

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Modelagem e simulação de aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo
de gaseificação de biomassa utilizando CFD**

Marina Garcia Resende Braga

São Carlos – SP

2017

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**Modelagem e simulação de aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo
de gaseificação de biomassa utilizando CFD**

Marina Garcia Resende Braga

Tese apresentada ao programa de pós-graduação em Engenharia Química da Universidade Federal de São Carlos como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Química, área de concentração de Pesquisa e Desenvolvimento de Processos Químicos.

Orientador: Prof. Dr. Rodrigo Béttega

São Carlos - SP

2017

Garcia Resende Braga, Marina

Modelagem e simulação de aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo de gaseificação de biomassa utilizando CFD / Marina Garcia Resende Braga. -- 2017.

119 f. : 30 cm.

Tese (doutorado)-Universidade Federal de São Carlos, campus São Carlos, São Carlos

Orientador: Rodrigo Béttega

Banca examinadora: Rodrigo Béttega, Gabriela Cantarelli Lopes, Vádila Giovana Guerra Béttega, Fábio Bentes Freire, Nivaldo Aparecido Corrêa, Gabriel Henrique Justi

Bibliografia

1. Gaseificação de biomassa. 2. Fluidodinâmica computacional. 3. Modelagem computacional. I. Orientador. II. Universidade Federal de São Carlos. III. Título.

Ficha catalográfica elaborada pelo Programa de Geração Automática da Secretaria Geral de Informática (SIn).

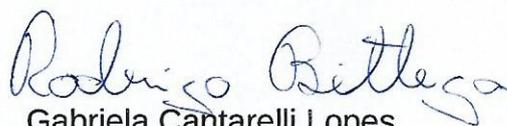
DADOS FORNECIDOS PELO(A) AUTOR(A)

MEMBROS DA BANCA EXAMINADORA DA DEFESA DE TESE DE MARINA GARCIA RESENDE BRAGA APRESENTADA AO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS, EM 28 DE JUNHO DE 2017.

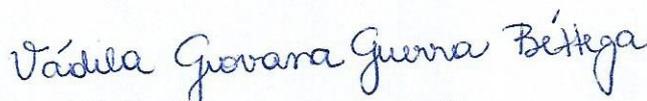
BANCA EXAMINADORA:



Rodrigo Béttega
Orientador, UFSCar



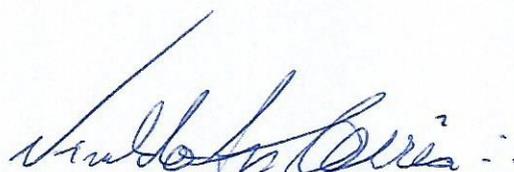
Gabriela Cantarelli Lopes
UFSCar



Vádila Giovana Guerra Béttega
UFSCar



Fábio Bentes Freire
UFSCar



Nivaldo Aparecido Corrêa
USP



Gabriel Henrique Justi
UFMT

A Deus, meu companheiro de todas as horas

A minha família

AGRADECIMENTOS

A Deus, que me permitiu realizar um dos sonhos mais lindos que sonhou para mim, mantendo minha fé e me fazendo insistir e continuar a esperar e crer, mesmo nos momentos mais difíceis. Obrigada, Senhor! Este trabalho é Seu!

A meus pais, Josué e Silvana, bálsamos em minha vida, a base de tudo. Meus grandes companheiros durante essa etapa e todas as outras que me fizeram chegar até aqui. Tudo o que fiz foi na tentativa de deixá-los felizes e orgulhosos de toda a educação e amor que me deram durante toda a vida.

A meu marido Pedro, companheiro sem igual e imprescindível durante esses 4 anos. Sua presença e apoio me deram força e motivação para continuar até o último dia. Obrigada por todo amor e compreensão. Te amo!

Ao meu irmão Guilherme. O tempo que passamos juntos em São Carlos foi fundamental para nos aproximarmos e nos tornarmos ainda mais amigos. Obrigada por me fazer companhia durante esse tempo e pela confiança de sempre.

Aos meus orientadores. Primeiramente, ao Prof. Dr. Rodrigo Béttega, que aceitou me ajudar em um momento de grande dificuldade e incerteza. Obrigada pela confiança depositada em mim e por me motivar a chegar até o fim. Obrigada a Profa. Dra. Gabriela Cantarelli Lopes que, de fato, me orientou durante todo este processo, sempre com conselhos valiosos, me ajudando de todas as formas possíveis e com muita paciência e compreensão. Obrigada por contribuírem tanto para minha formação profissional quanto pessoal. Levarei os dois como grandes amigos e mentores por toda a vida.

A toda a minha família que, mesmo distante, sempre torce pelo meu sucesso.

Aos grandes amigos que fiz durante toda a vida, em especial Gleyce, Luma, Paula, Rosiane e Verônica, que sempre estiveram ali quando precisei, apesar da distância. Aos amigos que fiz no DEQ e me ajudaram nas simulações, especialmente Gabriel, Liliana e Ricardo.

A todos os professores que tive durante toda a vida, que me ajudaram a subir cada degrau para chegar até aqui. Espero poder honrar essa profissão e ser tão profissional quanto cada um deles.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro durante o Doutorado.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para a realização deste trabalho.

*" Olho para os montes e pergunto:
De onde virá o meu socorro?
O meu socorro vem do Senhor Deus,
que fez o céu e a terra.
Ele, o seu protetor, está sempre alerta
e não deixará que você caia.
O protetor do povo de Israel
nunca dorme, nem cochila.
O Senhor guardará você;
ele está sempre ao seu lado para protegê-lo."*

Sl 121:1-5

RESUMO

Atualmente, um dos grandes problemas enfrentados pela humanidade é a questão da preservação do meio ambiente. Nos últimos anos, o progresso ocorreu de forma acelerada, tendo uma influência direta nos impactos ambientais provocados pelos mais diversos tipos de atividades. Buscando amenizar a situação, considerando um contexto industrial, uma das alternativas é a utilização e geração de biocombustíveis. Uma das formas mais antigas de geração de energia é a gaseificação e, tratando-se de biocombustíveis, esse processo é uma boa alternativa para contribuir com a preservação do meio ambiente. Este trabalho apresenta pontos importantes a respeito do estudo do processo de gaseificação de biomassa, avaliando aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo, através da utilização da simulação numérica CFD (*Computational Fluid Dynamics*) em conjunto com dados experimentais obtidos da literatura. Primeiramente, analisou-se a fluidodinâmica, não considerando a ocorrência de reações. Nesta etapa do trabalho, verificou-se a influência de altos e baixos fluxos mássicos de entrada de sólidos em variáveis como a fração volumétrica de sólidos (axial e radial) e velocidade da fase particulada. Além disso, também foi realizado um estudo de como o coeficiente de restituição pode intervir nas referidas variáveis. Foi constatada uma influência do coeficiente no perfil da fração volumétrica de sólidos nas regiões mais próximas à parede dos *risers*. Ademais, também foi realizado um estudo de diferentes modelos de arraste, de modo a obter o melhor perfil possível para a fração volumétrica de sólidos. Concluiu-se que modelos de arraste convencionais, como Gidaspow et al. (1992) por exemplo, são melhores em prever o comportamento desta variável em regiões mais diluídas, enquanto modelos que consideram uma maior heterogeneidade no escoamento, como os que utilizam abordagem EMMS (*Energy Minimization Multi-Scale*), são melhores em prever o mesmo comportamento em regiões mais densas. No que se refere à cinética do processo, foi analisado como o modelo de Gidaspow e o EMMS influenciam no rendimento final dos produtos do processo, bem como na fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do gaseificador. Os resultados mostraram que diferentes modelos de arraste não alteram de forma significativa esta variável neste caso.

Palavras-chave: Gaseificação de Biomassa. Fluidodinâmica. Cinética. Arraste. Fração Volumétrica de sólidos.

ABSTRACT

One of the major problems faced by humanity nowadays is the issue of preserving the environment. In recent years, progress has been accelerated, having a direct influence on the environmental impacts caused by several kinds of activities. In order to settle the situation, considering an industrial context, one of the alternatives is the use and generation of biofuels. One of the most ancient ways of energy generation is gasification, regarding biofuels, this process is a good alternative to contribute to environmental preservation. This work presents important points on the studying of biomass gasification process, evaluating hydrodynamic and kinetic aspects of the process through the use of numerical CFD (Computational Fluid Dynamics) simulation along with experimental data from literature. Firstly, the fluid dynamics was analyzed, not considering the occurrence of reactions. In this step of the project, the influence of high and low mass solid influxes in variables such as solid volumetric fractions (radial and axial) and particle velocities were verified. In addition, a study on how the restitution coefficient can have an effect on those variables were carried out. It was verified and influence of the coefficient on the solids volume fraction profiles in regions near to the risers walls. Moreover, a study of different drag models was also carried out, in order to obtain the best possible solids volume fraction profile. It was concluded that conventional drag models, such as Gidaspow et al. (1992), for example, are better in predicting the behavior of this variable in more dilute regions, while most models that consider a more heterogeneity in flows, such as those which use the Energy Minimization Multi-Scale (EMMS) approach, are better at predicting the same behavior in dense regions. Regarding the process kinetics, the influence of Gidaspow and EMMS models on the final process products yield was also analyzed, as well as the solids volume fraction along riser height. The results showed that different drag models do not alter significantly this variable profile in this case.

Keywords: Biomass Gasification. Fluid Dynamics. Kinetics. Drag. Solids Volume Fraction.

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 – Vantagens e desvantagens de gaseificadores de leito fixo e fluidizado.	15
Quadro 2 – Comparação entre três técnicas de solução para problemas de mecânica dos fluidos.	22

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 1 – Curva característica da fluidização.	6
Figura 2 – Gráfico da classificação de Geldart.....	8
Figura 3 – Fontes de biomassa.	9
Figura 4 – Esquema simplificado de algumas rotas do processo de gaseificação de biomassa.	12
Figura 5 – Tipos de gaseificadores.	13
Figura 6 – Configuração típica para um sistema de leito fluidizado circulante.	16
Figura 7 – Esquema simplificado do processo de pirólise de biomassa descrito por Koufopoulos et al. (1991).	18
Figura 8 – Diferentes frações volumétricas de sólidos em um leito de fluidização rápida.	25
Figura 9 – Etapas para obtenção de uma solução numérica em problemas de CFD.	49
Figura 10 – Desenho esquemático do sistema de FCC.	52
Figura 11 – Desenho esquemático do sistema de separação gás-sólido.....	53
Figura 12 - Geometria criada para os Casos 1 e 3.	54
Figura 13 – Geometria criada para os Casos 2 e 4.	54
Figura 14 – Representação da malha gerada para o modelo referente ao caso de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b), mostrando entrada e saída do <i>riser</i> , em 2D.	55
Figura 15 – Representação da malha gerada para o modelo referente ao caso de Mei, Monazam e Shadle (2006), mostrando entrada e saída do <i>riser</i> , em 2D.	55
Figura 16 – Aspecto das malhas geradas para o ambiente 3D para ambos os estudos de caso, mostrando o refinamento da malha nas entradas e saídas dos <i>risers</i> e em um corte da altura.	56
Figura 17 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 6,34 m do <i>riser</i> ($e=0$).	59
Figura 18 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 9,32 m do <i>riser</i> ($e=0$).	59

Figura 19 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 6,34 m do <i>riser</i> ($e=1$).	59
Figura 20 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 9,32 m do <i>riser</i> ($e=1$).	60
Figura 21 – Perfil radial de velocidade da partícula comparando-se os escoamentos laminar, turbulento e experimental.	61
Figura 22 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m ($e=0$). ..	62
Figura 23 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,32 m ($e=0$). ..	62
Figura 24 - Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m ($e=1$). ...	62
Figura 25 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,42 m ($e=1$). ..	63
Figura 26 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 3,96 m.	64
Figura 27 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m.	64
Figura 28 – Perfil da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,32 m.	65
Figura 29 – Perfil axial da fração volumétrica de sólidos.	66
Figura 30 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 1, em 3D, considerando o modelo de arraste EMMS.	67
Figura 31 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 1, em 3D, considerando o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).	67
Figura 32 – Perfil radial de velocidade das partículas em diferentes alturas, segundo a geometria de Mei, Monazam e Shadle. (2006).	68
Figura 33 – Simulação da fração volumétrica de sólidos ao longo do raio do <i>riser</i> em diferentes alturas referente à geometria de Mei, Monazam e Shadle. (2006).	69
Figura 34 – Fração volumétrica de sólidos ao longo da altura sob condições de baixo fluxo mássico de sólidos considerando diferentes modelos de arraste, em 2D.	70
Figura 35 – Comparação entre diferentes modelos de arraste utilizando técnicas de CFD.	71
Figura 36 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).	71

Figura 37 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de arraste EMMS (SHAH et al., 2011).....	72
Figura 38 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985).....	72
Figura 39 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Syamlal e O'Brien (1989).....	72
Figura 40 – Comparação entre os resultados para fração volumétrica de sólidos ao longo da altura para os Casos 1 e 2.....	73
Figura 41 – Desenho esquemático do aparato experimental para testes de gaseificação de óleo de oliva utilizando ar como agente gaseificador.....	75
Figura 42 – Geometria 2D para o caso considerando reações químicas.	76
Figura 43 – Representação da malha numérica utilizada para simulação das reações químicas.....	76
Figura 44 – Monitoramento da variável para diferentes quantidades de elementos.	78
Figura 45 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador, utilizando o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).	79
Figura 46 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador, utilizando o modelo EMMS (SHAH, 2011).....	80
Figura 47 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador.....	80
Figura 48 – Frações molares de algumas substâncias na saída do gaseificador.....	81
Figura 49 – Fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do <i>riser</i> para diferentes modelos de arraste considerando a ocorrência de reações químicas, em 2D.	82

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 – Análise elementar de resíduos de óleo de oliva.....	42
Tabela 2 – Análise imediata de resíduos de óleo de oliva.....	42
Tabela 3 – Parâmetros cinéticos utilizados para reações heterogêneas.....	46
Tabela 4 – Parâmetros cinéticos utilizados para reações homogêneas.....	47
Tabela 5 – Resumo de modelos numéricos aplicados nesta tese.....	50
Tabela 6 – Altura e raio dos <i>risers</i>	55
Tabela 7 – Número de elementos presentes em cada uma das malhas para os casos 2D e 3D.	56
Tabela 8 – Propriedades das fases para os Casos 1 a 4.	57
Tabela 9 – Condições de contorno utilizadas para os Casos 1 a 4.	57
Tabela 10 – Valor médio calculado para fração volumétrica de sólidos referente aos modelos de arraste estudados.	67
Tabela 11 – Valor médio calculado para fração volumétrica de sólidos do <i>riser</i> referente aos modelos de arraste estudados.	70
Tabela 12 – Principais propriedades e características da biomassa e do ar utilizados no processo de gaseificação.....	75
Tabela 13 – Condições de contorno e operação para simulação do processo de gaseificação de biomassa.....	77

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Latinas

A	fator pré-exponencial [$m^{3(n-1)} \text{ kmol}^{(n-1)} \text{ s}^{-1}$]
C_d	coeficiente de arraste [-]
C_μ	constante = 0.09 [-]
C_{ji}	constante do modelo $k-\epsilon$
$C_{\epsilon,1}$	constante do modelo $k-\epsilon$
$C_{\epsilon,2}$	constante do modelo $k-\epsilon$
$C_{\epsilon,3}$	constante do modelo $k-\epsilon$
d	diâmetro [m]
D	diâmetro do <i>riser</i> [m]
D_{gs}	coeficiente de difusividade mássica [$m^2 \text{ s}^{-1}$]
D_t	coeficiente de difusão térmica [$m^2 \text{ s}^{-1}$]
e	coeficiente de restituição [m]
E_a	energia de ativação [J mol^{-1}]
f	fator de correção para o modelo de pirólise [s^{-1}]
g	aceleração da gravidade [$m^2 \text{ s}^{-1}$]
G	fluxo mássico [$\text{kg m}^{-2} \text{ s}^{-1}$]
g_0	função de distribuição radial [-]
H	altura [m]
H_e	entalpia específica [kJ kg^{-1}]
J	fluxo de difusão mássica [$\text{kg m}^2 \text{ s}^{-1}$]
k_c	constante cinética [$m^{3(n-1)} \text{ kmol}^{(n-1)} \text{ s}^{-1}$]
k_d	constante cinética [$m^{3(n-1)} \text{ kmol}^{(n-1)} \text{ s}^{-1}$]
k_h	constante cinética [$m^{3(n-1)} \text{ kmol}^{(n-1)} \text{ s}^{-1}$]

k_p	constante cinética [$\text{m}^{3(n-1)} \text{kmol}^{(n-1)} \text{s}^{-1}$]
M_i	massa molar do componente i [kg kmol^{-1}]
p	pressão [Pa]
q	fluxo de flutuação de energia [$\text{J m}^{-2} \text{s}^{-1}$]
Q	quantidade de calor transferido [J s^{-1}]
R	raio [m]
Re	Número de Reynolds [-]
R_e	taxa líquida de formação ou consumo das espécies reativas [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$]
R_g	constante universal dos gases [$\text{J mol}^{-1} \text{K}^{-1}$]
r_h	taxa líquida de formação ou consumo das espécies reativas [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$]
r_p	taxa líquida de formação ou consumo das espécies reativas [$\text{kg m}^{-3} \text{s}^{-1}$]
S	termo fonte [-]
Sc	número de Schmidt [-]
Sh	número de Sherwood [-]
T	temperatura [K]
t	tempo [s]
\mathbf{v}	velocidade [m s^{-1}]
V_C	volume de <i>char</i> [m^3]
Y	fração mássica

Letras Gregas

λ_{ef}	condutividade térmica [$\text{W m}^{-1} \text{K}^{-1}$]
σ_k	constante do modelo $k-\epsilon$
σ_ϵ	constante do modelo $k-\epsilon$
α	coeficiente estequiométrico [-]

β	coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases [kg m ⁻³ s ⁻¹]
γ	taxa de dissipação de energia colisional [m ² s ⁻³]
δ	tensor unitário [-]
ε	fração volumétrica [-]
Θ	temperatura granular [m ² s ⁻²]
κ	energia cinética turbulenta [m ² s ²]
μ	viscosidade [Pa s]
ξ	viscosidade bulk [kg m ⁻¹ s ⁻¹]
ρ	densidade [kg m ⁻³]
τ	tensor tensão laminar [N m ⁻²]
τ'	tensor tensão de Reynolds [N m ⁻²]
ω	fator de correção [-]
φ	fator de correlação do modelo de arraste de Huilin-Gidaspow [-]
ϵ	taxa de dissipação de energia cinética turbulenta [m ² s ⁻³]
ϑ	constante de decaimento da partícula [-]

Subscritos

a,b,c	porcentagem mássicas de um elemento
d	região densa
g	fase gasosa
i	fase, componente ou espécie química
j	fase, componente ou espécie química
p	partícula
s	fase sólida
sup	superficial

t terminal

Sobrescritos

T transposto

Siglas

CFB *Circulating Fluidized Bed*

CFD *Computational Fluid Dynamics*

EMMS *Energy Minimization Multi-Scale*

FCC *Fluid Catalytic Cracking*

UDF *User Defined Function*

SUMÁRIO

RESUMO	i
ABSTRACT	ii
LISTA DE QUADROS	iii
LISTA DE ILUSTRAÇÕES	iv
LISTA DE TABELAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	viii
SUMÁRIO.....	xii
CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO	1
1.1. Objetivos da tese	3
1.1.1. Objetivo geral.....	3
1.1.2. Objetivos específicos.....	3
1.2. Estrutura geral da tese.....	3
CAPÍTULO 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	5
2.1. Fluidização.....	5
2.3. Classificação de Geldart para materiais particulados	7
2.4. Biomassa	9
2.4.1. Caracterização da biomassa	10
2.5. Gaseificação.....	11
2.5.1. Tipos de gaseificadores	12
2.5.2. Reações químicas no processo de gaseificação.....	16
2.5.3. Pirólise.....	17
2.5.4. Reações de combustão e redução	19
2.5.5. Variáveis relevantes ao processo de gaseificação	20
2.6. Fluidodinâmica Computacional	22
2.7. Gaseificação de biomassa – trabalhos correlatos.....	24

CAPÍTULO 3. MODELAGEM MATEMÁTICA	32
3.1. Equações de transporte	32
3.2. Equações de fechamento.....	34
3.2.1. Modelos de turbulência	35
3.2.2. Modelos de arraste	36
3.2.3. Teoria cinética do escoamento granular (KTGF)	40
3.6. Modelagem de reações químicas	41
3.6.1. Pirólise.....	42
3.6.2. Reações Heterogêneas.....	44
3.6.3. Reações Homogêneas.....	46
CAPÍTULO 4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA CFD	48
CAPÍTULO 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	51
5.1. Hidrodinâmica	51
5.1.1. Geometria e malha	51
5.1.2. Condições de contorno	57
5.1.3. Resultados e discussão – Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	58
5.1.3. Resultados e discussão – Mei, Monazam e Shadle (2006)	68
5.1.4. Síntese dos resultados para hidrodinâmica.....	73
5.2. Caso com reação química – García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004).....	74
5.2.1. Geometria e malha	76
5.2.2. Condições de contorno	77
5.2.3. Teste de independência de malha.....	77
5.2.4. Resultados e discussão	78
CAPÍTULO 6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS	84
6.1. Casos sem reação química	84
6.2. Caso com reações químicas	85
6.3. Sugestões de trabalhos futuros.....	85

REFERÊNCIAS 86

APÊNDICE 95

CAPÍTULO 1. INTRODUÇÃO

A energia, em suas diversas formas, mostra-se necessária à continuação e manutenção da vida humana desde suas origens. No entanto, ao longo dos anos, torna-se cada vez mais difícil ignorar os impactos ambientais causados pelo uso crescente de alguns recursos energéticos em todo o mundo.

No contexto de fontes renováveis de energia, a biomassa se destaca. Além de ser a mais antiga matéria-prima para geração de energia utilizada pela humanidade, pode ser usada tanto direta (queima da madeira para cozimento de alimentos, por exemplo) quanto indiretamente (produção de biocombustíveis, como biogás e etanol). Ademais, a utilização de biomassa para geração de energia pode ser sustentável e reduzir os danos causados ao meio ambiente que seriam provocados pela utilização de combustíveis fósseis, por exemplo.

Existem diversos processos envolvidos na produção de combustíveis a partir de biomassa. Dentre os principais, podem ser citados: pirólise, fermentação, extração mecânica e gaseificação. Comercialmente, o método mais utilizado é o da fermentação, através do qual pode ser obtido o etanol, a partir de matérias-primas como milho, beterraba e cana de açúcar, por exemplo. Outro biocombustível bastante conhecido é o biodiesel, obtido mais comumente através do processo de transesterificação entre um álcool e um óleo vegetal (BASU, 2010).

Um dos processos mais antigos de geração de combustíveis que, além de eficiente, pode ser bastante vantajoso, é a gaseificação. É um tipo de processo termoquímico capaz de converter produtos derivados de carbono em gases geradores de energia (SÁNCHEZ, 2010). Estes podem ser utilizados em motores de combustão interna, bombas de irrigação ou até mesmo como matéria-prima para sínteses químicas.

Dentre algumas das várias vantagens da gaseificação (de biomassa, em particular), podem ser citadas: menor emissão de particulados (cinzas e carbono residual permanecem no gaseificador); o combustível resultante é considerado mais limpo (livre de impurezas) do que em comparação a outros processos; e, se associada a certos tipos de catalisadores, aumenta a produção de hidrogênio e monóxido de carbono, além de

contribuir com a diminuição de emissões de dióxido de carbono (GASEIFICAÇÃO, 2014).

Vários tipos de configurações de reatores podem ser utilizados para que ocorra o processo de gaseificação de biomassa. Uma delas é a aplicação de um regime de escoamento conhecido como leito fluidizado circulante (CFB, do inglês *Circulating Fluidized Bed*). Neste tipo de configuração (MIAO et al., 2013), levando em consideração o fato de que a gaseificação é um processo reativo multifásico, o intenso contato entre as fases permite que possa haver um maior controle na temperatura e no grau de turbulência do processo. Resumidamente, algumas das reações que compõem a gaseificação são as seguintes: secagem, pirólise, combustão e, por fim, as reações de gaseificação propriamente ditas.

Deste modo, o estudo de alternativas para produção de biocombustíveis utilizando o processo de gaseificação de biomassa torna-se de suma importância no âmbito da Engenharia Química. Todavia, em sua grande maioria, devido principalmente à falta de uma estrutura experimental adequada e ao custo do processo, grande parte dos problemas de engenharia necessitam de um tratamento computacional. Em muitos casos, este é o procedimento mais prático ou, até mesmo, o único meio de se obter variáveis e parâmetros relacionados ao processo (FORTUNA, 2012).

Dentro deste contexto, uma área da computação científica bastante utilizada na resolução de problemas deste tipo é a Fluidodinâmica Computacional (CFD, do inglês *Computational Fluid Dynamics*). Usando estas técnicas, pode-se realizar a avaliação e até mesmo a alteração de variáveis e parâmetros do processo até que este atenda aos requisitos especificados no projeto (LOPES, 2012). Este tipo de abordagem é capaz de prever comportamentos dinâmicos de escoamentos complexos, como o que ocorre durante a gaseificação de biomassa.

Diversos avanços foram alcançados no que se refere à modelagem do processo de gaseificação de biomassa, especialmente nos últimos trinta anos. Porém, grande parte dos trabalhos avalia aspectos hidrodinâmicos e cinéticos em reatores de leito fixo ou leito fluidizado borbulhante. Por isto, é importante que novos estudos sejam desenvolvidos para uma melhor compreensão da fluidodinâmica e cinética do processo, considerando leitos fluidizados circulantes.

Em suma, torna-se necessário aliar o progresso na produção de biocombustíveis com a redução de impactos ao meio ambiente. Para isto, esta tese visa aprofundar conhecimentos sobre o comportamento hidrodinâmico e cinético do processo de gaseificação de biomassa, utilizando-se de técnicas de fluidodinâmica computacional.

1.1. Objetivos da tese

1.1.1. Objetivo geral

O objetivo geral deste trabalho é complementar as pesquisas já existentes, através do estudo detalhado de aspectos hidrodinâmicos e cinéticos concernentes ao processo de gaseificação de biomassa, mediante aplicação de técnicas de CFD, com o auxílio do pacote comercial ANSYS® versão 14.5.

1.1.2. Objetivos específicos

Como objetivos específicos deste estudo, tem-se:

- Complementação dos trabalhos de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b); Mei, Monazam e Shadle (2006) e Liu (2014), com o estudo de modelos hidrodinâmicos em 2D e 3D, considerando apenas escoamentos transientes, acoplados a diferentes modelos de arraste de partículas. O objetivo desta etapa da pesquisa foi avaliar como diferentes modelos de arraste influenciam em perfis de fração volumétrica de sólidos em leitos fluidizados circulantes, muito utilizados em processos de gaseificação. Para tanto, foram escolhidos trabalhos com diferentes fluxos mássicos de entradas de sólidos;
- Estudo da cinética do processo de gaseificação de biomassa através da modelagem dos dados experimentais obtidos de García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004), também proposto por Liu (2014), porém utilizando abordagens relativamente diferentes, principalmente relacionadas à modelagem das reações heterogêneas do processo, utilizando diferentes parâmetros. O objetivo desta etapa foi a avaliação da influência de modelos de coeficientes de arraste na cinética do processo, principalmente no que se refere à conversão dos produtos.

1.2. Estrutura geral da tese

Esta tese está estruturada em seis capítulos, objetivando apresentar resultados e bons argumentos sobre aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo de gaseificação

de biomassa, ressaltando sua importância no contexto da Engenharia Química e biocombustíveis.

O Capítulo 1 apresenta uma introdução geral sobre o tema, bem como os principais objetivos buscados durante a realização deste trabalho. Este capítulo se atém apenas a apresentar ao leitor noções iniciais do que foi tratado durante toda a tese.

No Capítulo 2, o leitor entrará em contato com os principais conceitos teóricos relacionados à gaseificação de biomassa, aos principais trabalhos desenvolvidos ao longo do tempo relacionados ao tema e também verá uma breve introdução sobre a técnica de CFD.

O Capítulo 3 traz, em detalhes, todas as equações e modelos utilizados para realização da modelagem matemática dos estudos de casos tratados nesta tese, tanto relacionados à hidrodinâmica quanto à parte cinética do processo de gaseificação de biomassa.

No Capítulo 4, pode ser visto um resumo dos procedimentos numéricos adotados neste trabalho.

No Capítulo 5, são apresentados todos os resultados obtidos durante a realização desta tese, bem como uma discussão sobre todas as soluções obtidas. O referido capítulo está dividido em simulações com e sem a ocorrência de reações químicas.

O Capítulo 6 traz a conclusão geral de toda a pesquisa realizada durante o doutorado, além de apresentar, também, sugestões de projetos futuros relacionados ao tema.

Após o Capítulo 6, são apresentadas todas as referências citadas durante a tese, e, por fim, um apêndice com algumas das UDFs (*User Defined Functions*) desenvolvidas ao longo do trabalho.

CAPÍTULO 2. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Este capítulo visa apresentar os conceitos principais relacionados à gaseificação de biomassa, desde as características mais marcantes desta matéria-prima até os rendimentos esperados dos produtos ao final do processo.

2.1. Fluidização

Existe uma vasta quantidade de operações dentro da indústria química em geral que envolvem escoamentos multifásicos do tipo gás-sólido. No âmbito das indústrias de geração de energia, podem ser citados o processo de craqueamento catalítico do petróleo (FCC, do inglês *Fluid Catalytic Cracking*) e a gaseificação, por exemplo. Nesses dois processos observa-se o regime fluidodinâmico de fluidização, na qual partículas sólidas entram em contato com correntes ascendentes de gás, contribuindo para a ocorrência de altas taxas de transferência de calor e massa entre as fases, o que possibilita a utilização deste tipo de abordagem em vários processos industriais (SÁNCHEZ, 2010).

Vários regimes de fluidização podem ser observados ao longo de um processo, dependendo de variáveis como o tipo de fluido utilizado e qual o seu sentido (ascendente, descendente, etc.) no escoamento (FOLTIN, 2013). Considerando-se um escoamento no qual a velocidade do gás vai aumentando ao longo do tempo, é possível caracterizar o comportamento do gás e das partículas no leito utilizando uma curva de vazão de ar *versus* queda de pressão.

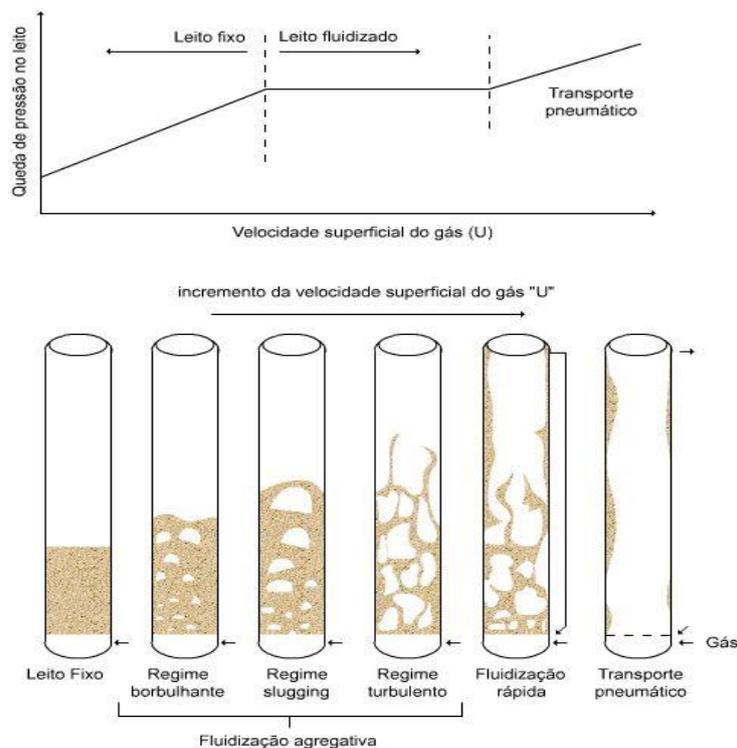
Inicialmente, quando a velocidade do fluido de arraste é muito baixa, este percorre os espaços entre as partículas, porém, não há expansão do leito. Este tipo de regime é chamado de leito fixo. A partir desse regime, com aumentos na vazão de gás observa-se que as partículas iniciam uma breve vibração, alcançando o regime denominado de leito expandido. No momento em que a velocidade do gás atinge a chamada mínima velocidade de fluidização, na qual o movimento das partículas é mais vigoroso, tem-se o regime incipiente (KUNII; LEVENSPIEL, 1991; GUPTA; SATHIYAMOORTHY, 1999; NITZ; GUARDANI, 2008).

Após o regime incipiente, aumentando-se ainda mais a velocidade do fluido de arraste, observa-se a formação de um regime borbulhante. Dependendo da densidade das partículas, pode-se ou não observar a formação de bolhas em um leito expandido.

Nessas condições, flutuações na queda de pressão do gás são consideráveis (NITZ; GUARDANI, 2008).

Logo em seguida ao regime borbulhante, há o regime de fluidização turbulenta. Este comportamento é caracterizado por uma diminuição nas alterações de queda de pressão do leito, o que ocasiona a dissipação de bolhas e espaços vazios no leito (BI et al., 2000). Posteriormente, é possível observar o regime de fluidização rápida, a partir do qual se inicia o arraste de material. Aumentando-se ainda mais a velocidade do gás, fazendo-se possível a ocorrência do arraste de todo o material particulado, tem-se o transporte ou regime pneumático (KUNII; LEVENSPIEL, 1991). Os regimes de fluidização citados podem ser observados na Figura 1.

Figura 1 – Curva característica da fluidização.



Fonte: Sánchez (2010), p. 36.

Pode-se dizer que o processo de fluidização de um leito ocorre entre os regimes de fluidização incipiente e turbulenta. Nitz e Guardani (2008) compararam o comportamento de um leito fluidizado ao de um líquido em estado de ebulição. Os autores afirmam que:

- Caso a fase sólida possua uma densidade menor que a do leito, flutuará no topo;

- Embora o recipiente no qual esteja o leito possa ser inclinado, a superfície deste permanecerá horizontal;
- A relação entre pressão estática e altura no leito no caso de um leito fluidizado multifásico do tipo gás-sólido é similar à de líquidos.

Existem vários tipos de configurações possíveis considerando regimes de fluidização para gaseificadores. Dentre as principais, podem ser citadas: leito fixo contracorrente, no qual a direção do combustível é descendente e a do gás é ascendente. Neste caso, a fonte de calor do processo provém da combustão de resíduos de carbono; leito fixo co-corrente, no qual a direção do escoamento tanto do combustível quanto do fluido de arraste é a mesma, descendente e a fonte de calor vem da combustão parcial dos voláteis; e, finalmente, os leitos fluidizados borbulhantes e circulantes, nos quais a direção do escoamento de combustíveis e agentes de gaseificação é ascendente, e a fonte de calor provém tanto da combustão parcial dos voláteis quanto dos resíduos de carbono gerados (LORA et al., 2012).

No entanto, este tipo de classificação de regimes de escoamento gás-sólido não pode ser generalizado para todos os tipos de partículas. De modo a minimizar erros e procurar certa padronização, foi criada uma classificação do comportamento de sólidos arrastados por gases (GELDART, 1973).

2.3. Classificação de Geldart para materiais particulados

O comportamento de um sólido ou de partículas sólidas, ao serem arrastadas por um gás, tomando por base o valor da diferença de densidade do sólido e do fluido e o diâmetro médio da partícula sólida, de acordo com Geldart (1973), pode ser classificado em quatro grupos distintos: A, B, C e D.

As letras representam os grupos de partículas. As principais características de cada um dos grupos são (GELDART, 1973; KNOWLTON, 2005; HODAPP, 2012):

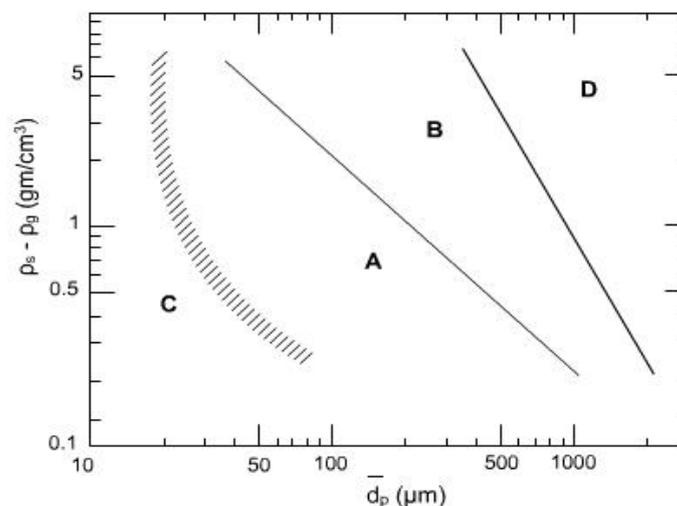
- **Grupo A:** no que diz respeito ao diâmetro das partículas, este encontra-se no intervalo de 30 e 100 μm . Este grupo apresenta partículas com boa fluidização e densidades relativamente baixas, abaixo de $1,4 \text{ g/cm}^3$, aproximadamente. Geralmente, ocorre a formação de bolhas, com relevante expansão do leito. Como exemplos, podem ser citadas partículas de FCC;
- **Grupo B:** já neste grupo, diâmetros entre 100 e 1000 μm são propriedades das partículas. Neste caso, há um crescimento considerável de bolhas, que se

formam assim que a velocidade do fluido de arraste atinge a velocidade de mínima fluidização. Como exemplos, podemos citar areia e sal de cozinha;

- **Grupo C:** as partículas pertencentes a este grupo apresentam diâmetros menores que $30\ \mu\text{m}$ e são muito finas e coesivas, apresentando, portanto, certa dificuldade de fluidização. Isso ocorre porque as forças entre as partículas (van der Waals, forças de capilaridade e eletrostáticas) são maiores que a força de arraste do gás. Baixas velocidades de fluido podem ocasionar caminhos preferenciais de partículas. Transferências de calor e massa entre gás e sólido são bem menores neste caso, comparadas aos outros grupos;
- **Grupo D:** estas partículas possuem diâmetros maiores que $1000\ \mu\text{m}$ e densidade também elevada. Estas características favorecem a formação de leitos de jorro, bolhas grandes e canais preferenciais, sendo que a velocidade do gás necessária para que haja fluidização é alta.

O gráfico da classificação de Geldart está representado na Figura 2.

Figura 2 – Gráfico da classificação de Geldart.



Fonte: Kunii e Levenspiel (1991).

É importante ter em mente os conceitos sobre os tipos de regime de escoamento gás-sólido, fluidização e classificação de partículas sólidas para um melhor entendimento da fluidodinâmica do processo de gaseificação de biomassa. O sistema trabalhado nesta tese é mais encontrado na configuração de leito fluidizado borbulhante ou circulante. Esse tipo de configuração apresenta várias vantagens e desvantagens, como poderá ser visto posteriormente na seção 2.5.1. Isto se deve ao fato da possibilidade de utilização de diversos tipos de combustíveis, como bagaço de cana,

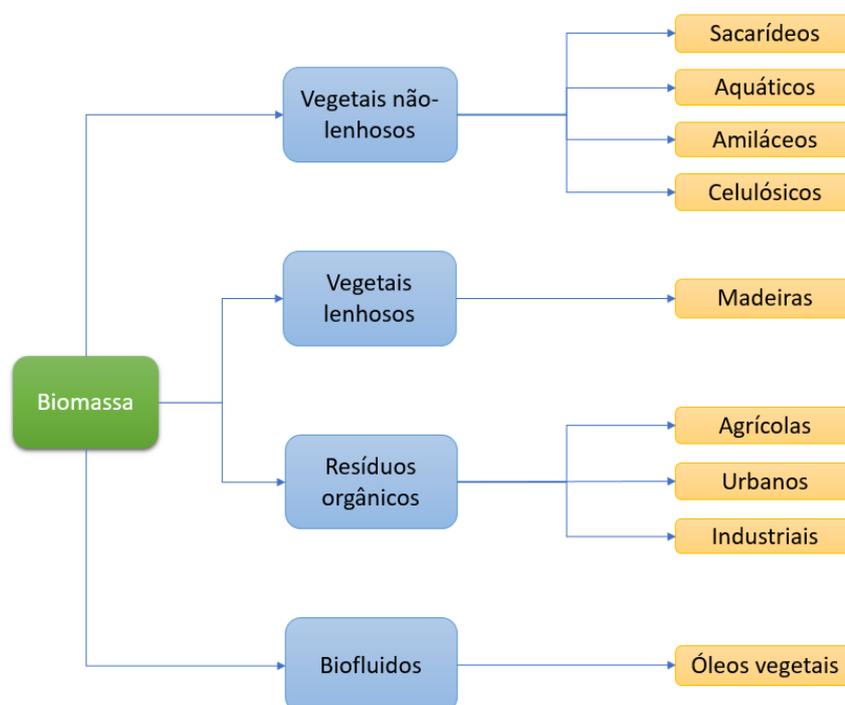
casca de arroz, óleo de oliva, entre outros. Devido a algumas características físicas e geométricas, esses tipos de biocombustíveis são mais bem gaseificados com gaseificadores do tipo leito fluidizado (CORTEZ; LORA; GÓMEZ., 2008).

2.4. Biomassa

A biomassa pode ser classificada como uma das fontes de energia renovável mais promissoras da atualidade. Rigorosas políticas de redução de emissões de gases poluentes contribuíram para esta classificação, além de possibilitarem que este tipo de matéria-prima pudesse ser reconhecido mundialmente como uma fonte de energia viável e eficiente. Por estes motivos, a biomassa vem sendo utilizada como principal combustível em vários processos químicos, dentre eles, a gaseificação (RESENDE et al., 2015).

A biomassa pode ser proveniente de várias fontes, como por exemplo: resíduos (agrícolas ou urbanos), produtos florestais (madeira, serragem, árvores em geral, entre outros), plantas aquáticas, cana-de-açúcar, batata, milho, trigo, girassóis, arroz, óleos vegetais, entre outros (CHAURASIA; BABU, 2011). A Figura 3 mostra um esquema simplificado das fontes de biomassa para geração de energia disponíveis atualmente.

Figura 3 – Fontes de biomassa.



Fonte: Adaptado de Cortez, Lora e Gómez, 2008, p. 19.

Além da vasta quantidade de fontes, compostos derivados de biomassa também apresentam outras vantagens, tais como:

- Conversões térmicas que geram emissões de gases tóxicos em menor quantidade, comparadas a combustíveis fósseis;
- Redução da quantidade de resíduos depositada em aterros sanitários, visto que alguns podem ser usados como matéria-prima para processos de gaseificação, combustão e fermentação, por exemplo;
- Contribui para redução do uso de combustíveis fósseis como um todo, diminuindo a dependência deste tipo de matéria-prima pouco sustentável.

2.4.1. Caracterização da biomassa

Combustíveis derivados de biomassa possuem algumas características marcantes. Apresentam alta reatividade e também uma quantidade maior de voláteis em sua composição do que os combustíveis de origem fóssil. Também produzem uma menor quantidade de finos de carbono (conhecidos em inglês como *char*) em processos de combustão e gaseificação. A grande porcentagem de voláteis na composição facilita a gaseificação do combustível. No entanto, também é produzida uma quantidade razoável de alcatrão, o que pode dificultar a limpeza dos gases ao final do processo (BASU, 2006).

Tratando-se do tipo de conversão, ou seja, processos de transformação da matéria-prima, a de biomassa pode seguir duas principais rotas: bioquímica e termoquímica. Na bioquímica, há a quebra de moléculas de biomassa mediante ação de enzimas ou bactérias, podendo ocorrer digestão aeróbia ou anaeróbia, fermentação e/ou hidrólises ácida ou enzimática. Este trabalho, no entanto, contempla apenas a conversão termoquímica de compostos derivados de biomassa, que consiste na conversão da biomassa em gases, mediante aquecimento e com a utilização ou não de um agente gaseificador. Estes gases, posteriormente, poderão ser utilizados diretamente para combustão ou sintetizados em outras substâncias químicas. A transformação termoquímica da biomassa ocorre mediante alguns processos principais, como combustão, pirólise e gaseificação, que serão tratados em mais detalhes posteriormente neste capítulo (BASU, 2006).

No que concerne a processos de conversão termoquímica, é necessário que a matéria-prima em questão passe por alguns procedimentos de análise (SÁNCHEZ, 2010), como por exemplo:

- **Granulometria:** através da análise granulométrica, é possível obter variáveis importantes para cálculos de dimensionamento do gaseificador e velocidade superficial de entrada do gás;
- **Análise imediata (*proximate analysis*):** é uma das mais importantes análises utilizadas para modelagem de um processo de gaseificação de biomassa. A partir dela, é possível obter as frações (em peso) de carbono fixo, umidade, voláteis e cinzas de uma amostra de biomassa;
- **Análise elementar (*ultimate analysis*):** como o próprio nome já indica, esta análise tem por objetivo a obtenção das frações (em peso) dos elementos que constituem a biomassa, como: carbono, oxigênio, hidrogênio, nitrogênio, enxofre, cloro, entre outros. Também fornece um resíduo que, inicialmente, é considerado como cinzas, diferindo um pouco do obtido na análise imediata devido a pequenas diferenças na aplicação de procedimentos e técnicas de análise;
- **Poder calorífico de sólidos:** responsável por medir o calor liberado na queima do combustível com o oxigênio. Pode variar de maneira significativa, dependendo da quantidade de umidade na biomassa (CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008). Pode ser utilizada no desenvolvimento de modelos de correlação para estimação do poder calorífico superior, na falta de uma caracterização mais fidedigna do combustível (SÁNCHEZ, 2010).

Durante a transformação termoquímica, toda a biomassa é convertida em gases que serão utilizados posteriormente como combustível ou como matéria-prima para outras reações químicas. O processo de gaseificação é um exemplo de processo de conversão termoquímica da biomassa. Os principais conceitos, características e etapas deste processo serão apresentados na seção 2.5.

2.5. Gaseificação

A gaseificação é um processo químico capaz de converter materiais carbonáceos em combustíveis gasosos ou insumos químicos. A pirólise, a oxidação parcial e a hidrogenação são processos relacionados com a gaseificação. A combustão também é

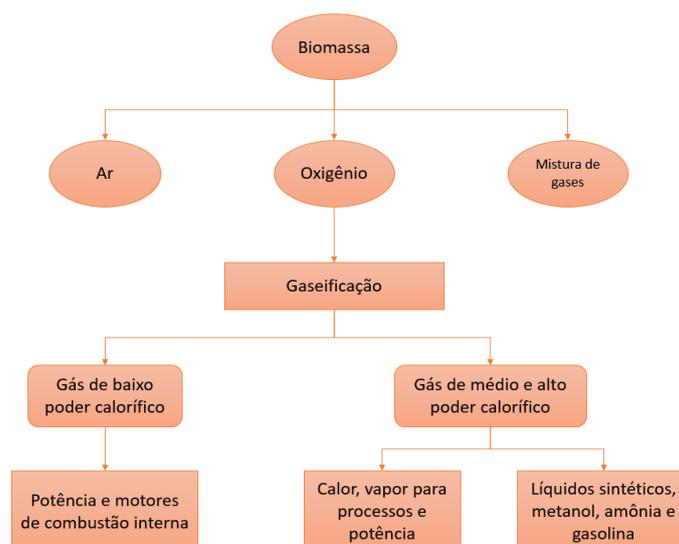
capaz de converter biomassa em combustíveis gasosos, no entanto, apresenta diferenças significativas quando comparada à gaseificação. Uma delas é que a combustão ocorre em ambientes nos quais há presença de oxigênio e liberação de energia em forma de calor. A gaseificação, por outro lado, ocorre em ambientes deficientes de oxigênio, onde há necessidade de aquecimento para que o processo aconteça (BASU, 2010).

Realizada a altas temperaturas, por volta da faixa de 850 a 1500°C, a gaseificação é um processo de conversão termoquímica de um combustível. Os produtos principais deste processo são os seguintes gases: CO, CO₂, H₂ e CH₄; além de alguns traços de outros hidrocarbonetos pesados, nitrogênio, água e outros particulados (alcatrão, ácidos, cinza, coque, entre outros). Estes produtos variam de acordo com a composição da biomassa e em como será realizado o processo de gaseificação (SORDI et al., 2006).

2.5.1. Tipos de gaseificadores

Os diversos tipos de gaseificadores podem ser classificados de acordo com certas características. Por exemplo, quanto ao poder calorífico de gás produzido, podem ser de baixo (até 5 MJ/Nm³), médio (5 a 10 MJ/Nm³) ou alto (10 a 40 MJ/Nm³). A letra N, ao lado de m³, refere-se à unidade de vazão “normal metro cúbico (Nm³)”, comumente utilizada para cálculos de vazão de gases. Além disso, a gaseificação pode ocorrer com a utilização dos seguintes agentes gaseificadores: ar, vapor d’água, oxigênio e hidrogênio (CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008). Dependendo destes fatores, a biomassa poderá seguir diferentes rotas, como indica a Figura 4.

Figura 4 – Esquema simplificado de algumas rotas do processo de gaseificação de biomassa.

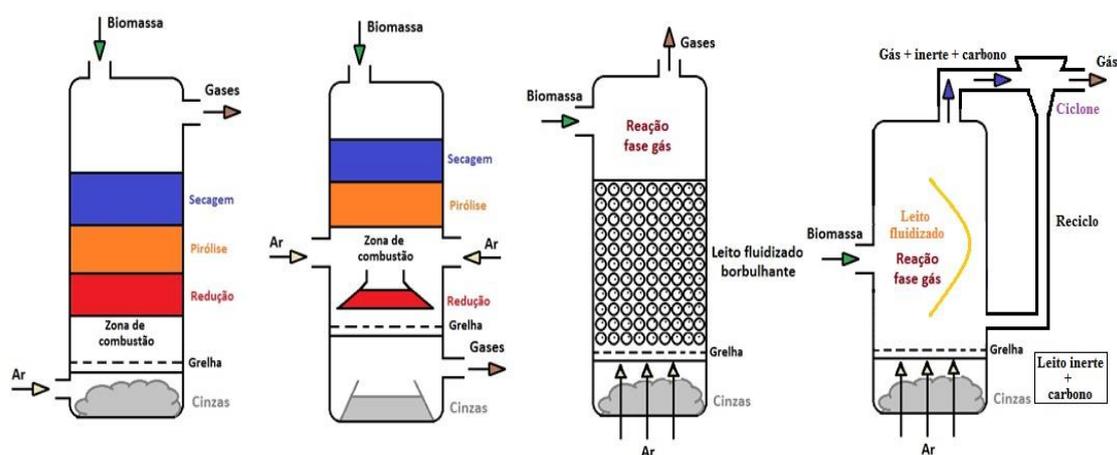


Fonte: Cortez, Lora e Gómez, 2008.

O agente gaseificador influencia, principalmente, no poder calorífico do gás resultante do processo de gaseificação e, conseqüentemente, influenciando também na usabilidade dos produtos finais do processo. É importante mencionar que os agentes gaseificadores (ar, oxigênio, mistura de gases, hidrogênio, entre outros) atuarão na etapa de combustão do processo de gaseificação de biomassa.

Uma análise mais detalhada dos tipos de gaseificadores classificados de acordo com a direção do movimento da biomassa e do agente de gaseificação foi feita na Figura 5, dada a importância dessa característica, em especial, a este trabalho.

Figura 5 – Tipos de gaseificadores.



(a) Leito fixo contracorrente (b) Leito fixo concorrente (c) Leito fluidizado borbulhante (d) Leito fluidizado circulante

Fonte: Adaptado de FAO (1986).

Até a atualidade, vários tipos de gaseificadores já foram desenvolvidos, cada qual com a finalidade de atender objetivos específicos. No entanto, a maioria dos gaseificadores pode ser agrupada de acordo com o tipo de leito utilizado, podendo ser estes de leito fixo ou de leito fluidizado (circulante ou borbulhante).

O mais simples e antigo tipo de gaseificador é o de leito fixo contracorrente, que pode ser observado na Figura 5a. A entrada de ar ocorre no fundo e os produtos gasosos saem no topo. As reações de combustão acontecem próximo à grade, seguidas de reações de redução. Na parte superior do gaseificador, reações de aquecimento e pirólise da matéria-prima ocorrem, resultantes da transferência de calor por convecção forçada dentro do gaseificador. As cinzas são removidas no fundo (FAO, 1986).

Este tipo de equipamento apresenta algumas vantagens, como sua simplicidade, transferências de calor internas que possibilitam saídas de gases a baixas temperaturas, além de grande eficiência de operação. As principais desvantagens se relacionam à

dificuldade de limpeza do gaseificador, devido à presença de grande quantidade de alcatrão condensado, que pode ser arrastado também pelo fluxo de gás (FAO, 1986).

Para tentar minimizar este problema, foram projetados gaseificadores de leito fixo do tipo concorrente, nos quais o ar de gaseificação é introduzido acima ou na própria zona de oxidação do equipamento. Os produtos gasosos, no entanto, são removidos na parte inferior do aparelho, de modo que a matéria-prima e os gases se movem no mesmo sentido, como pode ser visto na Figura 5b. Deste modo, é possível produzir um gás com pouca quantidade de alcatrão, cuja aplicabilidade pode ser em motores.

Por outro lado, há certas desvantagens nos gaseificadores de leito fixo do tipo concorrente. Uma delas é o tipo de escoamento, que pode causar queda de pressão. Por isso, geralmente, a matéria-prima deve ser transformada em pellets antes da entrada no equipamento. Outra desvantagem em comparação ao gaseificador do tipo contracorrente é a menor eficiência, devido à menor transferência de calor no processo (FAO, 1986).

Como uma forma de tentar minimizar as desvantagens dos gaseificadores de leito fixo, principalmente no que se refere às altas quedas de pressão, surgiram os gaseificadores de leito fluidizado, cujos esquemas podem ser observados na Figuras 5, itens c e d, na qual pode ser visto um gaseificador do tipo leito fluidizado borbulhante e um circulante.

Neste tipo de equipamento, o ar escoar através de um leito de partículas sólidas a uma velocidade suficiente para mantê-las em suspensão. O leito é aquecido externamente e a matéria-prima pode ser introduzida tanto no fundo, no topo ou em uma parte intermediária do equipamento, onde será rapidamente misturada com o material do leito e quase instantaneamente aquecida até a temperatura do mesmo. Conseqüentemente, o combustível sofre o processo de pirólise rapidamente, resultando em uma mistura com grande quantidade de materiais gasosos.

Seguidamente, na fase gasosa, ocorre gaseificação e reações de conversão de alcatrão. Cinzas também devem ser removidas do produto caso este venha a ser utilizado para aplicações em motores de combustão interna (FAO, 1986).

Vários autores se dedicaram ao estudo do processo de gaseificação em diferentes tipos de regime de escoamento. No que se refere a leitos fixos, tem-se o trabalho de Di Blasi (2004), no qual o autor apresenta um modelo unidimensional para modelagem de gaseificação de madeira em um reator de leito fixo contracorrente. Um trabalho

interessante que compara vários aspectos do processo de gaseificação de biomassa entre leitos fixos e leitos fluidizados foi realizado por Warnecke (2000). O autor conclui que, em relação à temperatura, os reatores de leito fixo possuem uma distribuição maior desta e, como grande vantagem, possibilitam altas conversões de carbono. Leitos fluidizados, por outro lado, possibilitam a ocorrência de altas taxas de transferência de calor e massa, sendo essa uma de suas maiores vantagens.

Os autores Bueckens e Schoeters¹ *apud* Lora et al. (2012) trazem um compilado sobre as principais vantagens e desvantagens de gaseificadores em leito fluidizado e em leito fixo. A análise dos autores pode ser observada no Quadro 1.

Quadro 1 – Vantagens e desvantagens de gaseificadores de leito fixo e fluidizado.

Regime	Vantagens	Desvantagens
Leito fixo	<ul style="list-style-type: none"> • Unidades mais simples e de baixo custo; • Em configuração contracorrente, apresenta alta eficiência térmica; • Alta eficiência de conversão de carbono; • Baixo teor de cinzas no gás; • Baixo teor de alcatrão no gás de produto em configuração co-corrente. 	<ul style="list-style-type: none"> • Baixa capacidade volumétrica; • Requer um combustível uniforme para atingir operação ótima; • Pode haver aglomeração e clivagem de cinzas na grelha e nos refratários.
Leito fluidizado	<ul style="list-style-type: none"> • Flexibilidade com relação à taxa de alimentação e composição do combustível; • Alta capacidade volumétrica; • Possibilidade de controle da temperatura do leito. 	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura de operação é limitada pela possibilidade de sinterização das cinzas; • A carga de partículas de cinzas no gás é alta; • A perda de carbono na fuligem pode ser alta; • Alcatrão é formado a baixas temperaturas de operação.

Fonte: Bueckens e Schoeters (1985)¹ *apud* Lora et al. (2008), p. 257.

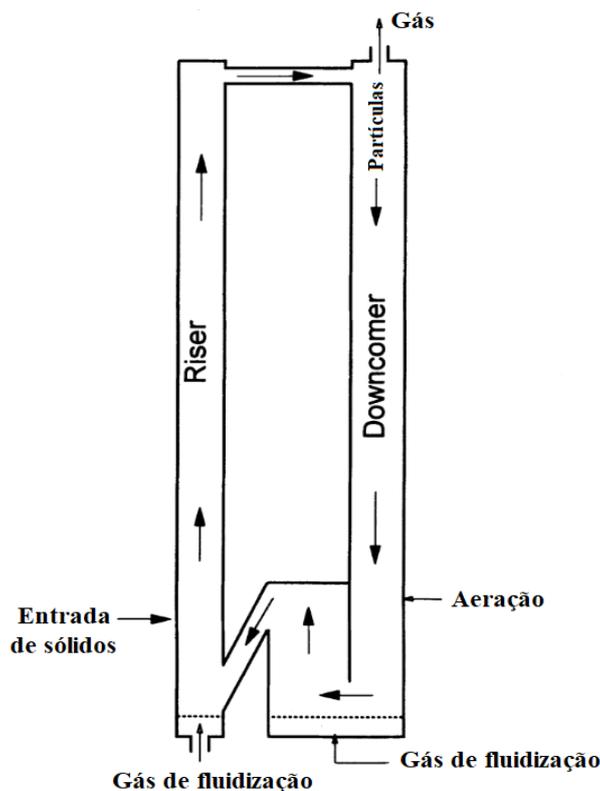
2.5.1.1. Leito fluidizado circulante

Um esquema típico de um reator de leito fluidizado circulante pode ser observado na Figura 6. Nota-se, a partir da Figura 6, considerando um processo do tipo gás-sólido, que as partículas sólidas entram no *riser* e são arrastadas por um fluido de arraste, que, na maioria das vezes, é o ar. Quando chegam ao topo do *riser*, passam por um ciclone no qual são separadas do gás de produto e sofrem recirculação, passando por um *downcomer* e retornando ao fundo do *riser*. É formado então um processo cíclico, no qual as partículas ficam circulando até atingir um diâmetro inferior ao diâmetro de corte do ciclone ou um diâmetro superior ao da maior partícula arrastada pelo fluxo de

¹ BUECKENS, A. G.; SCHOETERS, J. G. **Modeling of biomass gasification**. In: MILNE, T. A.; MUDGE, L. K. *Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion*. Londres: Ed. Elsevier App. Sc. Pb., 1985, p. 619-689.

entrada de gás. Isso pode ocorrer mediante ocorrência de reações químicas ou do próprio atrito no interior do sistema (MOURA; GAMA; CARDIM et al., 2011).

Figura 6 – Configuração típica para um sistema de leito fluidizado circulante.



Fonte: Adaptado de Grace, Avidan e Knowlton (1997).

Segundo Kunii e Levenspiel (1991), neste caso específico, em que há arraste de sólidos no leito, pode-se definir duas regiões: uma densa e outra mais diluída. Em reatores de leito fluidizado circulante, essas regiões podem ser de difícil identificação, principalmente a olho nu. Daí vem a importância de um estudo de modelos de arraste de partículas, para um melhor entendimento da fluidodinâmica do leito.

Devido às vantagens anteriormente citadas, os gaseificadores de leito fluidizado circulante foram escolhidos como objeto de estudo deste trabalho.

2.5.2. Reações químicas no processo de gaseificação

Há reações químicas bastante complexas que ocorrem durante a gaseificação, tanto que ainda não são todas completamente conhecidas. No entanto, para um melhor entendimento, o processo pode ser resumido em algumas etapas principais (CENBIO, 2002):

- **Primeira etapa:** ocorre o processo de pirólise ou decomposição térmica, desenvolvido a temperaturas por volta de 600°C;
- **Segunda etapa:** oxidação de uma parcela do carbono fixo do combustível, gerando, assim, energia térmica para etapas futuras;
- **Terceira etapa:** há o processo de gaseificação, com ocorrência de reações homogêneas e heterogêneas entre resíduos e produtos já formados;
- **Quarta etapa:** o alcatrão formado no processo é fracionado (craqueamento), obtendo-se CO, CO₂ e CH₄, dentre outros gases, como produtos;
- **Quinta etapa:** finalmente, os produtos produzidos pelo processo de pirólise são parcialmente oxidados.

As etapas descritas acima podem ocorrer em diferentes regiões do gaseificador ou em todo o seu volume simultaneamente (CENBIO, 2002). Uma descrição sucinta das reações químicas que ocorrem nas principais etapas do processo de gaseificação de biomassa será apresentada a seguir.

2.5.3. Pirólise

O termo "pirólise" vem da junção de duas palavras de origem grega: *pyro*, que significa calor ou fogo e *lysis*, cujo significado é quebra (REED; DAS, 1988). Ocorre após a secagem, que é a etapa inicial do processo de gaseificação de biomassa, na qual ocorre a liberação de água da matéria-prima, e inicia-se a decomposição de seus carboidratos (celulose, hemicelulose e lignina, além da produção de alcatrão e alguns ácidos mais leves (MILNE, 1981; SIMMONS; LEE, 1985; CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008). A pirólise ocorre na ausência de oxigênio, ou seja, é fornecido apenas calor à matéria e os produtos são obtidos.

O processo de pirólise (ou desvolatilização) é bastante complexo e a distribuição de produtos é particularmente sensível à taxa de aquecimento e ao tempo de residência dentro do reator. Durante o processo, são obtidos produtos sólidos, líquidos e gasosos, dentre eles: gases não-condensáveis (CO₂, CO, H₂O, H₂, CH₄), carvão vegetal e um condensado composto por alcatrão e ácidos. Posteriormente, haverá a etapa de craqueamento deste alcatrão, formando gases como CO, CO₂, etc.

Vários mecanismos de reações foram propostos ao longo do tempo pela literatura para a pirólise. O principal objetivo destes autores era buscar a melhor formulação possível de um modelo que pudesse prever, da melhor forma possível, o comportamento

do processo de pirólise. Estes modelos foram divididos em três categorias principais (DI BLASI, 1993):

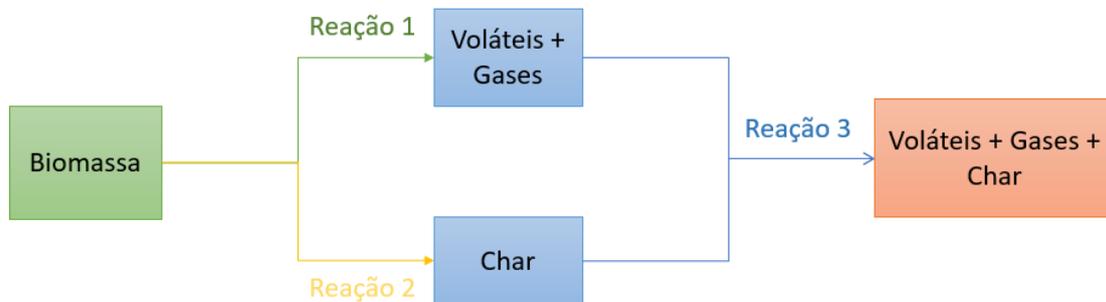
- Modelos globais de um passo;
- Modelos semi-globais de dois estágios;
- Modelos de um estágio com múltiplas reações.

Simmons e Lee (1985) propuseram uma representação simplificada do processo de desvolatilização segundo a primeira categoria de modelos, conforme a Equação 2.1. Além disso, modelos globais de um passo para pirólise foram também amplamente estudados por Di Blasi (1993).



Considerando o segundo grupo de modelos, Koufopoulos et al. (1991) propôs um esquema de reações químicas para a pirólise de biomassa, ilustrado na Figura 7. A terceira classe de modelos considera múltiplas reações de primeira ordem que competem entre si (CHAURASIA; BABU, 2011), tornando este grupo um dos mais difíceis para formulação de modelos que se adequem a seu comportamento.

Figura 7 – Esquema simplificado do processo de pirólise de biomassa descrito por Koufopoulos et al. (1991).



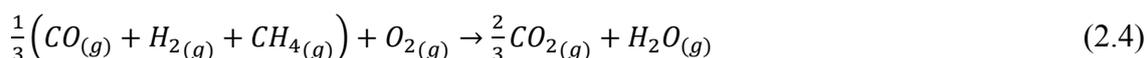
Fonte: Adaptado de Koufopoulos et al. (1991).

Dada a complexidade do processo de pirólise, envolvendo várias reações químicas, cada uma com suas características e especificidades, sua modelagem torna-se uma tarefa desafiadora, levando à necessidade de serem adotadas várias simplificações e hipóteses para o modelo. No Capítulo 3 desta tese, estão descritas, detalhadamente, todas as simplificações adotadas para formulação do modelo para esta etapa da gaseificação de biomassa.

2.5.4. Reações de combustão e redução

Basicamente, o processo de combustão consiste na reação química exotérmica entre um combustível e um comburente, biomassa e oxigênio, por exemplo. Há a conversão de energia armazenada em ligações químicas do combustível em energia térmica, podendo esta ser usada de várias formas durante ou após o processo (TURNS, 2013). É um processo que ocorre em múltiplas etapas e depende de muitos fatores, como por exemplo, tipo de combustível, grau de mistura com o comburente (oxigênio), temperatura, entre outros (GARCIA, 2013).

No processo de gaseificação de biomassa, pode-se afirmar que as reações químicas que acontecem na zona de combustão do reator são, de forma sucinta, combinações entre o oxigênio e os outros componentes presentes na biomassa em maior quantidade, ou seja, carbono e hidrogênio (CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008). As principais reações de combustão que ocorrem durante a gaseificação de biomassa, bem como a entalpia de cada uma, estão representadas pelas Equações de 2.2 a 2.4 (CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008; SÁNCHEZ, 2010). A letra C, neste caso, representa os finos de carbono da biomassa (*char*).

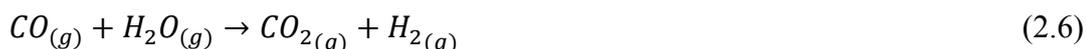


Outras reações exotérmicas que ocorrem no processo de gaseificação de biomassa são as seguintes:

- Formação de gás metano (entalpia = -79,93 kJ):



- Reação do gás monóxido de carbono com vapor d'água (entalpia = -41,2 kJ):



Entre as principais reações de redução endotérmicas, podem ser citadas:

- Reação de Boudouard (entalpia = 172,6 kJ):



- Reação do *char* com vapor d'água (entalpia = 131,4 kJ/mol):



- Reação do gás metano com vapor d'água (entalpia = 201,9 kJ/mol):



Diversos fatores podem influenciar a composição de equilíbrio dos gases no processo de gaseificação, entre elas, pode-se citar: temperatura, pressão e umidade do combustível, teor de oxigênio do agente de gaseificação, entre outros (CORTEZ; LORA; GÓMEZ, 2008; SÁNCHEZ, 2010).

2.5.5. Variáveis relevantes ao processo de gaseificação

Tendo em vista que o processo de gaseificação ocorre sob a dependência das quantidades de ar e combustível introduzidas ao gaseificador, pode-se afirmar que estas são as variáveis mais importantes e que exercem maior influência durante o processo. Tipos de reatores e outras características construtivas também podem influir na gaseificação. Neste contexto, é possível listar as principais variáveis envolvidas durante o processo: fator de ar, temperatura e eficiência do processo de gaseificação de biomassa (LORA et al., 2012).

2.5.5.1. Fator de ar

O fator de ar (FA), também conhecido como razão de equivalência (ou *equivalence ratio*, em inglês), é definido como a razão entre a quantidade de ar-combustível real e a estequiométrica necessárias para que ocorra o processo de combustão (LIU, 2014). Geralmente, é um termo utilizado em casos nos quais há deficiência de oxigênio no processo, assim como ocorre na própria gaseificação (BASU, 2010). Além disso, a razão de equivalência é uma condição operacional capaz de determinar o desempenho do gaseificador. De acordo com Tinaut et al. (2006) e Hernandez, Serrano e Perez (2006), o fator de ar pode ser definido conforme mostrado na Equação 2.10.

$$FA = \frac{\left(\frac{\text{Razão Ar}}{\text{Comb.}} \right)_{real}}{\left(\frac{\text{Razão Ar}}{\text{Comb.}} \right)_{estequiométrica}} \quad (2.10)$$

A relação ar-combustível é dada a partir da razão entre o consumo de ar (em Nm³, a condições normais de temperatura e pressão) e a quantidade (em kg) de combustível.

Geralmente, fatores de ar entre 0,2 e 0,6 são empregados na gaseificação. A partir destes valores, pode-se dizer que há uma variação de 40 a 80% de falta de ar para um processo de combustão, visto que a gaseificação pode ser comparada a uma combustão com ar faltante (SÁNCHEZ, 2010). Esta variável pode influenciar no comportamento, controle e conteúdo energético do gás de produto (REED; DAS, 1988; LORA et al., 2012).

2.5.5.2. Temperatura

Variável de grande importância para a gaseificação, a temperatura deve estar acondicionada ao valor do fator de ar do processo. O controle desta variável é necessário para evitar que haja perda de energia no sistema, fazendo com que o carbono presente no combustível seja transformado completamente e não haja acúmulo do mesmo nas cinzas (LORA et al., 2012).

Além de influenciar a composição dos gases do produto da gaseificação, altas temperaturas favorecem a produção de H₂ e CO, minimizando a produção do gás metano. Segundo Lora et al. (2012), este fato pode ser explicado devido ao Princípio de Lê Chatelier, o qual afirma que reagentes são favorecidos na condição de altas temperaturas em reações exotérmicas. Nas mesmas condições, no caso de reações endotérmicas, é favorecida a formação de produtos.

2.5.5.3. Eficiência do processo

Conforme é afirmado por Lora et al. (2012), esta variável pode ser calculada de duas formas distintas: a quente e a frio. A razão entre o somatório das energias química e sensível do gás produzido e o poder calorífico da biomassa gaseificada define a eficiência a quente. O quociente entre a energia química do gás e a do combustível é o modo de calcular-se a eficiência a frio. A maioria dos autores, na literatura, considera o valor obtido mediante cálculos de eficiência a frio como critério para modelagem e simulação do processo.

Mediante todas as características da matéria-prima e do processo de gaseificação de biomassa vistas até aqui, é nítida a complexidade de modelagem e simulação do processo. Existem diversas abordagens para tanto, porém, uma das formas de adquirir mais informações sobre diversas variáveis como fração volumétrica de sólidos e velocidades de gases e partículas, entre outras, é através da técnica de fluidodinâmica computacional, tratada com mais detalhe na seção seguinte.

2.6. Fluidodinâmica Computacional

A CFD é uma análise de sistemas envolvendo escoamento de fluidos, transferência de calor e outros fenômenos associados, como reações químicas, por exemplo, baseada em simulações computacionais (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007). Trata-se de uma técnica bastante eficiente, possuindo uma vasta gama de aplicações, como por exemplo:

- Hidrodinâmica de embarcações marítimas;
- Aerodinâmicas de aeronaves;
- Engenharia de processos químicos: separação e misturas;
- Hidrologia e oceanografia;
- Engenharia marinha.

No entanto, é importante salientar que o uso de simulações computacionais e métodos numéricos não implica que análises experimentais e teóricas referentes à mecânica dos fluidos possam ser dispensadas. Pelo contrário, estas técnicas de análise devem complementar-se, de forma a obter o modelo mais próximo possível do original.

Um dos objetivos básicos da CFD é a exploração de fenômenos que seriam difíceis de ser estudados em laboratório e a própria redução no número de experimentos. Com a utilização de CFD, a avaliação numérica de diversos parâmetros relevantes ao problema pode ser realizada de maneira eficiente. O Quadro 2 mostra uma breve comparação entre as três principais estratégias para resolução de um problema de mecânica dos fluidos (FORTUNA, 2012).

Quadro 2 – Comparação entre três técnicas de solução para problemas de mecânica dos fluidos.

Técnica	Vantagens	Desvantagens
Experimental	<ul style="list-style-type: none"> • Mais realista 	<ul style="list-style-type: none"> • Equipamento exigido • Problemas de escala • Dificuldades de medição • Custo operacional
Teórica	<ul style="list-style-type: none"> • Mais geral • Fórmula fechada 	<ul style="list-style-type: none"> • Restrita a geometrias e processos físicos simples • Geralmente restrita a problemas lineares
Numérica	<ul style="list-style-type: none"> • Não há restrição à linearidade • Geometrias e processos complicados • Evolução temporal do processo 	<ul style="list-style-type: none"> • Erros de truncamento • Prescrição das condições de fronteira apropriadas • Custos computacionais

Fonte: Fortuna (2012, p. 26).

De forma geral, a dinâmica dos fluidos computacional apresenta um conjunto de algoritmos bastante versáteis para solução de problemas de escoamento. Dependendo da situação tratada, certo algoritmo pode ser aplicado, por isso é importante que o usuário conheça os aspectos físicos do problema e numéricos da metodologia de solução (FORTUNA, 2012).

A modelagem matemática para solução de problemas de CFD é relativamente complexa. Deste modo, para tentar facilitar a resolução destes problemas, os pacotes comerciais de CFD incluem interfaces de usuário sofisticadas para entrada de dados e análise de resultados. Conseqüentemente, os códigos comerciais frequentemente apresentam vários pacotes de *software* específicos para três etapas principais de solução, que são as seguintes (VERSTEEG; MALALASEKERA, 2007):

- **Etapa de pré-processamento:** envolve definição da geometria da região de interesse (domínio do problema); geração da malha (subdivisão do domínio em subdomínios ainda menores); definição dos fenômenos químicos e físicos a serem modelados; definição das propriedades dos fluidos do sistema e especificação das condições de contorno do problema.
- **Etapa de solução numérica:** existem diversos tipos de discretização das equações de conservação, como o método dos elementos finitos, diferenças finitas e volumes finitos, por exemplo. Geralmente, o algoritmo para a solução numérica enquadra as seguintes etapas: discretização das equações do problema sobre o domínio a ser resolvido; escolha de um método de acoplamento pressão-velocidade para a solução das equações de Navier-Stokes; e, finalmente, solução das equações algébricas por um método iterativo, se possível.
- **Etapa de pós-processamento:** nesta etapa, o *software* possibilitará que o usuário visualize a solução através de gráficos 2D ou 3D, bem como permitirá a utilização de outras várias ferramentas para facilitar a interpretação da solução pelo usuário.

A CFD é, portanto, uma ferramenta que auxiliará na compreensão da natureza dos fenômenos envolvendo o movimento de fluidos (FORTUNA, 2012). Assim sendo, foi a técnica escolhida para realização deste trabalho. A seção 2.7 traz os principais trabalhos relacionados ao tema desta tese.

2.7. Gaseificação de biomassa – trabalhos correlatos

Esta seção traz uma coletânea sobre os principais trabalhos relacionados à gaseificação de biomassa e seus aspectos hidrodinâmicos e cinéticos, tanto em termos de modelagem e simulação computacional utilizando técnicas de CFD quanto trabalhos experimentais relevantes à pesquisa.

A maioria dos estudos que utilizam leitos fluidizados circulantes presentes na literatura estão em regime de fluidização rápida, regime este considerado também para o desenvolvimento da presente tese. Neste tipo de regime, há um grande arraste de sólidos, logo, o fluxo mássico de entrada de sólidos deve ser realizado de forma contínua, de modo a compensar a “perda” de sólidos ao longo do leito e procurar atingir o estado permanente do processo. Kunii e Levenspiel (1991) apresentaram o leito em fluidização rápida e suas regiões de diferentes frações de sólidos ao longo do leito que também podem ser observadas na Figura 8:

- Ao fundo do leito, observa-se uma zona de entrada com concentração de sólidos relativamente alta, cuja fração de sólidos pode variar entre 0,2 e 0,4;
- Mais adiante, há uma parte do reator na qual a fração de sólidos pode ser considerada relativamente constante, com um valor aproximado de 0,2. Kunii e Levenspiel (1991) classificaram esta região como a região densa do processo;
- Acima desta região densa, existe uma região superior de arraste na qual é possível observar o decréscimo progressivo na fração de sólidos (valores entre 0,02 e 0,05), na chamada região diluída do processo.

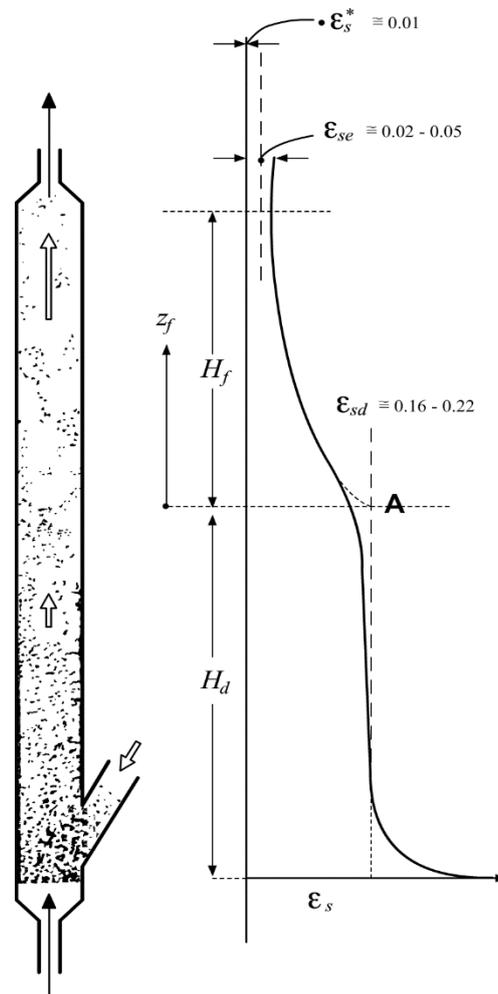
No que diz respeito à distribuição vertical de sólidos, vários autores se dedicaram a estudar como seria o perfil deste tipo de distribuição no caso de fluidização rápida, encontrando um perfil em forma de “S” para a curva (Figura 8), utilizando modelagem matemática. Dependendo das vazões de sólidos e gás, esta curva pode se mover mais para cima ou mais para baixo da coluna (Li; Kwauk, 1980; Weinstein et al., 1983). Kunii e Levenspiel (1991), a partir destes estudos, desenvolveram um modelo que se mostrou válido tanto para escoamentos em leito borbulhante quanto circulante. Este modelo foi modificado (Miao et al., 2013), no qual a distribuição vertical do perfil da fração de sólidos pôde ser calculada segundo a Equação 2.11:

$$\frac{\varepsilon_s - \varepsilon_s^*}{\varepsilon_{sd} - \varepsilon_s} = \exp[-\vartheta(H - H_d)] \quad (2.11)$$

onde ε_{sd} representa a fração volumétrica de sólidos na região densa, H_b é a altura da região densa e é determinada experimentalmente, ε_s^* é a fração de sólidos na região diluída e a constante de decaimento ϑ é função de propriedades das partículas e condições operacionais. O trabalho em questão utilizou a Equação 2.12, proposta por Adánez et al. (1994), para o cálculo da constante ϑ :

$$\vartheta(v_g - v_t)^2 = 3,5 - 1670d_p \quad (2.12)$$

Figura 8 – Diferentes frações volumétricas de sólidos em um leito de fluidização rápida.



Fonte: Adaptado de Kunii e Levenspiel (1991).

Como existem poucos modelos acerca do comportamento estrutural do escoamento de partículas de biomassa em leitos fluidizados circulantes, as seguintes correlações (Equações 2.13 e 2.14) foram propostas por Miao et al. (2013) (baseadas na literatura e em resultados experimentais):

$$\varepsilon_{sd} = 1,0422 \left(\frac{G_s}{\rho_p(v_g - v_t)} \right)^{0,2781} \left(\frac{v_g}{\sqrt{gD}} \right)^{-0,3218} \left(\frac{d_p \rho_g v_t}{\mu} \right)^{-0,1195} \quad (2.13)$$

$$\varepsilon_s^* = 0,0104 \left(\frac{G_s}{\rho_p(v_g - v_t)} \right)^{1,2933} \left(\frac{v_g}{\sqrt{gD}} \right)^{0,0808} \left(\frac{d_p^3 \rho_g g (\rho_p - \rho_g)}{\mu_g^2} \right)^{0,9822} \quad (2.14)$$

As Equações 2.13 e 2.14 são válidas para os seguintes intervalos: $d_p > 200 \mu m$, $\rho_p < 800 \frac{kg}{m^3}$, $v_g = 1,5 - 6 \frac{m}{s}$ e $G_s = 1,12 - 133,8 \frac{kg}{m^2 s}$.

Tratando-se de um comportamento hidrodinâmico possível em um processo de gaseificação de biomassa, logo no início dos anos 2000, Pärssinen e Zhu (2001) contribuíram para estudos relacionados à hidrodinâmica de leitos fluidizados circulantes com resultados experimentais provenientes de um *riser* usado para craqueamento catalítico fracionado (FCC) de petróleo. O principal objetivo deste trabalho era promover um melhor entendimento do comportamento de perfis radiais e axiais de velocidades de partículas, em especial sob condições de fluxos mássicos relativamente altos, podendo chegar a valores em torno de $550 \text{ kg/m}^2\text{s}$. Este estudo foi de fundamental importância para o desenvolvimento desta tese de doutorado e também de inúmeros trabalhos desenvolvidos nesta mesma temática, sendo considerado um trabalho de referência na área.

Os estudos de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) foi pioneiro em apresentar um mapeamento de perfis de escoamento e velocidade de partículas em *riser* longo, no qual os fluxos mássicos de entrada de sólidos poderiam chegar à um máximo de $550 \text{ kg/m}^2\text{s}$. Além disso, também foi observado que o desenvolvimento do escoamento era mais rápido à medida que a velocidade superficial do gás era aumentada. Em todas as regiões nas quais houve coleta de dados experimentais, notou-se uma dependência clara entre a velocidade local da partícula e a concentração de sólidos. A partir disso, conclui-se que a agregação de partículas pode ser considerada um dos fatores mais importantes que afetam a hidrodinâmica local em um *riser* de alto fluxo mássico de entrada de sólidos.

Ainda no ano de 2001, Sofialidis e Faltsi (2001) desenvolveram um modelo para simulação de processos químicos e físicos que ocorreram durante a gaseificação de biomassa em um leito fluidizado. O *software* comercial FLUENT® foi utilizado para descrição do escoamento turbulento do fluido, transferência de calor, transporte das espécies, não-volatilização e combustão da partícula e reação química na fase gás. A fase de emulsão da região fluida foi modelada como uma região porosa, enquanto que as bolhas dentro do leito são modeladas como regiões livres estacionárias. Medidas

experimentais disponíveis foram utilizadas para configuração do modelo e validação dos cálculos, em termos de fração mássica das espécies e temperatura na saída do gaseificador.

Sofialidis e Faltsi (2001) obtiveram resultados coerentes com a literatura para a gaseificação de biomassa do eucalipto. No entanto, várias hipóteses tiveram que ser levantadas para a modelagem do processo no *software* FLUENT[®], devido à complexidade do processo. No entanto, a trajetória de partículas ao longo do gaseificador não apresentou resultados satisfatórios. Neste caso, apenas a conversão dos gases no produto apresentou resultados satisfatórios. O modelo foi desenvolvido em ambiente 3D.

Um trabalho interessante sobre como o tipo de ambiente de simulação (2D ou 3D) pode influenciar na solução final do problema em CFD foi desenvolvido por Cammarata et al. (2003). Neste estudo, utilizando o *software* comercial CFX-4[®] (desenvolvido pela CFX LTDA, antiga *AEA Technology*), foram desenvolvidas simulações em 2D e 3D utilizando a abordagem Euleriana-Euleriana, considerando um escoamento do tipo gás-sólido em um leito fluidizado borbulhante. Os autores consideraram parâmetros como expansão do leito, tamanho e fração volumétrica de bolhas para avaliação. Os resultados mostraram que simulações em 3D podem prever um comportamento fluidodinâmico mais de acordo com os dados experimentais. No entanto, notou-se que, tanto o ambiente 2D quanto o 3D são capazes de prever comportamentos tanto qualitativos quanto quantitativos coerentes com os dados experimentais.

Trabalhos importantes para o estudo hidrodinâmico em leitos fluidizados circulantes foram desenvolvidos por Mei, Monazam e Shadle (2003; 2006). Primeiramente, os autores apresentaram resultados de um trabalho experimental sobre um escoamento multifásico (gás-sólido), cujo objetivo era discutir os possíveis regimes de escoamento pela variação do fluxo mássico de entrada de sólidos sob condições de velocidade superficial de gás constante. Observou-se que as partículas de cortiça (material escolhido como fase sólida) apresentaram comportamento distinto de materiais já estudados pela literatura previamente, como catalisadores utilizados em processos de FCC e areia, no que se refere ao perfil da fração volumétrica de sólidos nas regiões densa e diluída, em regime de fluidização rápida. Mais tarde, Jiradilok et al. (2008) utilizaram o mesmo aparato experimental de Mei, Monazam e Shadle (2003; 2006) para estudar coeficientes de dispersão axiais e radiais de sólido e gás,

considerando escoamento turbulento, e concluíram que o *software* FLUENT[®] foi eficiente para obter o tipo de comportamento hidrodinâmico pretendido.

Em busca de modelos mais adequados para prever o comportamento de sólidos em leitos fluidizados circulantes, vários tipos de abordagens foram utilizados ao longo dos anos. Modelos considerando uma abordagem Euleriana-Euleriana (E-E) do escoamento gás-sólido para este tipo de leito foram extensivamente estudados (YANG et al., 2003, Lu et al., 2005; WANG; LI, 2007; WANG; JIN; ZHONG, 2009). Dentre eles, Wang, Jin e Zhong (2009) desenvolveram um trabalho que incorporava a abordagem EMMS (*Energy Multi-Scale Minimization*) modelo E-E para simular a hidrodinâmica em *risers* de leito fluidizado circulante. No entanto, o presente trabalho se limitava apenas à simulação de partículas que pertencessem ao grupo A da caracterização de Geldart. Foi utilizada uma abordagem estocástica para análise das flutuações no comportamento de frações volumétricas de sólidos ao longo do *riser*, obtendo-se resultados promissores.

Ainda no mesmo ano, Almuttahir e Taghipour (2008) realizaram a modelagem de um leito fluidizado circulante de alta densidade, na qual variáveis como perfis de velocidades da fase sólida e da fase gás e fração volumétrica da fase sólida foram investigados. Foi observado que a modelagem não foi capaz de prever quantitativamente a segregação de sólidos na parede, devido à complexidade desta tarefa. Parâmetros de modelagem como diferentes modelos de arraste, coeficientes de restituição na parede e condições de deslizamento de sólidos também foram avaliados, concluindo-se que a aplicação de uma condição de deslizamento correta é capaz de influenciar significativamente na modelagem da hidrodinâmica do caso. Foram utilizadas partículas de FCC e ar como fluido de arraste.

No contexto de CFD aplicada à gaseificação, no trabalho de Chodapanedi, Sanke e Reddy (2009), foi realizada uma simulação computacional de um processo de gaseificação de biomassa avançado, desenvolvido no Laboratório de Gaseificação, Centro de Tecnologia Energética do *University College of Engineering, Osmania University, Hyderabad*. Para uma solução eficiente e economicamente viável, partículas de biomassa foram convertidas a um gás de síntese de alta qualidade. Neste caso, a dinâmica dos fluidos computacional foi uma ferramenta imprescindível para solução do problema proposto, sendo utilizada para caracterizar a conversão do processo, otimizar o projeto do equipamento, visualizar os campos de fluxo no ambiente de fluxo reacional, e finalmente, melhorar a eficiência de operação como um todo. O *software* utilizado para simulação computacional deste trabalho foi o Ansys-CFX[®].

Os estudos de Chodapaneedi, Sanke e Reddy (2009) trazem, em detalhes, as condições de contorno aplicadas ao problema. A biomassa utilizada neste caso foi a madeira. O modelo desenvolvido pelos autores foi em 3D e foi capaz de obter resultados semelhantes aos dados experimentais usados na comparação. Observou-se que o fator de ar é parâmetro-chave na simulação do processo de gaseificação de biomassa.

Um dos trabalhos mais conhecidos relacionados à modelagem de gaseificação de biomassa em leito fluidizado foi de Gómez-Barea e Leckner (2010). Tratou-se de uma revisão das principais características, modelagens hidrodinâmicas e cinéticas aplicadas a reatores para o processo em questão. Desde modelos puramente matemáticos até os que consideram a utilização de dinâmica dos fluidos computacional para serem solucionados, os autores listam os principais trabalhos relacionados ao tema, chegando à conclusão de que a maioria dos trabalhos se adequa aos dados experimentais escolhidos. No entanto, muito ainda deve ser feito de modo a aprimorar ainda mais os modelos, principalmente em relação às reações heterogêneas, que apresentam um grau maior de dificuldade na etapa de modelagem devido à complexidade das mesmas.

Pepiot e Desjardins (2012) afirmaram que a conversão termoquímica de biomassa pode ser uma grande promessa para produção de biocombustíveis e representará um papel importante na substituição de combustíveis derivados de petróleo por biocombustíveis. Abordagens empíricas já mostraram sérias limitações na capacidade de entendimento e controle destes processos de conversão. No entanto, sem a habilidade de prever e otimizar precisamente a performance da conversão termoquímica, a comercialização em grande escala destes sistemas é severamente comprometida.

Neste contexto, a fluidodinâmica computacional aparece como uma ferramenta essencial para melhor compreensão dos complexos fenômenos físicos e químicos envolvidos, abrindo caminho em direção à eficientes estratégias de controle e design. Após uma breve descrição dos modelos numéricos necessários para simulação de gaseificação e pirólise de biomassa, Pepiot e Desjardins (2012) apresentam as contribuições da CFD para o projeto de equipamentos e otimização do processo. Finalmente, o estado da arte em termos de modelos numéricos para os densos e reativos escoamentos de partículas são revisados. Deficiências em simulações de CFD existentes, especialmente em termos de validação e previsibilidade, são examinadas; e direções para futuras pesquisas baseadas no progresso da fluidodinâmica computacional em outros campos também são sugeridas.

Outro importante trabalho é de Patel, Shah e Patel (2013). Nesta pesquisa, foram realizadas simulações utilizando a dinâmica dos fluidos computacional para analisar vários parâmetros em um gaseificador de fluxo de ar descendente, como influências da turbulência, composição de gás no produto, temperatura, entre outros. O *software* utilizado foi o FLUENT® e os resultados obtidos foram condizentes com a literatura comparada. O modelo desenvolvido pelos autores pretendia prever a composição do gás de produto, o perfil de temperatura durante as reações, a fração mássica de *char* não convertido, a temperatura inicial da zona de pirólise, velocidade da corrente de ar e também a pressão. A maioria dos resultados apresentou concordância com os dados experimentais. Neste caso, não foi utilizada biomassa como combustível, e sim carvão mineral. No entanto, o trabalho é uma boa referência inicial para comparação e analogia com resultados de gaseificação de biomassa.

No ano seguinte, Liu (2014) desenvolveram um modelo de CFD tridimensional e em estado estacionário para simular a gaseificação de biomassa em um reator de leito fluidizado circulante. O modelo padrão de turbulência $k - \epsilon$ foi acoplado com a teoria cinética de fluxo granular para simulação da hidrodinâmica no gaseificador. A cinética de reações homogêneas e heterogêneas foram estudadas e integradas com equações de continuidade, movimento e energia para descrição das distribuições de velocidade, temperatura e concentração. Os resultados simulados foram comparados com os experimentais. O impacto de modelos de turbulência e radiação, reação de deslocamento gás-água (do inglês, *water gas shift*, WGSR) e razão equivalente (do inglês, *equivalence ratio*, ER) foram investigados para apresentar uma melhor compreensão de gaseificação de biomassa em um reator de leito fluidizado circulante.

Os autores foram capazes de obter resultados semelhantes aos dados experimentais, além de observarem que a diferença entre os modelos de arraste $k - \epsilon$ padrão, RNG e *realizable*, no que se refere à temperatura, foi insignificante. No mais, também aplicaram o modelo de radiação P-1 no processo de gaseificação, e concluíram que é importante considerar modelos de radiação em processos de gaseificação. Notou-se também que, com o aumento do fator de ar ou razão equivalente (ER), a fração molar das espécies químicas formadas decrescia.

Em relação à modelos de arraste aplicados à reatores de leito fluidizado circulante, existem vários trabalhos que abordam o tema na literatura (YANG et al., 2004; LIU, 2014). Em 2015, Armellini et al. (2015) analisou a influência de quatro diferentes modelos de arraste (Gidaspow, Bezburaiah e Ding (1992), Syamlal e O'Brien (1993),

EMMS (YANG, 2004) e *Four-zone model* (modelo de quatro zonas) (Li et al., 2009) em um leito fluidizado circulante com alto fluxo mássico de entrada de partículas, utilizando também os dados experimentais de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b). O trabalho em questão também avaliou a fração volumétrica de sólidos, como ocorre nesta tese.

Armellini et al. (2015) concluíram que modelos convencionais de arraste, como Gidaspow e Syamlal O'Brien são melhores para modelagem da região mais diluída do reator, enquanto modelos como EMMS (YANG, 2004) e *Four-zone* (Li et al., 2009), são melhores em captar o comportamento da fase sólida em regiões mais densas do *riser*. Uma análise semelhante é feita nesta tese, porém considerando diferentes modelos de arraste e uma outra abordagem para o modelo EMMS. Ao contrário do mencionado trabalho, esta tese avalia tanto o comportamento da fração volumétrica de sólidos considerando tanto um alto fluxo mássico de entrada de sólidos quanto um baixo, avaliando o comportamento de ambos.

Como pôde ser visto mediante todos os trabalhos citados, a literatura conta com vários estudos relacionados ao comportamento fluidodinâmico de escoamentos do tipo gás-sólido em leitos fluidizados circulantes. Além disso, o processo de gaseificação de biomassa também tem sido amplamente estudado, principalmente nos últimos anos. Aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo estão presentes em várias pesquisas, no entanto, os trabalhos que relacionam a influência de diferentes modelos de arraste em variáveis como a fração volumétrica de sólidos considerando a presença de reações químicas de gaseificação ainda são escassos.

Portanto, é de suma importância que novas tecnologias para gaseificação de biomassa com aplicação de técnicas de CFD sejam constantemente estudadas. Desta forma, este projeto pretende contribuir para o desenvolvimento do tema de forma a avaliar como um modelo de arraste pode influenciar na cinética de um processo de gaseificação de biomassa. Deste modo, em um contexto mais amplo, o projeto pretende colaborar para que possa haver um melhor aproveitamento de recursos renováveis, causando menores impactos ambientais.

CAPÍTULO 3. MODELAGEM MATEMÁTICA

Durante o processo de gaseificação de biomassa, as partículas sólidas são submetidas a uma série fenômenos químicos e físicos, tais como secagem, pirólise, combustão e gaseificação. A modelagem matemática e computacional deste processo, considerando um leito fluidizado circulante, é uma tarefa bastante complexa, devido à grande quantidade de variáveis, equações e modelos teóricos envolvidos (CORELLA; TOLEDO; MOLINA, 2007; MIAO et al., 2013). Em razão disso, a grande maioria dos modelos propostos na literatura trata cada uma dessas etapas de forma independente, de modo a simplificar a modelagem do processo de gaseificação.

Neste trabalho, foram realizadas várias simulações, cuja complexidade dos modelos foi aumentando de forma gradual. Os modelos considerados foram bifásicos (gás e sólidos), com uma abordagem Euleriana-Euleriana tanto para a fase sólida, quanto para a fase gás. Neste tipo de abordagem, as duas fases são consideradas contínuas e se interpenetram. Modelos bi e tridimensionais foram utilizados para a simulação da hidrodinâmica do processo, no entanto, para modelagem das reações químicas, apenas modelos bidimensionais foram considerados. Todas as simulações realizadas neste trabalho foram transientes, supondo-se, também, regime turbulento e escoamento incompressível.

Este capítulo traz, em detalhes, toda a modelagem matemática utilizada durante o desenvolvimento desta tese, desde as equações de transporte das fases sólida e gás com todos os modelos de arraste considerados até a modelagem de todas as reações que ocorrem em cada uma das etapas do processo de gaseificação.

3.1. Equações de transporte

De modo a obter o balanço de massa no sistema, foi utilizada a equação da continuidade para cada uma das fases, conforme indicam as Equações 3.1 e 3.2 (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012):

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g) = S_{gs} \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s) = S_{sg} \quad (3.2)$$

nas quais ε , ρ e \mathbf{v} representam, respectivamente, a fração volumétrica, a massa específica e o vetor velocidade de cada uma das fases. Os termos à direita das equações constituem os termos fonte de geração ou consumo para as fases sólida e gás,

representando o fenômeno que ocorre durante as reações químicas consideradas (LIU, 2014), que serão apresentadas mais adiante neste capítulo. É importante ressaltar que estes termos, durante a realização de simulações para determinar o comportamento hidrodinâmico do processo, são nulos, pois não é considerada a ocorrência de reações químicas neste caso.

Neste trabalho, algumas simulações foram realizadas considerando-se uma geometria bidimensional axissimétrica. De acordo com o manual do *software* FLUENT® (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012), a equação da continuidade, para este caso específico, é dada por:

$$\frac{\partial \rho_{g,s}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho_{g,s} v_x) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho_{g,s} v_r) + \frac{\rho_{g,s} v_r}{r} = S_{gs} \quad (3.3)$$

onde x é a coordenada axial, r representa a coordenada radial e v_x e v_r são consideradas as velocidades axial e radial, respectivamente. Lembrando que, o termo S_{gs} é nulo para os casos nos quais não há reações químicas.

No que concerne às equações de quantidade de movimento, é importante ressaltar que foram acopladas ao modelo de turbulência $k - \varepsilon$. Estas equações foram modeladas da seguinte forma:

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g \mathbf{v}_g) = -\varepsilon_g \nabla p + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_g + \boldsymbol{\tau}'_g) + \varepsilon_g \rho_g \mathbf{g} + S_{gs} \mathbf{v}_s + \beta (\mathbf{v}_p - \mathbf{v}_g) \quad (3.4)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s \mathbf{v}_s) = -\varepsilon_s \nabla p - \nabla p_s + \nabla \cdot (\boldsymbol{\tau}_s + \boldsymbol{\tau}'_s) + \varepsilon_s \rho_s \mathbf{g} + S_{sg} \mathbf{v}_s + \beta (\mathbf{v}_g - \mathbf{v}_p) \quad (3.5)$$

nas quais, $\boldsymbol{\tau}$ representa o tensor tensão nas fases sólida e gás, p é a pressão do sistema, \mathbf{g} é a aceleração da gravidade e β representa o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases. As equações que regem os cálculos relacionados a este coeficiente serão definidas mais adiante, quando serão tratadas as equações de fechamento para cada um dos modelos de arraste estudados nesta tese. Já o termo p_s é adicionado à equação para que sejam consideradas flutuações de velocidade devido à choques entre partículas, de acordo com a teoria cinética do escoamento granular, também explicada em mais detalhes ao longo deste capítulo.

Nos casos em que há transferência de energia entre as fases nas simulações, as equações responsáveis pela modelagem deste fenômeno são dadas por:

$$\frac{\partial \varepsilon_g \rho_g H_{eg}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_g \rho_g \mathbf{v}_g H_{eg}) = \nabla \cdot \lambda_{ef,g} \nabla T_g + S_g + Q_{sg} \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s H_{es}}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \mathbf{v}_s H_{es}) = \nabla \cdot \lambda_{ef,s} \nabla T_s + S_s + Q_{gs} \quad (3.7)$$

em que H_e , λ_{ef} , T e S equivalem à entalpia específica de cada uma das fases, à condutividade térmica, temperatura e termo fonte representando a mudança de entalpia durante as reações químicas, respectivamente. A quantidade de calor transferido entre as fases é dada por Q_{sg} e Q_{gs} , onde $Q_{gs} = -Q_{sg}$. De modo a simplificar os cálculos e a simulação, não foi considerada transferência de calor por radiação em nenhum dos estudos de caso desta tese.

As reações químicas que ocorrem no gaseificador foram modeladas utilizando equações de acordo com o *Species Transport* (transporte de espécies, em português). Este tipo de modelagem está presente no *software* FLUENT® e permite calcular a conservação das espécies químicas na fase gasosa de acordo com as Equações 3.8 e 3.9 (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012):

$$\frac{\partial(\rho_g \varepsilon_g Y_{i,g})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho_g \varepsilon_g \mathbf{v}_g Y_{i,g}) = -\nabla \cdot \varepsilon_g J_{i,g} + \varepsilon_g R_{ei,g} + R_e \quad (3.8)$$

$$J_{i,g} = -\left(\rho_g D_{ti,g} + \frac{\mu^t}{Sc_t}\right) \nabla Y_{i,g} - D_{tT,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (3.9)$$

onde Y_i representa a fração mássica de cada espécie i no sistema e J_i é o fluxo de difusão de cada uma. A taxa líquida de reação ou consumo devido a reações homogêneas de cada espécie i é dada por $R_{ei,g}$, enquanto R_e representa o mesmo, porém referente a reações heterogêneas. O coeficiente de difusão mássica de cada espécie é dado por D_{ti} e $D_{tT,i}$ é o coeficiente de difusão térmica de cada espécie i . O número de Schmidt turbulento também é levado em consideração no cálculo de difusão das espécies, sendo representado por Sc_t .

3.2. Equações de fechamento

Como já visto anteriormente, para que haja o fechamento das equações referentes à transferência de quantidade de movimento em cada uma das fases (Equações 3.4 e 3.5), são necessárias novas equações para determinar o valor de variáveis até então não definidas. Iniciando-se pelos tensores tensão $\boldsymbol{\tau}$, estes são responsáveis por modelar a distribuição de tensões e outros esforços internos em meios contínuos (LOPES et al., 2012). Estes tensores são modelados de acordo com as seguintes equações (LIU, 2014):

$$\boldsymbol{\tau}_{g,s} = \varepsilon_{s,g} \mu_{g,s} (\nabla \mathbf{v}_{g,s} + \nabla \mathbf{v}_{g,s}^T) + \varepsilon_{s,g} \left(\xi_{g,s} - \frac{2}{3} \mu_{g,s}\right) \boldsymbol{\delta} \quad (3.10)$$

$$\boldsymbol{\tau}'_{g,s} = \varepsilon_{s,g} \mu_{g,s}^t (\nabla \mathbf{v}_{g,s} + \nabla \mathbf{v}_{g,s}^T) - \frac{2}{3} (\varepsilon_{s,g} \rho_{g,s} \kappa_{g,s} + \varepsilon_{s,g} \mu_{g,s}^t \nabla \cdot \mathbf{v}_{g,s}) \boldsymbol{\delta} \quad (3.11)$$

nas quais, $\boldsymbol{\tau}$ e $\boldsymbol{\tau}'$ representam, respectivamente, os tensores tensão laminar e de Reynolds. A viscosidade laminar é dada por μ , ζ é a viscosidade bulk e $\boldsymbol{\delta}$ é um tensor unitário.

3.2.1. Modelos de turbulência

De acordo com Joshi (2001), existem três abordagens principais para o estudo da turbulência em CFD, sendo elas: Simulação Numérica Direta (DNS), Simulação de Grande Vórtice (LES) e Navier-Stokes com Média de Reynolds (RANS). Neste estudo, foi escolhido o modelo $\kappa - \epsilon$, derivado da abordagem RANS.

O modelo em questão tem um caráter semi-empírico, pois supõe que existe uma turbulência isotrópica, ou seja, independente da direção do escoamento. É um modelo bastante robusto, possuindo estabilidade numérica satisfatória. É uma das abordagens mais utilizadas para modelagem de turbulência em escoamentos (VERGEL, 2013).

Considerando este modelo, a viscosidade turbulenta pode ser calculada mediante a seguinte equação, para cada fase:

$$\mu_{g,s}^t = \rho_{g,s} C_\mu \frac{\kappa_{g,s}^2}{\epsilon_{g,s}} \quad (3.12)$$

em que κ e ϵ representam a energia cinética turbulenta e a taxa de dissipação desta energia, respectivamente. C_μ é uma constante obtida mediante realização de experimentos. Neste trabalho, seu valor foi considerado igual a 0,09 (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012; LIU, 2014).

Os valores da energia cinética turbulenta e sua taxa de dissipação advêm da solução de equações diferenciais de transporte, conforme as equações adiante (LIU, 2014):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_i \rho_i \kappa_i) + \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \kappa_i) = \nabla \cdot \left(\epsilon_i \frac{\mu_i^t}{\sigma_\kappa} \nabla \kappa_i \right) + (\epsilon_i G_{\kappa,i} - \epsilon_i \rho_i \epsilon_i) + \beta (C_{ij} \kappa_j - C_{ji} \kappa_i) - \beta (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \frac{\mu_j^t}{\epsilon_j \sigma_j} \nabla \epsilon_j + \beta (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \frac{\mu_i^t}{\epsilon_i \sigma_i} \nabla \epsilon_i \end{aligned} \quad (3.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon_i \rho_i \epsilon_i) + \nabla \cdot (\epsilon_i \rho_i \mathbf{v}_i \epsilon_i) = \nabla \cdot \left(\epsilon_i \frac{\mu_i^t}{\sigma_\epsilon} \nabla \epsilon_i \right) + \frac{\epsilon_i}{\kappa_i} \left[C_{1\epsilon} \rho_i G_{\kappa,i} - C_{2\epsilon} \rho_i \epsilon_i \epsilon_i + C_{3\epsilon} \left(\beta (C_{ji} \kappa_j - C_{ij} \kappa_i) - \beta (C_{ji} \kappa_j - C_{ij} \kappa_i) \frac{\mu_j^t}{\epsilon_j \sigma_j} \nabla \epsilon_j + \beta (\mathbf{v}_j - \mathbf{v}_i) \cdot \frac{\mu_i^t}{\epsilon_i \sigma_i} \nabla \epsilon_i \right) \right] \end{aligned} \quad (3.14)$$

em que os índices i e j representam as fases gás e sólida, sendo $i, j = g, s$ e $j, i = s, g$. Os símbolos σ_κ , σ_ϵ , $C_{1\epsilon}$, $C_{2\epsilon}$, $C_{3\epsilon}$ e C_{ji} são constantes, cujos valores são 1,0; 1,3; 1,44; 1,92; 1,2 e 2; respectivamente. A geração de energia cinética turbulenta pode ser considerada igual a G_κ . As letras gregas σ_κ e σ_ϵ representam o valor do número de Prandtl para κ e ϵ .

Os parâmetros restantes das equações são definidos como se segue (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012; LIU, 2014):

$$G_{\kappa,i} = \mu_i^t S^2 \quad (3.15)$$

$$S = \sqrt{S_{ml}} \quad (3.16)$$

$$S_{ml} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial v_m}{\partial v_l} + \frac{\partial v_l}{\partial v_m} \right) \quad (3.17)$$

$$C_{ij} = 2 \left(\frac{\eta_{ji}}{1+\eta_{ji}} \right) \quad (3.18)$$

$$\eta_{ji} = \frac{\tau_{ji}^t}{\tau_{ji}^F} \quad (3.19)$$

$$\tau_{ji}^t = \frac{\tau_i^t}{\sqrt{1+C_\beta \zeta^2}} \quad (3.20)$$

$$\tau_{ji}^F = \frac{\varepsilon_j \rho_j}{\beta} \left(\frac{\rho_j}{\rho_i} + C_V \right) \quad (3.21)$$

$$\zeta = \frac{|v_{ij}| \tau_i^t}{L_i^t} \quad (3.22)$$

$$\tau_i^t = \frac{3}{2} C_\mu \frac{\kappa_i}{\varepsilon_i} \quad (3.23)$$

$$L_i^t = \sqrt{\frac{3}{2}} C_\mu \frac{\kappa_i^{\frac{3}{2}}}{\varepsilon_i} \quad (3.24)$$

$$C_\beta = 1,8 - 1,35 \cos^2 \theta \quad (3.25)$$

É importante mencionar que todas as equações referentes ao modelo de turbulência $\kappa - \epsilon$ são aplicadas para ambas as fases: sólida e gás.

3.2.2. Modelos de arraste

Um dos focos principais deste trabalho está relacionado com o termo de transferência de quantidade de movimento entre as fases, descrito por β . Vários modelos de arraste foram testados em diferentes sistemas de leito fluidizado circulante, na tentativa de obter o melhor modelo possível para a hidrodinâmica de cada caso.

Existem diversos modelos de arraste disponíveis na literatura, os quais podem ser divididos em duas categorias principais: os convencionais e aqueles que utilizam a abordagem EMMS (*Energy Minimization Multiscale*, em inglês). Os modelos utilizados neste trabalho serão discutidos nas próximas seções.

3.2.2.1. Modelos de arraste convencionais

Esta categoria inclui modelos de arraste como os desenvolvidos por Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992); Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985); e também Syamlal e O'Brien (1989). Em geral, este tipo de modelagem é derivado de dados obtidos experimentalmente de velocidades terminais de partículas e quedas de pressão (LIU, 2014). No que concerne o modelo de Gidaspow, o cálculo do coeficiente de arraste depende de uma condição de porosidade, mediante uma combinação entre a equação de Ergun e o modelo de Wen e Yu, como mostrado nas Equações 3.26 (Ergun) e 3.27 (Wen e Yu):

Para $\varepsilon_g \leq 0,8$

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{\varepsilon_s \rho_g |v_g - v_s|}{d_p} \quad (3.26)$$

Para $\varepsilon_g > 0,8$

$$\beta_{Wen \& Yu} = \frac{3}{4} C_d \frac{\varepsilon_s \varepsilon_g \rho_g |v_g - v_s| \varepsilon_g^{-2,65}}{d_p} \quad (3.27)$$

$$C_d = \frac{24}{\varepsilon_g Re_p} [1 + 0,15(\varepsilon_g Re_p)^{0,687}] \quad (3.28)$$

$$Re_p = \frac{\rho_g |v_g - v_s| d_p}{\mu_g} \quad (3.29)$$

Também uma combinação do modelo de Wen e Yu e da equação de Ergun, o modelo de arraste de Huilin-Gidaspow propõe uma transição mais suave entre as duas condições de porosidade, ocorrendo quando a fração volumétrica de sólidos é menor que 0,2. As Equações 3.30 e 3.31 mostram a função de transição e o fator de correlação, respectivamente (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012).

$$\beta = \varphi \beta_{Ergun} + (1 - \varphi) \beta_{Wen \text{ and } Yu} \quad (3.30)$$

$$\varphi = 0,5 + \frac{\arctan(262,5(\varepsilon_s - 0,2))}{\pi} \quad (3.31)$$

O modelo de Gibilaro está descrito pela Equação 3.32, enquanto o cálculo do número de Reynolds para este caso pode ser observado na Equação 3.33 (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012):

$$\beta = \left(\frac{18}{Re} + 0,33 \right) \frac{\rho_g |v_s - v_g|}{d_p} \varepsilon_s \varepsilon_g^{-1,8} \quad (3.32)$$

$$Re = \frac{\varepsilon_g \rho_g d_p |v_s - v_g|}{\mu_g} \quad (3.33)$$

Já no modelo de Syamlal-O'Brien, o coeficiente de transferência de quantidade de movimento entre as fases é dado pela Equação 3.34, enquanto o cálculo do coeficiente de arraste pode ser realizado por meio da resolução da Equação 3.35 (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012).

$$\beta = \frac{C_D Re_s \varepsilon_g}{24 v_{r,s}^2} \quad (3.34)$$

$$C_d = \left(0,63 + \frac{4,8}{\sqrt{Re_s/v_{r,s}}} \right)^2 \quad (3.35)$$

3.2.2.2. Modelos de minimização de energia multi-escala (EMMS)

As condições de escoamento de fluidos e partículas em um reator de gaseificação de leito fluidizado circulante pode levar à formação de *clusters*, os quais coexistem e, ao mesmo tempo, interagem com o fluido na fase diluída. Os modelos convencionais de arraste, como os descritos na seção anterior, por exemplo, não tem a capacidade de representar este aspecto de forma precisa. Portanto, é necessário valer-se de modelos que levem em consideração este efeito de formação de clusters, o que caracterizará a heterogeneidade deste tipo de escoamento de forma mais acurada (SHAH et al., 2011).

Na abordagem de modelos de minimização de energia multi-escala (EMMS, sigla para *Energy Minimization Multiscale*, do inglês), o escoamento pode ser dividido em duas partes principais: fase densa (*clusters*) e fase diluída. Neste caso, todos os balanços de massa e momento são aplicados para as duas fases, de forma separada. De modo a obter a energia necessária para suspensão e transporte nessa nova condição, é necessário apenas somar e minimizar as energias das fases individuais, bem como a energia presente na interface entre as duas fases. Após este processo de minimização, um conjunto de parâmetros estruturais do escoamento, como diâmetro e fração volumétrica dos *clusters*, além de velocidades de deslizamento, podem ser utilizados, posteriormente, para o desenvolvimento de uma força de arraste que possa determinar o perfil do escoamento gás-sólido (SHAH et al., 2011; LIU, 2014).

Yang et al. (2004) desenvolveu uma correlação para o arraste de partículas baseando-se em algumas simplificações, de acordo com a abordagem EMMS. Os autores adicionaram ao modelo uma nova variável, a aceleração média de partículas por

volume de controle. O referido modelo pode ser verificado através das Equações 3.36 e 3.37.

Para $\varepsilon_g < 0,74$

$$\beta_{Ergun} = 150 \frac{\varepsilon_s^2 \mu_g}{\varepsilon_g d_p^2} + 1,75 \frac{\rho_g \varepsilon_s |v_g - v_s|}{d_p} \quad (3.36)$$

Para $\varepsilon_g \geq 0,74$

$$\beta_{Wen \& Yu} = \frac{3}{4} C_d \frac{\rho_g \varepsilon_s \varepsilon_g |v_g - v_s|}{d_p} \omega \quad (3.37)$$

O fator de correção ω depende de características intrínsecas a cada escoamento, em especial sua porosidade local. Shah et al. (2011) desenvolveram um conjunto de equações para este fator de correção para escoamentos de altos e baixos fluxos mássicos de entrada de sólidos. Além disso, Liu (2014) também utilizou da mesma abordagem e obteve fatores de correção específicos para o escoamento descrito no trabalho experimental de Pärssinen e Zhu (2001). As Equações 3.38, 3.39, 3.40, 3.41, 3.42, 3.43 e 3.44 mostram os valores adotados por Shah et al. (2011) para o fator de correção, juntamente com o intervalo de porosidade a ser considerado nos cálculos, e as Equações 3.45, 3.46 e 3.47, mostram os valores obtidos por Liu (2014), referentes ao trabalho de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b).

Para fluxo mássico de sólidos baixo:

$$\omega(\varepsilon_g) = -3,867 \times 10^{-2} + \frac{6,893 \times 10^{-3}}{4(\varepsilon_g - 0,761)^2 + 1,599 \times 10^{-3}} \quad (0,78 < \varepsilon_g \leq 0,86) \quad (3.38)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -1,283 \times 10^{-2} + \frac{3,940 \times 10^{-3}}{4(\varepsilon_g - 0,782)^2 + 2,711 \times 10^{-3}} \quad (0,86 < \varepsilon_g \leq 0,97) \quad (3.39)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -31,859 + 32,859 \varepsilon_g \quad (\varepsilon_g > 0,97) \quad (3.40)$$

Para fluxo mássico de sólidos alto:

$$\omega(\varepsilon_g) = -3,379 \times 10^{-2} + \frac{2,187 \times 10^{-3}}{4(\varepsilon_g - 0,744)^2 + 8,909 \times 10^{-4}} \quad (0,748 < \varepsilon_g \leq 0,83) \quad (3.41)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -1,186 \times 10^{-2} + \frac{1,327 \times 10^{-3}}{4(\varepsilon_g - 0,7510)^2 + 9,252 \times 10^{-4}} \quad (0,83 < \varepsilon_g \leq 0,86) \quad (3.42)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -6,223 \times 10^{-3} + \frac{1,023 \times 10^{-3}}{4(\varepsilon_g - 0,752)^2 + 8,151 \times 10^{-4}} \quad (0,86 < \varepsilon_g \leq 0,94) \quad (3.43)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -15,650 + 16,650 \varepsilon_g \quad (\varepsilon_g > 0,94) \quad (3.44)$$

Para os dados experimentais do escoamento gás-sólidos do trabalho de Pärssinen e Zhu (2001):

$$\omega(\varepsilon_g) = -0,5760 + \frac{0,0214}{4(\varepsilon_g - 0,7463)^2 + 0,0044} \quad (0,74 \leq \varepsilon_g < 0,82) \quad (3.45)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -0,0101 + \frac{0,0038}{4(\varepsilon_g - 0,7789)^2 + 0,0040} \quad (0,82 < \varepsilon_g \leq 0,97) \quad (3.46)$$

$$\omega(\varepsilon_g) = -31,8295 + 32,8295\varepsilon_g \quad (\varepsilon_g > 0,97) \quad (3.47)$$

Outra importante variável de fechamento para o cálculo da hidrodinâmica em leitos fluidizados circulantes do tipo gás-sólido, utilizando a abordagem Euleriana-Euleriana, é a pressão de sólidos. Esta variável é incluída nos cálculos de acordo com a teoria cinética do escoamento granular, que será abordada na próxima seção.

3.2.3. Teoria cinética do escoamento granular (KTGF)

Na teoria cinética do escoamento granular (KTGF, sigla para *Kinetic Theory of Granular Flow*, em inglês), o conceito de temperatura granular para cálculo de pressão de sólidos é aplicado. Esta nova variável está relacionada com a energia cinética quando ocorre flutuação de partículas (LOPES, 2012). De acordo com a KTGF, através da equação de flutuação de energia das partículas, variáveis de interesse podem ser estimadas, como a viscosidade bulk da fase sólida, por exemplo (LIU, 2014). A Equação 3.48 mostra o cálculo para pressão de sólidos de acordo com a teoria cinética do escoamento granular:

$$p_s = \varepsilon_s \rho_s \Theta [1 + 2(1 + e)g_0 \varepsilon_s] \quad (3.48)$$

em que Θ representa a temperatura granular, e é o coeficiente de restituição relacionado a colisões entre partículas e g_0 é uma função de distribuição radial, cuja função é coordenar a transição entre a condição em que ainda é possível minimizar os espaços entre as partículas e aquela em que não há mais espaço entre as mesmas (LOPES, 2012).

A chamada equação de flutuação de energia, nada mais é que um balanço de energia na qual considera-se a energia gerada pela tensão de cisalhamento e a dissipada devido a colisões inelásticas entre as mesmas (GIDASPOW, 2004). Algumas equações importantes para a solução deste balanço são mostradas a seguir (LIU, 2014).

Cálculo da viscosidade bulk da fase sólida:

$$\xi_s = \frac{4}{3} \varepsilon_s \rho_s (1 + e) \left(\frac{\Theta}{\pi}\right)^{1/2} \quad (3.49)$$

Cálculo da viscosidade de cisalhamento da fase sólida:

$$\mu_s = \frac{2\mu_{dil}}{(1+e)g_0} \left[1 + \frac{4}{5} (1 + e) g_0 \varepsilon_s \right]^2 + \frac{4}{5} \varepsilon_s^2 \rho_s d_p g_0 (1 + e) \left(\frac{\Theta}{\pi}\right)^{1/2} \quad (3.50)$$

$$\mu_{dil} = \frac{5\sqrt{\pi} \rho_s d_p \Theta^2}{96} \quad (3.51)$$

Equação de flutuação de energia:

$$\frac{3}{2} \left[\frac{\partial \varepsilon_s \rho_s \Theta}{\partial t} + \nabla \cdot (\varepsilon_s \rho_s \Theta \mathbf{v}) \right] = (\tau_s): \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial r} - \nabla \cdot \mathbf{q} - \gamma - 3\beta\Theta \quad (3.52)$$

em que q e γ representam o fluxo de flutuação de energia e a taxa de dissipação de colisões, respectivamente.

A função de distribuição radial pode ser formulada de várias maneiras. Neste trabalho, para a maioria das simulações, foi utilizada a função de distribuição radial, conforme indica a Equação 3.53. (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012). No entanto, para o caso do cálculo do perfil de escoamento referente aos dados experimentais de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b), a Equação 3.54 foi utilizada para o cálculo da referida função, conforme proposto por Liu (2014).

$$g_0 = \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,máx}} \right)^{\frac{1}{3}} \right]^{-1} \quad (3.53)$$

$$g_0 = \frac{3}{5} \left[1 - \left(\frac{\varepsilon_s}{\varepsilon_{s,máx}} \right)^{\frac{1}{2}} \right]^{-1} \quad (3.54)$$

Todas as equações e modelos vistos até agora tratam, principalmente, de aspectos referentes à hidrodinâmica do processo de gaseificação de biomassa. A partir deste ponto, serão apresentados todos os modelos utilizados nesta tese referentes à modelagem cinética do processo.

3.6. Modelagem de reações químicas

A modelagem e simulação do processo de gaseificação de biomassa é uma tarefa bastante complexa, principalmente devido à grande quantidade de variáveis e reações químicas envolvidas. Por esta razão, de modo a facilitar esta modelagem, algumas hipóteses e simplificações foram consideradas. Estas serão explicitadas durante a descrição das etapas do processo.

3.6.1. Pirólise

A pirólise é um processo de degradação térmica de matéria-prima (no caso, a biomassa), na ausência de ar ou oxigênio, que dá origem a produtos sólidos, líquidos e gasosos (CO₂, CO, H₂, H₂O, CH₄, C₂H₄, entre outros). A modelagem matemática e computacional do processo de pirólise sempre foi amplamente estudada por vários autores (BASU, 2010), porém todos os modelos desenvolvidos possuem certas limitações.

Algumas das variáveis mais importantes para a modelagem da pirólise de biomassa são os conteúdos das análises elementar e imediata do combustível. Estes valores podem ser observados nas Tabelas 1 e 2, respectivamente (GARCÍA-IBAÑEZ; CABANILLAS; SÁNCHEZ, 2004). Resíduos de óleo de oliva foram escolhidos para serem estudados no presente trabalho, referente à aspectos cinéticos do processo de gaseificação de biomassa.

Tabela 1 – Análise elementar de resíduos de óleo de oliva.

Análise elementar (base seca e sem cinzas, m/m%)	
C	52,7
H	7,2
N	1,6
S	0,07
Cl	0,37
O	38,1

Fonte: García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004).

Tabela 2 – Análise imediata de resíduos de óleo de oliva.

Análise imediata (base seca, m/m%)	
Matéria volátil	74,4
Carbono fixo	17,1
Cinzas	8,5

Fonte: García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004).

Primeiramente, obteve-se a fórmula molecular da biomassa. Isto tornou-se possível a partir do cálculo da porcentagem mássica dos elementos presentes na substância sobre a massa molar de cada um. Após este cálculo, dividiu-se cada um dos valores obtidos pelo valor obtido para o carbono, escolhido como padrão. Foram considerados apenas os elementos carbono, hidrogênio e oxigênio para a obtenção da fórmula, visto que os outros elementos aparecem em quantidades menores e podem ser desprezados. Mediante análise das Tabelas 1 e 2, é possível identificar a fórmula molecular da biomassa. Tomando como base o carbono, identificou-se a biomassa pela fórmula CH_aO_b , na qual os índices a e b foram calculados de acordo com as Equações 3.55 e 3.56 (DI BLASI, 2004; BOATENG; MTUI, 2012; ION; POPESCU; ROLEA, 2013):

$$a = \frac{H \times M_C}{C \times M_H} \quad (3.55)$$

$$b = \frac{O \times M_C}{C \times M_O} \quad (3.56)$$

em que C , H e O representam as porcentagens mássicas dos elementos carbono, hidrogênio e oxigênio, respectivamente, obtidas pela análise elementar da biomassa. M_i é a massa molar, em unidades do SI, de cada um dos elementos presentes na biomassa e considerados nestes cálculos. É importante ressaltar que, como o carbono está sendo utilizado como base para os cálculos, seu índice na fórmula molecular da biomassa corresponde a 1.

Para este trabalho, foi utilizado um modelo de um passo para obtenção de todos os produtos gerados na pirólise de biomassa. Como simplificação, não foi considerada a formação de alcatrão, visto que sua inserção no modelo aumentaria sua complexidade de forma bastante significativa (LIU, 2014). Deste modo, a reação química responsável pela modelagem da pirólise foi definida conforme a Equação 3.57.



Também foi considerado que a biomassa entrou em base seca (sem umidade). Aplicou-se a hipótese de que todos os finos de carvão são formados apenas por carbono (REED; LEVIE, 1983), bem como as cinzas. Isto significa assumir que o valor obtido para a quantidade de carbono fixo através da análise elementar da biomassa é igual à formação de finos de carbono após o processo de pirólise.

Para determinar os coeficientes estequiométricos da reação dos voláteis, foi realizada uma modelagem por meio de balanços molares atômicos de cada elemento,

conforme desenvolvido por Boateng e Mtui (2012). Logo, o sistema de equações referentes a estes balanços foi desenvolvido como mostram as Equações 3.58a - 3.58f.

$$\text{Balanço para o carbono: } 0,171 + 0,085 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + 2\alpha_4 = 1 \quad (3.58a)$$

$$\text{Balanço para o hidrogênio: } 4\alpha_3 + 4\alpha_4 + 2\alpha_5 + 2\alpha_6 = 1,639 \quad (3.58b)$$

$$\text{Balanço para o oxigênio: } \alpha_1 + 2\alpha_2 + \alpha_5 = 0,5422 \quad (3.58c)$$

$$\left(\frac{1,3}{29}\right) \times 44\alpha_2 = 1\alpha_6 \quad (3.58d)$$

$$\left(\frac{16,20}{29}\right) \times 44\alpha_2 = 16\alpha_3 \quad (3.58e)$$

$$\left(\frac{46,20}{29}\right) \times 44\alpha_2 = 28\alpha_1 \quad (3.58f)$$

Os valores experimentais referentes à pirólise de resíduos de óleo de oliva foram obtidos do trabalho de Zabaniotou et al. (2000), necessários para fechar o balanço por meio das Equações de 3.58d a 3.58f. Utilizou-se o *software* SciLab para resolução do sistema de equações lineares e os seguintes resultados foram obtidos: $\alpha_1 = 0,2597$; $\alpha_2 = 0,1037$; $\alpha_3 = 0,1594$; $\alpha_4 = 0,1106$; $\alpha_5 = 0,0749$; e $\alpha_6 = 0,2046$. A partir destes resultados, foi possível modelar o processo de pirólise. Sua taxa de reação foi modelada através da equação de Arrhenius (LIU, 2014), representada pelas equações 3.59 e 3.60, a qual foi programada através de uma UDF (*User Defined Function*) e inserida no FLUENT®:

$$r_p = k_p C_{biomassa} \quad (3.59)$$

$$k_p = fAT^n \exp\left(-\frac{E_a}{R_g T}\right) \quad (3.60)$$

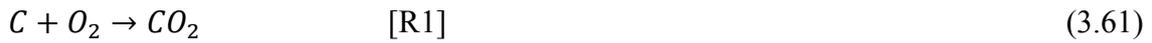
onde o valor do fator pré-exponencial, do fator de correção f , do índice n da temperatura e da energia de ativação foram, respectivamente, iguais a $99,0 \text{ s}^{-1}$; 1510; -1,2; e 11,14 kJ/mol.

3.6.2. Reações Heterogêneas

As reações heterogêneas tratadas nesta seção se referem ao processo de combustão e outras reações dos finos de carbono com os gases resultantes da pirólise e com o oxigênio do ar. O modo como estas partículas serão craqueadas, a difusividade dos reagentes, o caráter turbulento do escoamento e as interações entre as reações estão entre os fatores que podem influenciar esta etapa do processo de gaseificação de biomassa (WANG; JIN; ZHONG, 2009). De forma a modelar essas reações da melhor

maneira possível, tanto efeitos cinéticos quanto de difusividade mássica são considerados na simulação das taxas de reação (YU et al., 2007; WANG; JIN; ZHONG, 2009; ARMSTRONG; GU; LUO, 2011; GERBER; BEHRENDT; OEVERMANN, 2010; LIU, 2014).

As reações do *char* com os gases dentro do reator consideradas neste trabalho são apresentadas nas equações 3.61 a 3.64 (GERBER; BEHRENDT; OEVERMANN, 2010; LIU, 2014):



Um esquema global que considerou tanto a parte cinética quanto a difusividade mássica foi aplicado conforme as Equações 3.65 a 3.70. Este mesmo esquema foi aplicado de maneira semelhante em Wang, Jin e Zhong (2009), Gerber, Behrendt e Oevermann (2010) e Liu (2014):

$$r_h = \frac{6V_c k_h}{d_p} p_i \quad (3.65)$$

$$k_h = \frac{1}{\left(\frac{1}{k_c}\right) + \left(\frac{1}{k_d}\right)} \quad (3.66)$$

$$k_c = AT_p^n \exp\left(\frac{E}{R_g T_p}\right) \quad (3.67)$$

$$k_d = \frac{Sh D_{gs} M_c}{R_e T_p d_p} \quad (3.68)$$

$$Sh = 2 + 0,6Re^{1/2} Sc^{1/3} \quad (3.69)$$

$$D_{gs} = \frac{8,34 \times 10^{-6} T^{1,75}}{p} \quad (3.70)$$

onde V_c e M_c representam o volume e a massa molar do *char*, respectivamente. Os parâmetros utilizados para modelagem das reações heterogêneas encontram-se na Tabela 3.

Tabela 3 – Parâmetros cinéticos utilizados para reações heterogêneas.

Reação	Fator pré-exponencial (A)	Energia de ativação (E, em K)
R1	$1,0 \times 10^3$	-11200
R2	3,42	-15600
R3	3,42	-15600
R4	$3,42 \times 10^{-3}$	-15600

Fonte: Gerber, Behrendt e Oevermann (2010).

É importante ressaltar que todas as reações heterogêneas foram modeladas via UDF, pois o esquema utilizado não se encontrava disponível no *software* FLUENT®.

3.6.3. Reações Homogêneas

As reações homogêneas consideradas neste trabalho podem ser observadas através das Equações 3.71 a 3.74. A reação de *shift* de água-gás não foi considerada neste caso, pois, segundo Liu (2014), a cinética da reação foi obtida mediante testes catalíticos e sua modelagem é complexa. Os parâmetros cinéticos referentes a estas Equações estão presentes na Tabela 4, e todas foram simuladas de acordo com a equação de Arrhenius.



Tabela 4 – Parâmetros cinéticos utilizados para reações homogêneas.

Reação	Fator pré-exponencial (A)	Energia de ativação (kJ/mol)
R5	$2,32 \times 10^{12} \text{ (kmol/m}^3\text{)}^{-0,75}\text{s}^{-1}$	167
R6	$1,08 \times 10^{13} \text{ (kmol/m}^3\text{)}^{-1}\text{s}^{-1}$	125
R7	$5,16 \times 10^{13} \text{ (kmol/m}^3\text{)}^{-1}\text{s}^{-1}\text{K}$	130
R8	$1,0 \times 10^{12} \text{ (kmol/m}^3\text{)}^{-1}\text{s}^{-1}$	173

Fonte: Kaushal, Pröll e Hofbauer (2007), Gómez-Barea e Leckner (2010) e Liu (2014).

De acordo com Rhodes, Hutchings e Ward (1995) e Gorte e Zhao (2005), o papel da reação de deslocamento gás-água não é muito claro na modelagem do processo de gaseificação, pois a formulação do modelo para esta reação é baseada em reações catalíticas. Logo, e também por sua complexidade de modelagem e programação, a reação de deslocamento gás-água não foi considerada nesta tese.

CAPÍTULO 4. SIMULAÇÃO NUMÉRICA CFD

A solução numérica dos modelos matemáticos propostos para este trabalho foi obtida mediante utilização de métodos computacionais. Ferziger e Perić (2002) descrevem os itens necessários para obtenção de um método de solução numérica, sendo eles: modelo matemático, método de discretização, sistema de coordenadas e base vetorial, malha numérica, aproximações finitas, método de resolução de sistemas lineares e, finalmente, o critério de convergência da solução.

A etapa de desenvolvimento do modelo matemático contemplou a definição de todas as equações que fizeram parte da modelagem, bem como todas as condições de contorno aplicadas. O modelo matemático dependerá das características do escoamento em questão, como turbulência e dimensões.

Em seguida, é preciso determinar um método de discretização adequado para solucionar as equações do problema. Neste momento, então, é escolhido um método que aproxima as equações diferenciais, previamente definidas na modelagem matemática, a um sistema de equações algébricas, para variáveis em diferentes pontos de espaço e tempo. Neste trabalho, o Método dos Volumes Finitos (MVF) foi aplicado como método de discretização das equações diferenciais dos modelos. Trata-se de um método que divide o domínio computacional em volumes de controle finitos, em que as equações são aproximadas para que satisfaçam o balanço de cada propriedade dentro do mencionado volume de controle (TU; YEOH; LIU, 2008). Uma abordagem deste método está disponível no *software* FLUENT®.

Após a escolha do método de discretização, devem ser definidos o sistema de coordenadas e a base vetorial a serem utilizados para descrição das equações de conservação. O sistema pode estar em coordenadas cilíndricas (r, θ, z) , cartesianas (x, y, z) ou esféricas (r, θ, ϕ) . Logo após, é necessário a geração de uma malha numérica.

A malha numérica, segundo Justi (2016), simboliza uma representação discreta do domínio computacional (a região R onde estão inseridas as equações), dividido em subdomínios (elementos, células, entre outros). Esta etapa é de extrema importância, visto que pode influenciar na convergência e na estabilidade da solução numérica.

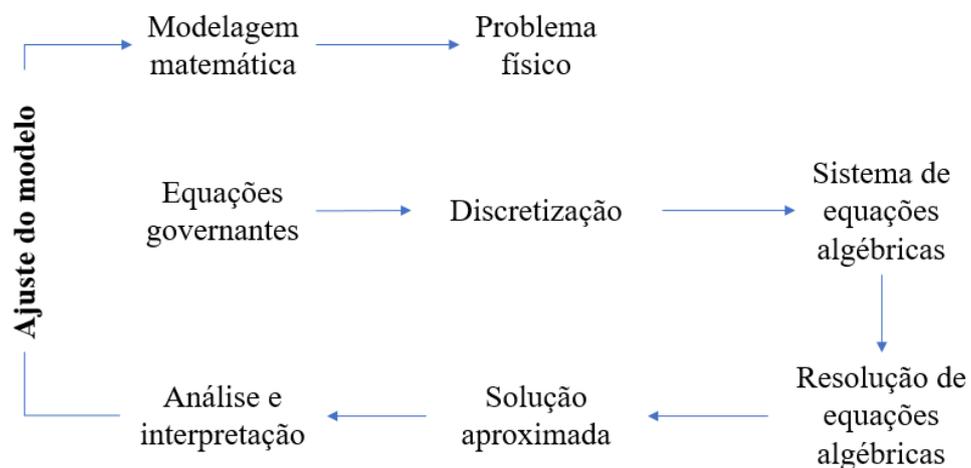
Seguidamente à escolha da malha, é necessário escolher um método cujo objetivo é a aproximação das equações diferenciais do problema a equações algébricas, ou seja,

aproximações finitas. De acordo com Fortuna (2012), nesta etapa são introduzidas as condições de contorno que, em conjunto com condições iniciais, propriedades físicas dos fluidos e parâmetros do escoamento são capazes de especificar o caso a ser solucionado.

Após a etapa descrita no parágrafo anterior, a definição de um método de resolução de sistemas lineares deve ser realizada. Estes métodos podem ser diretos ou iterativos. Maliska (2004) afirma que os métodos empregados para resolução de problemas em CFD são iterativos.

Por fim, tem-se a definição de um critério de convergência. Em problemas de CFD, cada iteração gera um resíduo, que representa o desequilíbrio local de cada equação presente em um volume de controle. Geralmente, o resíduo é usado como critério de convergência nestes casos (JUSTI, 2016). Um esquema resumindo todas as etapas de solução numérica de um problema de CFD pode ser observado na Figura 9.

Figura 9 – Etapas para obtenção de uma solução numérica em problemas de CFD.



Fonte: Adaptado de Fortuna (2012, p. 37).

Neste contexto, existe uma certa dificuldade para obtenção da solução numérica das equações de Navier-Stokes, responsáveis pela determinação dos campos de velocidade e pressão em um escoamento. Para o caso de escoamentos incompressíveis, não há uma equação explícita para o cálculo da pressão, logo, é necessário valer-se de abordagens específicas para resolver o problema: a solução acoplada ou a segregada do sistema de equações (LOPES, 2012).

O *software* FLUENT[®], utilizado para resolução dos problemas de CFD deste trabalho, utiliza um método adaptado para a correção da pressão: o método SIMPLE

(ANSYS FLUENT 14.5 – User’s Guide, 2012). É um método robusto e eficiente para aplicação em problemas de escoamentos multifásicos, logo, foi aplicado em todas as simulações realizadas nesta tese.

Finalmente, para a resolução de equações de quantidade de movimento, energia cinética turbulenta e taxa de dissipação da energia cinética turbulenta, neste trabalho, foi escolhido o método de interpolação *Upwind* de segunda ordem. Para cálculos de gradiente, fração volumétrica e termos transientes, os métodos de interpolação *Least Squares Cell Based*, *Upwind* de primeira ordem e esquema implícito de Euler também de primeira ordem foram utilizados para obtenção das soluções numéricas das simulações realizadas. Um resumo de métodos aplicados durante o procedimento numérico pode ser observado na Tabela 5.

Tabela 5 – Resumo de modelos numéricos aplicados nesta tese.

Gradiente	<i>Least Squares Cell Based</i>
Momento	<i>Second Order Upwind</i>
Fração volumétrica	<i>First Order Upwind</i>
Energia cinética turbulenta	<i>Second Order Upwind</i>
Taxa de dissipação turbulenta	<i>Second Order Upwind</i>
Energia	<i>First Order Upwind</i>
Termos transientes	Esquema implícito de Euler de primeira ordem

Fonte: Autor (2017).

Tanto as simulações em 2D quanto em 3D foram realizadas considerando-se um passo de tempo de 0,001 e 60 segundos de tempo real simulado, sendo que os últimos 30 s foram calculados mediante utilização de média temporal. Um critério de convergência de resíduos menores que 0,001 foi considerado. A fração volumétrica de sólidos e as velocidades das partículas foram as variáveis analisadas nestas simulações.

CAPÍTULO 5. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Este capítulo traz, em detalhes, as características e os resultados das simulações implementadas durante o desenvolvimento desta tese, desde a criação da geometria até a obtenção da solução numérica dos problemas em questão. Primeiramente, abordam-se os resultados referentes aos aspectos hidrodinâmicos do processo de gaseificação de biomassa. Em seguida, são tratados e analisados todos os resultados obtidos com as simulações que consideraram a cinética das reações envolvidas no processo.

5.1. Hidrodinâmica

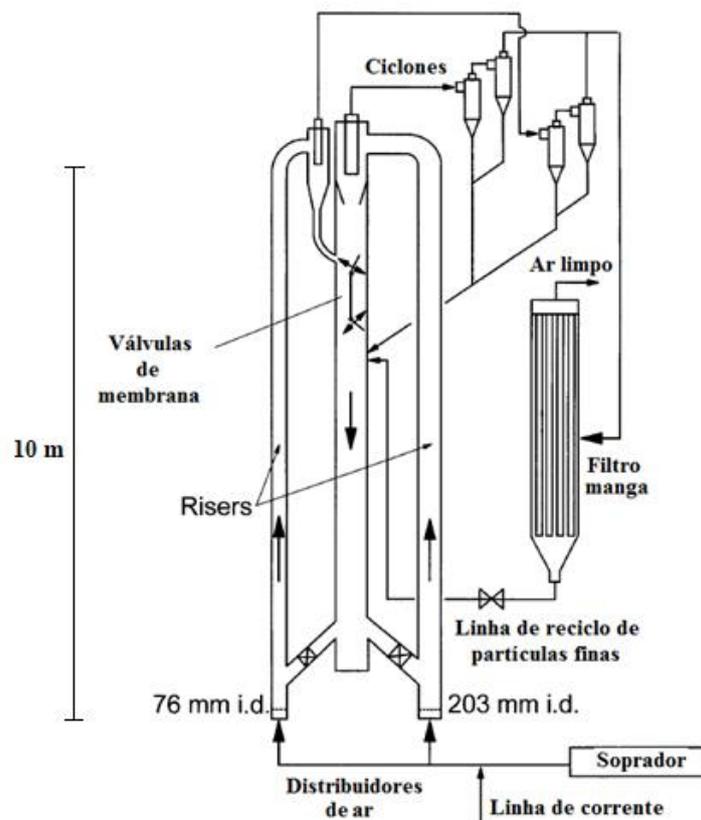
Esta seção apresenta os resultados e discussões pertinentes aos quatro primeiros estudos de caso analisados nesta tese. Em um primeiro momento, não se considerou a ocorrência de reações químicas, pois o foco deste estudo inicial era o comportamento fluidodinâmico do processo, principalmente das variáveis fração volumétrica de sólidos e velocidade da fase sólida.

Quatro estudos de caso foram escolhidos para esta etapa, cada um com diferenças e algumas semelhanças entre si, porém ambos leitos fluidizados circulantes que poderiam ser utilizados em processos de gaseificação de biomassa. O critério utilizado para a escolha dos casos foi o fluxo mássico de entrada de sólidos, considerando um fluxo mais alto (Caso 1 – 2D e Caso 2 – 3D) e um mais baixo (Caso 3 – 2D e Caso 4 – 3D). Os resultados obtidos mediante simulação dos quatro casos são comparados com a literatura e, após a comparação, é traçado um paralelo sobre o comportamento fluidodinâmico para ambos os casos, ressaltando suas semelhanças e diferenças relacionadas com as variáveis analisadas.

5.1.1. Geometria e malha

Primeiramente, com o objetivo de colaborar com os estudos relacionados à hidrodinâmica de leitos fluidizados circulantes, o trabalho de Pärssinen e Zhu (2001) foi escolhido como estudo de caso. O objetivo dos autores era estudar a velocidade da partícula e o desenvolvimento de escoamento bifásico do tipo gás-sólido (ar e partículas de FCC) em um *riser* longo em regime de CFB, com 10 m de comprimento e 76 mm de diâmetro. Um desenho esquemático do aparato experimental utilizado pelos autores para coleta de dados pode ser observado na Figura 10.

Figura 10 – Desenho esquemático do sistema de FCC.

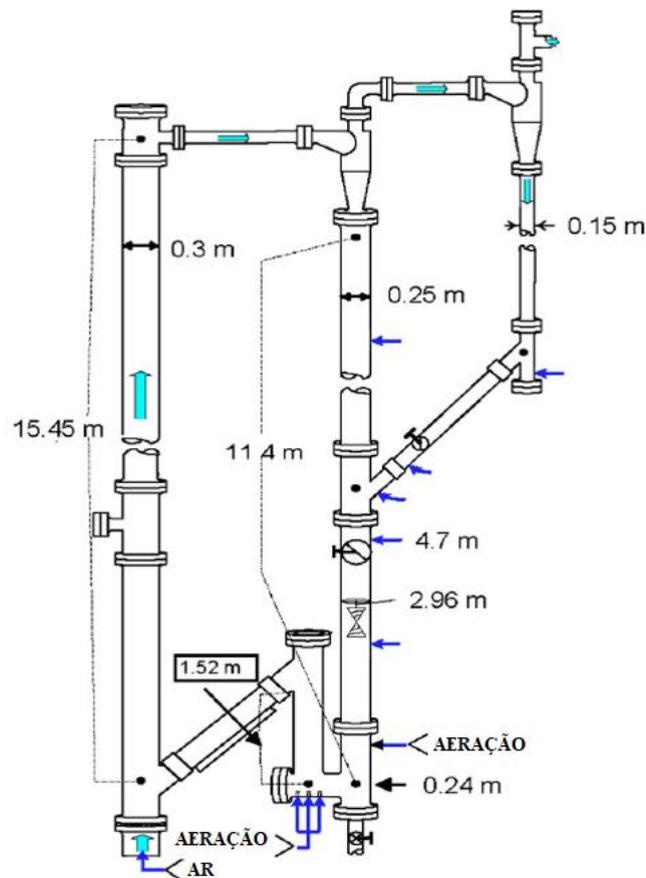


Fonte: Adaptado de Pärssinen e Zhu (2001a); Pärssinen (2002).

O segundo caso escolhido é baseado no trabalho de Mei, Monazam e Shadle (2006). Referente ao comportamento hidrodinâmico de materiais de densidade mais baixa, os autores realizaram experimentos em regime de leito fluidizado circulante utilizando partículas de cortiça. Neste trabalho, os autores contribuíram para uma melhor compreensão do processo de gaseificação, visto que foi observado que a razão de densidade entre as partículas de cortiça e o ar (à temperatura e pressão ambientes) é similar à razão densidades de carvão e gás no processo de gaseificação.

A Figura 11 mostra um desenho esquemático do aparato experimental utilizado por Mei, Monazam e Shadle (2006). O *riser* em questão possuía 15,45 m de altura e 0,305 m de diâmetro. A região densa do leito chegava a uma altura aproximada de 7,5 m.

Figura 11 – Desenho esquemático do sistema de separação gás-sólido.



Fonte: Mei, Monazam e Shadle. (2006).

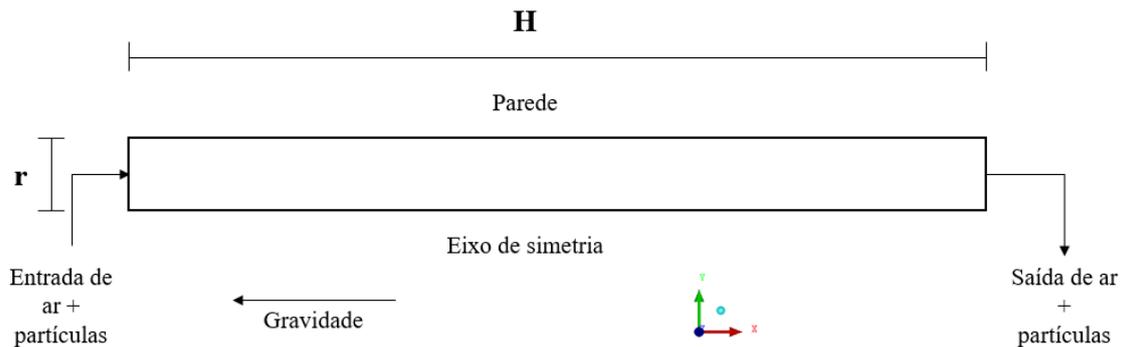
O *software* utilizado para geração das geometrias e malhas para ambos os casos foi o ICEM-CFD[®] versão 14.5, pertencente ao pacote ANSYS[®]. É importante ressaltar que foram criadas geometrias bi e tridimensionais para os casos, de forma a mais bem avaliar alguns comportamentos fluidodinâmicos que serão tratados detalhadamente na seção de resultados e discussão de cada um dos casos. As geometrias criadas para representar os casos em ambientes 2D (Casos 1 e 3 – Figura 12) e 3D (Casos 2 e 4 – Figura 13) tiveram formas bastante semelhantes, com alturas e raios diferentes, cujas dimensões podem ser observadas na Tabela 6.

Optou-se por criar uma geometria axissimétrica para os casos bidimensionais, ou seja, considerando-se apenas metade da geometria em relação a um eixo de simetria. Esta escolha foi devido ao fato de que este tipo de configuração possibilita menores tempos e esforços computacionais para obtenção da solução numérica. Também nestes casos, apenas uma entrada e uma saída foram consideradas, ou seja, sólidos e gases

entravam e saíam juntos do *riser*. A altura e o raio considerados na criação das geometrias estão representadas, respectivamente, pelas letras “H” e “r”.

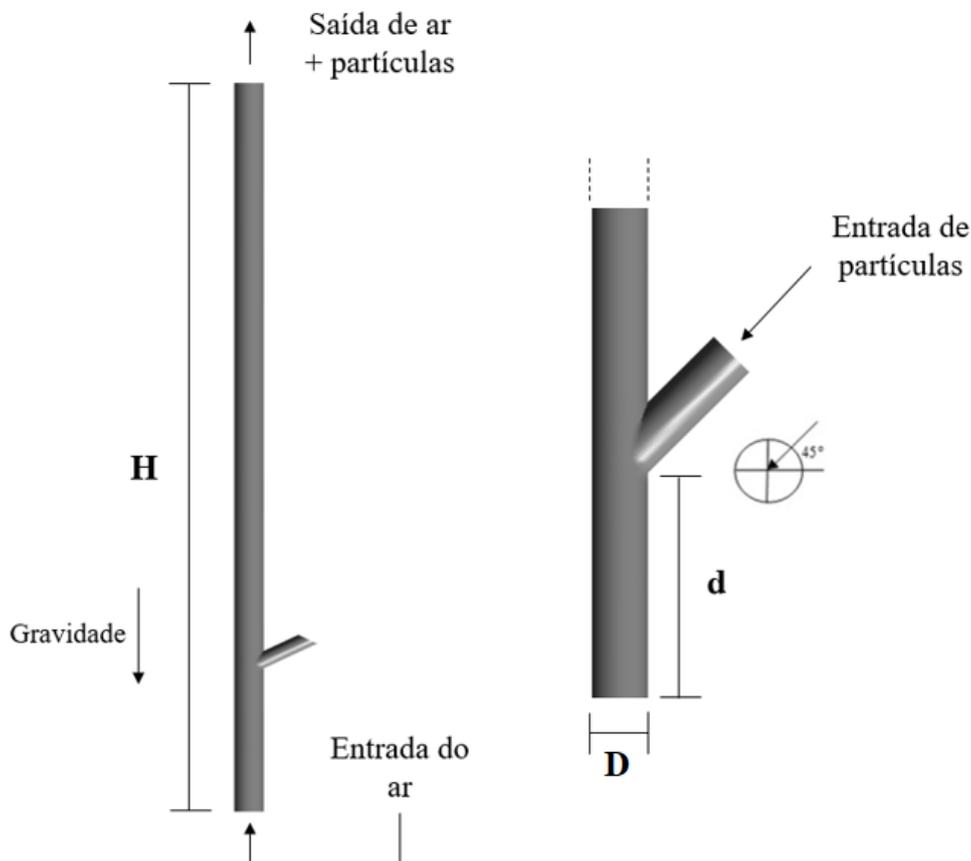
No que se refere aos Casos 2 e 4, foram projetadas duas entradas distintas, uma para os sólidos e outra para a fase gasosa. Desta forma, foi necessário considerar uma distância entre o fundo do *riser* (entrada de gases) e a entrada de sólidos. Esta distância é representada pela letra “d” e o diâmetro do *riser* é representado pela letra “D”.

Figura 12 - Geometria criada para os Casos 1 e 3.



Fonte: Autor (2017).

Figura 13 – Geometria criada para os Casos 2 e 4.



Fonte: Autor (2017).

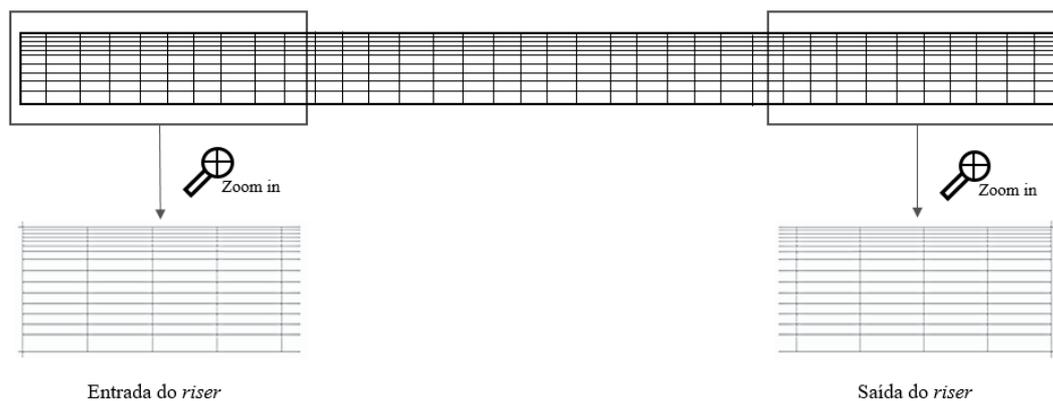
Tabela 6 – Altura e raio dos *risers*.

Caso	Altura (m)	Raio (m)	Distância (m)
Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	10	0,038	0,8
Mei, Monazam e Shadle (2006)	15,45	0,153	1,25

Fonte: Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) e Mei, Monazam e Shadle. (2006).

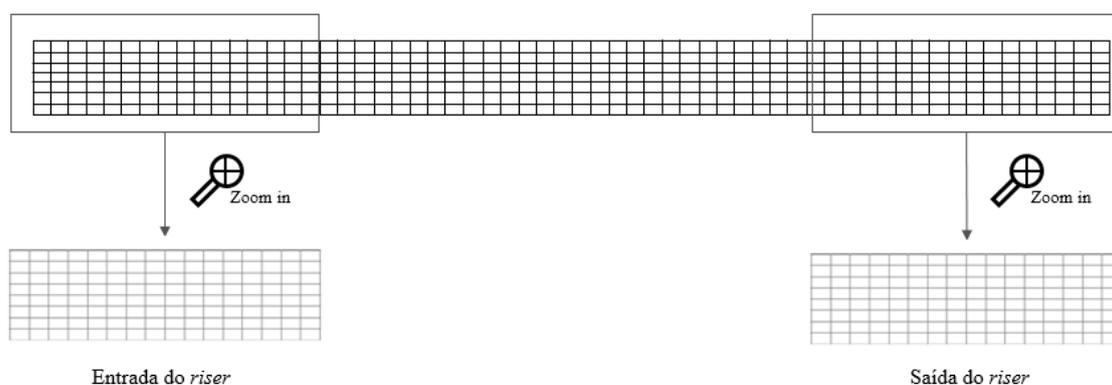
As Figuras 14 e 15 mostram as malhas criadas para as geometrias bidimensionais para os casos de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) e Mei, Monazam e Shadle (2006), respectivamente. As malhas tridimensionais geradas para os Casos 2 e 4 tiveram aspecto semelhante, porém com diferentes números de elementos totais na malha, o que pode ser observado na Figura 16. A quantidade de elementos em cada uma das malhas está apresentada de forma resumida na Tabela 7.

Figura 14 – Representação da malha gerada para o modelo referente ao caso de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b), mostrando entrada e saída do *riser*, em 2D.



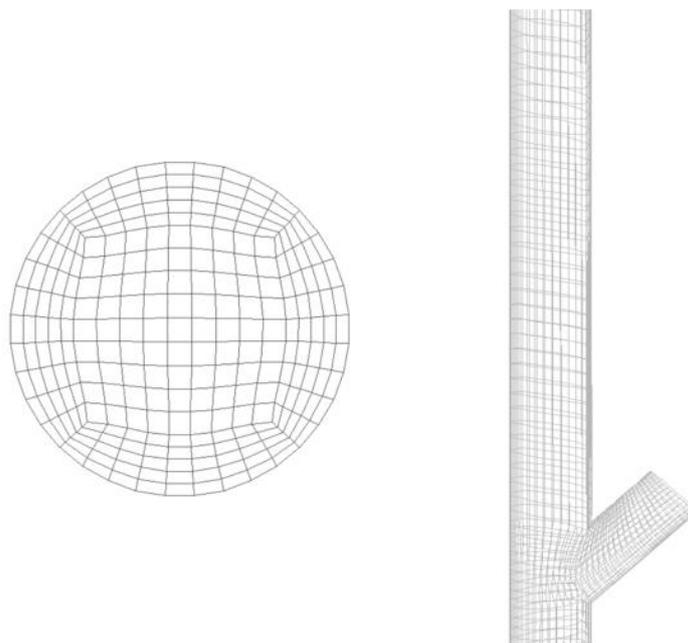
Fonte: Autor (2017).

Figura 15 – Representação da malha gerada para o modelo referente ao caso de Mei, Monazam e Shadle (2006), mostrando entrada e saída do *riser*, em 2D.



Fonte: Autor (2017).

Figura 16 – Aspecto das malhas geradas para o ambiente 3D para ambos os estudos de caso, mostrando o refinamento da malha nas entradas e saídas dos *risers* e em um corte da altura.



Fonte: Autor (2017).

Tabela 7 – Número de elementos presentes em cada uma das malhas para os casos 2D e 3D.

Caso	Malha em 2D	Malha em 3D
Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	6000	84681
Mei, Monazam e Shadle (2006)	3600	53361

Fonte: Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) e Mei, Monazam e Shadle (2006).

Os estudos de caso baseados nos dados experimentais de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) foram objeto de um estudo hidrodinâmico apresentado por Liu (2014), em 2D, semelhante ao que será apresentado nesta tese. No trabalho de Liu (2014), é realizado um teste de independência de malha para o estudo de caso em questão, constatando que uma malha com 6000 elementos é capaz de fornecer resultados fisicamente coerentes com os dados experimentais. Desta forma, a mesma quantidade de elementos foi escolhida para esta tese. Para o caso de Mei, Monazam e Shadle (2006), foi realizado um teste de malha e constatou-se que a malha com a quantidade de elementos apresentada na Tabela 7, em 2D, foi eficiente para o estudo fluidodinâmico pretendido.

5.1.2. Condições de contorno

As propriedades das fases e condições de contorno utilizadas na simulação dos quatro estudos de caso podem ser vistas nas Tabelas 8 e 9, respectivamente.

Tabela 8 – Propriedades das fases para os Casos 1 a 4.

Propriedade	Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	Mei, Monazam e Shadle (2006)
Densidade do ar	1,225 kg/m ³	1,225 kg/m ³ (25°C)
Viscosidade do ar	1,789 x 10 ⁻⁵ kg/m.s	1,789 x 10 ⁻⁵ kg/m.s (25°C)
Diâmetro das partículas	67 µm	812 µm
Densidade das partículas	1500 kg/m ³	189 kg/m ³
Classificação de Geldart	A	B

Fonte: Pärssinen e Zhu (2001a) e Mei, Monazam e Shadle (2006).

Tabela 9 – Condições de contorno utilizadas para os Casos 1 a 4.

Condição de contorno	Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	Mei, Monazam e Shadle (2006)
Entrada de gás	Caso 1 – <i>Velocity inlet</i> – UDF Caso 2 – <i>Velocity inlet</i>	Caso 3 – <i>Velocity inlet</i> – UDF Caso 4 – <i>Velocity inlet</i>
Velocidade superficial do gás	5,5 m/s	3,2 m/s
Entrada de sólidos	<i>Velocity inlet</i> – 0,8 m/s	<i>Velocity inlet</i> – 0,1243 m/s
Fluxo mássico de sólidos na entrada	300 kg/m ² s	3,2 kg/m ² s
Condições de parede (gás, sólidos)	Sem deslizamento	Sem deslizamento
Saída (gás, sólidos)	<i>Pressure outlet</i>	<i>Pressure outlet</i>
Fração volumétrica de sólidos na entrada	0,250	0,136

Fonte: Pärssinen e Zhu (2001a), Mei, Monazam e Shadle (2006) e Liu (2014).

Como pode ser observado na Tabela 9, houve a necessidade de criação de uma UDF para implementação de uma função que modelasse a entrada de gás no *riser*. A Equação 5.1 representa a função em questão, proposta por Liu (2014) e aplicada neste trabalho para os Casos 1 e 3. Por outro lado, a velocidade de entrada de sólidos foi calculada conforme a Equação 5.2, considerando o fluxo mássico de sólidos e a fração volumétrica dos mesmos na entrada, bem como a densidade da fase sólida.

$$v_{g,entrada} = \frac{2v_{g,sup}}{(1-\varepsilon_{s,entrada})} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right] \quad (5.1)$$

$$v_{s,entrada} = \frac{G_s}{\rho_s \varepsilon_{s,entrada}} \quad (5.2)$$

Para ambos os estudos de caso, em relação à modelagem da teoria cinética do escoamento granular, vários modelos foram utilizados para simulação dos diferentes tipos de viscosidades. Para a viscosidade colisional, utilizou-se o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992). De modo a simular as viscosidades cinética e friccional, os modelos de Syamlal e O'Brien (1989) e Schaeffer (1987) foram escolhidos, respectivamente. E, finalmente, referente à viscosidade global, o modelo de Lun et al. (1984) foi aplicado.

Considerando apenas o primeiro estudo de caso, especificamente para o caso em 2D, foi estudado o comportamento da fração volumétrica de sólidos e da velocidade da fase sólida ao longo do raio do *riser*, considerando-se dois coeficientes de restituição distintos: 0 e 1, como foi proposto por Liu (2014). Além disso, ainda foi analisado o perfil de fração volumétrica de sólidos, na direção radial, para diferentes modelos de arraste, objetivando-se saber a influência dos mesmos nesta variável. Os resultados e discussões referentes ao primeiro estudo de caso estão descritos na próxima seção.

A partir da análise dos dados experimentais dos Casos 3 e 4, com os dados experimentais de Mei, Monazam e Shadle. (2006), nota-se que é um caso de baixo fluxo de sólidos na entrada do reator. Portanto, para avaliar o comportamento do perfil axial da fração volumétrica de sólidos, foi aplicada uma abordagem do modelo de arraste EMMS. Considerando o ambiente 3D, vários modelos de arraste foram testados, de modo a avaliar qual melhor prevê o comportamento da variável em questão.

De modo a facilitar a discussão dos resultados obtidos, estes foram divididos de acordo com o ambiente na qual foi desenvolvida cada geometria, ou seja, 2D e 3D.

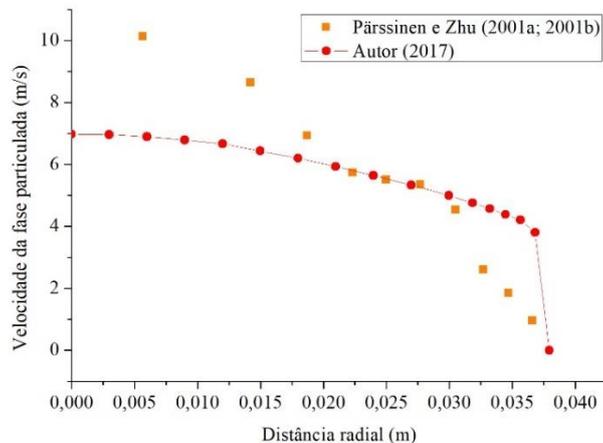
5.1.3. Resultados e discussão – Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)

5.1.3.1. Resultados em 2D – Caso 1

Para o Caso 1, em específico, perfis radiais de velocidade de partículas foram analisados e comparados com os resultados experimentais (PÄRSSINEN; ZHU, 2001a). Os resultados obtidos para cada valor de coeficiente de restituição ($e=1$ ou $e=0$) podem

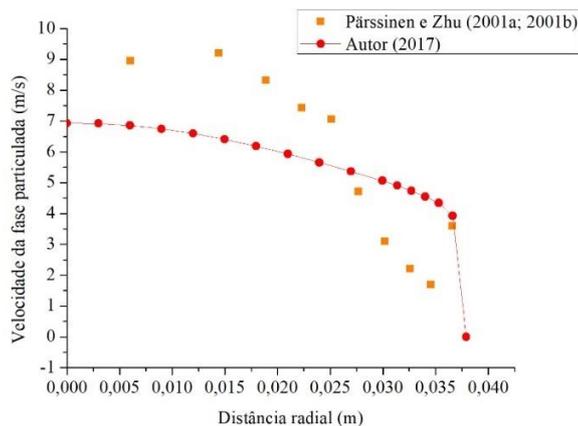
ser observados nas Figuras 17 a 20. Neste primeiro momento, o modelo de arraste utilizado foi o de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).

Figura 17 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 6,34 m do *riser* ($e=0$).



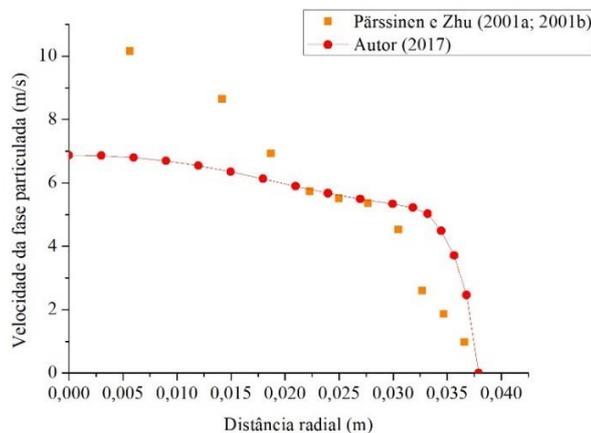
Fonte: Autor (2017).

Figura 18 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 9,32 m do *riser* ($e=0$).



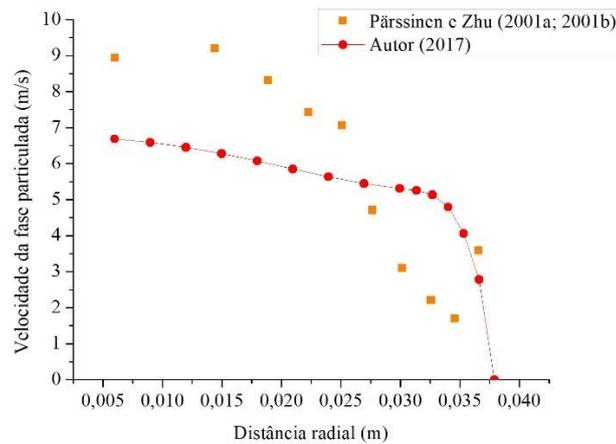
Fonte: Autor (2017).

Figura 19 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 6,34 m do *riser* ($e=1$).



Fonte: Autor (2017).

Figura 20 – Perfil radial de velocidade das partículas a uma altura de 9,32 m do *riser* ($e=1$).

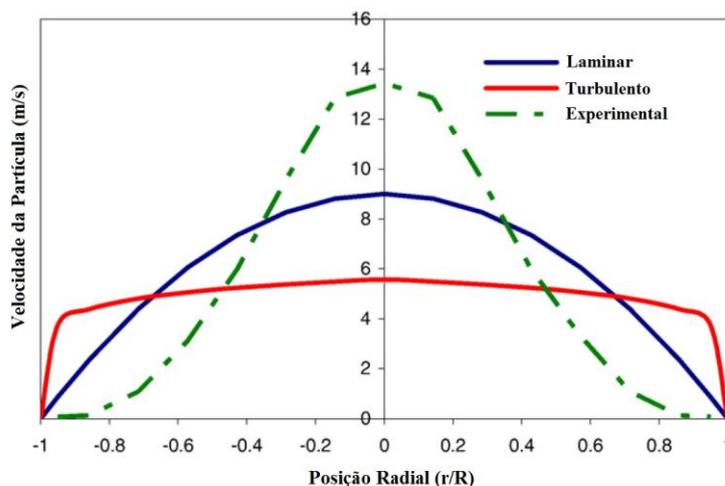


Fonte: Autor (2017).

Examinando os resultados obtidos para a velocidade da fase sólida, é possível observar que o comportamento do modelo não se adequa bem aos dados experimentais de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b) num contexto quantitativo. No entanto, levando em consideração o caráter qualitativo da solução, esta é capaz de prever o comportamento da variável velocidade da fase sólida para o caso. Além disso, pode-se notar que a mudança de valor do coeficiente de restituição não teve muita influência no perfil radial de velocidade da fase particulada.

Outro aspecto que deve ser destacado neste caso, e também que pode explicar os resultados obtidos pela solução numérica, pode ser encontrado no trabalho de Cruz, Steward e Pugsley (2006). Os autores propuseram novos modelos de fechamento para modelagem de leitos fluidizados circulantes utilizando a técnica de dinâmica dos fluidos computacional. De acordo com os pesquisadores, muitos estudos presentes na literatura concordam que o perfil de velocidade da fase sólida é similar ao experimental da Figura 21 (PÄRSSINEN; ZHU, 2001a; CRUZ; STEWARD; PUGSLEY, 2006). Isso ocorre uma vez que, para algumas condições de concentração de sólidos e outras variáveis, há acúmulo de partículas na região da parede, o que faz com que o gás seja direcionado para região central do equipamento (RESENDE; GONÇALVES; LOPES, 2015).

Figura 21 – Perfil radial de velocidade da partícula comparando-se os escoamentos laminar, turbulento e experimental.



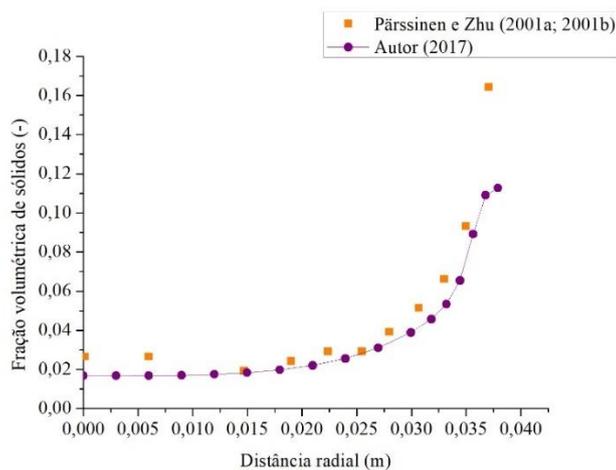
Fonte: Adaptado de Cruz, Steward e Pugsley (2006).

Por outro lado, deve-se dar ênfase ao fato de que o equipamento usado na obtenção dos dados experimentais não foi completamente detalhado no estudo de Pärssinen e Zhu (2001a). Como já observado em outros trabalhos numéricos sobre leitos fluidizados circulantes da literatura (CHENG et al., 1998; VAN DER MEER et al., 2000; LOPES et al., 2012), certas características geométricas de alimentação de partículas, bem como de saída do equipamento, influenciam de forma significativa no padrão de distribuição de partículas em seu interior.

É importante ressaltar que, nesta parte do trabalho, foi usada uma modelagem bidimensional, na qual não foram consideradas entradas separadas para o gás e as partículas, nem curvas na geometria de saída, como é geralmente encontrado em leitos fluidizados circulantes. Estes fatos podem levar à diferença entre a solução obtida pelo modelo e os dados experimentais da literatura.

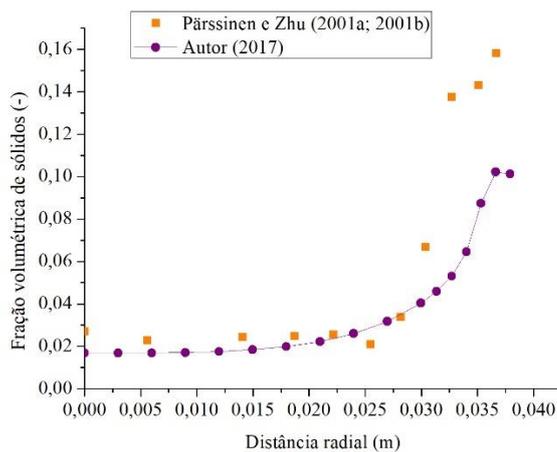
Tratando-se agora da fração volumétrica de sólidos ao longo do raio do *riser*, foi testada, primeiramente, a influência do coeficiente de restituição, em diferentes alturas. De acordo com Pannala, Syamlal e O'Brien (2011), o coeficiente de restituição é responsável pela representação de colisões entre partículas, ou seja, o valor unitário desta variável significaria a ocorrência de colisões perfeitamente elásticas entre as mesmas, enquanto um valor igual a zero indicaria colisões perfeitamente inelásticas. Esta variável é importante para o fechamento de cálculos relacionados à teoria cinética do escoamento granular. As Figuras 22 a 25 trazem os resultados obtidos.

Figura 22 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m ($e=0$).



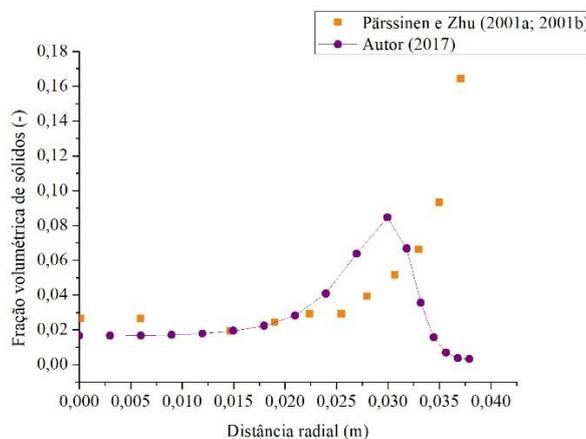
Fonte: Autor (2017).

Figura 23 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,32 m ($e=0$).



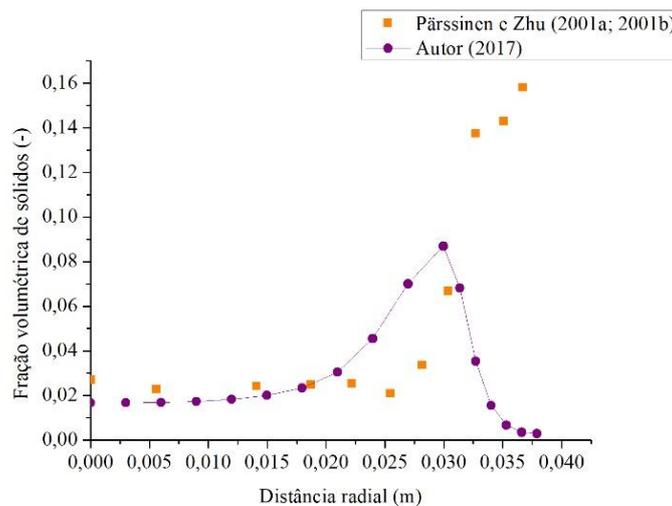
Fonte: Autor (2017).

Figura 24 - Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m ($e=1$).



Fonte: Autor (2017).

Figura 25 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,42 m ($e=1$).



Fonte: Autor (2017).

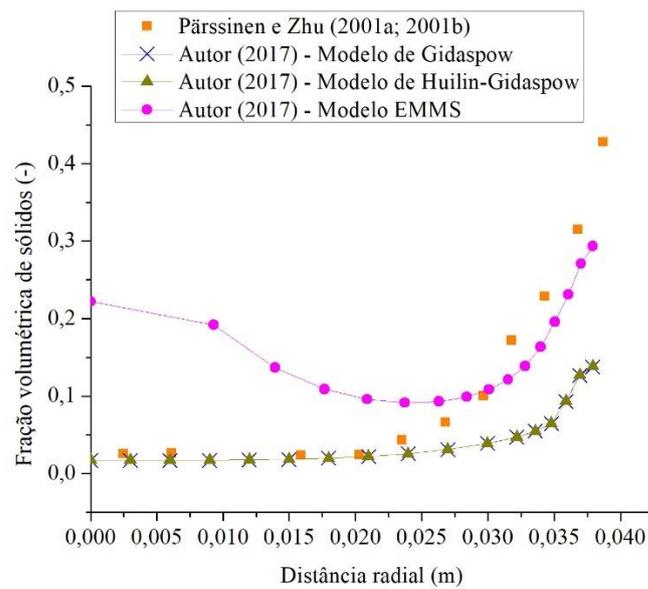
A partir do estudo dos resultados obtidos anteriormente, nota-se que tiveram um comportamento semelhante aos dados experimentais, diferindo de forma mais significativa próximo à parede. Uma possível solução para tentar minimizar essa diferença poderia ser o uso de um refinamento maior próximo à parede, a utilização de uma função de parede distinta ou diferentes modelos de arraste.

Pita e Sundaresan (1991; 1993) chegaram à conclusão de que pequenas mudanças no coeficiente de restituição poderiam causar alterações significativas no perfil *core-annular* do escoamento. Além disso, Cloete e Amini (2011) afirmaram que a utilização de um coeficiente de restituição menor que 1 contribuiu para a formação de um perfil *core-annular* de escoamento em seu trabalho. Além disso, também é importante ressaltar que, tratando-se de uma região mais diluída, ou seja, com baixa concentração de sólidos, o choque entre as partículas não é tão significativo. No entanto, observa-se que na região da parede o coeficiente de restituição tem uma importância maior, visto que esta região possui uma maior concentração de sólidos.

Analisando-se o comportamento dos perfis radiais de frações volumétricas de sólidos, é possível observar que o coeficiente $e=0$, por mais que pareça bem menor aos valores encontrados na literatura, como o de Huilin-Gidaspow (HUILIN; GIDASPOW, 2003) por exemplo, se adequa mais ao comportamento dos dados experimentais. Logo, este valor foi escolhido para as seguintes simulações hidrodinâmicas para este caso. Liu (2014) notou que um refinamento maior próximo à parede não afetou o perfil da fração volumétrica de sólidos no caso de diferentes coeficientes de restituição.

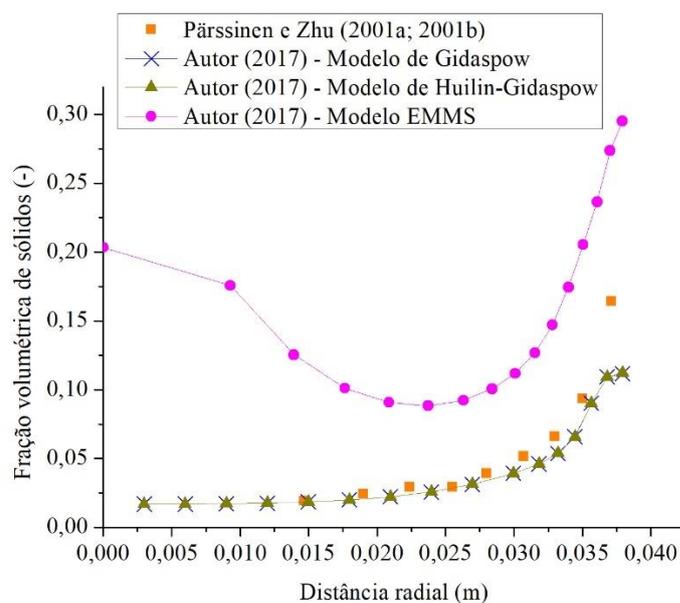
De forma a tentar solucionar o problema de modelagem da região próxima à parede do *riser*, diferentes modelos de arraste foram testados, sendo eles: Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), Huilin-Gidaspow (ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide, 2012) e um modelo proposto por Liu (2014) utilizando a abordagem EMMS com base no trabalho de Yang et al. (2004). Os resultados obtidos nesta parte do estudo podem ser observados nas Figuras 26 a 28.

Figura 26 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 3,96 m.



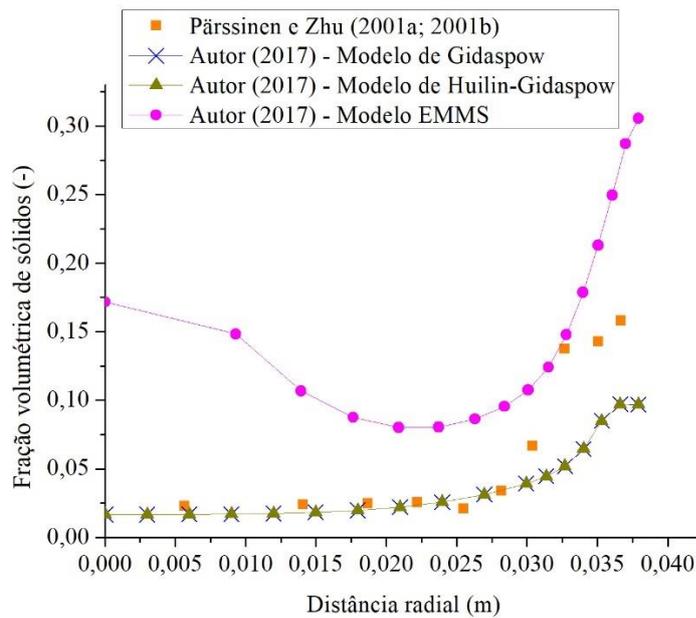
Fonte: Autor (2017).

Figura 27 – Perfil radial da fração volumétrica de sólidos na altura de 6,34 m.



Fonte: Autor (2017).

Figura 28 – Perfil da fração volumétrica de sólidos na altura de 9,32 m.



Fonte: Autor (2017).

A partir da análise das figuras acima apresentadas, nota-se, visualmente, que o modelo de Huilin-Gidaspow (HUILIN; GIDASPOW, 2003) exibiu quase o mesmo comportamento que o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992). Este comportamento era, de certa forma, esperado, visto que a diferença entre os dois modelos é pequena, tratando-se apenas da inserção de uma função de transição, como pode ser visto no Capítulo 3.

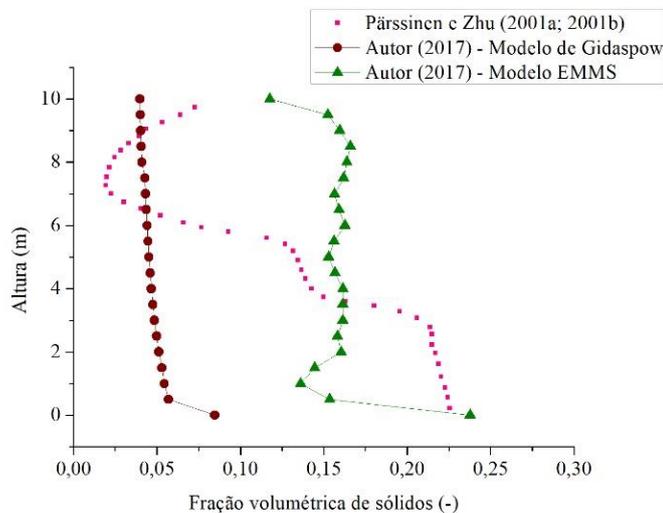
A abordagem EMMS proposta por Liu (2014) também apresentou divergências em relação aos dados experimentais, sendo incapaz de prever tanto qualitativamente quanto quantitativamente o comportamento da fração volumétrica de sólidos ao longo do raio, principalmente na região mais diluída, ou seja, com menor concentração de sólidos. Conforme se aproxima da região mais densa, o modelo consegue prever melhor o comportamento da fase sólida. Portanto, pode-se concluir que, para modelagem do perfil radial de fração volumétrica de sólidos, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) é satisfatório.

5.1.3.2. Resultados em 3D – Caso 2

Buscando avaliar o comportamento da fração volumétrica de sólidos também ao longo de toda a altura do *riser* e como este é afetado por diferentes modelos de arraste, considerou-se, neste momento, duas entradas distintas, uma para o ar e outra para a fase sólida, em um modelo tridimensional. Os resultados obtidos nesta etapa podem ser

observados na Figura 29. Neste caso, os perfis de fração volumétrica de sólidos foram obtidos através de médias em planos construídos ao longo do *riser*.

Figura 29 – Perfil axial da fração volumétrica de sólidos.



Fonte: Autor (2017).

Nesta etapa do estudo, foi necessário a criação de UDFs para o modelo EMMS, bem como para o perfil de velocidade de entrada do gás e também para implementação da função de distribuição radial, conforme visto no Capítulo 3.

É possível observar na Figura 29, três regiões distintas no interior do *riser* (KUNII; LEVENSPIEL, 1991; PÄRSSINEN; ZHU, 2001a; PÄRSSINEN, 2002; SHAH et al., 2011), sendo elas: uma região mais densa (localizada perto do fundo do reator), uma intermediária e, finalmente, outra região mais diluída (próxima ao topo do reator). Os resultados obtidos indicam que o modelo com a abordagem EMMS é mais apropriado para prever o comportamento na região mais densa do *riser*, enquanto o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) é mais adequado para a fase diluída. Estes fatos corroboram os resultados obtidos no modelo 2D.

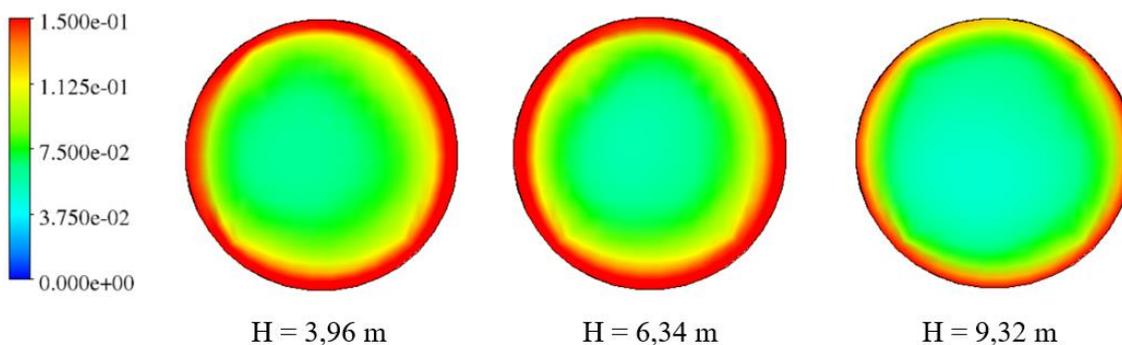
É importante salientar que, neste caso, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) pôde prever tanto qualitativamente quanto quantitativamente o perfil axial da fração volumétrica de sólidos. No entanto, os resultados referentes ao modelo EMMS foram capazes de prever o comportamento da variável de forma qualitativa e, quantitativamente, pode-se observar que o referido modelo obtém um valor médio entre os dados experimentais e o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), como mostra a Tabela 10. Os contornos referentes a diferentes alturas estão apresentados nas Figuras 30 e 31.

Tabela 10 – Valor médio calculado para fração volumétrica de sólidos referente aos modelos de arraste estudados.

Modelo de arraste	Fração volumétrica de sólidos
Experimental – Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b)	0,1177
Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992)	0,0214
EMMS	0,0933

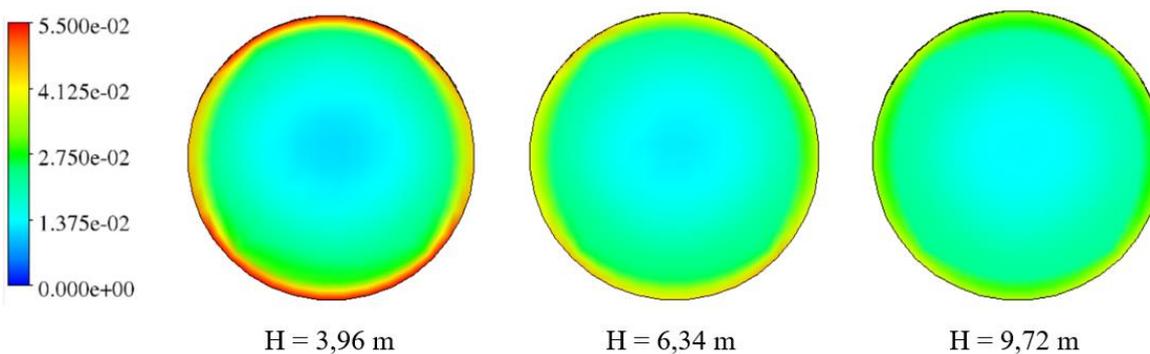
Fonte: Autor (2017).

Figura 30 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 1, em 3D, considerando o modelo de arraste EMMS.



Fonte: Autor (2017).

Figura 31 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 1, em 3D, considerando o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).



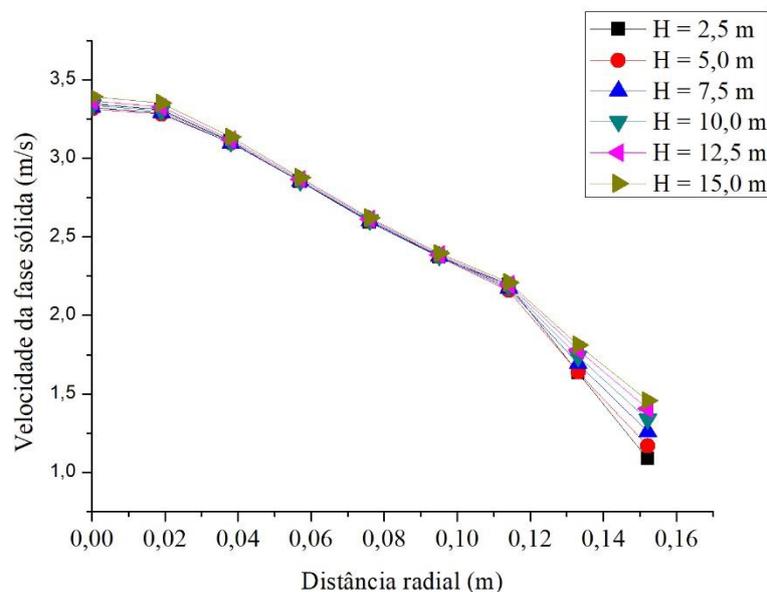
Fonte: Autor (2017).

5.1.3. Resultados e discussão – Mei, Monazam e Shadle (2006)

5.1.3.1. Resultados em 2D – Caso 3

As análises feitas para este caso foram semelhantes às realizadas para o caso de Pärssinen e Zhu (2001a; 2001b). Embora o trabalho de Mei, Monazam e Shadle (2006) não apresente dados experimentais para o perfil radial de velocidade da fase sólida, estes podem ser considerados para comparação, em caráter qualitativo, com o Caso 1. Como já foi analisado anteriormente, o coeficiente de restituição não possui tanta influência na velocidade da fase sólida, sendo considerado igual a zero para este caso. Primeiramente, considerar-se-á o perfil radial de velocidade da fase sólida, que pode ser observado na Figura 32. Neste caso, utilizou-se, primeiramente, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), para que pudesse ser feita uma analogia ao Caso 1, que também trabalhou com este modelo para análise da velocidade da fase sólida.

Figura 32 – Perfil radial de velocidade das partículas em diferentes alturas, segundo a geometria de Mei, Monazam e Shadle. (2006).

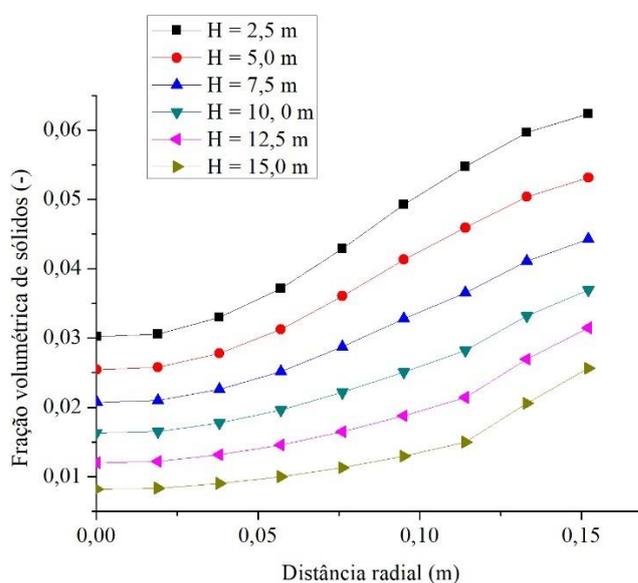


Fonte: Autor (2017).

A mesma discussão realizada para o Caso 1 cabe a este caso, pois, através da Figura 32, é possível observar o acúmulo de partículas na região da parede, direcionando o gás para a região central do *riser*. Como não há dados experimentais que considerem o comportamento dessa variável na situação em questão, não é possível analisar o que foi simulado quantitativamente.

Na Figura 33 são apresentados os principais resultados de fração volumétrica de sólidos ao longo do raio do *riser*, em diferentes alturas. Esta análise foi feita de modo semelhante ao Caso 1, no entanto novos valores de altura foram considerados, visto que o *riser* do Caso 2 possuía uma altura diferente do usado no Caso 1. Além disso, como já foi analisado previamente no Caso 1, um coeficiente de restituição igual a zero foi considerado, visto que foi capaz de prever bem o comportamento dos sólidos ao longo da distribuição radial do *riser*. O trabalho de Mei, Monazam e Shadle (2006) não apresenta dados experimentais para este comportamento da variável em questão, porém, é interessante analisar os dados simulados para que o comportamento qualitativo possa ser comparado ao primeiro estudo de caso.

Figura 33 – Simulação da fração volumétrica de sólidos ao longo do raio do *riser* em diferentes alturas referente à geometria de Mei, Monazam e Shadle. (2006).

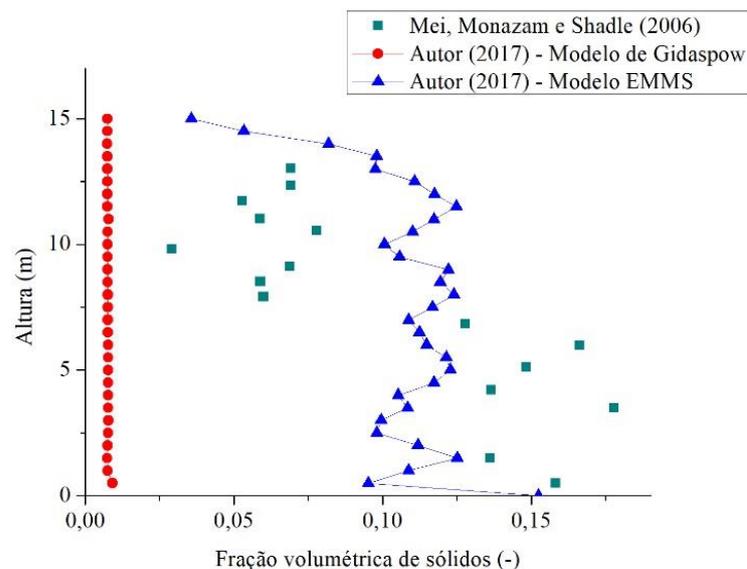


Fonte: Autor (2017).

Considerando, inicialmente, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) para estas simulações iniciais, é possível notar que o comportamento apresentado na Figura 33 é semelhante também ao obtido para a mesma variável no Caso 1, analisado previamente.

Na Figura 34, é possível observar a solução numérica do modelo matemático para avaliação do comportamento da fração volumétrica de sólidos ao longo do *riser* de acordo com os resultados experimentais (MEI; MONAZAM; SHADLE, 2006). Os valores médios encontrados mediante construção de planos ao longo da altura do *riser* podem ser vistos na Tabela 11. Os modelos de arraste de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) e EMMS (SHAH, 2011) foram testados neste primeiro momento.

Figura 34 – Fração volumétrica de sólidos ao longo da altura sob condições de baixo fluxo mássico de sólidos considerando diferentes modelos de arraste, em 2D.



Fonte: Autor (2017).

Tabela 11 – Valor médio calculado para fração volumétrica de sólidos do *riser* referente aos modelos de arraste estudados.

Modelo de arraste	Fração volumétrica de sólidos
Experimental – Mei, Monazam e Shadle (2006)	0,0998
Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992)	0,0076
EMMS (SHAH et al., 2011)	0,1077

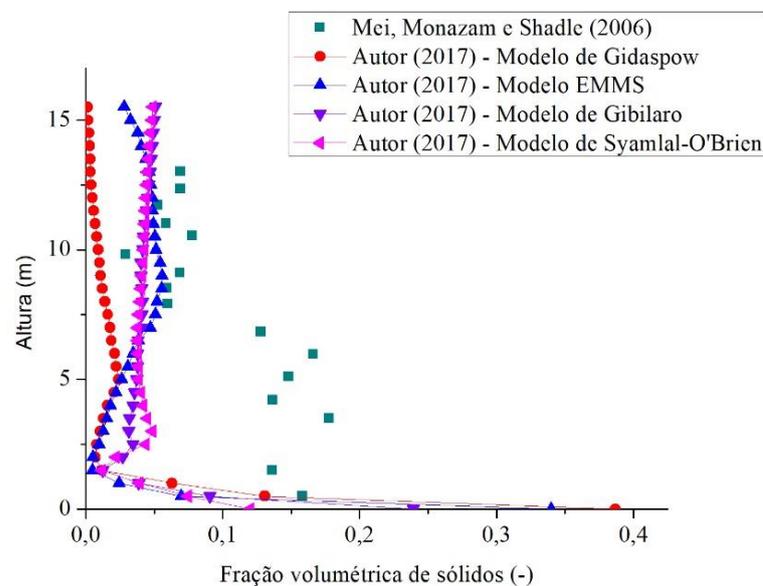
Fonte: Autor (2017).

Nota-se que, na Figura 34, os dados experimentais mostraram um perfil em forma de "S" da fração volumétrica de sólidos ao longo da altura (KUNII; LEVENSPIEL, 1991; MIAO et al., 2013). Os resultados obtidos mediante aplicação da técnica de dinâmica dos fluidos computacional mostraram que com a aplicação do modelo de arraste EMMS, o comportamento do perfil axial da fração volumétrica de sólidos simulado foi mais próximo dos resultados apresentados na literatura, o que não ocorreu com o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992). Essa comparação fica mais clara mediante observação da Tabela 11.

5.1.3.2. Resultados em 3D – Caso 4

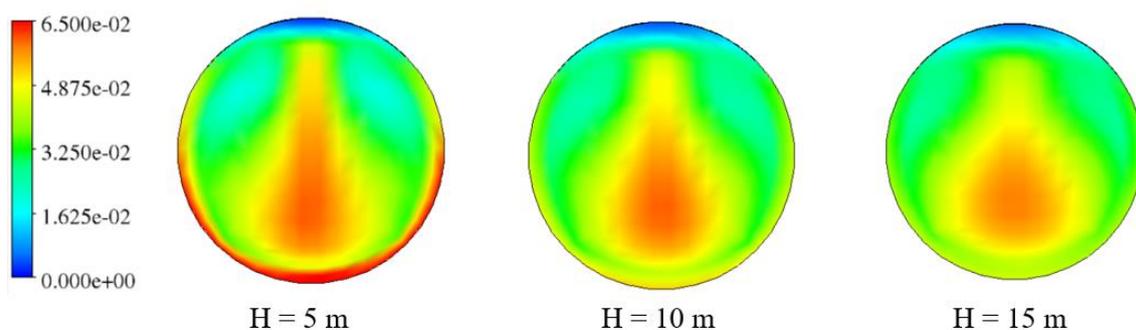
De modo a verificar se os resultados em 3D seriam semelhantes aos do ambiente 2D, primeiramente, foram testados os dois modelos de arraste utilizados no caso em 2D. De formar a complementar ainda mais o estudo nesta etapa, mais dois modelos de arraste também foram testados: Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985) e Syamlal e O'Brien (1989). Os resultados obtidos nesta simulação estão apresentados na Figura 35. Os contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para os modelos de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), EMMS (SHAH et al., 2011), Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985) e Syamlal e O'Brien (1989) podem ser observados nas Figuras 35 a 39, respectivamente.

Figura 35 – Comparação entre diferentes modelos de arraste utilizando técnicas de CFD.



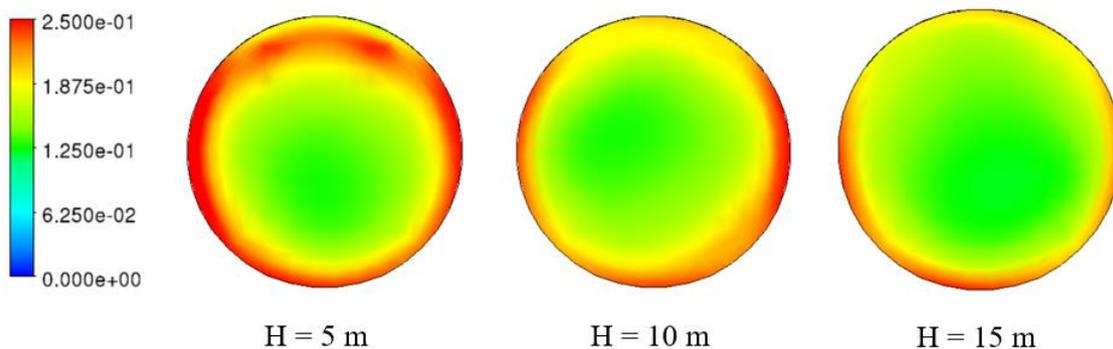
Fonte: Autor (2017).

Figura 36 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992).



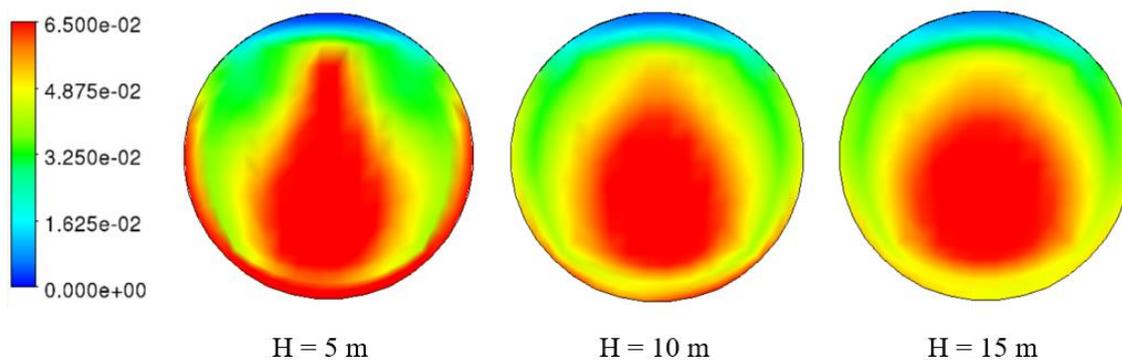
Fonte: Autor (2017).

Figura 37 – Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de arraste EMMS (SHAH et al., 2011).



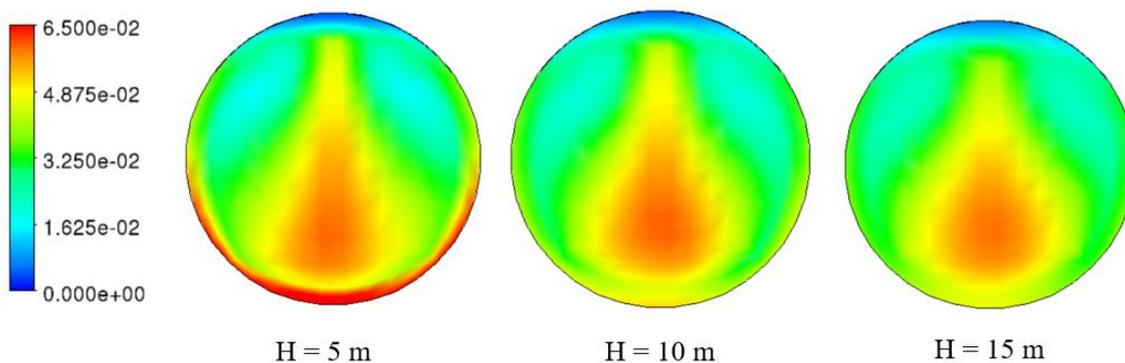
Fonte: Autor (2017).

Figura 38 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985).



Fonte: Autor (2017).

Figura 39 - Contornos de fração volumétrica de sólidos em diferentes alturas para o Caso 4, em 3D, considerando o modelo de Syamlal e O'Brien (1989).



Fonte: Autor (2017).

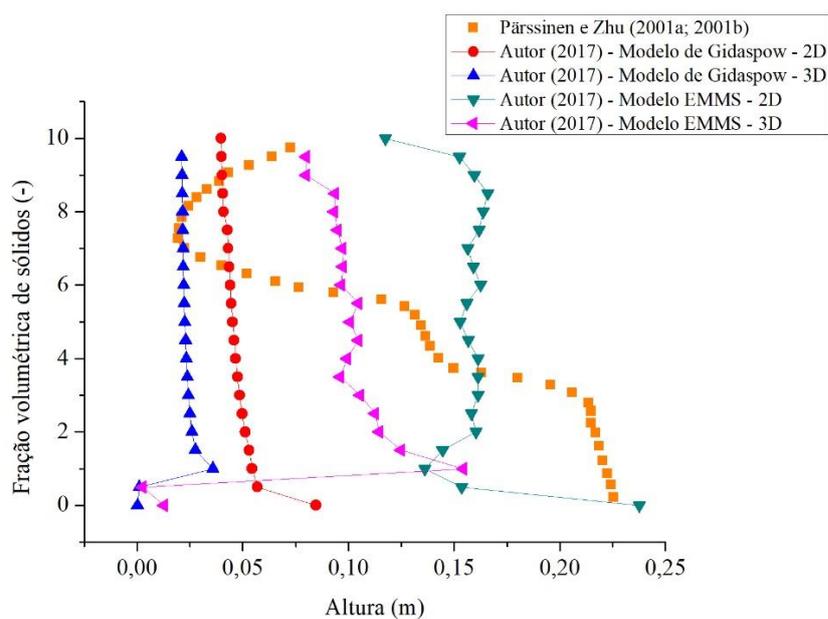
Novamente, mediante interpretação dos resultados, pode-se notar que os resultados obtidos com o modelo EMMS se aproximam mais da região densa, enquanto modelos

de arraste convencionais, como Gibilaro e Gidaspow, são melhores em prever o comportamento da fração volumétrica de sólidos ao longo da altura na região diluída do *riser*. Para este caso, porém, os modelos convencionais de arraste foram melhores em prever o perfil da fração volumétrica de sólidos, em geral, pois os resultados destes se aproximaram mais ao perfil experimental obtido da literatura, tratando-se de uma análise qualitativa.

5.1.4. Síntese dos resultados para hidrodinâmica

Mediante análises dos resultados dos dois estudos de caso analisados nesta tese, tanto em 2D quanto em 3D, podem ser tiradas algumas conclusões. Os resultados em 2D e 3D, no que se refere à fração volumétrica de sólidos, foram bastante semelhantes. Logo, uma geometria em 2D é capaz de satisfazer os propósitos de obter resultados coerentes para diferentes modelos de arraste nestes casos. Por isso, para o caso com ocorrência de reações químicas, foi considerada apenas uma geometria em 2D. Este fato pode ser comprovado mediante análise da Figura 40, por exemplo. Pode-se observar que os resultados obtidos para o ambiente 2D com os modelos de arraste de Gidaspow, Bezburuah e Ding. (1992) e EMMS (SHAH et al., 2011) assemelham-se tanto quantitativamente quanto qualitativamente dos resultados em 3D. Observa-se uma ligeira diferença maior entre os resultados referentes ao modelo EMMS (SHAH, 2011), apresentando um resultado mais coerente com os dados experimentais no ambiente 3D.

Figura 40 – Comparação entre os resultados para fração volumétrica de sólidos ao longo da altura para os Casos 1 e 2.



Fonte: Autor (2017).

Tratando-se de modelos de arraste convencionais, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) é amplamente utilizado e aceito na literatura. Porém, para os casos estudados neste trabalho, o modelo em questão conseguiu prever as variáveis estudadas na região mais diluída do *riser*, para os Casos 1 e 2 e, para os Casos 3 e 4, observou-se que o modelo em questão também é adequado para prever qualitativamente a fração volumétrica de sólidos ao longo do *riser*, mostrando resultados melhores que o modelo EMMS.

Em suma, os modelos que utilizam a abordagem EMMS (YANG et al., 2004; SHAH et al., 2011; LIU, 2014) foram melhores em prever o comportamento das variáveis estudadas até o momento em escoamentos que possuem alto fluxo mássico de entrada de sólidos, principalmente no aspecto quantitativo das regiões mais densas do *riser* e no aspecto qualitativo em geral. Porém, para escoamentos com fluxos mássicos de entrada de sólidos mais baixos, modelos convencionais de arraste como Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) e Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985) apresentaram resultados mais consistentes com a literatura.

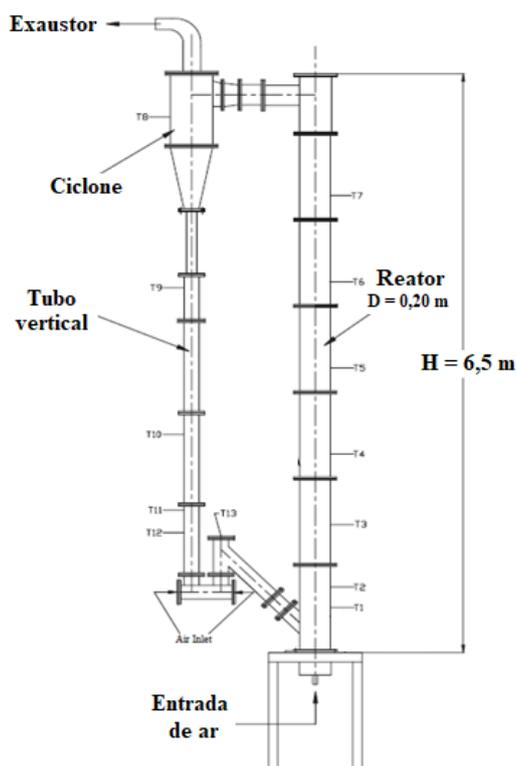
5.2. Caso com reação química – García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004)

Os dados experimentais da literatura escolhidos para modelagem e simulação do processo de gaseificação de biomassa utilizando técnicas de CFD vêm do caso de García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004). O trabalho dos autores consistiu em aplicar o processo de gaseificação utilizando ar, como fluido de arraste, e resíduos de óleo de oliva, como partículas, usando um reator do tipo leito fluidizado circulante. Um esquema do aparato experimental pode ser observado na Figura 41.

O principal objetivo dos autores era apresentar as possibilidades de gaseificação deste tipo específico de biomassa, os resíduos de óleo de oliva, visto que são muito comuns na região da Espanha (GARCÍA-IBAÑEZ; CABANILLAS; SÁNCHEZ, 2004) e também avaliar como a mudança de variáveis de interesse do processo de gaseificação poderiam influenciar na qualidade do gás do produto, na conversão de carbono e na eficiência energética do processo como um todo. As propriedades do ar e da biomassa utilizados neste experimento estão mostrados na Tabela 12.

A dificuldade em modelar um sistema com várias reações químicas levou à necessidade de considerar condições especiais de simulação, especialmente em regime transiente, como é o caso desta tese.

Figura 41 – Desenho esquemático do aparato experimental para testes de gaseificação de óleo de oliva utilizando ar como agente gaseificador.



Fonte: Adaptado de García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004).

Tabela 12 – Principais propriedades e características da biomassa e do ar utilizados no processo de gaseificação.

Densidade do ar	1,225 kg/m ³
Viscosidade do ar	1,72 x 10 ⁻⁵ kg/m ³
Densidade da biomassa	659 kg/m ³
Tamanho médio da partícula	1,89 mm
Conteúdo de umidade da biomassa	8,9% (base mássica)
Análise imediata (base seca, massa%)	
Matéria volátil	74,4
Carbono fixo	17,1
Cinzas	8,5
Análise elementar (base seca e sem cinzas, massa%)	
C	52,7
H	7,2
N	1,6
S	0,07
Cl	0,37
O	38,1
Poder calorífico superior	19,9 MJ/kg
Poder calorífico inferior	18,5 MJ/kg

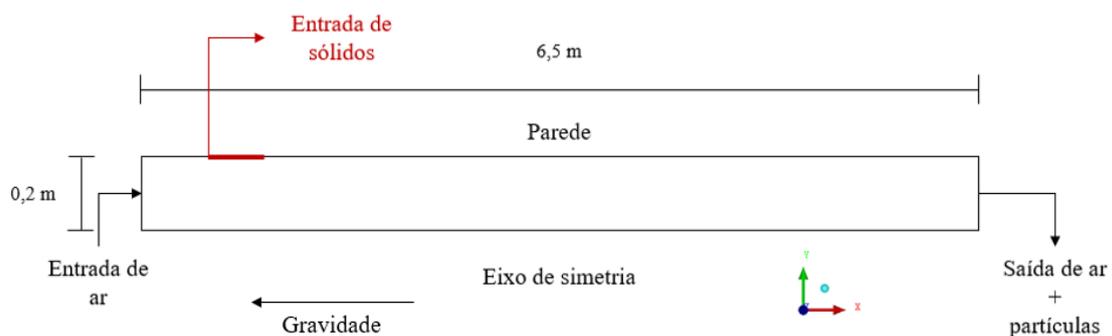
Fonte: García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004).

Com o objetivo de obter um perfil mais desenvolvido da hidrodinâmica no reator, inicialmente, foram simulados 9 segundos, sem considerar a ocorrência de reações químicas. Após esse tempo, mais 21 segundos de reação foram simulados, já considerando uma média temporal. Foi utilizado um passo de tempo de 10^{-3} segundos e apenas simulações em 2D foram realizadas, considerando resíduos abaixo de 0,001 como critério de convergência e dupla precisão.

5.2.1. Geometria e malha

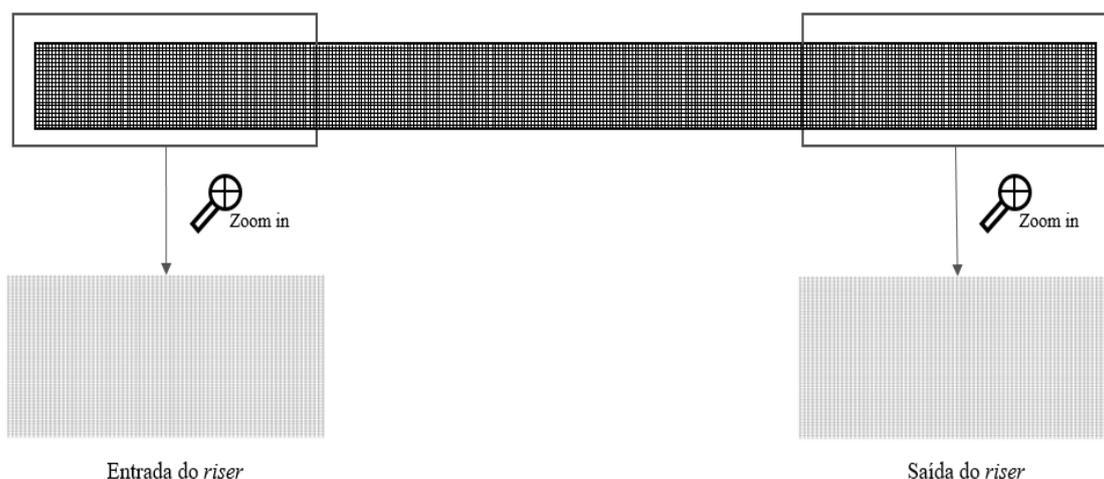
A geometria criada para representar o processo de gaseificação de biomassa, bem como suas dimensões, pode ser observada na Figura 42. É possível notar a inclusão de uma entrada lateral para a biomassa, além da entrada principal do ar no fundo. Ambas as fases saem por uma só saída, ao topo do reator. Novamente, optou-se por uma geometria axissimétrica. A malha criada está representada na Figura 43.

Figura 42 – Geometria 2D para o caso considerando reações químicas.



Fonte: Autor (2017).

Figura 43 – Representação da malha numérica utilizada para simulação das reações químicas.



Fonte: Autor (2017).

Com o objetivo de obter uma solução numérica mais robusta, foi feito um teste de independência de malha, que será apresentado na seção 5.2.3 deste capítulo. A presente malha apresentou 162500 elementos, conforme a Figura 43.

5.2.2. Condições de contorno

Todas as condições de contorno e operacionais utilizadas para simulação do caso estão na Tabela 13. A ausência de um modelo de radiação se dá pelo fato da tentativa de minimização de divergências durante a simulação, visto que é uma simulação bastante complexa e houve a necessidade de utilização de cinco UDFs no FLUENT® para modelagem das reações heterogêneas, incluindo a pirólise.

Tabela 13 – Condições de contorno e operação para simulação do processo de gaseificação de biomassa.

Vazão volumétrica de ar na entrada	109 Nm ³ /h (<i>Velocity inlet</i>)
Taxa de alimentação da biomassa	60 kg/h (<i>Mass flow inlet</i>)
Fator de ar (<i>Equivalence Ratio</i>)	0,41
Pressão	1,0 atm
Condições de parede (gás e sólidos)	Sem deslizamento
Diâmetro da geometria	0,2 m
Altura da geometria	6,5 m
Modelo de turbulência	$\kappa - \epsilon$
Tratamento próximo à parede	<i>Standard Wall Functions</i>
Modelo de arraste	Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992)
Modelo de radiação	Nenhum
Temperatura de entrada da biomassa	873,15 K
Temperatura de entrada do ar	1273,15 K

Fonte: García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004); Liu (2014).

A ausência de um modelo de radiação se dá pelo fato da tentativa de minimização de divergências durante a simulação, visto que é uma simulação bastante complexa e houve a necessidade de utilização de cinco UDFs no FLUENT® para modelagem das reações heterogêneas, incluindo a pirólise.

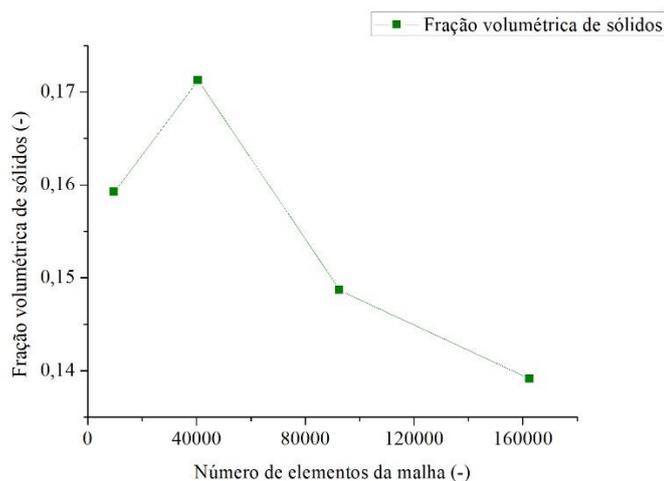
5.2.3. Teste de independência de malha

A etapa seguinte à proposição da geometria do gaseificador, bem como dos modelos e condições a serem utilizados na simulação, foi um teste para verificar a independência dos resultados de acordo com o grau de refino da malha. Devido à complexidade da modelagem cinética do processo, optou-se por realizar este teste apenas nesta etapa, para minimizar possíveis erros de convergência.

Utilizando o *software* ICEM-CDF[®] versão 14.5, pertencente ao pacote ANSYS[®], quatro malhas hexaédricas foram criadas, com os respectivos números de elementos: 9732, 40625, 92606 e 162500. As condições de operação usadas foram as mesmas aplicadas ao caso com reação química, no entanto, para aplicação do teste de malha, não foi considerada a ocorrência de reações.

Uma variável foi escolhida para avaliar os erros numéricos associados às malhas: a fração volumétrica de sólidos na saída do *riser* (valor médio). Como pode ser observado na Figura 44, não há uma à estabilização nos valores de frações volumétricas de sólidos para os diferentes números de elementos de malha. Observa-se que esta começa a se estabilizar em torno de 100000 elementos, aproximadamente. Logo, a malha de 162500 elementos foi escolhida para este trabalho, visto que uma malha mais grosseira poderia levar a resultados inconsistentes, no que se refere aos produtos das reações químicas.

Figura 44 – Monitoramento da variável para diferentes quantidades de elementos.



Fonte: Autor (2017).

5.2.4. Resultados e discussão

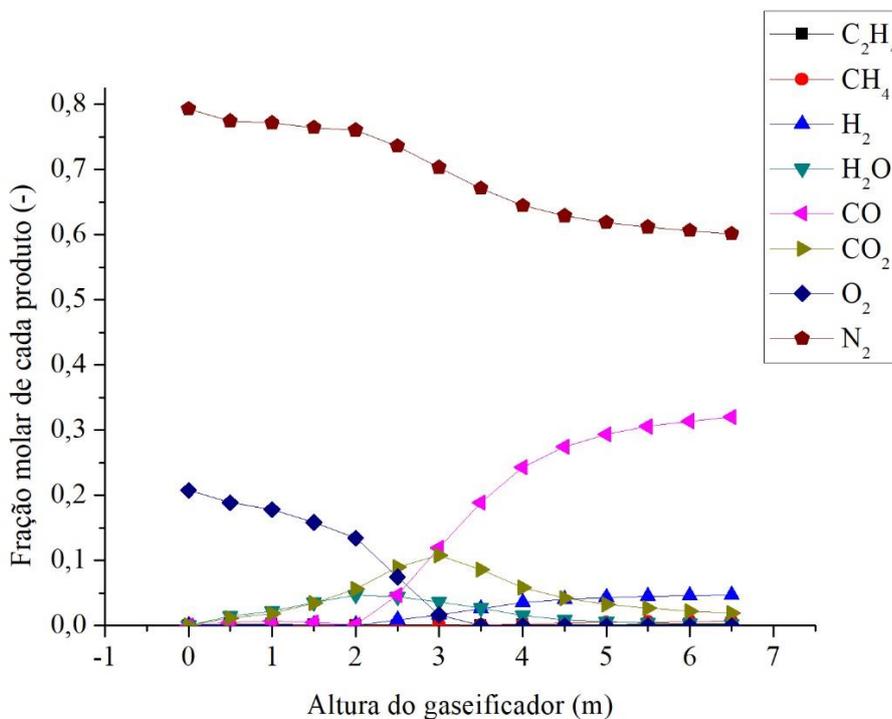
Considerando os resultados com a ocorrência de reações químicas, algumas hipóteses simplificadoras para o modelo foram assumidas, tais como: geometria em 2D; não foi considerada a formação de alcatrão no processo de pirólise; e, finalmente, a não inserção da reação de deslocamento gás-água. Primeiramente, foi testado o modelo de arraste de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), visto que é mais bem aceito na literatura e já se encontrava disponível no *software* FLUENT[®]. Os resultados obtidos referentes à fração molar dos produtos e reagentes ao longo da altura do gaseificador podem ser observados na Figura 45.

Pode-se observar, na Figura 45, que as quantidades de CH_4 e C_2H_4 obtidas são baixas. No entanto, este é um comportamento esperado, pois no processo de gaseificação a conversão destes produtos é realmente pequena (GARCÍA-IBAÑEZ; CABANILLAS; SÁNCHEZ, 2004; MIAO et al., 2013; LIU, 2014).

Em seguida, foi testado o modelo de arraste com a abordagem EMMS proposto por Shah et al. (2011), o perfil de fração molar de alguns componentes ao longo da altura está representado na Figura 46. Os perfis de fração molar das Figuras 45 e 46 foram baseados no trabalho de Liu (2014), cujos resultados podem ser vistos na Figura 47.

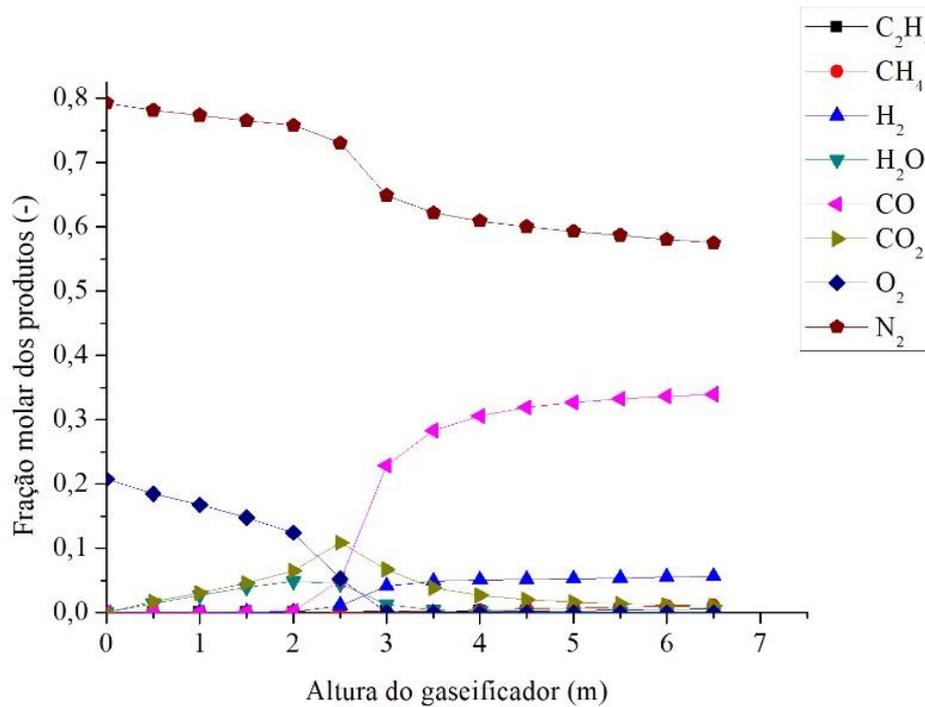
Mediante análise das Figuras 45 a 47, pode-se concluir que os modelos de arraste não tiveram influência significativa no perfil de fração molar dos produtos formados no processo de gaseificação. Isso pode ser explicado pelo fato de as reações heterogêneas, que dependem da concentração de sólidos no sistema, serem mais rápidas que as homogêneas, principalmente em ambientes de temperaturas altas, como é o caso da gaseificação. A própria pirólise, por exemplo, pode ser instantânea, dependendo da temperatura do reator. Nesta tese, foi o processo de pirólise foi considerado instantâneo.

Figura 45 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador, utilizando o modelo de Gidaspow, Bezburaah e Ding (1992).



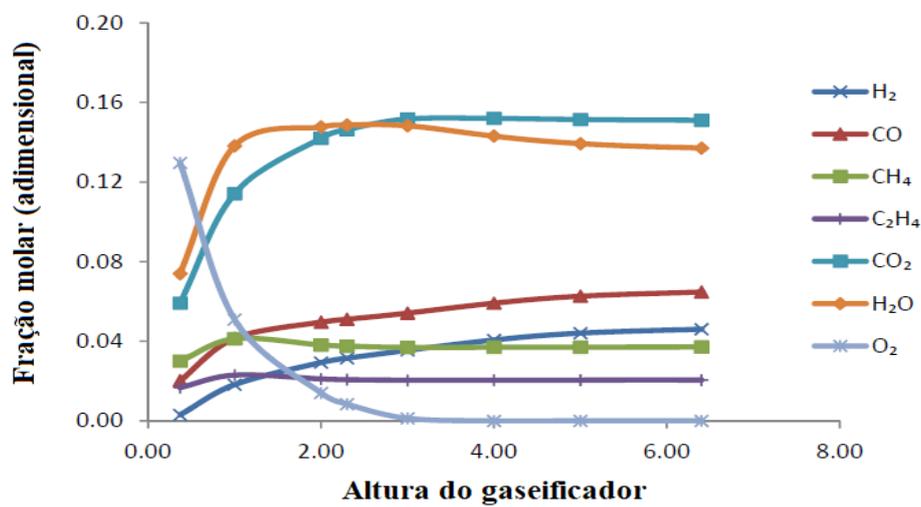
Fonte: Autor (2017).

Figura 46 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador, utilizando o modelo EMMS (SHAH, 2011).



Fonte: Autor (2017).

Figura 47 – Fração molar dos componentes ao longo da altura do gaseificador.



Fonte: Liu (2014).

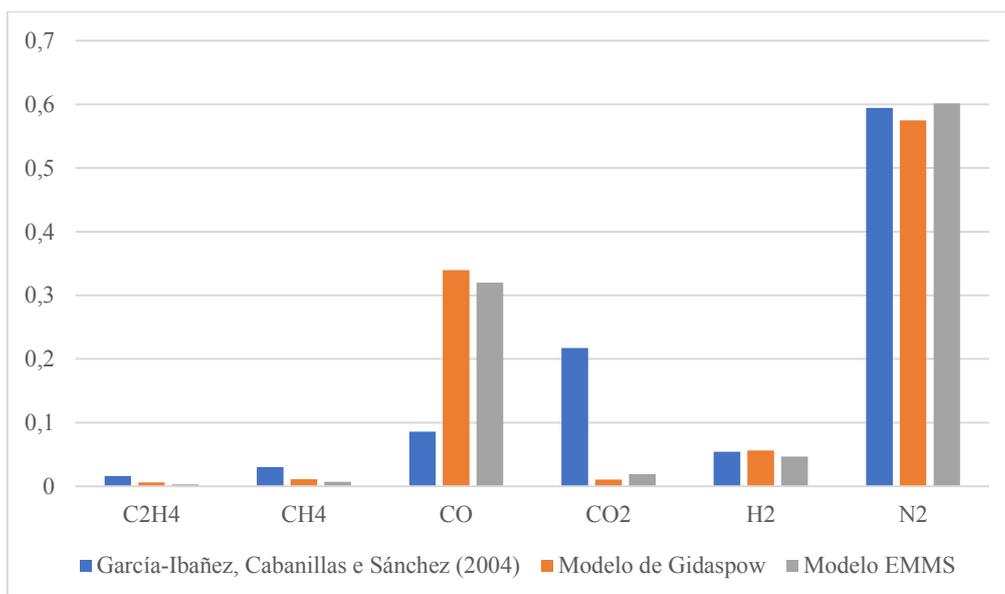
A Figura 48 mostra as composições molares dos produtos na saída do gaseificador, em comparação aos dados experimentais, já considerando a simulação com o modelo de arraste baseado na abordagem EMMS (SHAH et al., 2011). É possível observar que as frações molares de C₂H₄, CH₄, H₂ e N₂ se aproximam dos resultados encontrados na literatura. Todavia, as frações de CO e CO₂ apresentaram divergências na comparação

dos resultados. Uma das explicações possíveis para tal divergência é o fato de não se estar considerando a presença da reação de deslocamento gás-água, dada pela Equação 5.3.



Observa-se que os produtos da reação são CO_2 e H_2 , enquanto os reagentes são CO e H_2O . A fração molar de CO_2 obtida pelo modelo foi relativamente maior que a obtida através dos dados experimentais, isso pode ser explicado justamente pela ausência da reação mencionada, pois trata-se de um produto da mesma. O mesmo acontece com o CO , só que ao contrário, pois é um dos reagentes da equação. Apesar disso, o valor da fração molar de H_2 não foi afetado significativamente.

Figura 48 – Frações molares de algumas substâncias na saída do gaseificador.



Fonte: García-Ibañez, Cabanillas e Sánchez (2004) e Autor (2017).

Outros fatores que podem explicar a divergência entre os resultados do modelo e da literatura são os seguintes:

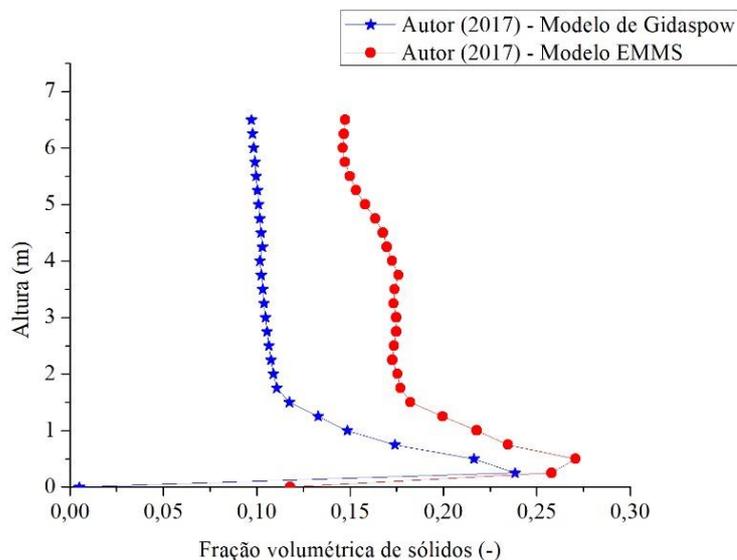
- A comparação entre uma simulação em 2D com dados experimentais obtidos em reatores em 3D sempre pode levar a erros;
- A modelagem em questão foi baseada no trabalho de Liu (2014), mas com algumas diferenças marcantes. O modelo de Liu (2014) foi desenvolvido em

ambiente 3D e simulado em estado pseudo-estacionário. Já este trabalho, o ambiente considerado foi 2D e o regime transiente;

- O modelo de pirólise mostrou-se o mais desafiador de todos, pois é o que tem menos dados disponíveis para o caso. Liu (2014) utilizou a mesma abordagem em seu trabalho, porém é desconhecido como ele calculou os coeficientes estequiométricos da reação dos voláteis. A diferença de abordagens entre o do mencionado autor e deste trabalho pode ter levado a divergências nos resultados obtidos por ambos.

Tratando-se da análise das possíveis diferenças apresentada através dos resultados da implementação dos dois modelos de arraste, nota-se pela Figura 48 que as frações molares dos produtos gerados pelo processo de gaseificação de biomassa não sofreram alterações significativas com a mudança dos modelos de arraste, o que mostra que a fluidodinâmica do processo não altera o resultado final da conversão dos reagentes em produtos. No entanto, a partir da análise da fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do *riser*, é possível observar algumas diferenças, como é apresentado na Figura 48. A fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do *riser* para os diferentes modelos de arraste testados pode ser vista na Figura 49.

Figura 49 – Fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do *riser* para diferentes modelos de arraste considerando a ocorrência de reações químicas, em 2D.



Fonte: Autor (2017).

Nota-se, a partir da análise da Figura 48, que as conclusões obtidas nos Casos 1-4, analisados previamente neste capítulo, também cabem neste caso. Como era esperado, o

modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) apresentou valores menores para a fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do que o modelo EMMS (SHAH et al., 2011).

CAPÍTULO 6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES DE TRABALHOS FUTUROS

De forma geral, a presente tese de doutorado reafirmou a eficiência da aplicação de técnicas de fluidodinâmica computacional para simulação de aspectos hidrodinâmicos e cinéticos do processo de gaseificação de biomassa, especialmente no que concerne à aplicação de diferentes modelos de arraste de partículas. As conclusões obtidas durante a realização deste projeto são apresentadas a seguir.

6.1. Casos sem reação química

O perfil de velocidade da fase sólida foi analisado para os Casos 1 e 3, bidimensionais, apresentando bons resultados quando comparados à literatura disponível. Além disso, para o Caso 1, também foi avaliada a influência do coeficiente de restituição sobre a velocidade da fase sólida, concluindo-se que o mesmo não tem tanta influência sobre a variável em questão.

Verificou-se, também, como o coeficiente de restituição poderia intervir no perfil radial de fração volumétrica de sólidos, considerando o Caso 1. Neste cenário, por outro lado, nota-se que o coeficiente é capaz de influenciar nos resultados do referido perfil, principalmente nas regiões mais próximas à parede do *riser*, onde a concentração de sólidos é maior.

As diferenças entre as simulações em 2D e em 3D não foram tão significativas no que se refere à previsão do perfil axial da fração volumétrica de sólidos, assim como ocorreu no trabalho de Cammarata et al. (2003).

Em geral, para os casos de alto ou baixo fluxo mássico de entrada de sólidos, o modelo de Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992) foi eficiente em captar o perfil axial da variável de interesse nas regiões mais diluídas do *riser*, considerando um aspecto qualitativo.

Para regiões mais densas, modelos baseados em abordagens EMMS, como os desenvolvidos por Yang et al. (2004) e adaptados por Shah et al. (2011) e Liu (2014), conseguiram prever, qualitativamente, com mais acurácia o perfil de sólidos.

Em suma, considerando o valor médio da fração volumétrica de sólidos ao longo da altura, os modelos com abordagem EMMS são mais eficientes que os modelos de

arraste convencionais, como Gidaspow, Bezburuah e Ding (1992), Gibilaro, Di Felice e Waldram (1985) e Syamlal e O'Brien (1989).

6.2. Caso com reações químicas

Conclui-se que o modelo de arraste não teve tanta influência na fração molar dos produtos do processo na saída do gaseificador. Isto pode ser explicado pelo fato da alta velocidade das reações heterogêneas do processo. Altas temperaturas podem favorecer a conversão dos reagentes em produtos nestes tipos de reação. Dessa forma, observa-se uma influência na viscosidade do fluido e, conseqüentemente, no arraste e fluidodinâmica.

Finalmente, foi estudada também a variável fração volumétrica de sólidos ao longo da altura do gaseificador. Pode-se notar que, a diferença entre os resultados apresentados pelos diferentes modelos de arraste não é tão acentuada quanto a apresentada nos casos sem reações químicas.

6.3. Sugestões de trabalhos futuros

Como sugestões para estudos em trabalhos futuros, tem-se:

- Aplicação da abordagem EMMS em modelos 3D, considerando a ocorrência das principais reações químicas presentes no processo de gaseificação de biomassa;
- Avaliação mais detalhada do papel da reação de deslocamento gás-água no processo de gaseificação de biomassa;
- Aplicação da reação mencionada anteriormente e modelagem da hidrodinâmica do gaseificador com a abordagem EMMS;
- Consideração da formação de alcatrão no processo de pirólise da biomassa e sua influência nos gases de produto, também se aplicando a abordagem EMMS;
- Verificar a influência do refinamento da malha no perfil de concentração de sólidos para o caso de diferentes modelos de arraste aplicados a simulações que considerem as reações químicas presentes no processo de gaseificação de biomassa;
- Como diferentes modelos de arraste acoplados a diferentes modelos de transferência de energia podem influenciar no rendimento dos produtos do processo de gaseificação.

REFERÊNCIAS

- ADÁNEZ, J.; GAYÁN, P. GARCÍA-LABIANO, F; de DIEGO, L. F. Axial voidage profiles in fast-fluidized beds. **Powder Technology**, v. 81, p. 259-268, 1994.
- ALMUTTAHAR, A.; TAGHIPOUR, F. Computational fluid dynamics of high density circulating fluidized bed riser: study of modeling parameters. **Powder Technology**, v. 185, p. 11-23, 2008.
- ANSYS Inc. (US). *ANSYS FLUENT 14.5 – Theory Guide*. Ansys, Inc, 2012.
- ARMELLINI, V. A. D.; COSTANZO, M. D.; CASTRO, H. C. A.; VERGEL, J. L. G.; MORI, M.; MARTIGNONI, W. P. Effect of different gas-solid drag models in a high-flux circulating fluidized bed riser. **Chemical Engineering Transactions**, v. 43, p. 1627-1632, 2015.
- ARMSTRONG, L. M.; GU, S.; LUO, K. H. Effects of limestone calcination on the gasification processes in a BFB coal gasifier. **Chemical Engineering Journal**, v. 168, p. 848-860, 2011.
- BASU, P. **Combustion and gasification in fluidized beds**. CRC Press, 2006.
- BASU, P. **Biomass gasification and pyrolysis – practical design and theory**. Estados Unidos: ELSEVIER, 2010.
- BI, H. T.; ELLIS, N.; ABBAS, I. A.; GRACE, J. R. A state-of-the-art review of gas-solid turbulent fluidization. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 4789-4825, 2000.
- BOATENG, A. A.; MTUI, P. L. CFD modeling of space-time evolution of fast pyrolysis products in a bench-scale fluidized-bed reactor. **Applied Thermal Engineering**, v. 33-34, p. 190-198, 2012.
- BRAGA, M. G. R.; GONÇALVES, J. A. S.; LOPES, G. C. Modelagem matemática e computacional de aspectos da hidrodinâmica do processo de gaseificação de biomassa. In: XXI CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 2016. Fortaleza. *Anais...* Fortaleza, 2016.
- CAMMARATA, L.; LETTIERI, P.; MICALÈ, G. D. M.; COLMAN, D. 2D and 3D CFD simulations of bubbling fluidized beds using eulerian-eulerian models. **International Journal of Chemical Reactor Engineering**, v. 1, 2003.

- CENBIO. **Comparação entre tecnologias de gaseificação de biomassa existentes no Brasil e no exterior e formação de recursos na região norte**. São Paulo – SP, 2002. Disponível em: <http://143.107.4.241/download/publicacoes/Estado_da_Arte.pdf>. Acesso em: 24 mai. 2014.
- CHAURASIA, A.; BABU, B. V. **Modeling, simulation, and optimization of pyrolysis of biomass**. Lambert Academic Publishing, 2011.
- CHENG, Y.; WEI, F.; YANG, G.; YONG, J. Inlet and outlet effects on flow patterns in gas-solid risers. **Powder Technology**, v. 98, p. 151–156, 1998.
- CHODAPANEEDI, R.; SANKE, N.; REDDY, D. N. CFD simulation of an advanced biomass gasifier. **Journal of Mechanical and Civil Engineering**, v. 1, p. 42-48, 2009.
- CLOETE, S.; AMINI, S. A fine resolution parametric study of the numerical simulation of gas-solid flows in a periodic riser section. **Powder Technology**, v. 150, p. 42-55, 2011.
- CORELLA, J.; TOLEDO, J. M.; MOLINA, G. A review on dual fluidized-bed biomass gasifiers. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 46, p. 6831-6839, 2007.
- CORTEZ, L. A. B.; LORA, E. E. S.; GÓMEZ, E. O. **Biomassa para energia**. Campinas-SP: Editora da Unicamp, 2008.
- CRUZ, E.; STEWARD, F. R.; PUGSLEY, T. New closure models for CFD modeling of high-density circulating fluidized beds. **Powder Technology**, v. 169, p. 115-122, 2006.
- DI BLASI, C. Modeling and simulation of combustion processes of charring and non-charring solid fuels. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 19, p. 71-104, 1993.
- DI BLASI, C. Modeling wood gasification in a countercurrent fixed-bed reactor. **AIChE Journal**, v. 50, p. 2306-2319, 2004.
- FAO. **Wood gas as engine fuel**, 1986. Disponível em: <<http://www.fao.org/3/a-t0512e.pdf>>. Acesso em: 04 mar. 2014.

- FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. **Computational methods for fluid dynamics**. 3 ed. Berlim: Springer, 2002. 423 p.
- FOLTIN, J. P. Avaliação da perda de carga em leito fixo de partículas irregulares utilizando xisto betuminoso, analisando a modelagem matemática através do efeito de parede e porosidade. 104 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal do Paraná, Curitiba-PR, 2013.
- FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. São Paulo: EdUSP, 2012.
- GARCIA, R. **Combustíveis e combustão industrial**. Rio de Janeiro: Interciência, 2013.
- GARCÍA-IBÁÑEZ, P.; CABANILLAS, A.; SÁNCHEZ, J. M. Gasification of leached orujillo (olive oil waste) in a pilot plant circulating fluidized bed reactor. Preliminary results. **Biomass & Bioenergy**, v. 27, p. 183-194, 2004.
- GASEIFICAÇÃO Industrial: Conteúdo de Biomassa. Disponível em: <http://ambientes.ambientebrasil.com.br/energia/biomassa/gaseificacao_industrial.html>. Acesso em: 10 jan. 2014.
- GELDART, D. Types of gas fluidization. **Powder Technology**, v. 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**, v. 89, p. 2903-2917, 2010.
- GIBILARO, L. G.; DI FELICE, R.; WALDRAM S P. Generalized Friction Factor and Drag Coefficient Correlations for Fluid-Particle Interactions. **Chemical Engineering Science**, p. 1817-1823, 1985. 40 p.
- GIDASPOW, D.; BEZBURUAH, R; DING J. Hydrodynamics of circulating fluidized bed, kinetic theory approach, in: 7th Engineering Foundation Conference on Fluidization, 1992.
- GIDASPOW, D. Multiphase flow and fluidization: continuum and kinetic theory descriptions with applications. California: Academic Press Inc, 2004.

- GÓMEZ-BAREA, A.; LECKNER, B. Modeling of biomass gasification in fluidized bed. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 36, p. 444-509, 2010.
- GORTE, R. J.; ZHAO, S. Studies of the water-gas-shift reactions with ceria-supported precious metals. **Catalysis Today**, v. 104, p. 18-24, 2005.
- GRACE, J. R.; AVIDAN, A. A.; KNOWLTON, T. M. **Circulating fluidized beds**. Londres: Chapman & Hall, 1997. 608 p.
- GUPTA, C. K.; SATHIYAMOORTHY, D. **Fluid bed technology in materials processing**. Boca Raton: CRC Press LLC, 1999.
- HERNANDEZ, J. J.; SERRANO, C.; PEREZ, J. Prediction of the autoignition delay time of producer gas from biomass gasification. **Energy & Fuels**, v. 20, p. 535-539, 2006.
- HODAPP, M. J. Simulação trifásica por técnicas de CFD da combustão de carvão mineral em leito fluidizado circulante. 2012. 192 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2012.
- HUILIN, L.; GIDASPOW D. Hydrodynamics of binary fluidization in a riser: CFD simulation using two granular temperatures. **Chemical Engineering Science**, 58, p. 3777–3792, 2003.
- ION, I. V.; POPESCU F.; ROLEA, G. G. A Biomass pyrolysis model for CFD application, **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, 111, p. 1811-1815, 2013.
- JIRADILOK, V.; GIDASPOW, D.; BREAUULT, R. W.; SHADLE, L. J.; GUENTHER, C.; SHI, S. Computational of turbulence and dispersion of cork in the NETL riser. **Chemical Engineering Science**, v. 63, p. 2135-2148, 2008.
- JOSHI, J. B. Computational flow modeling and design of bubble column reactors. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 5893-5933, 2001.
- JUSTI, G. H. Avaliação da transferência de quantidade de movimento, energia e das espécies químicas em um prato perfurado de destilação através da fluidodinâmica computacional. 2016. 160 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Federal de São Carlos, São Carlos, 2016.

- KAUSHAL, P.; PRÖLL, T.; HOFBAUER, H. Model development and validation: co-combustion of residual char, gases and volatile fuels in the fast-fluidized combustion chamber of a dual fluidized bed biomass gasifier. **Fuel**, v. 86, p. 2687-2695, 2007.
- KNOWLTON, T. M. Experimental modeling of gas-solid flow systems. In: *Workshop Latino-Americano de CFD Aplicado à Indústria de Petróleo (CFD OIL)*. Rio de Janeiro, 2005.
- KOUFOPANOS, C. A.; PAPAYANNAKOS, N.; MASCHIO, G.; LUCHESI, A. Modeling of the pyrolysis of biomass particles: studies on kinetics, thermal and heat transfer effects. **Canadian Journal of Chemical Engineering**, v. 69, p. 907-915, 1991.
- KUNII, D.; LEVENSPIEL O., **Fluidization Engineering**, Boston: Ed. Butterworth-Heinemann, Estados Unidos da América, 1991.
- LI, P.; LAN, X. Y.; XU, C. M.; WANG, G.; LU, C. X., GAO, J. S. Drag models for simulating gas-solid flow in the turbulent fluidization of FCC particles. **Particuology**, v. 7, p. 269-277, 2009.
- LI, Y.; KWAIK, M. **The dynamics of fast fluidization**. Nova Iorque: Springer US, 1980.
- LIU, Hui. **CFD modeling of biomass gasification using a circulating fluidized bed reactor**. 2014. 140 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade de Waterloo, Ontário - Canadá, 2014.
- LOPES, G. C. Estudo computacional da dinâmica do escoamento reativo em risers industriais de FCC. 2012. 129 f. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 2012.
- LOPES, G. C.; ROSA, L. M.; MORI, M.; NUNHEZ, J. R.; MARTIGNONI, W. P. CFD study of industrial FCC risers: the effect of outlet configurations on hydrodynamics and reactions. **International Journal of Chemical Engineering**, 2012.
- LORA, E. E. S.; ANDRADE, R. V.; ÁNGEL, J. D. M.; LEITE, M. A. H.; ROCHA, M. H.; SALES, C. A. V. B. de; MENDOZA, M. A. G.; CORAL, D. D. S. O. **Gaseificação e pirólise para a conversão da biomassa em eletricidade e**

- biocombustíveis.** In: LORA, E. E. S.; VENTURINI, O. J. (Org.). *Biocombustíveis*. Rio de Janeiro : Interciência, v. 2, 2012, p. 411-498.
- LU, H.; SUN, Q.; HE, Y.; SUN, Y.; DING, J.; LI, X. Numerical study of particle cluster flow in risers with cluster-based approach. **Chemical Engineering Science**, v. 60, p. 6757-6767, 2005.
- LUN, C. K. K.; SAVAGE, S. B.; JEFFREY, D. J. ; CHEPURNIY, N. Kinetic Theories for Granular Flow: Inelastic Particles in Couette Flow and Slightly Inelastic Particles in a General Flow Field. **Journal of Fluid Mechanics**, v.140, p. 223–256, 1984.
- MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2 ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2004. 453 p.
- MEI, J. S.; MONAZAM, E. R.; SHADLE, L. J. The mapping of flow regimes for a light material: cork. In: *17th International Fluidized Bed Combustion Conference*, 2003. Jacksonville, Florida. *Anais...* Florida, 2003.
- MEI, J. S.; MONAZAM, E. R.; SHADLE, L. J. Flow Regime Study of a Light Material in an Industrial Scale Cold Flow Circulating Fluidized Bed. **Journal of Energy Resource Technology**, 128, p. 129-134, 2006.
- MIAO, Q.; ZHU J.; BARGHI S.; WU C.; YIN X.; ZHOU Z. Modeling Biomass Gasification in Circulating Fluidized Beds. **Renewable Energy**, v. 50, p. 655-661, 2013.
- MILNE, T. *Pyrolysis – the thermal behavior of biomass below 600°C*. In: Biomass gasification: principles and technology. Ed. T. B. Reed, p. 91-111, 1981.
- MOURA, J.P; GAMA, P; CARDIM, G. de. **Fundamentos da combustão de biomassa em leito fluidizado circulante**, 2011. Artigo em Hypertexto. Disponível em: <http://www.infobibos.com/Artigos/2011_2/FundamentosCombustao/index.htm>. Acesso em: 31 maio 2017.
- NITZ, M.; GUARDANI, R. Fluidização gás-sólido – fundamentos e avanços. **Revista Brasileira de Engenharia Química**, p. 20-24, 2008.
- PANNALA, S.; SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. **Computational gas-solids flows and reacting systems: theory, methods and practice**. IGI Global, 2011.

- PÄRSSINEN, J. H.; ZHU, J.-X. Axial and radial solids holdup distribution in a long and high-flux CFB riser. **AIChE Journal**, v. 47, p. 2197-2205, 2001a.
- PÄRSSINEN, J. H.; ZHU, J.-X. Particle velocity and flow development in a long and high-flux circulating fluidized bed riser. **Chemical Engineering Science**, v. 56, p. 5295-5303, 2001b.
- PÄRSSINEN, J. H. Hydrodynamics of low-flux and high-flux circulating fluidized beds. PhD Thesis – Helsinki University of Technology, Espoo, Finland, 2002.
- PATEL, D. K.; SHAH, N. K.; PATEL, R. N. CFD analysis of spatial distribution of various parameters in downdraft gasifier. **Procedia Engineering**, v. 51, p. 764-769, 2013.
- PEPIOT, P.; DESJARDINS, O. Numerical analysis of the dynamics of two- and three-dimensional fluidized bed reactors using an Euler-Lagrange approach. **Powder Technology**, v. 220, p. 104-121, 2012.
- PITA, J. A.; SUNDARESAN, S. Gas-solid flow in vertical tubes. **AIChE Journal**, v. 37, p. 1009-1018, 1991.
- PITA, J. A.; SUNDARESAN, S. Developing flow of a gas-particle mixture in a vertical riser. **AIChE Journal**, v. 39, n. 4, p. 541-552, 1993.
- REED, T. B.; LEVIE, B. A simplified model of the stratified downdraft gasifier draft report. Solar Energy Research Institute, Golden Colorado, 1983.
- REED, T. B.; DAS, A. **Handbook of biomass downdraft gasifier engine systems**. The Biomass Energy Foundation Press, 1988.
- RESENDE, M. G.; GONÇALVES, J. A. S.; LOPES, G. C. Estudo preliminar da hidrodinâmica do processo de gaseificação de biomassa. In: *XXXVII CONGRESSO BRASILEIRO DE SISTEMAS PARTICULADOS*, 2015. São Carlos. *Anais...* São Carlos, 2015.
- RHODES, C.; HUTCHINGS, G. J.; WARD, A. M. Water-gas shift reaction: finding the mechanistic boundary. **Catalysis Today**, v. 23, p. 43-58, 1995.
- SÁNCHEZ, C. G. **Tecnologia da gaseificação de biomassa**. Campinas-SP: Ed. Átomo, 2010.

- SCHAEFFER, D. G. Instability in the Evolution Equations Describing Incompressible Granular Flow. **Journal of Differential Equations**, v. 66, p.19–50, 1987.
- SHAH, M. T.; UTIKAR, R. P.; TADE, M. O.; PAREEK, V. K. Hydrodynamics of an FCC Riser Using Energy Minimization Multiscale Drag Model. **Chemical Engineering Journal**, 168, p. 812-821, 2011.
- SIMMONS, G. M.; LEE, W. H. **Kinetics of gas formation from cellulose and wood pyrolysis**. In: OVEREND, R. P.; MILNE, T. A.; MUDGE, L. K. (Org.). *Fundamentals of Thermochemical Biomass Conversion*. Londres : Elsevier App. Sc. Pub., p. 385-395, 1985.
- SOFIALIDIS, D.; FALTSI, O. Simulation of biomass gasification in fluidized beds using computational fluid dynamics approach. **Thermal Science**, v. 5, p. 95-105, 2001.
- SORDI, A.; SILVA, E. P.; LOBKOV, D. D.; NETO, A. J. M.; LOPES, D. G. Gaseificação de biomassa e célula a combustível: sistema com célula tipo PEMFC. In: *ENCONTRO DE ENERGIA NO MEIO RURAL*, ano 6, Campinas: UNICAMP, 2006.
- SYAMLAL, M.; O'BRIEN, T. J. Computer simulation of bubbles in a fluidized bed. Simpósio AIChE série 85, p. 22-31, 1989.
- TINAUT, F. V.; MELGAR, A.; HORRILLO, A.; DE LA ROSA, A. D. Method for predicting the performance of an internal combustion engine fueled by producer gas and other low heating value gases. **Fuel Processing Technology**, v. 87, p. 135-142, 2006.
- TU, J.; YEOH, G. H.; LIU, C. **Computational fluid dynamics: a practical approach**. 1 ed. Oxford: Butterworth-Heinemann, 2008. 456 p.
- URNS, S. R. **Introdução à combustão: conceitos e aplicações**. Porto Alegre: AMGH, 2013. 404p.
- VAN DER MEER, E. H.; THORPE, R. B.; DAVIDSON, J. F. Flow patterns in the square cross-section riser of a circulating fluidized bed and the effect of riser exit design. **Chemical Engineering Science**, v. 55, p. 4079–4099, 2000.
- VERGEL, J. L. G. Estudo da influência da malha computacional, modelos de turbulência e aspectos numéricos da modelagem CFD em impelidores PBT usando

malhas não-estruturadas. 2013. 157 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Departamento de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 2013.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: the finite volume method**. 2 ed. Harlow: Pearson Education, 2007. 503 p.

WANG, W.; LI, J. Simulation of gas-solid two-phase flow by a multi-scale CFD approach – Extension of the EMMS model to the sub-grid level. **Chemical Engineering Science**, v. 62, p. 208-231, 2007.

WANG, X.; JIN, B.; ZHONG, W. Three-dimensional simulation of fluidized bed coal gasification. **Chemical Engineering and Processing: Process Intensification**, v. 48, p. 695-705, 2009.

WARNECKE, R. Gasification of biomass: comparison of fixed bed and fluidized bed gasifier. **Biomass and Bioenergy**, v. 18, p. 489-497, 2000.

WEINSTEIN, H.; GRAFF, R. A.; MELLER, M.; SHAO, M. J. The influence of the imposed pressure drop across a fast fluidized bed. In: *Kunii, D., Toei, R. (Org.), Fluidization, vol. IV*. Engineering Foundation, Nova Iorque, p. 299-306, 1983.

YANG, N.; WANG, W.; GE, W.; WANG, L.; LI, J. Simulation of Heterogeneous Structure in a Circulating Fluidized-Bed Riser by Combining the Two-Fluid Model with the EMMS Approach. **Industrial Engineering Chemistry Research**, 43 p. 5548-5561, 2004.

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**, v. 86, p. 722-734, 2007.

ZABANIOTOU, A. A.; KALOGIANNIS, G.; KAPPAS, E.; KARABELAS, A. J. Olive residues (cuttings and kernels) rapid pyrolysis product yields and kinetics. **Biomass & Bioenergy**, v. 18, p. 411-420, 2000.

APÊNDICE

Este apêndice traz as principais UDFs implementadas no *software* FLUENT® durante o desenvolvimento desta tese. Primeiramente, será apresentada a UDF utilizada para corrigir o perfil de velocidade da fase gasosa. Em seguida, uma sub-rotina utilizadas para implementação de um modelo de arraste que utilizou a abordagem EMMS poderá ser observada. Finalmente, a UDF implementada para o processo de pirólise de biomassa, para o caso em que ocorrem reações químicas, é apresentada.

UDF desenvolvida e implementada para correção do perfil de velocidade da fase gasosa (Caso 1 – Hidrodinâmica – Pärssinen e Zhu (2001a, 2001b) – 2D)

```
#include "udf.h"
DEFINE_PROFILE(perfil_de_velocidade, thread, position)
{
    real x[ND_ND];
    real y;
    face_t f;

    begin_f_loop(f, thread)
    {
        F_CENTROID(x, f, thread);
        y = x[1];
        F_PROFILE(f, thread, position) =
        ((2*5.5)/(0.75))*((1-(y/0.038)*(y/0.038)));
    }
    end_f_loop(f, thread)
}
```

UDF desenvolvida e implementada para modelo de arraste com abordagem EMMS para o caso de Mei, Monazam e Shadle (2006) – 2D, considerando o modelo desenvolvido por Shah et al. (2011).

Esta UDF foi desenvolvida com base na UDF presente no ANSYS FLUENT 14.5 – UDF Manual (2012), utilizada para personalizar o modelo de arraste de Syamlal e O'Brien (1989).

```
#include "udf.h"
```

```

#define pi 4.*atan(1.)
#define diam2 812.e-6

DEFINE_EXCHANGE_PROPERTY(modelo_arraste_mei,cell,mix_thread,s_col,f_col)
1)
{
  Thread *thread_g, *thread_s;
  real  x_vel_g,  x_vel_s,  y_vel_g,  y_vel_s,  abs_v,  slip_x,
slip_y,rho_g, rho_s, mu_g, reyp, res, void_g, fdrgs, k_g_s, void_s,
omega, taup;

  thread_g = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, s_col);
  thread_s = THREAD_SUB_THREAD(mix_thread, f_col);

  x_vel_g = C_U(cell, thread_g);
  y_vel_g = C_V(cell, thread_g);
  x_vel_s = C_U(cell, thread_s);
  y_vel_s = C_V(cell, thread_s);
  slip_x = x_vel_g - x_vel_s;
  slip_y = y_vel_g - y_vel_s;
  rho_g = C_R(cell, thread_g);
  rho_s = C_R(cell, thread_s);
  mu_g = C_MU_L(cell, thread_g);

  abs_v = sqrt((slip_x*slip_x) + (slip_y*slip_y));

  taup = rho_s*diam2*diam2/18./mu_g;
  void_g = C_VOF(cell, thread_g);
  void_s = C_VOF(cell, thread_s);

  reyp = rho_g * abs_v * diam2 / mu_g;
  res = void_g * reyp;

  {fdrgs = (24 / res) * (1 + 0.15 * pow(res,0.687));}

  if(void_g <= 0.78)
  {
    k_g_s = 150 * (void_s * void_s * mu_g ) / (void_g * diam2 *
diam2)+ 1.75 * ( rho_g * void_s * abs_v) / diam2 ;
  }
  else {

```

```

        if(void_g > 0.78 && void_g <= 0.86)
            omega = 0-0.03867 + 0.006893 / (4 * (void_g - 0.761)
* (void_g - 0.761) + 0.001599);
        else if(void_g>0.86 && void_g<=0.97)
            omega = 0-0.01283+0.003940/(4*(void_g-0.782)*(void_g-
0.782)+0.002711);
        else
            omega = 0-31.859+32.859*void_g;

        k_g_s = 3/4 * fdrgs * ((void_g *void_s *rho_g *abs_v) /
diam2) * omega;
    }

    return k_g_s;

}

```

UDFs desenvolvidas e implementadas para o caso com reação química para o processo de pirólise de biomassa

A seguinte UDF foi desenvolvida com base na UDF presente no Tutorial 18 – Modeling Heterogeneous Reactions with Eulerian-Granular Flow (ANSYS FLUENT 13.0 – Tutorial Guide) e no modelo de pirólise aplicado no trabalho de Liu (2014).

```

DEFINE_HET_RXN_RATE(pirolise,c,t,hr,mw,yi,rr,rr_t)
{
    Thread **pt = THREAD_SUB_THREADS(t);
    Thread *tp = pt[0]; /* gas phase */
    Thread *ts = pt[1]; /* solid phase */

    real prod;
    real x0_star = 0., x_star =0.;
    real T = MAX(273.,C_T(c,ts));
    real T_SAT = 373.15;

    *rr = 0;
    prod =0.;
    if(T>TMAX) T = TMAX;
    if(T > T_SAT)

```

```

    {
        if(C_VOF(c,          tp)          <          eps_g_small          &&
yi[INDEX_PHASE_VOL][INDEX_SPECIES_VOL] > spe_small)
        {
            prod          =          (yi[INDEX_PHASE_VOL][INDEX_SPECIES_VOL]-
x_star)*C_R(c,ts)/mw[INDEX_PHASE_VOL][INDEX_SPECIES_VOL];

            *rr = 0.01 * c_devol_pre * Arrhenius_devolatilization *
pow(T, -1.2) *
                exp(-          c_devol_exp          *
E_Activation_devolatilization/(UNIVERSAL_GAS_CONSTANT * T))
            * prod * C_VOF(c, ts); /* kmol/(m3.s) */
        }
    }
}

```