_g \rho_g)_p \xi_s + (\varepsilon_g \rho_g)_s \bar{\xi}_s] \right\} \quad (\text{A1.53h})$$