



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

**Estudo da gaseificação de biomassa em reator co- corrente de  
duplo estágio mediante análises experimentais e modelagem  
com ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional**

**Diego Mauricio Yepes Maya**

Dezembro de 2016

Itajubá, MG – Brasil

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

Diego Mauricio Yepes Maya

**Estudo da gaseificação de biomassa em reator co- corrente de duplo estágio mediante análises experimentais e modelagem com ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional**

Tese submetida ao programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Engenharia Mecânica

Área de concentração:

Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora

Co-orientador: Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade

Dezembro de 2016

Itajubá, MG – Brasil

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

Diego Mauricio Yepes Maya

**Estudo da gaseificação de biomassa em reator co- corrente de  
duplo estágio mediante análises experimentais e modelagem  
com ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional**

Tese aprovada por banca examinadora em 15 de  
dezembro de 2016, conferindo ao autor o título de  
Doutor em Ciências em Engenharia Mecânica.

Banca examinadora:

Prof. Dr. Edgardo Olivares Gómez - UFGD

Prof. Dr. Albert Ratner - UIOWA

Prof. Dr. Arnaldo Martín Martínez – UNIFEI

Prof. Dr. José Carlos Escobar Palácio – UNIFEI

Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade – UNIFEI (Co-orientador)

Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora – UNIFEI (Orientador)

Itajubá, MG – Brasil

2016

## **Dedicatória**

*A mis padres, Elpidia, Humberto y Oliva; y mis hermanos todos. Gracias por la fuerza y fé.*

*A mi séquito.*

## Agradecimentos

Agradeço a Deus por me acompanhar nesta viagem no mais profundo do meu entendimento, por ser a força que mora em cada um de nós, e por cuidar de minha família justo nos instantes certos, no momento certo, do jeito certo. Obrigado Deus!

Agradeço a minha tia Elpidia, aos meus pais Humberto e Oliva, aos meus irmãos Juan E., Andrés, Eliana, Edwin, Juan F., David e Daniel. Peço me desculpem pelos momentos que não passamos juntos e a toda minha família que me acompanha nesta viagem.

A Angie. Obrigado pelo amor e companhia nestes dias juntos, especialmente os últimos que tiraram o melhor e pior de nós nesta caminhada que apenas começa.

Ao meu orientador, Prof. Dr. Electo Silva Lora, e ao meu co-orientador Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade, por me ajudarem na construção desta pesquisa, pelas orientações e sugestões.

Ao Prof. Dr. Arnaldo Martín Martínez Reyes e a sua esposa Prof. Ester pelos prazerosos momentos de conversa, debate, orientação e amizade.

Ao Prof. Dr. Lourival Jorge Mendes Neto pelas conversas em torno as ferramentas de CFD. E ao mestre Carlos Andrés Aguirre, especialista em geração de malhas pelas dicas e ajuda sempre oportuna.

Aos Prof. Dr. Edgardo Olivares Gómez, Profa. Dra. Yurany Camacho Ardila, Prof. Dr. Albert Ratner e ao Prof. Dr. José Carlos Escobar Palacio por aceitar o convite e participarem desta pesquisa e por suas sempre oportunas e construtivas orientações.

Aos meus colegas do Grupo de pesquisa em Geração Termelétrica e Distribuída NEST-UNIFEI: Dimas, Aldemar, Felipe, Ana, Sebastian, Gaylord, Cristina, Martha, Camila, Mateus, Arquimedes e tantos outros colegas, obrigado pela amizade e irmandade. E aos colegas de outros departamentos e institutos que de uma ou outra forma sempre contribuíram nesta tarefa.

Ao meus colegas e amigos do grupo de pesquisa em *Termodinámica aplicada y energías alternativas* TAYEA, da Universidade Nacional da Colômbia, sede Medellín, pela amizade que permanece.

Ao programa de pós-graduação em engenharia mecânica, ao Instituto de Engenharia Mecânica, e ao DRA da UNIFEI por estar sempre por perto.

Agradeço à CAPES, ao CNPQ e à FAPEMIG, através dos seus programas de bolsas de estudo pelo apoio financeiro. E ao Brasil por ter me acolhido e ser muito mais que uma escola.

*... o botão de “stop” da complexa máquina do tempo deverá ser acionado pela mais poderosa e pouco domável de todas as energias. A energia mental do usuário.*

***Augusto Cury***

*De que le sirve a un hombre ganar el mundo si pierde la vida?*

***Evangelio de San Mateo***

## Resumo

**YEPES MAYA, D. M. (2016)**, *Estudo da gaseificação de biomassa em reator co-corrente de duplo estágio mediante análises experimentais e modelagem com ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional*, Itajubá, 113 p. Tese (Doutorado em Engenharia Mecânica. Área de concentração: Térmica, Fluidos e Máquinas de Fluxo) – Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Este trabalho apresenta o estudo do comportamento de um gaseificador tipo co-corrente de duplo estágio utilizando biomassa de rejeito como combustível e misturas de reagentes. Inicialmente foi feita uma caracterização físico – química de combustíveis derivados e resíduos e outras biomassas a fim caracteriza-los no processo de gaseificação. Posteriormente foram realizados testes experimentais de gaseificação de biomassa em um reator co-corrente de duplo estágio instalado no laboratório de gaseificação do Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída – NEST da Universidade Federal de Itajubá, MG - UNIFEI. Na sequência foram analisados os produtos da gaseificação onde utilizou-se ar, ar + vapor e oxigênio + vapor como reagentes dentro do processo com o intuito de utilizar as informações geradas para as simulações por Dinâmica dos Fluidos Computacional e posterior validação. Em seguida foi definido o modelo do gaseificador composto por um meio poroso, e definidas as condições de contorno e as configurações dos diferentes parâmetros que representam o fenômeno da gaseificação em leito fixo co-corrente de duplo estágio. Para as simulações foram escolhidas as ferramentas ANSYS-ICEM®, ANSYS-FLUENT® e ANSYS-CFD POST® para geração da geometria e da malha, solução numérica do processo e pós processamento dos resultados respectivamente. Os casos de estudo foram validados com dados experimentais para as melhores condições operacionais do reator selecionado considerando uma relação de equivalência  $RE=0,35$  como aquela em que o gás produzido apresenta o maior poder calorífico inferior. Da avaliação das simulações frente aos dados experimentais conclui-se que o modelo representa o fenômeno da gaseificação de biomassa em reator co-corrente de duplo estágio com uma significância estatística superior ao 95% baseada no desvio padrão e a variância dos dados das simulações contra os dados experimentais.

Este estudo constitui-se uma ferramenta útil para estudar gaseificadores de leito fixo utilizando diferentes combustíveis sólidos e o uso de diferentes reagentes. Permite fazer prognósticos para a formação das espécies nos produtos da gaseificação, perfis de temperatura, pressão e velocidades ao longo do leito.

### Palavras-chave:

Gaseificação, Co-corrente, Biomassa, Combustível Derivado de Resíduos (CDR), Dinâmica dos Fluidos Computacional, Função de densidade de probabilidade (PDF), Energia de resíduos (WTE)

## **Abstract**

**YEPES MAYA, D. M. (2016)**, *Study of biomass gasification in dual stage downdraft reactor by experimental analysis and modeling with tools of Computational Fluid Dynamics, Itajubá, 113 p. PhD. Thesis (Doctorate in Mechanical Engineering concentration area: Thermal, Fluids and Flow Machines) - Institute of Mechanical Engineering, Federal University of Itajubá.*

*This work discusses the behavior of a two-stage downdraft gasifier fed with biomass wastes and mixtures of reagents. Initially, the pertinent physical and chemical characteristics of waste- or biomass-derived fuels were studied. Experiments were then performed on a two-stage downdraft gasifier installed at the Center of Excellence in Thermolectric and Distributed Generation - NEST at the Federal University of Itajubá, UNIFEI, Minas Gerais, Brazil. The gasification products resulting from feeds of pure air, air and steam, and steam and oxygen were analyzed. Following the reactor was set model comprising as a porous media, and set the boundary conditions and settings of the various parameters that represent the gasification phenomenon in a double stage downdraft system. These processes were simulated using ANSYS-ICEM®, ANSYS-FLUENT® and ANSYS CFD-POST® to generate geometry and mesh, numerical solution of the process and post processing results respectively. The cases studied were validated with experimental data for the best operating conditions considering an equivalence ratio,  $ER = 0.35$  as one in which the synthesis gas has the highest lower calorific value. Simulations agreed with the experimental, suggesting that the simulation approach is sufficiently accurate to model fixed-bed gasifiers using different solid fuels and different reagents, greater than 95% of statistical significance based on the standard deviation and the variance of the simulations versus the experimental data. This study is a useful tool to analyze fixed bed gasifiers using different solid fuels and use different reagents. It allows to make prognostics for the formation of the gaseous species in the producer gas, profiles of temperature, pressure and speeds along the bed.*

### **Keywords:**

*Gasification, Downdraft, Two-Stage Downdraft Gasifier, Biomass, Refuse Derived Fuel (RDF), Computational Fluid Dynamics, Probability density function (PDF), Waste to Energy (WTE)*

## Sumario

CAPÍTULO 1 PROPOSTA DA TESE -----	8
1.1 Introdução-----	8
1.2 Motivação e alcance do presente trabalho-----	9
1.3 Hipótese da tese -----	11
1.4 Objetivos -----	11
1.5 Contribuição do trabalho no âmbito científico -----	12
1.6 Organização do trabalho-----	12
CAPÍTULO 2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA-----	13
2.1 Princípios básicos da gaseificação de biomassa. -----	13
2.2 Caracterização e obtenção de combustíveis derivados de resíduos - CDR	16
2.3 Gaseificação de CDR em duplo estágio -----	19
2.4 Dinâmica de Fluidos Computacional aplicada à gaseificação de leito fixo co-corrente	22
CAPÍTULO 3 MODELAGEM EM CFD DO PROCESSO DE GASEIFICAÇÃO DE BIOMASSA EM UM REATOR CO-CORRENTE DE DUPLO ESTÁGIO -----	33
3.1 Modelo conceitual proposto-----	33
3.2 Domínio Computacional para gaseificação co-corrente de duplo estágio -	35
3.2.1 Considerações Teóricas -----	35
3.2.2 Geometria e volume de controle-----	37
3.2.3 Discretização Espacial – Malha-----	38
3.3 Condições de contorno no volume de controle e outras considerações nas simulações	42
3.3.1 Modelo matemático utilizado -----	43
3.3.2 Resumo generalizado das simulações-----	55

CAPÍTULO 4 TESTES EXPERIMENTAIS DE GASEIFICAÇÃO DE	
BIOMASSA NUM REATOR CO – CORRENTE DE DUPLO ESTÁGIO -----	58
4.1 Materiais: Análise elementar e imediata-----	58
4.2 Características do gaseificador co-corrente de duplo estágio -----	60
4.3 Procedimento operacional e arranjo dos testes no gaseificador -----	61
4.4 Composição do gás produzido e perfis de temperatura -----	64
CAPÍTULO 5 RESULTADOS ----- 66	
5.1 Resultados dos testes experimentais -----	66
5.1.1 Testes com Ar, Ar + Vapor e Vapor + Oxigênio como reagentes de gaseificação. 67	
5.2 Resultados das simulações-----	70
5.2.1 Temperaturas atingidas no reator-----	71
5.2.2 Velocidade superficial do gás -----	76
5.2.3 Fração molar de hidrogênio -----	78
5.2.4 Fração molar de Metano -----	79
5.2.5 Fração molar de Monóxido de carbono-----	80
5.2.6 Redução do leito de biomassa durante o processo -----	81
5.2.7 Validação das simulações a partir das espécies no gás produzido ----	84
5.2.8 Poder Calorífico Inferior dos produtos da gaseificação -----	88
5.2.9 Resultados das simulações por CFD e dados experimentais desta pesquisa 89	
CAPÍTULO 6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES ----- 91	
6.1 Conclusões -----	91
6.2 Sugestões para trabalhos futuros-----	93
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS----- 94	
Apêndice A. Código ANSYS FLUENT® para o caso base 12 kg/h biomassa tipo CDR, RE=0,35 em reator de duplo estágio -----	101

## Lista de Figuras

Figura 2-1 Esquema de um gaseificador co-corrente e perfis típicos de temperatura no leito [32].	15
Figura 2-2 Composição de RSU para diferentes regiões do mundo [44]	17
Figura 2-3 Esquema de produção dos CDR [54]	19
Figura 2-4 Representação esquemática simplificada das principais rotas de aproveitamento energético da biomassa [46]	19
Figura 2-5 Esquema de um gaseificador co-corrente de duplo estágio [24]	21
Figura 2-6 Esquema da gaseificação em duplo estágio, adaptado de [14]	21
Figura 2-7 Diagrama conceitual da modelagem CFD para gaseificação de biomassa. Fonte: Adaptação de [60]e[61]	23
Figura 3-1 Modelo conceitual simplificado do gaseificador co-corrente de dois estágios	35
Figura 3-2 Resumo do procedimento para solução de problemas utilizando Dinâmica de fluidos computacional	36
Figura 3-3 Esquema do gaseificador e volume de controle 3D definido	37
Figura 3-4 Terminologia de elementos de malha [90]	39
Figura 3-5 Elementos de malha [90], [91]	39
Figura 3-6 Malha elaborada para o volume de controle, detalhes do refinamento	42
Figura 3-7 Representação da função de densidade de probabilidade	54
Figura 3-8 Representação 3D de uma função de densidade de probabilidade específica	55
Figura 3-9 Esquema de discretização do método SIMPLE	57
Figura 4-1 Biomassas utilizadas nos testes experimentais	59
Figura 4-2 Gaseificador co-corrente no laboratório do NEST-UNIFEI	61
Figura 5-1 Dados das vazões mássicas de reagentes e RE - biomassa 12 kg/h	67
Figura 5-2 Evolução de espécies da gaseificação e fluxos de reagentes utilizados - biomassa 12kg/h	68
Figura 5-3 Vasões mássicos de reagente e Poder calorífico inferior do gás produzido - biomassa 12 kg/h	69
Figura 5-4 Relação de temperaturas máximas obtidas experimentalmente em conjunto com vazões mássicas de reagente - biomassa 12kg/h	70

Figura 5-5 Temperaturas atingidas no reator para gaseificação co-corrente em duplo estágio com diferentes reagentes e regime permanente, ER=0,35 - biomassa 12 kg/h - 72	72
Figura 5-6 Comparação das temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD-----	74
Figura 5-7 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Ar -----	74
Figura 5-8 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Ar_Vapor -----	75
Figura 5-9 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Oxigenio_Vapor -----	76
Figura 5-10 Velocidade superficial do gás no reator para gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h-----	77
Figura 5-11 Fração molar de Hidrogênio da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h -----	78
Figura 5-12 Fração molar de Metano da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h-----	79
Figura 5-13 Fração molar de Monóxido de carbono da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h-----	80
Figura 5-14 Redução do leito em t=0 min-----	81
Figura 5-15 Redução do leito em t=5 min -----	81
Figura 5-16 Redução do leito em t=10 min -----	82
Figura 5-17 Redução do leito em t=15 min -----	82
Figura 5-18 Redução do leito em t=20 min -----	82
Figura 5-19 Redução do leito em t=25 min -----	82
Figura 5-20 Redução do leito em t=30 min -----	83
Figura 5-21 Redução do leito em t=35 min -----	83
Figura 5-22 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Ar. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT® -----	85
Figura 5-23 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Ar + Vapor. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT®-----	86

- Figura 5-24 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Vapor + Oxigênio. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT® ----- 87
- Figura 5-23 Poder Calorífico Inferior dos produtos da gaseificação. Resultados experimentais e simulações CFD em ANSYS FLUENT® ----- 88

## Lista de Tabelas

Tabela 2-1 Reações básicas no processo de gaseificação de biomassa -----	14
Tabela 2-2 Resumo dos trabalhos com simulação por ferramentas CFD -----	31
Tabela 3-1 Expressões cinéticas para as reações heterogêneas-----	52
Tabela 3-2 Expressões cinéticas para as reações homogêneas na fase gasosa -----	53
Tabela 3-3 Condições gerais das simulações da gaseificação para o caso base-----	56
Tabela 4-1 Análise Elementar e imediata de CDR, Eucalipto e Capim. (base seca) ----	60
Tabela 4-2 Resumo das condições operacionais do gaseificador -----	64
Tabela 4-3 Tabela de experimentos com diferentes reagentes.-----	64
Tabela 5-1 Resumo dos testes experimentais com biomassa de eucalipto em briquetes, biomassa de eucalipto em pedaços e as simulações CFD. -----	90

## Lista de Símbolos

### Siglas, Subscritos

ANEEL	Agência Nacional de Energia Elétrica
AIT	<i>Asian Institute of Technology</i>
BEN	Balanço Energético Nacional
BIG-GT	<i>Biomass Integrated Gasifier - Gas Turbine</i>
BTL	<i>Biomass to Liquid</i>
bu	Base úmida
C	Carbono
CF	Carbono Fixo
CDR	Combustível derivado de resíduos
CH <sub>4</sub>	Metano
CO	Monóxido de Carbono
CO <sub>2</sub>	Dióxido de Carbono
cp	Calor específico a pressão constante
cp <sub>H<sub>2</sub>O</sub>	Calor específico da água
GR	<i>Gasifying Ratio</i>
H <sub>2</sub>	Hidrogênio
H <sub>2</sub> O	Água
mcomb	Massa de combustível
mH <sub>2</sub> O	Massa de água da biomassa
MME	Ministério de Minas e Energia
N <sub>2</sub>	Nitrogênio
NEST	Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída
NO <sub>x</sub>	Óxidos de nitrogênio
NREL	<i>National Renewable Energy Laboratory</i>
PCI	Poder calorífico inferior
PCS	Poder calorífico superior
PNUMA	Programa das Nações Unidas para o Meio Ambiente
R (A/C) esteq	Relação ar/combustível estequiométrica
R (A/C) real	Relação ar/combustível real
Ra	Razão de distribuição de ar nos estágios
RE	Razão de Equivalência
RSU	Resíduos Sólidos Urbanos
SBR	<i>Steam-to-Biomass Ratio</i>
T	Temperatura
TGA	<i>Thermogravimetric analyser</i>
V	Voláteis
V <sub>ar</sub>	Volume de ar
V <sub>g</sub>	Volume de gás
V <sub>O<sub>2</sub></sub>	Volume teórico de oxigênio

# Capítulo 1 Proposta da tese

## 1.1 Introdução

A geração de resíduos sólidos urbanos e seu destino final são um dos grandes problemas ambientais da atualidade. O aumento na geração decorrente dentre outros fatores do processo de expansão e urbanização das cidades vem se tornando cada vez mais um desafio tecnológico. Conforme o crescimento das populações vem em aumento o consumo energético e em consequência o aumento na dependência de todo tipo de combustíveis [1].

Uma perspectiva tecnológica promissora hoje é a valorização de todo tipo de resíduos, um processo que envolve a seleção na fonte, em combinação com a reciclagem de materiais e conversão de resíduos em energia [2].

Brasil é um dos países de maior extensão geográfica e com aproximadamente 210,49 milhões de habitantes é um dos mais populosos [3], posiciona-se dentro do grupo de países com renda média-alta. Como país industrializado enfrenta a necessidade de novas fontes de energia pois o consumo de energia reportado segundo o Balanço Energético Nacional-2016 foi de 465203 Gigawatts-hora (GWh), por outro lado precisa de uma disposição adequada dos resíduos sólidos urbanos. Este último ponto apresenta especial interesse desde o ponto de vista ambiental e tecnológico [4].

O mundo, para a transformação de resíduos sólidos urbanos (RSU), biomassa virgem o de rejeito e outros resíduos em energia elétrica, existem alternativas tecnológicas

consolidadas, e outras ainda em desenvolvimento [5]. Uma das alternativas menos exploradas, mas com alto potencial para o aproveitamento dos RSU, é a gaseificação, com aplicação preferencial em conglomerados urbanos pequenos e médios. A tecnologia de gaseificação é uma forma de conversão de energia onde é possível a utilização de materiais residuais para geração de potência [6]–[12].

O processo de gaseificação produz um gás de baixo poder calorífico se comparado ao gás natural, entretanto com a utilização de outros agentes de gaseificação como o vapor e oxigênio pode-se melhorar a qualidade desse gás e utilizá-lo em motores ou turbinas a gás para a geração de energia elétrica [13],[14].

A gaseificação apresenta como vantagem em relação à queima direta de biomassa sólida, gás de síntese que pode ser utilizado produzindo menores emissões de poluentes, sendo facilmente distribuído, é mais adequado ao uso doméstico, a sua queima é mais facilmente controlada. As principais desvantagens residem no fato da utilização de uma tecnologia mais complicada do que a da queima direta, por exemplo para a sua operação e manutenção [5].

## 1.2 Motivação e alcance do presente trabalho

De acordo com a associação brasileira de normas técnicas ABNT a qual instituiu a Política Nacional de Resíduos Sólidos e altera a lei Nº 9.605/1998 no capítulo II pela Lei Nº12.305/2010: “São definidos como RSU<sup>1</sup>, restos de alimentos, sacolas plásticas, frascos, papéis em geral, roupas, restos de podas, restos de feiras como: frutas, legumes, verduras em geral, e outros materiais orgânicos e não orgânicos”. Segundo a primeira promulgação da Política Nacional de Resíduos Sólidos do Brasil [15], os RSU não incluem resíduos hospitalares, industriais, perigosos ou radioativos. Segundo o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), no Brasil, a quantidade gerada de RSU chega aproximadamente 209.208 toneladas por dia e, tem como destino final lixões a céu aberto (17,7%), aterros sanitários (58,1%) e aterros controlados (24,2%) [16]–[19].

Do ponto de vista da geração de eletricidade, o Plano Nacional de Energia (PNE), na avaliação de cenários futuros de geração de energia, até 2030 [20], considera o

---

<sup>1</sup> (RSU: nome genérico para qualquer tipo de resíduos domésticos gerados rotineiramente) [23].

aproveitamento do potencial energético dos RSU na composição da matriz energética nacional já que apresenta vantagens socioambientais e econômicas.

A composição dos RSU é variada e heterogênea, podendo se classificar em grandes categorias como: vidros, metais, plásticos, papéis, têxteis, madeiras, resíduos de comida e resíduos de jardinagem [5], [7], [21].

Produto de processos de separação, reciclagem e aproveitamento de RSU surgem os combustíveis derivados de resíduos (CDR), os quais apresentam uma maior homogeneidade e posteriormente um melhor aproveitamento [22].

Quanto à gaseificação de biomassa e outros combustíveis residuais para geração de eletricidade como energia renovável, está vinculada a geração distribuída que contempla o uso de sistemas descentralizados modulares, próximos ao usuário final, com capacidades de até 100 kW [23]. Neste contexto, diferentes grupos de pesquisa no Brasil, dentre eles, o Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída (NEST), da Universidade Federal de Itajubá, tem desenvolvido vários trabalhos na área de gaseificação, especialmente de biomassa, que incluem pesquisas experimentais de gaseificação em leito fixo de duplo estágio [14],[24],[25] e em leito fluidizado [26], [27], e estudos teóricos da gaseificação em leito fixo [28] e leito fluidizado [24]. Os estudos anteriores foram focados nas condições de operação dos sistemas, composição do gás produzido e das metodologias de projeto dos gaseificadores ou plantas piloto.

Já utilizando modelagem de equilíbrio químico, no mesmo grupo de pesquisa foram desenvolvidos três trabalhos utilizando softwares comerciais como ferramenta para a solução dos modelos, foram eles: Simulação de uma planta Piloto de gaseificação de combustíveis derivados de resíduos utilizando o software Aspen Plus® [22], avaliação técnica de biorrefinarias para produção de combustíveis líquidos e eletricidade a partir da gaseificação de biomassa [29] e um outro trabalho utilizando o software livre Scilab® foi feita a modelagem de um gaseificador co-corrente utilizando diferentes fluidos de gaseificação [30].

Segundo a revisão da literatura (A qual será aprofundada no capítulo 2), várias pesquisas têm sido desenvolvidas no estudo da modelagem matemática dos fenômenos físico-químicos, fluido mecânicos e térmicos que acontecem dentro do reator para gaseificação, porém vislumbrasse a necessidade de estudar a possibilidade de utilizar ferramentas CFD para a simulação dos modelos que representam o comportamento de gaseificadores de tipo co-corrente de duplo estágio e a utilização de diferentes reagentes como foco de pesquisa.

### 1.3 Hipótese da tese

A partir de dados experimentais, é possível obter informações básicas do fenômeno da gaseificação de biomassa em um reator de leito fixo para estabelecer um modelo que permita simular o comportamento de um gaseificador co-corrente de duplo estágio utilizado biomassa de resíduos como combustível e diferentes misturas de reagentes, que possa ser resolvido utilizando ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional e avaliar o comportamento fluido mecânico, térmico e físico-químico do reator.

### 1.4 Objetivos

Modelar o comportamento de um gaseificador tipo co-corrente de duplo estágio alimentado com biomassa de resíduos e misturas de reagentes para gaseificação, utilizando ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD).

Outros objetivos decorrentes do objetivo principal são:

- Caracterizar física e quimicamente diferentes tipos de biomassa de rejeito como combustível para um processo de gaseificação.
- Analisar experimentalmente a composição do gás produzido com biomassa de rejeito para diferentes agentes de gaseificação.
- Utilizar um código CFD, para simular o comportamento da gaseificação co-corrente de duplo estágio com biomassa de rejeito e diferentes reagentes de gaseificação.
- Validar o modelo numérico com dados experimentais próprios neste trabalho.

## **1.5 Contribuição do trabalho no âmbito científico**

Propõe-se uma primeira caracterização de combustíveis (análise elementar, imediata e poder calorífico inferior) a partir de biomassas de rejeito com o intuito de conhecer suas propriedades físicas e químicas, e fornecer assim informações para as bases de dados qualificadas. Posteriormente, a realização de testes experimentais procura estabelecer parâmetros operacionais padrão quando se utilizam diferentes reagentes num reator de leito fixo co-corrente de duplo estágio.

Por fim, propõe-se um modelo que aproveitará quanto parâmetros padrão estabelecidos experimentalmente tanto como a incorporação de novos combustíveis gerados a partir da análise elementar e imediata de biomassa de rejeito, coligando-os com a utilização de ferramentas CFD e incorporando-os num software comercial para simular diferentes condições operacionais de um reator de duplo estágio. Por tanto, este estudo visa prover informações da gaseificação de biomassa na busca de reduzir custos computacionais e gerar informações dos produtos gasosos, velocidade superficial dos gases gerados e dos perfis de temperatura e pressões dentre outras características.

## **1.6 Organização do trabalho**

A tese está dividida em 6 capítulos. O capítulo 1 inclui a parte preliminar e motivação da pesquisa. O Capítulo 2 inclui a fundamentação teórica, o estado da arte da gaseificação de biomassa de rejeito com destaque em combustíveis derivados de resíduos em reatores de duplo estágio. Além disso, no mesmo capítulo é feita uma revisão da modelagem da gaseificação focado nos estudos de Dinâmica de Fluidos Computacional. Das conclusões e fatos no estado da arte, surgem os detalhes da configuração e modelagem do processo de gaseificação, os quais são apresentados no Capítulo 3, junto com as considerações da modelagem baseada em ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional. Já os equipamentos para os testes experimentais, as configurações dos mesmos e as condições de operação do reator de duplo estágio são descritos no capítulo 4. No capítulo 5, são apresentados os resultados tanto dos testes experimentais, quanto das simulações, a validação e a discussão proposta. Por fim, o capítulo 6, apresenta as principais conclusões desta pesquisa e sugestões para trabalhos futuros.

## **Capítulo 2 Revisão bibliográfica**

Neste capítulo são tratados os conceitos básicos da gaseificação de biomassa, com especial atenção em reatores de leito fixo, se faz ênfase nos gaseificadores de duplo estágio como equipamento escolhido desta pesquisa por apresentar vantagens técnicas quando comparado com configurações mais simples.

Explica-se o conceito de combustível derivado de resíduo (CDR) como matéria prima gerada a partir dos processos de aproveitamento de resíduos sólidos urbanos, assim como outras biomassas de rejeito e a sua importância como potencial recurso energético.

Posteriormente são discutidos os trabalhos reportados na literatura em matéria de modelagem do processo de gaseificação em leito fixo, utilizando ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional.

### **2.1 Princípios básicos da gaseificação de biomassa.**

A gaseificação é um processo termoquímico onde materiais carbonáceos sólidos ou líquidos contendo carbono, hidrogênio, oxigênio e uma variedade de constituintes orgânicos e inorgânicos, são convertidos através da oxidação parcial em um gás combustível [11], [13].

O agente oxidante pode ser ar, oxigênio, vapor de água ou até misturas dos mesmos. O gás produzido é um gás de baixo poder calorífico em torno de 4-7 MJ/Nm<sup>3</sup> (se o agente oxidante for ar) ou 10-18 MJ/Nm<sup>3</sup> (se o agente oxidante for oxigênio ou vapor). Devido a esse baixo poder calorífico o gás resultante do processo de gaseificação é denominado de gás pobre. Na sua composição está presente monóxido de carbono (CO), Dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>), hidrogênio (H<sub>2</sub>), Metano (CH<sub>4</sub>), e nitrogênio (N<sub>2</sub>) entre outras espécies químicas gasosas e vários contaminantes como particulados e alcatrão [27].

Um reator para gaseificação é chamado de gaseificador, dentro dele o processo de gaseificação se dá em zonas, que são definidas pela diferença de temperatura do processo e classificadas em: secagem, pirólise, combustão e redução ou gaseificação. A secagem, é a eliminação da água presente no combustível, que acontece por completo a partir dos 100°C; a pirólise é a termo decomposição da biomassa na ausência de oxigênio que ocorre a temperatura entre 280 e 450 °C [31]. A oxidação se dá a temperaturas da ordem 700 a 1800°C e é caracterizada pela liberação de energia na forma de calor, necessária para o desenvolvimento dos diferentes processos exotérmicos. O oxigênio do agente oxidante reage com o carbono e o hidrogênio do combustível resultando em dióxido de carbono e vapor d'água [32]. A redução é uma zona onde acontecem em sua maioria reações endotérmicas numa faixa de temperaturas da ordem de 800 até 1100°C. As principais reações que ocorrem na zona de redução são apresentadas nas equações (2.3), (2.4) e (2.5). As reações homogêneas ou de reforma, caracterizadas pela oxidação parcial de monóxido de carbono, oxidação de hidrogênio e metano, assim como pela reação de deslocamento água – gás são descritas nas equações (2.6) até (2.9). Na Tabela 2-1 são apresentadas as principais reações da gaseificação de biomassa.

Tabela 2-1 Reações básicas no processo de gaseificação de biomassa

Estequiometria	Reação	Eq.
Reações de carbono		
$C + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO$	Combustão parcial	(2.1)
$C + O_2 \rightarrow CO_2$	Combustão completa	(2.2)
Gaseificação de carbono		
$C + CO_2 \rightarrow 2CO$	Reação de <i>Boudouard</i>	(2.3)
$C + H_2O \rightarrow CO + H_2$	Reação gás d'água	(2.4)
$C + 2H_2 \rightarrow CH_4$	Formação de metano	(2.5)
Reações homogêneas		
$CO + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CO_2$	Oxidação do monóxido de carbono	(2.6)
$H_2 + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow H_2O$	Oxidação do hidrogênio	(2.7)
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	Oxidação do metano	(2.8)
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	Água – gás reação de deslocamento	(2.9)

Fonte: Adaptações de [14], [25], [33], [34]

A composição do gás gerado é afetado pelas condições de operação do gaseificador tais como temperatura e pressão, pelas características do combustível como umidade, tipo, tamanho e composição, e teor de oxigênio no reagente [31], [35].

Os gaseificadores são classificados segundo sua pressão de trabalho em atmosféricos e pressurizados de acordo com o tipo de leito em fixo e fluidizado. Os de leito fixo podem ainda ser divididos em co-corrente, contracorrente e de fluxo cruzado. Os de leito fluidizado são divididos em leito fluidizado borbulhante e leito fluidizado circulante [36].

O gaseificador co-corrente (*Downdraft*), é o tipo de gaseificador de leito fixo mais difundido, tendo sido amplamente utilizado, inclusive em veículos [37]. Seu tipo de arranjo e funcionamento lhe permite uma produção de gás relativamente livre de alcatrão [31], na Figura 2-1 é apresentado um esquema simples do reator visando representar as zonas onde acontecem as reações.

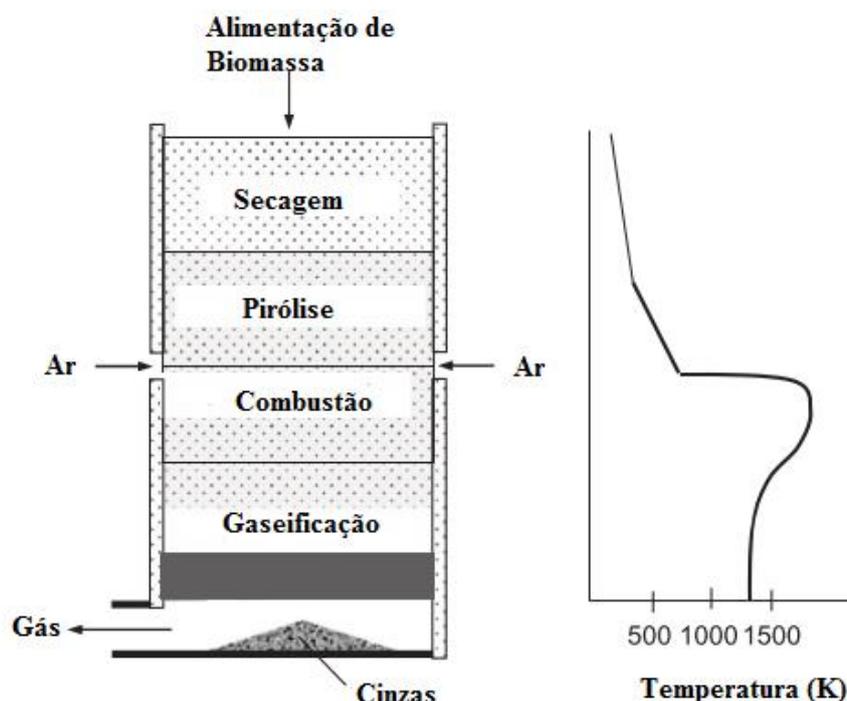


Figura 2-1 Esquema de um gaseificador co-corrente e perfis típicos de temperatura no leito [32].

Nesta pesquisa, as justificativas para a utilização deste tipo de reator se devem as características do equipamento, o arranjo simples, a versatilidade no uso de diferentes combustíveis, a tolerância a umidade presente na biomassa, um alto rendimento térmico

e de conversão de carbono, um baixo teor de particulado no gás produzido [14], [25], [31], [32], [38], [39] e além disso ter resultados experimentais [14], [24], [25] que serão utilizados para a validação dos resultados das simulações.

## **2.2 Caracterização e obtenção de combustíveis derivados de resíduos - CDR**

Os RSU podem ser classificados em três categorias, em conformidade com a legislação brasileira: a) residencial doméstica; b) estabelecimentos comerciais (restaurantes, escritórios, lojas em geral); c) órgãos públicos (hospitais, prisões, escolas, bibliotecas). Neste ponto, principalmente tratando-se de resíduos hospitalários e das prisões, não são levados em conta os resíduos perigosos, pois estes são coletados e quantificados de maneira diferenciada [15], [40].

A composição dos RSU varia de acordo com a situação social e econômica do país. A Figura 2-2 oferece uma comparação da composição dos RSU para várias regiões, onde observa-se por exemplo que nos países industrializados a parcela orgânica é menor do que a de papéis e plásticos diferentemente do que ocorre em países em desenvolvimento [41]–[43]. A América Latina, incluindo o Brasil apresenta semelhanças com outras partes do mundo, como a África e a Ásia Oriental e do Pacífico. Já no sul da Ásia é um caso diferente, onde a maioria dos resíduos são de difícil classificação, possivelmente atribuído a utilização doméstica de carvão, ou seja, estes resíduos vão ser em maioria compostos por cinzas. Um aspecto importante é que não se sabe ao certo como ocorre a contabilização de materiais reciclados como por exemplo, papel vidro e metais [44].

No caso brasileiro, para obter um aproximado da quantidade de resíduos sólidos que são recolhidos, a coleta de informações foi feita a partir de pesquisas reportadas na base de dados do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística, neste ponto em particular de limpeza urbana, foram obtidos dados de geração de 209.208 toneladas por dia de RSU [1], [14], [15].

A vazão dos combustíveis derivados de resíduos, ou seja, a quantidade gerada e potencialmente aproveitável para produção de CDR não foi estimada, porém, foi apurado só a quantidade de resíduo coletado em centros urbanos.

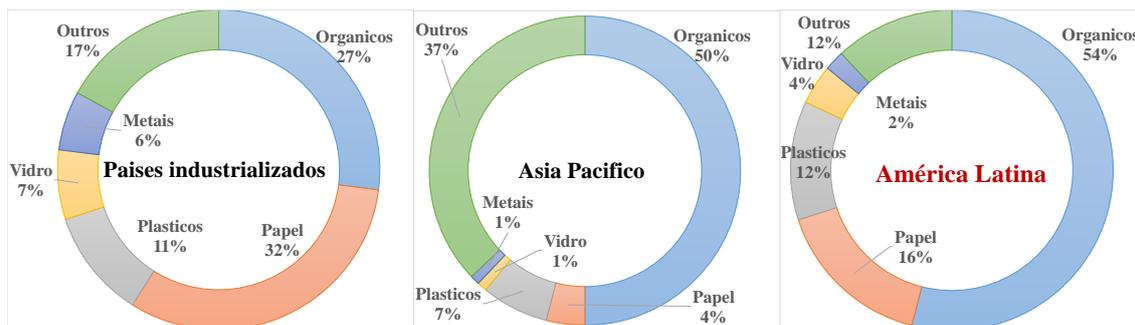


Figura 2-2 Composição de RSU para diferentes regiões do mundo [44]

Para considerar a utilização de um material como possível vetor energético, é preciso estabelecer os compostos orgânicos presentes, a umidade e o carbono fixo, através das análises imediata e elementar. Além disso, deve-se avaliar o poder calorífico inferior e superior. Todos eles juntos, formam a base fundamental para a análise de processos de combustão ou gaseificação [32], [45]. Neste sentido, uma compilação das características físico químicas e térmicas de combustíveis derivados de resíduos foi feito recentemente visando aportar informações sobre o potencial energético dos mesmos dada a grande variedade de possíveis compostos presentes e simular uma planta piloto de produção de CDR e sua posterior gaseificação, integrada a um motor de combustão interna ciclo Otto, para geração de energia elétrica [22].

No mundo ainda são poucos os casos de instalações para gaseificação de RSU nas mesmas condições em que são gerados, o método mais utilizado para seu tratamento ainda é a incineração [46]. Tem-se conhecido casos de testes em laboratório de gaseificação de outros resíduos como, resíduos madeireiros de plantações de oliveira, caroço de azeitona, farinha de ossos, lodo de esgoto seca e compostagem de resíduos sólidos urbanos, onde foram gaseificados em uma unidade piloto de gaseificação de leito fluidizado para avaliar rendimentos experimentais. Neste estudo os principais resultados para o caso particular da gaseificação de compostagem de resíduos sólidos urbanos destacam-se os problemas em torno à alta quantidade de cinzas e a concentração de metais pesados e outros poluentes. Não é analisado o comportamento hidrodinâmico do reator [47].

Na escala piloto o projeto P&D 418 CEMIG-NEST P&D 418 R-03, desenvolvido pelo grupo de pesquisa NEST/UNIFEI e a Companhia Energética do Estado de Minas Gerais – CEMIG [48], em parceria com o e a empresa AGTERM Caldeiras e Equipamentos Ltda. [49], visa construir uma instalação para o aproveitamento energético dos RSU da cidade de Itajubá, MG, onde está sendo edificada uma planta piloto com

estação de triagem para classificação dos RSU com posterior geração de combustíveis derivados de resíduos para serem gaseificados num reator do tipo co-corrente e posterior geração de energia elétrica a partir de um motogerador. O projeto visa a geração de até 100 kWe e encontra-se na etapa de construção e montagem dos equipamentos [50].

Na tentativa de estimar melhores opções de aproveitamento de RSU em energia foi desenvolvido um estudo de análise de ciclo de vida ACV, onde foram avaliadas alternativas de tratamento e disposição final de RSU para populações de médio porte, considerando cenários para a valoração energética e ambiental pelas rotas de tratamento termoquímico e biológico. Como resultado foram criados vários cenários de avaliação como ferramenta de apoio a decisões onde foram obtidos dados de geração de energia para o caso em for escolhida a opção de aproveitamento por aterro sanitário, aterro sanitário e motor de combustão aproveitando biogás e por fim, uma opção composta por digestão anaeróbica, gaseificação e reciclagem, esta última foi a que apresentou os melhores fluxos energéticos [51].

Para produzir combustíveis derivados de resíduos, os RSU são submetidos a um processo de triagem, logo um tratamento para homogeneização que pode incluir a redução em volume e até secagem, podendo apresentar diversas características (ver Figura 2-3 do processo esquematizado). Os combustíveis derivados de resíduos ou CDR são produto do processo de transformação dos resíduos sólidos que envolve a alteração de suas propriedades físicas, físico-químicas ou biológicas, com vistas à transformação em combustível substituto [52]. A fracção produzida como CDR, trata-se essencialmente dos materiais de natureza orgânica (têxteis, papel, cartão, plásticos, madeira, borracha, etc) que representam um potencial energético importante dada a sua natureza combustível, representam uma oportunidade a explorar atendendo aos seus benefícios ambientais e económicos. A valorização dos CDR vai de encontro aos princípios das políticas energéticas e ambientais, que assentam na procura de fontes de energia primária de natureza não fóssil, na redução das emissões de CO<sub>2</sub>, na minimização da deposição de resíduos em aterro e no respeito pela hierarquia da gestão de resíduos [53].

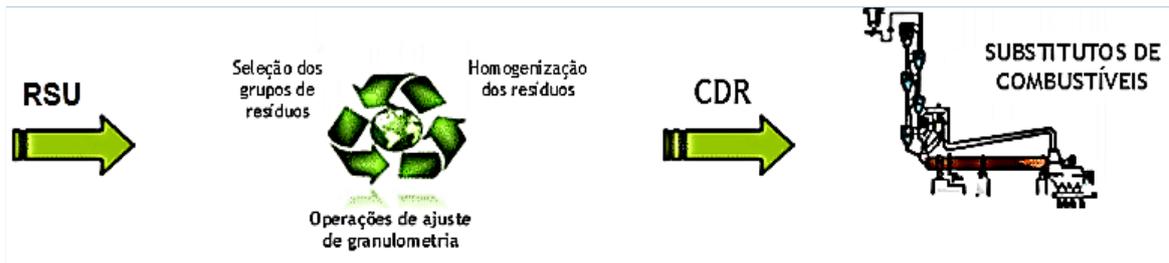


Figura 2-3 Esquema de produção dos CDR [54]

## 2.3 Gaseificação de CDR em duplo estágio

A conversão de biomassa em energia ocorre principalmente por tecnologias que utilizam ciclos termodinâmicos. Um esquema simplificado das rotas para aproveitamento de biomassa em energia é apresentado na Figura 2-4, a seguir:

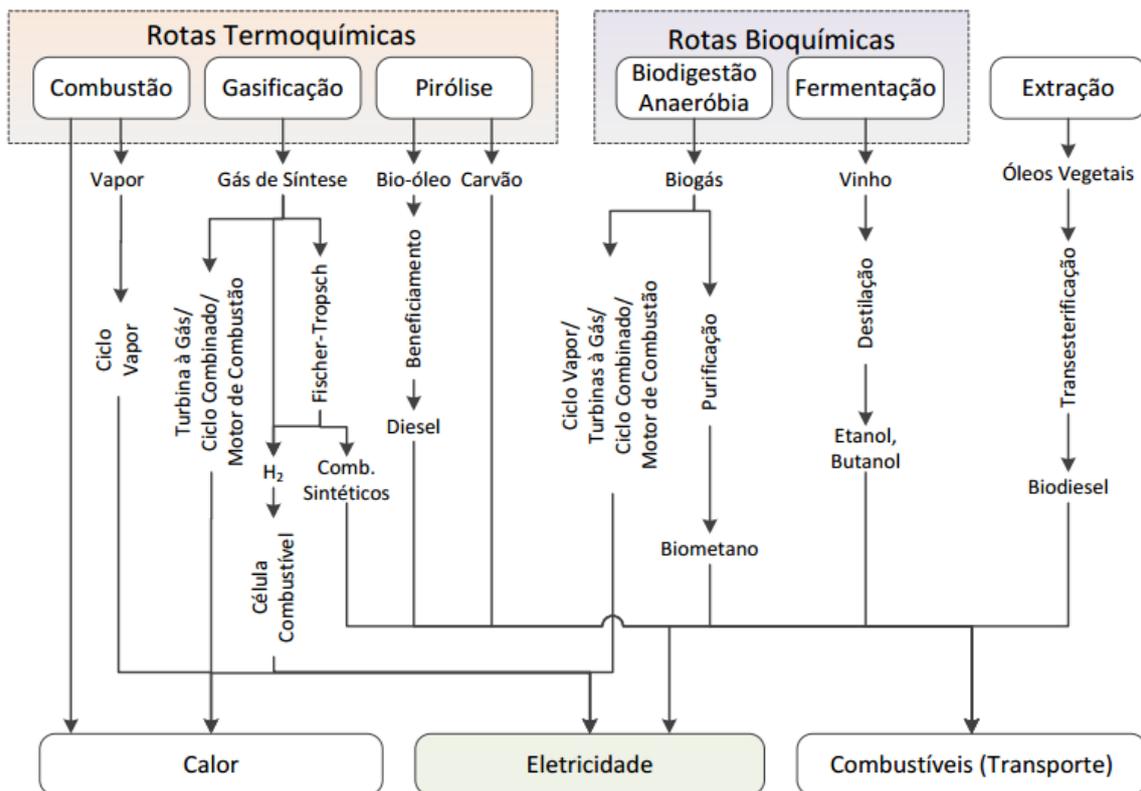


Figura 2-4 Representação esquemática simplificada das principais rotas de aproveitamento energético da biomassa [46]

Eventualmente a fonte de biomassa requer pré-tratamentos, tais como evaporação ou biodigestão, consideradas como as alternativas pela rota bioquímica onde o principal

produto é o biogás que pode ser queimado em um ciclo vapor ou diretamente numa turbina a gás para gerar eletricidade; ou pode ser tratado e purificado para ser transformado em biometano. Existe também a rota da extração cujo principal produto são óleos vegetais que mediante o processo de transesterificação podem ser transformados em biodiesel.

Também é possível obter energia a partir de processos termoquímicos, tais como combustão, gaseificação ou pirólise. Na combustão, o principal produto é o calor e secundariamente o vapor, que pode ser incluído dentro de um processo para geração por vapor. O principal produto da pirólise é o bio-óleo que pode ser transformado em diesel e posteriormente queimado como combustível num ciclo combinado para geração de eletricidade. Da gaseificação, o principal produto é o gás de síntese que pode ser queimado diretamente num motor de combustão interna ou com misturas num ciclo vapor com turbina a gás; também pode ser limpo para fornecer hidrogênio numa célula de combustível ou até utilizar como insumo em processos de síntese de produtos químicos mediante processos de *fischer trops*.

Na gaseificação de leito fixo co-corrente de duplo estágio, alguns autores afirmam que para um dado valor fixo da vazão de ar no primeiro estágio, o acréscimo da vazão de ar no segundo estágio resulta em uma diminuição do teor de alcatrão com aumento dos percentuais de Monóxido de carbono (CO) e Hidrogênio (H<sub>2</sub>) do gás gerado [55], [56] em [25].

Outros autores reportam resultados na qualidade do gás usando misturas de diferentes tipos de agente gasificante, apontando acréscimos de até 25% na produção de hidrogênio (H<sub>2</sub>) e até 50% para monóxido de carbono (CO) utilizando misturas de ar + vapor d'água em reatores de duplo estágio [14].

Um esquema de um gaseificador co-corrente de duplo estágio é apontado na Figura 2-5.

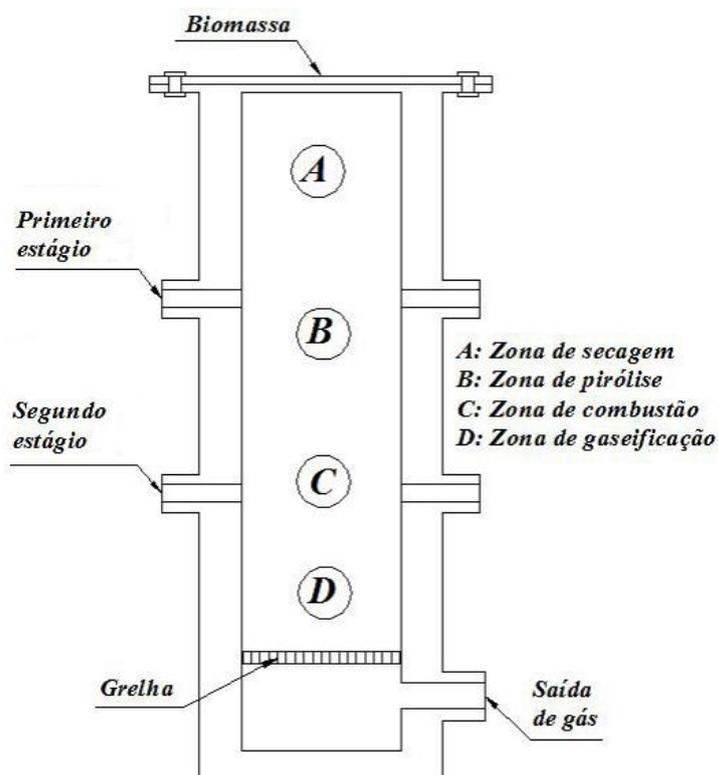


Figura 2-5 Esquema de um gaseificador co-corrente de duplo estágio [24]

Neste sentido, no segundo estágio, o agente de gaseificação fornecido a fim de queimar parcialmente o combustível sólido a ser transformado; desta forma, é gerada a energia para as etapas de secagem e pirólise que ocorrem acima da zona de combustão, assim como para várias reações endotérmicas envolvidas na gaseificação. O primeiro estágio de fornecimento de reagente tem como principal finalidade favorecer o craqueamento do alcatrão produzido durante os processos de secagem e pirólise, a fim de reduzir sua concentração até um valor mínimo permissível [24], [39]. A Figura 2-6 apresenta um esquema simplificado.

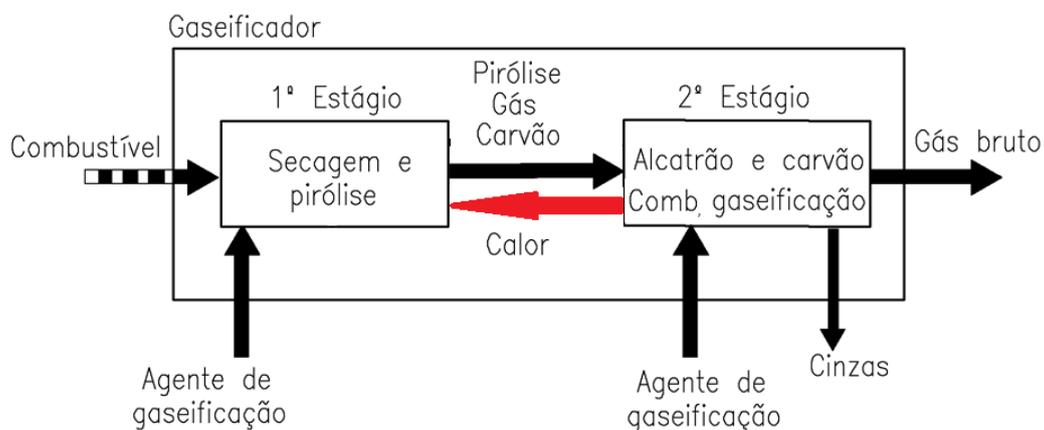


Figura 2-6 Esquema da gaseificação em duplo estágio, adaptado de [14]

Esta configuração tem sido amplamente estudada por pesquisadores da Índia (Laboratório de Combustão, Gaseificação e Propulsão do Instituto Indiano de Ciência - IISc), Tailândia (Programa de Energia do Instituto Asiático de Tecnologia - AIT) e atualmente pelo Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída (NEST) da Universidade Federal de Itajubá / Brasil [14], [24], [25], [57]. O gaseificador co-corrente do NEST é um reator fechado com entradas laterais de fornecimento de agente de gaseificação.

Vários sistemas de gaseificação co-corrente de duplo estágio foram testados e reportados [58]. Destes o fator de similitude foi dado pelos produtos da pirólise, os quais são gerados num primeiro estágio do reator ao reagir com o agente de gaseificação, e a mistura gasosa e sólida produzida flui até a segunda zona. A segunda zona é um reator de leito fixo onde o alcatrão e hidrocarbonetos pesados são craqueados. Nestes estudos foram avaliados a qualidade dos produtos da gaseificação e o uso de catalizadores, porém, não foram avaliadas as condições da dinâmica dentro do reator.

Em outro estudo observou-se que o fornecimento de ar secundário aumenta a temperatura na região de combustão e conseqüentemente uma redução do teor de alcatrão bem como um aumento do poder calorífico do gás. Outro aspecto a se observar é que o fornecimento de ar misturado com uma parcela do gás produzido no estágio secundário também reduz o teor de alcatrão de 1.270 mg/Nm<sup>3</sup> para 43,2 mg/Nm<sup>3</sup> e aumenta o PCI do gás de 4,57 MJ/Nm<sup>3</sup> para 6,47 MJ/Nm<sup>3</sup>[59].

## **2.4 Dinâmica de Fluidos Computacional aplicada à gaseificação de leito fixo co-corrente**

A Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD, acrônimo das palavras em inglês “*Computational Fluid Dynamics*”), consiste na simulação numérica por computador dos processos físicos e químicos que apresentam qualquer tipo de escoamento. Neste documento será utilizado como a sigla CFD. O principal objetivo é a busca de uma solução aproximada das equações que representam o movimento dos fluidos e sua discretização, ou seja, seria dividido o domínio de cálculo em pequenos elementos (ou volumes) e resolvendo assim as equações governantes.

Os métodos numéricos aplicados na mecânica de fluidos são uma ferramenta útil para o projeto e análise das distintas situações práticas nas quais se utilizam fluidos. A previsão dos campos de velocidades, pressão, temperaturas e propriedades turbulentas é efetuada através de modelos matemáticos baseados nos princípios de conservação de massa, da energia e da quantidade de movimento, no domínio, do espaço e/ou do tempo [60]. Na Figura 2-7 mostra-se um esquema das possíveis rotas para a modelagem CFD adaptado para gaseificação de biomassa em leito fixo.

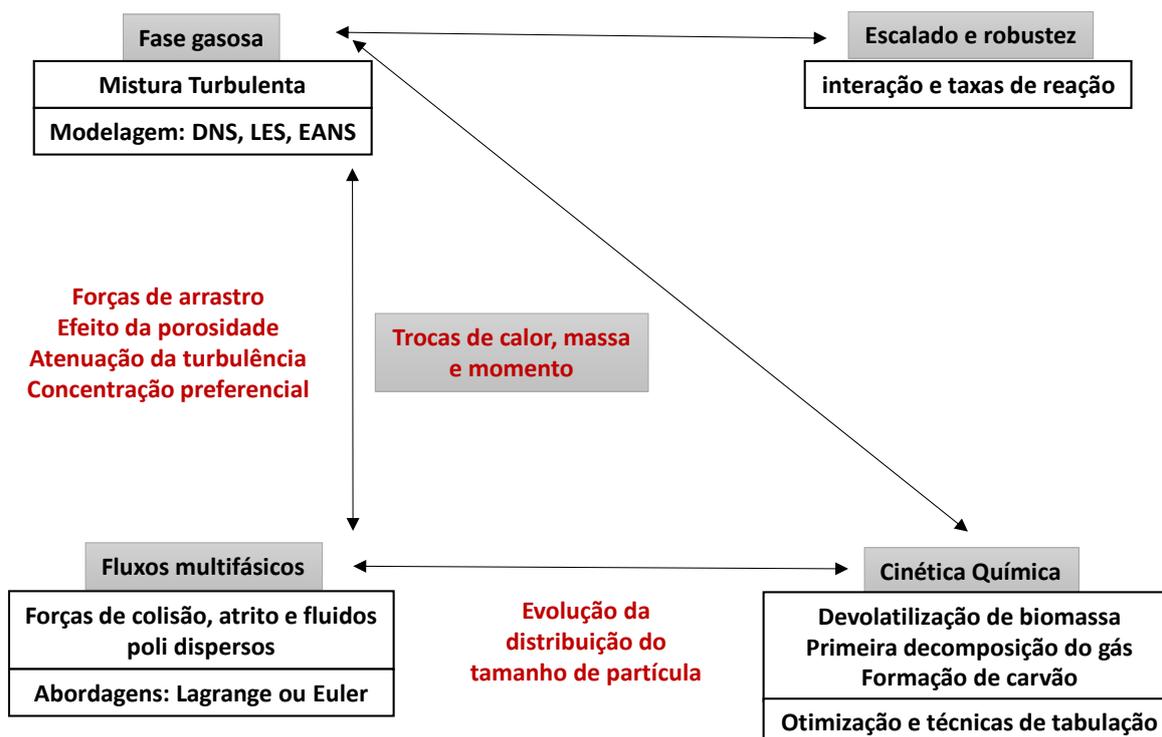


Figura 2-7 Diagrama conceitual da modelagem CFD para gaseificação de biomassa.  
Fonte: Adaptação de [60]e[61]

Da Figura 2-7; uma modelagem CFD envolve métodos numéricos avançados para a descrição da fase sólida, acoplamento da fase de gás e também incide sobre a mistura da fase sólida e gás. A mistura turbulenta pode ser modelada pela aplicação de várias equações, como a simulação numérica direta (DNS), simulação de grandes escalas (LES) e de Navier-Stokes (RANS) e equações de Reynolds [60]. Além disso, o paramétrico complexo como força de arrasto, porosidade da biomassa e atenuação da turbulência devem ser considerados na avaliação. A fase continua pode ser representada utilizando o modelo de dois fluidos ou modelo de partículas discretas; além disso, a química heterogênea de gaseificação de biomassa, incluindo devolatilização, combustão do carvão

e a fase gasosa poderão ser simulada considerando, simultaneamente, o calor, a massa e a mudança em cada fase [62].

A Teoria do Contínuo fundamenta a concepção teórica que justifica a maior parte da análise em CFD, onde o fluido é, um meio contínuo, discretizado com base no modelo de partículas. Esta abstração conceitua um elemento representativo de volume de micro ou nano dimensões, uma propriedade ou quantidade física mantém um valor médio, sob as mesmas condições, passível de reprodução em laboratório, sob as mesmas solicitações externas ao fluido. Assim uma partícula representativa de um volume de fluido, o REV, é o menor volume em que as propriedades do fluido se mantém [55] .

Várias pesquisas têm sido realizadas no desenvolvimento de modelos para simulação da gaseificação. Um dos objetivos principais destes modelos foram fornecer orientação qualitativa sobre o efeito do projeto e os parâmetros operacionais de um gaseificador. Estes modelos podem ser classificados em quatro grupos, modelos de: Cinética química [68], [69], Dinâmica de Fluidos Computacional (CFD), equilíbrio termodinâmico e redes neurais artificiais [36], [70].

Estudos anteriores incluem o desenvolvimento de modelos baseados na minimização da energia livre de Gibbs para analisar a composição do gás em gaseificadores comerciais, bem como de vários modelos cinéticos para diferentes tipos de reatores. Estes, segundo alguns autores [26], fornecem resultados promissórios, com algumas limitantes dado o uso de um pequeno número de reações e espécies com mecanismos bem definidos. No entanto, os modelos cinéticos ainda descrevem as reações químicas e mecanismos em profundidade, ao mesmo tempo, modelos de equilíbrio químico são capazes de prever formação de espécies na composição do gás produzido.

Simulações numéricas do processo da gaseificação foram consideradas escassas, em princípio atribuído a limitações no recurso computacional, porém, alguns modelos numéricos simplificados foram estabelecidos para simular o comportamento térmico de reatores e a previsão de espécies presentes no gás produzido [64]. Devido aos avanços em capacidade de cálculo computacional, nas duas últimas décadas tem-se incrementado os estudos numéricos dada a importância e interesse em pesquisas utilizando técnicas CFD, principalmente pelo fato desta ferramenta apresentar resultados promissores como complemento nos estudos dos fenômenos da gaseificação sem que isso represente grandes custos econômicos com testes experimentais.

Uma revisão da literatura focada em modelagem e/ou simulação numérica com ferramentas CFD de reatores de leito fixo do tipo co-corrente é feita a continuação numa ordem cronológica.

Manurung e Bennackers [73] reportam as primeiras modelagens em reatores co-corrente dividindo o reator em duas zonas, uma para secagem e pirólise e outra zona para redução de carbono e voláteis produtos da pirólise. Utilizaram um modelo de equilíbrio químico baseado nos balanços de massa e energia para cada uma das fases e dos componentes. O modelo consegue estimar as variações nas condições operacionais, a eficiência na conversão do carbono, a composição do gás produzido e o poder calorífico do gás. No entanto é estudado um reator de uma entrada de reagente, e o mesmo considera só ar como agente de gaseificação.

Di Blasi [38] Apresentou um primer modelo para um reator de leito fixo considerando 6 espécies na zona de redução ( $\text{CH}_4$ ,  $\text{CH}_x$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2$  e  $\text{CO}$ ) assim como as reações heterogêneas de oxidação do carvão e a gaseificação com  $\text{CO}_2$  e  $\text{H}_2\text{O}$  com vapor de água. Para a solução numérica foi utilizado o método de diferenças finitas e o esquema do gaseificador foi dividido em três etapas correspondentes aos processos das reações químicas, transferência de calor entre a partícula e transporte de espécies. O modelo oferece como resultados previsões da composição do gás e os parâmetros de temperatura axial de acordo com os dados experimentais como função na redução do tamanho de partícula. Neste estudo foram estudadas características de gaseificação apenas com ar como reagente.

Zainal e outros [74] utilizaram um modelo para gaseificação de diferentes biomassas considerando equilíbrio termodinâmico, assumindo a hipótese que os produtos da pirólise são queimados antes de se formarem na zona de redução. Desta forma as reações do processo ficam reduzidas para a gaseificação do carvão formado na pirólise com  $\text{CO}_2$  e vapor d'água, formação e metano a partir do carvão e as reações de reformado na fase gasosa. Esta simplificação permitiria a incorporação de outros agentes de gaseificação, porém não foi levada em conta e o modelo fica reduzido a gaseificação apenas com ar.

Mathieu e Dubuisson [75] desenvolveram um modelo de gaseificação de madeira em um reator a pequena escala. Na descrição do modelo é assumido o processo como um arranjo de quatro etapas: pirólise, combustão, reação de *Boudouard* e o processo de gaseificação propriamente dito. É assumido uma pirólise instantânea no momento em que a biomassa é fornecida ao reator. Tal aproximação é feita para considerar que os

produtos da pirólise são queimados, gaseificados ou passam a ser parte da reação de *Boudouard* para gerar uma parcela de CO, o resto de CO e dos produtos são gerados acima dos 1000°C como consequência do equilíbrio nos balanços de massa. Finalmente estas considerações são válidas para o caso em que o ar ou o vapor como reagentes ingressam no reator no mínimo a 300°C. Não foram levados em conta outros tipos de misturas como reagentes.

Wurzenberger *et al* [76] desenvolveram um modelo considerando o leito em duas fases, uma gasosa e outra formada pelas partículas. Este modelo considera as etapas de aquecimento, secagem, pirólise primária, pirólise do alcatrão, reações homogêneas de oxidação e reações heterogêneas de carvão. Foi resolvido pelo método dos volumes finitos e o solver utilizado foi LIMEX® e obtidos perfis de temperatura no leito, para cada etapa do processo e achados os balanços de massa e energia para cada componente de cada fase envolvida fase utilizando ar como reagente e a entrada de biomassa e do ar pela mesma superfície. Foi constatado que o modelo de redução de leito simplificado para uma partícula de biomassa oferece pouca significância estatística na sua validação com dados experimentais. Nota-se também, similar aos casos anteriores que foi utilizado ar como reagente de gaseificação.

Zhubrin [77] apresentou um modelo para a gaseificação do carvão, em um leito fixo co-corrente, considerando um leito de duas fases, não acopladas. O modelo proposto assume transferência de calor entre as duas fases, e resolve as equações de massa e momento para as espécies presentes em cada fase. São considerados os processos para volatilização, oxidação dos voláteis na fase gasosa. Também são levadas em conta as reações de oxidação e reações heterogêneas do carvão na fase gasosa de reformação de metano com vapor, a reação de substituição com o vapor de água e a redução de monóxido de carbono com hidrogênio para produzir metano. Neste modelo a oxidação ocorre quase de forma instantânea e os gases de combustão resultantes em conjunto com materiais voláteis ( $CH_x$ ) são transferidas para a fase gasosa, aonde são levadas a cabo reações de reformado com vapor, reação de substituição com o vapor de água e a redução de monóxido de carbono com hidrogênio. Os autores utilizaram o software PHOENICS® para a resolução numérica das equações segundo as considerações destacadas. Embora este seja um modelo mais detalhado, foi utilizado apenas ar como reagente e o esquema do reator considerou a entrada conjunta para biomassa e o agente de gaseificação num reator de um só estágio.

No trabalho de Bakar [78], foi utilizado um reator de fluxo descendente de um estágio, similar ao do tipo co-corrente e representado em um modelo geométrico de duas dimensões e cinética química não detalhada para previsão de espécies, a qual foi fundamentada numa função de densidade de probabilidade (PDF), considerando zonas dentro do reator para combustão e gaseificação e analisado considerando regime permanente nas duas zonas; com resultados aproximados ao ser comparados com testes experimentais reportados pelo autor. Constatou-se algumas dificuldades no campo computacional dado que a zona de combustão foi acoplada na zona de gaseificação considerando que os produtos são gerados quase instantaneamente, isto se considerado que a entrada de biomassa e do reagente é feita em diferentes seções do reator, constituiu-se em um erro de convergência na solução numérica. Foi utilizado ar como único reagente e um domínio computacional simplificado numa geometria de duas dimensões.

Sivakumar [79] relata um trabalho onde foi feita a modelagem só da zona de redução de um gaseificador co-corrente que utiliza biomassa como combustível para um projeto que descreve um reator de 100 kW, utiliza correlações empíricas da literatura e assume o processo em regime permanente na zona estudada. Foram estudadas diferentes combinações para o fluxo de ar como único agente de gaseificação, e feito um estudo da distribuição de temperatura através da zona de redução e da concentração dos produtos analisados a partir dos balanços de massa. Na resolução numérica foi utilizado o software CFX®5.5.1 hoje em dia este software de propriedade da Ansys®. Como foi destacado, neste trabalho modelou-se só a zona de gaseificação de um reator em um estágio e utilizou-se ar como reagente, embora tenham sido estudados diferentes fluxos de reagente, os dados de validação das simulações consideraram poucas experiências experimentais.

Ramirez [80] descreve um modelo numérico bidimensional para um reator co-corrente que utiliza ar como agente de gaseificação. O leito do reator é considerado como uma corrente de dois fluxos paralelos como primeira abordagem para resolver os componentes da fase gasosa e o uso de cinética química disponibilizada na literatura, já na fase sólida e as velocidades de reação utilizando equações de conservação com uma abordagem euleriana para descrever a trajetória das partículas. A solução numérica do modelo e feito utilizando o software PHOENIX® cfd. É analisado também o fenômeno de turbulência entre as duas fases utilizando o modelo de turbulência padrão disponibilizado no software. Neste ponto, igual aos casos anteriormente relatados e

utilizado ar como único reagente e o modelo geométrico do reator apresenta um só estágio e uma geometria de duas dimensões para representar o domínio computacional.

Mishra [81] conduziu uma análise de um reator co-corrente de um estágio utilizando madeira como biomassa. Neste estudo o reator foi dividido em três zonas descendentes: zona de secagem e pirólise (assumida como processo de reação instantânea), zona de oxidação e zona de redução. A cinética química é resolvida utilizando o software comercial EES® (*Engineering Equation Solver*) mediante um modelo em equilíbrio termodinâmico onde é estudada influência da umidade na biomassa e foram levadas em conta diferentes vazões de ar como reagente. Utilizou-se um modelo geométrico em duas dimensões para representar o reator e para a resolução do modelo numérico foi utilizado o software Fluent®. Neste trabalho, a solução numérica da modelagem fica restrita ao uso do software que resolve a parte química dos processos (EES®) e a distribuição de temperaturas no interior do reator acoplada ao software CFD. Embora a estratégia, segundo os autores permite uma econômica no uso do recurso computacional, não foram simuladas variadas condições operacionais, foi utilizado um domínio computacional simplificado em duas dimensões e não foi oferecida validação com dados experimentais.

Pérez [36] Propõe um modelo 1-D no estado estacionário para um reator co-corrente em um estágio, assumindo o leito como uma corrente de dois fluxos paralelos considerando transferência de calor nas fases sólidos-gás e do leito com as paredes do reator. Neste trabalho foram propostos e desenvolvidos modelos cinéticos para as zonas de oxidação, redução, incluído as reações heterogêneas e homogêneas dos processos dentro do reator. Os dados cinéticos para modelar as reações químicas tanto como as taxas de reação globais são aportes da literatura. Não é considerado o modelo geométrico do gaseificador, porém para a simulação numérica é utilizado o software Matlab®. Os resultados do modelo predizem a composição dos gases e outros fenômenos como a redução do leito na medida do consumo de biomassa, assim como os perfis de temperatura para gaseificação com ar como único reagente. São validados os resultados das simulações com testes experimentais no mesmo tipo de gaseificador modelado, porém não foram subministrados dados de outras possíveis condições operacionais do equipamento.

Korotko, *et al* [82] Apresentaram um modelo para um gaseificador de leito fixo co-corrente de um estágio para gaseificação de aparas de madeira. Foram consideradas quatro zonas ou processos dentro do reator: evaporação da água, pirólise, gaseificação e

oxidação. Utilizam o software Fluent® para resolver a abordagem numérica, onde as reações químicas são modeladas utilizando o mecanismo de funções definidas pelo usuário (UDF), disponível no software, desta forma foi formulado um modelo de duas fases, em que estas duas fases vêm a interagir e considerando o espaço ocupado pela biomassa como um meio poroso. Foram incluídas reações químicas homogêneas, tais como mudança de água e gás, combustão de CO, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub> e reações heterogêneas, tais como combustão do carvão, gaseificação de CO<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, H<sub>2</sub>. Taxas de estes processos são definidos pelas taxas de cinética química a partir da equação de Arrhenius. Os coeficientes de estas equações são tomados a partir da literatura [31]. Embora, tenha sido utilizado UDF para representar diferentes tipos de biomassas, nos resultados da validação do modelo, unicamente foram apresentadas simulações com madeira e a validação das simulações não foi a apresentada por falta de dados experimentais.

Muilenburg [83] propôs a modelagem de um reator de leito fixo co-corrente de um estágio onde os combustíveis foram modelados como partículas de carvão com uma fórmula empírica para a biomassa derivada da análises elementar e imediata. O modelo foi testado para diferentes densidades de leito e estudada a velocidade da mistura do combustível com o agente gasificante para descrever os efeitos sobre a zona de combustão, o interior do reator foi analisado como um leito empacado em regime permanente onde os componentes se degradam pela ação da temperatura, para as reações químicas é utilizada uma função de densidade de probabilidade e assim se representa a cinética química da gaseificação. Neste trabalho foram testados vários tipos de biomassas e validados os resultados com dados experimentais o que permitiu uma boa representatividade do processo para as zonas de combustão e gaseificação ficando em falta a simulação das zonas de secagem e pirólise.

Rashidi [65] fez a modelagem e simulação de um gaseificador de 60 kW com aquecimento externo e alimentado com biomassa, considera a entrada do combustível e do reagente pelo topo do equipamento e os produtos da pirólise são considerados como uma mistura de hidrocarbonetos gerada quase instantaneamente logo após a zona de secagem. Para a solução numérica do modelo proposto foi utilizado o software GAMBIT® para a elaboração da geometria do gaseificador e o software Fluent® para a solução do modelo de turbulência e das reações na zona de redução. O modelo foi validado com dados experimentais gerados pelo autor em que foi utilizado ar como reagente. Neste trabalho é apresentada a gaseificação exclusivamente na zona de redução o que explica a validação do modelo e o baixo custo computacional reportado pelo autor,

ficando em evidencia a necessidade de incorporar as outras zonas que compõem o reator e os fenômenos que acontecem em cada uma delas.

Janajreh e Shrah [84] modelam um gaseificador co-corrente de um estágio alimentado com pellets de madeira como combustível. Neste trabalho o reator foi assumido como uma corrente de dois fluxos paralelos. O modelo geométrico considera uma malha de elementos hexaédricos que representa o volume do reator. Na parte das reações da gaseificação foram utilizadas taxas de reação obtidas pela literatura e outras a partir de estudos em balança termogravimétrica para o modelo de redução de partícula. As resoluções das equações próprias da gaseificação são resolvidas utilizando o software Fluent®. Os dados do modelo são comparados com testes experimentais, obtendo-se uma significância dos resultados baseada no fato de ter assumido o reator como um todo aonde acontecem simultaneamente todas as reações dos processos.

Budhathoki [61] desenvolve uma abordagem híbrida para modelar o processo de gaseificação co – corrente utilizando dois submodelos separados. As zonas de pirólise e de oxidação são modeladas com a abordagem de equilíbrio químico, enquanto a zona de redução é baseada na abordagem de cinética finita utilizando taxas de reação a partir de informações da literatura. Os produtos da gaseificação são apresentados como uma mistura de carvão (C), H<sub>2</sub>, CO, CO<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, H<sub>2</sub>O e N<sub>2</sub>. Os resultados do modelo são validados com dados experimentais da literatura evidenciando dificuldades do modelo para a predição da composição do gás com maior razão de equivalência.

Raj e Srividhya [85] Modelam um reator do tipo co-corrente de 20 kW com biomassa como combustível. O modelo para o combustível utiliza a mesma abordagem apresentada por Mulemburg [83] onde é modificada a fórmula empírica do carvão a partir da análise imediata da biomassa. É estudada a influência da densidade do combustível a partir de variações na densidade do leito com foco exclusivo na zona de redução e combustão. O modelo geométrico foi desenvolvido no software GAMBIT ® e a solução numérica do reator foi feita utilizando o software Fluent®. Foi feita a validação das simulações com dados experimentais, ficando em destaque a necessidade de incorporar ao modelo as outras zonas do reator.

Patel [86] desenvolve a simulação de um reator co – corrente que utiliza lignite como combustível. O modelo geométrico foi elaborado no software GAMBIT ®. Já para o modelo do reator, este é dividido em quatro zonas: combustão, redução, oxidação e zona de secagem. O combustível e o agente gasificante entram no reator pelo topo o qual é assumido como um leito empacado cuja resolução numérica é feita no software

Fluent®. Finalmente são analisados contornos de temperatura, velocidade, pressão estática e frações dos produtos da gaseificação. Com a validação das simulações com dados experimentais evidenciou-se a necessidade de estudar outros reagentes e estudar os efeitos da densidade do leito com diferentes tipos de biomassas.

A Tabela 2-2 apresenta um resumo dos principais trabalhos em matéria de simulação utilizando completa o parcialmente ferramentas CFD.

Tabela 2-2 Resumo dos trabalhos com simulação por ferramentas CFD

Combustível	Modelos CFD	Turbulência	Software-CFD	Val.	Ref
Madeira	Transporte de espécies	$k-\varepsilon$	NI	Sim	[38]
Madeira	CQ Carvão modificado	$k-\varepsilon$	NI	Sim	[74]
Madeira	EQ	NI	NI	Sim	[75]
Madeira	Combustão misturada	$k-\varepsilon$	LIMEX	NI	[76]
Carvão	Fases não acopladas	$k-\varepsilon$	PHOENIX	NI	[77]
Madeira	Transporte de espécies modelo de carvão modificado	$k-\varepsilon$	FLUENT	Não	[85]
Madeira	DPM	RANS	CFX		[69]
Pellets de madeira	Transporte de espécies	$k-\varepsilon$	FLUENT 5.5	Sim	[78]
Madeira	Euler para partícula e gás	RNG $k-\varepsilon$	PHOENIX	Não	[80]
Milho e Madeira	PDF para espécies	$k-\varepsilon$	FLUENT		[83]
Madeira	PDF para espécies	$k-\varepsilon$	FLUENT	Sim	[85]
Pellets de madeira	Lagrange	$k-\varepsilon$	NI	Sim	[84]
Pellets de madeira	UDF	$k-\varepsilon$	FLUENT	Não	[82]
Lignite	NI	NI	FLUENT 6.2.16	Sim	[86]
Madeira	NI	NI	CFX 5.5.1	Não	[79]
Madeira	Combustão misturada	$k-\varepsilon$	Fluent	sim	[65]
Madeira e resíduos	(NPM) Modelo sem pre mistura para combustão	$k-\varepsilon$	FLUENT 6.3	Sim	[81]

Abreviaturas: NI: Não Informado; EQ: Equilíbrio químico; CQ: Com cinética química; PDF: tradução Função de densidade de população; UDF: Fun. Def. pelo usuário; DPM: Modelo de partículas

As principais conclusões após a revisão da literatura para o caso específico de reatores co-corrente são as seguintes:

- Com a maioria dos trabalhos reportados na literatura científica fica em evidência a necessidade de estimular estudos com diferentes biomassas e diferentes agentes de gaseificação para assim gerar informações que permitam avaliar os produtos da gaseificação, perfis de temperatura e outras condições operacionais.
- A grande maioria dos estudos de modelagem e/ou simulação de gaseificadores do tipo co - corrente são feitos com base em reatores de um só estágio de fornecimento de reagente, daí que se faz interessante estudar o efeito de um segundo estágio nos produtos da gaseificação, os perfis de temperatura e outros efeitos possíveis.

- No detalhamento químico associado as simulações com ferramentas de CFD foi utilizada uma função de densidade de probabilidade (PDF) para modificar um combustível genérico tipo carvão o qual é fornecido pelo conjunto de ferramentas na solução numérica, fato que pode aumentar o erro na hora de validação com testes experimentais.
- A grande maioria dos trabalhos até o momento reportados utiliza ar como único reagente, e só em alguns casos é utilizado vapor, e na maioria dos casos fica em falta o uso de misturas de reagentes.
- Alguns dos trabalhos reportados na literatura não é feita a validação com testes experimentais.

Decorrente da revisão da literatura, esta pesquisa trata do fato de considerar um reator de duplo estágio para fornecimento de reagente num domínio computacional 3-D, até agora não estudado com ferramentas CFD e utilizar ar, ar + vapor e oxigênio + vapor como misturas para gaseificação.

Será adotada a estratégia de representar o combustível e as cinéticas próprias das reações mediante a abordagem de funções de densidade de probabilidade (PDF), dado que foi constatado como mecanismo útil quando se conhece a análise elementar e imediata do combustível a ser fornecido. Neste ponto, propõe-se a utilização de dados obtidos experimentalmente da análise imediata e elementar gerados a partir de combustíveis reais e não empíricos. A partir dos dados reais da biomassa utilizada, serão inseridos novos combustíveis dentro das livrarias do software para resolução dos modelos aqui propostos. Esta determinação permite além de acrescentar e fornecer dados analíticos as livrarias das bases de dados dos combustíveis e do software, gerar uma economia no uso de recursos computacionais.

## **Capítulo 3 Modelagem em CFD do processo de gaseificação de biomassa em um reator co-corrente de duplo estágio**

Neste capítulo, apresenta-se a metodologia utilizada na modelagem CFD da gaseificação de biomassa em um reator co-corrente de duplo estágio, são dispostas as diferentes considerações teóricas e conceituais para a simulação dos fenômenos que acontecem no interior do reator.

Um conjunto de aplicativos contidos no software ANSYS FLUENT® foi selecionado para realizar as simulações numéricas; este software de uso comercial tem a capacidade de reproduzir os fenômenos relacionados ao fluxo de fluidos, transferência de calor e massa, e reações químicas [87].

### **3.1 Modelo conceitual proposto**

O combustível, propriamente dito é considerado como briquetes de biomassa de forma cilíndrica cujas dimensões aproximadas são 35 mm de diâmetro x 35 mm de largura.

Considera-se o gaseificador como um reator cujo comportamento tanto para a biomassa quanto para o reagente após entrarem no reator descem em direção na grelha apresentando um comportamento de fluxos paralelos.

Esta pesquisa se baseia na configuração de modelos que consideram os fenômenos químicos e de transporte na partícula de biomassa e o fluxo de gases através do leito móvel de biomassa que desce em direção na saída dos gases e cinzas. O detalhamento dos processos no interior da partícula de biomassa, tais como aquecimento, secagem, devolatilização, combustão e gaseificação e forças de arrasto são levados em conta.

Considera-se a partícula de biomassa composta por carbono, hidrogênio, oxigênio, enxofre, materiais voláteis, água e cinzas; estes componentes todos são quantificados mediante a sua fração mássica. Neste contexto, precisa-se obter e resolver equações para os componentes da velocidade da partícula, entalpia, fração volumétrica da biomassa e uma variável adicional para computar o tamanho da partícula [69], [88].

A fase gasosa é modelada como uma mistura de vários componentes, que incluem: CO, H<sub>2</sub>, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>O, CO<sub>2</sub> e CH<sub>x</sub> (Hidrocarbonetos genéricos), estes compostos são quantificados mediante a sua fração mássica. Neste aspecto precisa-se obter e resolver equações para as componentes e velocidade na fase gasosa, entalpia, fração volumetria gasosa, energia cinética turbulenta e velocidade de dissipação.

As equações de transporte são resolvidas numericamente, incluindo uma para a variação do tamanho da partícula na medida em que ela vai-se transformando e reduzindo, inclui-se também uma equação para a velocidade cinética finita para cada uma das reações.

A modelagem da gaseificação nesta configuração, pode-se descrever em quatro etapas: secagem, pirólise, combustão e redução. Onde os briquetes de biomassa formam um leito empacado desde o topo até a grelha, como dois fluxos paralelos (biomassa e agente de gaseificação) que reagem e movimentam-se no sentido descendente até a grelha, a traves da qual saem os gases e as cinzas. Um esquema simplificado desta configuração é apresentado na Figura 3-1.

Neste movimento das partículas de biomassa e agente oxidante ao longo do reator acontecem as reações químicas do processo.

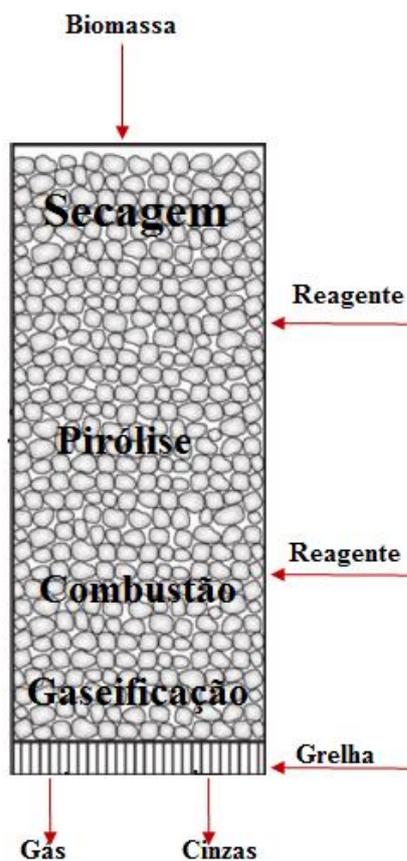


Figura 3-1 Modelo conceitual simplificado do gaseificador co-corrente de dois estágios

## 3.2 Domínio Computacional para gaseificação co-corrente de duplo estágio

Nesta seção são apresentados os principais aspectos para as considerações teóricas do projeto, a geometria e o domínio computacional, assim como os critérios para discretização espacial do volume de controle do projeto gaseificador co-corrente de duplo estágio.

### 3.2.1 Considerações Teóricas

A Dinâmica de Fluidos Computacional ou CFD é a análise do escoamento de fluidos que envolve, transferência de calor, transferência de massa, transferência de quantidade de movimento e reações químicas por meio de códigos computacionais.

Para a solução de problemas deste tipo, várias etapas devem ser executadas. A Figura 3-2 representa o algoritmo para solução de um determinado problema utilizando a técnica CFD. A primeira etapa consiste na definição do projeto, através da sua geometria. Programas comerciais auxiliares como ICEM-CFD®, SolidWorks®, Solid Edge®, AutoCAD®, Pro-Engineer®, CATIA®, entre outros, permitem modelar qualquer geometria de um objeto no espaço bidimensional ou tridimensional. A segunda etapa consiste na geração da malha computacional, necessária na posterior definição das propriedades termodinâmicas e na aplicação das condições de contorno. Na terceira etapa, é realizada a obtenção da solução numérica com base na definição de critérios numéricos para a solução das equações diferenciais. Finalmente, o pós-processamento permite visualizar a solução na forma local ou global.

Para as simulações realizadas no presente trabalho, foram utilizados os seguintes softwares comerciais: ANSYS ICEM-CFD®, para a geração da geometria e da malha computacional, e ANSYS CFD-FLUENT®, para a definição e solução dos modelos matemáticos envolvidos, esquemas de solução numérica, condições de contorno; já a análise de resultados será feita no ANSYS CFD-POST® [60], [87], [89].

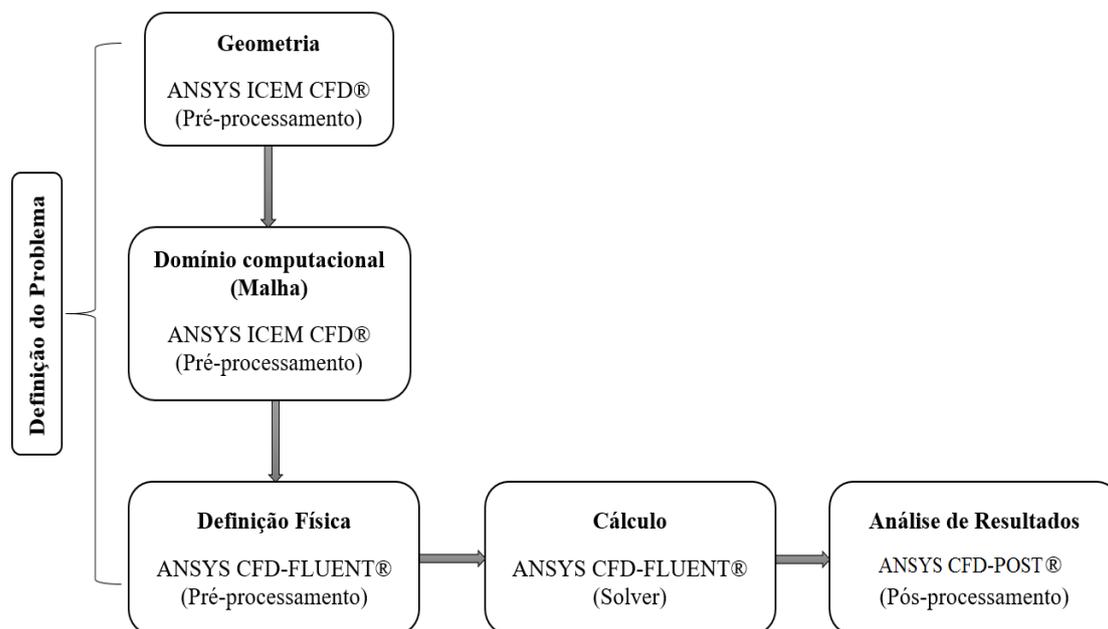


Figura 3-2 Resumo do procedimento para solução de problemas utilizando Dinâmica de fluidos computacional

### 3.2.2 Geometria e volume de controle

O arranjo físico do gaseificador é composto por um silo de alimentação, o reator propriamente dito e o cinzeiro. A saída dos gases desde o interior do reator é realizada a través do cinzeiro pela grelha.

Para os efeitos da modelagem do gaseificador adota-se um volume de controle que tem uma forma tubular com exatamente as mesmas dimensões internas do reator, que representa a sua estrutura interna e a qual foi projetada e reproduzida no aplicativo ANSYS ICEM CFD®. Na

Figura 3-3 é apresentado o esquema do domínio computacional e definidas as superfícies características para cada zona, definido a seguir:

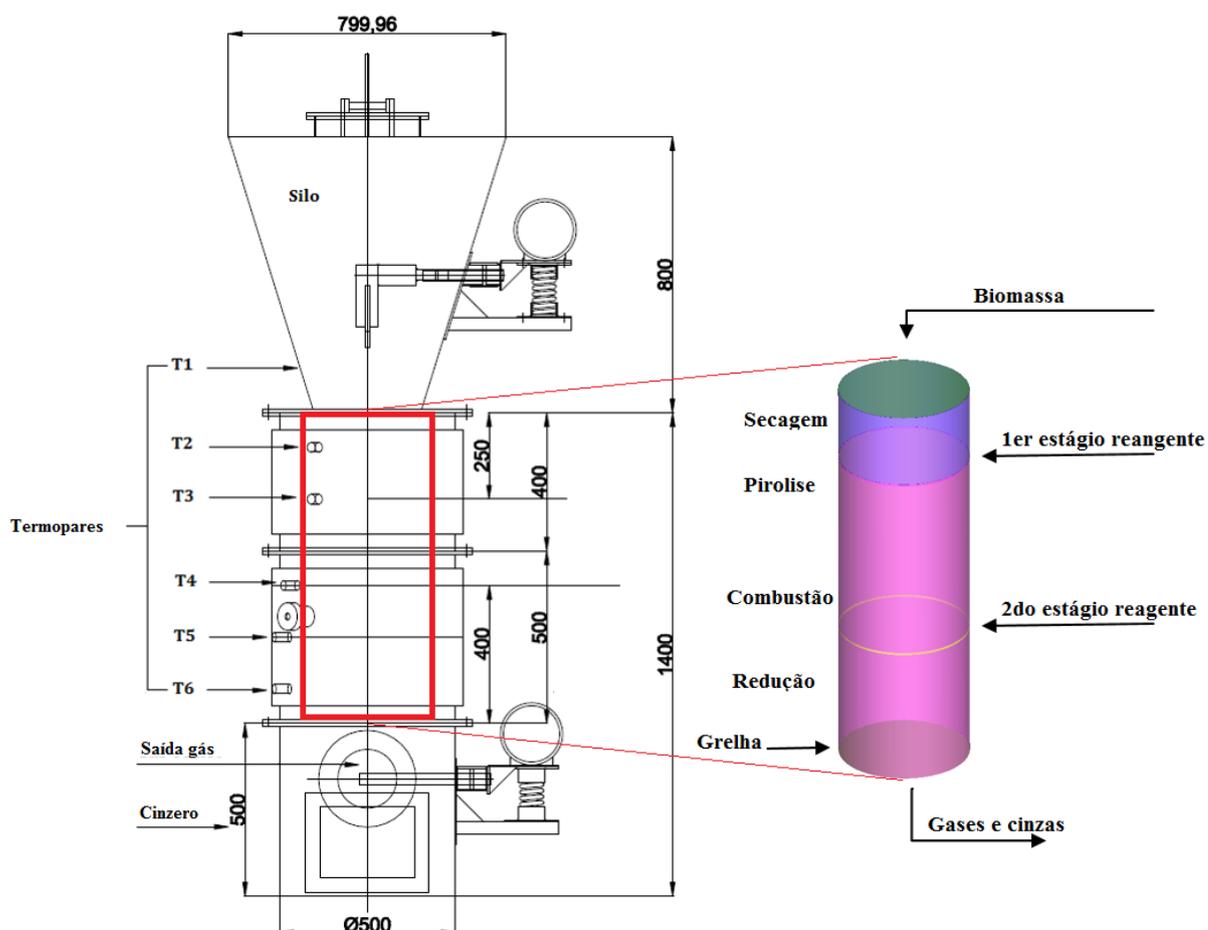


Figura 3-3 Esquema do gaseificador e volume de controle 3D definido

- A superfícies de entrada de biomassa pelo topo do gaseificador.
- Duas superfícies de entrada de agente de gaseificação pelas laterais para o primeiro e segundo estágio.
- Uma saída de gases e sólidos na parte inferior do equipamento através da grelha.
- Uma superfície para definir a zona de secagem.
- Uma superfície para definir a zona de combustão e pirólise que fica entre as duas entradas de reagentes.
- Uma superfície que define a zona de gaseificação/ redução que fica entre a segunda entrada de reagente e a superfície de saída.
- Nesta abordagem são consideradas as diferentes zonas no interior do gaseificador, sendo elas: secagem, pirólise, combustão e redução.

### 3.2.3 Discretização Espacial – Malha

Uma malha computacional é constituída na sua forma básica por linhas e pontos. Os pontos são considerados onde as arestas se interceptam e servem de orientação para o cálculo de propriedades físicas baseado em um modelo matemático. Uma malha computacional é uma representação em forma discreta de um plano ou de um volume. A Figura 3-4 apresenta um plano e um volume onde são identificados os elementos de malha e que posteriormente é utilizada em todos os métodos de discretização, ou seja:

Célula ou elemento: volume de controle no qual o domínio é particionado;

- Nó: ponto da malha;
- Centro da célula: centro geométrico do elemento ou célula;
- Aresta: fronteira da face;
- Face: fronteira do elemento ou célula;
- Zona, agrupamento de nós, faces e células: zonas de fronteira de paredes;
- Domínio: grupo de nós, faces e zonas celulares

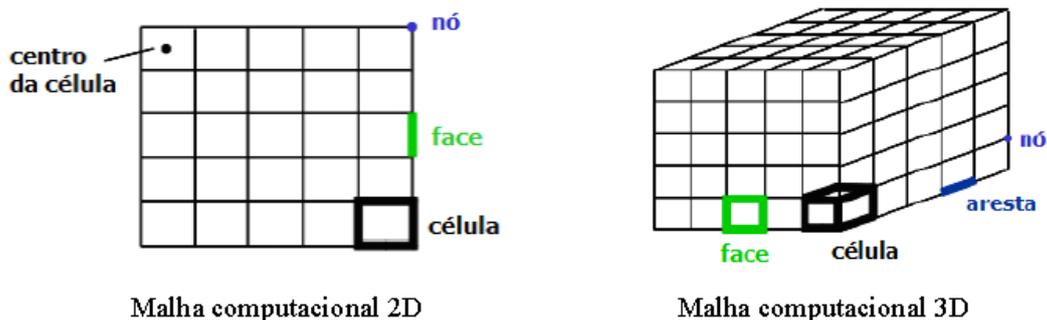


Figura 3-4 Terminologia de elementos de malha [90]

Diferentes elementos ou células podem ser gerados afim de representar um domínio computacional 2D ou 3D são apresentados na Figura 3-5. Uma malha pode conter elementos triangulares e quadrilaterais para representar volumes com geometrias em 2D, pode também conter elementos tetraédricos, hexaédricos, prismáticos, piramidais e poliedrais para representar volumes com geometrias em 3D. Possíveis combinações de elementos de malha podem ser achadas para representar geometria complexas ou que precisem de um apuramento especial numa região específica da geometria.

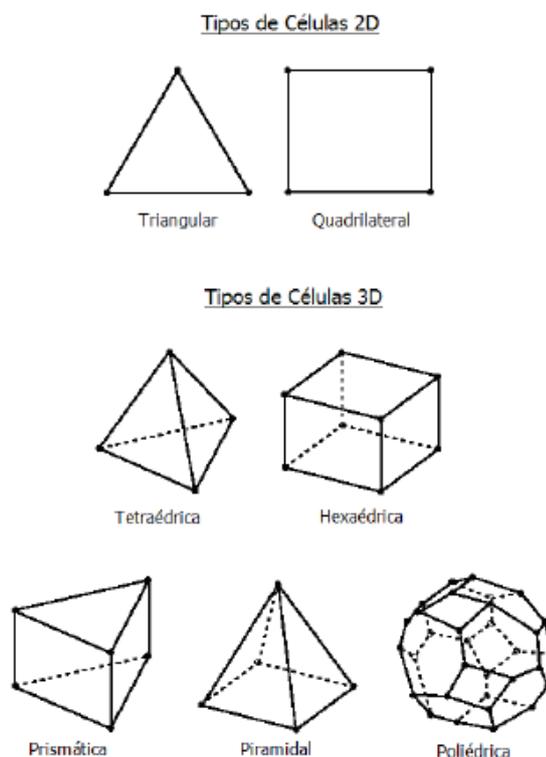


Figura 3-5 Elementos de malha [90], [91]

Uma malha é uniforme, se os pontos são uniformemente espaçados, caso contrário é chamada de não uniforme. Quando o domínio apresenta regiões de maiores gradientes de velocidades ou de pressões, opta-se por uma maior concentração de elementos nessa região (maior refinamento). Pode ser classificada como estruturada se apresentar um padrão na sua distribuição de pontos ou elementos. As malhas estruturadas têm como princípio a associação de blocos 2D ou 3D para uma parte ou toda geometria do domínio computacional. A técnica de blocagem pode ser aplicada sem muita dificuldade em geometrias simples, e dependendo da experiência do usuário, as malhas estruturadas podem ser aplicadas com certa dificuldade em qualquer geometria. Uma malha estruturada normalmente gera resultados de melhor precisão, principalmente se os elementos apresentam maiores ortogonalidades, ao ser uma malha mais robusta reduz o tempo de convergência na hora das simulações e permite a utilização de elementos mais grosseiros, porém apresenta um consumo de tempo maior nas operações de associação (blocagem) da geometria. A malha não estruturada pode ser gerada com diversos tipos de elementos e é empregada em geometrias complexas [91].

O domínio computacional do gaseificador descrito e apresentado no apartado anterior é definido como um conjunto de superfícies que vão representar computacionalmente as zonas onde acontecem as reações dentro do reator. No interior deste volume de controle precisam ser criadas uma quantidade de elementos de malha (volumes) para que possam ser realizadas as simulações numéricas dos fenômenos que acontecem nos processos de conversão termoquímica da gaseificação.

Neste trabalho adotasse uma estratégia de representação para o volume de controle com uma malha hexaédrica estruturada multi blocos [91], que representa o volume de controle definido como um cilindro e logo a partir de combinações de grupos de elementos chamados blocos de malha, elaborar assim um grande número de elementos (volumes menores) hexaédricos que vão constituir tridimensionalmente o reator propriamente dito. Esta estratégia permite gerar elementos de malha tridimensionais hexaédricos e estruturados com maior precisão e qualidade no que se refere a ferramenta computacional.

A discretização do volume de controle foi feita a partir de um conjunto de 60 blocos distribuídos com diferentes números de elementos hexaédricos associados a cada superfície ou zona do gaseificador com o objetivo de gerar a malha que representara o

reator. A malha do volume de controle definido para a representação do reator de duplo estágio é apresentada na Figura 3-6, e são mostrados os detalhes geométricos de geração do volume de controle propriamente dito, dos elementos e o refinamento para a entrada da biomassa e as estradas de reagente nos dois estágios. A malha posteriormente é testada considerando o reator como uma composição de dois fluxos paralelos que se movimentam em conjunto e cujo comportamento assume a função de um meio poroso que vai-se degradando para formar as espécies gasosas e os inertes [91].

Para avaliar se o número de elementos de malha é representativo nas simulações, o ponto de partida foi injetar ar a temperatura ambiente na direção do processo dentro do volume de controle assumindo diferentes quantidades de elementos hexaédricos. Isto permite avaliar a influência da densidade da malha nos resultados da simulação, além de ajudar na estimativa no consumo de recursos computacionais. As condições iniciais consideram o interior do gaseificador como um meio poroso, tudo sem reação química, fornecendo ar como agente de gaseificação com um fluxo perpendicular no primeiro estágio de 10,73 kg/h (aproximadamente 44% do agente de gaseificação), e para o segundo estágio de 13,41 kg/h (aproximadamente 56% do agente de gaseificação); mesmas vazões utilizadas nos testes experimentais. Esta avaliação representa um menor custo computacional se for comparado com testes no reator.

Os resultados dos testes de malha são baseados nas medições de velocidade e pressão em diferentes planos do reator, e cujo resultado serve para calcular o número de elementos de malha que permita representar os fenômenos da gaseificação com a melhor combinação de número de elementos de malha versus o gasto em recurso computacional.

Dos diferentes testes de malha definiu-se então utilizar uma malha de 383031 elementos tridimensionais hexaédricos que representam o volume de controle com uma qualidade dentre 95 - 100 % ao ser avaliados as diferenças dos tamanhos dos elementos tridimensionais de malha.

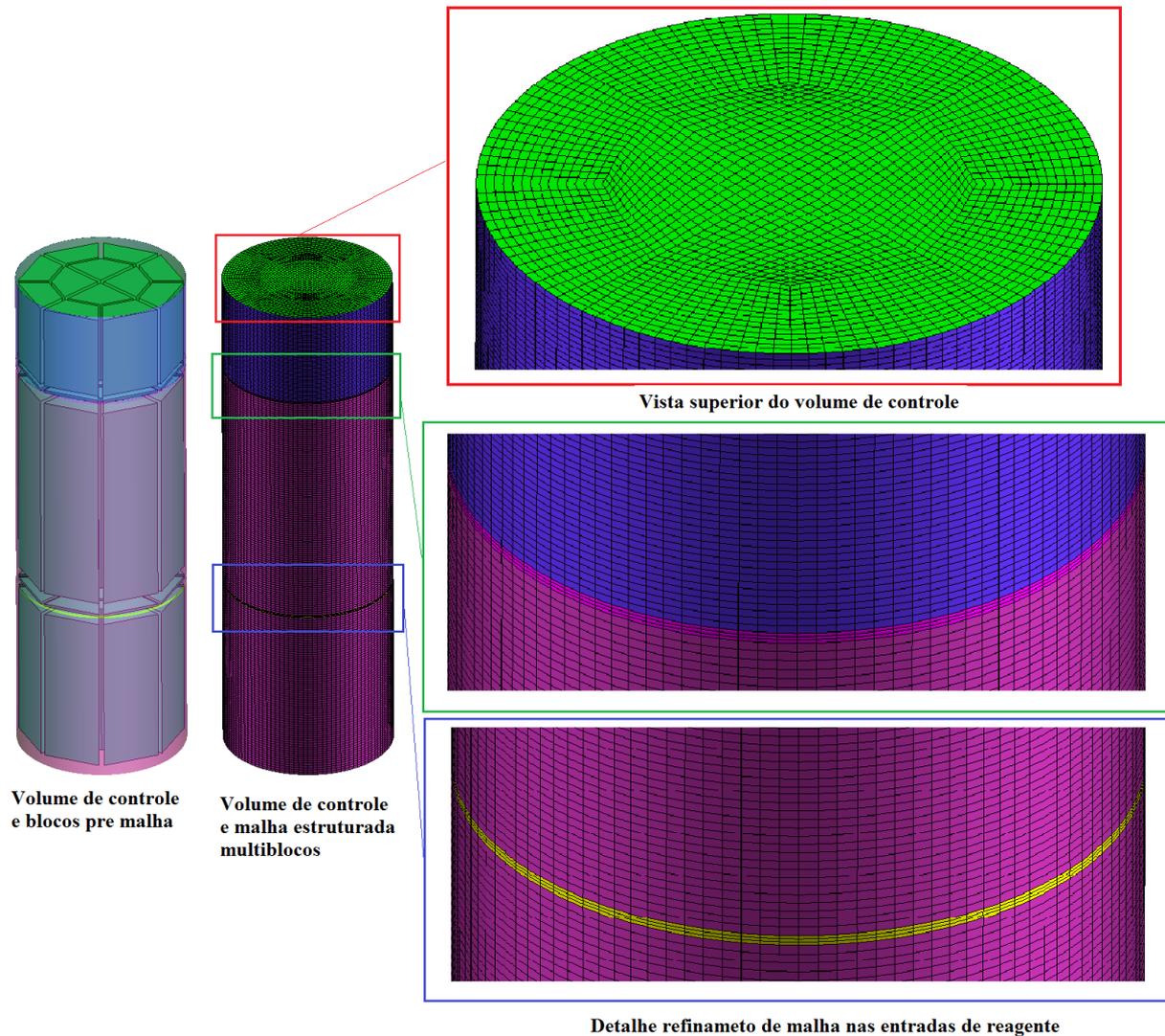


Figura 3-6 Malha elaborada para o volume de controle, detalhes do refinamento

### 3.3 Condições de contorno no volume de controle e outras considerações nas simulações

Parâmetros obtidos experimentalmente fornecem as principais informações necessárias ao estabelecimento das condições de contorno e posterior configuração das condições operacionais a serem simuladas no processo. As principais hipóteses consideradas nas simulações são descritas a seguir:

- O leito do gaseificador é composto por duas fases, sólida e gasosa; que descem interagindo como dois fluxos paralelos (biomassa reagindo e mistura gasosa) em

direção na grelha. Para a fase sólida e gasosa é assumido que os elementos de fase se movimentam com perfis de velocidade uniforme na direção do fluxo dependendo do consumo específico de biomassa, está hipótese conhecida como fluxo pistão [70],[88].

- Se considera regime permanente dado que a maioria dos reatores de leito fixo operam por longos períodos de tempo sem variações significativas de suas propriedades físicas [92].
- Hipótese isotérmica para as partículas sólidas [93].
- Existe transferência de calor por radiação na fase sólida, já que é o mecanismo de transferência de energia mais importante na hora da partida e posterior desenvolvimento das reações no interior do reator [88].
- Considera o comportamento de gás ideal na mistura de gases.
- Cinzas são consideradas inertes quimicamente [92].
- Considerações a partir de dados experimentais utilizadas nas reações químicas são descritas para cada situação particular.

### 3.3.1 Modelo matemático utilizado

- **Método dos Volumes Finitos**

Existem diferentes métodos numéricos para a solução de problemas de engenharia, com a utilizando de um método numérico é possível obter a solução das equações de conservação da massa e de quantidade de movimento. A técnica numérica mais utilizada para problemas de análise de escoamento é a de os volumes finitos que tem como base o balanço das variáveis vetoriais e escalares no volume de controle. Basicamente, o método dos volumes finitos consiste, em princípio, em representar o fenômeno físico através de equações diferenciais de transporte, utilizando uma variável geral (escalar ou vetorial) na forma conservativa e representativa de um o campo de escoamento.

Podem ser escritas as equações da forma geral representada na Equação 3.1 onde, da esquerda para a direita, são identificados os seguintes quatro termos: variação temporal, termo convectivo, termo difusivo e o termo fonte [91], [94], [95].

Posteriormente com a ajuda do teorema de Gauss, é transformada a integral de volume numa integral de superfície. Resultando numa equação geral de conservação na

forma integral. Posteriormente o sistema de equações diferenciais parciais, serão transformados em equações algébricas a serem resolvidas por métodos numéricos, que podem ser diretos, como Eliminação de Gauss e Decomposição LU, ou iterativos, como Método de Gauss-Seidel, Método de Jacobi ou Método das Sobre relaxações Sucessivas.

Dentre as várias técnicas numéricas de solução e suas diferenças, estão associadas à forma com que as variáveis incógnitas são aproximadas e ao procedimento de discretização. Todas essas metodologias numéricas levam a sistemas de equações lineares, com matrizes cheias ou esparsas, com um grande número de equações, tornando necessária uma abordagem numérica para a solução de tais sistemas [90]. Nesta pesquisa, a partir do software escolhido para as simulações o software Ansys Fluent®, será utilizado o método de solução iterativo de Gauss-Seidel, por tratar-se de um dos métodos iterativos que vem se aplicando com êxito em pesquisas semelhantes [96]–[98].

- **Equação da conservação da massa**

A equação da conservação da massa, também conhecida como equação da continuidade, pode ser escrita como:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (3.1)$$

A equação 3.1 é a forma geral da equação da conservação da massa e é válida tanto para fluxos compressíveis quanto para fluxos incompressíveis. O termo fonte  $S_m$  é a massa adicionada à fase contínua desde uma segunda fase dispersa (por exemplo, devido a partículas, vaporização ou gotas de líquido) e qualquer outra fonte definida no modelo particular [91].

- **Equação de conservação do momento**

A conservação do momento em um referencial inercial (não acelerado) é representada como:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (3.2)$$

Onde  $p$  é a pressão estática,  $\bar{\tau}$  é o tensor viscoso equação (3.2), e  $\rho \vec{g}$  as forças de campo e  $\vec{F}$  são as forças externas.

$$\bar{\tau} = \mu \left[ (\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (3.3)$$

Onde  $\mu$  é a viscosidade dinâmica ou absoluta,  $I$  é o tensor unitário. O segundo termo do lado direito é o efeito da dilatação volumétrica [91].

- **Combustão sem pré-mistura**

É considerada combustão sem pré-mistura quando combustível e oxidante entram na zona de reação em correntes distintas. Isto é o contrário do que acontece nos sistemas pré-misturados, nos quais os reagentes se misturam antes de serem queimados. O caso de gaseificação de briquetes de biomassa pode ser considerado um caso típico de combustão sem pré-mistura.

Sob certas hipóteses, a termoquímica pode ser reduzida para um único parâmetro: a fração de mistura ( $f$ ), a qual representa a fração de massa originada a partir do fluxo de combustível. A fração de mistura pode ser vista também como a fração mássica local dos elementos (C, H, etc.) queimados e não queimados do fluxo do combustível no total de espécies ( $\text{CO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{O}_2$ , etc.) da mistura. A abordagem é interessante visto que os elementos atômicos são conservados nas reações químicas. Por sua vez, a fração de mistura é um escalar conservado e, portanto, a sua equação de transporte não possui termo fonte. Usando a abordagem de fração de mistura, a combustão é simplificada a um problema de mistura e são evitadas as dificuldades associadas com a utilização de taxas de reação media não lineares.

A modelagem de combustão sem pré-mistura envolve a solução de equações de transporte para um ou dois escalares. Não são resolvidas equações para espécies individuais, mas em lugar disso as concentrações das espécies são derivadas dos campos de frações de mistura predeterminados. Os cálculos termoquímicos são pré-processados e tabuados numa dispersão para serem usados nos demais cálculos quando necessário. A interação entre turbulência e reações químicas pode ser contabilizada assumindo uma forma de função densidade de probabilidade (PDF pelas iniciais em inglês) [91].

- **Equação de conservação da energia para combustão não pré-misturada**

Esta versão da equação da energia é usada para problemas de combustão/gaseificação não pré-misturados, não-adiabáticos. Por apresentar características de dissipação viscosa aparece o termo  $Sh$ , utilizado como um termo pivô,

inserido eventualmente, mas nesta pesquisa não é considerado já que a operação do reator é feita a pressão atmosférica o que torna este termo a ser insignificante nestes casos:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} H) = \nabla \cdot \left( \frac{k_t}{c_p} \nabla H \right) + S_h \quad (3.4)$$

Considerando que o número de Lewis é:

( $Le = [(Difusividade\ termica)/(Difusividade\ massica)] = 1$ ), os termos da condução e difusão de espécies se misturam resultando no primeiro termo do lado direito da equação (3.4). Enquanto a contribuição da dissipação viscosa aparece numa forma não conservativa como o segundo termo. A entalpia total  $H$  é definida como:

$$H = \sum_j Y_j H_j \quad (3.5)$$

Onde  $Y_j$  é a fração mássica da espécie  $j$  e:

$$H_j = \int_{T_{ref_j}}^T c_{p_j} dT + h_j^0(T_{ref_j}) \quad (3.6)$$

Onde  $h_j^0(T_{ref_j})$  é a entalpia de formação da espécie  $j$  na temperatura de referência  $T_{ref_j}$ .

Este termo exclui a necessidade de calor do termo fonte uma vez que a reação de formação de calor está incluída. No entanto, a equação de energia para este modelo inclui um termo fonte de radiação [91]. O termo fonte de radiação é definido na equação (4.7).

$$-\nabla \cdot q_r = aG - 4an^2\sigma T^4 \quad (3.7)$$

- **Equação de transporte para fração de mistura gasosa**

A equação de transporte para a média de Favre da fração de mistura é:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m + S_u \quad (3.8)$$

Onde o termo fonte  $S_m$  é referido unicamente à transferência de massa para a fase gasosa a partir de uma fase dispersa (partículas, gotas),  $S_u$  é um termo fonte que pode ser definido pelo usuário.

Além da equação (4.8), uma equação para a conservação da variação da fração de mistura ( $\overline{f'^2}$ ) também é resolvida:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \overline{f'^2}) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla \bar{f})^2 - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} + S_u \quad (3.9)$$

Onde:

$$f' = f - \bar{f} \quad (3.10)$$

e  $\sigma_t = 0,85$ ;  $C_g = 2,86$ ; and  $C_d = 2,0$

- **Modelo de turbulência *Standard k-ε***

Nesta abordagem é utilizado o modelo *k-ε* padrão, representado pelas equações de transporte para energia cinética e a taxa de dissipação.

O modelo *k-ε standard* (padrão) é amplamente utilizado na modelagem de fenômenos que apresentam turbulência, para aplicações científicas, é considerado um modelo robusto e razoavelmente preciso, contendo sub-modelos de compressibilidade, empuxo, combustão, multifásicos, etc. O modelo *k-ε* contém funções de parede, não sendo necessária a simulação na região da camada viscosa laminar e da camada intermediária. Os coeficientes são derivados empiricamente e são válidos para escoamentos totalmente turbulentos. O modelo *k-ε* é muito popular para aplicações industriais devido à fácil convergência. Geralmente, não é indicado para escoamentos onde existem grandes regiões de separação, gradientes adversos, altas curvaturas de linha de corrente e altos gradientes de pressão.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (3.11)$$

E

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) \\ = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \left( \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} \\ + S_\varepsilon \end{aligned} \quad (3.12)$$

Nas equações (3.11) e (3.12),  $G_k$  representa a geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente da velocidade principal.  $G_b$  é a geração de energia cinética turbulenta devido as flutuações.  $Y_M$  representa a contribuição da dilatação flutuante em turbulência compressível à taxa total de dissipação; termos que são desconsiderados, neste caso, já que a gravidade é considerada e dissipação de dilatação ocorre apenas em números elevados Mach, que não está sob consideração neste modelo.  $\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$  são os números de Prandtl turbulento para  $k$  e  $\varepsilon$  respectivamente.  $S_k$  e  $S_\varepsilon$  são termos fonte definidos pelo usuário.

A viscosidade turbulenta ( $\mu_t$ ) é calculada combinando  $k$  e  $\varepsilon$  como segue:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.13)$$

Onde  $C_\mu$  é uma constante.

As constantes do modelo  $C_{1\varepsilon}$ ,  $C_{2\varepsilon}$ ,  $C_\mu$ , por omissão voluntária neste caso, possuem valores experimentais definidos por [60] adotados no Fluent®. Os números de Prandtl turbulentos para  $k$  e  $\varepsilon$ ,

$\sigma_k$  e  $\sigma_\varepsilon$ , são dados como 1,0 e 1,3 respectivamente [60], [81], [83]. Para este modelo, não foram utilizados termos fonte, definidos pelo usuário.

$$C_{1\varepsilon} = 1.44$$

$$C_{2\varepsilon} = 1.92$$

$$C_\mu = 0.09$$

$$\sigma_k = 1.0$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3$$

- **Componentes da partícula de biomassa**

A partícula de biomassa é considerada composta por frações de biomassa sem reagir, água, voláteis, material carbonoso e cinzas (Base úmida). Na forma de seus componentes:  $y_p^{\text{carb}}$ ,  $y_p^{\text{biomcrua}}$ ,  $y_p^{\text{volateis}}$ ,  $y_p^{\text{agua}}$ , para o caso das cinzas, estas são calculadas pela diferença.

- **Secagem**

Os fatores em influenciam o processo de secagem são: tamanho de partícula, umidade inicial, temperatura, umidade relativa e velocidade do gás na vizinhança. Neste trabalho um modelo de equilíbrio (água liberada e absorvida) é considerado na fase local dos poros. Matematicamente isto será representado assumindo que este fenômeno acontece de forma instantânea uma vez a biomassa entra na zona de secagem.

Um modelo de núcleo exposto é assumido como uma aproximação na descrita da secagem de uma partícula de biomassa. Embora a secagem não sugere reações químicas importantes a transferência de massa é considerada como mecanismo importante nesta etapa. Assumindo que todas as mudanças de fase acontecem na interfase núcleo-vizinhança envolvente [88], a velocidade de secagem pode ser descrita como:

$$\bar{r}_s = \frac{2}{d_{p,l}} \frac{\bar{\rho}_{\text{agua,sat}} - \bar{\rho}_{\text{agua},\infty}}{\sum_1^3 U_{d,k}} \quad (3.14)$$

Onde

$$U_{d,1} = \frac{1}{D_{\text{agua,g}} N_{\text{sh}}} = U_{U,1} \text{ Para a capa limite de gás}$$

$$U_{d,2} = \frac{1-a}{a D_{\text{agua,A}}} = U_{U,2} \text{ Para a envolvente que está no redor do núcleo}$$

$$U_{d,3} = 0 \text{ Para o núcleo}$$

$d_{p,l}$  é o diametro inicial da partícula

Com

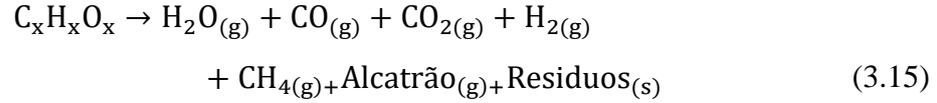
$$N_{\text{sh}} = \frac{\beta_g r_a}{D_{\text{H}_2\text{O,gas}}}$$

$$D_{\text{H}_2\text{O,gas}} = 8,677 * 10^{-5} \frac{T^{1,75}}{P}$$

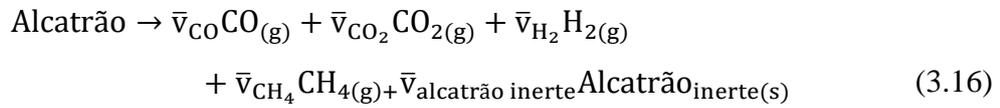
- **Pirólise**

Num primeiro passo da pirólise primaria, o sólido é decomposto termicamente em gases, alcatrão e material carbonoso [88]. Já a conversão do alcatrão em gás e material

carbonoso é denominada por vários autores como pirólise secundária[68], [99]. Uma aproximação foi proposta para generalizar a formação dos voláteis, a seguir:

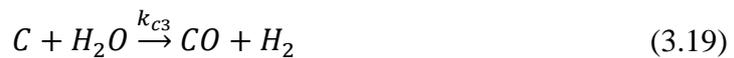
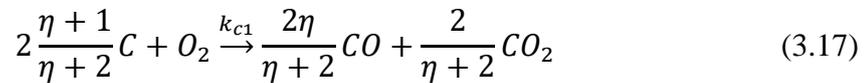


Uma segunda decomposição térmica do alcatrão é gerada como uma mistura de hidrocarbonetos condensados. As reações de craqueamento acontecem homoganeamente na fase gasosa e heterogeneamente na partícula e no material carbonoso. Neste estudo considera-se que o alcatrão segue uma só reação global, a seguir:



- **Reações Heterogêneas**

São consideradas aqui as reações que acontecem a partir dos resíduos sólido da pirólise com as espécies na fase gasosa. As seguintes considerações são levadas em conta para as reações nesta etapa.



A taxa de produção  $\eta$  para o CO e CO<sub>2</sub> muda com a temperatura [85] e a ordem das reações é calculada a seguir:

$$r_{het} = \frac{3r_2}{D} k_{Ti} p_i \quad (3.20)$$

Para:

$$k_{Ti} p_i = \frac{1}{\left(\frac{1}{k_{ci}}\right) + \left(\frac{1}{K_{Di}}\right)} \quad \text{para } i = O_2, CO_2, H_2O, H_2 \quad (3.21)$$

Onde  $D$  é o diâmetro da partícula:  $p_i$  é a pressão parcial do componente  $i$  e  $k_c$  e  $k_D$  são as constantes cinética e de difusão respectivamente, e calculados como segue:

$$k_c = A_h e^{-Eh/RT_2} \quad (3.22)$$

$$k_D = \frac{Sh D_k M_c}{RT_1 D} \quad (3.23)$$

$Sh$  é o número de Sherwood,  $D_k$  o coeficiente de difusão para  $O_2$ ,  $CO_2$ , e  $H_2O$  e  $M_c$  a massa molecular do carbono [88], [100].

- **Tamanho de partícula**

A mudança no tamanho de partícula é determinada por um escalar adicional na fase sólida que representa o inverso da fração sólida consumida durante a transferência de massa, permitindo a seleção dos processos de transferência de massa que contribuem com a mudança na partícula. O escalar  $\Phi_s$  é calculado a partir de uma equação de transporte, como segue [88], [100]:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f} \Phi_s) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \bar{f} \Phi_s) = \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m + S_{\Phi_s} \quad (3.24)$$

Nesta pesquisa são considerados unicamente as reações heterogêneas que contribuem com o processo de transferência de massa, como fator para a redução do tamanho de partícula.

Logo, é calculado o diâmetro total da partícula como:

$$D = D_i \Phi_s^{-1/3} \quad (3.25)$$

Onde  $D_i$  é o diâmetro inicial da partícula, e  $D$  o diâmetro da partícula.

- **Detalhamento Químico**

Nesta seção são apresentadas as taxas de reações cinéticas das reações heterogêneas que conformam o mecanismo de reação do processo de gaseificação para o cálculo posterior das taxas netas de reação por espécie.

As constantes cinéticas são apresentadas na Tabela 3-1, a seguir:

Tabela 3-1 Expressões cinéticas para as reações heterogêneas

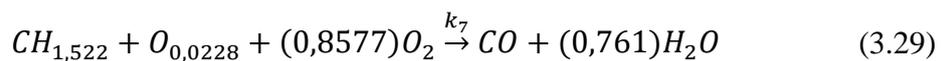
Taxa de reação	Ud.
$r_1 = 1,5 * 10^6 \exp\left(\frac{-13078}{T_2}\right) P_{O_2} (1 - X_c)^{1/2}$	$s^{-1}$
$\eta = 3 * 10^8 \exp\left(\frac{-30178}{T_2}\right)$	--
$r_2 = 4364 \exp\left(\frac{-29844}{T_2}\right) C_{CO_2}$	$s^{-1}$
$r_3 = \frac{k_4 p_{H_2O}}{1 + k_5 p_{H_2O} + k_6 p_{H_2}}$	$s^{-1}$
$k_4 = 4,93 * 10^3 \exp\left(\frac{-18522}{T_2}\right)$	$s^{-1} \text{bar}^{-1}$
$k_5 = 1,11 * 10^1 \exp\left(\frac{-3548}{T_2}\right)$	$\text{bar}^{-1}$
$k_6 = 1,53 * 10^{-9} \exp\left(\frac{-25161}{T_2}\right)$	$\text{bar}^{-1}$

Fonte: [68], [99]

- **Componentes e reações na fase gasosa.**

A fase gasosa é simulada como uma mistura de 7 espécies, representadas pelas suas frações mássicas  $y_{O_2}$ ,  $y_{H_2O_{vapor}}$ ,  $y_{CO}$ ,  $y_{H_2}$ ,  $y_{CO_2}$ ,  $y_{CH_x}$  e  $y_{N_2}$ . A equação de transporte de é resolvida para cada uma de estas espécies.

Na pirólise, são produzidas espécies gasosas reativas, como vapor d'água que reage com oxigênio no ar no primeiro estágio. Como o calor gerado das reações exotérmicas, nesta pesquisa são consideradas as seguintes reações homogêneas.



As constantes de equilíbrio são calculadas a partir da energia livre de Gibbs. O equilíbrio nas reações é assumido na direção dos produtos e por tanto a reação inversa não é levada em conta. Os parâmetros cinéticos são tomados da literatura conforme é apresentado na Tabela 3-2.

A transferência de calor na interfase solido - gás é modelada como:

$$q_{j \rightarrow i} = \frac{12,36r_2}{r_1 D_1} \rho_1 C p_1 u_1 Re^{-0,575} Pr^{-2/3} (T_j - T_i) \quad (3.32)$$

Onde,  $Re$  e  $Pr$  são os números Reynolds e Prandtl na fase gasosa.

Tabela 3-2 Expressões cinéticas para as reações homogêneas na fase gasosa

Taxa de reação	Ud.
$r_4 = 2,78 * 10^{-3} \exp\left(\frac{-1510}{T_g}\right) \left(y_{CO} y_{H_2O} - \frac{y_{CO_2} y_{H_2}}{K}\right) C_{mol}^2$	mol/m <sup>3</sup> /s
$K = 0,0265 \exp\left(\frac{-68,5}{RT_g}\right)$	---
$r_5 = 3,98 * 10^{14} \exp\left(\frac{-20119}{T_g}\right) y_{CO} y_{O_2}^{0,25} y_{H_2O}^{0,5} C_{mol}^{1,75}$	mol/m <sup>3</sup> /s
$r_6 = 2,19 * 10^{12} \exp\left(\frac{-13127}{T_g}\right) y_{H_2} y_{O_2} C_{mol}^2$	mol/m <sup>3</sup> /s
$r_7 = 1,58 * 10^{13} \exp\left(\frac{-24343}{T_g}\right) y_{CH_4}^{0,7} y_{O_2}^{0,8} C_{mol}^{1,5}$	mol/m <sup>3</sup> /s
$r_8 = 3,21 * 10^2 \exp\left(\frac{-468}{T_g}\right) y_{CH_4}^{0,7} y_{H_2O}^{1,3} C_{mol}^2$	mol/m <sup>3</sup> /s
$r_9 = 3,21 * 10^2 \exp\left(\frac{-468}{T_g}\right) y_{H_2}^{1,3} y_{CO}^{0,7} C_{mol}^2$	mol/m <sup>3</sup> /s

Fonte: [68], [69], [93]

A transferência de quantidade de movimento entre o gás e as partículas no leito para a interfase sólido - gás é levada em conta na direção axial usando a equação 3.33.

$$f_{i \rightarrow j} = f_{j \rightarrow i} = \frac{1}{0,8D_i} \rho_1 C_D (W_1 - W_2) \quad (3.33)$$

Onde  $W_1 - W_2$  é assumido como a mudança de velocidade relativa entre a partícula e o gás,  $C_D$  é o coeficiente de arrasto, o qual é calculado como:

$$C_D = 1,75 + \frac{150\eta_1}{0,8D} \quad (3.34)$$

Para  $\eta_1$  como velocidade cinemática do gás,  $D$  o diâmetro médio da partícula.

- **Função de densidade de probabilidade**

Para a modelagem da geração e distribuição de espécies no reator de duplo estágio é assumido o modelo de combustão incompleta sem pre-mistura, onde o combustível, neste caso a biomassa entra pelo topo do reator e os reagentes entram nas laterais.

Caberá então fornecer a composição elementar do combustível e do tipo de reagente para utilizar uma função densidade de probabilidade, PDF pelas siglas em inglês (*Probability Density Function*). Escrito como  $P(f)$ , em que  $f$  é considerada a fração de mistura. É, por conseguinte, descreve a possibilidade que um dado aleatório assumir um dado valor dentro de uma determinada faixa em um instante de tempo  $t$ . Escrito matematicamente

$$\Delta f \cdot p(f) = \lim_{T \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{T} \right) \cdot \sum T_i \quad (3.35)$$

A forma da função de  $P(f)$  depende da natureza das flutuações turbulentas em  $\Delta f$  (veja-se a Figura 3-7).

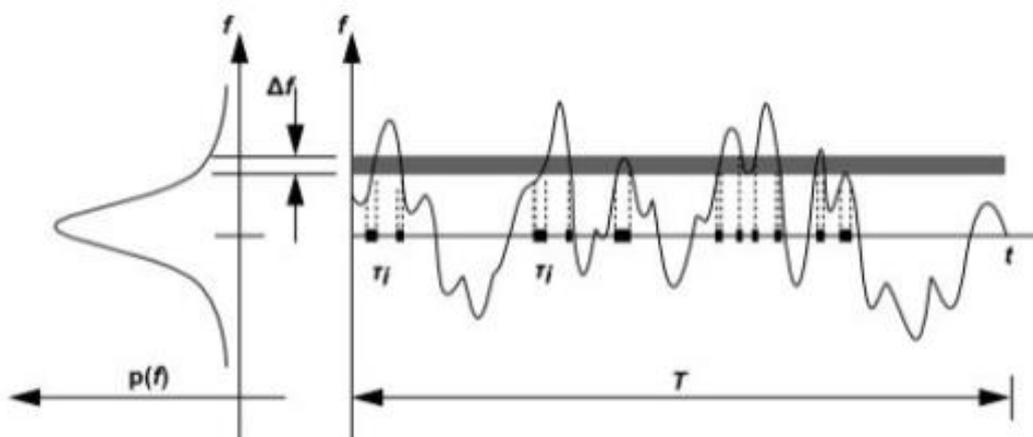


Figura 3-7 Representação da função de densidade de probabilidade

Na prática,  $P(f)$  é desconhecida e é modelada como uma função matemática que se aproxima das formas PDF reais que são observados experimentalmente [91].

Graficamente a composição de uma PDF é apresentada na Figura 3-8, composta por uma fração de mistura (presente no eixo  $x$ ), o valor do escalar (presente no eixo  $y$ ) e a variância do escalar (presente no eixo  $z$ ).

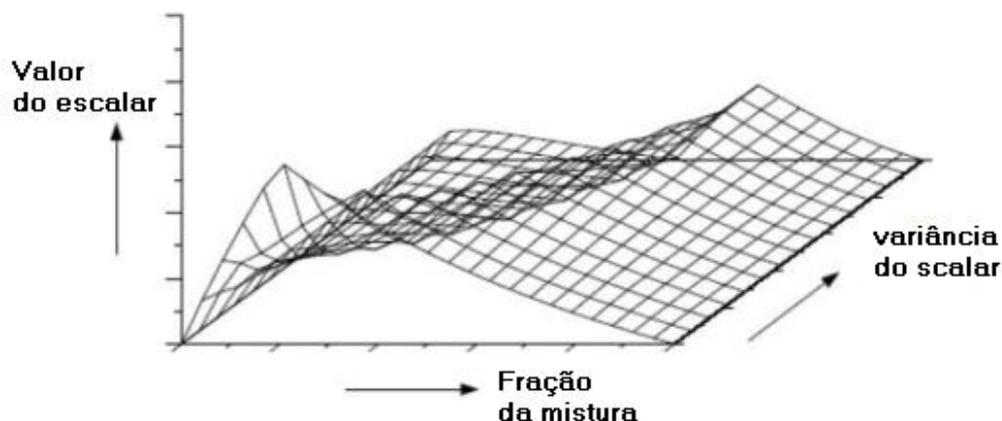


Figura 3-8 Representação 3D de uma função de densidade de probabilidade específica

### 3.3.2 Resumo generalizado das simulações

Nesta seção são apresentadas as principais considerações das simulações, levando em conta as condições de fronteira e especificações das mesmas. A

Tabela 3-3 apresenta de forma geral as condições de contorno, parâmetros e modelos utilizados nas simulações no software ANSYS FLUENT®.

O procedimento para simulação começa com a importação para o programa ANSYS FLUENT® do modelo geométrico, ou seja, o volume de controle no qual foi projetada a malha (Figura 3-6), logo são definidos os parâmetros de escalado para testar mais uma vez a qualidade dos elementos tridimensionais. Na sequência são inseridos e acoplados os modelos para equação de conservação energia, conservação de massa, quantidade de movimento, assim como a equação de transporte para a fração de mistura, e os componentes do modelo de partículas nas diferentes zonas do reator. Posteriormente para construir a função de densidade de probabilidade são atualizados os modelos de secagem, pirólise, reações heterogêneas, de tamanho de partícula e da cinética química das reações na fase gasosa e das reações homogêneas. Em seguida continua-se com a configuração das condições de contorno nas respectivas superfícies do reator, vasões mássicos de biomassa e agente de gaseificação, modelo de radiação e definido o esquema de solução baseado no critério de convergência desejado.

Tabela 3-3 Condições gerais das simulações da gaseificação para o caso base

Modelo	Seleção	Observações
Domínio computacional	3D	383031 elementos de Malha hex. Estrut.
Regime	Permanente	
Viscosidade	$k-\varepsilon$ standard	Modificado para $k-\varepsilon$ realizável
Tratamento das paredes	Funções padrão	É assumido comportamento isotérmico
Radiação	P1	Por default
Transporte de espécies	PDF	Calculada a partir do análise elementar e o PCI do combustível
Nome da superfície	Definição no Ansys Fluent	Atributo
<i>Inlet_Biomassa</i>	Entrada de fluxo de massa	$X_1$ kg/s 410K
<i>Dry</i> (Secagem)	Superfície	410K
<i>Combustion</i> (Combustão)	Superfície	1230K
<i>Inlet_air_1</i> (1er estágio)	Entrada de fluxo de massa	$X_2$ kg/s 1234K
<i>Inlet_air_2</i> (2do estágio)	Entrada de fluxo de massa	$X_3$ kg/s 1123K
<i>Oxi_Reduction</i> (Redução)	Superfície	1123K
<i>Outlet_syngas</i> (Saída)	Saída de pressão	900K
<i>Gasifier</i> (Gaseificador)	Interior	Meio poroso

Coeficientes  $X_1, X_2$  e  $X_3$  são inseridos de acordo as vazões de biomassa e reagente respetivamente

### • Esquemas de discretização e interpolação

No processo de discretização, o sistema de equações de quantidade de movimento e da conservação da massa pode ser concebido para ser resolvido de maneira segregada ou acoplada. A solução segregada consiste em resolver os sistemas lineares de cada equação uma a uma, atualizando seus coeficientes devido à não linearidade e ao acoplamento entre as variáveis. A solução acoplada, por sua vez, cria uma única matriz envolvendo todos os coeficientes e resolvendo todas as incógnitas simultaneamente, necessitando de atualizações da matriz de coeficientes devido à não linearidade do problema, ou seja, com a solução acoplada, evita-se empregar os conhecidos métodos para o tratamento do acoplamento pressão e velocidade.

Os métodos que utilizam a solução segregada usam a equação de conservação da quantidade de movimento para calcular os componentes do vetor velocidade e transformam a equação de conservação da massa em uma equação que permite uma correção para o campo de pressões utilizado anteriormente. Esse novo campo de pressões deve corrigir as velocidades de tal forma que a massa seja conservada. A Figura 3-9 mostra uma representação esquemática do método SIMPLE (*Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations*).

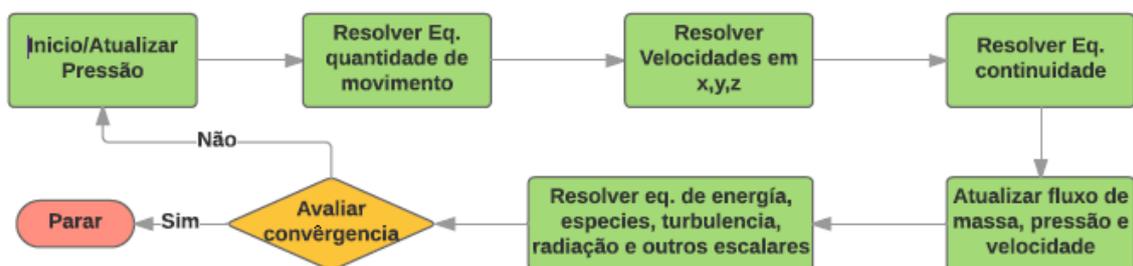


Figura 3-9 Esquema de discretização do método SIMPLE

## **Capítulo 4 Testes experimentais de gaseificação de biomassa num reator co – corrente de duplo estágio**

Neste capítulo são tratados os assuntos relacionados aos materiais e sua caracterização físico química e energética, a metodologia experimental, assim como os procedimentos de partida, operação do reator de duplo estágio e equipamentos utilizados, visando-se obter as informações experimentais como ponto de partida e posterior conjunto de elementos que ajudaram a validar a eficácia dos modelos a partir das simulações e discutir os resultados de gaseificação de biomassa com misturas de agentes de gaseificação.

### **4.1 Materiais: Análise elementar e imediata**

Foram feitas análises elementar e imediata de briquetes de CDR, eucalipto e capim elefante no laboratório para caracterização de combustíveis sólidos do Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída (NEST), da Universidade Federal de Itajubá para o qual foi empregado um analisador CHNSO da marca Perkin Elmer series II 2400 [101] para análise baseado na norma ASTM D 5373-08 [102]. A análise imediata (cinzas, voláteis, carbono fixo) foi realizada utilizando um analisador termogravimétrico marca LECO 701[103] para análise seguindo a norma ASTM D317\* [104], e para a determinação do poder calorífico superior foi empregada uma bomba calorimétrica marca

IKA, modelo C2000 operando o método dinâmico a 25°C por 7 min. Fotografias dos materiais utilizados experimentalmente são apresentadas na Figura 4-1



a) Eucalipto em pedaços  
2-3 \* 4,5 cm aprox.



b) Eucalipto em briquetes  
3 cm diâmetro \* 3-5 cm comprimento



c) Miscanthus em briquetes  
3 cm diâmetro \* 3-5 cm comprimento



d) CDR em briquetes  
3 cm diâmetro \* 3-5 cm comprimento

Figura 4-1 Biomassas utilizadas nos testes experimentais

Numa primeira caracterização dos combustíveis derivados de resíduos (CDR) foram achados valores muito parecidos para as análises elementar e imediata e poder calorífico ao ser comparados os CDR com briquetes de eucalipto, fato que determinou a escolha na hora de realização dos testes experimentais. Não entanto, pela natureza dos resíduos sólidos é de se esperar que os CDR possam apresentar valores muito diferentes nas análises físicas, químicas e no conteúdo de umidade [53] tal e como foi mencionado em apartados anteriores dada a natureza dos resíduos sólidos urbanos e as diferentes características baseados na zona em que são gerados.

Para efeitos de esta pesquisa, um outro elemento ajudou para a escolha de briquetes de eucalipto, e foi a possibilidade de comparação com um conjunto de testes realizados no mesmo reator utilizando eucalipto em pedaços e diferentes reagentes [14], além das variadas experiências em gaseificadores de duplo estágio do grupo NEST-UNIFEI

reportadas nos apartados anteriores. Na Tabela 4-1 são apresentados os resultados das análises elementar e imediata em base seca das biomassas utilizadas nesta pesquisa.

Tabela 4-1 Análise Elementar e imediata de CDR, Eucalipto e Capim. (base seca)

<b>Elementar (%BS)</b>	<b>Eucalipto</b>	<b>Capim</b>	<b>CDR</b>	<b>Standard</b>
Carbono	45,12	48,6	44,91	ASTM D 5373-08 [102]
Nitrogênio	0,16	0,27	1,7	ASTM D 5373-08 [102]
Hidrogênio	6,30	6,00	6,45	ASTM D 5373-08 [102]
Enxofre	2,09	0,07	2,12	ASTM D 5373-08 [102]
Oxigênio*	46,33	45,06	44,82	Pela diferença
<b>Imediata (%BS)</b>				
Cinzas	0,65	4,61	2,43	ASTM D 3175 [104]
Voláteis	73,00	67,15	72,58	ASTM D 3174 [104]
Carbono Fixo	15,18	16,68	16,70	ASTM D-3172 [104]
Umidade	11,17	11,56	8,29	ASTM D 3173 [104]
PCI [MJ/kg]	15,609	16,257	16,015	NA

## 4.2 Características do gaseificador co-corrente de duplo estágio

A composição básica do equipamento é apresentada na Figura 4-2, fabricado pela empresa Termoquip®, construído em aço carbono, revestido interiormente de material refratário, com uma altura de 2,2 m, considerando o silo de biomassa e a parte destinada a retirada das cinzas produzidas no processo; tem um diâmetro externo de 500 mm e o interno 300 mm.

Este reator possui dois vibradores, um localizado no silo para ajudar no escoamento e outro localizado sobre o coletor de cinzas, o qual contribui para a movimentação da biomassa que fica acima da grelha e a remoção das cinzas.

O reator foi projetado para produzir uma potência térmica máxima de 45 kWt com um consumo nominal de 12 kg/h de biomassa úmida. O reagente no segundo estágio (perto da zona de oxidação, ver Figura 4-2) é utilizado para a queima parcial da biomassa a fim de gerar a energia necessária para as etapas de secagem e pirólise, assim como para o desenvolvimento de algumas reações endotérmicas do processo; já o segundo estágio tem como principal finalidade o craqueamento térmico do alcatrão produzido no processo [24], [25].



Figura 4-2 Gaseificador co-corrente no laboratório do NEST-UNIFEI

Fonte: Adaptações de [14] e [25].

### 4.3 Procedimento operacional e arranjo dos testes no gaseificador

Nesta pesquisa foram realizados testes experimentais de gaseificação com briquetes de eucalipto e capim elefante (com dimensões aproximadas de: 35 mm de diâmetro; 35 - 50 mm de largura). Estes materiais foram escolhidos pelas características similares com as análises próxima e imediata feitas com os briquetes de CDR.

Na sequência são apresentados os fatores de cálculo para os diferentes reagentes de gaseificação adotados também em pesquisas anteriores [14], os quais foram reproduzidos com o intuito de garantir repetitividade e significância estatística.

- **Razão de Equivalência = RE (*Equivalent Ratio = ER*)**

O fator de ar define a proporção de combustível queimado (combustão completa) com relação à quantidade gaseificada (oxidação parcial e/ou redução). Segundo dados reportados na literatura, o fluxo de agente de gaseificação controla o consumo de biomassa em gaseificadores de fluxo descendente de leito móvel e, conseqüentemente, a velocidade superficial do gás (SGV), a taxa específica de gaseificação (SGR) e a razão de equivalência [39],[85], [105], [106]. Todos eles são parâmetros operacionais importantes na gaseificação de biomassa neste tipo de reatores.

A razão de equivalência RE (Estabelecida como o volume de ar real fornecido à razão do volume de ar estequiométrica necessária para combustão do material) é obtido a partir do balanço de massa do processo de gaseificação. É o cociente entre a razão de ar/combustível real pela razão ar/combustível estequiométrica (Eq. 4.1). Define a fração de combustível gaseificado (oxidação parcial) em relação à proporção de combustível queimado (combustão completa) [107].

$$RE = \frac{(R A / C)_{real}}{(R A / C)_{esteq}} \quad (4.1)$$

O volume teórico de oxigênio necessário para queimar completamente 1kg de biomassa (em base seca) é dado pela Eq.4.2. [32]

$$VO_2 = (1,866 \times \frac{C}{100} + 5,56 \times \frac{H}{100} + 0,7 \times \frac{S}{100} - 0,7 \times \frac{O}{100}) Nm^3 / kg_{comb} \quad (4.2)$$

Assumindo que uma molécula de o ar conte cerca de 21% de O<sub>2</sub> e 79% de N<sub>2</sub> por volume, quando 1 kg de combustível (em base seca) é queimado completamente, este requer uma quantidade de ar em volume dada pela Eq. 4.3.

$$(R A / C)_{esteq} = Var = \frac{1}{0,21} (1,866 \times \frac{C}{100} + 5,56 \times \frac{H}{100} + 0,7 \times \frac{S}{100} - 0,7 \times \frac{O}{100}) Nm^3 / kg_{comb} \quad (4.3)$$

Logo, a relação ar/combustível estequiométrico, determinada em m<sup>3</sup>/kg nas condições normais de temperatura e pressão (1atm e 0°C) fica:

$$(R A / C)_{esteq} = 0,0889 \times (C + 0,375S) + 0,265 \times H - 0,033ONm^3 / kg_{comb} \quad (4.4)$$

A relação ar/combustível real é calculada considerando a quantidade de biomassa consumida na operação do reator ( $m_b$ ), a vazão volumétrica de ar ( $V_{ar}$ ) e o tempo de operação ( $t$ ) como mostra a Eq. 4.5.

$$(RA/C)_{real} = \frac{(V_{ar} \times t)}{m_b} \quad (4.5)$$

• **RE<sub>eq</sub> ou GR- (RE<sub>H<sub>2</sub>O+O<sub>2</sub></sub>)- A razão de gaseificação GR (*Gasifying Ratio*)**

É o equivalente a razão de equivalência RE, desconsiderando a parcela de nitrogênio presente no ar. Nesta pesquisa, adotando a mesma nomenclatura o GR será chamado de RE<sub>eq</sub>. (Fator de ar equivalente) ou apenas RE.

A mistura vapor+ oxigênio será composta do somatório da quantidade de oxigênio puro e o vapor.

• **Razão vapor/biomassa**

A utilização de vapor no processo de gaseificação tem por objetivo aumentar os teores de hidrogênio no gás produzido, O vapor favorece a reação de água e gás, responsável pela formação de H<sub>2</sub> e CO. A expressão *Steam-to-biomass ratio* (SBR) é calculada segundo a Eq. 4.6.

$$SBR = \frac{\dot{m}_{vapor} + \dot{m}_{\acute{a}gua\_biom}}{\dot{m}_{biom\_livre\_cinzas\_e\_\acute{a}gua}} \quad (4.6)$$

Os arranjo experimental desta pesquisa é complementado com outros trabalhos realizados no NEST/UNIFEI, para condições de gaseificação com ar, ar + vapor e vapor + oxigênio estudando a relação de equivalência que varia entre 0,25 até 0,45; adotando a relação de equivalência (RE) de 0,35 como a parâmetro de referência, amplamente referenciado como a melhor condição operacional para este tipo de reator [14], [24], [25], [57], [58]. Na Tabela 4-2, são apresentadas as condições operacionais do reator na fase experimental.

Tabela 4-2 Resumo das condições operacionais do gaseificador

Biomassa (kg/h)	Agente de Gaseificação	RE	Vazão mássica (kg/h)	SBR*	Vazão de Vapor (kg/h)
12	Ar	0,25-0,45	20-28 (ar)	NA	NA
	Ar + Vapor	0,25-0,45	20-28 (ar)	0,4-1,0	3-9
	Oxigênio + Vapor	NA	4,8-6,4 (O <sub>2</sub> )	0,4-1,0	3-9

\*Ração Vapor Biomassa (*SBR: Steam to biomass ratio*)

Para os testes experimentais foi tomando como base 12 kg/hr de biomassa na base de trabalho, considerou-se um total de quinze corridas, como mostrado na Tabela 4-3. Assim, três variações do fluxo de ar (16,00, 18,70 e 21,30 Nm<sup>3</sup> / h) para os testes com (i) apenas ar. Do mesmo modo, duas variações do fluxo de vapor (3,0 e 9,0 kg / h) para cada fluxo de ar mencionado acima, resultando em seis corridas para os ensaios com (ii) ar + vapor saturado. Testes preliminares com fluxo de vapor superior a 9,0 kg / h mostraram forte redução de temperatura. Finalmente, três variações do fluxo de oxigênio (3,36, 3,92 e 4,48 Nm<sup>3</sup> / h), para cada fluxo de vapor mencionado acima, o que levou a outras seis execuções para os testes com (iii) oxigênio puro e vapor.

Tabela 4-3 Tabela de experimentos com diferentes reagentes.

#	Nomenclatura	Ar (kg/h)	O <sub>2</sub> (kg/h)	Vapor (kg/h)
1	A1 Air_1	20,60		
2	A2 Air_2	24,08		
3	A3 Air_3	27,42		
4	A1S1 Air_1 + 3St	20,60		3,00
5	A2S1 Air_2+ 3St	24,08		3,00
6	A3S1 Air_3 + 3St	27,42		3,00
7	A1S2 Air_1 + 9St	20,60		9,00
8	A2S2 Air_2+ 9St	24,08		9,00
9	A3S2 Air_3 + 9St	27,42		9,00
10	O1S1 O_1 + 3St		4,80	3,00
11	O2S1 O_2 + 3St		5,60	3,00
12	O3S1 O_3 + 3St		6,40	3,00
13	O1S2 O_1 + 9St		4,80	9,00
14	O2S2 O_2 + 9St		5,60	9,00
15	O3S2 O_3 + 9St		6,40	9,00

#### 4.4 Composição do gás produzido e perfis de temperatura

A composição do gás produzido no gaseificador é obtida utilizando analisadores contínuos da marca SIEMENS® modelo ULTRAMAT-23 para análise de monóxido de

carbono, oxigênio e metano; e CALOMAT-6 para análise de hidrogênio. Os valores de temperatura são monitorados através de 7 termopares tipo k com sensibilidade aproximada de  $41\mu\text{V}/^\circ\text{C}$  instalados na parte interna do gaseificador e distribuídos como aparece na Figura 4-2. Tanto os dados de temperatura como da composição do gás são enviados a um computador através do sistema de aquisição de dados *Contempview*®. As informações são armazenadas na memória do computador a cada dois segundos e podem ser vistas em tempo real durante o experimento, o que permite monitorar o comportamento do processo.

O poder calorífico inferior (PCI) do gás é calculado a partir da fração volumétrica dos combustíveis do gás: CO, H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>. De acordo com a metodologia apresentada pelo Laboratório Nacional de Energia Renovável (NREL, pelas siglas em inglês do *National Renewable Energy Laboratory*), e adotada nesta e outras pesquisas do grupo NEST/UNIFEI [14], o poder calorífico inferior do CO, H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub> é 12,622 MJ/Nm<sup>3</sup>, 10,788 MJ/Nm<sup>3</sup> e 35,814 MJ/Nm<sup>3</sup> respectivamente [14].

A equação que determina o PCI (MJ/Nm<sup>3</sup>) gás seco é:

$$PCI \left[ \frac{\text{MJ}}{\text{Nm}^3} \right] = \sum_{i=1}^N (\text{PCI}_i \cdot y_i) \quad (4.7)$$

Onde:

PCI<sub>i</sub>: É o poder calorífico de cada espécie em [MJ/Nm<sup>3</sup>]

y<sub>i</sub>: É a fração volumétrica de cada espécie no gás [%v]

## **Capítulo 5 Resultados**

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados dos testes experimentais no gaseificador co-corrente de duplo estágio com biomassa de eucalipto em briquetes e misturas de ar, ar + vapor e vapor + oxigênio como agentes de gaseificação, com o intuito de evidenciar melhoras nos produtos da gaseificação. Considerou-se a hipótese de operação em regime permanente, segundo os parâmetros operacionais descritos no Capítulo 4.

Na sequência, são apresentados os resultados das simulações a partir dos modelos configurados mediante a utilização de ferramentas de Dinâmica de Fluidos Computacional descrito no Capítulo 3, para a gaseificação em reator co-corrente de duplo estágio de biomassa de rejeito com diferentes reagentes.

Por fim, são validados os resultados das simulações por CFD com dados experimentais próprios desta pesquisa com o objetivo de estabelecer o grau de significância do modelo aqui proposto e propor os ajustes que sejam necessários para um desempenho dos modelos e assim fornecer informações em diferentes cenários.

### **5.1 Resultados dos testes experimentais**

Os testes experimentais foram desenvolvidos com o intuito de reproduzir as condições de máxima eficiência do gaseificador e validar as informações obtidas para que os resultados sejam considerados como dado de entrada e condições de fronteira na

simulação numérica posterior. Os perfis de temperatura na interfase entre a parede e o leito de biomassa do reator, assim como para a composição média de gás são analisados a partir do princípio operacional em regime permanente, estabelecido como ponto maior eficiência do processo. Tanto os resultados experimentais quanto os resultados das simulações são analisados com o intuito de estabelecer a significância estatística dos dados e validação das simulações versus dados experimentais.

### 5.1.1 Testes com Ar, Ar + Vapor e Vapor + Oxigênio como reagentes de gaseificação.

A Figura 5-1 apresenta os resultados das vazões mássicas dos reagentes junto com a evolução da razão de equivalência (RE) nos testes experimentais de ar e ar + vapor, desconsiderando a curva para o caso em que é utilizado vapor e oxigênio como mistura de reagente. Para efeitos dos cálculos de reagentes, a vazão mássica de biomassa foi assumida como constante, como foi exposto no capítulo 4. Experimentalmente foram realizadas 15 corridas cujas configurações foram avaliadas no mesmo reator do trabalho experimental que antecedeu esta pesquisa [14].

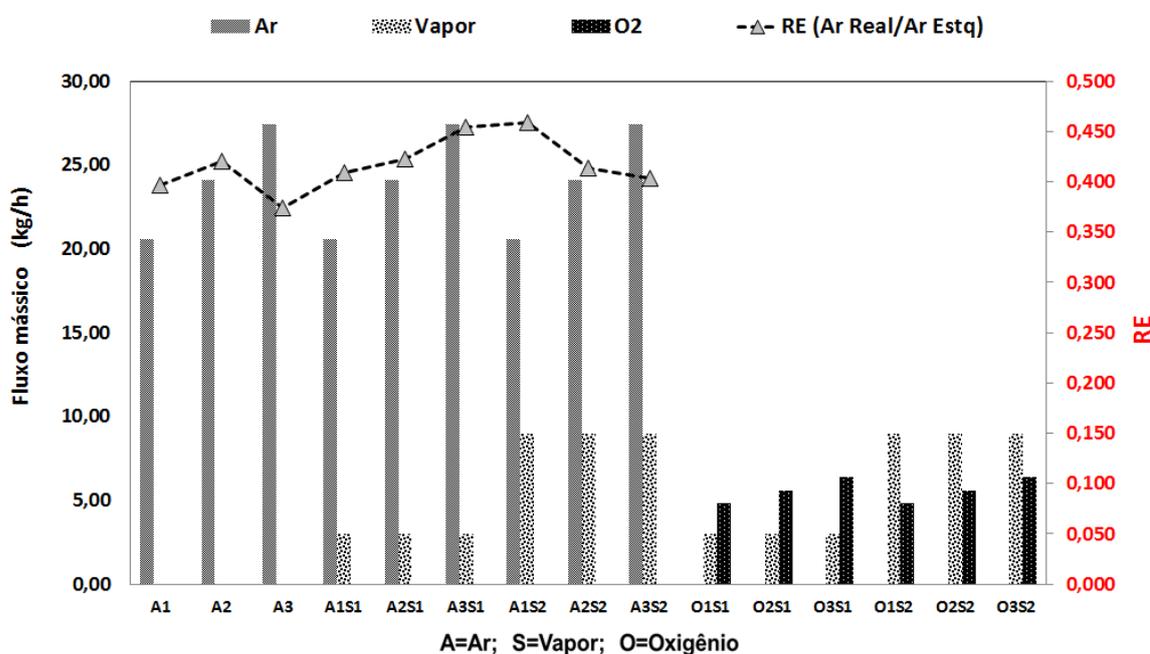


Figura 5-1 Dados das vazões mássicas de reagentes e RE - biomassa 12 kg/h

A Figura 5-2 mostra a evolução dos produtos gasosos combustíveis como resultado do processo de gaseificação de biomassa utilizando as diferentes misturas. Neste caso são analisadas as espécies: Monóxido de carbono, Hidrogênio e Metano; as quais representam mais do 90% dos produtos e formam a base na análise energética do gás produzido.

Dos resultados apresentados pode evidenciar que para os casos em que é utilizado só ar como reagente, a formação de monóxido de carbono é maior para os casos em que é utilizado vapor na mistura de reagente.

Um aumento pouco significativo dos produtos da gaseificação vê-se estimulado ao fornecer uma quantidade maior de vapor como reagente na mistura, principalmente favorecendo a produção de monóxido de carbono nos casos em que é fornecido ar + vapor. Porém, para esta espécie não supera a quantidade atingida se fosse utilizado ar como reagente.

Para o caso do hidrogênio, na corrente dos gases produzidos, esta espécie apresenta uma maior fração molar nos testes em que é utilizado vapor na mistura de reagentes, obtendo a maior concentração utilizando oxigênio + vapor como reagente.

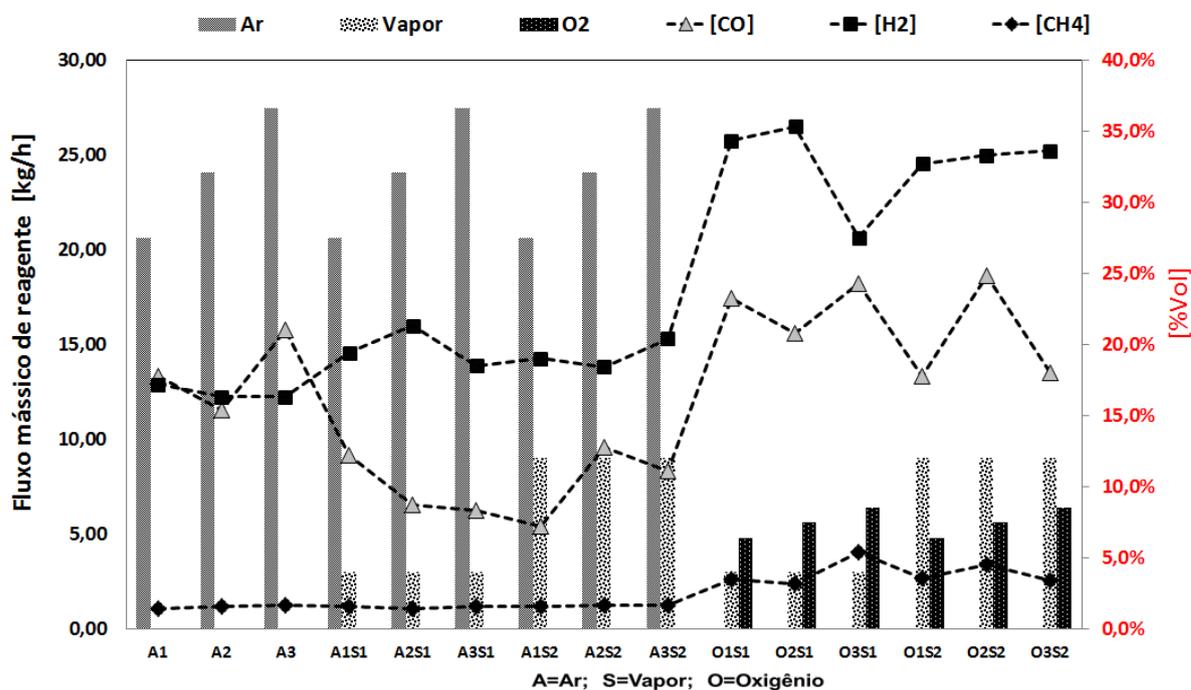


Figura 5-2 Evolução de espécies da gaseificação e fluxos de reagentes utilizados - biomassa 12kg/h

Quanto ao poder calorífico inferior, a Figura 5-3 apresenta uma comparação entre os fluxos mássicos de reagentes e a evolução do poder calorífico inferior do gás produzido. Fica evidente o aumento do PCI, especificamente quando é utilizada a mistura de oxigênio + vapor em concordância com o aumento na concentração de hidrogênio nos produtos da gaseificação.

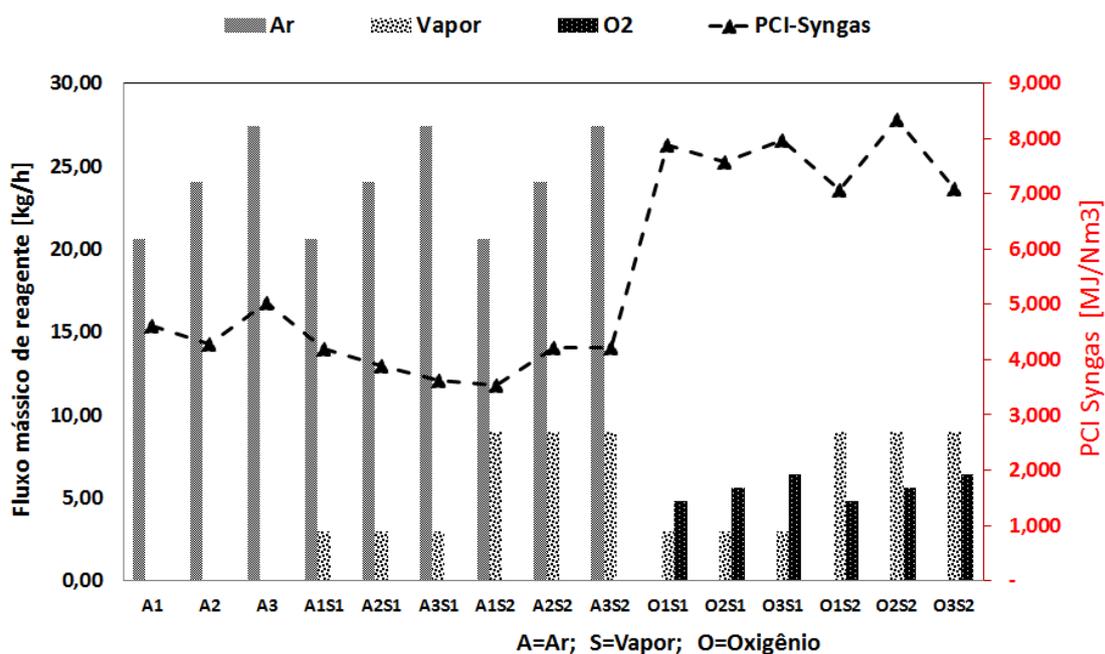


Figura 5-3 Vasões mássicos de reagente e Poder calorífico inferior do gás produzido - biomassa 12 kg/h

Ao analisar os efeitos dos agente de gaseificação (Figura 5-3) na composição gasosa e no PCI observou-se um aumento de 18% para  $\text{CH}_4$ , 17% para  $\text{CO}$  e 28% para o  $\text{H}_2$  nas gaseificações com vapor na mistura, o que favorece um acréscimo no poder calorífico do gás equivalente a 21% se for comparado com a gaseificação com ar como único reagente.

Variações significativas são evidenciadas no uso de vapor saturado e oxigênio se comparado com ar. Os acréscimos obtidos foram: 177% para  $\text{CH}_4$ , -4% para  $\text{CO}$ , e 100% a mais para  $\text{H}_2$ , dando como resultado um aumento de 55% no PCI do gás. Comparando os acréscimos obtidos para a mistura ar + vapor contra vapor + oxigênio, as variações são: 134% para  $\text{CH}_4$ , -18% para  $\text{CO}$  e 56% para  $\text{H}_2$ ; o PCI passaria a ter um incremento de 27%.

A Figura 5-4 relaciona as máximas temperaturas obtidas na camada limite para cada teste, em pontos específicos obtidos a partir dos termopares instalados nas diferentes

alturas do reator quando são utilizadas as diferentes misturas de reagentes, expressas aqui na sua vazão mássica /h. Pode-se observar que para o caso das temperaturas na zona de secagem, as máximas temperatura não apresentam muita diferença, e permanecem quase na mesma relação. Já nos casos em que é utilizado vapor saturado na mistura de reagentes pode se observar variações nas temperaturas tanto nas zonas de pirólise e combustão quanto na zona de gaseificação, apresentando uma queda significativa de temperatura na zona de gaseificação, no entanto a temperatura na zona de gaseificação seja baixa, está continua na faixa de valores apropriados para este tipo de reator.

A queda de temperatura pelo fornecimento de vapor pode ser explicada pelo fato de fornecer vapor saturado numa temperatura média de 103-110 °C que ao entrar no reator, se expande perto do termopar instalado entre a parede e a biomassa reagindo. Este fenômeno, é estudado nos estudos prévios a esta pesquisa [14], [24], [25] e amplamente discutido.

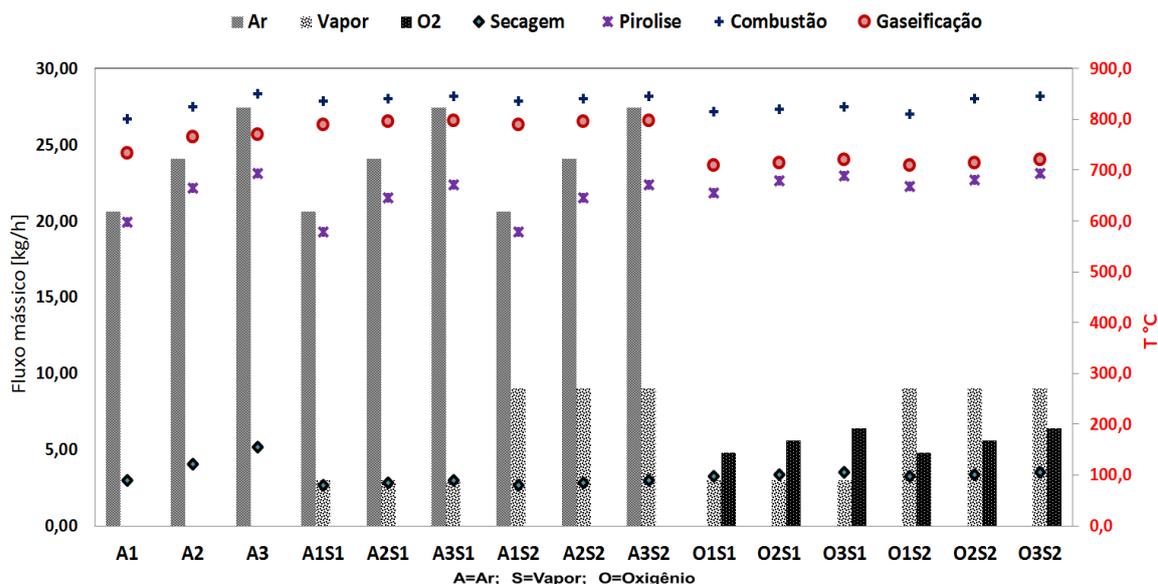


Figura 5-4 Relação de temperaturas máximas obtidas experimentalmente em conjunto com vazões mássicas de reagente - biomassa 12kg/h

## 5.2 Resultados das simulações

Nesta seção são apresentados os resultados finais das simulações da gaseificação de biomassa em reator co-corrente de duplo estágio considerando as situações de

operação auto térmica e regime permanente, como foi descrito no Capítulo 3. Nesta pesquisa o *hardware* utilizado foi uma estação de trabalho composta por dois processadores Intel® Xeon® de quatro núcleos, 1,8 GHz de velocidade de cada processador. Uma memória RAM de 64 Gb. Os diferentes softwares utilizados foram: ANSYS ICEM® para a geração de geometria e da malha no volume de controle, que posteriormente foi exportada para o software ANSYS FLUENT® para fazer as simulações numéricas. Já, a apresentação e o tratamentos dos resultados foi feita utilizando o software ANSYS CFD-POS®. É utilizada uma plataforma de trabalho (Sistema Operacional) Windows® para um sistema baseado numa arquitetura de 64 bits. O tempo meio de processamento para a solução numérica para os casos base foi de 12-14 horas por caso.

Para facilidade na interpretação dos resultados foram criados casos base tomando como relação de equivalência,  $ER=0,35$  sendo fornecido 44,4% e 55,6% para o primeiro e segundo estágio respectivamente e para cada tipo ou combinação de reagente. O fator  $ER= 0,35$  foi testado na condição em que é gerado a melhor qualidade do gás a partir de estudos anteriores utilizando diferentes reagentes [14], [24], [25]. Nesta pesquisa as simulações utilizam como reagentes: ar, ar + vapor e vapor + oxigênio. Os resultados das simulações são apresentados na sequência e no final são comparados todos os casos simulados e validados com dados experimentais.

### **5.2.1 Temperaturas atingidas no reator**

A Figura 5-5 apresenta os contornos de temperaturas atingidas ao interior do volume de controle para os três casos base simulados a partir dos diferentes reagentes (ar, ar +vapor e vapor +oxigênio). Os diferentes reagentes entram no reator em quantidades diferentes no primeiro e no segundo estágio, esta relação foi obtida experimentalmente durante os testes de melhor desempenho do equipamento e foi mantida para a execução dos casos base a razão de 44,4% do reagente no primeiro estágio y o restante (55,6% ) no segundo estágio.

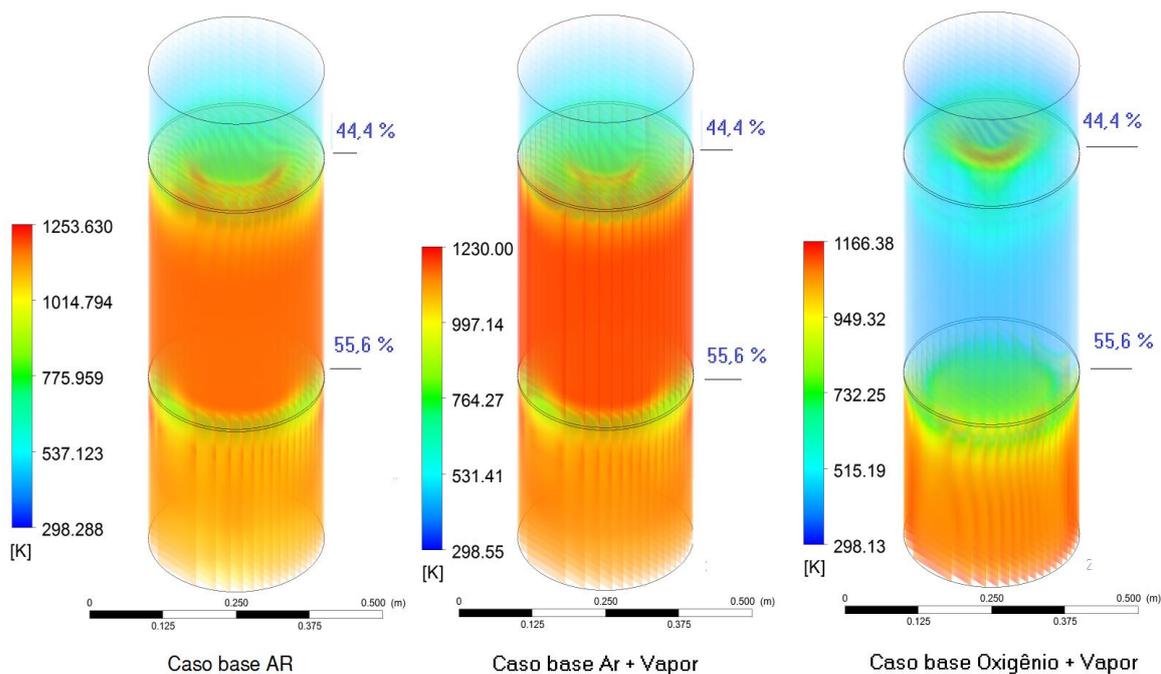


Figura 5-5 Temperaturas atingidas no reator para gaseificação co-corrente em duplo estágio com diferentes reagentes e regime permanente, ER=0,35 - biomassa 12 kg/h

Da Figura 5-5, do caso base AR, pelos contornos de temperatura (em Kelvin) fica evidente que as maiores temperaturas obtidas são achadas na zona de combustão, no conjunto de superfícies formadas pelas entradas de reagente para o primeiro e segundo estágio. Note-se que para o caso da gaseificação com ar como único reagente as maiores temperaturas ficam na faixa dos 980°C (1253 K aprox) atingidas na zona mencionada.

Já para o caso das temperaturas na zona de combustão atingidas utilizando ar + vapor e vapor + oxigênio como reagente (caso base AR + vapor e Oxigênio + vapor), observa-se uma diminuição na maior temperatura obtida nesta zona. Este último fenômeno atribuído ao fato de que as simulações foram baseadas em condições experimentais em que o vapor fornecido não é vapor superaquecido, sendo apenas vapor saturado que entra no reator a uma pressão de 3,5 bar e uma temperatura de 105°C  $\pm$ 5, sofrendo uma expansão espontânea na vizinhança das paredes do reator e a biomassa reagindo.

Ao analisar a zona de redução/gaseificação observou-se uma diminuição das temperaturas utilizando as combinações com os três tipos de reagentes, fato que apresenta coerência com os estudos experimentais tanto nesta pesquisa, quanto nos estudos anteriores [14]. As maiores temperaturas atingidas na zona de redução para os casos de

reagentes ar, ar + vapor e vapor + oxigênio foram respectivamente: 860°C/1133K, 840°C/1113K e 780°C/1053K.

Posteriormente foram definidos pontos de comparação de temperatura baseados nos três casos base: biomassa 12 kg/h, regime permanente, ER=0,35, e misturas de reagentes.

Graficamente são comparados diferentes pontos de controle de temperatura interfacial de parede obtidos a partir dos dados experimentais com os resultados obtidos a partir das simulações utilizando técnicas CFD e apresentados na Figura 5-6 num compilado com os três casos base estudados.

Foram obtidos dados de temperatura interfacial e axial a partir das simulações para os três casos base. Esta comparação permite obter informações nas diferentes zonas do gaseificador, destacando que para a zona de secagem os valores de temperaturas obtidas experimentalmente na parede do reator e os valores obtidos pelas simulações por CFD tanto na parede como a temperatura axial do leito apresentam valores com uma significância estatística quase perfeita, ou seja, sem mudanças significativas de temperatura ao comparar dados experimentais e simulações. A aparente falta de mudança nas temperaturas axial e de parede é comumente atribuída pelas reações de devolatilização e evaporação da umidade na biomassa que acontecem na zona de secagem já que são conhecidos como processos de desenvolvimento lento dentro das reações da gaseificação [83].

Já para as outras zonas do reator, as mudanças na temperatura axial e da parede são maiores, atingindo em muitos casos diferenças de temperatura na faixa dos 100 a 180°C (diferença entre a parede e o núcleo do reator). Fato que guarda estreita relação com a natureza das reações exotérmicas, heterogêneas nas zonas de combustão e redução que acontecem no interior do leito reagindo, além dos fenômenos turbulentos das mudanças de fase próprios da biomassa se descompondo [108].

Das observações na diferenças de temperatura interfacial e axial do reator concluiu-se que existe a necessidade de implementar uma sonda com termopares em diferentes alturas ao interior do reator que permita estudar as mudanças por transferência de calor do interior do leito formado pela biomassa.

A significância estatística dos resultados das temperaturas nos pontos de controle para os casos base obtidos pelas simulações CFD e dos dados experimentais resulta numa faixa de confiabilidade superior ao 90% ao ser comparado o desvio padrão e a variância dos dados das simulações contra os dados experimentais. Discussão que será tratada caso a caso na sequência.

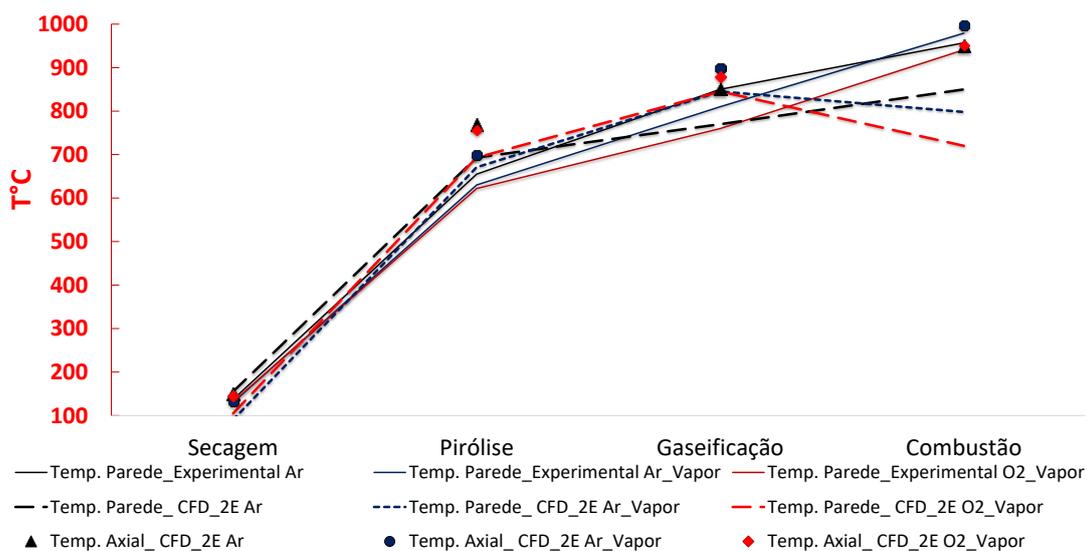


Figura 5-6 Comparação das temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD

Posteriormente são apresentados os dados das temperaturas obtidas experimentalmente na região interfacial de parede (Entre a parede do reator e o leito de biomassa reagindo) e as temperaturas na região de parede e temperatura axial obtidas pelas simulações utilizando ferramentas CFD, para os casos base Ar na Figura 5-7, Ar + Vapor na Figura 5-8, e O<sub>2</sub> + Vapor na Figura 5-9.

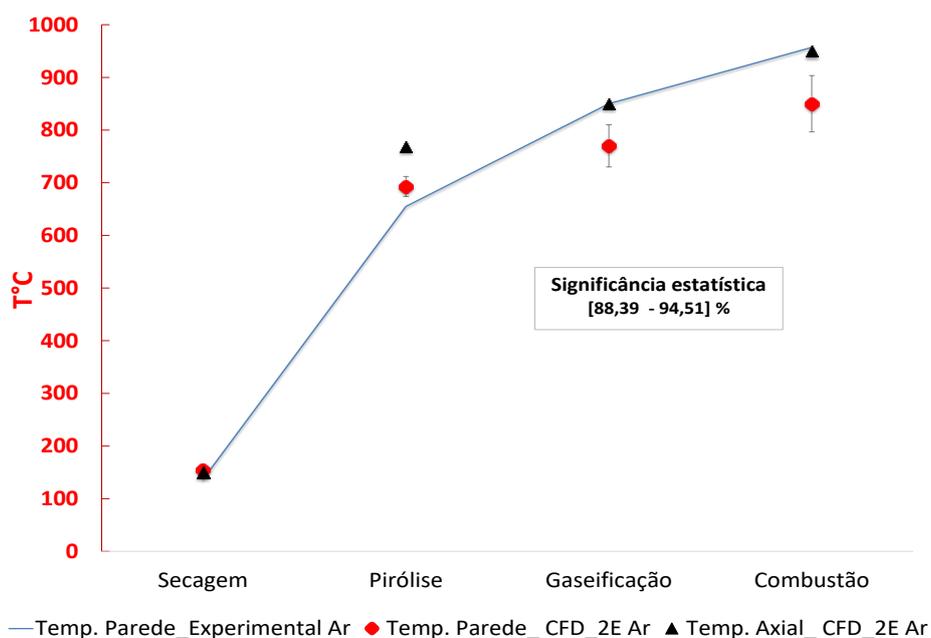


Figura 5-7 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Ar

Para o caso base utilizando Ar como reagente foram avaliados pontos de controle de temperatura interfacial e axial nas simulações e temperatura interfacial obtida experimentalmente. Da Figura 5-7, pode-se observar que o modelo proposto permite representar as condições experimentais e estimar os dados de temperatura ao interior do reator, destacando que os valores das simulações apresentam uma significância estatística com valores entre 88,39% até 94,51 % quando avaliado o desvio padrão e a variância dos dados das simulações. Apresentou-se também o desvio médio para as temperaturas interfaciais (na parede) obtidas nas simulações contra as obtidas experimentalmente destacando um valor maior na zona de combustão, porem mantendo-se no intervalo de confiança mencionado.

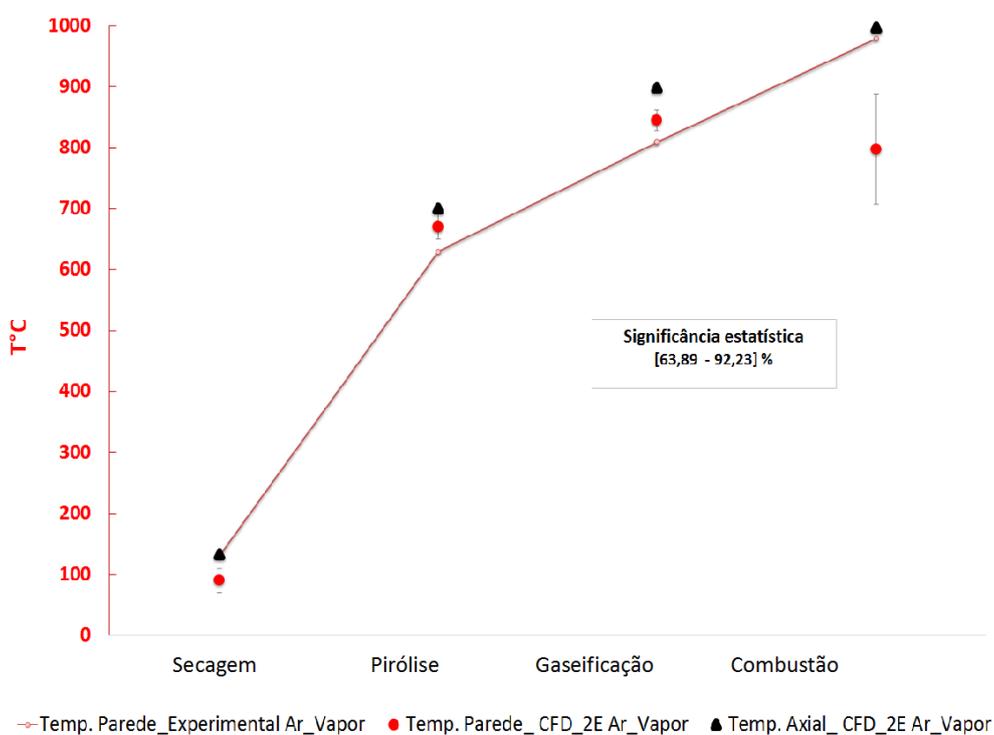


Figura 5-8 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Ar\_Vapor

Para as simulações do caso base utilizando Ar + vapor como reagentes (veja-se a Figura 5-8) , ao ser avaliados os pontos de controle de temperatura interfacial e axial contra a temperatura interfacial obtida experimentalmente encontrou-se um comportamento com significância estatística media, onde o modelo proposto predisse as temperaturas interfacial e axial com um intervalo de certeza entre 63,89% e 92,23 % quando avaliado o desvio padrão e a variância dos dados das simulações. Já o valor que

apresentou o maior desvio padrão foi o valor para a temperatura de parede na zona de combustão, porem se mantendo no intervalo de representatividade.

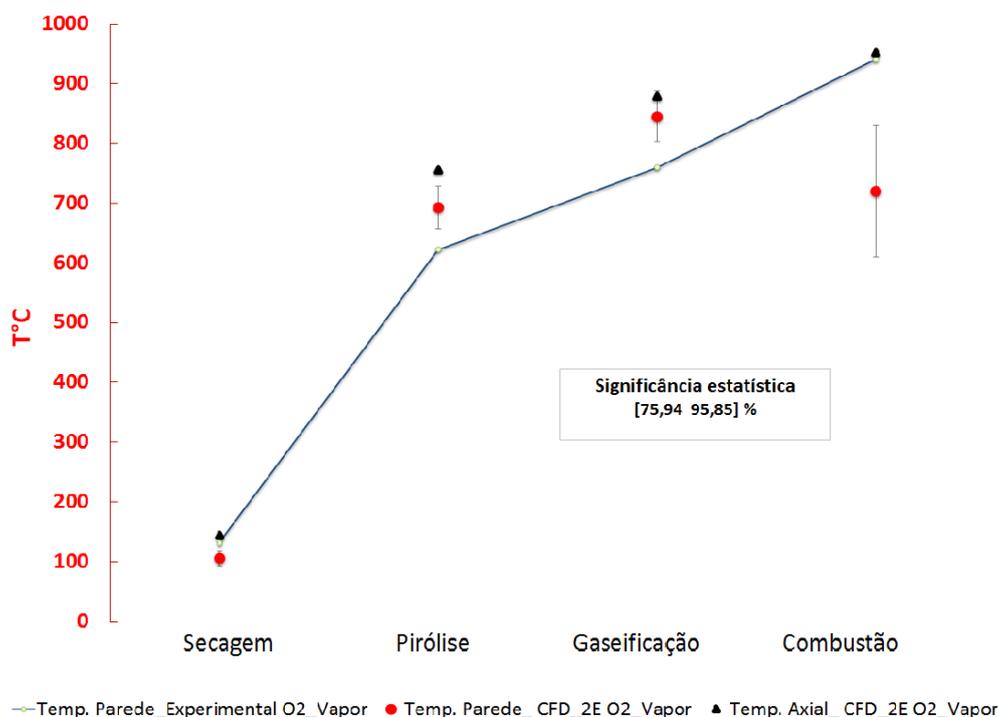


Figura 5-9 Temperaturas obtidas experimentalmente e temperaturas obtidas nas simulações por CFD Caso base Oxigênio \_Vapor

Ao ser analisadas as simulações para o caso base Oxigênio + vapor, encontro se uma significância estatística para os valores de temperatura axial e de parede nas simulações cuja significância estatística ficou na faixa de 75,04% até 95,85% quando avaliado o desvio padrão e a variância dos dados das simulações. Já o valor que apresentou o maior desvio padrão ao comparar os dados experimentais e das simulações para os dados de temperatura na parede foram os valores obtidos na zona de combustão, porem se mantendo no intervalo de representatividade estatística.

### 5.2.2 Velocidade superficial do gás

O leito de biomassa é formado sobre a grade através da qual os gases saem exercendo uma força de arrasto sobre a fase sólida e produzindo uma queda de pressão. Esta hipótese no regime é conhecida como leito empacotado móvel, em que os sólidos se movem em direção descendente em relação às paredes do gaseificador [36], [68], [99],

[109]. A partir deste conceito define-se a velocidade superficial do gás como a taxa de variação temporal do fluxo de gás por unidade de área ou secção transversal do leito. Este fator somado ao fluxo de reagente é analisado como consequência da influência nas reações químicas com a utilização de diferentes reagentes.

Por tratar-se de uma análise em regime permanente, aqui são apresentados os contornos nas zonas do reator, destacam-se como as zonas de maior velocidade a zona de combustão com deslocamento na proximidade da zona de redução; uma comparação dos perfis de velocidade comparando os três tipos de reagente é apontada na Figura 5-10, a seguir.

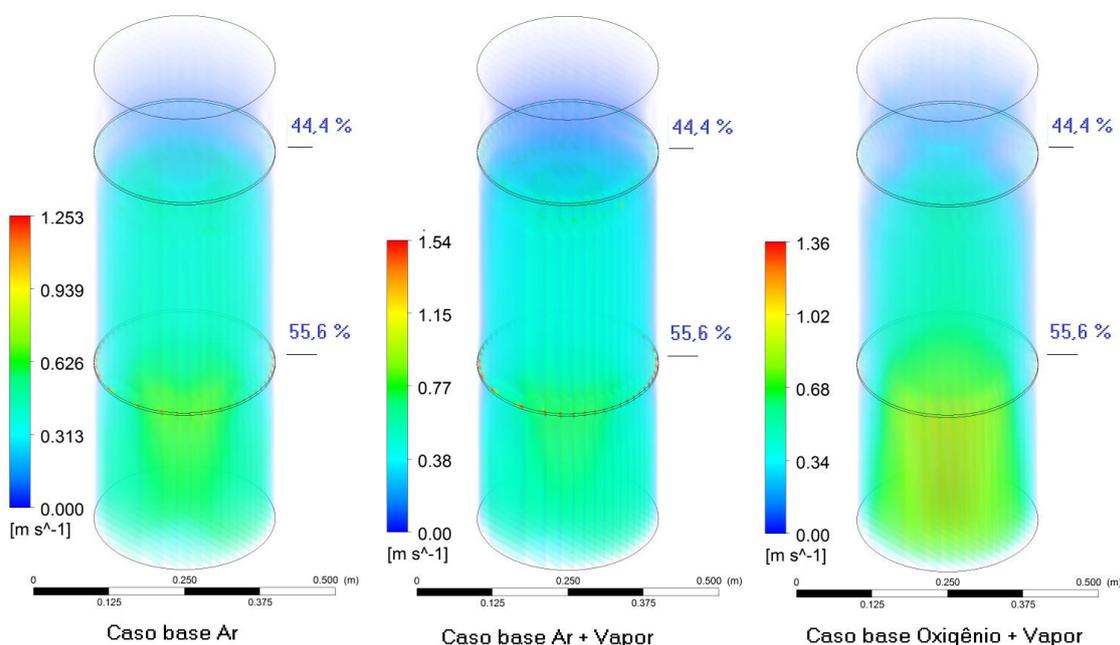


Figura 5-10 Velocidade superficial do gás no reator para gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h

É importante notar, que em todos os casos base é mantida a mesma porosidade do leito (0,5), toda vez que ele é considerado um meio poroso reagindo com uma mistura de reagentes. Aqui é observada uma maior velocidade superficial quando é utilizado ar + vapor como reagente (1,54 m/s).

Os resultados das frações molares dos principais produtos da gaseificação são exibidos na Figura 5-11 para hidrogênio, na Figura 5-12 para o metano e na Figura 5-13 para o monóxido de carbono.

### 5.2.3 Fração molar de hidrogênio

O hidrogênio é um dos produtos mais importantes na gaseificação, formado principalmente a partir das reações gás e água na gaseificação do carbono (Eq. 2.4), e da reação homogênea de deslocamento água e gás (Eq. 2.9), dado seu poder calorífico alto, torna-se de especial interesse estimular a formação desta espécie na corrente dos gases produzidos. Para os dois primeiros casos base utilizando ar e ar + vapor como reagentes, a formação de hidrogênio é especialmente marcada na zona de combustão com deslocamento até a zona de redução, obtendo as maiores concentrações da espécie entre 19-21 % de concentração molar para o caso em que é utilizado ar + vapor como reagente. Já para o caso base utilizando uma mistura de vapor + oxigênio como reagente a formação desta espécie vê-se concentrada mais na zona de redução, fenômeno atribuído a queda de temperatura na zona de combustão por injeção de vapor saturado no primeiro e segundo estágios, mencionado já no apartado 5.2.1. As maiores concentrações molares desta espécie ficam numa faixa entre 18-32,5%.

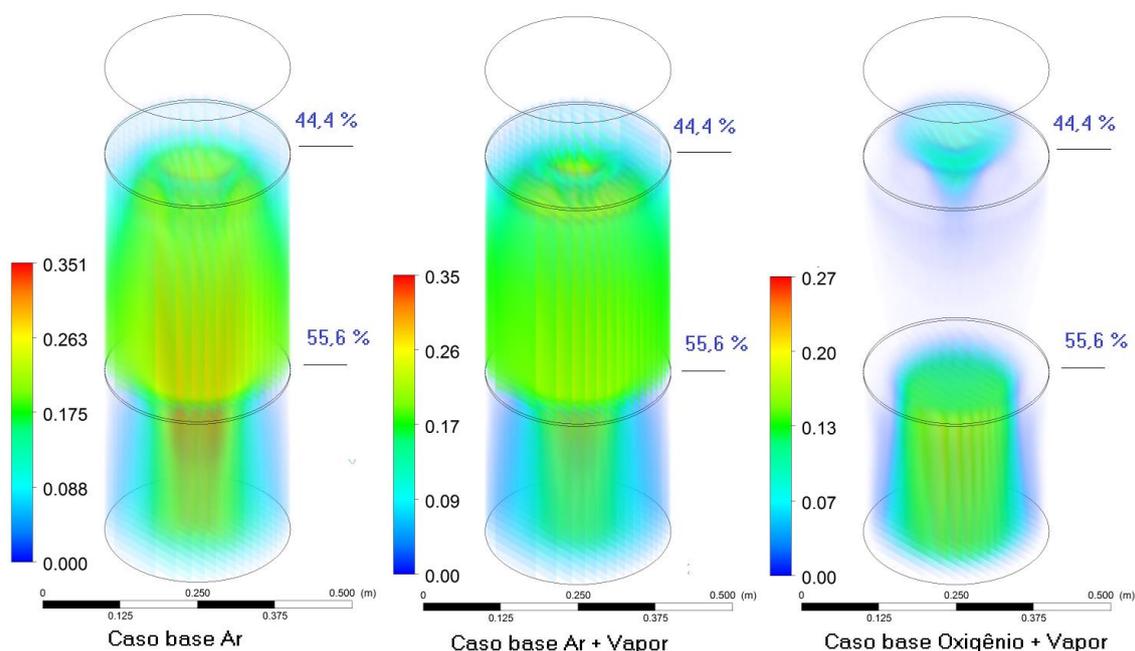


Figura 5-11 Fração molar de Hidrogênio da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h

### 5.2.4 Fração molar de Metano

Em reatores do tipo co-corrente é amplamente discutido que a produção de metano é baixa, a concentração desta espécie é basicamente estimulada na gaseificação de carbono (eq. 2.5), a qual acontece logo após a secagem e devolatilização da biomassa.

O metano é outro componente com um alto poder calorífico nos produtos da gaseificação, no caso específico do tipo de reator utilizado nesta pesquisa, reator co-corrente de duplo estágio, observou-se uma concentração de metano na seção formada pela entrada de reagente no primeiro estágio, potencialmente atribuído a natureza das reações de gaseificação e as baixas temperaturas nessa zona do reator e a presença do reagente entrando também a baixas temperaturas. A Figura 5-12 apresenta os gráficos de contorno para a fração molar de metano utilizando misturas de reagentes.

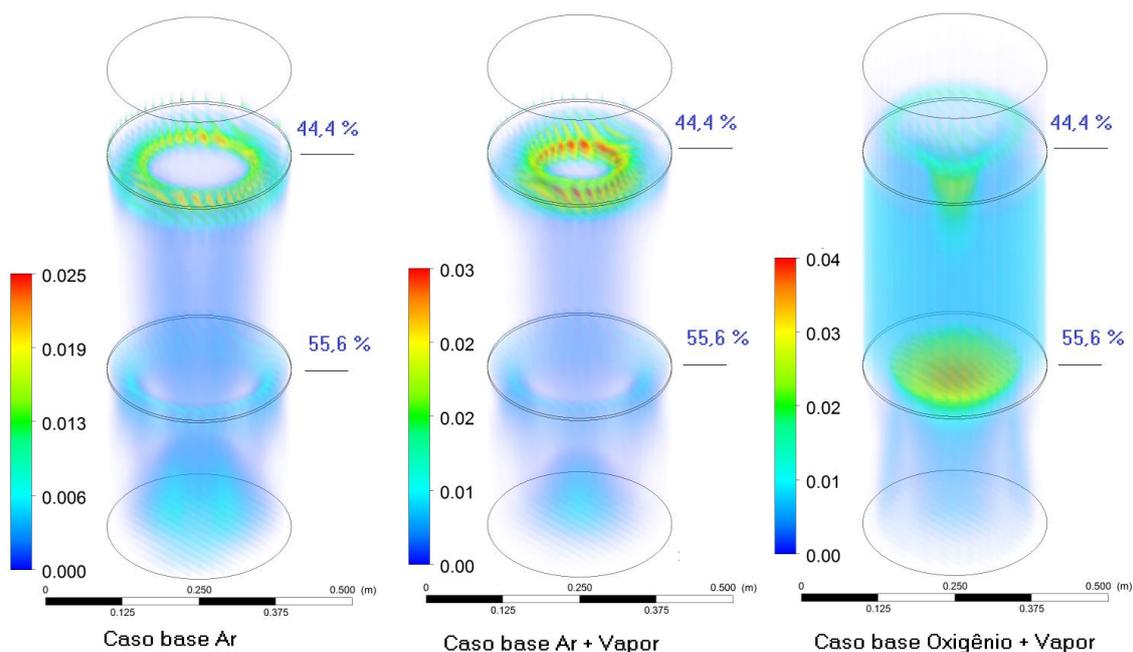


Figura 5-12 Fração molar de Metano da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h

Nos casos base apresentados, as concentrações molares de metano utilizando ar, ar + vapor e vapor + oxigênio como reagentes os valores obtidos ficaram nas faixas de 2 - 2,5 %, 1,5 - 3% e 3,3 - 5% respectivamente.

### 5.2.5 Fração molar de Monóxido de carbono

O monóxido de carbono é uma outra espécie que contribui com o poder calorífico do gás produzido, tanto em gaseificadores de leito fixo, quanto reatores de leito fluidizado esta espécie é favorecida na presença de oxigênio nas reações de combustão parcial de carbono (Eq. 2.1), da reação de *Boudouard* (Eq. 2.3) e da reação gás de água (Eq. 2.4), por isso em destaque observou-se concentrações na zona de combustão para os casos em que se utiliza ar e ar + vapor como reagentes; já no caso em que é utilizado vapor + oxigênio como reagente as maiores concentrações ficam na zona de redução. Os valores medios das leituras nas simulações com as diferentes misturas de reagentes foram: 15,3-21% para gaseificação com ar como reagente, 12-16,8% para ar + vapor como reagente e 12-18,5% utilizando vapor + oxigênio como reagente.

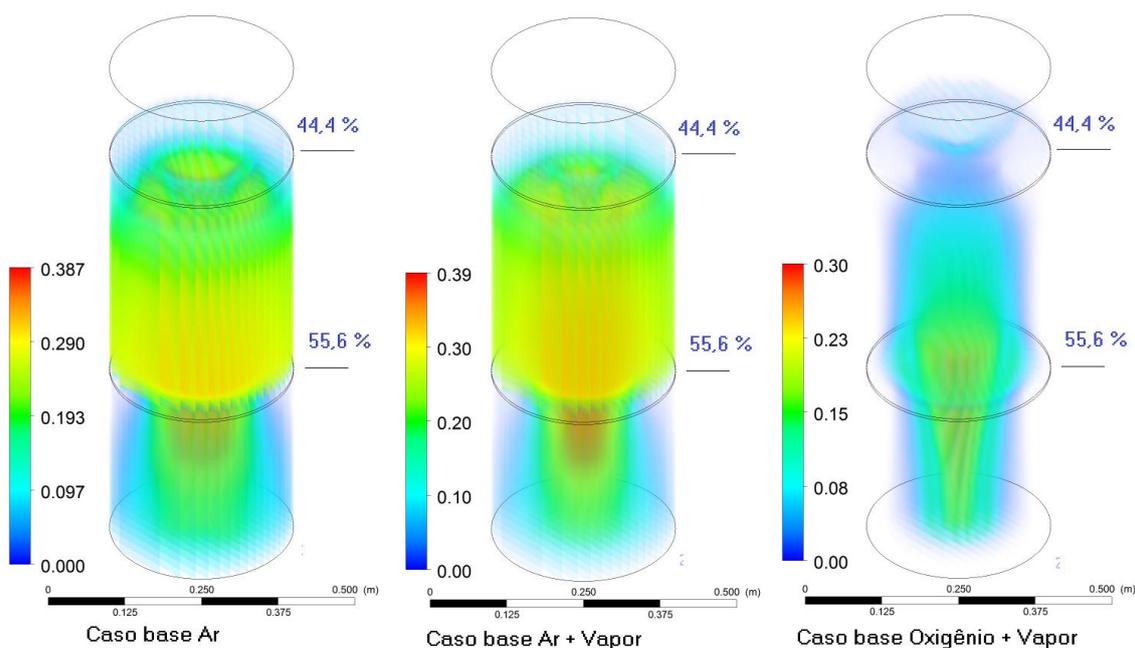


Figura 5-13 Fração molar de Monóxido de carbono da gaseificação com diferentes reagentes em duplo estágio co-corrente regime permanente. ER=0,35, biomassa 12 kg/h

Das diferentes situações simuladas utilizando técnicas de Dinâmica dos Fluidos Computacional para gaseificação de biomassa e diferentes tipos de reagentes, observou-se um aumento no teor de hidrogênio e uma diminuição na concentração de monóxido de carbono quando é utilizado vapor de baixa qualidade na mistura dos reagentes. O

acréscimo do teor de hidrogênio vem a ser explicado devido ao favorecimento da reação de deslocamento gás- água que é decorrente do fornecimento deste reagente ao processo.

Da análise dos resultados fica evidente que a utilização de vapor no processo produz um gás de maior teor de hidrogênio. Já a utilização de oxigênio na mistura de reagentes favorece a reação de Boudouard fazendo com que seja incrementada a produção de monóxido de carbono na corrente dos produtos.

### 5.2.6 Redução do leito de biomassa durante o processo

Utilizando uma ferramenta disponível no software CFD-Pos® de Ansys® foi possível representar o consumo de biomassa dentro do reator a partir da redução do leito. Esta ferramenta de pós processamento permite obter fotografias do processo na situação hipotética de regime transiente se o reator fosse alimentado por batelada, a partir dos resultados obtidos em regime permanente.

Para tal fim, foi definido um intervalo de tempo de 0 até 35 min e os resultados são apresentados a partir de planos de corte no centro do reator desde a Figura 5-14 até a Redução do leito em  $t=35$  min na Figura 5-21.

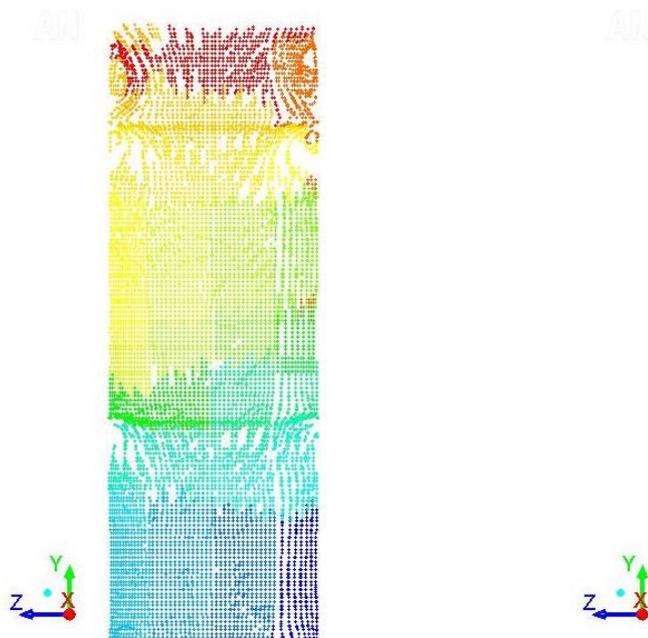
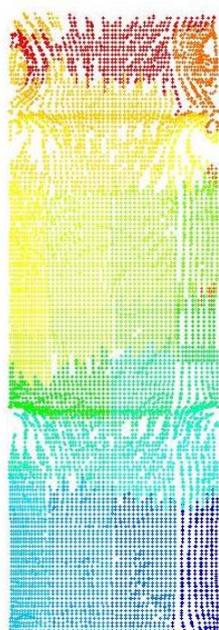


Figura 5-14 Redução do leito em  $t=0$  min    Figura 5-15 Redução do leito em  $t=5$  min

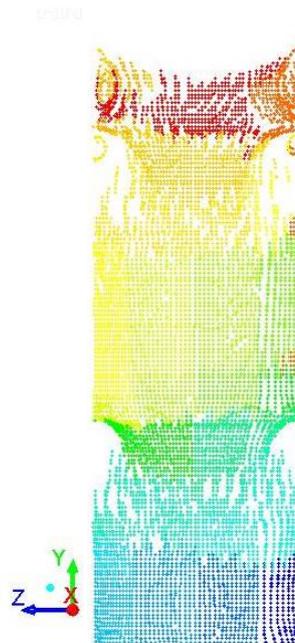
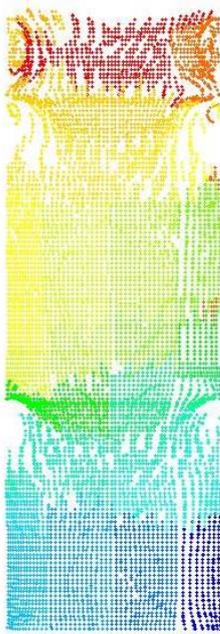


Figura 5-16 Redução do leito em  $t=10$  min    Figura 5-17 Redução do leito em  $t=15$  min

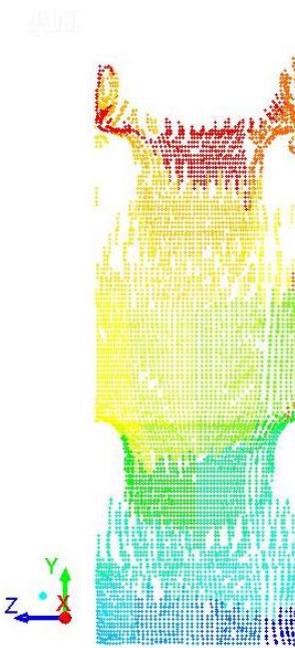
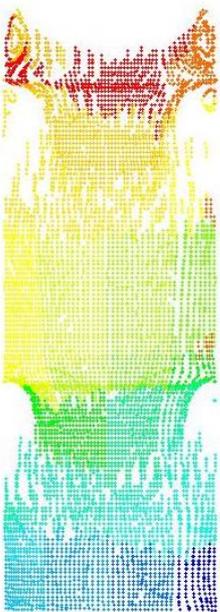


Figura 5-18 Redução do leito em  $t=20$  min    Figura 5-19 Redução do leito em  $t=25$  min

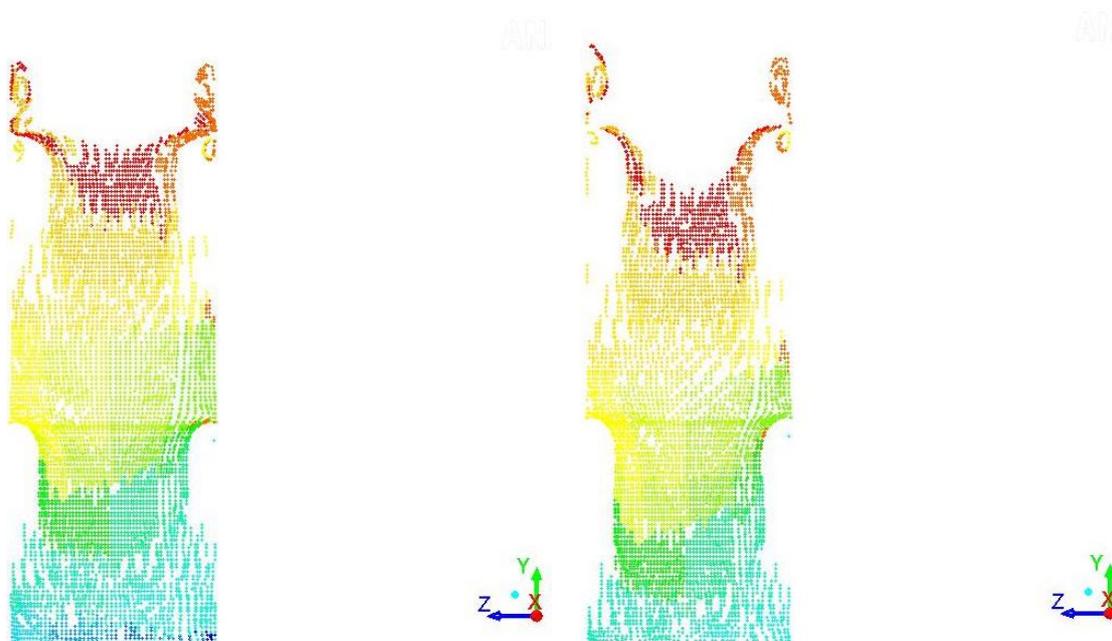


Figura 5-20 Redução do leito em  $t=30$  min    Figura 5-21 Redução do leito em  $t=35$  min

A partir das informações das simulações em regime permanente, considerou-se que o processo começa quando o reator atinge as temperaturas próprias em cada zona de reação. Num primer momento biomassa começa a secar e devolatilizar continuando com as primeiras reações da pirólise primária, apresentando a primeira fase de redução do leito na zona de secagem e as frentes de chama formadas com o reagente perto da zona do primeiro e segundo estágio Figura 5-14 e Figura 5-15.

Logo após as frentes de chama intensificasse, a biomassa desce desde a zona de secagem e pirólise no sentido da zona e combustão e redução (Figura 5-16, Figura 5-17, Figura 5-18, Figura 5-19). Após, 30 min, nota se a completa redução do leito na zona de secagem e pirolise e a intensificação dos frentes de chama nas paredes do reator próximas as entradas de reagente (Figura 5-20 e Figura 5-21).

Embora este mecanismo ainda seja pouco explorado dado o consumo do recurso computacional que representa, permite gerar aproximações gráficas do comportamento do reator em virtude do consumo de biomassa, a redução do leito e o fluxo da biomassa a partir de informações fornecidas a partir das simulações em regime permanente.

### 5.2.7 Validação das simulações a partir das espécies no gás produzido

Com o intuito de validar estatisticamente as simulações dos modelos baseados em ferramentas Dinâmica dos Fluidos Computacional, foram comparados os valores para a concentração molar de espécies no gás produzido ( $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$  e  $\text{CH}_4$ ) a partir dos dados experimentais com diferentes biomassas contra os valores simulados. Assim, foram plotadas curvas com os resultados das simulações utilizando os dados da biomassa (dados a partir na análise próxima e imediata do combustível) fornecidos nas bases de dados no software de CFD e no mesmo plano foram dispostos os pontos experimentais. O objetivo foi estabelecer a significância estatística dos dados simulados a partir do desvio padrão e a variância dos dados contra os resultados experimentais executados no mesmo reator para os arranjos configurados com misturas dos reagentes e biomassas como: briquetes de eucalipto, briquetes de capim elefante (*miscanthus ssp*) e milho. Estes dois últimos materiais fizeram parte de uma pesquisa conjunta entre o grupo NEST-UNIFEI e pesquisadores da IOWA University (Projeto: MEC / MCTI / CAPES / CNPq / FAPs No 71/2013 - *Special Guest Researcher. the grant number Proposal: 152583. Process: 88881.030460 / 2013-01*), e autorizaram a divulgação dos resultados para validação. Nas Figura 5-22, 5-23 e 5-24 são apresentados os resultados experimentais e os resultados das simulações, em conjunto com o tipo de reagente fornecido em kg/h para cada experimento. As curvas plotadas representam as estimações do modelo CFD no intervalo da RE especificada, as marcas e símbolos apresentam os pontos experimentais com diferentes biomassas.

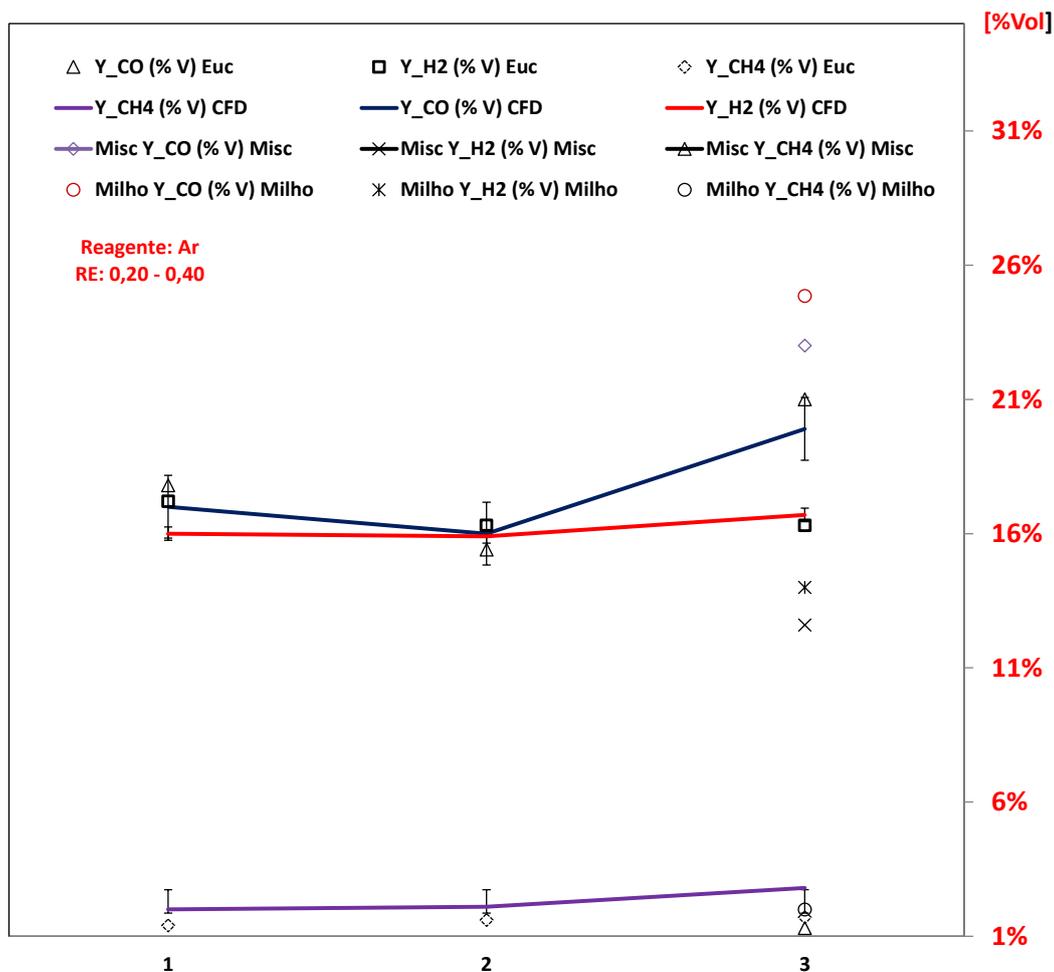


Figura 5-22 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Ar. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT®

Para o caso em que se utiliza ar como reagente (veja-se Figura 5-22), os dados comparados das simulações CFD contra os dados experimentais, encontrou-se uma significância estatística fundamentada no desvio padrão superior ao 90% quando foram comparadas as simulações e os dados experimentais com eucalipto e capim elefante em todas as espécies gasosas analisadas (CO, H<sub>2</sub> e CH<sub>4</sub>) do gás produzido. Já para o caso em que foram comparados os resultados simulados com os experimentais com milho a significância estatística caiu para um 82,97%, como pode ser constatado na porcentagem de erro para a espécie CO, este fato pode ser atribuído a um maior conteúdo de carbono na biomassa (milho) utilizada nos testes experimentais.

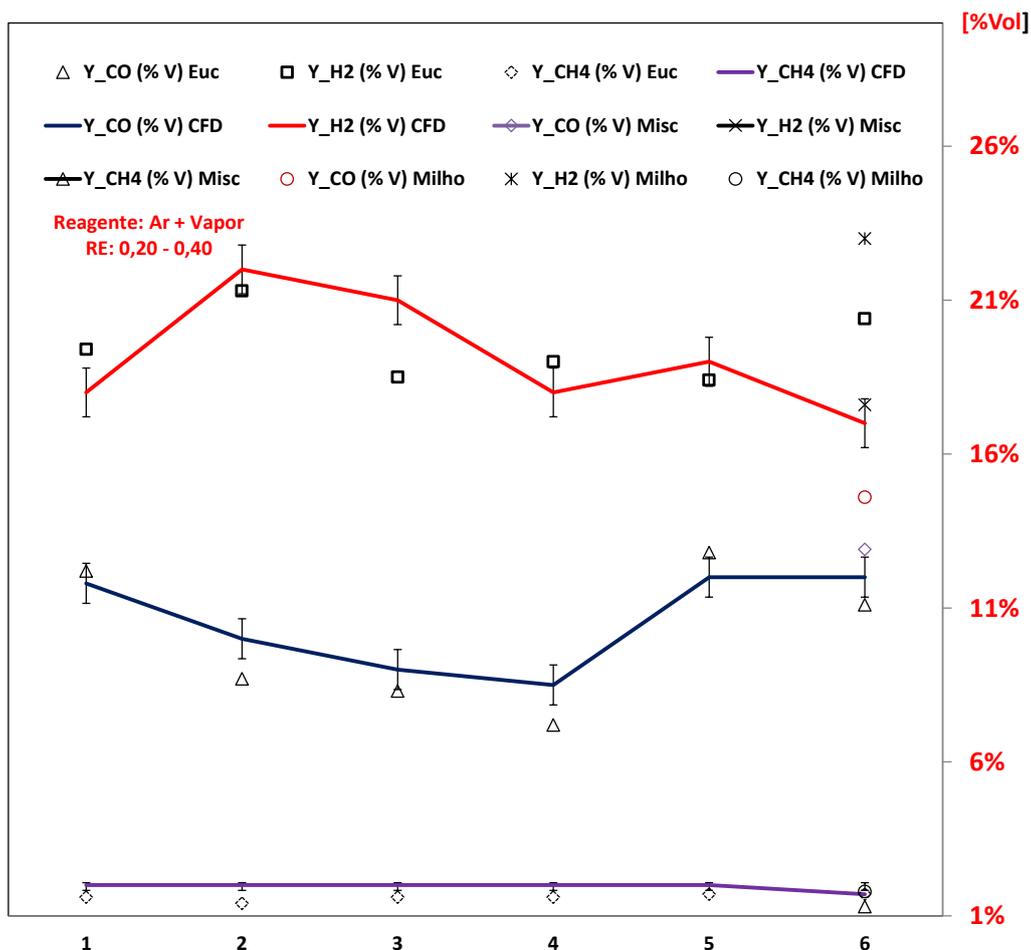


Figura 5-23 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Ar + Vapor. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT®

Quando fornecidos ar e vapor como misturas de reagentes os valores das estimativas dos dados obtidos nas simulações contra os dados experimentais com briquetes de eucalipto e capim elefante apresentaram uma significância estatística próxima ao 93% comparando as espécies do gás produzido, observou-se que os erros baseados no desvio padrão apresentam um comportamento quase uniforme (sem desvio mínimo ou máximo, veja-se Figura 5-23) para 5 dos 6 testes realizados experimentalmente com eucalipto e para todos os testes com capim elefante.

Para o caso em que foram comparadas as estimações dos modelos CFD com os testes experimentais com milho apresento uma diminuição da significância baseada nos resultados para as espécies hidrogênio e monóxido de carbono, possivelmente atribuído aos conteúdos altos de hidrogênio e carbono na biomassa fornecida.

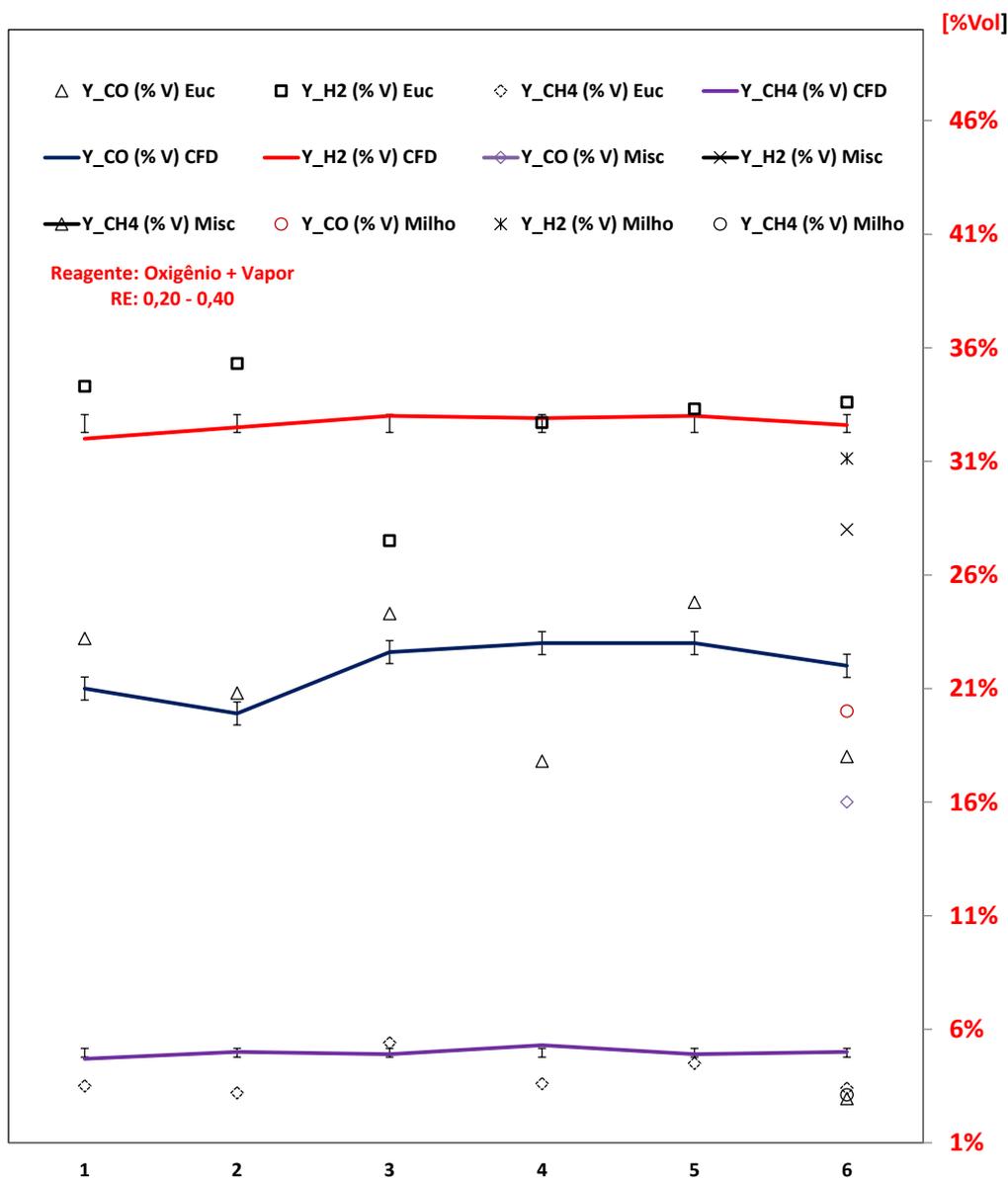


Figura 5-24 Composição volumétrica dos produtos da gaseificação na saída do gaseificador. Reagente: Vapor + Oxigênio. Biomassa: Eucalipto, Capim elefante e Milho contra as simulações CFD em ANSYS FLUENT®

A Figura 5-24 apresenta os resultados obtidos nas estimativas dos modelos CFD para o caso em foram fornecidos vapor e oxigênio como misturas nas correntes dos reagentes. Do mesmo modo ao comparar os dados para gaseificação com eucalipto e capim elefante contra os resultados das simulações por CFD encontrou-se que a significância estatística para as espécies comparadas apresentou um valor de 83%, além disso, em 3 dos 6 experimentos detectou-se valores atípicos para o monóxido de carbono e dois valores consideravelmente fora dos resultados simulados para a fração molar de

hidrogênio. Já para o metano, não foram determinados valores atípicos do modelo contra os dados experimentais.

A análise comparando os dados das simulações com os testes experimentais com milho e por tratar-se de um material com composição química diferente da biomassa estudada nesta pesquisa pode-se estabelecer a necessidade de conhecer a composição das análises elementar e imediata da biomassa com o intuito de que possam ser inseridas na base de dados de combustíveis e a partir de novas simulações gerar resultados para efeitos de validação e posterior comparação.

### 5.2.8 Poder Calorífico Inferior dos produtos da gaseificação

São analisados os valores do poder calorífico inferior do gás produzido tanto para os testes experimentais com briquetes de eucalipto, quando para as simulações por Dinâmica dos Fluidos Computacional. Neste quesito a Figura 5-25 apresenta os resultados, onde são mantidas as colunas de reagentes em sua vazão em massa fornecida para cada experimento com o intuito de comparar e acompanhar as diferentes mudanças que tem a ver com o aumento ou diminuição do poder calorífico do gás produzido como resposta ao fornecimento de cada mistura de reagente.

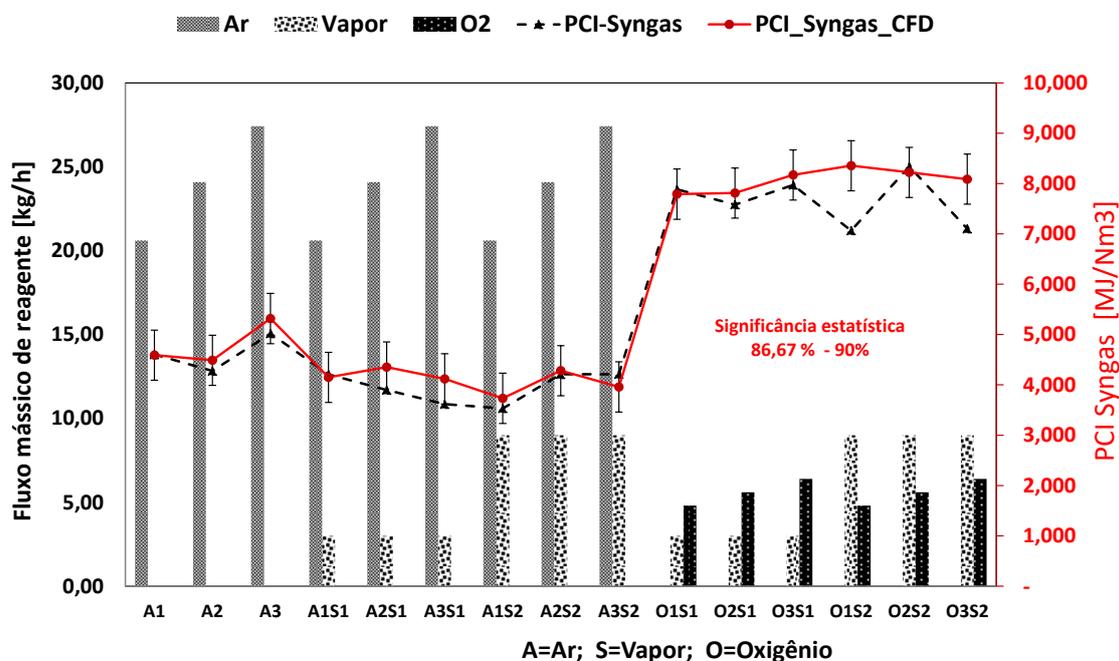


Figura 5-25 Poder Calorífico Inferior dos produtos da gaseificação. Resultados experimentais e simulações CFD em ANSYS FLUENT®

Ao comparar os dados experimentais e das simulações por CFD para a variável de saída poder calorífico inferior do gás produzido encontrou-se de maneira geral que os valores obtidos representam a variável com uma alta significância estatística (86,67% – 90%). Especificamente para o caso das gaseificações de biomassa com Ar e Ar + Vapor como reagentes, todos os valores das simulações ficaram na faixa de valores experimentais possíveis dentro das relações de equivalência estudadas. Para o caso em que são utilizados vapor + oxigênio como reagentes, existe uma tendência quase linear no poder calorífico para todas as relações de equivalência estudadas, no entanto dois pontos experimentais apresentaram valores fora da linha de tendência e em consequência fora de desvio padrão calculado o que ocasionou uma queda na representatividade do modelo e será motivo de sugestão para trabalhos futuros.

### **5.2.9 Resultados das simulações por CFD e dados experimentais desta pesquisa**

Na Tabela 5-1 são apresentados os valores das simulações com ferramentas de Dinâmica dos Fluidos Computacional frente aos dados experimentais desta pesquisa e da pesquisa imediatamente anterior. Por tratar-se de uns dos poucos trabalhos realizados no tipo de reator escolhido, o objetivo desta comparação foi destacar a proximidade dos dados estimados nas simulações e os dados coletados experimentalmente visando mediante os dados das espécies presentes no gás produzido, estabelecer parâmetros e condições de repetitividade para possíveis trabalhos futuros utilizando este tipo de reatores e misturas de reagentes.

Tabela 5-1 Resumo dos testes experimentais com biomassa de eucalipto em briquetes, biomassa de eucalipto em pedaços e as simulações CFD.

Teste	Ar (kg/h)	O2 (kg/h)	Vapor (kg/h)	CO (V/100)			H2 (V/100)			CH4 (V/100)		
				CFD	Exp	Exp	CFD	Exp	Exp	CFD	Exp	Exp
				Esta pesquisa	[14]	Esta pesquisa	[14]	Esta pesquisa	[14]			
Ar_1	20,60	-	-	0,170	0,178	--	0,160	0,172	--	0,020	0,014	--
Ar_2	24,08	-	-	0,160	0,154	0,180	0,159	0,163	0,162	0,021	0,016	0,013
Ar_3	27,42	-	-	0,199	0,210	--	0,167	0,163	--	0,028	0,017	--
Ar_1 + 3Vp	20,60	-	3,00	0,118	0,122	0,082	0,180	0,194	0,180	0,020	0,016	0,015
Ar_2 + 3Vp	24,08	-	3,00	0,100	0,087	0,127	0,220	0,213	0,190	0,020	0,014	0,016
Ar_3 + 3Vp	27,42	-	3,00	0,090	0,083	0,117	0,210	0,185	0,190	0,020	0,016	0,014
Ar_1 + 9Vp	20,60	-	9,00	0,085	0,072	0,072	0,180	0,190	0,190	0,020	0,016	0,015
Ar_2 + 9Vp	24,08	-	9,00	0,120	0,128	0,110	0,190	0,184	0,200	0,020	0,017	0,016
Ar_3 + 9Vp	27,42	-	9,00	0,120	0,111	0,873	0,170	0,204	0,210	0,017	0,017	0,014
O_1 + 3Vp	-	4,80	3,00	0,210	0,232	0,240	0,320	0,343	0,274	0,047	0,035	0,053
O_2 + 3Vp	-	5,60	3,00	0,199	0,208	0,177	0,325	0,353	0,327	0,050	0,032	0,038
O_3 + 3Vp	-	6,40	3,00	0,226	0,243	0,246	0,330	0,275	0,332	0,049	0,054	0,045
O_1 + 9Vp	-	4,80	9,00	0,230	0,178	0,179	0,329	0,327	0,331	0,053	0,036	0,045
O_2 + 9Vp	-	5,60	9,00	0,230	0,248	0,180	0,330	0,333	0,333	0,049	0,045	0,035
O_3 + 9Vp	-	6,40	9,00	0,220	0,180	0,207	0,326	0,336	0,359	0,050	0,034	0,033

Dos dados analisados tanto nas simulações, quanto experimentalmente notou-se a existência de uma repetitividade coerente das diferentes condições simuladas com os modelos CFD quando for comparado com os dados coletados experimentalmente para as três espécies no gás produzido.

Como foi comentado em subitens anteriores a partir dos valores obtidos na composição de espécies no gás produto observou-se valores para a concentração das espécies dentro da faixa reportada na literatura que permitem estabelecer a funcionalidade do modelo para representar diferentes configurações de gaseificação com misturas de reagentes.

## Capítulo 6 Conclusões e sugestões

### 6.1 Conclusões

A partir das análises de temperatura interfacial ficou em evidencia a necessidade de estabelecer um método alternativo para obter temperatura axial (no centro do reator) e estudar as mudanças de fase associadas aos efeitos da radiação da biomassa reagindo.

Experimentalmente foi obtido o ponto de máxima eficiência energética do reator quando se refere à composição dos produtos da gaseificação. Este ponto coincide com uma relação de equivalência  $RE = 0,35$ . O próximo passo deveria ser estudar os diferentes tempos de residência com diferentes combustíveis para alcançar o máximo desempenho do reator.

Mostrou-se que a utilização de vapor como reagente misturado no ar apresenta uma melhora significativa até 20% nos produtos de gaseificação, embora apenas se tenha utilizado vapor saturado. O próximo passo seria usar vapor superaquecido para estudar as melhorias tanto nos produtos quanto no desempenho do reator.

A utilização de oxigênio em combinação com vapor torna-se uma alternativa para melhorar a qualidade do gás (entre 19% e 23% dos produtos no gás produzido), deve se levar em conta o estudo econômico associado ao fornecimento deste reagente.

As simulações baseadas no modelo em regime permanente multi-etapa apresentam uma significância estatística entre 90% e 95% para a estimação dos produtos da gaseificação e composições de gás produzido, poder calorífico inferior e temperaturas.

Esta avaliação de significância foi feita com base no desvio padrão e a variância dos dados obtidos das simulações contra os dados obtidos experimentalmente.

Foi constatado que o uso de funções de distribuição de probabilidade para representar as principais reações químicas do processo permite obter redução no custo computacional ao resolver os diferentes modelos com reações químicas e taxas de reação relativamente rápidas. No entanto para reações mais lentas e analisar melhor uma grade variedade de componentes no gás produto e possível contaminantes, o seguinte passo seria a utilização de ferramentas que permitam fornecer um detalhamento químico robusto como programação de Funções Definidas pelo Usuário (UDF).

A partir do modelo configurado nesta pesquisa foi aberta a possibilidade de utilizar diferentes combustíveis empíricos, com base na sua composição química elementar e imediata. O modelo aqui proposto permite com poucos ajustes, configurar diferentes condições operacionais, sempre que à operação seja feita em reatores de leito fixo a pressão atmosférica.

O aqui desenvolvido oferece uma alternativa para simular facilmente diferentes tipos de reagentes sempre que sejam fornecidos por entradas diferentes a da biomassa. Esta hipótese foi bem resolvida sempre que seja utilizado o modelo de combustão sem pre-mistura em que combustíveis e reagentes não entram na mesma corrente no reator.

Destacam-se as principais contribuições desta pesquisa como:

Possibilidade de inserir um combustível novo na livraria do simulador ANSYS® a partir de sua composição química elementar e imediata

Utilização de diferentes reagentes e misturas dentro do processo de gaseificação, especificamente em reatores de duplo estágio, deixando aberta a possibilidade de simular com uma única entrada de reagente.

Considerar modelos de gaseificação sem pre-mistura que permitem a partir de uma função de densidade de probabilidade, gerar a composição de uma mistura de produtos gasosos.

Permite prever a formação das espécies produto da gaseificação, contornos de temperatura, pressão e velocidades ao longo do leito, e com alguns ajustes mais complexos, até os possíveis poluentes.

Representa uma economia de recursos ao ser comparado com grandes investimentos para a realização de testes experimentais.

## 6.2 Sugestões para trabalhos futuros

Com o intuito de melhorar os avanços oferecido nesta pesquisa, e visto com interesse utilizar modelos de cinética química mais robustos, especificamente para a zona de pirólise visando um melhor entendimento deste processo em reatores de duplo estágio.

Com especial interesse em estudar as temperaturas no interior do gaseificador propõe-se fabricar uma sonda com termopares que possa ser adaptada desde o topo do gaseificador e assim obter leituras a diferentes alturas do leito da temperatura axial nas diferentes zonas e poder assim comparar dados experimentais de temperatura na parede e o eixo central do reator.

Recomenda-se estudar diferentes tipos de mecanismos para geração de malhas que permitam simular este tipo de processos a partir das diferentes geometrias e arranjos físicos que podem apresentar os gaseificadores de leito fixo.

Aprofundar em técnicas de simulação numérica que permitam desenvolver estudos para a simulação do processo em regime transiente sem detrimento no custo computacional.

As bases de dados de combustíveis contidas no software ainda não oferecem grande quantidade de biomassas como matérias primas seja para processo de gaseificação ou combustão. Este aspecto torna-se interessante como base para desenvolver rotinas alternativas que permitam desenvolver maior detalhamento químico dos processos associados a estes fenômenos, para que sejam compatíveis com as ferramentas de dinâmica dos fluidos computacional oferecidas pelo conjunto de programas que vincula o ANSYS®.

## Referências Bibliográficas

- [1] ONU, *Industrial Development Report 2011*, U.N.I.D.O. Vienna, 2011.
- [2] S. Teixeira, E. Monteiro, V. Silva, and A. Rouboa, “Prospective application of municipal solid wastes for energy production in Portugal,” *Energy Policy*, vol. 71, pp. 159–168, Aug. 2014.
- [3] “Brasil | Data.” [Online]. Available: <http://data.worldbank.org/country/brazil/portuguese>. [Accessed: 03-Jun-2015].
- [4] Empresa de Pesquisa Energética/MME, “Consumo de energia elétrica no Brasil: Ano base 2015,” *Anuário estatístico Energ. Eletr. 2016*, p. 253, 2016.
- [5] U. Arena, “Process and technological aspects of municipal solid waste gasification. A review,” *Waste Manag.*, vol. 32, no. 4, pp. 625–39, Apr. 2012.
- [6] U. Arena, L. Zaccariello, and M. Mastellone, “Fluidized bed gasification of waste-derived fuels,” *Waste Manag.*, 2010.
- [7] U. Arena, “Department of Environmental Sciences – Second University of Naples of Wastes WtE processes,” 2012.
- [8] G. Galeno, M. Minutillo, and a. Perna, “From waste to electricity through integrated plasma gasification/fuel cell (IPGFC) system,” *Int. J. Hydrogen Energy*, vol. 36, no. 2, pp. 1692–1701, Jan. 2011.
- [9] J. W. Schilli, “Using Gasification to Process Municipal Solid Waste,” *HDR Innov.*, vol. 12, no. 4, 2004.
- [10] STANTEC, “WASTE TO ENERGY A Technical Review of Municipal,” Bumaby, BC, 2011.
- [11] N. Tanigaki, K. Manako, and M. Osada, “Co-gasification of municipal solid waste and material recovery in a large-scale gasification and melting system.,” *Waste Manag.*, vol. 32, no. 4, pp. 667–75, Apr. 2012.
- [12] W. T. Tsai and Y. H. Chou, “An overview of renewable energy utilization from

- municipal solid waste (MSW) incineration in Taiwan,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 10, no. 5, pp. 491–502, Oct. 2006.
- [13] a. V. Bridgwater, a. J. Toft, and J. G. Brammer, *A techno-economic comparison of power production by biomass fast pyrolysis with gasification and combustion*, vol. 6, no. 3. 2002.
- [14] C. A. V. B. de O. Sales, “Estudo experimental da gaseificação do eucalipto em gaseificador co-corrente de duplo estágio com ar , vapor saturado e oxigênio para produção de gás de síntese,” *Tese doutorado*, p. 159, 2015.
- [15] Edições Câmara, Ed., *POLÍTICA NACIONAL DE RESÍDUOS SÓLIDOS*, 2nd ed. Brasília, 2012.
- [16] “Brasil em síntese | Habitação | características dos domicílios.” [Online]. Available: <http://brasilemsintese.ibge.gov.br/pt/habitacao/caracteristicas-dos-domicilios>. [Accessed: 03-Jun-2015].
- [17] “IBGE :: Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística.” [Online]. Available: <http://www.ibge.gov.br/home/>. [Accessed: 03-Jun-2015].
- [18] A. Salomão, “Banco Mundial faz estudo sobre o lixo no Brasil,” *Exame.com*, 2010. [Online]. Available: <http://exame.abril.com.br/blogs/aqui-no-brasil/2010/10/04/banco-mundial-faz-estudo-sobre-o-lixo-no-brasil/>. [Accessed: 15-May-2013].
- [19] ISWA and Abrelpe, *Resíduos Sólidos: Manual de Boas Práticas no Planejamento*, 1st ed. São Paulo, 2011.
- [20] M. Tolmasquim, “Plano Nacional de energia 2030,” *Minist. Minas e Energia. Cons. Nac. ...*, 2007.
- [21] U. Arena and F. Di Gregorio, “Element partitioning in combustion- and gasification-based waste-to-energy units.,” *Waste Manag.*, vol. 33, no. 5, pp. 1142–50, May 2013.
- [22] A. M. L. Nasner, “Modelagem de uma Planta Piloto de Gaseificação de Combustível Derivado de Resíduos (CDR) em um Sistema Integrado a Motor Ciclo Otto, Utilizando o Software Aspen Plus<sup>TM</sup>,” *Diss. Mestr.*, p. 140, 2015.
- [23] Abrelpe, “Atlas Brasileiro de Emissões de GEE e Potencial Energético na Destinação de Resíduos Sólidos,” São Paulo, 2013.
- [24] J. Martínez, “Estudo Experimental do Conjunto Gaseificador de Biomassa em Reator Co-corrente com Duplo Estágio de Fornecimento de Ar e Motor de Combustão,” *Diss. Mestr.*, 2009.
- [25] S. Y. Giraldo Restrepo, “Avaliação de um Sistema de Limpeza integrado a um Conjunto Gaseificador de Biomassa/Célula SOFC.,” *Tese doutorado*, p. 166, 2013.
- [26] I.-S. Antonopoulos, a Karagiannidis, a Gkouletsos, and G. Perkoulidis, “Modelling of a downdraft gasifier fed by agricultural residues.,” *Waste Manag.*, vol. 32, no. 4, pp. 710–8, Apr. 2012.
- [27] E. S. Lora and R. V. Andrade, “Biomass as energy source in Brazil,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 13, no. 4, pp. 777–788, May 2009.
- [28] F. O. Centeno González, “Avaliação do desempenho de um sistema integrado

- Motor Ciclo Otto/Gaseificador Co-corriente utilizando modelagem matemática,” *Diss. Mestr.*, p. 156, 2010.
- [29] M. H. Rocha, “Avaliação Técnico-Econômica de Biorrefinarias para a Produção de Biocombustíveis Líquidos e Eletricidade Através da Gaseificação de Biomassa,” *Tese doutorado*, p. 383, 2015.
- [30] M. F. R. Nascimento, “Modelagem de gaseificador co-corrente utilizando diferentes fluidos de gaseificação Modelagem de gaseificador co-corrente utilizando diferentes fluidos de gaseificação,” *Diss. Mestr.*, p. 182, 2015.
- [31] P. Basu, *Biomass Gasification and Pyrolysis*. Burlington, MA: Elsevier Inc., 2010.
- [32] P. Basu, *Biomass Gasification, Pyrolysis and Torrefaction: Practical Design and Theory*. 2013.
- [33] Y. C. Ardila, “Gaseificação da Biomassa para a Produção de Gás de Síntese e Posterior Fermentação para Bioetanol: Modelagem e Simulação do Processo,” *Tese doutorado*, p. 234, 2015.
- [34] P. Basu, *Combustion and Gasification in Fluidized Beds*. 2006.
- [35] V. Belgiorno, G. De Feo, C. Della Rocca, and R. M. a Napoli, “Energy from gasification of solid wastes,” *Waste Manag.*, vol. 23, no. 1, pp. 1–15, Jan. 2003.
- [36] J. F. Pérez Bayer, “Gasificación de biomassa Estudios teórico-experimentales en lecho fijo equicorriente,” *Editor. UdeA*, p. 230, 2009.
- [37] C. G. Sanches, *Tecnologia da gaseificação de biomassa*. Campinas, 2010.
- [38] C. D. Blasi, “Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers,” *Chem. Eng. Sci.*, vol. 55, pp. 2931–2944, 2000.
- [39] J. D. Martínez, K. Mahkamov, R. V. Andrade, and E. E. Silva Lora, “Syngas production in downdraft biomass gasifiers and its application using internal combustion engines,” *Renew. Energy*, vol. 38, no. 1, pp. 1–9, 2012.
- [40] FEAM, DPED, and GEMUC, *APROVEITAMENTO ENERGÉTICO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS: GUIA*. Belo Horizonte, 2012.
- [41] C. Shonhiwa, *An assessment of biomass residue sustainably available for thermochemical conversion to energy in Zimbabwe*, vol. 52. Elsevier Ltd, 2013.
- [42] S. Cointreau, “Occupational and environmental health issues of solid waste management,” *Urban Pap.*, p. 57, 2006.
- [43] F. Codignole, “Projeto e avaliação técnico-econômica de plantas de gaseificação o lixo urbano para geração distribuída de eletricidade,” *Diss. Mestr.*, p. 244, 2013.
- [44] B. Leckner, “Process aspects in combustion and gasification Waste-to-Energy (WtE) units,” *Waste Manag.*, vol. 37, no. 0, p. , 2014.
- [45] P. H. Brunner and H. Rechberger, “Waste to energy – key element for sustainable waste management,” *Waste Manag.*, Mar. 2014.
- [46] EPE, *Energia renovável: hidráulica, biomassa, eólica, solar e oceânica*. Rio de Janeiro, 2016.
- [47] M. Campoy, A. Gómez-Barea, P. Ollero, and S. Nilsson, “Gasification of wastes in a pilot fluidized bed gasifier,” *Fuel Process. Technol.*, vol. 121, pp. 63–69, May

- 2014.
- [48] CEMIG, “Resíduo Sólido Projeto P&D GT 418.” [Online]. Available: [http://www.cemig.com.br/pt-br/A\\_Cemig\\_e\\_o\\_Futuro/inovacao/Alternativas\\_Energeticas/Paginas/Res%25C3%25ADduo-S%25C3%25B3lido.aspx](http://www.cemig.com.br/pt-br/A_Cemig_e_o_Futuro/inovacao/Alternativas_Energeticas/Paginas/Res%25C3%25ADduo-S%25C3%25B3lido.aspx).
- [49] AGTHERM, “AG Therm Caldeiras e Equipamentos Ltda.” [Online]. Available: <http://www.agtherm.com.br/servicos/locacao-de-caldeiras.htm>.
- [50] E. E. S. Lora, R. V. Andrade, J. C. E. Palacio, V. M. Cobas, and O. J. Venturini, “Projeto P&D 418 CEMIG-NEST P&D 418 R-03,” Itajubá, MG. Brasil, 2014.
- [51] A. I. M. Henríquez, “Análise de Ciclo de Vida de sistemas integrados de tratamento e disposição final de RSU para cidades de médio porte,” *Diss. Mestr.*, 2016.
- [52] Brasil, “Lei nº 12.305, de 2 de agosto de 2010,” *Diário Of. da União*, p. 2, 2010.
- [53] P. de A. F. J. Valente, “O combustível derivado de resíduos no contexto das políticas nacionais de energia e resíduos sólidos,” *J. Chem. Inf. Model.*, vol. 53, no. 9, pp. 1689–1699, 2013.
- [54] S. G. Ribeiro, “GERAÇÃO DE ENERGIA ELÉTRICA COM RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS - USINAS ‘WASTE-TO-ENERGY’ (WTE),” in *waste energy*, 2014, pp. 1–17.
- [55] S. . Bhattacharya, A. H. M. Mizanur Rahman Siddique, and H. Pham, “A study on wood gasification for low-tar gas production,” *Energy*, vol. 24, no. 4. pp. 285–296, 1999.
- [56] S. C. Bhattacharya, S. Shwe Hla, and H. L. Pham, “A study on a multi-stage hybrid gasifier-engine system,” *Biomass and Bioenergy*, vol. 21, no. 6, pp. 445–460, 2001.
- [57] A. L. G. Noguera, “Análise Dos Efeitos Das Condições Operacionais De Um Gaseificador Co- Corrente De Duplo Estágio Na Qualidade Operacionais De Um Gaseificador Co-,” *Diss. Mestr.*, p. 129, 2012.
- [58] J. D. Martínez, E. E. Silva Lora, R. V. Andrade, and R. L. Jaén, “Experimental study on biomass gasification in a double air stage downdraft reactor,” *Biomass and Bioenergy*, vol. 35, no. 8, pp. 3465–3480, Aug. 2011.
- [59] K. Jaojaruek, S. Jarungthammachote, M. K. B. Gratuito, H. Wongsuwan, and S. Homhual, “Experimental study of wood downdraft gasification for an improved producer gas quality through an innovative two-stage air and premixed air/gas supply approach.,” *Bioresour. Technol.*, vol. 102, no. 7, pp. 4834–40, Apr. 2011.
- [60] H. K. Versteeg and W. Malalasekera, *An introduction to computational fluid dynamics The finite volume method*, 2nd ed. 1996.
- [61] R. Budhathoki, “Three zone modeling of Downdraft biomass Gasification : Equilibrium and finite Kinetic Approach,” *Master thesis*, 2013.
- [62] R. Bird, W. Stewart, and E. Lightfoot, *Transport phenomena*. 2007.
- [63] J. M. Mejía Cárdenas, “LARGE EDDY SIMULATION OF SCALAR MIXING IN A TURBULENT ROUND JET,” *PhD Tesis*, no. February, p. 122, 2011.
- [64] T. Y. Ahmed, M. M. Ahmad, S. Yusup, A. Inayat, and Z. Khan, “Mathematical

- and computational approaches for design of biomass gasification for hydrogen production: A review,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 16, no. 4, pp. 2304–2315, May 2012.
- [65] A. Rashidi, “Inaugural - Dissertation CFD Simulation of Biomass Gasification Using Detailed Chemistry,” *PhD Thesis*, p. 123, 2011.
- [66] J. K. Ratnadhariya and S. a. Channiwala, “Three zone equilibrium and kinetic free modeling of biomass gasifier - a novel approach,” *Renew. Energy*, vol. 34, no. 4, pp. 1050–1058, 2009.
- [67] A. K. Sharma, “Modeling and simulation of a downdraft biomass gasifier 1. Model development and validation,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 52, no. 2, pp. 1386–1396, Feb. 2011.
- [68] C. Di Blasi and C. Branca, “Modeling a stratified downdraft wood gasifier with primary and secondary air entry,” *Fuel*, vol. 104, pp. 847–860, 2013.
- [69] D. F. Fletcher, B. S. Haynes, F. C. Christo, and S. D. Joseph, “A CFD based combustion model of an entrained flow biomass gasifier,” *Appl. Math. Model.*, vol. 24, no. 2000, pp. 165–182, 2000.
- [70] M. Puig-Arnavat, J. C. Bruno, and A. Coronas, “Review and analysis of biomass gasification models,” *Renew. Sustain. Energy Rev.*, vol. 14, no. 9, pp. 2841–2851, Dec. 2010.
- [71] R. Rodrigues, “Modelagem E Simulação De Um Gaseificador Em Leito Fixo Para O Tratamento Térmico De Resíduos Sólidos Da Indústria Calçadista,” *Diss. Mestr.*, p. 141, 2008.
- [72] L. Yu, J. Lu, X. Zhang, and S. Zhang, “Numerical simulation of the bubbling fluidized bed coal gasification by the kinetic theory of granular flow (KTGF),” *Fuel*, vol. 86, no. 5–6, pp. 722–734, 2007.
- [73] R. K. Manurung and A. A. C. M. Beenackers, “Modeling and Simulation of an Open Core Down-Draft Moving Bed Rice Husk Gasifier,” in *Advances in Thermochemical Biomass Conversion*, Springer, Ed. Dordrecht: Springer Netherlands, 1993, pp. 288–309.
- [74] Z. A. Zainal, R. Ali, C. H. Lean, and K. N. Seetharamu, “Prediction of performance of a downdraft gasifier using equilibrium modeling for different biomass materials,” *Energy Convers. Manag.*, vol. 42, no. 12, pp. 1499–1515, 2001.
- [75] P. Mathieu and R. Dubuisson, “Performance analysis of a biomass gasifier,” *Fuel Energy Abstr.*, vol. 44, no. 2, p. 88, 2003.
- [76] J. C. Wurzenberger, S. Wallner, H. Raupenstrauch, and J. G. Khinast, “Thermal conversion of biomass: Comprehensive reactor and particle modeling,” *AIChE J.*, vol. 48, no. 10, pp. 2398–2411, 2002.
- [77] S. V. Zhubrin, “MODELLING of COAL GASIFICATION,” *Demonstr. case CHAM-Japan*, 2002.
- [78] N. A. Bakar, “Modelling of downdraft gasifier using computational fluid dynamics software---Fluent,” *Master thesis*, no. June, p. 71, 2003.
- [79] S. Sivakumar, “Design and Analysis Of Down Draft Biomass Gasifier using Computational Fluid Dynamics,” *Anna ...*, pp. 1–7, 2006.

- [80] A. Rogel-Ramírez, “Modelado de un gasificador estratificado de lecho móvil de biomasa, utilizando CFD,” *Ing. Investig. y Tecnol.*, no. 4, pp. 329–338, 2008.
- [81] A. Mishra, “Exergy analysis and CFD modeling of Downdraft Gasifier for Biomass Gasification,” *Master thesis*, p. 126, 2007.
- [82] J. Korotko, “NUMERICAL MODELING OF THERMODYNAMIC PROCESSES IN BIOMASS BED,” no. 2010, p. 2011, 2011.
- [83] M. Muilenburg, “Computational Modeling of the Combustion and Gasification Zones in a Downdraft Gasifier,” *Master thesis*, pp. 151–158, 2011.
- [84] I. Janajreh and M. Al Shrah, “Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of wood chips,” *Energy Convers. Manag.*, 2012.
- [85] C. Mohan Raj and P. Srividhyab, “CFD Simulation of 20 KW Down Draft Gasifier,” pp. 209–214, 2013.
- [86] K. Patel, N. Shah, and R. Patel, “CFD Analysis of Spatial Distribution of Various Parameters in Downdraft Gasifier,” *Procedia Eng.*, 2013.
- [87] Ansys, “ANSYS CFX Technical Specifications,” pp. 1–4, 2013.
- [88] M. L. d. Souza-Santos, “Solid Fuels Combustion and Gasification,” *Mech. Eng.*, pp. 1–431, 2004.
- [89] Ansys, “Ansys cfx brochure,” 2013.
- [90] A. Augusto and C. De Oliveira, “Metodologia de Projeto Aerodinâmico de Rotores Axiais e Otimização da Pá com base nos Efeitos de Sweep e Dihedral Metodologia de Projeto Aerodinâmico de Rotores Axiais e Otimização da Pá com base nos Efeitos de Sweep e Dihedral,” 2014.
- [91] ANSYS Inc. (US), “ANSYS Fluent Theory Guide,” vol. Release 14, no. November, pp. 724–746, 2013.
- [92] D. Barba, M. Prisciandaro, A. Salladini, and G. Mazziotti Di Celso, “The Gibbs Free Energy Gradient Method for RDF gasification modelling,” *Fuel*, vol. 90, no. 4, pp. 1402–1407, 2011.
- [93] M. L. de Souza-Santos, “Comprehensive modelling and simulation of fluidized bed boilers and gasifiers,” *Fuel*, vol. 68, pp. 1507–1521, 1989.
- [94] C. T. Crowe, “MULTIPHASE FLOW HANDBOOK,” *City*, 2006.
- [95] P. D. Function, “Using the Non-Premixed Combustion Model,” *Combustion*, no. 1, pp. 1–46, 2006.
- [96] A. Confidential, “Lecture 8 : Multiphase Turbulence Advanced Multiphase Course Turbulence in Multiphase Flows Free stream Turbulence Turbulence Interaction,” 2014.
- [97] T. Eulerian, A. Fluent, and T. Guide, “Tutorial : Modeling Uniform Fluidization in 2D Fluidized Bed Introduction,” pp. 1–14, 2012.
- [98] A. Confidential, “General Introduction and Multiphase Training Agenda Introductions :,” pp. 0–6, 2014.
- [99] C. Di Blasi, “Combustion and gasification rates of lignocellulosic chars,” *Prog. Energy Combust. Sci.*, vol. 35, no. 2, pp. 121–140, 2009.

- [100] R. Bird, W. E. Stewart, and E. N. Lightfoot, *Transport phenomena*. 2007.
- [101] PerkinElmer(R), “2400 seriesII CHNSO Analyzer User Guide.” .
- [102] ASTM, *ASTM D5373: Standard Methods for Instrumental Determination of Carbon, Hydrogen, and Nitrogen in Laboratory Samples of Coal and Coke*. 1997, p. 6.
- [103] LECO, “TGA701-Thermogravimetric Analyzer Instruction Manual,” 2010.
- [104] ASTM, “ASTM D3172 - 13 Standard Practice for Proximate Analysis of Coal and Coke.” West Conshohocken, p. 2, 2013.
- [105] M. Simone, F. Barontini, C. Nicoletta, and L. Tognotti, “Gasification of pelletized biomass in a pilot scale downdraft gasifier.,” *Bioresour. Technol.*, vol. 116, pp. 403–12, Jul. 2012.
- [106] T. K. Patra and P. N. Sheth, “Biomass gasification models for downdraft gasifier: A state-of-the-art review,” vol. 50, pp. 583–593, 2015.
- [107] M. Van Der Burgt and C. Higman, *Gasification*. 2008.
- [108] C. Van Huynh and S.-C. Kong, “Combustion and NO<sub>x</sub> emissions of biomass-derived syngas under various gasification conditions utilizing oxygen-enriched-air and steam,” *Fuel*, no. x, Dec. 2012.
- [109] Y. Shi, “Biomass Gasification in a pilot-scale system,” *PhD Thesis*, p. 128, 2016.

## Apêndice A. Código ANSYS FLUENT® para o caso base 12 kg/h biomassa tipo CDR, RE=0,35 em reator de duplo estágio

Fluent  
 Version: 3d, dp, pbns, pdf20, rke (3d, double precision, pressure-based, 20 species pdf, realizable k-epsilon)  
 Title: Caso Base RE=0,35

### Models

Model	Settings
Space	3D
Time	Steady
Viscous	Realizable k-epsilon turbulence model
Wall Treatment	Standard Wall Functions
Heat Transfer	Enabled
Solidification and Melting	Disabled
Radiation	P1 Model
Species	Non-Premixed Combustion (c h o n s n2 o2 empirical-fuel co c<s> co2 h2 h2o ch4)
Coupled Dispersed Phase	Disabled
NOx Pollutants	Disabled
SOx Pollutants	Disabled
Soot	Disabled
Mercury Pollutants	Disabled

### Material Properties

Material: pdf-mixture (mixture)

Property	Units	Method	Value(s)
Mixture Species	names	(c h o n s n2 o2 empirical-fuel co c<s> co2 h2 ch4)	
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	mixing-law	#f
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	0.0454
Viscosity	kg/m-s	constant	1.72e-05
Absorption Coefficient	1/m	constant	0
Scattering Coefficient	1/m	constant	0
Scattering Phase Function		isotropic	#f
Refractive Index		constant	1
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (ch4 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 403.5915
9.0574851	-0.014425329	1.5805453e-05	-6.3431579e-09)
5.3055622	-0.0020083285	3.5167054e-07	-2.3339494e-11)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	16.04276
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-74892973
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	186057.77
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (co2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:
429.93022	1.8744798	-0.0019664917	1.2972557e-06
841.37933	0.59324115	-0.00024151756	4.5227419e-08
			-3.153141e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	44.0098
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-3.9354283e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	213734.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h2o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:
1563.0818	1.6037598	-0.0029327939	3.2161116e-06
1233.2377	1.4105281	-0.00040291547	5.5427906e-08
			-2.949834e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	18.01528
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.4184276e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	188713.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000:
13602.855	3.4024177	-0.0033585231	-3.9080689e-07
12337.891	2.8873611	-0.00023236285	-3.8074924e-08
			6.5279369e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	2.01588
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2448.5948
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	130593.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (co . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
968.39484 0.44879012 -0.0011522231	1.656891e-06	-7.3464085e-10)	(1000-5000: 897.9353 0.4282339 -0.0001671401 3.0234596e-08 -2.0513808e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0104
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-1.1053974e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	197546.27
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (c<s> . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	constant	2000
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(273-1000: -
464.18404 4.9712284 -0.0038992607	1.4829568e-06	-2.8855917e-10)	(1000-5000: 1031.5336 1.1505684 -0.0004629064 8.9358187e-08 -6.3721819e-12)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	12.011
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1174.647
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	5735.9101
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (empirical-fuel . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1000
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	30
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-2.4433086e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	0
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (o2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
834.82638 0.29295803 -0.0001495637	3.4138851e-07	-2.2783585e-10)	(1000-5000: 960.7523 0.15941258 -3.2708853e-05 4.6127636e-09 -2.9528327e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	31.9988
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	-847.64045
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	205041.62
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (n2 . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
979.04296 0.41796388 -0.001176279	1.6743942e-06	-7.2562943e-10)	
868.62287 0.44162954 -0.00016872292	2.9967875e-08	-2.0043856e-12)	
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	28.0134
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	1429.881
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	191509.42
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (s . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
826.43725 -0.41376619 0.00052001081	-3.9076864e-07	1.2786239e-10)	
752.49315 -0.14220788 7.1682233e-05	-1.3008792e-08	8.1693563e-13)	
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	32.066
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.7700835e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	167746.59
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (n . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
1485.8163 -0.012940529 3.2176116e-05	-3.3523766e-08	1.2464974e-11)	
1454.4726 0.063286132 -4.4314043e-05	1.1157564e-08	-6.0902132e-13)	
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	14.0067
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	4.7262532e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	153187.62
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (o . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1000-5000:
1531.1577 -0.851299 0.0012581269	-8.3294264e-07	2.0218614e-10)	
1321.021 -0.014317108 -1.6124204e-06	2.3650336e-09	-2.2699264e-13)	
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	15.9994
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.49195e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	160943.58
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (h . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 20622.11 0 0 0 0) (1000-5000: 20622.11 0 0 0 0)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	1.00794
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	2.1797701e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	114603.82
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: (c . pdf-mixture) (fluid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	pdf	#f
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	polynomial	(300-1000: 1729.5876 0.055971935 -0.0001867419 2.1048751e-07 -7.6605439e-11) (1000-5000: 1801.2352 -0.12370659 6.2902963e-05 -7.9601502e-09 2.291856e-13)
Molecular Weight	kg/kgmol	constant	12.011
Standard State Enthalpy	j/kgmol	constant	7.1674177e+08
Standard State Entropy	j/kgmol-k	constant	158005.45
Reference Temperature	k	constant	298.15
Speed of Sound	m/s	none	#f

Material: CDR biomass (combusting-particle)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	constant	1400
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	1680
Latent Heat	j/kg	constant	0
Vaporization Temperature	k	constant	400
Volatile Component Fraction	%	constant	7.963976
Binary Diffusivity	m2/s	constant	4e-05
Swelling Coefficient		constant	1.4
Burnout Stoichiometric Ratio		constant	2.67
Combustible Fraction	%	constant	20.303238
Devolatilization Model	1/s	constant	50
Combustion Model		diffusion-limited	#f

Material: carbon steel (solid)

Property	Units	Method	Value (s)
Density	kg/m3	constant	7860
Cp (Specific Heat)	j/kg-k	constant	486
Thermal Conductivity	w/m-k	constant	52.900002

## Cell Zone Conditions

## Zones

```

-----
name    id    type
-----
fluid   11    fluid

```

## Setup Conditions

fluid

```

-----
Condition                                     Value
-----
Material Name                                pdf-mixture
Specify source terms?                        no
Source Terms ((mass) (x-momentum) (y-momentum) (z-momentum) (k)
(epsilon) (energy) (p1) (fmean) (fvar))
Specify fixed values?                        no
Local Coordinate System for Fixed Velocities no
Fixed Values ((x-velocity (inactive . #f) (constant . 0)
(profile )) (y-velocity (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (z-velocity
(inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (k (inactive . #f) (constant . 0)
(profile )) (epsilon (inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (enthalpy
(inactive . #f) (constant . 0) (profile )) (fmean (inactive . #f) (constant .
0) (profile )) (fvar (inactive . #f) (constant . 0) (profile )))
Frame Motion?                                no
Relative To Cell Zone                        -1
Reference Frame Rotation Speed (rad/s)       0
Reference Frame X-Velocity Of Zone (m/s)     0
Reference Frame Y-Velocity Of Zone (m/s)     0
Reference Frame Z-Velocity Of Zone (m/s)     0
Reference Frame X-Origin of Rotation-Axis (mm) 0
Reference Frame Y-Origin of Rotation-Axis (mm) 0
Reference Frame Z-Origin of Rotation-Axis (mm) 0
Reference Frame X-Component of Rotation-Axis 0
Reference Frame Y-Component of Rotation-Axis 0
Reference Frame Z-Component of Rotation-Axis 1
Reference Frame User Defined Zone Motion Function none
Mesh Motion?                                no
Relative To Cell Zone                        -1
Moving Mesh Rotation Speed (rad/s)           0
Moving Mesh X-Velocity Of Zone (m/s)         0
Moving Mesh Y-Velocity Of Zone (m/s)         0
Moving Mesh Z-Velocity Of Zone (m/s)         0
Moving Mesh X-Origin of Rotation-Axis (mm)   0
Moving Mesh Y-Origin of Rotation-Axis (mm)   0
Moving Mesh Z-Origin of Rotation-Axis (mm)   0
Moving Mesh X-Component of Rotation-Axis     0
Moving Mesh Y-Component of Rotation-Axis     0
Moving Mesh Z-Component of Rotation-Axis     1
Moving Mesh User Defined Zone Motion Function none
Participates in radiation                    no
Deactivated Thread                           no
Laminar zone?                                no
Set Turbulent Viscosity to zero within laminar zone? yes
Embedded Subgrid-Scale Model                 0
Momentum Spatial Discretization             0
Cwale                                         0.325
Cs                                             0.1
Porous zone?                                 yes
Conical porous zone?                         no
X-Component of Direction-1 Vector            1
Y-Component of Direction-1 Vector            0
Z-Component of Direction-1 Vector            0
X-Component of Direction-2 Vector            0
Y-Component of Direction-2 Vector            1
Z-Component of Direction-2 Vector            0

```

X-Component of Cone Axis Vector	1
Y-Component of Cone Axis Vector	0
Z-Component of Cone Axis Vector	0
X-Coordinate of Point on Cone Axis (mm)	1000
Y-Coordinate of Point on Cone Axis (mm)	0
Z-Coordinate of Point on Cone Axis (mm)	0
Half Angle of Cone Relative to its Axis (deg)	0
Relative Velocity Resistance Formulation?	yes
Direction-1 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Direction-2 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Direction-3 Viscous Resistance (1/m <sup>2</sup> )	0
Choose alternative formulation for inertial resistance?	no
Direction-1 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-2 Inertial Resistance (1/m)	0
Direction-3 Inertial Resistance (1/m)	0
C0 Coefficient for Power-Law	0
C1 Coefficient for Power-Law	0
Porosity	0.5
Equilibrium Thermal Model (if no, Non-Equilibrium)?	yes
Non-Equilibrium Thermal Model?	no
Solid Material Name	Carbon steel
Interfacial Area Density (1/m)	1
Heat Transfer Coefficient (w/m <sup>2</sup> -k)	1

## Boundary Conditions

-----

## Zones

name	id	type
outlet_syngas	14	pressure-outlet
inlet_biomassa	13	mass-flow-inlet
intlet_air2	16	mass-flow-inlet
intlet_air1	15	mass-flow-inlet
dry	17	wall
combution	18	wall
oxi_reduction	19	wall

## Setup Conditions

## outlet\_syngas

Condition	Value
Gauge Pressure (pascal)	100
Backflow Total Temperature (k)	900
Backflow Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Turbulent Specification Method	3
Backflow Turbulent Kinetic Energy (m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> )	1
Backflow Turbulent Dissipation Rate (m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> )	1
Backflow Turbulent Intensity (%)	0.098999998
Backflow Turbulent Length Scale (mm)	1000
Backflow Hydraulic Diameter (mm)	0.017000001

Backflow Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	0.6
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no
Radial Equilibrium Pressure Distribution	no
Average Pressure Specification?	no
	0
Specify targeted mass flow rate	no
Targeted mass flow (kg/s)	1
Upper Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	5000000
Lower Limit of Absolute Pressure Value (pascal)	1

inlet\_biomassa

Condition	Value
-----	
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	0.00294
Mass Flux (kg/m2-s)	1
Average Mass Flux (kg/m2-s)	1
Upstream Torque Integral (n-m)	1
Upstream Total Enthalpy Integral (w/m2)	1
Total Temperature (k)	410
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Axis Direction	1
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	0
X-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Turbulent Specification Method	1
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	5
Turbulent Length Scale (mm)	1000
Hydraulic Diameter (mm)	1000
Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	0.6
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

intlet\_air2

Condition	Value
-----	
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	0.00373
Mass Flux (kg/m2-s)	1

Average Mass Flux (kg/m2-s)	1
Upstream Torque Integral (n-m)	1
Upstream Total Enthalpy Integral (w/m2)	1
Total Temperature (k)	1123
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Axis Direction	0
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	1
X-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	4.9999999
Turbulent Length Scale (mm)	1000
Hydraulic Diameter (mm)	1000
Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	0.6
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

inlet\_air1

Condition	Value
-----	-----
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	0.00298
Mass Flux (kg/m2-s)	1
Average Mass Flux (kg/m2-s)	1
Upstream Torque Integral (n-m)	1
Upstream Total Enthalpy Integral (w/m2)	1
Total Temperature (k)	1234
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Direction Specification Method	1
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0
X-Component of Flow Direction	1
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Velocity (m/s)	0
X-Component of Axis Direction	0
Y-Component of Axis Direction	0
Z-Component of Axis Direction	1
X-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (mm)	0
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	4.9999999
Turbulent Length Scale (mm)	1000
Hydraulic Diameter (mm)	1000

Turbulent Viscosity Ratio	10
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	0.6
Mean Mixture Fraction	0
Mixture Fraction Variance	0
is zone used in mixing-plane model?	no

dry

Condition	Value
-----	
Wall Thickness (mm)	0
Heat Generation Rate (w/m3)	0
Material Name	aluminum
Thermal BC Type	0
Temperature (k)	410
Heat Flux (w/m2)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0
Free Stream Temperature (k)	300
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	1
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of Wall Translation	1
Y-Component of Wall Translation	0
Z-Component of Wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of Wall Translation (m/s)	0
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0
Internal Emissivity	0.6
External Emissivity	1
External Radiation Temperature (k)	300
Wall Roughness Height (mm)	0
Wall Roughness Constant	0.5
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Fslip constant	0
Eslip constant	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1
Enable Thermal Stabilization?	no
Scale Factor	0
Stabilization Method	1

combution

Condition	Value
-----	
Wall Thickness (mm)	0
Heat Generation Rate (w/m3)	0
Material Name	aluminum
Thermal BC Type	0

Temperature (k)	1230
Heat Flux (w/m2)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0
Free Stream Temperature (k)	300
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	1
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of Wall Translation	1
Y-Component of Wall Translation	0
Z-Component of Wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of Wall Translation (m/s)	0
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0
Internal Emissivity	0.6
External Emissivity	1
External Radiation Temperature (k)	300
Wall Roughness Height (mm)	0
Wall Roughness Constant	0.5
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Fslip constant	0
Eslip constant	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1
Enable Thermal Stabilization?	no
Scale Factor	0
Stabilization Method	1

## oxi\_reduction

Condition	Value
-----	-----
Wall Thickness (mm)	0
Heat Generation Rate (w/m3)	0
Material Name	aluminum
Thermal BC Type	0
Temperature (k)	1123
Heat Flux (w/m2)	0
Convective Heat Transfer Coefficient (w/m2-k)	0
Free Stream Temperature (k)	300
Enable shell conduction?	no
Wall Motion	1
Shear Boundary Condition	0
Define wall motion relative to adjacent cell zone?	yes
Apply a rotational velocity to this wall?	no
Velocity Magnitude (m/s)	0
X-Component of Wall Translation	1
Y-Component of Wall Translation	0
Z-Component of Wall Translation	0
Define wall velocity components?	no
X-Component of Wall Translation (m/s)	0
Y-Component of Wall Translation (m/s)	0
Z-Component of Wall Translation (m/s)	0

Internal Emissivity	0.6
External Emissivity	1
External Radiation Temperature (k)	300
Wall Roughness Height (mm)	0
Wall Roughness Constant	0.5
Rotation Speed (rad/s)	0
X-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Y-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
Z-Position of Rotation-Axis Origin (mm)	0
X-Component of Rotation-Axis Direction	0
Y-Component of Rotation-Axis Direction	0
Z-Component of Rotation-Axis Direction	1
X-component of shear stress (pascal)	0
Y-component of shear stress (pascal)	0
Z-component of shear stress (pascal)	0
Fslip constant	0
Eslip constant	0
Surface tension gradient (n/m-k)	0
Specularity Coefficient	0
Convective Augmentation Factor	1
Enable Thermal Stabilization?	no
Scale Factor	0
Stabilization Method	1

#### Solver Settings

##### Equations

Equation	Solved
Flow	yes
Turbulence	yes
Energy	yes
P1	yes
Pdf	yes

##### Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

##### Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Pressure	0.5
Density	0.80000001
Body Forces	1
Momentum	0.30000001
Turbulent Kinetic Energy	0.69999999
Turbulent Dissipation Rate	0.69999999
Turbulent Viscosity	1
Energy	1
Temperature	1
P1	0.80000001
Mean Mixture Fraction	1
Mixture Fraction Variance	0.9

##### Linear Solver

Solver Variable	Termination Type	Residual Reduction Criterion	Tolerance
-----			

Pressure	V-Cycle	0.1	
X-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Y-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Z-Momentum	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
Energy	F-Cycle	0.1	
P1	Flexible	0.1	0.7
Mean Mixture Fraction	Flexible	0.1	0.7
Mixture Fraction Variance	Flexible	0.1	0.7

#### Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
-----	
Type	SIMPLE

#### Discretization Scheme

Variable	Scheme
-----	
Pressure	PRESTO!
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
Energy	Second Order Upwind
Mean Mixture Fraction	Second Order Upwind
Mixture Fraction Variance	Second Order Upwind

#### Solution Limits

Quantity	Limit
-----	
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10
Minimum Temperature	1
Maximum Temperature	5000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000