

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

TESE DE DOUTORADO

**Avaliação da combustão de bagaço e palha de
cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira
industrial AMD a partir da modelagem por CFD**

Autor: MSc. Felipe Orlando Centeno González

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora

Co-orientador: Prof. Dr. Helcio Francisco Villa Nova

Itajubá, novembro de 2015

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

TESE DE DOUTORADO

**Avaliação da combustão de bagaço e palha de
cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira
industrial AMD a partir da modelagem por CFD**

Autor: MSc. Felipe Orlando Centeno González

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora

Co-orientador: Prof. Dr. Helcio Francisco Villa Nova

Curso: Doutorado em Engenharia Mecânica

Área de Concentração: Conversão de energia

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

Itajubá, novembro de 2015

MG – Brasil

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

TESE DE DOUTORADO

**Avaliação da combustão de bagaço e palha de
cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira
industrial AMD a partir da modelagem por CFD**

Autor: MSc. Felipe Orlando Centeno González

Orientador: Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora

Co-orientador: Prof. Dr. Helcio Francisco Villa Nova

Composição da Banca Examinadora:

Prof. Dr. Arnaldo Martín Martínez Reyes – Universidade do Oriente (Cuba)

Prof. Dr. Lourival Jorge Mendes Neto - UFSJ

Prof. Dr. Rubenildo Vieira Andrade - IEM/UNIFEI

Prof. Dr. Flavio Neves Teixeira - UFSJ

Agradecimentos

Aos meus Orientadores, Prof. Dr. Electo Eduardo Silva Lora e Prof. Dr. Helcio Francisco Villa Nova, pela competência, dedicação, paciência e amizade.

A todos os membros da banca examinadora pelas suas importantes revisões e sugestões.

Ao pessoal da empresa CALDEMA fabricante da caldeira objeto deste estudo, que forneceram algumas informações requeridas do equipamento.

Ao Prof. Dr. Edgardo Olivares Gómez quem sendo pesquisador do Laboratório Nacional de Ciência e Tecnologia do Bioetanol (CTBE) facilitou amostras de bagaço e palha de cana-de-açúcar necessárias para o trabalho.

Ao Prof Dr. Albert Ratner na Universidade de Iowa (Iowa city, IA, EUA) quem disponibilizou sua equipe, acesso a sua infraestrutura de laboratórios e especialmente ao cluster NEON da sua Universidade.

Ao Instituto de Engenharia Mecânica da UNIFEI, representado pelos seus dedicados Professores e Funcionários, pela oportunidade que me concedeu na realização deste trabalho, e aos amigos desse Instituto, pelo convívio profissional.

À CAPES, CNPq, FAPEMIG, PRH-16-ANP, agencias que através dos seus programa de bolsas deram apoio financeiro a vários participantes deste projeto.

Ao projeto do **CNPq** identificado com o **número de processo 407050/2013-2**, que deu apoio financeiro para varias atividades do projeto e principalmente para o financiamento de uma estância curta na Universidade de Iowa (Iowa city, IA, EUA) onde foi possível utilizar a infraestrutura de laboratórios e especialmente o cluster de computadores.

A Lidianne, minha maior fortaleza e inspiração, pelo amor, paciência e companhia.

A todos meus colegas do Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída - NEST da Universidade Federal de Itajubá.

A todos meus familiares e amigos.

Resumo

CENTENO, G. F. O. (2015), *Avaliação da combustão de bagaço e palha de cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira industrial AMD a partir da modelagem por CFD*, Itajubá, 239p. **Tese** (Doutorado em Engenharia Mecânica. Conversão de Energia) - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá.

Apresenta-se um modelo CFD para avaliação da combustão de bagaço e palha de cana-de-açúcar polidispersos numa caldeira industrial. O modelo foi desenvolvido no aplicativo comercial ANSYS FLUENT e inclui funções definidas pelo usuário programadas em linguagem C para definir o fenômeno de liberação dos voláteis e também a queima do combustível na grelha da fornalha. Observou-se mediante simulação com o modelo que a devolatilização é o fenômeno que acontece na maior parte da trajetória da partícula. Já o carbono fixo é queimado principalmente na grelha ou então arrastado até a saída. Partindo dos resultados fornecidos pelo modelo foi possível também quantificar a eficiência da queima e verificar a influência de algumas variáveis como umidade do combustível, relação ar primário/ar secundário, excesso de ar e aerodinâmica do ar secundário.

Palavras-chave

Combustão de biomassa, bagaço, palha, cana-de-açúcar, CFD.

Abstract

CENTENO, G. F O. (2015), *Evaluating combustion of sugarcane bagasse and straw in a industrial boiler furnace by CFD modeling*, Itajubá, 162p. Thesis - Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, 162p.

It is presented a CFD model to evaluate the combustion of polydisperse sugarcane bagasse and straw in a industrial boiler. The model was developed in the commercial application ANSYS FLUENT and it includes user-defined functions programmed in C language defining the devolatilization phenomenon and also the burning on the grate. It was observed by simulation with the model that devolatilization is the phenomenon that happens in the largest portion of the particle trajectory. On the other hand, the char is burned on the grate mainly or entrained to the furnace outlet. Among other observations it can also be seen that the fuel moisture has a strong influence on the furnace efficiency, unlike others variables which influence on the furnace performance depends on the set of conditions. Based on the results provided by the model it was also possible to quantify the burning efficiency and the influence of some variables such as fuel moisture, primary to secondary air ratio, excess air and secondary air aerodynamics.

Keywords

Biomass combustion, bagasse, straw, sugarcane, CFD.

Sumário

AGRADECIMENTOS	I
RESUMO	III
ABSTRACT	IV
SUMÁRIO	V
LISTA DE FIGURAS	X
LISTA DE TABELAS	XIV
SIMBOLOGIA	XVI
LETRAS LATINAS	XVI
LETRAS GREGAS	XVII
SOBRESCRITOS	XVII
SUBSCRITOS	XVIII
ABREVIATURAS	XVIII
SIGLAS	XIX
CAPÍTULO 1	1
INTRODUÇÃO	1
1.1 MOTIVAÇÃO -----	1
1.2 OBJETIVOS-----	9
1.2.1 Objetivo Geral -----	9
1.2.2 Objetivos Específicos-----	9
CAPÍTULO 2	11
ESTADO DA ARTE	11
2.1 CANA-DE-AÇÚCAR-----	11

2.1.1 A planta de cana-de-açúcar -----	11
2.1.2 Produção de cana-de-açúcar -----	13
2.1.2.1 Produção de cana-de-açúcar no mundo -----	13
2.1.2.2 Produção de cana-de-açúcar no Brasil -----	13
2.2 CARACTERIZAÇÃO DOS RESÍDUOS DA CANA-DE-AÇÚCAR: BAGAÇO E PALHA -----	16
2.2.1 Composição imediata -----	16
2.2.2 Composição elementar -----	17
2.2.3 Análise térmica -----	18
2.2.4 Poder calorífico -----	19
2.2.5 Granulometria e morfologia das partículas do bagaço e da palha de cana-de-açúcar -----	19
2.3 RESÍDUOS DE CANA-DE-AÇÚCAR PARA ENERGIA -----	22
2.3.1 Vantagens -----	23
2.3.2 Limitações -----	24
2.4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DA MODELAGEM DA QUEIMA DE BAGAÇO E PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR EM FORNALHAS DE CALDEIRAS DE QUEIMA EM SUSPENSÃO -----	25
2.5 MODELANDO A DEVOLATILIZAÇÃO -----	33
2.5.1 Cinética do estado sólido -----	34
2.5.2 Método de Ozawa, Flynn e Wall -----	40
2.5.3 Dados cinéticos da devolatilização do bagaço e a palha de cana-de-açúcar -----	41
2.5.3.1 Descrição do experimento -----	41
2.5.3.2 Análise dos dados -----	42
CAPÍTULO 3 _____	45
MODELAGEM NUMÉRICA DO SISTEMA DE QUEIMA _____	45
3.1 MODELO GEOMÉTRICO -----	47
3.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL - MALHA -----	48
3.2.1 Grelha -----	50
3.2.1.1 Discretização final da grelha -----	55
3.3 MODELAGEM POR CFD -----	56
3.3.1 Modelando a fase contínua -----	57
3.3.2 Modelando a fase discreta -----	57
3.4 ESTRATÉGIA DE SOLUÇÃO DO MODELO -----	58
CAPÍTULO 4 _____	60

CASO BASE E NOTAS SOBRE A CONFIABILIDADE DO MODELO	60
4.1 SETUP E CONDIÇÕES DE CONTORNO NO CASO BASE	60
4.2 RESULTADOS DO CASO BASE	61
4.3 SOBRE A CONFIABILIDADE DO MODELO	78
CAPÍTULO 5	79
SIMULAÇÕES	79
5.1 EFEITO DA UMIDADE: SENDO CONSTANTE A ENERGIA DISPONÍVEL NO COMBUSTÍVEL	89
5.2 EFEITO DA RELAÇÃO AR PRIMÁRIO/AR SECUNDÁRIO	92
5.3 EFEITO DO EXCESSO DE AR	98
5.4 EFEITO DA CONFIGURAÇÃO AERODINÂMICA DO AR SECUNDÁRIO	101
CAPÍTULO 6	105
CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	105
6.1 CONCLUSÕES	105
6.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS	106
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	107
APÊNDICE A	119
MODELOS MATEMÁTICOS NA FORMULAÇÃO CFD	119
A.1 MODELO DE FASE CONTÍNUA	119
A.1.1 Forma geral das equações de conversão do fluido	119
A.1.1.1 Equação da conservação da massa	119
A.1.1.2 Equação de conservação do momento	120
A.1.1.3 Equação de conservação da energia	121
A.1.2 Equação de estado do gás ideal	122
A.2 TRANSPORTE DE ESPÉCIES E TAXA QUÍMICA FINITA PELO MODELO DE DISSIPACÃO por vórtices	122
A.2.1 Equações de transporte de espécies	122
A.2.2 Difusão mássica em fluxos turbulentos	123
A.2.3 Tratamento do transporte de espécies na equação da energia	123
A.2.4 Formulação da taxa finita de reação pelo modelo de dissipação por vórtices	124
A.3 TURBULÊNCIA	124
A.3.1 Modelo k- ϵ padrão	125
A.3.1.1 Visão geral	125

A.3.1.2	Equações de transporte -----	125
A.3.1.3	Modelando a viscosidade turbulenta-----	126
A.3.1.4	Constantes do modelo-----	126
A.4	RADIAÇÃO -----	126
A.4.1	Modelo de radiação por ordenadas discretas -----	127
A.4.1.1	Efeito de uma fase discreta de partículas no modelo de radiação por ordenadas discretas -----	128
A.5	MODELO DE FASE DISCRETA-----	129
A.5.1	Abordagem Euleriana-Lagrangeana -----	129
A.5.2	Teoria do movimento das partículas-----	129
A.5.2.1	Equações do movimento das partículas -----	129
A.5.2.2	Dispersão turbulenta das partículas -----	130
A.5.3	Equacionamento para coeficientes de arrasto -----	130
A.5.3.1	Equacionamento para arrasto de partículas esféricas-----	130
A.5.3.2	Equacionamento para arrasto de partículas não esféricas-----	130
A.5.4	Processos de troca de calor e massa -----	131
A.5.4.1	Processo de aquecimento inerte -----	131
A.5.4.2	Processo de secagem -----	134
A.5.4.3	Processo de volatilização-----	136
A.5.4.4	Combustão na superfície -----	138
APÊNDICE B	-----	141
CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB DO CÁLCULO DO MEIO POROSO REPRESENTANDO A GRELHA -----		141
B.1	index.m-----	141
B.2	fit_plot_presure_velocity.m-----	143
B.3	plot_presure_height.m -----	144
B.4	plot_presure_velocity.m -----	145
B.5	case_data.txt-----	147
B.6	velocity_vector.txt-----	151
B.7	height_vector.txt-----	151
APÊNDICE C	-----	156
CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB DO MÉTODO OFW -----		156
C.1	calcule_ofw.m -----	156
C.2	alpha_temperature_bagazo.txt-----	165

C.3 alpha_temperature_palha.txt-----	167
C.4 beta_bagazo.txt -----	169
C.5 beta_palha.txt -----	169
APÊNDICE D _____	170
CÓDIGO FONTE DAS UDFS PROGRAMADAS _____	170
D.5 furnace.c -----	170
D.5 auxiliar.h-----	178
APÊNDICE E _____	186
BALANÇOS NO CASO BASE GERADOS PELO ANSYS FLUENT _____	186
E.1 BALANÇO DE MASSA GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE	186
E.2 BALANÇO DE NITROGENIO GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE -----	188
E.3 BALANÇO DE ENERGIA GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE	189
APÊNDICE F _____	191
REPORTES DE ENTRADAS DO ANSYS FLUENT _____	191
F.1 AJUSTES DO SOLVER -----	191
F.2 RESUMO DE CONDIÇÕES DE CONTORNO NO CASO BASE (caso-00) -----	193

Lista de Figuras

Figura 1 – Queima em campo da cana-de-açúcar para colheita-----	5
Figura 2 – Partes da cana-de-açúcar (Hassuani <i>et al.</i> , 2005) -----	12
Figura 3 – Bagaço de cana - Fibra. (a) foto, (b) características geométricas e (c) esquema. Fonte: Sosa Arnao (2007)-----	20
Figura 4 – Bagaço de cana - Pó. (a) foto, (b) características geométricas e (c) esquema. Fonte: Sosa Arnao (2007) -----	20
Figura 5 – Esquema de aglomerado de fibras e medula. Fonte: Lenço (2010)-----	21
Figura 6 – Análise TG-DTA de uma partícula de bagaço de 710 μm . Fonte: Shanmukharadhya (2007)-----	34
Figura 7 – Métodos para estudar cinética do estado sólido. Fonte: Khawam e Flanagan (2006)-----	35
Figura 8 - Termograma e modelo da devolatilização do bagaço-----	44
Figura 9 - Termograma e modelo da devolatilização da palha -----	44
Figura 10 – Esquema da caldeira CALDEMA AMD-58-6GI -----	46
Figura 11 – Descrição da geometria da fornalha em SolidWorks-----	47
Figura 12 – Geometria da fornalha em ICFM CFD-----	48
Figura 13 – Discretização do domínio da fornalha-----	49
Figura 14 – Discretização do domínio da placa de grelha com furos -----	50
Figura 15 – Contorno de velocidade da grade isolada (Caso 3)-----	51
Figura 16 – Contornos de pressão estática da grade isolada (Caso 3)-----	52
Figura 17 – Pressão em diversos pontos ao longo de uma linha vertical que atravessa o centro do modelo da grade isolada - todos os casos-----	52
Figura 18 – Ajuste dos dados de queda de pressão a uma equação quadrática -----	53
Figura 19 – Discretização do domínio da placa de grelha com meio poroso-----	54
Figura 20 – Contornos de pressão estática da placa de grelha com meio poroso (Pa) - Caso 3-----	55
Figura 21 – Blocos no domínio da grelha na fornalha-----	56

Figura 22 – Malha da grelha na fornalha (meio poroso) -----	56
Figura 23 – Contornos de temperatura (K)-----	62
Figura 24 – Contornos de temperatura na saída (K) -----	62
Figura 25 – Contornos de dióxido de carbono (fração mássica de CO ₂)-----	63
Figura 26 – Contornos de nitrogênio (fração mássica de N ₂)-----	64
Figura 27 – Contornos de vapor d'água (fração mássica de H ₂ O) -----	64
Figura 28 – Contornos de oxigênio (fração mássica de O ₂) -----	65
Figura 29 – Vista isométrica de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O ₂) esta próxima de zero-----	66
Figura 30 – Vista frontal de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O ₂) esta próxima de zero-----	66
Figura 31 – Vista lateral de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O ₂) esta próxima de zero-----	67
Figura 32 – Vista superior de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio esta próxima de zero-----	67
Figura 33 – Contornos de fontes de massa na grelha (kg/s) -----	68
Figura 34 – Vista ampliada dos contornos de fonte de massa na grelha (kg/s) -----	68
Figura 35 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 00 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	69
Figura 36 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 01 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	70
Figura 37 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 02 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	70
Figura 38 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 03 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	71
Figura 39 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 04 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	71
Figura 40 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 05 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	72
Figura 41 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 06 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	72
Figura 42 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 07 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	73

Figura 43 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 08 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	73
Figura 44 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 09 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	74
Figura 45 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 10 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	74
Figura 46 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 11 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor -----	75
Figura 47 – Efeito da umidade do combustível sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, sendo constante a energia disponível no combustível. -----	89
Figura 48 – Contornos de temperatura casos 03 e 111 -----	90
Figura 49 – Efeito da umidade do combustível sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha, sendo constante a energia disponível no combustível. -----	90
Figura 50 – Efeito da umidade do combustível sobre as perdas por combustão química incompleta, sendo constante a energia disponível no combustível. -----	91
Figura 51 – Efeito da umidade do combustível sobre a combustão mecânica incompleta, sendo constante a energia disponível no combustível. -----	92
Figura 52 – Efeito da umidade do combustível sobre a eficiência da combustão, sendo constante a energia disponível no combustível. -----	92
Figura 53 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha.-----	93
Figura 54 – Contornos de frações mássicas de O_2 para o par de casos 03 e 07 -----	93
Figura 55 – Contornos de frações mássicas de O_2 para o par de casos 111 e 115 -----	94
Figura 56 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha -----	95
Figura 56 – Contornos de temperaturas para o par de casos 03 e 07 -----	95
Figura 56 – Contornos de temperaturas para o par de casos 01 e 05 -----	96
Figura 57 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a perda de calor por combustão química incompleta -----	97
Figura 58 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a combustão mecânica incompleta-----	97
Figura 59 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a eficiência da combustão -----	98
Figura 60 – Efeito do excesso de ar sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha. -----	99
Figura 61 – Efeito do excesso de ar sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha	99

Figura 62 – Efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão química incompleta	100
Figura 63 – Efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta-----	100
Figura 64 – Efeito do excesso de ar sobre a eficiência da combustão-----	101
Figura 65 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha.-----	102
Figura 66 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha -----	102
Figura 67 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor combustão química incompleta -----	103
Figura 68 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta -----	103
Figura 69 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a eficiência da combustão -----	104

Lista de Tabelas

Tabela 1 - Projetos sobre cogeração com bagaço de cana-de-açúcar, instalados no Brasil e registrados na UNFCCC (2012) -----	4
Tabela 2 - Composição típica dos custos diretos de investimento de uma central termelétrica a vapor (Adaptado por Lora e Nascimento (2004) de Rodríguez (1981)) -----	6
Tabela 3 – Composição média da cana-de-açúcar (colmos) (Copersucar, 2007; Abel Seabra, 2008)-----	12
Tabela 4 – Principais constituintes dos sólidos solúveis na cana-de-açúcar (colmos) (Copersucar, 2007; Abel Seabra, 2008)-----	12
Tabela 5 - Produção da cultura de cana-de-açúcar dos 20 principais produtores mundiais em 2011 em milhões de toneladas (FAO, 2013)-----	13
Tabela 6 - Produção brasileira de "commodities" alimentares e agrícolas em 2011 (FAO, 2013)-----	14
Tabela 7 - Evolução da produção da cultura de cana-de-açúcar no Brasil de 2003 a 2011 em toneladas (IBGE, 2013) -----	15
Tabela 8 - Teste de análise aproximada do bagaço -----	16
Tabela 9 - Teste de análise aproximada da palha-----	16
Tabela 10 - Análise elementar do bagaço da cana-de-açúcar-----	17
Tabela 11 - Análise elementar da palha de cana-de-açúcar-----	17
Tabela 12 – Dados da literatura da análise termogravimétrica do bagaço de cana (Lenço, 2010)-----	18
Tabela 13 - Testes de PCS do bagaço da cana-de-açúcar -----	19
Tabela 14 - Testes de PCS da palha da cana-de-açúcar -----	19
Tabela 15 - Resultados da análise granulométrica do bagaço de cana (Olivares Gómez, 1996)21	
Tabela 16 - Resultados da análise granulométrica da palha de cana após moenda (Olivares Gómez, 1996)-----	22

Tabela 17 - Resumo da formulação de modelos CFD disponíveis na literatura para queima em suspensão de combustíveis sólidos particulados -----	31
Tabela 18 - Diversos modelos de reação para cinética de estado sólido -----	36
Tabela 19 - Programa de aquecimento a 5°C/min-----	42
Tabela 20 - Programa de aquecimento a 10°C/min -----	42
Tabela 21 - Programa de aquecimento a 15°C/min -----	42
Tabela 22 - Dados cinéticos da liberação dos voláteis no bagaço da cana-de-açúcar-----	43
Tabela 23 - Dados cinéticos da liberação dos voláteis na palha da cana-de-açúcar -----	43
Tabela 24 - Algumas características da caldeira AMD-58-6GI -----	45
Tabela 25 - Casos estudados na placa de grelha-----	51
Tabela 26 - Vetor direção 1 (vetor unitário na direção dos furos) -----	53
Tabela 27 - Vetor direção 2 (perpendicular ao vetor direção 1)-----	53
Tabela 28 - Resistência viscosa $D \ 1m^2$ -----	53
Tabela 29 - Resistência inercial $D \ 1m$ -----	53
Tabela 30 - Modelos utilizados na simulação da fornalha -----	58
Tabela 31 - Composição aproximada do bagaço seco -----	61
Tabela 32 - Composição Elemental seca e livre de cinzas no bagaço simulado -----	61
Tabela 33 - Fluxos de ar e bagaço na simulação do caso base -----	61
Tabela 34 - Conteúdo das partículas por injeção no caso base -----	77
Tabela 35 - Configuração dos diversos casos simulados -----	80
Tabela 36 - Fluxos de ar para cada caso simulado -----	81
Tabela 37 - Análise dos gases de saída para as diversas simulações -----	83
Tabela 38 - Análise do conteúdo do particulado -----	86
Tabela 39 - Balanço de energia de cada um dos casos simulados -----	88

Simbologia

Letras Latinas

a_i	Fração do conteúdo total de cinzas do combustível na localização i	%
A_i	Conteúdo de cinzas na localização i	%
c_c	Calor específico do combustível	$\text{kJ/kg} \cdot ^\circ\text{C}$
C_i	Conteúdo de elementos combustíveis nos resíduos na localização i	%
h_i	Entalpia de i	kJ/kg
K^T	Quantidade de carbono condicional no combustível	%
C^T	Carbono no combustível	%
$\dot{m}_i$	Fluxo mássico de i	kg/s
Q_{at}	Calor introduzido na fornalha pelo vapor de atomização	kJ/kg
Q_d^t	Calor total introduzido ao forno	kJ/kg
Q_i	Perda de calor ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$)	kJ/kg
q_i	Perda de calor ($i = 1, 2, 3, 4, 5, 6$)	%
Q_{fc}	Calor físico ou sensível do combustível	kJ/kg
Q_{paa}	Calor introduzido à fornalha pelo ar quando pré-aquecido fora da caldeira	kJ/kg
PCI^t	Poder calorífico inferior do combustível	kJ/kg

S^T	Enxofre no combustível	%
T_i	Temperatura na localização i	°C
V_i	Volume específico	m^3/kg
x_i	Fração molar	%
Z	Coeficiente de correção	

Letras Gregas

α_{ge}	Coeficiente de excesso de ar calculado pelos gases de escape	
η_b	Rendimento bruto	%

Sobrescritos

t	Combustível de trabalho	
-----	-------------------------	--

Subscritos

<i>aa</i>	Água de alimentação
<i>af</i>	Ar ambiente
<i>arr</i>	Arraste
<i>comb</i>	Combustível
<i>e</i>	Extrações
<i>esc</i>	Escoria
<i>g</i>	Grelhas
<i>ge</i>	Gases de escape
<i>gs</i>	Gases secos
<i>nom</i>	Nominal
<i>silos</i>	Silos do feixe de convecção
<i>vs</i>	Vapor saturado
<i>vsa</i>	Vapor superaquecido

Abreviaturas

Amb.	Ambiente
------	----------

Siglas

AMD	Aquatubular, Monodrum
ASTM	<i>American Society for Testing and Materials</i>
BIG-GT	Gaseificação de biomassa integrada a um ciclo com turbina a gás
BNDES	Banco Nacional de Desenvolvimento Econômico e Social
COPERSUCAR	Cooperativa de Produtores de Cana-de-açúcar, Açúcar e Álcool do Estado de São Paulo
CFD	Dinâmica dos fluidos computacional
DPM	Modelo de fase discreta
DSC	Calorimetria diferencial de varredura
DTA	Análise térmica diferencial
EUA	Estados Unidos da América
FAO	Organização das Nações Unidas para Alimentação e Agricultura
FEM	Faculdade de Engenharia Mecânica
FG-DVC	<i>The Functional-Group, Depolymerization, Vaporization, Cross-linking model</i>
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
IEM	Instituto de Engenharia Mecânica
NEST	Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída
PCI	Poder calorífico inferior
PCS	Poder calorífico superior
PHC	<i>Pin Hole</i> Contínua
RAM	Memória de acesso aleatório
RCE	Redução Certificada de Emissão
RNG	Grupos de renormalização
SBC	Aplicativo <i>Steam Boiler Calculations</i>
SRI	<i>Sugar Research Institute</i> (Austrália)
TGA	Análise termogravimétrica
UDF	Função definida pelo usuário
UFPA	Universidade Federal do Pará
UNFCCC	Convenção-Quadro das Nações Unidas sobre a Mudança do

xx

Clima

UNICAMP

Universidade Estadual de Campinas

UNIFEI

Universidade Federal de Itajubá

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

1.1 MOTIVAÇÃO

O mundo está enfrentando sérios problemas ambientais devido às emissões de gases de efeito estufa provenientes do uso de combustíveis fósseis e ao mesmo tempo a maioria dos países em desenvolvimento está sofrendo com a falta de fontes de energia. As energias renováveis, como são os combustíveis de biomassa, podem desempenhar um papel importante na redução das emissões de gases que intensificam o efeito estufa e outros efeitos nocivos ao planeta. Particularmente, tem atraído a atenção (Beeharry, 1996; Mohee e Beeharry, 1999; Kartha *et al.*, 2000; Gabra *et al.*, 2001a; b; Siddhartha Bhatt e Rajkumar, 2001; Kadam, 2002; Mirza *et al.*, 2008) o fato de que nos principais países produtores de cana-de-açúcar no mundo (Brasil, Índia, Tailândia, Paquistão, México, Cuba, Colômbia e Filipinas) existe um grande potencial para melhorar a eficiência na conversão energética de resíduos nos processos de produção de açúcar e de etanol. Este material lignocelulósico polidisperso compõe o “bagaço”, juntamente com resíduos desta agroindústria como a palha e a lignina.

As emissões de CO₂, resultantes da queima do bagaço da cana-de-açúcar, têm grande paridade com a quantidade de CO₂ absorvida pela planta da cana-de-açúcar durante o seu crescimento. Esse fato faz o processo de cogeração quase neutro em termos de gases de efeito estufa.

Segundo De Carvalho Macedo (1992), o uso de combustíveis fósseis na produção de cana-de-açúcar é da ordem de 271 MJ/t de cana cortada. O bagaço de cana-de-açúcar e o etanol substituem a gasolina e ao óleo combustível na indústria química e de alimentos (incluindo a produção de açúcar). Podendo contribuir com a diminuição emissões de CO₂ na queima de combustíveis fósseis. Considerando o rápido ciclo de carbono na produção e uso de cana-de-açúcar, são evitadas 9,45 milhões de emissões de toneladas de carbono por ano. Isto corresponde grosseiramente a 18% do total das emissões de CO₂ provenientes da queima de combustíveis fósseis no Brasil.

No Brasil, a agroindústria da cana-de-açúcar tem adotado políticas de preservação ambiental que são exemplos para a agricultura mundial. E embora muitas vezes estas políticas não contemplem os problemas decorrentes da expansão acelerada do cultivo da cana-de-açúcar sobre vastas regiões e o prejuízo decorrente da substituição da agricultura variada de pequenas propriedades pela monocultura. A forma principal de contemplação desta forma de equilíbrio ambiental são os créditos de carbono. Já existem diversas usinas brasileiras que comercializam créditos de carbono, dada a sua eficiência ambiental.

No site da Convenção das Nações Unidas Sobre Mudança Climática (2012) (UNFCCC), e como citado por Ho (2006), encontra-se que o Brasil e a Índia são os países que alojam o maior número destes projetos registrados sobre cogeração a partir do bagaço da cana-de-açúcar. O Brasil com 21 projetos, estimando-se um total de 395612 RCEs/ano (uma Redução Certificada de Emissão (RCE) é equivalente a uma tonelada métrica de dióxido de carbono) e a Índia com 20 projetos, estimando-se um total de 970137 RCEs/ano. Estes dados também fornecem uma idéia do potencial que ainda pode ter o Brasil na redução de emissões de CO₂ a partir de projetos de cogeração com bagaço de cana-de-açúcar. Deve ser levado em conta também que a produção de cana-de-açúcar no Brasil é quase três vezes a produção indiana. Estes projetos concedem créditos de carbono, e estes podem ser vendidos em mercados de carbono em todo o mundo.

A Tabela 1 mostra os projetos registrados no Brasil, organizados por RCE decrescente, junto com as respectivas RCEs, data de registro e referência UNFCCC (Convenção das Nações Unidas sobre mudança climática) para que possa ser achado facilmente caso se deseje ampliar a informação.

Existem várias rotas de aproveitamento energético do bagaço de cana-de-açúcar, as quais podem ser:

1. Queima direta em fornalha de caldeira para cogeração: energia térmica (vapor) e energia elétrica a partir de ciclo Rankine;

2. Gaseificação para conversão da biomassa em energia elétrica em um ciclo combinado de turbina a gás (BIG-GT);
3. Produção de etanol de segunda geração por meio da hidrólise da celulose seguida de fermentação;
4. Gaseificação associada a um processo Fischer-Tropsch para produção de bicomcombustíveis de segunda geração.

Salvo a primeira rota mencionada (queima direta) as outras três rotas encontram-se ainda em desenvolvimento.

Alguns estudos (Botha e Von Blottnitz, 2006; Chauhan *et al.*, 2011) têm demonstrado mediante análise de ciclo de vida, que todas as rotas de aproveitamento mencionadas acima resultam em benefícios ambientais. Também, muitos autores (Beeharry, 1996; Kaltschmitt *et al.*, 1997; Schlamadinger *et al.*, 1997; Brentrup *et al.*, 2001; Botha e Von Blottnitz, 2006; Boog *et al.*, 2008; Kiatkittipong *et al.*, 2009; Chauhan *et al.*, 2011; Dantas *et al.*, 2013) concluem mediante análise técnico-econômica que a melhor opção para o aproveitamento do bagaço de cana-de-açúcar continua sendo a opção de queima direta para produção de vapor e eletricidade em geração por ciclo Rankine.

Tabela 1 - Projetos sobre cogeração com bagaço de cana-de-açúcar, instalados no Brasil e registrados na UNFCCC (2012)

Data de registro	Titulo	RECs/ano	Ref. UNFCCC
6-mar-06	<i>Zillo Lorenzetti Bagasse Cogeneration Project (ZLBC)</i>	53774	202
20-fev-06	<i>Santa Elisa Bagasse Cogeneration Project (SEBCP)</i>	45801	178
3-mar-06	<i>Cerradinho Bagasse Cogeneration Project (CBCP)</i>	34742	203
9-mar-06	<i>Equipav Bagasse Cogeneration Project (EBCP)</i>	31821	205
3-mar-06	<i>Southeast Caeté Mills Bagasse Cogeneration Project (SECMBCP)</i>	30326	206
3-mar-06	<i>Colombo Bagasse Cogeneration Project (CBCP)</i>	28018	180
3-mar-06	<i>Vale do Rosário Bagasse Cogeneration (VRBC)</i>	25277	199
3-mar-06	<i>Coinbra-Cresciumal Bagasse Cogeneration Project (CCBCP)</i>	17481	215
3-mar-06	<i>Lucélia Bagasse Cogeneration Project (LBCP)</i>	14362	43
9-mar-06	<i>Moema Bagasse Cogeneration Project (MBCP)</i>	13139	190
4-mar-06	<i>Iturama Bagasse Cogeneration Project (IBCP)</i>	12841	212
20-fev-06	<i>Nova América Bagasse Cogeneration Project (NABCP)</i>	12027	179
20-fev-06	<i>Alta Mogiana Bagasse Cogeneration Project (AMBCP)</i>	12024	181
24-fev-06	<i>Santa Cândida Bagasse Cogeneration Project (SCBCP)</i>	10604	65
3-mar-06	<i>Campo Florido Bagasse Cogeneration Project (CFBCP)</i>	10175	208
6-mar-06	<i>Cruz Alta Bagasse Cogeneration Project (CABCP)</i>	10061	216
4-mar-06	<i>Alto Alegre Bagasse Cogeneration Project (AABCP)</i>	9674	207
3-mar-06	<i>Jalles Machado Bagasse Cogeneration Project (JMBCP)</i>	8955	187
3-mar-06	<i>Serra Bagasse Cogeneration Project (SBCP)</i>	6644	213
3-mar-06	<i>Coruripe Bagasse Cogeneration Project (CBCP)</i>	5784	185
28-ago-06	<i>Cucaú Bagasse Cogeneration Project (CBCP)</i>	2082	485

Queimar o bagaço numa caldeira para geração de vapor e eletricidade em ciclo Rankine não é apenas uma opção, mas uma necessidade, visto que geralmente tanto o vapor quanto a energia elétrica produzida são utilizados para suprir os requerimentos energéticos nos processos da usina sucroalcooleira. Então o bagaço disponível para conversão em biocombustível (etanol de segunda geração) ou gás combustível (opções 2, 3 e 4) compete diretamente com o uso para produção de energia, a partir da queima na caldeira.

Com a recente tendência para a diversificação na indústria da cana-de-açúcar, um crescente número de usinas está manufacturando um ou mais subprodutos principalmente

açúcar, álcool e melão. Numa usina com vários produtos, cada um dos quais requer certa quantidade de energia (vapor e eletricidade obtidos a partir do bagaço) para ser produzido; a eficiência energética (durante ambos os processos, na conversão do bagaço em energia útil e na utilização desta energia dentro da usina) pode chegar a ser muito mais importante.

Mesmo após suprir os requerimentos energéticos nos processos da usina, dependendo da eficiência do processo e da tecnologia utilizada, pode-se ter eletricidade excedente para ser disponibilizada para vendê-la para a rede (Bridgwater *et al.*, 2002; Ghosh *et al.*, 2002; Erlich *et al.*, 2005; Omer, 2005; Dantas *et al.*, 2013) ou então sobrar bagaço para ser utilizado na produção de etanol de segunda geração. Esta possibilidade incrementa o interesse em melhorar a eficiência das tecnologias utilizadas para produção de vapor e eletricidade (Hofsetz e Silva, 2012). Várias pesquisas (Beeharry, 1996; Siddhartha Bhatt e Rajkumar, 2001) têm previsto que, através de modificações para melhorar a eficiência energética das usinas existentes, a quantidade de bagaço disponível para a geração de eletricidade ou como matéria prima pode ser significativamente aumentada. Além disso, eliminando a prática da queima em campo em algumas usinas onde ainda prevalece, uma fração da palhada (o resíduo do processo de colheita, que inclui a palha e as pontas da cana) poderia ser levada à usina para a queima em fornalha. Isto permitiria dispor de uma ainda maior quantidade de biomassa como combustível ou matéria-prima, como já mostrado por alguns estudos (Botha e Von Blottnitz, 2006; Seabra *et al.*, 2010; Dias, Cunha, *et al.*, 2011). A Figura 1 ilustra a queima em campo da cana-de-açúcar.



Figura 1 – Queima em campo da cana-de-açúcar para colheita

No passado, as usinas no Brasil utilizavam caldeiras e turbinas de baixa pressão (Ogden, J. M. *et al.*, 1990; Dias, Modesto, *et al.*, 2011). Basicamente, isto representava um uso ineficiente do bagaço, devido a não regulamentação do setor elétrico, o que não permitia a

venda de eletricidade excedente. Então o propósito era maximizar a quantidade de bagaço queimado para evitar problemas com a necessidade de armazenamento ou, com a sua disponibilização final (Ogden, J. *et al.*, 1990; Dantas *et al.*, 2013). Na década de 90, quando a maioria das usinas trabalhava com caldeiras de baixa pressão (~22 bar), o aumento da produção (e consequentemente da capacidade do moinho) levou a uma situação de operação perto da capacidade nominal destas (Ensinas *et al.*, 2007; Dias, Cunha, *et al.*, 2011), tornando difícil a geração de energia a partir do bagaço excedente, surgindo a necessidade de investimentos em novos sistemas de geração, particularmente, novas caldeiras as quais são o bem de capital mais caro do processo como apontado por Lora e Nascimento (2004).

Uma radiografia dos custos envolvidos na construção de uma planta para geração de vapor (Tabela 2) mostra a forte incidência da caldeira sobre o custo para a modificação da planta.

Tabela 2 - Composição típica dos custos diretos de investimento de uma central termelétrica a vapor (Adaptado por Lora e Nascimento (2004) de Rodríguez (1981))

Item de custo	Participação
Equipamentos eletromecânicos	60%
Planta da caldeira	27%
Planta da turbina	21%
Tubulação e acessórios	6%
Subestação	3%
Outros equipamentos	3%
Montagem dos equipamentos	12%
Construção	21%
Obras civis	15%
Circuito de água	6%
Outros custos	7%
Terreno, benfeitorias	3%
Projeto, organização	4%

Em anos recentes, usinas sucroalcooleiras brasileiras têm investido em turbinas com caldeiras de média pressão (40-120 bar), o que tem permitido a geração de eletricidade excedente (Dias, Cunha, *et al.*, 2011). Mas, com o incremento da demanda por etanol e açúcar, espera-se para um futuro próximo, que as usinas empreguem processos de mais “alta tecnologia” os quais ajudem a aumentar a sua capacidade, e preferencialmente cujos fornecedores sejam fabricantes da indústria nacional (Energética, 2008; Hofsetz e Silva, 2012). O termo “alta tecnologia” neste caso refere-se a processos empregando caldeiras de alta pressão (150-180 bar), com câmaras de combustão onde o bagaço é queimado em suspensão, associadas a turbinas, trocadores de calor, pré-aquecedores, evaporadores,

superaquecedores e reaquecedores de elevada eficiência (Seabra *et al.*, 2010; Seabra e Macedo, 2011; Dantas *et al.*, 2013).

Na atualidade, todos os novos projetos de usinas sucroalcooleiras (ou reformas de velhos projetos) incluem investimentos em plantas de cogeração para geração de eletricidade excedente.

Sendo Brasil o país líder na produção de cana-de-açúcar no mundo (Hofsetz e Silva, 2012; Fao, 2013), juntamente com a consequente necessidade de melhora na tecnologia de processamento, e mais precisamente de caldeiras de alta temperatura-pressão, espera-se que a indústria nacional de fabricação destes equipamentos também adote as últimas tecnologias para o projeto eficiente de caldeiras de queima de bagaço, além de projetar equipamentos capazes de queimar eficientemente outros resíduos da indústria canavieira tais como a palha que sobra da colheita e a lignina residual da produção de etanol lignocelulósico. A palha de cana-de-açúcar, objeto de estudo neste trabalho, não é uma biomassa tradicionalmente usada para queima em fornalha podendo apresentar uma série de dificuldades durante o processo.

Como indicado por Sosa Arnao (2007), a abordagem mais apropriada para projeto de caldeiras eficientes de queima de biomassa é baseado no aprendizado experimental somado à aplicação da dinâmica de fluidos computacional (CFD). Esta técnica vem se afirmando como uma nova ferramenta que pode ser aplicada em análises de otimização de caldeiras, de forma geral e não somente para a queima de bagaço e outros resíduos do processamento da cana-de-açúcar.

De acordo com Sosa Arnao (2007), fabricantes de caldeiras sobretudo no Brasil, empregam aplicativos computacionais baseados em métodos semi-empíricos, dedicados e específicos ao desenvolvimento de projeto de caldeiras, tal como o “*Steam Boiler Calculations* - SBC” (Silva Lora e Paramonov, 2003) desenvolvido no Brasil. Outros trabalhos realizados no país (Reinaldo, 2004; Mendes, 2010; Mendes e Bazzo, 2012) utilizam técnicas numéricas e software CFD para estudar a deposição de cinzas em tubos de caldeiras de carvão pulverizado.

A indústria nacional atualmente projeta as caldeiras com métodos baseados no empirismo, os quais são limitados para otimizações de projetos, obrigando a importação de projetos não nacionais. Outra opção é o investimento na realização de testes experimentais de alto custo. Isto pode ser evitado ou reduzido com o emprego da dinâmica de fluidos computacional.

O principal problema a ser otimizado em sistemas e geradores de vapor é centrado no processo de geração e transferência de calor. Isto em função de várias razões:

- Aerodinâmica inadequada da fornalha (Distribuição de ar em primário e secundário, distribuição dos níveis dos bocais de injeção);
- Mudanças nas características do combustível, por exemplo: granulometria e teor de umidade;
- Distribuição inadequada entre a fração do combustível queimada em suspensão e a fração queimada na grelha.

Estes itens não podem ser analisados e melhorados com as metodologias semi-empíricas comumente utilizadas para o projeto das fornalhas de caldeiras. Contudo, a dinâmica de fluidos computacional permitiria uma análise localizada dos problemas.

Os desenvolvimentos do CFD sobre queima de combustível sólido polidisperso, tradicionalmente têm sido focado no uso de carvão pulverizado, o qual é um combustível amplamente utilizado em caldeiras. Porém, este apresenta relevantes diferenças com relação ao emprego de biomassa, particularmente de resíduos do processamento da cana-de-açúcar (bagaço e palha), por serem mais polidispersos e polimorfos, além das possíveis aglomerações formadas. Isto torna necessário o desenvolvimento de novos modelos, com especial atenção às características e aos limites dos modelos já existentes. Por exemplo, o fato de a biomassa ser um combustível com alto teor de voláteis, composto por partículas de forma e granulometria variada, com um processo de combustão o qual ocorre parcialmente em suspensão na fornalha e parte numa camada sobre a grelha, justifica o emprego do CFD para esta análise.

Já no caso de existir a necessidade de se estudar a viabilidade técnica de uso de outras biomassas que não têm sido tradicionalmente usadas para queima em fornalha de caldeira, por exemplo, palha de cana; o CFD se apresenta como uma ferramenta útil. Isto poderia evitar ou reduzir um grande número de testes experimentais, ajudando na previsão do comportamento do processo de combustão.

Neste ponto é importante destacar que existem dois fatores fundamentais que historicamente tem impedido, principalmente à indústria nacional, utilizar o CFD como ferramenta para o projeto de caldeiras eficientes: Os modelos matemáticos necessários para esse tipo de simulações estão em constante evolução, então, o uso de CFD para projetar e/ou analisar caldeiras de bagaço demanda a contratação de pessoal altamente qualificado na utilização desta ferramenta, muitas vezes não existe disponibilidade ou estão representados em consultorias de custo elevado e com pouca ou nula experiência no tema específico. O segundo é o fato de que o tamanho das caldeiras para queima de bagaço implica um grande

domínio computacional a ser abordado pelo CFD, então é requerido também investimento em "cluster" de computadores de alto desempenho, o qual normalmente também se traduz em licenças específicas de software e custos elevados.

1.2 OBJETIVOS

1.2.1 Objetivo Geral

- Modelagem numérica CFD dos processos de combustão de bagaço e palha de cana-de-açúcar numa fornalha industrial, visando determinar as perdas por combustão química incompleta, combustão mecânica incompleta assim como a distribuição de temperaturas e espécies.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Determinar mediante processamento de dados de análise termogravimétrica os parâmetros cinéticos que caracterizam o processo de devolatilização nas partículas de bagaço e palha de cana-de-açúcar;
- Propor e solucionar modelo numérico CFD da fornalha, incluindo combustão em suspensão no volume da fornalha, combustão no leito da grelha e a interação entre eles;
- Utilizar o modelo proposto para simular as condições de operação nominais fornecidas pelo fabricante da caldeira visando verificar a confiabilidade das previsões do mesmo;
- Utilizar o modelo proposto para simular diversos casos visando determinar a influência de algumas variáveis (umidade do combustível, relação ar primário/ar secundário, excesso de ar e orientação aerodinâmica do ar secundário) sobre o aumento ou diminuição da eficiência da queima.

1.3 CONTEÚDO

O capítulo 1 apresenta uma introdução ao tema, apresentando a motivação para o mesmo e finalmente definindo o objetivo geral da pesquisa e os respectivos objetivos específicos.

O capítulo 2 apresenta o estado da arte, começando pela produção da cana-de-açúcar no Brasil e no mundo, a caracterização dos seus resíduos bagaço e palha com o qual se obtém dados de entrada muito importantes na simulação, algumas observações sobre o uso destes resíduos para energia. Na parte final deste capítulo se apresenta a revisão bibliográfica da modelagem CFD da combustão de combustíveis particulados em suspensão, com o intuito de identificar deficiências que os modelos disponíveis apresentam, identificando assim ao modelo de devolatilização e a modelagem da queima em grelha como deficiências a serem enfrentadas. Finalmente o capítulo termina com o estado da arte sobre como modelar a devolatilização.

O capítulo 3 apresenta uma descrição da modelagem numérica do sistema, incluindo modelo geométrico, discretização espacial, modelos no CFD e concluindo com a estratégia de solução do modelo.

O capítulo 4 corresponde à simulação do caso base, no qual é utilizado o modelo para simular as condições de operação nominais da caldeira fornecidas pelo fabricante, neste também são usados alguns dados para verificar os resultados da simulação e finalmente conclui com algumas observações sobre a confiabilidade do modelo.

No capítulo 5 são apresentados resultados das simulações do modelo e apresentadas discussões com base nas simulações

O capítulo 6 finalmente apresenta as conclusões e recomendações para trabalhos futuros.

Capítulo 2

ESTADO DA ARTE

2.1 CANA-DE-AÇÚCAR

2.1.1 A planta de cana-de-açúcar

A cana-de-açúcar é uma planta que pertence ao gênero *Saccharum*, que apresenta maior desenvolvimento em regiões de clima com duas estações distintas: uma quente e úmida e outra fria e seca (Alves, 2011). A planta de cana-de-açúcar é composta essencialmente pelos colmos (nos quais se concentra a sacarose), pelas pontas e folhas (que conformam a palha de cana) e pelas raízes, no subsolo (Abel Seabra, 2008; Banco Nacional De Desenvolvimento Econômico E e Centro De Gestão E Estudos, 2008) como mostrado na Figura 2.

Como a sacarose é a matéria-prima tanto do açúcar, quanto do álcool, seu teor é o principal critério para a determinação da qualidade da variedade de cana-de-açúcar. Na Tabela 3 se mostra a composição média dos colmos da cana-de-açúcar, e na Tabela 4 seus principais constituintes.

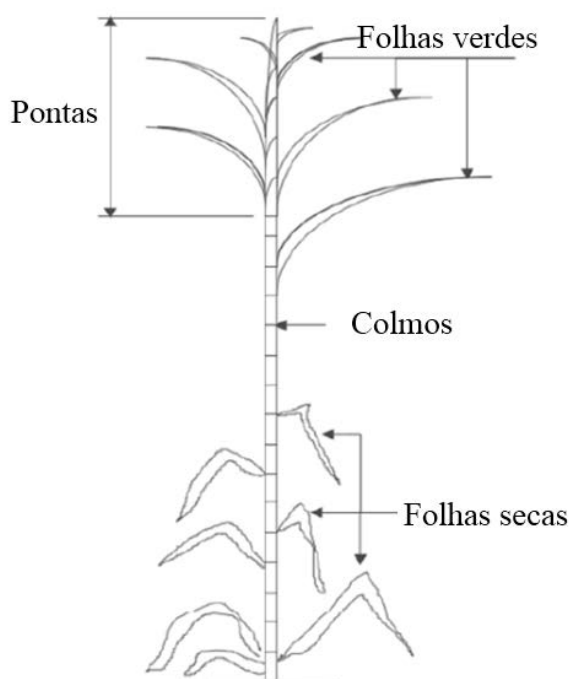


Figura 2 – Partes da cana-de-açúcar (Hassuani *et al.*, 2005)

Tabela 3 – Composição média da cana-de-açúcar (colmos) (Copersucar, 2007; Abel Seabra, 2008)

Componente	Teor (%)
Água	65 - 75
Açúcares	11 - 18
Fibras	8 - 14
Sólidos solúveis*	12 - 23
*Sólidos solúveis incluem os açúcares	

Tabela 4 – Principais constituintes dos sólidos solúveis na cana-de-açúcar (colmos) (Copersucar, 2007; Abel Seabra, 2008)

Constituinte	Sólidos solúveis (%)
Açúcares	75 - 93
Sacarose	70 - 91
Glicose	2 - 4
Frutose	2 - 4
Sais	3 - 5
De ácidos inorgânico	1,5 - 4,5
De ácidos orgânicos	1,0 - 3,0
Proteínas	0,5 - 0,6
Amido	0,001 - 0,05
Gomas	0,3 - 0,6
Ceras e graxas	0,05 - 0,15
Corantes	3 - 5

2.1.2 Produção de cana-de-açúcar

2.1.2.1 Produção de cana-de-açúcar no mundo

A Tabela 5 mostra os países com maior produção de cana-de-açúcar, ordenados por produção decrescente. Nela é possível observar o Brasil como maior produtor dobrado a produção do segundo maior produtor que é a Índia.

Tabela 5 - Produção da cultura de cana-de-açúcar dos 20 principais produtores mundiais em 2011 em milhões de toneladas (FAO, 2013)

Ranque	Área	Produção (t)	Obs.
1	Brasil	734.006.059	
2	Índia	342.382.000	
3	China	115.123.560	
4	China continental	114.435.000	
5	Tailândia	95.950.416	
6	Paquistão	55.308.500	
7	México	49.735.273	
8	Filipinas	30.000.000	F
9	Estados Unidos da América	26.655.810	
10	Austrália	25.181.814	
11	Argentina	25.000.000	F
12	Indonésia	24.000.000	F
13	Colômbia	22.728.757	
14	Guatemala	20.586.052	
15	Vietnam	17.539.572	
16	África do sul	16.800.000	
17	Cuba	15.800.000	
18	Egito	15.765.213	
19	El Salvador	9.898.968	
20	Peru	9.884.936	
[]: Dado oficial F: Estimado da FAO			

2.1.2.2 Produção de cana-de-açúcar no Brasil

Segundo a FAO (2013), o Brasil é hoje o principal produtor de cana-de-açúcar do mundo. Esta é amplamente utilizada na produção de açúcar, álcool combustível e mais recentemente, biodiesel. A FAO relata que, em 2010, o valor da produção brasileira foi de

aproximadamente 23 bilhões de dólares, seguido da produção indiana, superior a oito bilhões de dólares.

De acordo com dados da FAO (2013) a cana-de-açúcar é o maior "commodity" brasileiro entre produtos agrícolas e alimentos como pode ser observado na Tabela 6. Pode ser visto na Tabela 7 a evolução da produção da cultura de cana-de-açúcar no Brasil de 2003 a 2011 segundo o IBGE (2013).

Tabela 6 - Produção brasileira de "commodities" alimentares e agrícolas em 2011 (FAO, 2013)

Ranque	Commodity	Produção (t)	Observação
1	Cana-de-açúcar	734.006.059	
2	Soja	74.815.447	
3	Milho	55.660.415	
4	Leite de vaca, inteira, fresca	32.096.214	
5	Mandioca	25.349.088	
6	Laranjas	19.811.064	
7	Arroz	13.476.994	
8	Carne de frango	11.476.290	F
9	Carne de gado	9.120.456	Fc
10	Bananas	7.329.471	
11	Trigo	5.690.043	
12	Tomates	4.416.652	
13	Batatas	3.917.234	
14	Feijão, seco	3.435.366	
15	Carne suína	3.369.145	Fc
16	Sementes de algodão	3.194.552	F
17	Coco	2.943.651	
18	Vegetais frescos	2.829.816	Im
19	Café verde	2.700.440	
20	Abacaxi	2.365.458	

[]: Dado oficial

F : Estimado da FAO

Fc: Dado Calculado

Im: Dados da FAO com base na metodologia de imputação

Tabela 7 - Evolução da produção da cultura de cana-de-açúcar no Brasil de 2003 a 2011 em toneladas (IBGE, 2013)

	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2011 (%)
Brasil	396.012.158	415.205.835	422.956.646	477.410.655	549.707.314	645.300.182	691.606.147	717.463.793	734.006.059	100,00
São Paulo	227.980.860	239.527.890	254.809.756	289.299.376	329.095.578	386.061.274	408.451.088	426.572.099	427.364.854	58,22
Minas Gerais	20.787.483	24.331.841	25.386.038	32.212.574	38.741.094	47.914.898	58.384.105	60.603.247	67.732.138	9,23
Goiás	12.907.592	14.001.079	15.642.125	19.049.550	22.387.847	33.112.209	43.666.585	48.000.163	54.903.085	7,48
Paraná	31.925.805	32.642.730	29.717.100	33.917.335	45.887.548	51.244.227	53.831.791	48.361.207	44.907.862	6,12
Mato Grosso do Sul	9.030.833	9.572.305	9.513.818	12.011.538	15.839.993	21.362.034	25.228.392	34.795.664	34.876.698	4,75
Alagoas	27.220.770	26.283.941	23.723.803	23.497.027	24.993.144	29.220.000	26.804.130	24.352.340	29.257.108	3,99
Pernambuco	18.522.067	19.015.069	17.115.218	17.595.676	19.637.061	20.359.720	19.445.241	19.704.071	19.332.281	2,63
Mato Grosso	14.667.046	14.290.810	12.595.990	13.552.228	15.000.313	15.850.786	16.209.589	14.564.724	14.050.998	1,91
Bahia	4.751.958	4.943.535	5.592.921	6.150.367	6.279.183	5.689.329	4.630.196	5.868.709	6.992.412	0,95
Paraíba	6.074.074	6.364.312	4.975.797	6.059.030	6.222.223	6.297.179	6.302.570	5.646.151	6.417.385	0,87
Rio de Janeiro	7.234.790	8.653.494	7.554.495	6.835.315	5.965.446	6.582.623	6.481.715	6.394.477	5.137.700	0,70
Espírito Santo	3.785.579	4.079.805	4.240.922	4.206.342	4.436.412	5.176.445	5.249.775	5.314.685	4.682.285	0,64
Rio Grande do Norte	3.153.139	3.257.293	3.286.428	3.391.184	3.836.626	4.105.299	4.259.996	3.962.017	3.581.848	0,49
Sergipe	1.449.316	1.696.508	1.777.372	1.924.975	2.401.966	2.429.603	2.607.155	2.994.819	3.336.034	0,45
Maranhão	1.703.087	1.652.422	1.968.414	2.306.456	2.440.358	3.005.774	2.824.701	3.176.531	2.673.211	0,36
Ceará	1.742.801	1.762.197	1.787.126	1.617.003	2.251.239	2.270.816	2.323.937	2.306.004	2.209.852	0,30
Tocantins	156.815	160.096	161.873	193.390	202.620	392.071	664.284	715.317	2.164.861	0,29
Rio Grande do Sul	1.136.114	1.025.756	908.930	1.166.717	1.426.978	1.431.081	1.254.475	1.504.692	1.384.967	0,19
Piauí	475.868	524.080	647.675	640.707	779.482	778.084	859.513	779.084	981.605	0,13
Pará	367.583	504.225	505.348	618.316	677.844	574.660	698.845	668.738	715.152	0,10
Santa Catarina	648.989	603.495	601.869	660.333	734.562	756.803	699.068	422.014	532.656	0,07
Amazonas	227.685	235.431	340.027	349.847	343.302	365.983	368.050	341.186	302.895	0,04
Rondônia	24.808	29.651	49.228	86.870	55.302	207.438	253.277	233.527	218.975	0,03
Acre	18.409	22.977	25.690	35.248	37.138	52.609	38.650	107.251	179.044	0,02
Distrito Federal	15.550	21.436	25.638	29.756	30.335	54.661	66.248	69.475	65.342	0,01
Amapá	2.000	2.201	1.755	2.205	2.430	3.200	1.395	4.146	3.428	0,00
Roraima	1.137	1.256	1.290	1.290	1.290	1.376	1.376	1.455	1.383	0,00

2.2 CARACTERIZAÇÃO DOS RESÍDUOS DA CANA-DE-AÇÚCAR: BAGAÇO E PALHA

Qualquer tipo de trabalho científico-tecnológico envolvendo instalações de conversão termoquímica deve partir da caracterização físico-química da matéria prima já que estes dados são de essencial importância durante os cálculos e a operação dos sistemas analisados.

Como apontado por Olivares Gómez (1996), a determinação das propriedades termoquímicas do material combustível, como composição elementar, composição imediata e poder calorífico, permitem conhecer a qualidade do combustível utilizado e constituem a base dos cálculos térmicos dos equipamentos energéticos em geral.

2.2.1 Composição imediata

A análise da composição imediata de um combustível oferece as frações em peso de umidade, voláteis, cinzas e carbono fixo de uma amostra de combustível.

Para efeitos de cálculo no presente trabalho, a composição imediata das biomassa utilizadas foi determinada experimentalmente nos laboratórios do NEST/UNIFEI. Na Tabela 8 podem ser observados os cinco testes de análise aproximada aplicados às amostra de bagaço e na Tabela 9 os cinco testes aplicados às amostras de palha.

Tabela 8 - Teste de análise aproximada do bagaço

Teste	Umidade (%)	Voláteis (%)	Carbono fixo (%)	Cinzas (%)
1	9,80	73,77	14,87	1,56
2	9,87	73,25	15,16	1,72
3	9,86	73,67	14,98	1,50
4	9,81	73,78	14,73	1,65
5	9,80	74,13	14,56	1,51

Tabela 9 - Teste de análise aproximada da palha

Teste	Umidade (%)	Voláteis (%)	Carbono fixo (%)	Cinzas (%)
1	11,15	70,49	15,29	3,07
2	11,15	70,19	15,32	3,33
3	11,19	70,04	15,14	3,63
4	11,17	69,69	15,69	3,45
5	11,19	69,88	15,37	3,56

É importante observar que as condições de umidade das amostras nestes casos não correspondem com as condições de operação da caldeira, estes testes visam somente determinar o conteúdo seco, nas simulações a composição aproximada umida será recalculada baseado na condição de umidade simulada em cada caso.

2.2.2 Composição elementar

A análise elementar fornece as porcentagens em massa de cada um dos elementos presentes na amostra, para biomassa normalmente inclui carbono (C), hidrogênio (H), enxofre (S), oxigênio (O) e nitrogênio (N) e cloro (Cl). Segundo destacado por Cortez *et al.* (2008), a composição elementar é a característica técnica mais importante do combustível e constitui a base para análise dos processos de combustão.

Para efeitos de cálculo no presente trabalho, a composição elementar das biomassa utilizadas foi determinada experimentalmente nos laboratórios do NEST/UNIFEI. Na Tabela 10 podem ser observado os três testes de análise elementar aplicados às amostras de bagaço e na Tabela 11 podem ser observados os três testes aplicados às amostras de palha.

Tabela 10 - Análise elementar do bagaço da cana-de-açúcar

Teste	C (%)	H (%)	N (%)	S (%)	O (%)
1	44,73	6,12	6,66	2,17	40,32
2	42,50	6,30	6,90	2,19	42,11
3	42,84	6,43	9,28	2,17	39,28

Tabela 11 - Análise elementar da palha de cana-de-açúcar

Teste	C (%)	H (%)	N (%)	S (%)	O (%)
1	42,87	6,20	2,88	2,15	45,90
2	41,76	6,11	2,18	2,11	47,84
3	42,53	6,15	1,81	2,18	47,25

É importante observar que estes testes mostram o conteúdo elementar seco e livre de cinzas.

2.2.3 Análise térmica

A análise térmica engloba um conjunto de técnicas analíticas que estudam o comportamento dos materiais durante processos termoquímicos. As análises térmicas seguem uma propriedade da amostra do material, numa determinada atmosfera, em função do tempo ou da temperatura, quando dita amostra é submetida a um programa de temperatura controlado. O programa de temperatura pode ser esquentar ou esfriar a amostra a uma determinada velocidade, ou manter a temperatura constante, ou uma combinação das duas.

Os efeitos do calor podem ser vários, produzindo mudanças em muitas propriedades da amostra. Assim por exemplo, na análise termogravimétrica (TGA) mudanças de peso configuram a base, enquanto que na análise térmica diferencial (DTA) e na calorimetria diferencial de varredura (DSC) as medidas de mudanças de energia constituem a base.

A Tabela 12 apresenta dados de análise termogravimétrica do bagaço de cana-de-açúcar recopilados por Lenço (2010). Observa-se que existe diferença na apresentação de resultados pelos diversos autores.

Tabela 12 – Dados da literatura da análise termogravimétrica do bagaço de cana (Lenço, 2010)

Referência	Meio usado	Massa usada (mg)	Taxa de aquecimento (°C/min)	Temperatura (°C)							
				Evaporação de H ₂ O				Volatilização		Descarbonização	
				Primeira perda		Segunda perda					
				Início	Final	Início	Final	Início	Final	Início	Final
Nassar <i>et al.</i> (1996)	O ₂	18	5	Amb ¹	>100	125	200	225	347,5	400	455
	N ₂	18	5	Amb ¹	>100	125	200	225	350	380	560
Sosa Arnao (2007)	O ₂	1 a 2	10	Amb ¹	>100	110	200	200	420	350	700
	N ₂	1 a 2	10	Amb ¹	>100	110	210	210	380	380	1200
García-Pérez <i>et al.</i> (2001)	N ₂	4	10	Seca ²		100	199	199	373	373	600
	N ₂	4	20	Seca ²		100	207	207	385	385	600
	N ₂	4	30	Seca ²		100	215	215	407	407	600
	N ₂	4	40	Seca ²		100	215	215	414	414	600
Resende (2003)	N ₂	10	5	25	>100	100	215	215	400	400	800
	N ₂	10	10	25	>100	100	220	220	425	425	800
	N ₂	10	15	25	>100	100	220	220	480	480	800
	N ₂	10	20	25	>100	100	240	240	460	460	800

¹Amb. = Temperatura ambiente
²Seca = Amostra seca

¹Amb. = Temperatura ambiente

²Seca = Amostra seca

2.2.4 Poder calorífico

O poder calorífico do combustível representa a quantidade de energia por unidade de massa que é liberado na sua combustão.

Distingue-se entre duas formas de considerar o poder calorífico, o Poder Calorífico Superior (PCS) que equivale à energia liberada em forma de calor na combustão completa de uma unidade mássica de combustível quando o vapor d'água originada durante a combustão é condensado, ou seja, a soma da energia liberada na forma de calor mais a energia gasta na evaporação d'água formada na oxidação; e o Poder Calorífico Inferior (PCI) que representa somente a energia liberada em forma de calor, ou seja, assumindo água produto da combustão como sendo vapor.

Para efeitos de cálculo no presente trabalho, o poder calorífico superior das biomassa utilizadas foi determinada experimentalmente nos laboratórios do NEST/UNIFEI. Na Tabela 13 podem ser vistos os três testes praticados às amostras de bagaço e na Tabela 14 podem ser vistos os três testes praticados às amostras de palha.

Tabela 13 - Testes de PCS do bagaço da cana-de-açúcar

Teste	PCS (MJ/kg)	Umidade (%)
1	15.641	9,8
2	15.546	9,8
3	15.667	9,8

Tabela 14 - Testes de PCS da palha da cana-de-açúcar

Teste	PCS (MJ/kg)	Umidade (%)
1	15.182	11,15
2	15.234	11,15
3	15.190	11,15

É importante observar que o poder calorífico superior depende da umidade da biomassa e é preciso ser recalculado baseado nos requerimentos de umidade de cada caso sendo simulado.

2.2.5 Granulometria e morfologia das partículas do bagaço e da palha de cana-de-açúcar

A caracterização da morfologia das partículas de bagaço e palha é muito importante para a modelagem CFD, visto que normalmente os modelos de combustão de partículas em

CFD foram originalmente desenvolvidos para carvão pulverizado, e diferente deste, parte do bagaço e da palha de cana-de-açúcar apresentam um formato não tão próximo de uma esfera. Isto faz com que seja necessário colocar especial atenção na morfologia e desenvolver modelos particulares de coeficiente de arrasto, diferente a aqueles normalmente utilizados com partículas de carvão pulverizado.

Vários autores (Meirelles, 1984; Nebra, 1985; Barbosa, 1992; Corrêa, 2003; Sosa Arnao, 2007) têm registrado que independente do processo utilizado na extração do caldo (moenda ou difusor) observa-se dois grupos muito bem diferenciados numa amostra de bagaço de cana-de-açúcar, isto é, partículas maiores comumente denominadas fibras e partículas menores denominadas medula ou pó, como se pode ver na Figura 3 e na Figura 4.



Figura 3 – Bagaço de cana - Fibra. (a) foto, (b) características geométricas e (c) esquema. Fonte: Sosa Arnao (2007)

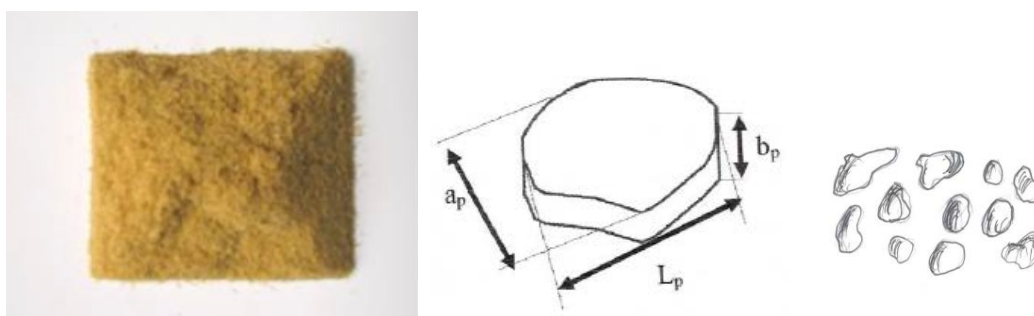


Figura 4 – Bagaço de cana - Pó. (a) foto, (b) características geométricas e (c) esquema. Fonte: Sosa Arnao (2007)

Também, devido às características de armazenamento e à umidade podem-se formar aglomerados (Lenço, 2010), como esquematizado na Figura 5

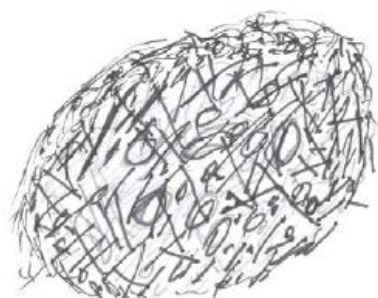


Figura 5 – Esquema de aglomerado de fibras e medula. Fonte: Lenço (2010)

Sosa Arnao (2007) ao analisar amostras de bagaço de cana obteve cerca de 72% de fibra e 27% de pó, independente deste ser obtido de um processo de moenda ou difusor.

A Tabela 15 apresenta um resultado de análise granulométrica praticado a duas amostras de bagaço de cana-de-açúcar, já a Tabela 16 apresenta a mesma análise no caso de palha de cana-de-açúcar, ambas as tabelas são tomadas da literatura; para o caso particular do estudo neste trabalho serão realizados testes experimentais já que como apontado por alguns pesquisadores, a composição granulométrica do bagaço e da palha de cana-de-açúcar dependem da variedade de cana-de-açúcar de origem, do esquema de preparação da moenda na usina e, em grande parte, do estado técnico dos equipamentos utilizados (Beatón Soler e Silva Lora, 1991; Olivares Gómez, 1996; Cortez *et al.*, 2008; Leite e Cortez, 2009).

Tabela 15 - Resultados da análise granulométrica do bagaço de cana (Olivares Gómez, 1996)

Abertura da peneira (mm)	Fração mássica retida	
	Amostra 1	Amostra 2
0,000	0,01518	0,01107
0,149	0,05899	0,05734
0,297	0,12967	0,12475
0,420	0,28180	0,25754
0,840	0,09233	0,08853
1,190	0,06812	0,11469
2,380	0,15675	0,11167
3,360	0,09017	0,07042
4,760	0,05345	0,06237
6,350	0,03508	0,07646
9,520	0,01026	0,01207
12,700	0,00821	0,01308

Tabela 16 - Resultados da análise granulométrica da palha de cana após moenda (Olivares Gómez, 1996)

Abertura da peneira (mm)	Fração mássica retida	
	Amostra 1	Amostra 2
0,000	0,05126	0,07920
1,5	0,02087	0,02506
2,0	0,01853	0,02389
2,4	0,02221	0,02139
3,17	0,02070	0,01604
3,57	0,01352	0,01387
3,97	0,02738	0,01888
4,36	0,02388	0,01470
4,76	0,02187	0,01621
5,16	0,02354	0,01805
5,55	0,02788	0,02089
5,95	0,02555	0,01571
6,35	0,03957	0,02690
6,74	0,07631	0,03860
7,14	0,07138	0,05998
7,54	0,03390	0,03375
7,94	0,08232	0,07536
8,33	0,07163	0,06216
8,73	0,06579	0,05831
9,13	0,24846	0,36324

Na Tabela 16 é importante advertir que a palha de cana foi processada visando reduzir suas folhas a partículas, então esta distribuição apresentada não é produto de um processo de aproveitamento da cana-de-açúcar na moenda e pode variar dependendo do processamento aplicado à palha.

Para efeitos da simulação neste trabalho, existe a possibilidade de incluir a distribuição de tamanho de partículas como uma distribuição de Rosin-Rammler (Olivares Gómez, 1996) onde se inclui uma única injeção de combustível representando todos os tamanhos de partícula, mas para maior versatilidade no pos-processamento de resultados foi incluído cada tamanho de partícula como sendo uma injeção de combustível separada.

2.3 RESÍDUOS DE CANA-DE-AÇÚCAR PARA ENERGIA

No uso dos resíduos de cana-de-açúcar para energia, devem ser levadas em consideração as vantagens e limitações do processo, algumas das quais são mencionadas a seguir.

2.3.1 Vantagens

- A cana-de-açúcar é a cultura mais difundida em muitos países;
- A cana-de-açúcar é uma das plantas com a maior eficiência de bioconversão por fotossíntese;
- Produzir energia a partir de bagaço de cana-de-açúcar, não compete com a produção de alimentos, de fato, poderia favorecer a produção de alimentos, já que o bagaço é um resíduo da produção de açúcar a partir da cana-de-açúcar. Um eventual aumento na produção de energia a partir de bagaço poderia em muitos casos significar um aumento na produção de açúcar;
- O bagaço e/ou a palha gerados na usina seriam consumidos para produção de energia por meio da cogeração, tornando a usina auto-sustentável energeticamente e, em alguns casos, sobra energia para venda de eletricidade;
- A produção de energia a partir do bagaço e palha de cana-de-açúcar geraria maior rentabilidade nas usinas sucroalcooleiras;
- O bagaço é um material extremamente heterogêneo que compreende cerca de 30-40% de fibra medular, que é derivada do núcleo da planta e é principalmente material de parênquima e "entrecasca", "casca", ou fibra de "tronco", e é em grande parte derivado de materiais de esclerênquima. Estas propriedades tornam bagaço particularmente problemático para fabricação de papel e têm sido objeto da literatura (Covey *et al.*, 2006).
- A viabilidade do uso da palha de cana-de-açúcar como combustível na caldeira representaria um incentivo para eliminar a prática de queima em campo, o qual seria muito bom econômica e ambientalmente para a usina.
- A viabilidade do uso de palha de cana-de-açúcar como combustível na caldeira aumentaria a disponibilidade de bagaço de cana-de-açúcar que poderia ser usado para outros fins, por exemplo, para a produção de etanol por hidrólise de biomassa celulósica.

2.3.2 Limitações

- A cultura da cana-de-açúcar é sazonal, o qual significa que o fornecimento do bagaço e palha atingiria o pico apenas durante e após a colheita, e então, é preciso programar o armazenamento destes resíduos.
- O teor de umidade elevado do bagaço, tipicamente 40 a 50%, representa um fator contrário no objetivo da sua utilização como combustível.
- O bagaço é utilizado também para produção de biomateriais, por exemplo, papel, mas a produção de papel é só segunda maior fonte de receitas provenientes do bagaço, já que a maior fonte de receitas é a cogeração de eletricidade.
- As fibras de bagaço variam em comprimento, dependendo do país e variedade de cana-de-açúcar, mas são tipicamente perto de 13 a 17 mm de comprimento. Fibras do bagaço são adequadas para papel de seda, ondulado, papel de jornal e papel para escrever (Seppo, 1998; Geoff *et al.*, 2006). No entanto, uma análise de ciclo de vida completo deve ser realizada antes do seu uso para estas atividades a nível comercial.
- O bagaço é usado para fazer tábuas de madeira compensada (contraplacado). É um método amigável com o meio ambiente, pois não implica qualquer prejuízo com desmatamento.
- Uma parte da palha de cana-de-açúcar deverá permanecer no campo para atuar como uma importante proteção verde ao solo (Donzelli, 2005; Abel Seabra, 2008). Esta quantidade pode girar em torno de 30%, mas como apontado por Abel Seabra (2008) a quantidade adequada de palha a ser deixada no campo varia conforme a exigência das condições locais do solo, fazendo com que, para casos específicos, estes valores sejam bem diferentes.
- No caso da palha uma das dificuldades está nos riscos de problemas operacionais em função do teor de cinzas e de sua composição, o que pode resultar na formação de depósitos, incrustações e corrosão.

2.4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA DA MODELAGEM DA QUEIMA DE BAGAÇO E PALHA DE CANA-DE-AÇÚCAR EM FORNALHAS DE CALDEIRAS DE QUEIMA EM SUSPENSÃO

Os primeiros desenvolvimentos sobre modelagem CFD da queima de combustíveis sólidos polidispersos são referidos ao carvão mineral pulverizado. Hoje estas técnicas desenvolvidas para carvão mineral são já metodologias bastante maduras ao ponto de alguns modelos estarem disponíveis em softwares comerciais de CFD. E estes desenvolvimentos foram tomados como base para aplicação em modelos para queima de biomassas. Porém técnicas de modelagem CFD para combustão de biomassa ainda apresentam grandes desafios, que podem ser vistos nas diferenças significativas que existem entre a queima de biomassa polidispersa e a queima de carvão mineral pulverizado.

Como apontado por Demirbas (2005) e por Belosevic (2010), relativo ao carvão mineral, a biomassa geralmente possui um menor teor de carbono, mais oxigênio, mais sílica e potássio, menos alumínio e ferro, menor poder calorífico, maior umidade e menor densidade e friabilidade (tendência a ser desmontada). Bharadwaj *et al.* (2004) determinaram que a densidade de uma partícula de biomassa é consideravelmente menor à de uma partícula de carvão, diferenciadas na ordem de 4 a 7 vezes. A biomassa geralmente possui um teor de enxofre muito baixo comparado ao carvão. E algumas biomassas possuem maior teor de cloro do que o carvão. Belosevic (2010) assinala o teor de cloro como o principal fator na formação de cinzas, já que este facilita a mobilidade de muitos componentes inorgânicos, particularmente potássio. Também, é necessário fazer um estudo particular de cada biomassa que pretende ser usada para combustão em fornalhas de caldeiras, devido à composição de inorgânicos de cada uma delas ser diferente. Estes são componentes críticos relacionados com a formação de aglomerações e depósitos.

Como observado por Baxter (2005), as partículas de biomassa são grandes e fisicamente complexas, a baixa densidade e a forma das partículas de biomassa promovem a sua oxidação a velocidades muito maiores do que aquelas para partículas de carvão. Partículas grandes de uma determinada massa queimam mais rápido quando não são esféricas.

A biomassa possui sempre maior teor de voláteis, mesmo que os carvões de baixo nível (*Low-rank coals* na literatura inglesa; turfa e linhito) como assinalado por alguns autores (Baxter, 2005; Belosevic, 2010). Também, como afirmado por Demirbas (2005), as

volatilidades relativas (relação entre matéria volátil "MV" e carbono fixo "CF", ou seja, (MV/CF)) típicas são: $MV/CF > 4.0$ para biomassa e $MV/CF < 1.0$ para carvão. O alto conteúdo de material volátil faz com que uma partícula de biomassa queime mais rapidamente numa caldeira se comparada a uma partícula de carvão de tamanho similar.

Nesta seção do trabalho apresenta-se um resumo cronológico de diferentes modelos e/ou outros aportes relativos à queima de combustível sólido particulado, principalmente biomassa. Nem todos são referentes, especificamente, ao bagaço ou à palha de cana-de-açúcar. A grande maioria foi desenvolvida para carvão mineral pulverizado e alguns também para outras biomassas. Neste ponto cabe ressaltar que de acordo ao modo de queima as fornalhas de caldeiras podem ser de um destes três tipos: leito fluidizado, queima em suspensão e leito fixo (queima em grelha) neste capítulo são apresentados apenas desenvolvimentos referidos a fornalhas de queima em suspensão que é o modelo de fornalha estudado. Devido a alguns fatores como umidade e aglomerados de partículas, parte da biomassa pode cair e queimar na grelha, a abordagem deste fenômeno será explicada no Capítulo 4.

Luo e Stanmore (1992) tentaram elaborar um modelo de combustão de bagaço em caldeiras de usinas açucareiras. Sabendo que para descrever o comportamento de combustão do bagaço, os processos de secagem, volatilização, queima de voláteis e combustão do carbono fixo residual devem ser entendidos, perceberam que alguns dos dados necessários não estavam disponíveis e deram-se a tarefa de determiná-los. Foi feito um teste ASTM de material volátil, carbonizando amostras de bagaço pulverizado (90-125 μm). Utilizando análise termogravimétrica (TGA e DTG) para medir a cinética de combustão do carbono fixo residual (*char* na literatura inglesa). Chegaram à conclusão de que estes parâmetros cinéticos são semelhantes aos de carbono fixo residual de carvões de baixo nível.

Backreedy *et al.* (1999) perceberam que os modelos de combustão de carvão da época a fim de atender às limitações computacionais, usavam modelos simplificados das etapas de combustão e devolatilização das partículas de carvão. Assim que, no seu trabalho eles preferem calcular as taxas de devolatilização utilizando um modelo específico de devolatilização de carvão (FG-DVC); desta forma, obtiveram a taxa de produção de voláteis, a os rendimentos de carbono e voláteis. Asseguram que utilizando o FG-DVC junto com um modelo de oxidação global simples de carbono residual, os dados parecem dar uma boa concordância com os resultados experimentais disponíveis para queima do carbono residual, mas sugerem tentar melhorar o modelo de oxidação do carbono já que o utilizado não é suficientemente preciso para prever a queima do carbono em todas as condições. O trabalho

de Backreedy *et al.* (1999) se limitou a carvão mineral, não incluindo nenhuma biomassa. Os experimentos e modelagens estiveram limitados um reator de tubo, onde era possível queimar uma pequena amostra de combustível em condições controladas.

Eastwick *et al.* (1999), fizeram uma comparação entre dois códigos CFD comerciais utilizados para modelagem de combustão de carvão pulverizado: FLUENT e FLOW3D 3.2 (agora chamado CFX). As comparações com dados experimentais mostraram que a versão do FLUENT especialmente adaptada para a combustão do carvão fornecia previsões ligeiramente melhores do que a versão comercial do FLOW3D. Eles perceberam que as discrepâncias entre as previsões dos dois códigos CFD são devido a diferenças nos modelos físicos utilizados para descrever a devolatilização e combustão de voláteis e concluíram que o modelo de Arrhenius não representa adequadamente a devolatilização. O trabalho de Eastwick *et al.* (1999) se limitou a pesquisar o desempenho dos softwares na combustão de carvão mineral pulverizado sem mencionar o caso específico de biomassas.

Woodfield *et al.* (2000); Woodfield (2001) utilizaram o código computacional tridimensional FURNACE (originalmente desenvolvido por Boyd e Kent (1988) para modelar fornalhas de carvão pulverizado) para modelar uma fornalha de bagaço. Introduzindo a dependência com o tempo no modelo original, eles demonstraram a importância que tem o efeito da combustão em grelha na estabilidade geral da combustão. Estes trabalhos utilizam o código FURNACE o qual não é de uso geral, foi desenvolvido especificamente para modelagem de combustão em fornalhas de carvão pulverizado e, portanto possui algumas limitações relativas ao tipo e refinamento de malha computacional que se relaciona diretamente com a limitação na complexidade da geometria da fornalha a ser estudada, também o código por ser particular, este é caracterizado pela indisponibilidade de alguns submodelos já disponíveis em softwares CFD tradicionais e de uso geral (por exemplo: distribuições tamanho de partículas, meios porosos, etc.). A reprogramação de códigos particulares para serem adaptados a casos específicos normalmente precisa de grandes esforços do usuário que na maioria dos casos não é o foco do estudo.

Stastny *et al.* (2002) utilizaram o código computacional FLUENT 5.7 para modelar o processo de combustão dentro de uma caldeira que utiliza turfa como combustível. Eles compararam os resultados dos cálculos CFD com medidas de pirometria acústica e dados de processo. Este trabalho assume a biomassa como sendo similar a carvão de baixo nível e não se preocupa em incluir sub-rotinas que levem em consideração as particularidades da combustão de biomassa em relação à do carvão mineral pulverizado.

Sheng *et al.* (2004) verificaram o comportamento da queima de misturas de carvão australiano em caldeiras utilizando o código CFD FLUENT. Neste caso, eles utilizaram a abordagem de duas frações de mistura. Concluíram que a abordagem de única fração de mistura apresenta uma previsão quase aditiva das propriedades da combustão do carvão e então, só é aplicável às misturas de carvões semelhantes. Também foi identificado que o modelo de devolatilização é um dos de maior importância no controle do processo. As simulações e comparações foram feitas em escala de laboratório, mas apontam que o modelo pode ser estendido à escala industrial. O trabalho não inclui nada relativo à queima de biomassa e se limita às misturas de carvão pulverizado.

Zahirovic *et al.* (2004) utilizaram como base o modelo de fase discreta (DPM) do software comercial FLUENT para prever a combustão de biomassa pulverizada. Sabendo que o DPM do FLUENT foi originalmente desenvolvido para carvão pulverizado e que existem algumas diferenças entre o comportamento da combustão do carvão mineral e o da biomassa, fizeram algumas modificações. Por exemplo, já que comparado ao carvão a biomassa tem maior teor de voláteis, então a devolatilização teria um papel determinante no processo global de conversão, pelo qual foi incluído um modelo mais detalhado para devolatilização e a equação de energia foi modificada para levar em conta a dependência do calor específico da partícula em relação à temperatura. Advertem sobre a necessidade de considerar a condução de calor interna nas partículas. O modelo de devolatilização utilizado por eles considera três etapas acontecendo paralelamente, aplicado a uma biomassa de madeira pulverizada cujo nome não foi especificado, e que não utiliza nem bagaço nem palha de cana-de-açúcar como combustível.

Dixon *et al.* (2005) apresentam um resumo das numerosas aplicações onde o Instituto de pesquisa do açúcar da Austrália (*Sugar Research Institute - SRI*) tem obtido resultados bem sucedidos utilizando o CFD. Eles trabalharam na modelagem da combustão em caldeiras, usando principalmente o código computacional de malha estruturada “FURNACE”, originalmente desenvolvido por Boyd e Kent (1988) para caldeiras de queima de carvão pulverizado; e que através de vários anos foi modificado para modelar os processos de combustão em caldeiras de queima de bagaço (Luo, 1993; Woodfield *et al.*, 2000; Mann *et al.*, 2001; Woodfield, 2001; Mann *et al.*, 2003). Por se tratar de um código que não é de uso geral, o FURNACE apresenta algumas desvantagens que já foram mencionadas acima.

Backreedy *et al.* (2005) examinaram mediante modelagem CFD a queima de misturas de carvão-biomassa, assumindo uma similaridade entre eles e colocando especial atenção nas partículas de biomassa de maior diâmetro. No seu estudo eles percebem que existe certo

número de códigos CFD disponíveis comercialmente e que a disponibilidade ou adaptabilidade para inclusão de novos submodelos específicos para combustão de biomassa são fatores chave na hora de selecionar o código apropriado. Selecionaram o código comercial FLUENT 6.122, o qual possibilita a inclusão de submodelos e rotinas definidas pelo usuário. Além disso, permite também o uso de dois termos fonte, um para carvão e outro para biomassa, embora com algumas restrições. Concluíram que a combustão de pequenas partículas (200 μm) de madeira foi rápida, mas a taxa de combustão de partículas maiores era dependente da sua composição, tamanho e formato. O modelo assume que o processo de devolatilização de biomassa é igual ao do carvão, mesmo que como mencionado no próprio texto, os autores reconhecem que diferente do carvão, e devido a sua consistência lignocelulósica a devolatilização de biomassa está dividida em várias etapas; esta diferença foi mencionada acima e também foi advertida por outros autores (Wilhelmy, 1850; Laidler, 1984; Chen *et al.*, 1998; Shanmukharadhya, 2007; Centeno González, 2015).

Ramajo-Escalera *et al.* (2006) determinaram os parâmetros cinéticos para a oxidação do bagaço, utilizando a metodologia do modelo de cinética de Vyazovkin (Vyazovkin e Linert, 1995; Vyazovkin, 1996; 1997; Vyazovkin e Sbirrazzuoli, 1997; Vyazovkin e Wight, 1998; 1999). Eles determinaram parâmetros cinéticos tanto para desidratação quanto para combustão do bagaço de cana-de-açúcar. Os autores esperam que os dados cinéticos do bagaço por eles obtidos no mencionado estudo, permitam seu apropriado uso em aplicações de combustão e gaseificação de bagaço, além de esperar também um incremento do uso de bagaço como fonte de energia. O trabalho só apresenta os dados cinéticos determinados para o bagaço e não apresenta nenhum modelo específico CFD de uma fornalha, também não apresenta dados para palha de cana-de-açúcar.

Shanmukharadhya e Sudhakar (Shanmukharadhya, K. e Sudhakar, K., 2007; Shanmukharadhya, 2007; Shanmukharadhya, K. S. e Sudhakar, K. G., 2007a) realizaram uma pesquisa experimental para determinar as zonas de reação e os campos de temperatura na fornalha de uma caldeira industrial queimando bagaço de cana-de-açúcar. Além disso, a fornalha foi modelada usando o código CFD FLUENT ao qual foram incorporados vários submodelos. Tanto os resultados experimentais como os computacionais conseguem mostrar o atraso considerável da ignição devido à secagem do combustível. Também os resultados indicaram claramente a localização das zonas de máxima temperatura na fornalha e o padrão de propagação da chama. O modelo CFD proposto nos trabalhos mencionados segue o modelo de devolatilização de Drummond e Drummond (1996) que considera a devolatilização do bagaço acontecendo a uma taxa única, desconsiderando diversas etapas às taxas diferentes,

próprias de materiais de consistência lignocelulósica; também não se faz menção ao uso de palha de cana-de-açúcar para queima na fornalha.

Backreedy *et al.* (2005); Ma *et al.* (2007) desenvolveram um modelo em CFD que simula a combustão de biomassa numa fornalha para queima de carvão pulverizado. O modelo é principalmente baseado em submodelos de combustão de carvão utilizando uma abordagem Euleriana-Lagrangiana, mas constantes específicas para biomassa que definem os submodelos foram pesquisadas e empregadas nas simulações. Ma *et al.* (2007) também percebem que as irregularidades na forma das partículas de biomassa causam importantes aumentos da complexidade para as simulações numéricas, particularmente para grandes relações de aspecto. Advertem que as diferentes fases da combustão (Secagem, liberação de voláteis, combustão de voláteis e combustão do carbono residual) podem coexistir em uma única partícula e, que podem experimentar diferenças significativas na taxa de aquecimento em diferentes partes da partícula. Outra observação importante no modelo por eles desenvolvido é que aumentam a velocidade de reação por um fator de quatro, a fim de representar a elevada velocidade de combustão das partículas do carbono residual de biomassa. Eles compararam previsões numéricas do modelo com algumas medidas experimentais que foram tomadas e alcançaram uma boa concordância. No caso do modelo CFD utilizado no trabalho de Ma *et al.* (2007), aplicam as mesmas observações feitas alguns parágrafos acima para o modelo de Backreedy *et al.* (2005), assumem a devolatilização da biomassa como sendo igual à do carvão, também não trabalham com bagaço nem com palha de cana-de-açúcar.

A Tabela 17 mostra um resumo das características dos modelos CFD disponíveis na literatura para queima de combustíveis sólidos particulados. Da Tabela 17 observa-se que nenhum dos modelos apresentados utiliza palha de cana-de-açúcar como combustível. Apenas dois modelos (Woodfield *et al.*, 2000; Shanmukharadhya, 2007) utilizam especificamente bagaço de cana-de-açúcar como combustível. Um destes (Woodfield *et al.*, 2000) utilizando o código FURNACE que não é de uso geral e é limitado a malha estruturada. Quase todos os modelos utilizam o submodelo de devolatilização de Arrhenius de uma única etapa que segundo Eastwick *et al.* (1999) não representa adequadamente a devolatilização. Segundo estudo de sensibilidade de Smith (1990), foi identificada a devolatilização como sendo o maior fenômeno físico de controle. Um dos modelos apresentados (Zahirovic *et al.*, 2004) utiliza um submodelo de devolatilização independente que reconhece a condição da biomassa como material lignocelulósico, mas não utiliza nem bagaço nem palha de cana-de-açúcar como combustível.

Tabela 17 - Resumo da formulação de modelos CFD disponíveis na literatura para queima em suspensão de combustíveis sólidos particulados

Referência	Rogerson <i>et al.</i> (2007)	Ma <i>et al.</i> (2007)	Shanmukharadhya (2007)	Shanmukharadhya, K. e Sudhakar, K. (2007)	Shanmukharadhya, K. S. e Sudhakar, K. G. (2007b)	Ma <i>et al.</i> (2009)	Shanmukharadhya e Ramachandran (2009)	Gubba <i>et al.</i> (2012)
País	Austrália	Reino Unido	Índia	Índia	Índia	Reino Unido	Índia	Reino Unido + China
Afiliação	<i>University of Sydney</i>	<i>University of Leeds</i>	<i>Bannari Amman Institute of Technology</i>	<i>Bannari Amman Institute of Technology + Government Tool Room and Training Centre, Bangalore</i>	<i>Bannari Amman Institute of Technology + Government Tool Room and Training Centre, Bangalore</i>	<i>University of Leeds</i>	<i>Bannari Amman Institute of Technology + Vellore Institute of Technology</i>	<i>University of Leeds + Xi'an Jiaotong University + Zhejiang University</i>
Combustível original	Carvão	Carvão	Carvão	Carvão	Carvão	Carvão	Carvão	Carvão
Combustível		Madeira polidispersa de nome não especificado	Bagaço	Bagaço	Bagaço	Mistura carvão-biomassa	Bagaço	Mistura carvão-biomassa
Código	FURNACE	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT 6.3	FLUENT 6.2	FLUENT 13.0
Sistema de referência	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana	Euleriana-Lagrangeana
Modelo de turbulência	$k - \varepsilon$	$k - \varepsilon$ RNG	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ Standard e RNG	$k - \varepsilon$ Standard	$k - \varepsilon$ realizável
Modelo de radiação		P-1	Ordenadas discretas (DO)	P-1	P-1	P-1	Ordenadas discretas (DO)	Ordenadas discretas (DO)
DTP		Rossin-Rammler					Rossin-Rammler	Rossin-Rammler logarítmico
Combustão do carbono residual	Smith (1982)	Smith (1982) modificado		Smith (1982)			Taxa de reação de superfície limitada por cinética/difusão	
Modelo de devolatilização	Arrhenius única etapa	Arrhenius única etapa	Arrhenius única etapa	Arrhenius única etapa		FG-DVC	Arrhenius única etapa	Arrhenius única etapa
Combustão turbulenta	Fração de mistura / PDF	Dissipação Eddy	Fração de mistura / PDF				Fração de mistura / PDF	Dissipação Eddy
Combustão na grelha					especificado			

2.5 MODELANDO A DEVOLATILIZAÇÃO

Como visto na Tabela 17 que mostra o resumo dos trabalhos de simulação CFD de combustão de biomassa polidispersa, para modelar a cinética da devolatilização, a maioria dos autores utilizam um único trio cinético, com $f(\alpha)$ de primeira ordem (ver Tabela 18). Como mencionado por Zakharov e Shchuchkin (1986), o critério para a seleção desse modelo está na conveniência da sua aplicação, e não estritamente em um sentido físico. Também, como visto no item 2.5, muitos autores (Backreedy *et al.*, 1999; Eastwick *et al.*, 1999; Sheng *et al.*, 2004; Backreedy *et al.*, 2005) asseguram que o modelo tipo Arrhenius não representa adequadamente a devolatilização da biomassa.

O bagaço e a palha de cana-de-açúcar possuem composição química similar à da madeira e outros materiais lignocelulosicos pelo qual se pode supor que o seu comportamento no processo de pirólise é similar, ou seja, o processo acontece a taxas diferentes dependendo do grau de degradação, ou em outras palavras, o modelo de devolatilização é mais bem representado por um conjunto de trios cinéticos e não só um trio cinético. Incluso alguns autores (Aboyade *et al.*, 2011) asseguram que a curva TGA de uma amostra de material lignocelulosico, corresponde aproximadamente à superposição das curvas TGA dos seus pseudo-componentes (celulose, hemicelulose e lignina) nas suas respectivas proporções.

Esse comportamento da devolatilização de materiais lignocelulósicos é confirmado por Lora *et al.* (1992), o qual utiliza um conjunto de dois trios cinéticos para pirólise do bagaço, e podendo também ser verificado na forma das curvas de termogravimetria apresentadas por Shanmukharadhya (2007) e uma destas reproduzida na Figura 6. Outros autores (Roque-Diaz *et al.*, 1985; Mothé e Miranda, 2013) também apresentam conjuntos de trios cinéticos para representar a devolatilização do bagaço e da palha de cana-de-açúcar.

No próximo item serão mencionados e comparados brevemente os modelos cinéticos e aproximações matemáticas utilizadas atualmente em análise térmica de estado sólido. E será apresentada uma descrição do método de Ozawa, Flynn e Wall (OFW) que será o escolhido neste trabalho para calcular os conjuntos de trios cinéticos descrevendo a devolatilização do bagaço e a palha de cana-de-açúcar

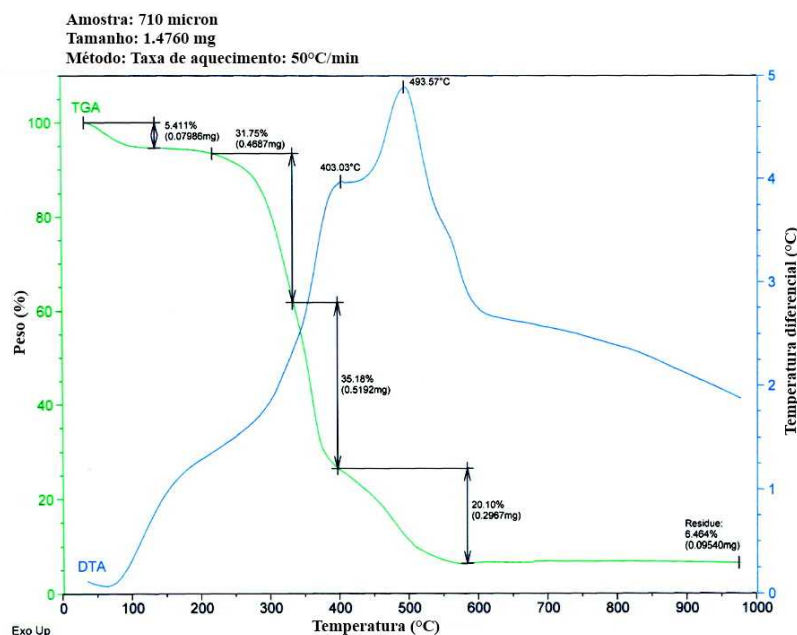


Figura 6 – Análise TG-DTA de uma partícula de bagaço de 710 μm . Fonte: Shanmukharadhya (2007)

2.5.1 Cinética do estado sólido

Os conceitos da cinética química foram baseados originalmente em generalizações de observações empíricas em reações homogêneas na fase gasosa. Depois estes conceitos foram aplicados a soluções (fase líquida) e eventualmente a reações da fase sólida. Então os conceitos da cinética química do estado sólido não foram desenvolvidos separadamente, muitos princípios da cinética química do estado sólido foram desenvolvidos partindo destes para fase homogênea (gases e líquido). De fato muitos princípios matemáticos são compartilhados pelas três fases. Mas as taxas de conversão cinética que descrevem a degradação de combustíveis sólidos são mais complexas do que aquelas para fase homogênea.

As diferenças entre princípios cinéticos para fase sólida e para fase líquida e gasosa são naturalmente devidas à natureza destas fases. Algumas características como tamanho, superfície externa e forma geométrica, são próprias de reações heterogêneas (envolvendo sólidos) e não possuem uma equivalência em reações homogêneas.

A cinética da decomposição térmica de combustíveis sólidos pode ser estudada isotermicamente ou com temperatura variável. Muitas metodologias matemáticas têm sido desenvolvidas para interpretar ambos, dados experimentais de estudos de degradação isotérmica e não-isotérmica, um resumo destas metodologias é representado esquematicamente na Figura 7

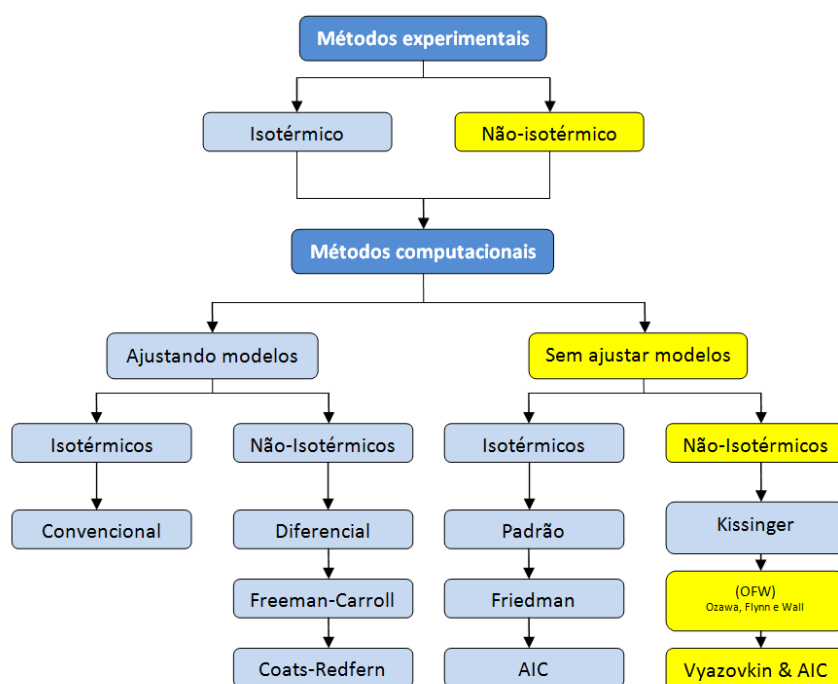


Figura 7 – Métodos para estudar cinética do estado sólido. Fonte: Khawam e Flanagan (2006)

Nos experimentos por termogravimetria, com o progresso da reação é medida a perda de massa como uma função do tempo (caso isotérmico) o da temperatura (caso não-isotérmico) e em geral é reportada na forma normalizada conhecida como fração de conversão (α) a qual relaciona as massas inicial (m_0), final (m_∞) e em um tempo (t) qualquer da amostra. Para o caso isotérmico a massa atual (m_t) representa a massa num instante de tempo (t) e a fração de conversão é calculada como na equação (2.1).

$$\alpha = \frac{m_0 - m_t}{m_0 - m_\infty} \quad (2.1)$$

Para o caso não-isotérmico a massa (m_T) representa a massa quando atingida uma temperatura (T) e a fração de conversão é então calculada como na equação (2.2)

$$\alpha = \frac{m_0 - m_T}{m_0 - m_\infty} \quad (2.2)$$

Ao contrário da taxa de conversão cinética no caso de reações homogêneas, as quais normalmente dependem da ordem de reação (isto é, as referências F0, F1, F2 ou F3 na Tabela 18), a taxa de conversão cinética para uma reação elementar de estado sólido depende da formação de núcleos, avanço da interface, difusão e/ou da forma geométrica da partícula sólida. Estes fatores mencionados acima levam à necessidade de utilização de vários fatores

de decomposição que não existem na cinética de reações homogêneas, alguns destes modelos aparecem na Tabela 18.

De forma geral, a taxa de conversão cinética ($\frac{d\alpha}{dt}$) pode ser expressa como na equação (2.3)

$$\frac{d\alpha}{dt} = k(T)f(\alpha) \quad (2.3)$$

Onde $f(\alpha)$ representa uma função expressando a dependência da taxa de conversão cinética com a fração de conversão, $k(T)$ é muitas vezes conhecida como a constante de velocidade de reação, mas na realidade é uma função da temperatura e a dependência destas é usualmente dada pela equação (2.4) conhecida como equação de Arrhenius, mas vários autores têm proposto outras equações como mostrado por Laidler (1984)

$$k(T) = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} \quad (2.4)$$

Tabela 18 - Diversos modelos de reação para cinética de estado sólido

Modelo	ref	Forma diferencial $f(\alpha) = \frac{1}{k} \frac{d\alpha}{dt}$	Forma integral $g(\alpha) = kt$
Modelos de nucleação			
Lei de potência	P2	$2\alpha^{(1/2)}$	$\alpha^{(1/2)}$
Lei de potência	P3	$3\alpha^{(2/3)}$	$\alpha^{(1/3)}$
Lei de potência	P4	$4\alpha^{(3/4)}$	$\alpha^{(1/4)}$
Avrami-Erofe'ev	A2	$2(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/2}$
Avrami-Erofe'ev	A3	$3(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{2/3}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/3}$
Avrami-Erofe'ev	A4	$4(1-\alpha)[- \ln(1-\alpha)]^{3/4}$	$[- \ln(1-\alpha)]^{1/4}$
Prout-Tompkins	B1	$\alpha(1-\alpha)$	$\ln[\alpha/(1-\alpha)]$
Modelos de contração geométrica			
Contração de área	R2	$2(1-\alpha)^{1/2}$	$[1 - (1-\alpha)^{1/2}]$
Contração de volume	R3	$3(1-\alpha)^{2/3}$	$[1 - (1-\alpha)^{1/3}]$
Modelos de difusão			
Difusão 1-D	D1	$1/2\alpha$	α^2
Difusão 2-D	D2	$[- \ln(1-\alpha)]^{-1}$	$[(1-\alpha) \ln(1-\alpha)] + \alpha$
Difusão 3-D Equação de Jander	D3	$3(1-\alpha)^{2/3}/2[1 - (1-\alpha)^{1/3}]$	$[1 - (1-\alpha)^{1/3}]^2$
Ginstling-Brounshtein	D4	$(3/2)[1 - (1-\alpha)^{1/3}]^{-1}$	$[1 - (1-\alpha)^{1/3}]^2$
Modelos de ordem de reação			
Ordem zero	F0/R1	1	α
Primeira ordem	F1	$(1-\alpha)$	$- \ln(1-\alpha)$
Segunda ordem	F2	$(1-\alpha)^2$	$(1-\alpha)^{-1} - 1$
Terceira ordem	F3	$(1-\alpha)^3$	$(1/2)[(1-\alpha)^{-2} - 1]$

Na equação (2.4) A é o fator pré-exponencial, também conhecido como fator de frequência, E_a é a energia de ativação, R é a constante dos gases e T é a temperatura absoluta.

Substituindo a equação de Arrhenius na equação (2.3) obtemos:

$$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (2.5)$$

Análises termogravimétricas para combustíveis sólidos tais como biomassas, normalmente são praticados não isotermicamente a uma taxa de aquecimento constante (β), para tais experimentos a taxa de conversão cinética pode ser expressa como:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{d\alpha}{dT} \frac{dT}{dt} = \beta \frac{d\alpha}{dT} \quad (2.6)$$

Substituindo a equação (2.6) na equação (2.5)

$$\beta \frac{d\alpha}{dT} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (2.7)$$

Reorganizando

$$\frac{d\alpha}{dT} = \frac{A}{\beta} e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (2.8)$$

Separando variáveis para integrar podemos definir uma função $g(\alpha)$ como sendo

$$g(\alpha) = \int_0^\alpha \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{A}{\beta} \int_{T_0}^T e^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} dT \quad (2.9)$$

Algumas opções para $f(\alpha)$ e a sua respectiva $g(\alpha)$ são encontradas na Tabela 18. Para simplificar um pouco a integral da temperatura e deixar ela numa forma de integral comumente encontrada em manuais de matemáticas, é definida a variável x como sendo

$$x = \frac{E_a}{RT} \quad (2.10)$$

Da equação (2.10) temos

$$T = \frac{E_a}{R} x^{-1} \quad (2.11)$$

$$dT = -\frac{E_a}{R x^2} dx \quad (2.12)$$

E substituindo na equação (2.9) temos

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{A}{\beta} \int_{T_0}^T e^{(-x)} \left(\frac{E_a}{R x^2} dx \right) \quad (2.13)$$

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{AE_a}{\beta R} \int_{T_0}^T \frac{e^{(-x)}}{x^2} dx \quad (2.14)$$

Limites

$$\begin{cases} T \rightarrow 0 \Rightarrow x \rightarrow \infty \\ T \rightarrow T \Rightarrow x \rightarrow \frac{E_a}{RT} \end{cases}$$

Então

$$g(\alpha) = \int_0^{\alpha} \frac{d\alpha}{f(\alpha)} = \frac{AE_a}{\beta R} \int_{\infty}^x \frac{e^{(-x)}}{x^2} dx \quad (2.15)$$

A integral do lado direito pode ser simplificada como $p(x)$ do qual temos

$$g(\alpha) = \frac{AE_a}{\beta R} p(x) \quad (2.16)$$

$$p(x) = \int_{\infty}^x \frac{e^{(-x)}}{x^2} dx \quad (2.17)$$

A integral $p(x)$ conhecida em cinética como integral exponencial ou integral de Arrhenius não possui uma solução analítica. Entre as abordagens possíveis para calcular a integral $p(x)$ temos

- Calcular a integral $p(x)$ numericamente
- Aproximar a integral $p(x)$ mediante a expansão de uma série
- Calcular a integral $p(x)$ a partir de uma aproximação que possa ser integrada

Pela sua precisão e relativa simplicidade, uma das aproximações mais utilizadas da integral $p(x)$ é a proposta por Doyle onde:

$$\ln[p(x)] \approx -2,315 - 0,457x \quad (2.18)$$

Substituindo a aproximação de Doyle na equação

$$g(\alpha) = \frac{AE_a}{\beta R} [e^{(-2,315 - 0,457x)}] \quad (2.19)$$

O objetivo da modelagem dos processos de conversão é obter os três parâmetros cinéticos também chamados de trio cinético (A , E_a e $f(\alpha)$, ou conjuntos deles), que melhor represente os dados experimentais. Como visto na Figura 7, os métodos para modelar experimentos de decomposição não-isotérmica podem ser de dois tipos de acordo com a necessidade do uso prévio de um modelo ($f(\alpha)$) da dependência da taxa de conversão ($\frac{d\alpha}{dt}$) com a fração de conversão (α) para iniciar o cálculo dos parâmetros: os que “ajustam modelos” e os “livres de modelos” (conhecidos respectivamente como *model-fitting* e *model-free* na literatura inglesa).

Mais detalhes sobre métodos que ajustam modelos podem ser encontrados na literatura (Khawam e Flanagan, 2006). Este trabalho limita-se a apresentar e utilizar alguns dos métodos “livres de modelos”, isto porque como é evidente, ao utilizar métodos que ajustam modelos, eles apresentam algumas limitações que fazem com que não sejam ótimos para analisar a decomposição não-isotérmica de alguns sólidos, particularmente biomassas lignocelulosicas que apresentam uma estrutura complexa. Entre as limitações dos métodos que ajustam modelos pode-se mencionar:

- Assumem um trio cinético (A , E_a e $f(\alpha)$) constante
- Envolvem o ajuste de três parâmetros (A , E_a e $f(\alpha)$), os quais são determinados simultaneamente a partir de uma única curva
- Eles envolvem uma taxa de aquecimento única (β), o qual nem sempre é suficiente para determinar a cinética da reação

Por definição, os métodos livres de modelos calculam a energia de ativação da reação (E_a) sem necessidade de supor uma forma para o modelo de reação $f(\alpha)$. Normalmente, a estratégia dos métodos livres de modelo é agrupar termos tais como fator de frequência (A) e modelo ($f(\alpha)$) na constante de intersecção de uma equação linear e usar o coeficiente angular dessa equação para calcular a energia de ativação.

Um método isoconversional é um método livre de modelo, capaz de avaliar os parâmetros cinéticos, especialmente a energia de ativação (E_a) em valores progressivos da fração de conversão (α). Estes métodos requerem várias curvas cinéticas para levar a cabo a análise e por isso têm sido chamados de métodos multicurvas por alguns autores. Então os métodos isoconversionais são muito interessantes porque são capazes de considerar várias análises termogravimétricas do mesmo combustível a diferentes taxas de aquecimento (β). Também são muito convenientes devido a que não pressupõem um trio cinético (A , E_a e

$f(\alpha)$) único, ao contrario, supõe que estes podem mudar dependendo da fração de conversão (α), o qual pode ser o caso de alguns sólidos, especialmente algumas biomassas pela sua composição lignocelulósica.

Como bem apontado por Khawam e Flanagan (2006), algumas vezes os termos “método livres de modelo” e “método isoconversional” são usados sem distinção, mas cabe destacar que não todos os métodos livres de modelos são isoconversionais, por exemplo, o método de Kissinger pode ser considerado livre de modelo, mas não isoconversional. Não é o objetivo de o presente trabalho apresentar detalhes do método de Kissinger, mas foi mencionado para aclarar que será centrada a atenção em métodos isoconversionais, especificamente no método de Ozawa, Flynn e Wall (OFW).

2.5.2 Método de Ozawa, Flynn e Wall

O método de Ozawa, Flynn e Wall (OFW) foi desenvolvido de forma independente por Ozawa (1965) e por Flynn e Wall (1966), a lógica aplicada por ele, é apresentada brevemente a seguir.

Aplica-se logaritmo natural a cada lado da equação (2.19)

$$\ln[g(\alpha)] = \ln\left\{\frac{AE_a}{\beta R} [e^{(-2,315-0,457x)}]\right\} \quad (2.20)$$

$$\ln[g(\alpha)] = \ln\left(\frac{AE_a}{\beta R}\right) - 2,315 - 0,457x \quad (2.21)$$

$$\ln \beta = \ln\left\{\frac{AE_a}{g(\alpha)R}\right\} - 2,315 - 0,457x \quad (2.22)$$

substituindo x de acordo com a equação (2.10) temos:

$$\ln \beta = \ln\left\{\frac{AE_a}{g(\alpha)R}\right\} - 2,315 - 0,457 \frac{E_a}{RT} \quad (2.23)$$

A equação (2.23) pode ser representada como a equação de uma reta

$$Y = mX + b \quad (2.24)$$

Onde

$$Y = \ln \beta \quad (2.25)$$

$$b = \ln \left\{ \frac{AE_a}{g(\alpha)R} \right\} - 2,315 \quad (2.26)$$

$$m = -0,457 \frac{E_a}{R} \quad (2.27)$$

$$X = \frac{1}{T} \quad (2.28)$$

O método OFW utiliza dados de vários gráficos α vs T , cada obtido a diferente taxa de aquecimento β . O método obtém uma reta ao plotar $\ln \beta$ vs $\frac{1}{T}$ para um α fixo de acordo com a equação (2.24); da pendente m dessa reta é possível obter o valor de E_a para cada α de acordo com a equação (2.27), desta forma se tem diversas faixas de α com seus respectivos valores de energia de ativação E_a , nestas faixas são aplicados diversas funções $f(\alpha)$ da Tabela 18, a que der o melhor ajuste será a que represente a faixa. Desta forma o método OFW identifica as possíveis diversas faixas de α com seu receptivo trio cinético (A , E_a e $f(\alpha)$). A programação do método OFW em MATLAB pode ser vista no Apêndice F.

2.5.3 Dados cinéticos da devolatilização do bagaço e a palha de cana-de-açúcar

2.5.3.1 Descrição do experimento

As amostras de biomassa foram submetidas à análise termogravimétrica no TGA701 LECO®, o equipamento possui capacidade para analisar até 19 amostras num mesmo programa de aquecimento pesando uma amostra de cada vez. O programa de aquecimento aplicado foi programado e consiste em um passo inicial de secagem da amostra com cadinho aberto e um segundo passo de devolatilização com cadinho fechado a uma taxa de aquecimento constante.

Foram selecionados programas de aquecimento para taxas de 5, 10 e 15 °C/min; Para cada um destes programas foram analisados simultaneamente 8 amostras de cada biomassa a fim de se obter uma maior quantidade possível de dados para obter um comportamento representativo. Nas Tabelas 19, 20 e 21 são mostrados os programas de aquecimento utilizados.

Tabela 19 - Programa de aquecimento a 5°C/min

Passo	Tampa no cadinho	Temperatura inicial (°C)	Temperatura final(°C)	Taxa de aquecimento (°C/min)	Atmosfera	Fim do passo
Secagem	Não	25	107	5	N ₂	massa constante 0,05%
Devolatilização	Sim	107	950	5	N ₂	Massa constante 0,05%

Tabela 20 - Programa de aquecimento a 10°C/min

Passo	Tampa no cadinho	Temperatura inicial (°C)	Temperatura final(°C)	Taxa de aquecimento (°C/min)	Atmosfera	Fim do passo
Secagem	Não	25	107	10	N ₂	massa constante 0,05%
Devolatilização	Sim	107	950	10	N ₂	Massa constante 0,05%

Tabela 21 - Programa de aquecimento a 15°C/min

Passo	Tampa no cadinho	Temperatura inicial (°C)	Temperatura final(°C)	Taxa de aquecimento (°C/min)	Atmosfera	Fim do passo
Secagem	Não	25	107	15	N ₂	massa constante 0,05%
Devolatilização	Sim	107	950	15	N ₂	Massa constante 0,05%

2.5.3.2 Análise dos dados

A fim de analisar a devolatilização, foram descartados os pontos referentes ao passo de secagem. Os dados de devolatilização das oito amostras foram juntados e organizados em ordem de temperatura ascendente, finalmente os dados de perda de massa para as três taxas de aquecimento foram transformados em dados de fração de conversão, onde zero corresponde ao início da devolatilização e um ao fim da liberação dos voláteis.

A fim de modelar a cinética da liberação dos voláteis, os dados obtidos da análise termogravimétrica deverão ser representados por uma o um conjunto de equações da forma:

$$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)} f(\alpha) \quad (2.29)$$

Onde t é o tempo, α é a fração de conversão, A é o fator pré-exponencial, E_a a energia de ativação, R é a constante universal dos gases e $f(\alpha)$ o modelo de reação. Foi utilizado o método de Ozawa, Flynn e Wall (OFW) (1965; 1966) para testar entre 17 modelos de reação

mostrados na Tabela 18, os modelos que melhor ajustam os dados e seu respectivo intervalo de aplicação são mostrados na Tabela 22 para bagaço e na Tabela 23 para palha, gráficos de conversão destes modelos contra os dados de conversão obtidos no TGA são mostrado na Figura 8 para bagaço e na Figura 9 para palha de cana-de-açúcar.

Tabela 22 - Dados cinéticos da liberação dos voláteis no bagaço da cana-de-açúcar

Equação 1	Intervalo de fração de conversão	De 0 até 0,6
	$A [s^{-1}]$	88655,1772
	$E_a [J/mol]$	65173,6942
	$f(\alpha)$	Segunda ordem
	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^2$	
Equação 2	Intervalo de fração de conversão	De 0,6 até 1
	$A [s^{-1}]$	64561,7295
	$E_a [J/mol]$	60898,0233
	$f(\alpha)$	Terceira ordem
	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^3$	

Tabela 23 - Dados cinéticos da liberação dos voláteis na palha da cana-de-açúcar

Equação 1	Intervalo de fração de conversão	De 0 até 0,5
	$A [s^{-1}]$	256726,7848
	$E_a [J/mol]$	68987,7579
	$f(\alpha)$	Terceira ordem
	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^3$	
Equação 2	Intervalo de fração de conversão	De 0,5 até 1
	$A [s^{-1}]$	53068,6204
	$E_a [J/mol]$	59233,9148
	$f(\alpha)$	Terceira ordem
	$\frac{d\alpha}{dt} = Ae^{\left(-\frac{E_a}{RT}\right)}(1 - \alpha)^3$	

Figura 8 - Termograma e modelo da devolatilização do bagaço

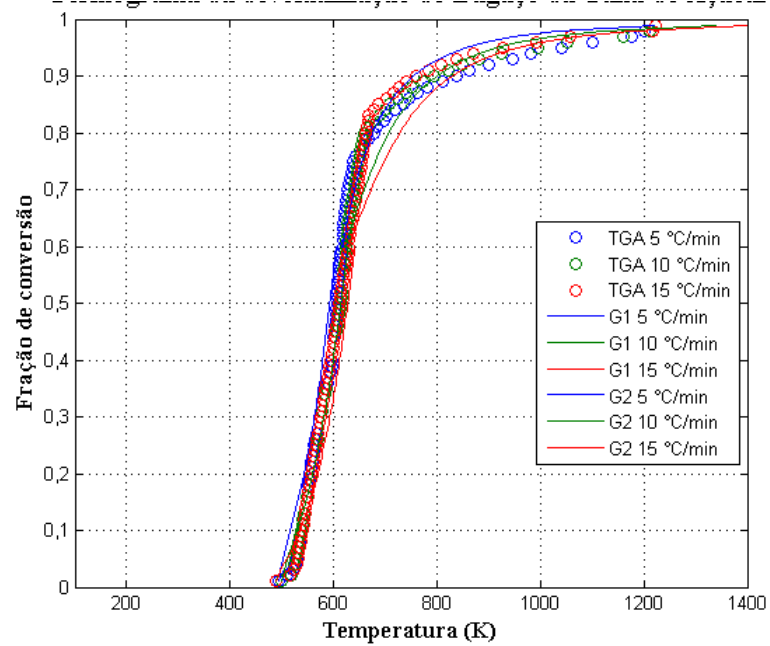
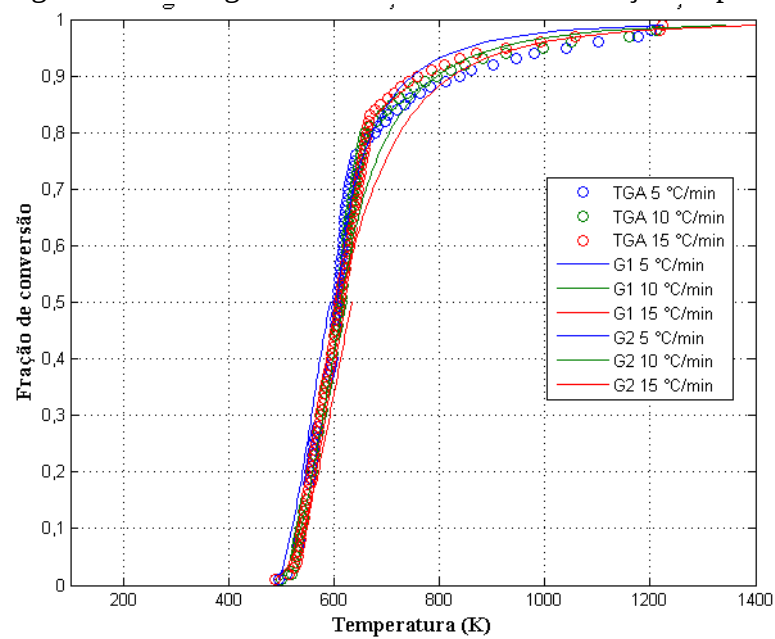


Figura 9 - Termograma e modelo da devolatilização da palha



Capítulo 3

MODELAGEM NUMÉRICA DO SISTEMA DE QUEIMA

Neste capítulo são mostrados detalhes da modelagem numérica da fornalha de uma caldeira CALDEMA AMD-58-6GI. Um esquema da caldeira pode ser visto na Figura 10 e algumas características podem ser vistas na Tabela 24. A modelagem foi desenvolvida a partir de uma discretização espacial das equações de conservação, empregando-se um conjunto de malhas hexaedras estruturadas multi-blocos. A discretização numérica das equações de conservação envolvidas na fase contínua (massa, momentum, energia, energia cinética turbulenta, taxa de dissipação turbulenta, radiação e transporte de espécies) e a sua interação com termos fontes de partículas atuando na fase dispersa foi obtida pelo método de volumes finitos empregando o aplicativo comercial ANSYS FLUENT R15.0[®]. Os ajustes do solver podem ser vistos no Apêndice F

Tabela 24 - Algumas características da caldeira AMD-58-6GI

Equipamento	Caldeira CALDEMA AMD-58-6GI
Quantidade de vapor	175000 <i>kg/h</i>
Quantidade de combustível	81478 <i>kg/h</i>
Quantidade de ar primário	122212 <i>kg/h</i>
Quantidade de ar secundário	150138 <i>kg/h</i>
Quantidade de ar pneumático	27926 <i>kg/h</i>
Pressão de operação no tubulão	72,2 <i>kgf/cm²</i>
Temperatura de vapor saturado	286°C
Temperatura de vapor superaquecido	490°C

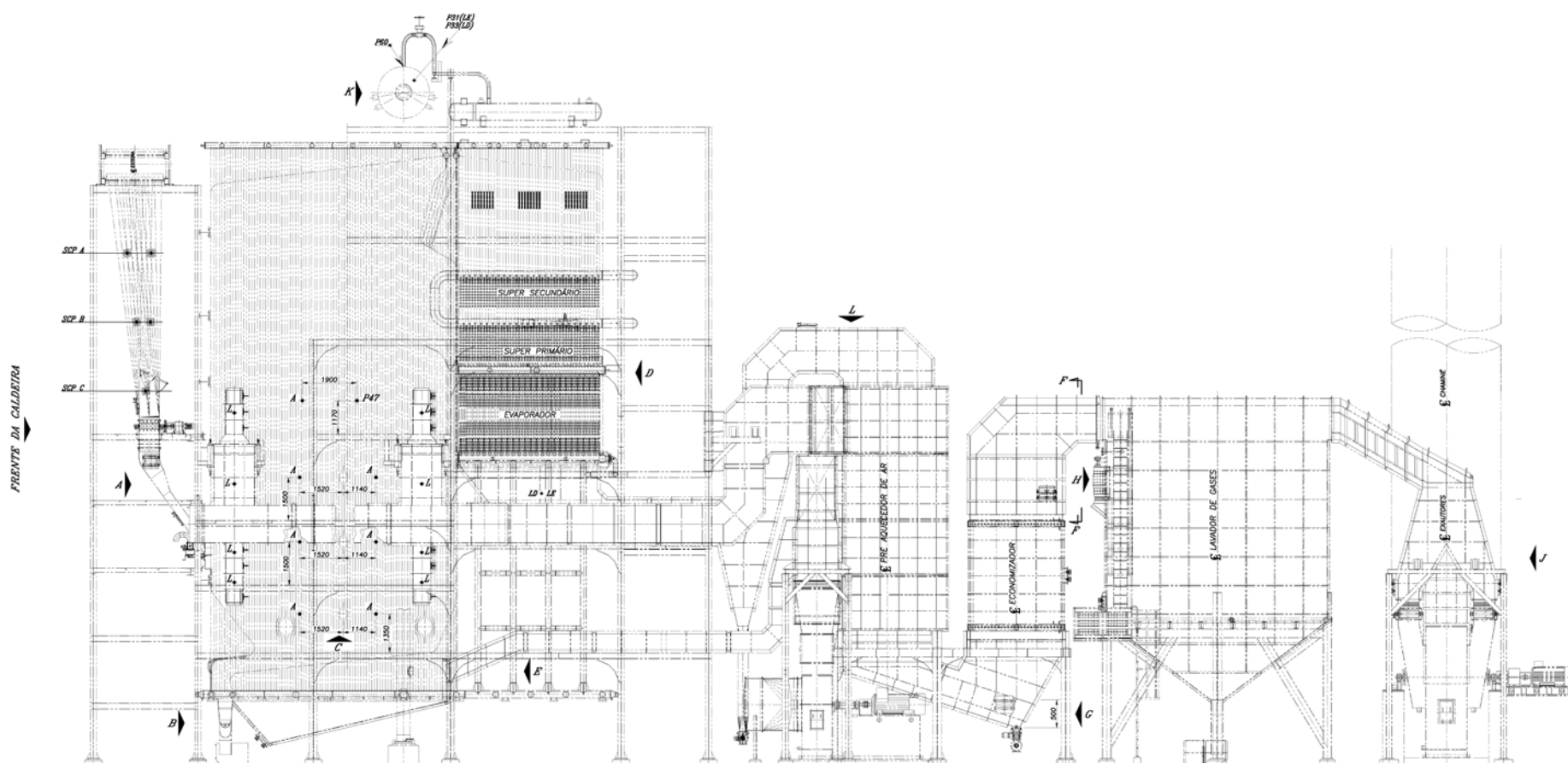


Figura 10 – Esquema da caldeira CALDEMA AMD-58-6GI

3.1 MODELO GEOMÉTRICO

A geometria da fornalha foi reproduzida no aplicativo comercial SolidWorks 2013[®] como mostra na Figura 11. A fornalha consiste de:

- Seis entradas de biomassa na parede frontal, cada uma com a sua respectiva entrada de ar pneumático na parte inferior;
- 40 entradas de ar secundário, distribuídas em grupos de 10 entradas, situado cada grupo nos extremos frontal e traseiro das paredes laterais;
- Uma Grelha PHC (Pin Hole Contínua) que distribui o ar primário;
- Uma entrada de ar primário na parede traseira, justo abaixo a grelha;
- Uma saída de gases na parte superior da parede traseira.

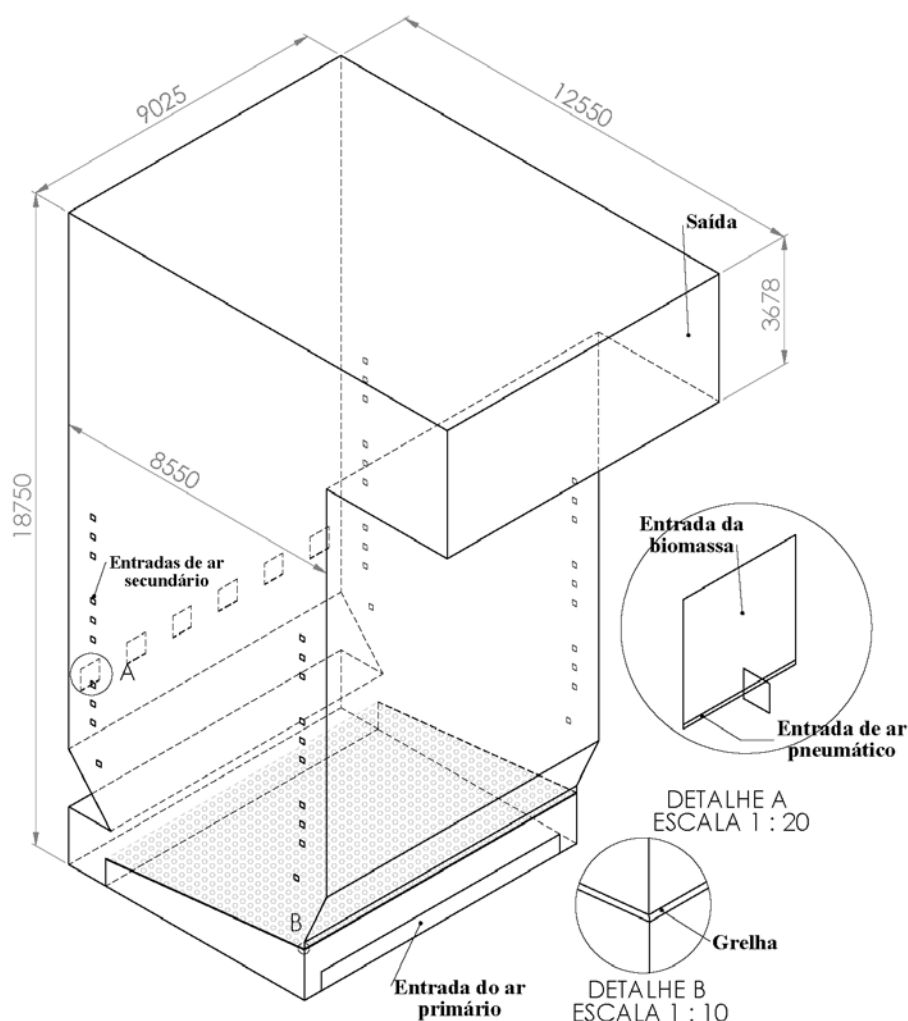


Figura 11 – Descrição da geometria da fornalha em SolidWorks

A geometria em SolidWorks® foi importada para o aplicativo comercial ANSYS ICEM CFD 15.0® como pode ser visto na Figura 12.

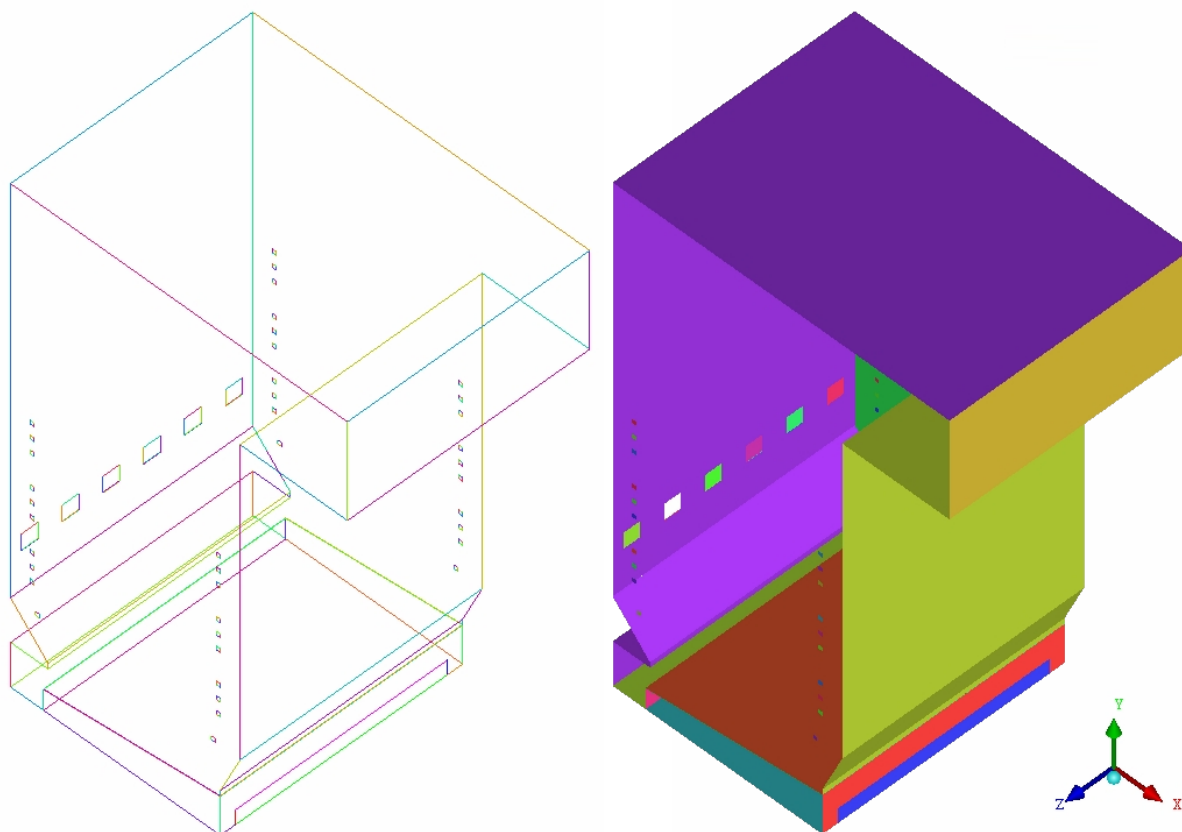


Figura 12 – Geometria da fornalha em ICEM CFD

3.2 DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL - MALHA

A geometria da fornalha foi discretizada a partir da malha obtida com o aplicativo ICEM CFD®. Visando um controle mais preciso do número de nós e elementos, a discretização do domínio foi feita empregando-se um conjunto de malhas hexaedras estruturadas multi-blocos como mostrado na Figura 13. Esta discretização consiste de dois domínios:

- Um domínio de meio poroso representando a grelha, e
- Um domínio fluido, o qual é composto de duas regiões, um sobre e outro na parte inferior da grelha.

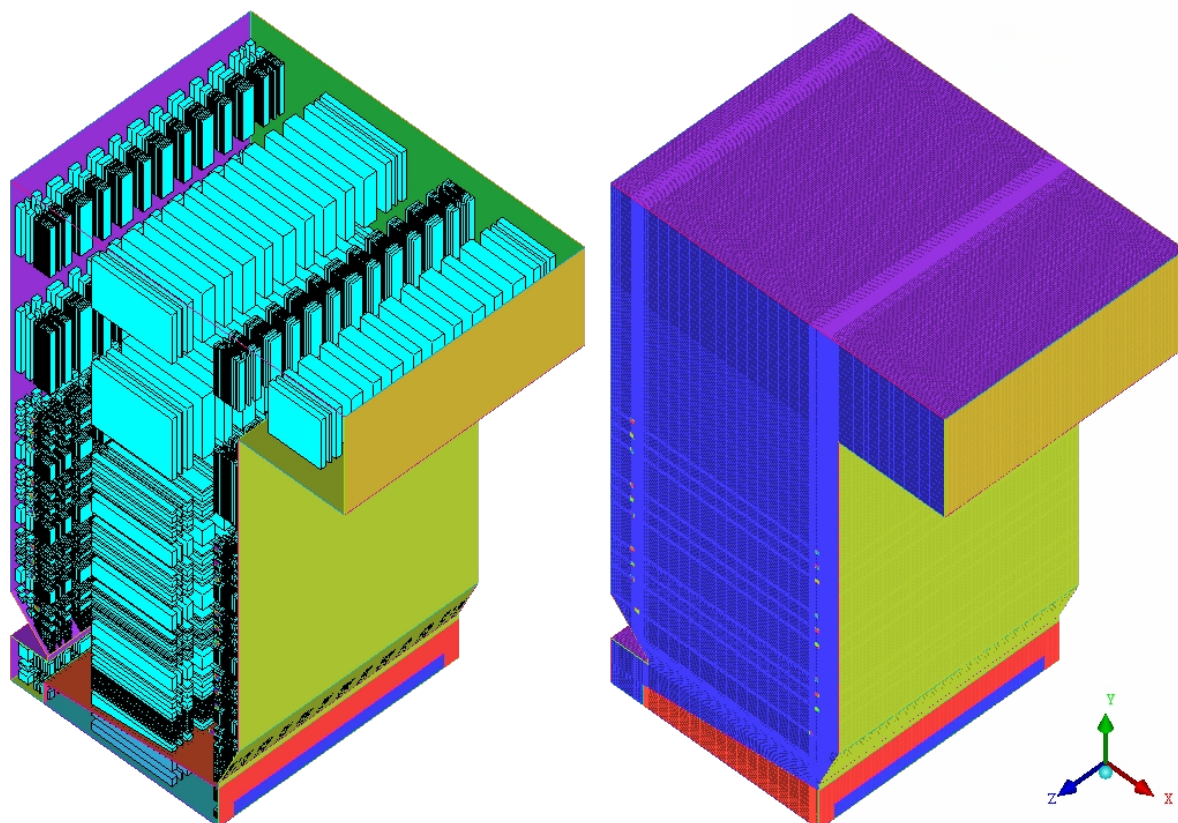


Figura 13 – Discretização do domínio da fornalha

Algumas estatísticas da malha de acordo com o reporte de ANSYS FLUENT são:

Extensão do domínio:

Coordenada-x: min (m) = -6.242057×10^{-3} , max (m) = 1.254376×10^1

Coordenada-y: min (m) = $-6.314393 \times 10^{-16}$, max (m) = 1.875000×10^1

Coordenada-z: min (m) = -3.917003×10^{-8} , max (m) = 9.025000×10^0

Estatísticas de volumes:

Volume mínimo (m³): 1.785356×10^{-6}

Volume máximo (m³): 2.496920×10^{-3}

Volume total (m³): 1.551185×10^3

Estatísticas de área:

Área mínima (m²): 3.347666×10^{-5}

Área máxima (m²): 3.799628×10^{-2}

Qualidade da malha:

Qualidade ortogonal rangos de 0 a 1, onde valores perto de 0 correspondem a baixa qualidade.

Qualidade ortogonal mínima = 4.25236×10^{-1}

Relação de aspeto máxima = 4.04004×10^1

3.2.1 Grelha

A grelha da fornalha consiste de um conjunto de 3348 (93x36) placas Pin Hole Contínuas (PHC). Cada placa possui 12 furos de 7 mm de diâmetro como mostra na Figura 14, resultando em um total de 40176 furos na grelha.

A discretização da geometria real da grelha no domínio da fornalha representa um problema importante visto que a representação do total dos furos requer um número muito grande de nós, levando a um valor excessivo de necessidade de memória. Porém, a supressão da grelha no domínio, não é a melhor opção visto que a grande quantidade de furos de pequenas dimensões representa um efeito importante na queda de pressão, em função da quantidade de ar primário injetado na fornalha e isto pode estar relacionado com a quantidade de biomassa a ser queimada sobre a grelha.

Para enfrentar o problema descrito acima, foi reproduzida a geometria correspondente a uma das placas da grelha, sendo feita a sua discretização espacial isolada, empregando-se um conjunto de malhas hexaedras estruturadas multi-blocos como mostra na Figura 14. O domínio desta única placa consiste de 2.030.664 nós.

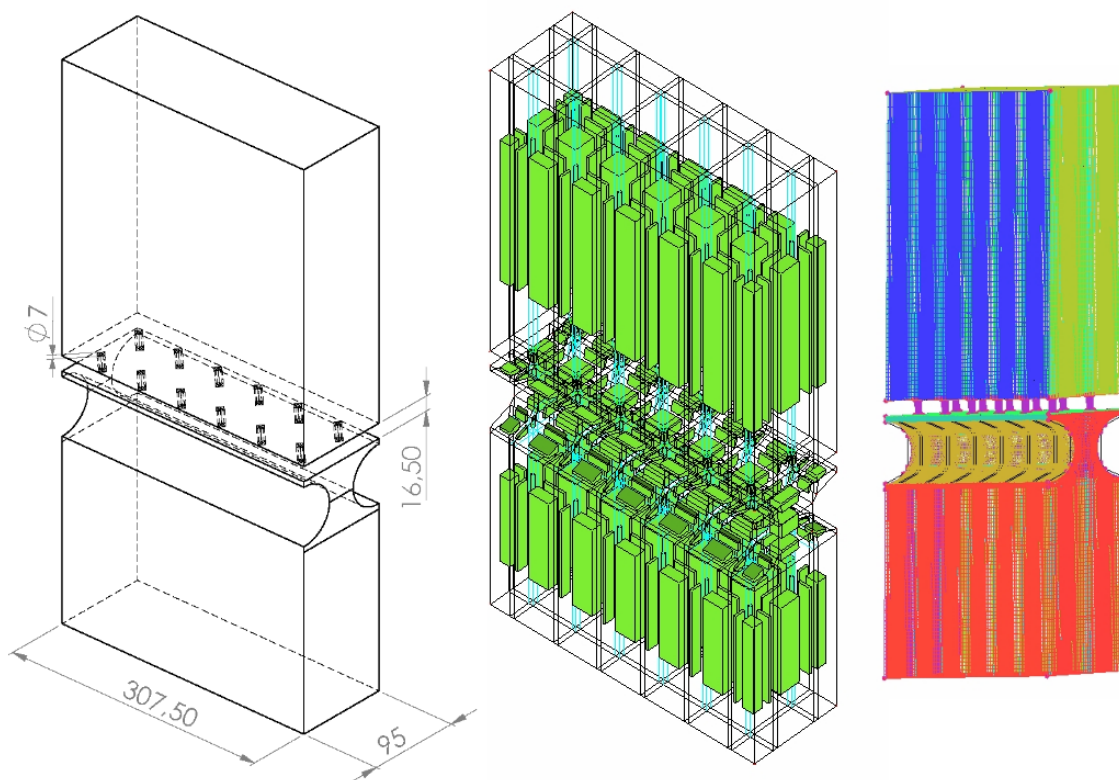


Figura 14 – Discretização do domínio da placa de grelha com furos

Mediante a análise CFD no aplicativo ANSYS FLUENT 15.0[®], foi verificada a queda de pressão com variação da velocidade de entrada. Por exemplo, a Figura 15 mostra um gráfico de velocidades para o caso no qual a velocidade de entrada foi de 0,394 m/s (Caso 3) e a Figura 16 mostra o respectivo gráfico de pressão. As quedas de pressão determinadas pelo CFD para os diversos casos estudados podem ser vistas na Tabela 25. Uma sub-rotina de códigos foi programada em MATLAB (ver Apêndice B) para processar os dados dos diversos casos de pressão e velocidade, resultando nos termos necessários para definir a equação do meio poroso (equação (A.4) no apêndice)

Tabela 25 - Casos estudados na placa de grelha

Caso	Velocidade (m/s)	Queda de pressão (Pa)
1	0,131	85,56
2	0,263	331,00
3	0,394	729,84
4	0,525	1.273,29
5	0,657	1.985,75
6	0,788	2.828,72

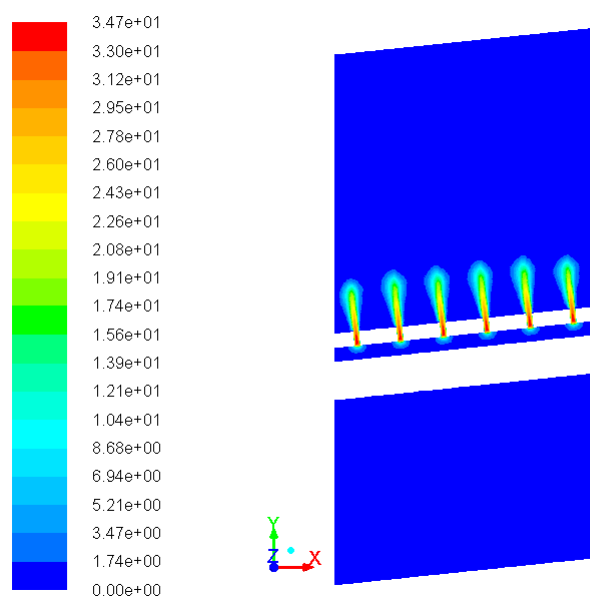


Figura 15 – Contorno de velocidade da grade isolada (Caso 3)

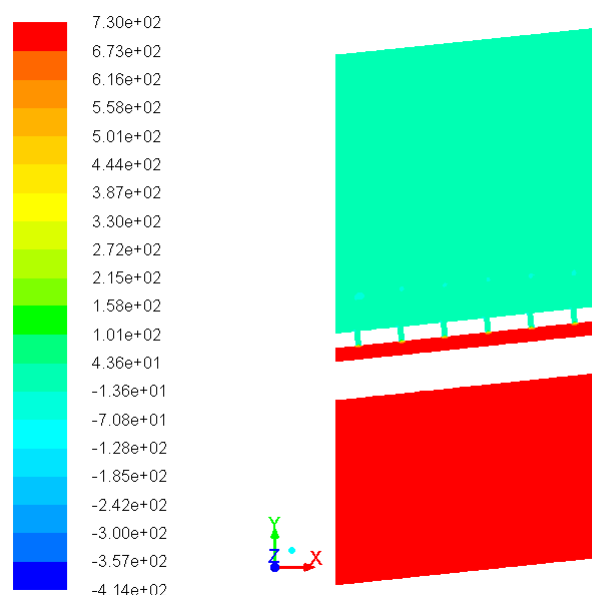


Figura 16 – Contornos de pressão estática da grade isolada (Caso 3)

A Figura 17 mostra a pressão em diversos pontos ao longo de uma linha vertical que atravessa o centro do modelo da grade isolada. Observam-se as quedas de pressão para os diversos casos estudados de velocidades de entrada de ar. O ajuste destes dados a uma equação quadrática é feito pelo código programado em MATLAB, sendo mostrado na Figura 18.

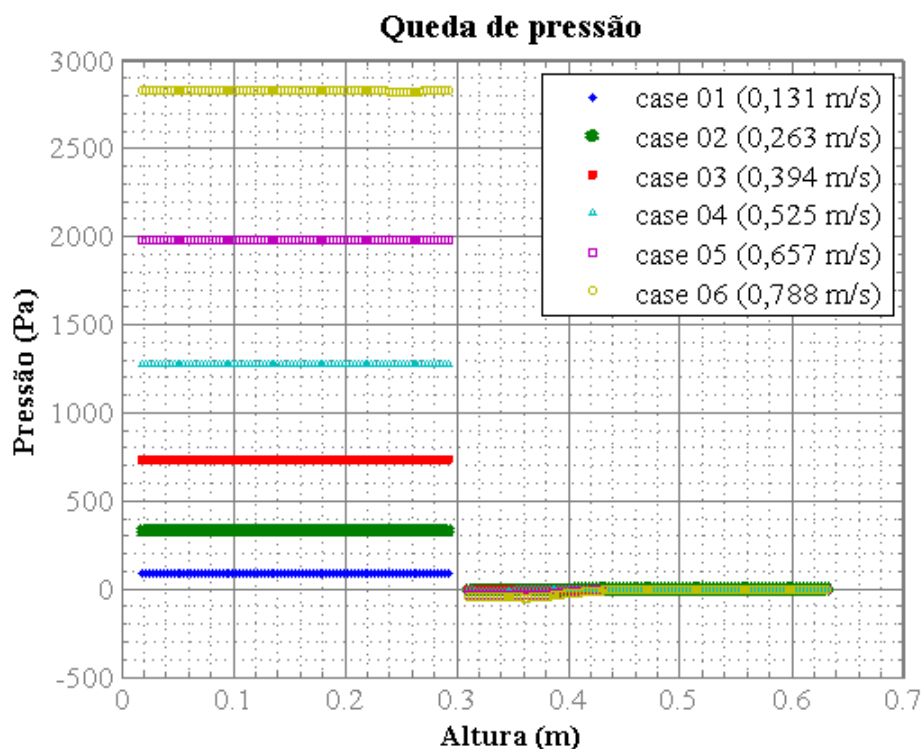


Figura 17 – Pressão em diversos pontos ao longo de uma linha vertical que atravessa o centro do modelo da grade isolada - todos os casos

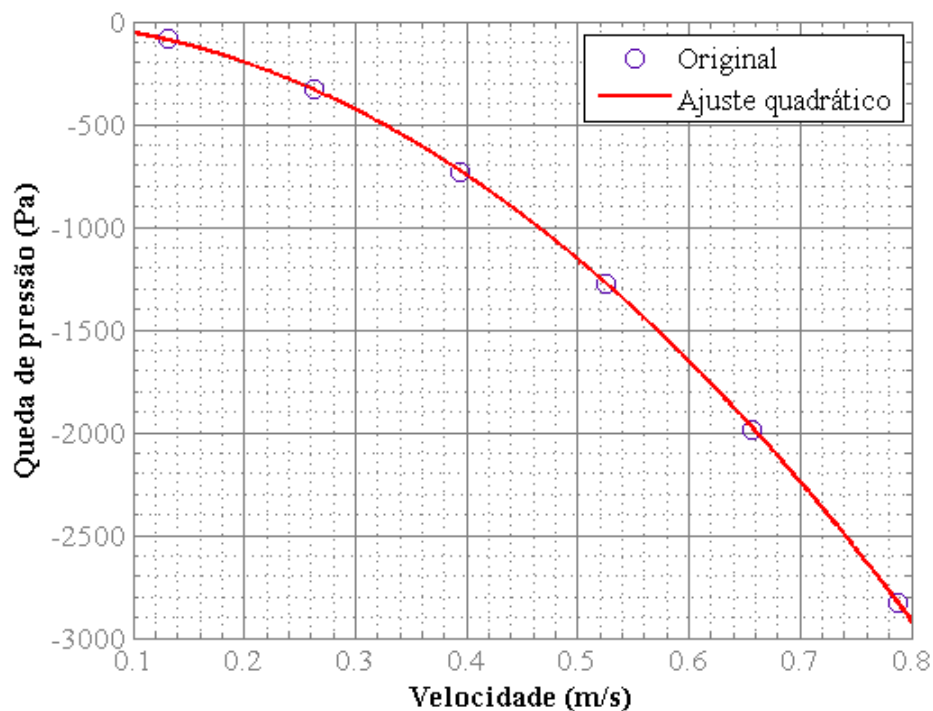


Figura 18 – Ajuste dos dados de queda de pressão a uma equação quadrática

O código em MATLAB da como resultado os parâmetros da equação do meio poroso (equação (A.4) no apêndice) e são apresentados da Tabela 26 até a Tabela 29.

Tabela 26 - Vetor direção 1 (vetor unitário na direção dos furos)

X	-0.103
Y	0.994
Z	0

Tabela 27 - Vetor direção 2 (perpendicular ao vetor direção 1)

X	0
Y	0
Z	1

Tabela 28 - Resistência viscosa (D [$1/m^2$])

Direção 1	$0,003308576584771 \times 10^{11}$
Direção 2	$3,308576584770919 \times 10^{11}$
Direção 3	$3,308576584770919 \times 10^{11}$

Tabela 29 - Resistência inercial (D [$1/m$])

Direção 1	$0,004514546105153 \times 10^8$
Direção 2	$4,514546105152668 \times 10^8$
Direção 3	$4,514546105152668 \times 10^8$

Para verificar os dados calculados com MATLAB novamente foi reproduzida a geometria correspondente a uma placa da grelha. Neste caso foi substituída a geometria dos furos da grelha por um meio poroso e foi feita a sua respectiva discretização espacial empregando-se um conjunto de malhas estruturadas multi-blocos como mostra na Figura 19. O domínio desta única placa consiste de 436.000 nós.

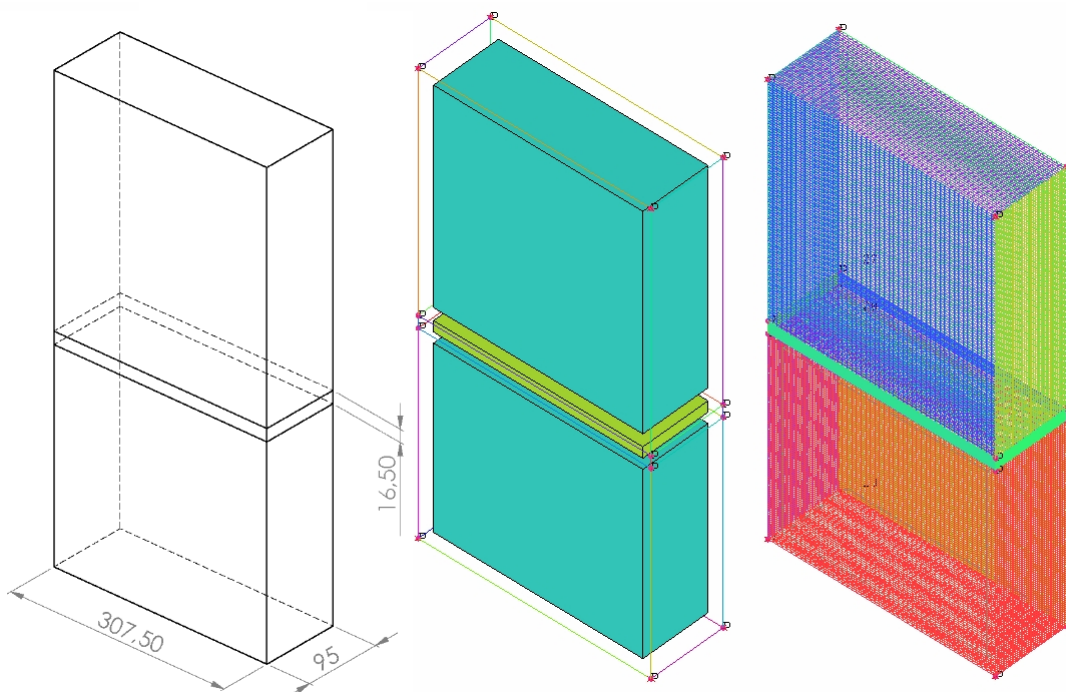


Figura 19 – Discretização do domínio da placa de grelha com meio poroso

Mediante a análise CFD no aplicativo ANSYS FLUENT 15.0[®] foi verificada a queda de pressão variando a velocidade de entrada para os mesmo casos apresentados na Tabela 25. Os resultados de queda de pressão foram comparados, verificando assim que o modelo de meio poroso pode substituir o efeito da geometria dos furos. Para efeito de comparação, a Figura 20 mostra o gráfico de pressão equivalente ao gráfico mostrado na Figura 16.

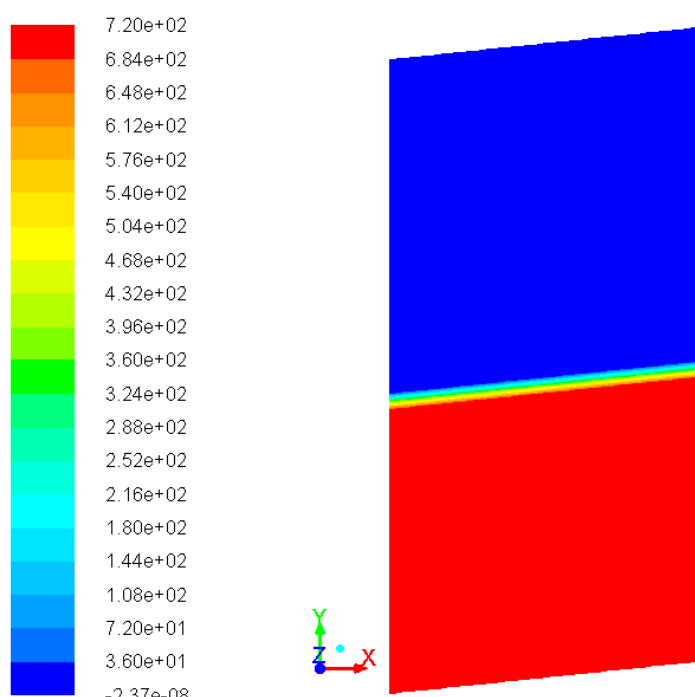


Figura 20 – Contornos de pressão estática da placa de grelha com meio poroso (Pa) - Caso 3

A técnica descrita acima, utilizada para a análise da grelha foi definida análogo a aquela utilizada no trabalho de Gan e Riffat (1997), que validaram com dados experimentais dados de quedas de pressão em placas perfuradas obtidos por CFD no aplicativo ANSYS FLUENT.

3.2.1.1 Discretização final da grelha

A Figura 21 mostra uma ampliação perto da grelha para observar o domínio correspondente à grelha, já a Figura 22 mostra a malha hexaédrica discretizando a grelha. É importante observar neste ponto que o meio poroso representando a grelha permite uma supressão importante de nós, o qual viabiliza o cálculo do efeito da grelha sem a necessidade de representar a geometria dos furos.

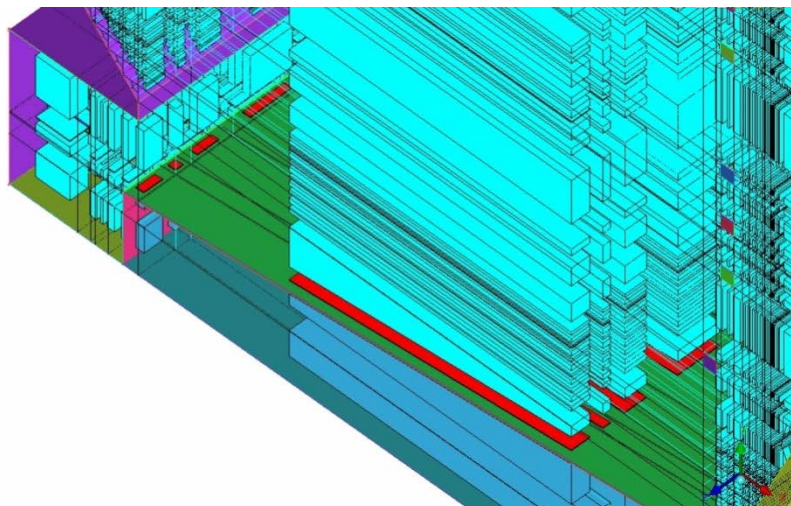


Figura 21 – Blocos no domínio da grelha na fornalha

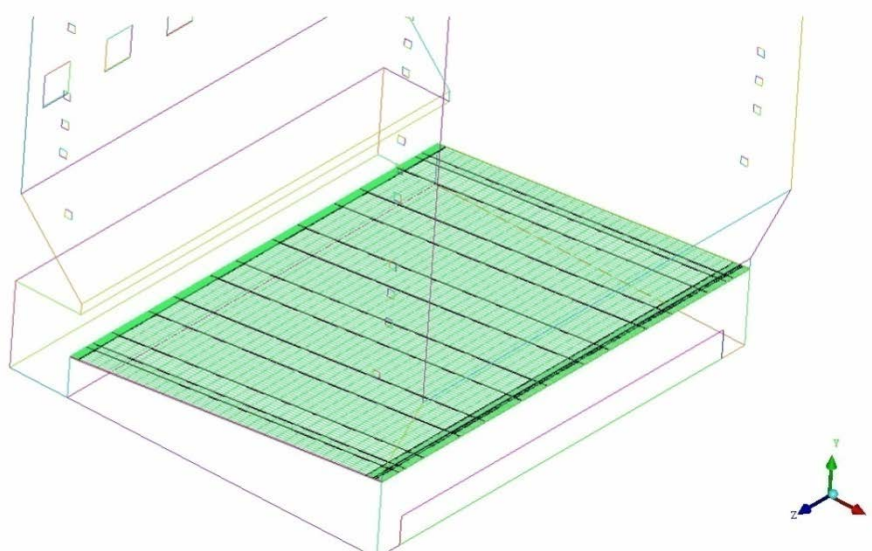


Figura 22 – Malha da grelha na fornalha (meio poroso)

3.3 MODELAGEM POR CFD

Foi empregado o aplicativo ANSYS FLUENT R15.0 para a modelagem numérica da fornalha. Trata-se de uma "combustão não pré-misturada", onde a biomassa combustível e o oxidante entram na zona de reação em correntes diferentes. O modelo considera uma fase contínua de gases reagindo e uma fase discreta de partículas de combustível submersas na

fase contínua definindo as posições das fontes de massa e calor na medida em que elas percorrem as suas trajetórias.

3.3.1 Modelando a fase contínua

A fase contínua considera-se uma mistura de gases, sendo consideradas seis espécies (voláteis, O_2 , CO_2 , H_2O , CO e N_2), foi solucionada a equação de conservação da massa ou equação da continuidade, assim como também equações de conservação para cinco das seis espécies, excetuando o nitrogênio que é calculado por diferença. Visto que a fornalha opera a pressão constante igual à atmosférica e então visto que a densidade dos gases muda apenas como uma função da temperatura, foi considerada a equação de estado para gases ideais incompressíveis. Visto que se trata de um caso de combustão turbulenta não-premisturada, onde o combustível e o oxidante ingressam em correntes separadas e a turbulência mistura e levam eles até as zonas de reação onde reagem rapidamente, foi selecionado o modelo de transporte de espécies por dissipação por vórtices.

Naturalmente, foi levada em conta também a conservação da quantidade de movimento, e a modelagem da turbulência é feita empregando o modelo $k - \varepsilon$ standard. Foi levada em conta também a conservação da energia, onde a modelagem da radiação foi feita pelo modelo de ordenadas discretas, um dos quais permite incluir o efeito de uma fase discreta sobre o meio contínuo.

3.3.2 Modelando a fase discreta

Considera-se que o combustível é um conjunto de partículas que possuem uma distribuição de tamanhos. Sendo assim, e visando facilitar o pós-processamento dos resultados, para cada entrada de biomassa foram considerados doze tamanhos diferentes de partículas como injeções separadas. Partículas do combustível se movimentam submersas no meio contínuo passando por uma trajetória definida pela integração do balanço das forças sobre a partícula, e na medida em que estas percorrem seu trajeto, acontecem fenômenos de troca de massa e calor entre elas e o meio contínuo. Estes fenômenos definem as posições de fontes de massa (espécies) e energia no meio contínuo.

Os fenômenos de troca de calor e massa considerados foram: Aquecimento/resfriamento inerte, secagem (podendo ser por evaporação ou ebulição), devolatilização sendo definida por

uma UDF (Função definida pelo usuário) e por fim combustão do carbono e aquecimento/resfriamento das cinzas.

Caso as condições para uma determinada partícula sejam tais que esta consegue atingir a superfície da grelha, irá permanecer nessa posição, liberando seu conteúdo de umidade e voláteis, liberando CO_2 e consumindo O_2 devido à combustão do char, assim como liberando ou absorvendo as respectivas parcelas de energia de cada um destes processos.

A Tabela 30 mostra um resumo de todos os modelos utilizados tanto na definição da fase contínua como na da fase discreta.

Tabela 30 - Modelos utilizados na simulação da fornalha

Fase	Modelos		Equação no apêndice
Fase Contínua (Abordagem Euleriana)	Gases	Conservação da massa	(A.1)
		Conservação do momentum	(A.2)
		Conservação da energia	(A.5)
		Viscosidade: k-epsilon standard	(A.19), (A.20)
		Radiação por ordenadas discretas	(A.23)
		Equação de estado de gás ideal incompressível	(A.10)
		Transporte de espécies por dissipação por vórtices	(A.12)
	Grelha	Momentum para meio poroso (grelha)	(A.4)
		Fontes de massa (espécies) e energia	UDF
Fase Discreta (Abordagem Lagrangeana)	Movimento das partículas	Balanço de forças da partícula	(A.29)
	Troca de calor e massa	Aquecimento/resfriamento inerte	(A.41)
		Secagem (vaporização e ebulição)	(A.51), (A.54), (A.57)
		Devolatilização	UDF
		Combustão na superfície: Modelo de taxa limitada por difusão	(A.71), (A.72), (A.76)

3.4 ESTRATÉGIA DE SOLUÇÃO DO MODELO

Obter uma solução convergida na modelagem de fluxos combustíveis pode ser difícil por muitas razões, neste tipo de fluxos é preciso ajudar a acelerar a convergência e melhorar a estabilidade. Para isto, foi definida uma sequência de passos, onde a idéia é sempre em cada passo obter uma solução parcial que seja um bom ponto de partida para o seguinte passo até incluir todas as condições do problema global e obter uma solução final convergida.

Passo 1: Configuração do problema

São configuradas todas as condições da simulação final

Passo 2: Fluxo frio, não-reativo e sem radiação

É desativado o cálculo da radiação, assim como também o das reações, se obtém uma solução para o fluxo frio (na temperatura de entrada das correntes de ar oxidante), ainda sem incluir correntes de combustíveis.

Passo 3: Iniciar o fluxo reativo sem radiação

Partindo da solução do passo anterior, inicialmente são definidas manualmente regiões com alta temperatura e concentração de produtos, visando iniciar a troca de massa e calor entre as partículas de combustível e o meio contínuo, assim como também as reações entre os gases neste último. O cálculo das reações é reativado.

Passo 4: Fluxo reativo com radiação entre gases e paredes

É reativado o cálculo da radiação, mas ainda sem incluir o efeito da fase discreta sobre a radiação.

Passo 5: fluxo incluindo a interação das partículas com a radiação

Finalmente deve ser ativada a interação das partículas com a radiação e realizar várias iterações até obter a solução convergida.

Capítulo 4

CASO BASE E NOTAS SOBRE A CONFIABILIDADE DO MODELO

4.1 SETUP E CONDIÇÕES DE CONTORNO NO CASO BASE

Para testar a confiabilidade do modelo foi configurada uma simulação para queima de bagaço numa caldeira CALDEMA AMD-58-6GI nas condições de operação fornecidas pelo fabricante, algumas destas condições são resumidas na Tabela 24, outros detalhes das condições de contorno no caso base podem ser vistas no reporte resumido disponível no Apêndice F.

No caso base foi simulada a combustão de bagaço com 50% de umidade, a composição aproximada do combustível seco é mostrada na Tabela 31 onde optou-se por não apresentar a umidade visto que as frações dos constituintes secos são fixas e a umidade muda de acordo com a condição simulada, já na Tabela 32 é mostrada a composição elementar seca e livre de cinzas. Os fluxos totais de ar e combustível e suas respectivas temperaturas nas condições da simulação são mostrados na Tabela 33.

Tabela 31 - Composição aproximada do bagaço seco

	Fração mássica (%)
Voláteis	81,76
Carbono fixo	16,48
Cinzas	1,76
Total	100.00

Tabela 32 - Composição Elemental seca e livre de cinzas no bagaço simulado

	Fração mássica (%)
Carbono	42,84
Hidrogênio	6,30
Oxigênio	43,96
Nitrogênio	6,90
Total	100,00

Tabela 33 - Fluxos de ar e bagaço na simulação do caso base

	Fluxo total (kg/h)	Temperatura (°C)
Biomassa	81478	25
Ar primário	122212	271
Ar secundário	150138	352
Ar pneumático	27926	271

4.2 RESULTADOS DO CASO BASE

A Figura 23 mostra contornos de temperatura na fornalha, observa-se nestes, regiões localizadas com altas temperaturas perto da grelha. Já a Figura 24 mostra os contornos de temperatura no plano de saída da fornalha onde se observam temperaturas ao redor dos 900°C coincidindo com a temperatura de projeto.

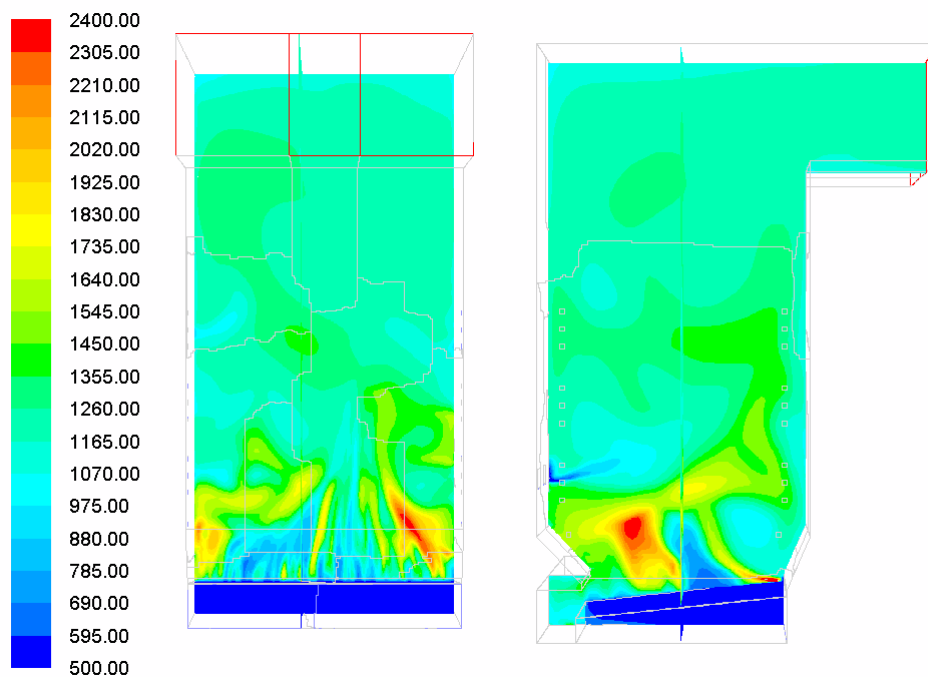


Figura 23 – Contornos de temperatura (K)

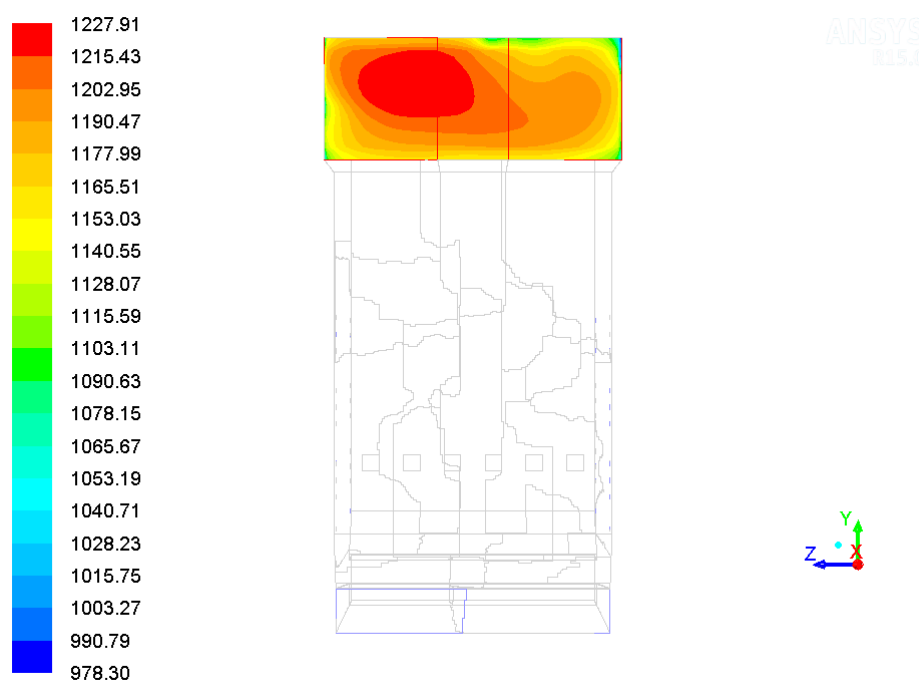


Figura 24 – Contornos de temperatura na saída (K)

A Figura 25 mostra contornos de fração mássica de dióxido de carbono, onde as maiores concentrações correspondem às zonas de reacção e as menores correspondem a regiões onde a fracção massica de oxidante é alta, por exemplo embaixo da grelha

onde somente tem ar sem presença de combustível e também em algumas regiões do interior da chama que se forma sobre a grelha, nestas últimas é onde está ingressando o ar primário distribuído pela grelha.

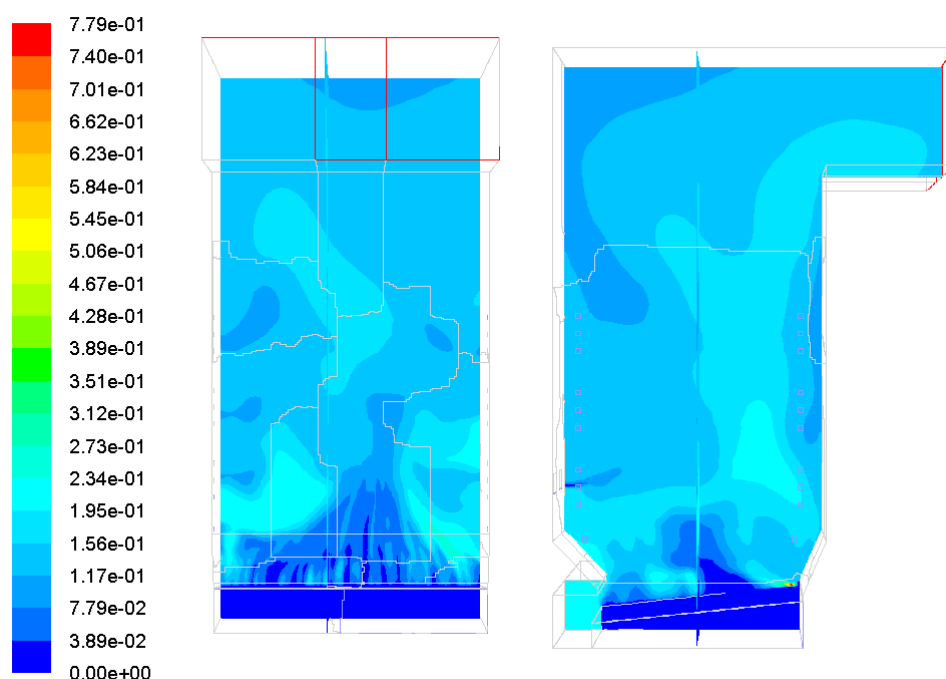


Figura 25 – Contornos de dióxido de carbono (fração mássica de CO_2)

A Figura 26 mostra contornos de nitrogênio, novamente as regiões onde a concentração é maior se correspondem com as entradas de ar, também se observa uma região em verde onde a concentração é a menor e coincide com uma das regiões onde tem falta de oxigênio segundo a Figura 28

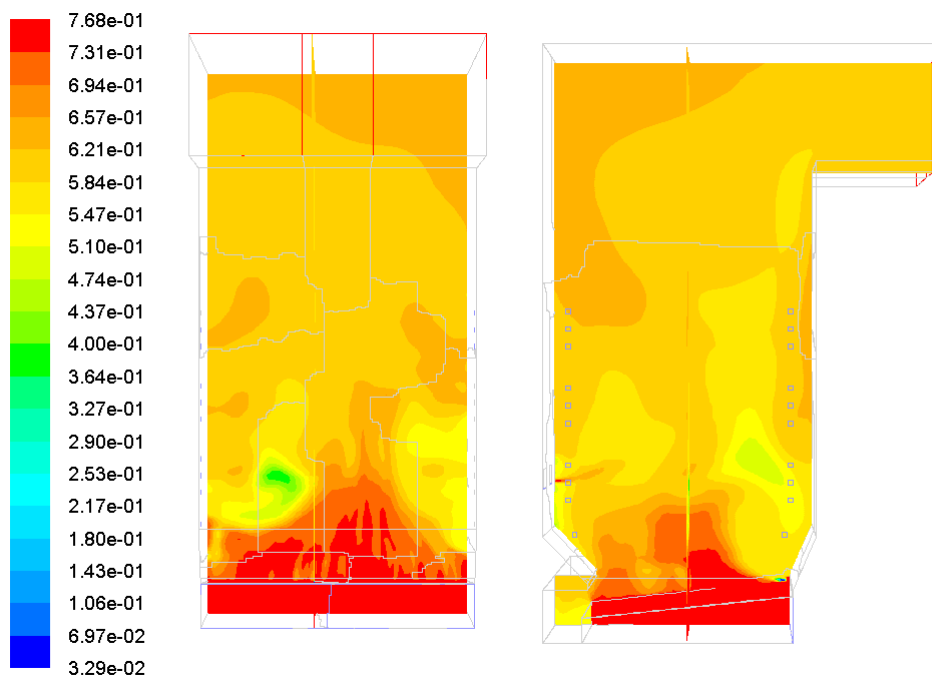


Figura 26 – Contornos de nitrogênio (fração mássica de N_2)

A Figura 27 mostra contornos de fração mássica de vapor d'água, as regiões com alta concentração podem ser influenciadas por ambas, pela liberação da umidade e pela combustão do hidrogênio nos voláteis.

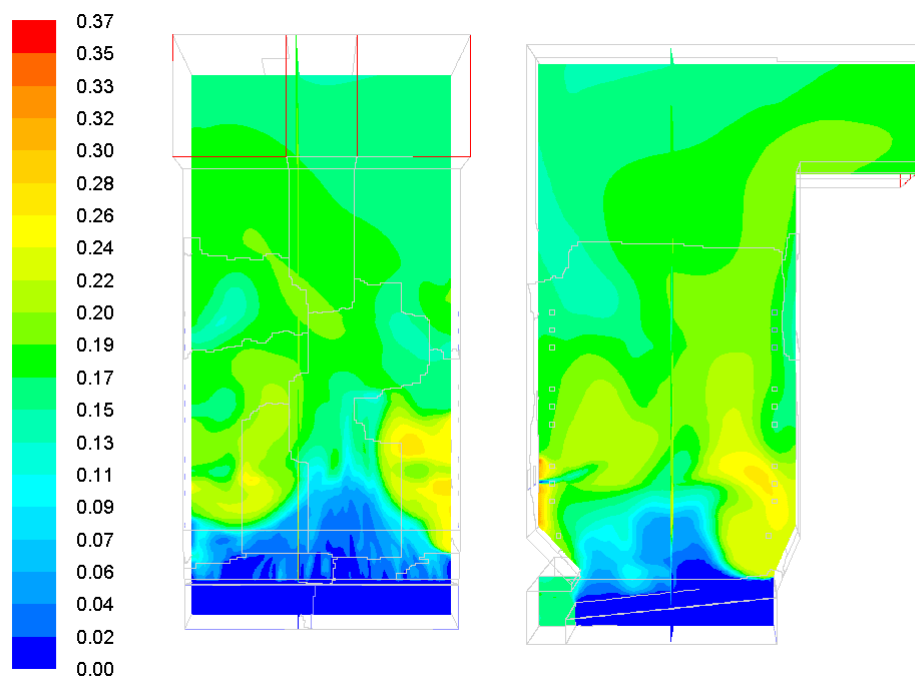


Figura 27 – Contornos de vapor d'água (fração mássica de H_2O)

Na Figura 28 são mostrados contornos de fração mássica de oxigênio e é possível observar nestes o formato de chama sobre a grelha. Neste, o oxidante ingressa no interior da chama e encontra-se/mixtura-se com o combustível gasoso (voláteis e monóxido de carbono) nas zonas de reação. Nesta figura é possível visualizar também regiões com falta de oxigênio, as quais serão melhor visualizadas pelas iso-superfícies da Figura 29 até a Figura 32. Pode-se inferir que o oxigênio que vem com o ar primário consome-se nas zonas de reação gerando o formato de chama e estas regiões com falta de oxigênio justo acima da chama.

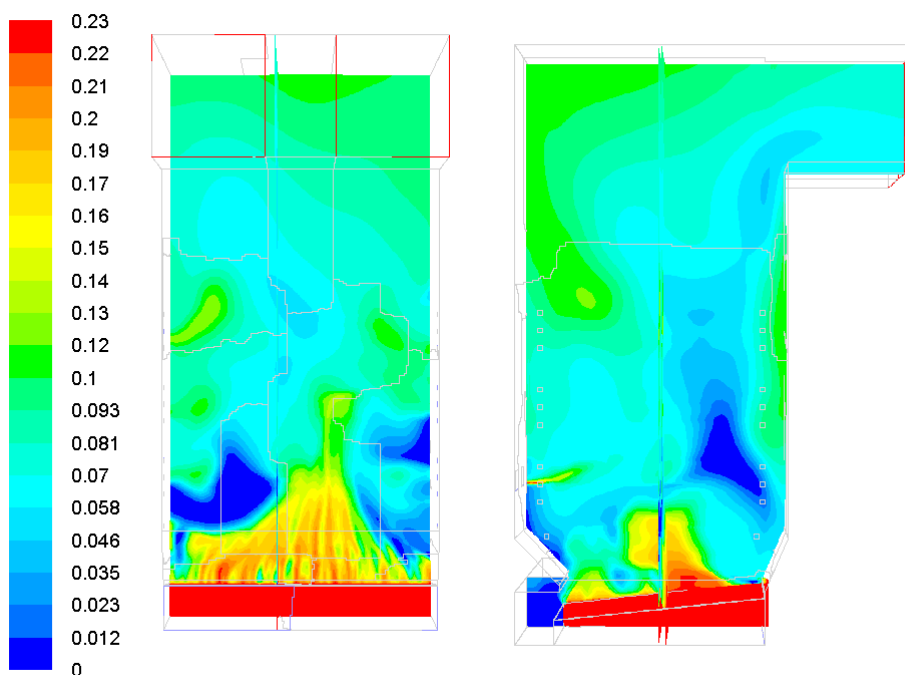


Figura 28 – Contornos de oxigênio (fração mássica de O_2)

Da Figura 29 até a Figura 32 são mostradas diversas vistas da iso-superfície demarcando regiões com falta de oxigênio, pode-se observar que estas regiões encontram-se principalmente na parte inferior da fornalha, o qual sugere que colocar entradas de ar secundário nestas regiões poderia melhorar a mistura de oxidante e voláteis.

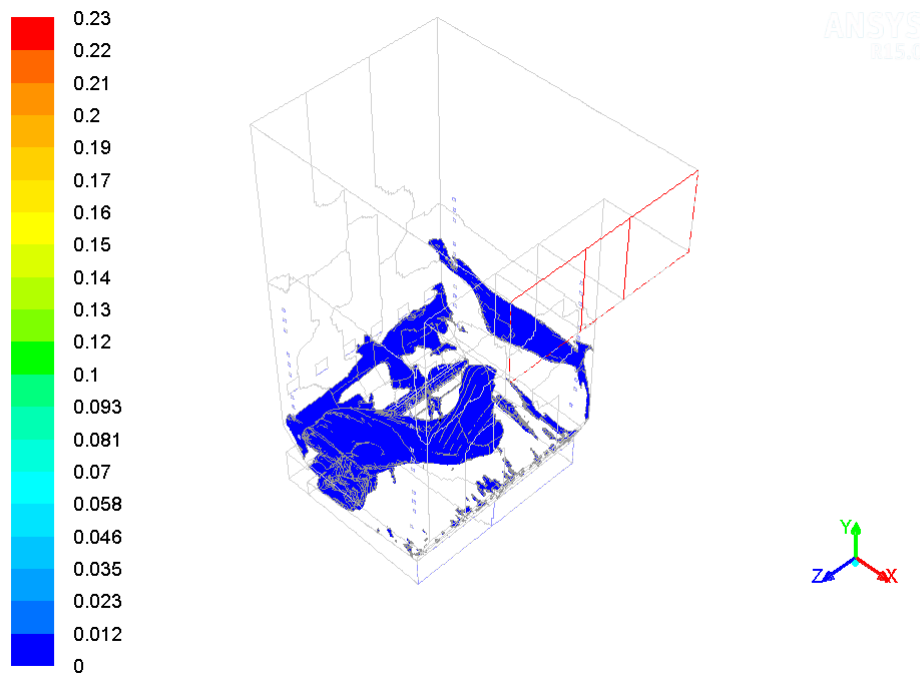


Figura 29 – Vista isométrica de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O_2) está próxima de zero

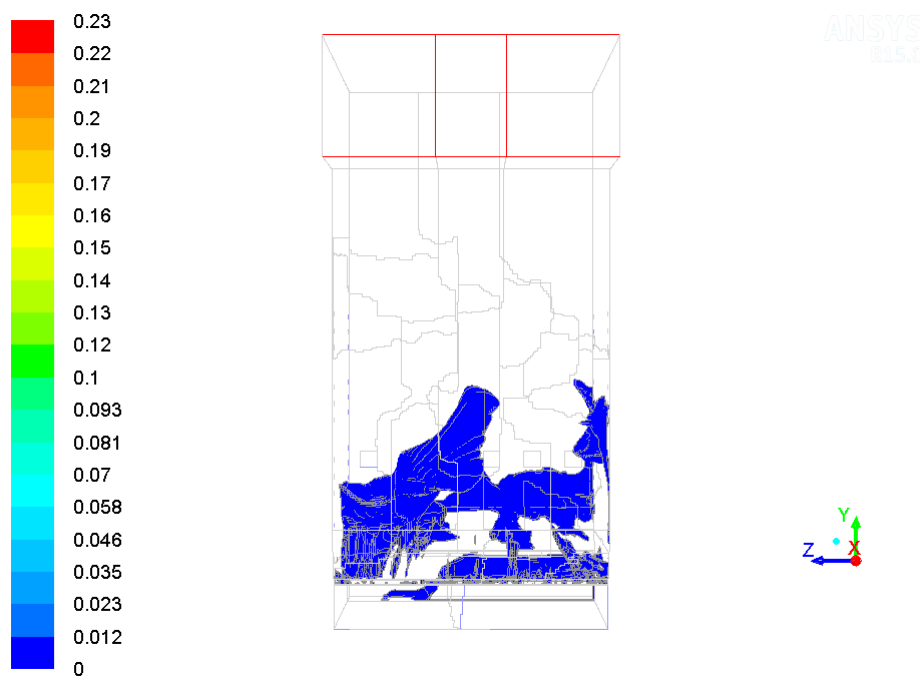


Figura 30 – Vista frontal de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O_2) está próxima de zero

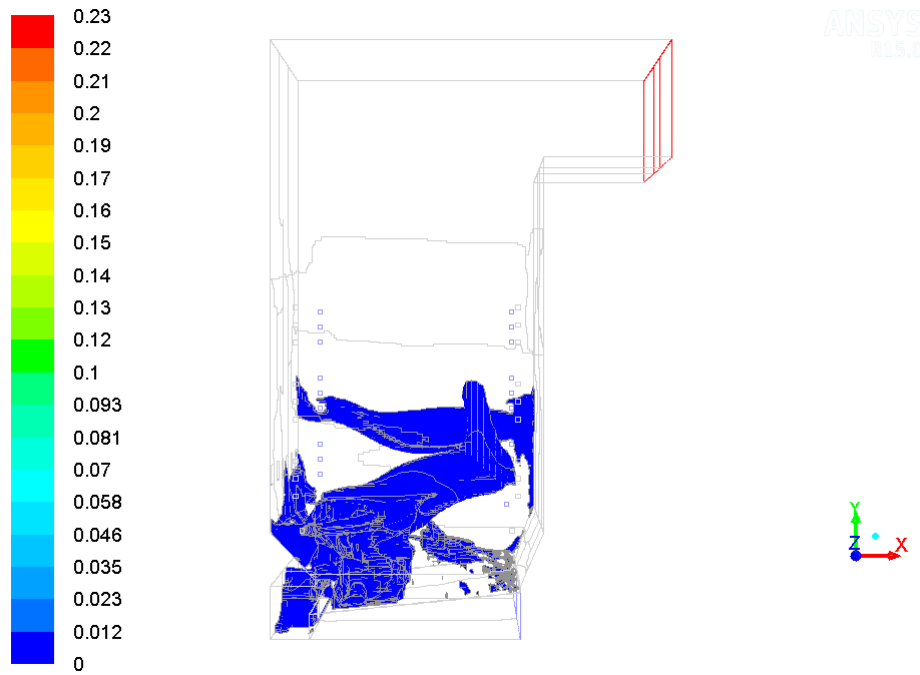


Figura 31 – Vista lateral de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio (O_2) está próxima de zero

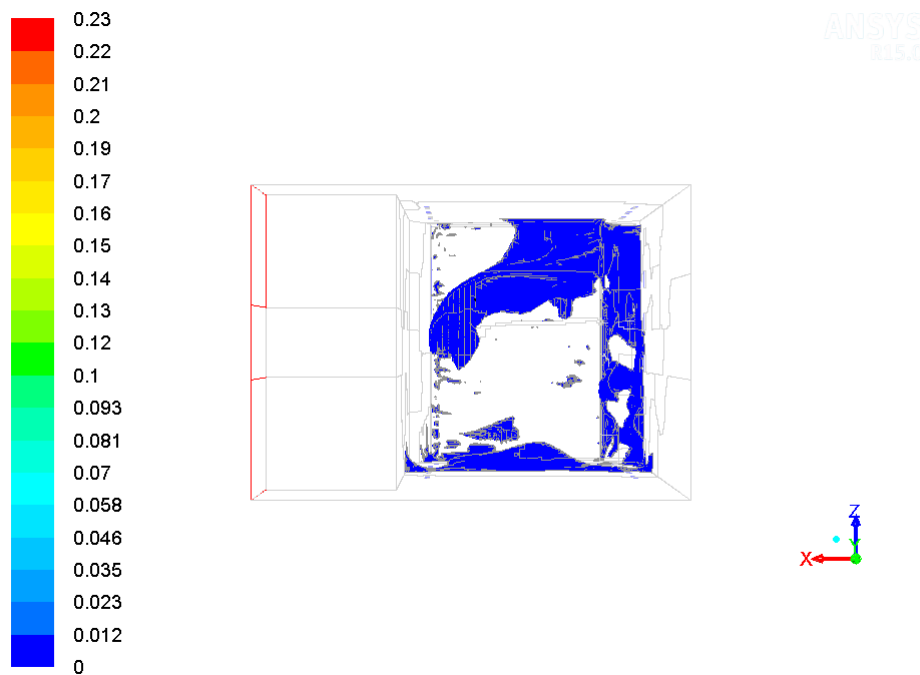


Figura 32 – Vista superior de iso-superfície ilustrando regiões onde a fração mássica de oxigênio está próxima de zero

Na Figura 33 e na Figura 34 são mostrados contornos de fontes de massa na grelha. Com estes é possível saber quais são os lugares preferenciais onde caem as partículas sobre a grelha.

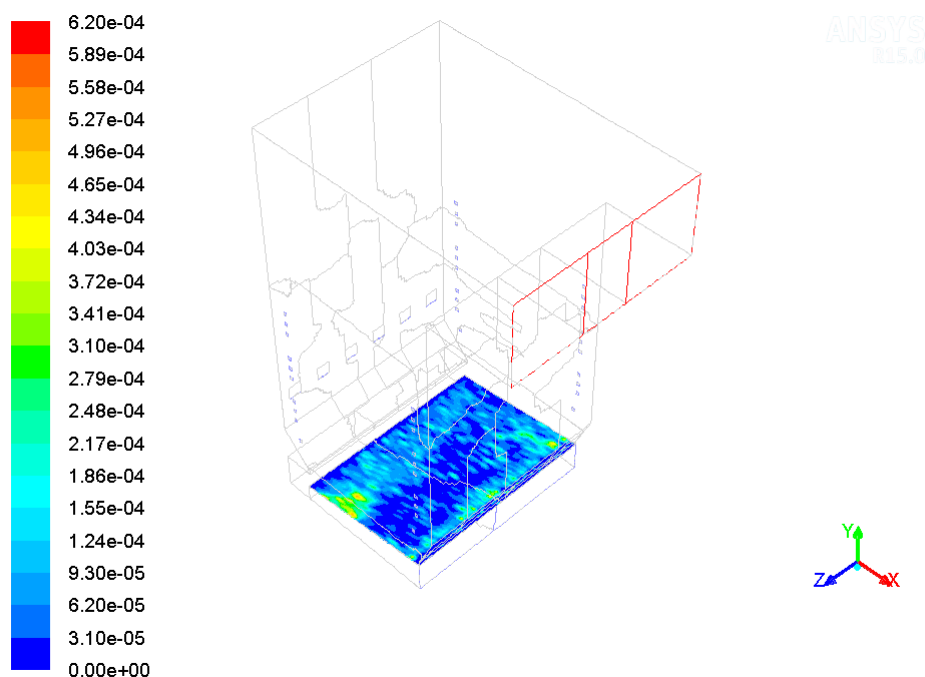


Figura 33 – Contornos de fontes de massa na grelha (kg/s)

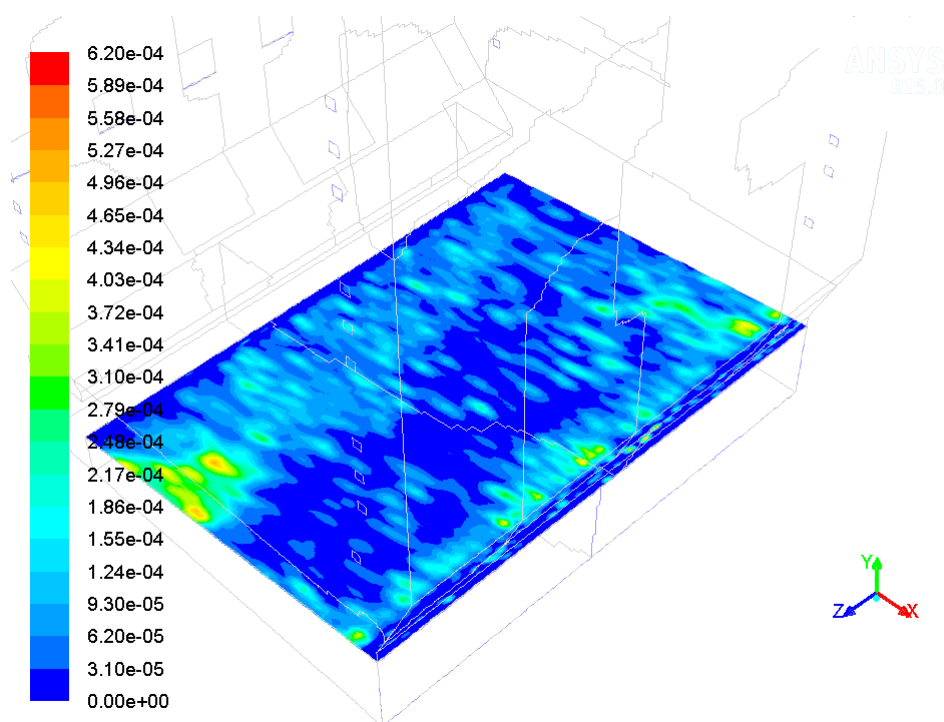


Figura 34 – Vista ampliada dos contornos de fonte de massa na grelha (kg/s)

Da Figura 35 até a Figura 46 é possível observar a trajetória das partículas de combustível coloridas pelos processos de transferência de massa e calor entre a partícula e o meio contínuo. Pode-se ver na escala que os processos considerados são: aquecimento inerte, secagem (podendo ser por vaporização ou ebulição), devolatilização e combustão do carbono fixo. Cada figura corresponde a uma injeção diferente, sendo que cada uma corresponde a um tamanho de partícula o qual vai aumentando da injeção 00 até a injeção 11.

Da Figura 35 até a Figura 46 algumas observações qualitativas podem ser feitas:

- As partículas maiores tendem a queimar-se na grelha e aquelas menores tendem a ser arrastadas até a saída;
- Em geral o processo de secagem acontece na parte inferior da fornalha, majoritariamente pelo fenômeno de vaporização;
- O processo de devolatilização encontra-se distribuído por todo o espaço da fornalha;
- É difícil observar a combustão do char nas trajetórias das partículas, o qual sugere que o processo acontece primariamente na grelha e parte do char é arrastada até a saída.



Figura 35 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 00 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

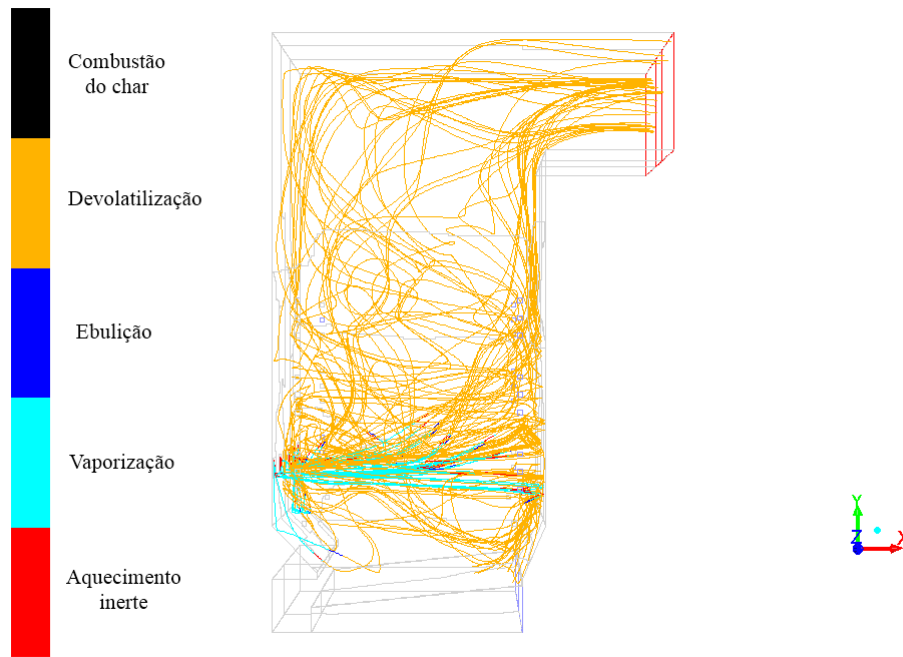


Figura 36 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 01 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

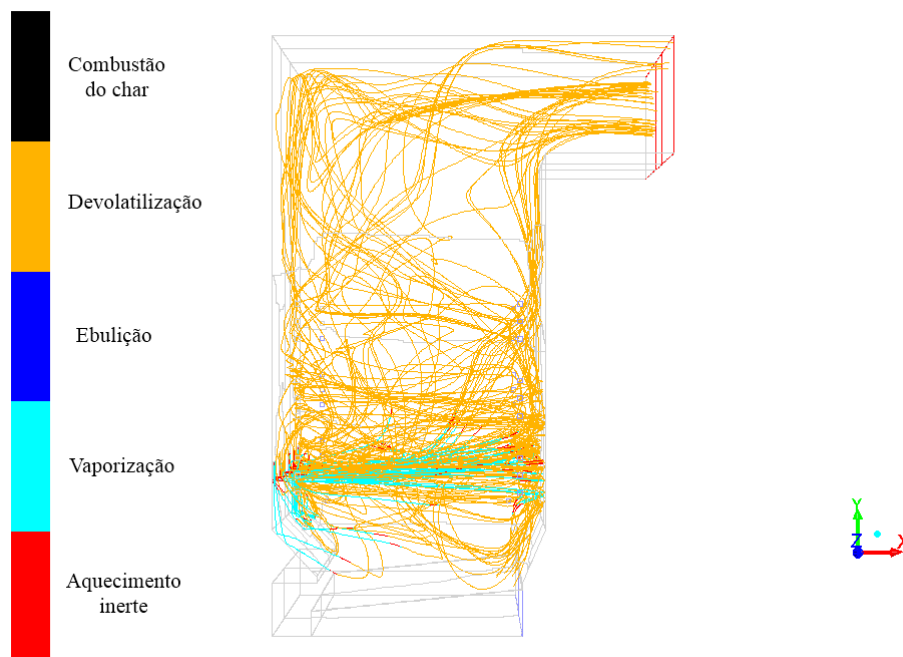


Figura 37 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 02 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

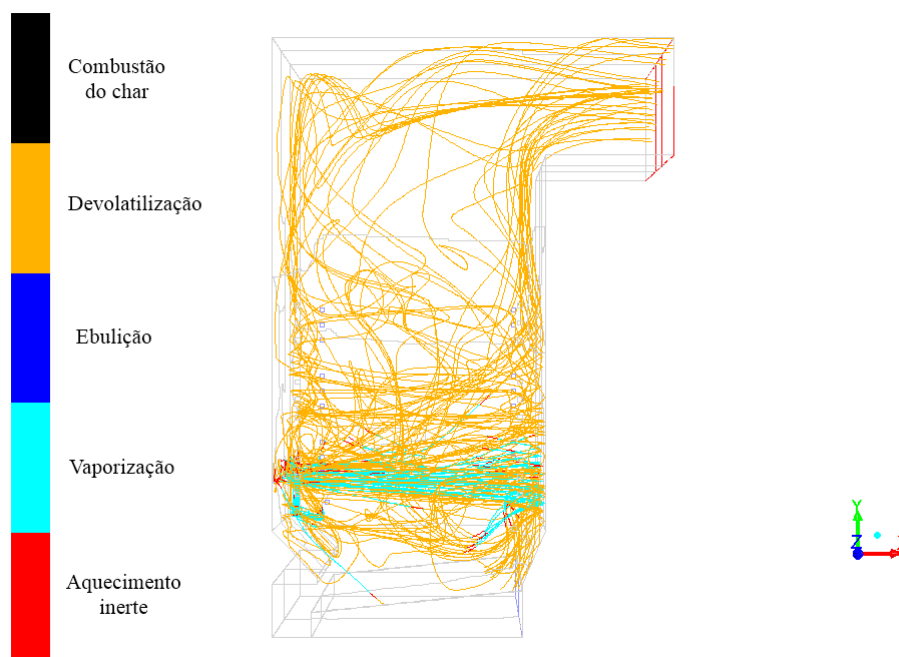


Figura 38 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 03 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

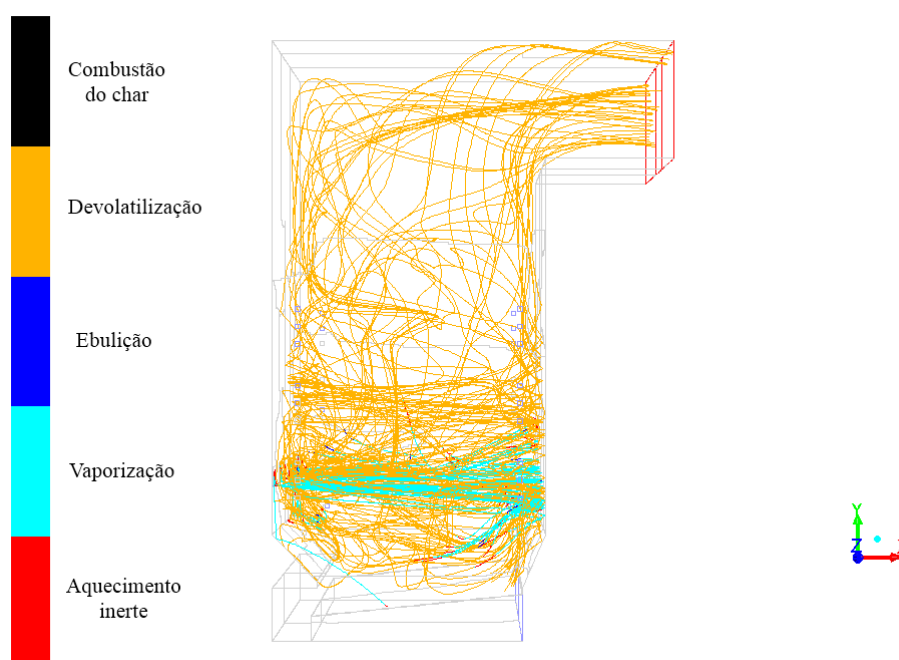


Figura 39 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 04 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

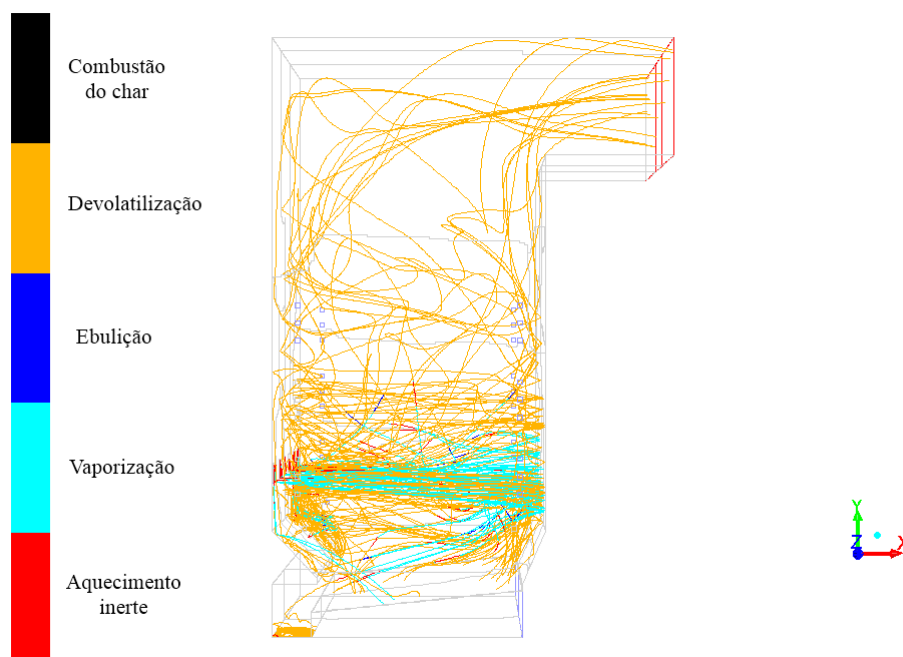


Figura 40 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 05 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

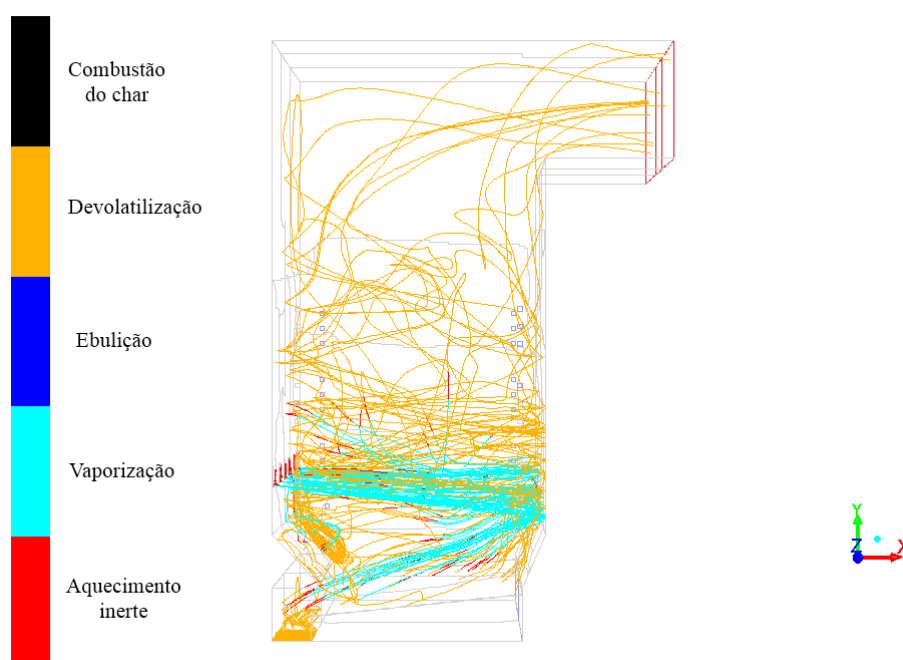


Figura 41 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 06 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

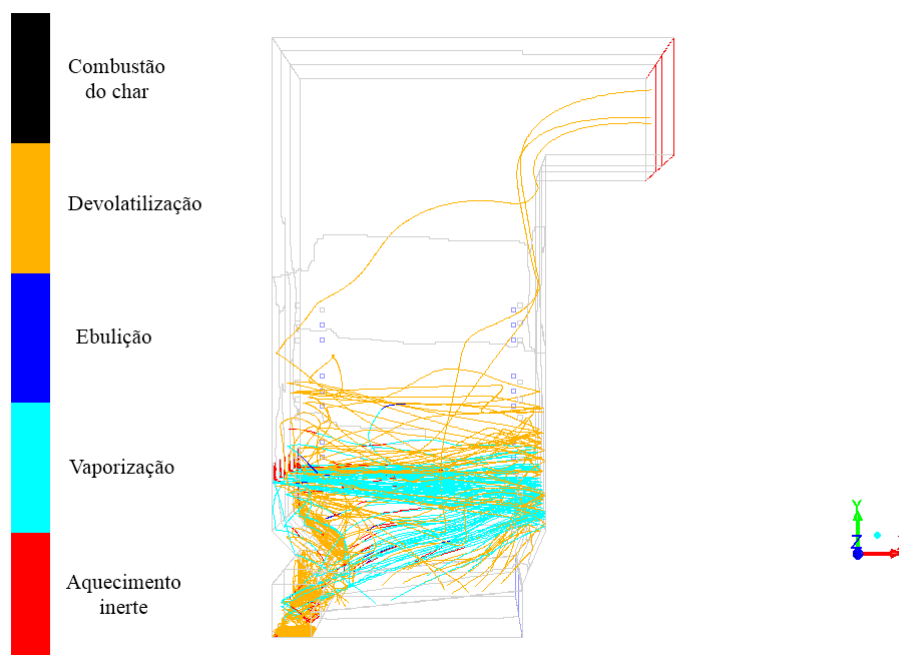


Figura 42 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 07 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

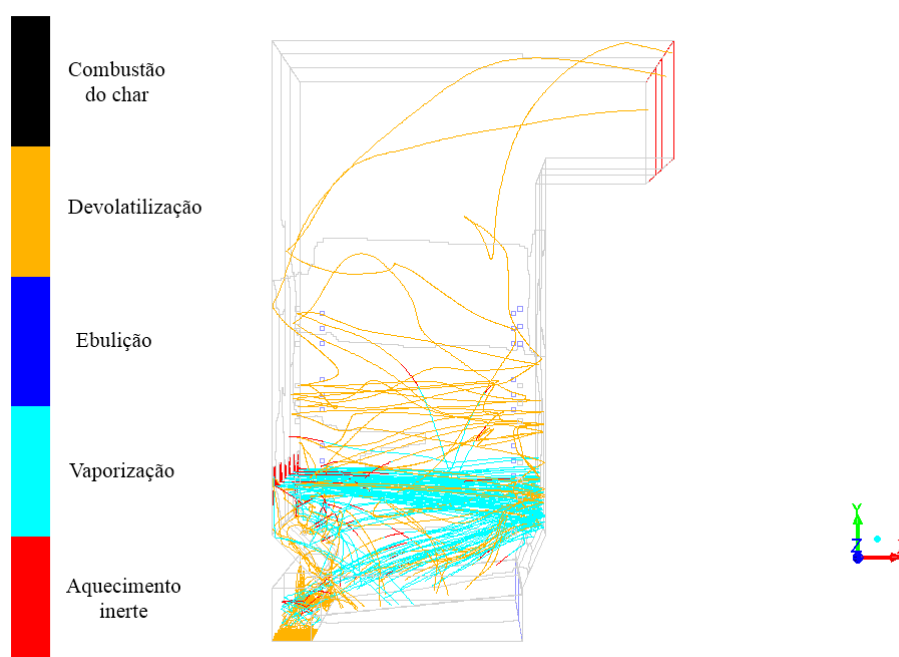


Figura 43 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 08 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

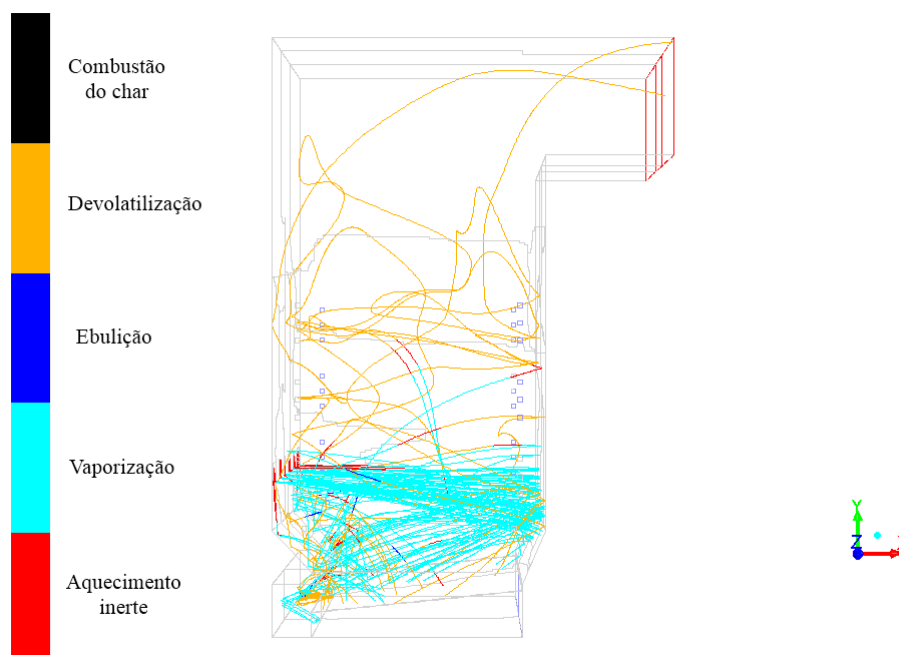


Figura 44 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 09 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

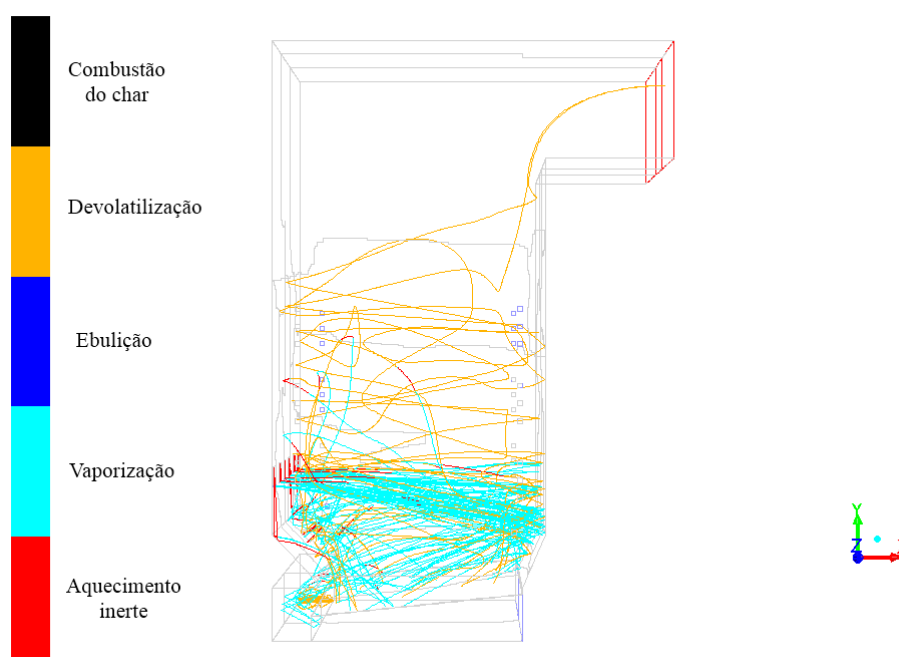


Figura 45 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 10 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

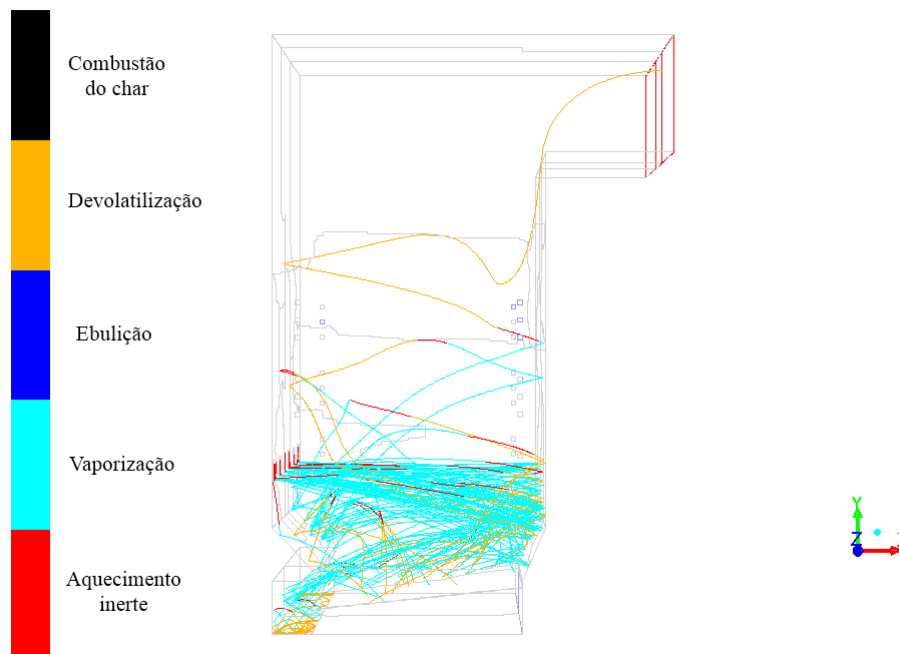


Figura 46 – Trajetórias das partículas de combustível da injeção 11 coloridas pelos processos de transferência de massa e calor

As observações qualitativas extraídas da Figura 35 até a Figura 46 podem também ser vistas quantitativamente na Tabela 34 que apresenta o conteúdo das partículas por injeção e nesta pode ser confirmado que:

- A umidade contida nas partículas dificilmente pode ser arrastada até a saída, sendo liberada enquanto as partículas voam no interior da fornalha perto da entrada das mesmas ou na grelha;
- A porcentagem de voláteis das partículas na saída da fornalha é baixa, então os voláteis são liberados enquanto as partículas voam no interior da fornalha e outra parte na grelha;
- O char é queimado principalmente na grelha para o caso das partículas maiores ou arrastado até a saída principalmente no caso das partículas menores;
- Observa-se dos termogramas da Figura 8 e da Figura 9 que quando a fração de conversão encontra-se próxima de 1 (100% voláteis liberados) a pendente da curva torna-se próxima de zero o qual torna lenta a liberação da última fração de voláteis. O fato da Tabela 34 mostrar que a porcentagem de voláteis contida na partícula na saída da fornalha não supera o 5% (ou seja, fração de conversão maior do que 95%) e a porcentagem de carbono fixo contida na partícula na

saída da fornalha no caso de partículas menores é um valor grande (de 20 até quase 90%) pode ser um indicativo que o modelo está retrasando o início da queima do char. Isto pode causar uma grande fração de não-queimados sólidos sendo arrastados até a saída.

Tabela 34 - Conteúdo das partículas por injeção no caso base

Injeção	Diâmetro equivalente	Fluxo mássico	Umidade				Voláteis				Carbono fixo			
			Total	Grelha	Suspensão	Saída	Total	Grelha	Suspensão	Saída	Total	Grelha	Suspensão	Saída
[]	[mm]	[kg/s]	[kg/s]	[%]	[%]	[%]	[kg/s]	[%]	[%]	[%]	[kg/s]	[%]	[%]	[%]
00	0.38	0.34	0.17	0.00	100.00	0.00	0.14	2.48	92.78	4.74	0.03	11.67	0.00	88.33
01	0.48	1.34	0.67	0.00	100.00	0.00	0.55	5.16	90.09	4.75	0.11	15.00	0.00	85.00
02	0.54	2.94	1.47	0.00	100.00	0.00	1.20	4.04	91.52	4.44	0.24	11.66	1.67	86.67
03	0.68	6.38	3.19	0.00	100.00	0.00	2.61	11.12	85.48	3.40	0.53	30.00	0.00	70.00
04	0.76	2.09	1.04	0.00	100.00	0.00	0.85	4.43	92.17	3.40	0.17	21.67	1.67	76.66
05	0.96	1.54	0.77	0.61	99.39	0.00	0.63	18.82	79.64	1.54	0.13	58.34	6.66	35.00
06	1.08	3.55	1.77	0.28	99.72	0.00	1.45	27.30	71.6	1.10	0.29	60.00	16.67	23.33
07	1.21	2.04	1.02	2.03	97.97	0.00	0.83	37.30	62.45	0.25	0.17	73.33	21.67	5.00
08	1.34	1.21	0.60	7.37	92.63	0.00	0.49	53.91	45.89	0.20	0.10	83.33	11.67	5.00
09	1.53	0.79	0.40	15.62	84.38	0.00	0.32	72.90	26.94	0.16	0.07	93.33	3.34	3.33
10	1.68	0.23	0.12	25.00	75.00	0.00	0.09	76.75	23.09	0.16	0.02	93.33	3.34	3.33
11	1.78	0.19	0.09	23.50	76.50	0.00	0.08	86.60	13.29	0.11	0.02	96.67	1.66	1.67

4.3 SOBRE A CONFIABILIDADE DO MODELO

Alguns indicativos foram tomados para verificar a confiabilidade dos resultados oferecidos pelo modelo, especialmente no caso base. Como mencionado acima, o caso base apresenta as mesmas condições de operação da caldeira fornecidas pelo fabricante. Foi verificado que a temperatura na saída da fornalha encontrasse muito próxima da temperatura fornecida pelo fabricante (900°C) como pode ser verificado na Figura 23 e na Figura 24; também, os balanços de massa, nitrogênio e energia sobre as fronteiras do domínio apresentam erros de 0, 1 e 8 % respectivamente, como pode ser visto nos reportes gerados no ANSYS FLUENT e disponíveis no apêndice. Outras características aparentemente lógicas podem ser vistas na análise de resultados do caso base. De qualquer forma, o CFD fornece uma grande quantidade de detalhes do processo que por outras metodologias de cálculo não seria possível obter, assim como também para configurar um caso são requeridos uma grande quantidade de dados de entrada, detalhes do processo que muitas vezes precisam ser assumidos e que para ter maior certeza destes seria preciso praticar um estudo da influência deles.

Idealmente a verificação do caso base e outros deveriam ser acompanhados também de um grande número de observações experimentais. Outras sugestões podem ser vistas na seção de recomendações para trabalhos futuros.

É recomendado que nos resultados fornecidos neste trabalho observe-se a influência relativa das variáveis ao invés de aceitar como certos os valores absolutos. Especial atenção também deve ser colocada a um possível atraso do início da combustão do char levando a valores alto de não-queimados sólidos na saída, o qual é um ponto importante a ser atendido em trabalhos futuros.

Capítulo 5

SIMULAÇÕES

Com o propósito de avaliar a influência de alguns parâmetros, foi configurado um total de 22 simulações, nestas variou-se: o combustível (bagaço e palha), a umidade do mesmo, a relação entre fluxo mássico de ar primário e fluxo mássico de ar secundário, porcentagem de excesso de ar e a orientação de entrada do ar secundário. Podem ser vistos na Tabela 35 detalhes dos casos simulados.

Pode-se observar na Tabela 35 que: as variações consideradas para combustível foram bagaço e palha, as variações consideradas para umidade foram 50 e 10%, a relação ar primário /ar secundário no caso base foi 0.8 e foram também simulados casos com 0.6 e 1.2, os casos de porcentagem de excesso de ar estudados foram 10 e 45% e os casos estudados de "configuração aerodinâmica do ar secundário" estão identificados como "atual" e "centro", onde "atual" corresponde à configuração do caso base na qual dos 10 níveis de ar secundário os três superiores estão orientados para formar um vórtice girando em sentido horário e os sete inferiores um vórtice em sentido anti-horário e "centro" corresponde a todos os injetores apontando ao eixo central da fornalha em planos horizontais.

A convergência de cada caso consumia em media 4500 iterações. Durante o desenvolvimento do código e definição do setup do problema foi utilizado um computador do Núcleo de Excelência em Geração Termelétrica e Distribuída (NEST) da Universidade Federal de Itajubá, tendo um processador Intel Core i7 3970X (8

núcleos) e 64 Gb de memória RAM compartilhada, neste equipamento o tempo médio de convergência foi de 8 dias. As demais simulações foram executadas usando licenças de ANSYS FLUENT e um cluster de computadores na Universidade de Iowa (Iowa city, IA, EUA). O cluster empregado foi o NEON utilizando na maioria dos casos 48 núcleos de processamento com 64Gb de memória compartilhada e gastando um tempo médio de 12 horas para convergência.

Tabela 35 - Configuração dos diversos casos simulados

Caso	Combustível	Fluxo mássico do combustível	Potência disponível no combustível	Umidade	Ar primário/ Ar secundário	Excesso de ar	Configuração aerodinâmica do ar secundário
		[kg/s]	[kW]	[%]		[%]	
00	Bagaço	22,63	151584,33	50	0,8	45	atual
01	Bagaço	22,63	151584,33	50	0,6	10	atual
02	Bagaço	22,63	151584,33	50	0,6	10	centro
03	Bagaço	22,63	151584,33	50	0,6	45	atual
04	Bagaço	22,63	151584,33	50	0,6	45	centro
05	Bagaço	22,63	151584,33	50	1,2	10	atual
07	Bagaço	22,63	151584,33	50	1,2	45	atual
08	Bagaço	22,63	151584,33	50	1,2	45	centro
11	Bagaço	22,63	314471,37	10	0,6	45	atual
12	Bagaço	22,63	314471,37	10	0,6	45	centro
14	Bagaço	22,63	314471,37	10	1,2	10	centro
15	Bagaço	22,63	314471,37	10	1,2	45	atual
16	Bagaço	22,63	314471,37	10	1,2	45	centro
17	Palha	22,63	148371,00	50	0,8	45	atual
19	Palha	22,63	148371,00	50	0,6	10	centro
26	Palha	22,63	305621,09	10	0,6	10	atual
28	Palha	22,63	305621,09	10	0,6	45	atual
111	Bagaço	10,91	151584,33	10	0,6	45	atual
112	Bagaço	10,91	151584,33	10	0,6	45	centro
115	Bagaço	10,91	151584,33	10	1,2	45	atual
128	Palha	11,23	151584,33	10	0,6	45	atual
129	Palha	11,23	151584,33	10	0,6	45	centro

A Tabela 36 apresenta os detalhes dos fluxos de ar servindo como complemento para visualizar melhor as configurações de cada simulação.

Tabela 36 - Fluxos de ar para cada caso simulado

Caso	Excesso de ar	Ar primário/ Ar secundário	Fluxo mássico nas entradas de ar primário	Fluxo mássico na entrada de ar primário	Fluxo mássico nas entradas de ar pneumático	Fluxo mássico de ar total	Caso
			[40 entradas]	[uma entrada]	[6 entradas]		
	[%]		[kg/s]	[kg/s]	[kg/s]	[kg/s]	
00	45	0,8	1,051	33,643	1,293	83,441	00
01	10	0,6	0,868	20,832	1,293	63,31	01
02	10	0,6	0,868	20,832	1,293	63,31	02
03	45	0,6	1,183	28,386	1,293	83,464	03
04	45	0,6	1,183	28,386	1,293	83,464	04
05	10	1,2	0,631	30,301	1,293	63,299	05
07	45	1,2	0,86	41,289	1,293	83,447	07
08	45	1,2	0,86	41,289	1,293	83,447	08
11	45	0,6	2,226	53,422	1,293	150,22	11
12	45	0,6	2,226	53,422	1,293	150,22	12
14	10	1,2	1,207	57,927	1,293	113,965	14
15	45	1,2	1,619	77,704	1,293	150,222	15
16	45	1,2	1,619	77,704	1,293	150,222	16
17	45	0,8	0,959	30,691	1,293	76,809	17
19	10	0,6	0,789	18,943	1,293	58,261	19
26	10	0,6	1,518	36,424	1,293	104,902	26
28	45	0,6	2,039	48,939	1,293	138,257	28
111	45	0,6	1,01	24,244	1,293	72,402	111
112	45	0,6	1,01	24,244	1,293	72,402	112
115	45	1,2	0,735	35,264	1,293	72,422	115
128	45	0,6	0,95	22,807	1,293	68,565	128
129	45	0,6	0,95	22,807	1,293	68,565	129

A Tabela 37 mostra a análise dos gases na saída da fornalha para as diversas simulações, onde se inclui: temperatura média dos gases na saída da fornalha, composição dos gases assim como também a perda de calor por combustão química incompleta que foi calculada a partir dos gases não queimados como na equação (5.1)

$$q_3 = \frac{100 \times Q_3}{Q_d^t} = \frac{100 \times (\dot{m}_{vol} PCI_{vol} + \dot{m}_{CO} PCI_{CO})}{\dot{m}_{biom} PCI_{biom} + \sum_{i=1}^3 \dot{m}_{ar_i} (h_{ar_i @ T_i} - h_{ar_i @ T_{amb}})} \quad (5.1)$$

Onde a somatória de um até três refere-se às entradas de ar primário, secundário e pneumático respectivamente.

Com o propósito de comparar os resultados das diversas simulações com os resultados do caso base, a Tabela 37 mostra também a "porcentagem de variação da temperatura dos gases na saída da fornalha relativo ao caso base" (PVTRCB) que foi calculado como na equação (5.2), e mostra também a "porcentagem de variação do q_3 relativo ao caso base" (PVQ3RCB) que foi calculado como na equação (5.3)

$$PVTRCB = \frac{[T_{saida\ i} - T_{saida\ (caso-base)}] \times 100}{T_{saida\ (caso-base)}} \quad (5.2)$$

$$PVQ3RCB = \frac{[q_{3i} - q_{3(caso-base)}] \times 100}{q_{3(caso-base)}} \quad (5.3)$$

Nas equações (5.2) e (5.3), T_{saida} refere-se à temperatura dos gases na saída da fornalha, q_3 à perda de calor por combustão química incompleta e os subscritos i e $(caso - base)$ ao caso sendo calculado e ao caso base respectivamente.

Na Tabela 37 observa-se a temperatura média dos gases na saída da fornalha (1186,30 K) coincidindo com o valor fornecido pelo fabricante. Também as perdas por combustão química incompleta obtidas são inferiores a 1,00%

Tabela 37 - Análise dos gases de saída para as diversas simulações

Caso	Temperatura média dos gases na saída da fornalha	PVTRCB	Desvio padrão temperatura	Gases na saída						q ₃	PVQ3RCB	Caso
				vol	O ₂	CO ₂	H ₂ O	CO	N ₂			
	[K]	[%]	[K]	[g/s]	[kg/s]	[kg/s]	[kg/s]	[g/s]	[kg/s]	[%]	[%]	
00	1186,30	0,00	32,10	5,37	7,77	15,27	18,37	4,19	63,28	0,07	0,00	00
01	1340,30	12,98	44,90	2,36	3,19	16,07	18,78	1,62	46,78	0,03	-57,14	01
02	1236,00	4,19	30,70	1,22	3,57	14,73	18,10	0,80	48,58	0,02	-71,43	02
03	1260,60	6,26	34,50	6,21	7,67	15,53	18,45	4,61	63,27	0,08	14,29	03
04	1099,90	-7,28	27,90	2,04	8,91	13,89	17,41	1,34	64,54	0,03	-57,14	04
05	1260,50	6,25	46,10	2,60	3,10	15,34	17,91	1,87	48,40	0,03	-57,14	05
07	1140,80	-3,84	28,20	5,46	8,50	14,48	17,95	3,80	63,61	0,07	0,00	07
08	1089,90	-8,13	24,00	2,57	8,48	15,47	19,06	1,73	61,53	0,03	-57,14	08
11	1366,50	15,19	33,90	14,46	17,59	21,89	13,51	10,08	116,39	0,09	28,57	11
12	1304,70	9,98	60,80	10,59	17,98	21,27	13,54	7,14	116,30	0,06	-14,29	12
14	1430,00	20,54	73,20	6,08	9,41	21,68	13,99	4,13	88,22	0,04	-42,86	14
15	1348,50	13,67	53,50	22,51	17,24	22,33	13,84	15,49	115,81	0,13	85,71	15
16	1297,90	9,41	76,30	9,79	18,98	21,04	13,37	6,91	115,68	0,06	-14,29	16
17	1435,40	21,00	48,80	1,89	5,67	17,74	18,79	2,06	56,16	0,03	-57,14	17
19	1649,70	39,06	48,50	0,61	1,64	18,93	19,30	1,05	40,18	0,01	-85,71	19
26	1911,20	61,11	65,00	6,28	4,36	28,16	15,42	5,02	76,87	0,04	-42,86	26
28	1582,90	33,43	43,70	10,18	13,67	24,86	13,88	7,85	105,27	0,06	-14,29	28
111	1448,70	22,12	49,10	2,19	6,79	13,26	6,74	1,56	55,66	0,03	-57,14	111
112	1372,40	15,69	37,70	0,81	7,10	13,08	6,74	0,49	55,54	0,01	-85,71	112
115	1461,80	23,22	63,70	2,04	7,36	13,49	6,92	1,51	54,57	0,03	-57,14	115
128	1770,70	49,26	58,40	0,51	5,02	15,49	7,60	0,45	50,93	0,01	-85,71	128
129	1710,40	44,18	51,00	0,71	5,14	15,96	7,40	0,58	50,49	0,01	-85,71	129

A Tabela 38 mostra a análise do conteúdo do particulado de combustível e inclui-se também a perda de calor por combustão mecânica incompleta (q_4) que é calculada a partir do conteúdo de não queimados na partícula na saída da fornalha como na equação (5.4), apresenta também a eficiência da combustão (η) calculada como na equação (5.5)

$$q_4 = \frac{100 \times Q_4}{Q_d^t} = \frac{100 \times (\dot{m}_{vol} PCI_{vol} + \dot{m}_C PCI_C)}{\dot{m}_{biom} PCI_{biom} + \sum_{i=1}^3 \dot{m}_{ar_i} (h_{ar_i @ T_i} - h_{ar_i @ T_{amb}})} \quad (5.4)$$

$$\eta = 100 - q_3 - q_4 \quad (5.5)$$

Na equação (5.4), $\dot{m}_{vol}$ e $\dot{m}_C$ são respectivamente os fluxos mássicos de voláteis e carbono fixo não queimado arrastado com as partículas que saem da fornalha, e análogo à equação (5.1) a somatória de um até três refere-se às entradas de ar primário, secundário e pneumático respectivamente.

Novamente, com o propósito de comparar os resultados das diversas simulações com os resultados do caso base, a Tabela 38 mostra a "porcentagem de variação do q_4 relativo ao caso base" (PVQ4RCB) calculado como na equação (5.6) e a "porcentagem de variação da eficiência de combustão relativo ao caso base" (PVNRCB) calculado como na equação (5.7)

$$PVQ4RCB = \frac{[q_{4_i} - q_{4(caso-base)}] \times 100}{q_{4(caso-base)}} \quad (5.6)$$

$$PVNRCB = \frac{[\eta_i - \eta_{(caso-base)}] \times 100}{\eta_{(caso-base)}} \quad (5.7)$$

Nas equações (5.6) e (5.7), q_4 refere-se à perda de calor por combustão mecânica incompleta, η à eficiência da combustão e os subscritos i e $(caso - base)$ ao caso sendo calculado e ao caso base respectivamente.

Na Tabela 38 é possível observar que a porcentagem dos voláteis ainda sendo arrastados até a saída da fornalha no interior das partículas é em todos os casos inferior de 5% (ou seja, que a etapa de devolatilização encontra-se próxima do final), já a porcentagem de carbono fixo não queimado até a saída é superior a 40% na maioria dos casos, isto representa perdas de calor por combustão mecânica incompleta maior do que 15% na maioria dos casos o qual seria um valor maior do que o esperado. Este comportamento do modelo pode ser devido a algumas coisas:

- Como observado nos termogramas da devolatilização (Figura 8 e Figura 9) a pendente próxima de zero no final da liberação dos voláteis pode estar retrasando o fim da devolatilização e início da combustão do carbono fixo.
- O modelo não considera o fenômeno de aglomeração de partículas o qual levaria a que um maior porcentagem da biomassa seja consumido no interior da fornalha e menos arrastada até a saída.

Tabela 38 - Análise do conteúdo do particulado

Caso	Umidade				Voláteis				Carbono fixo				q ₄	PVQ4RCB	η	PVNRCV	Caso
	Total	Grelha	Suspensão	Saída	Total	Grelha	Suspensão	Saída	Total	Grelha	Suspensão	Saída					
	[kg/s]	[%]	[%]	[%]	[kg/s]	[%]	[%]	[%]	[kg/s]	[%]	[%]	[%]					
00	11,32	1,46	98,54	0,00	9,25	19,56	78,21	2,23	1,87	44,90	6,68	48,42	20,38	0,00	79,55	0,00	00
01	11,32	1,34	98,66	0,00	9,25	25,07	73,42	1,51	1,86	56,10	2,66	41,24	17,19	-15,65	82,78	4,06	01
02	11,32	2,34	97,66	0,00	9,25	40,46	58,42	1,12	1,87	67,13	1,43	31,44	13,09	-35,77	86,90	9,24	02
03	11,32	4,87	95,13	0,00	9,25	28,42	69,62	1,96	1,87	54,42	3,87	41,71	17,58	-13,74	82,34	3,51	03
04	11,32	2,45	97,55	0,00	9,25	32,66	65,16	2,18	1,86	56,68	0,58	42,74	18,13	-11,04	81,85	2,89	04
05	11,32	3,56	96,44	0,00	9,25	35,04	63,70	1,26	1,86	62,68	2,43	34,89	14,55	-28,61	85,42	7,38	05
07	11,32	1,85	98,15	0,00	9,25	23,12	74,50	2,38	1,86	43,32	3,45	53,23	22,37	9,76	77,56	-2,50	07
08	11,32	1,25	98,75	0,00	9,25	26,34	71,45	2,21	1,86	46,31	1,01	52,68	22,03	8,10	77,94	-2,02	08
11	2,26	0,00	100,00	0,00	16,66	5,47	90,83	3,70	3,36	19,01	1,88	79,11	28,83	41,46	71,08	-10,65	11
12	2,26	0,00	100,00	0,00	16,66	6,47	89,36	4,17	3,36	20,60	0,21	79,19	29,17	43,13	70,77	-11,04	12
14	2,26	0,00	100,00	0,00	16,65	4,70	92,79	2,51	3,36	26,69	0,81	72,50	26,07	27,92	73,90	-7,10	14
15	2,26	0,00	100,00	0,00	16,65	11,24	85,11	3,65	3,36	27,37	0,09	72,54	26,64	30,72	73,23	-7,94	15
16	2,26	0,00	100,00	0,00	16,65	8,50	87,31	4,19	3,36	17,90	0,68	81,42	29,96	47,01	69,98	-12,03	16
17	11,16	9,97	90,03	0,00	8,80	49,39	50,01	0,60	1,93	83,29	0,00	16,71	7,20	-64,67	92,77	16,62	17
19	11,17	10,26	89,74	0,00	8,81	69,90	29,97	0,13	1,93	94,64	0,43	4,93	2,10	-89,70	97,88	23,04	19
26	2,23	0,00	100,00	0,00	15,85	13,53	85,32	1,15	3,47	54,46	0,49	45,05	16,58	-18,65	83,38	4,81	26
28	2,23	0,00	100,00	0,00	15,85	23,71	74,67	1,62	3,48	50,16	3,63	46,21	17,17	-15,75	82,77	4,05	28
111	1,09	0,00	100,00	0,00	8,03	6,72	92,15	1,13	1,62	59,01	1,27	39,72	14,01	-31,26	85,96	8,06	111
112	1,09	0,00	100,00	0,00	8,03	5,21	93,78	1,01	1,62	63,84	1,87	34,29	12,11	-40,58	87,88	10,47	112
115	1,09	0,00	100,00	0,00	8,03	7,32	91,43	1,25	1,62	51,68	3,09	45,23	15,95	-21,74	84,03	5,63	115
128	1,11	0,00	100,00	0,00	7,86	19,88	80,00	0,12	1,72	92,21	1,53	6,26	2,26	-88,91	97,73	22,85	128
129	1,11	0,00	100,00	0,00	7,86	11,95	87,79	0,26	1,72	82,44	6,62	10,94	3,99	-80,42	96,00	20,68	129

A Tabela 39 mostra o balanço de energia global de todos os casos simulados, incluindo fluxos de energia devido à entalpia da biomassa, entalpia dos fluxos de ar, calor transferido às paredes d'água e entalpia dos gases que saim da fornalha. Para efeitos de comparação, é apresentado também a "porcentagem de variação do calor transferido às paredes d'água relativo ao caso base" (PVQPRCB) calculado como na equação (5.8)

$$PVQPRCB = \frac{[\dot{Q}_{paredes\ i} - \dot{Q}_{paredes\ (caso - base)}] \times 100}{\dot{Q}_{paredes\ (caso - base)}} \quad (5.8)$$

Na equação (5.8), $\dot{Q}_{paredes}$ refere-se ao calor transferido às paredes d'água e os subscritos i e $(caso - base)$ ao caso sendo calculado e ao caso base respectivamente.

Tabela 39 - Balanço de energia de cada um dos casos simulados

Caso	Biomassa	Ar total	Ar primário	Ar secundário	Ar pneumático	Paredes				Gás na saída	desbalance	Caso
	[MW]	[MW]	[%]	[%]	[%]	[MW]	PVQPRCB [%]	[kW/m2]	[kW/m3]	[MW]	[%]	
00	-242,27	24,56	34,10	57,91	7,99	-26,27	0,00	30,06	16,94	266,20	8,35	00
01	-242,70	18,71	26,80	62,71	10,49	-34,22	30,26	39,16	22,07	281,17	8,17	01
02	-242,30	18,61	26,37	63,09	10,55	-30,57	16,37	34,98	19,71	272,09	6,56	02
03	-242,27	25,03	28,20	63,96	7,84	-29,07	10,66	33,26	18,74	258,61	4,76	03
04	-241,77	25,00	28,09	64,06	7,85	-26,73	1,75	30,59	17,24	254,33	4,25	04
05	-242,55	17,90	41,39	47,64	10,97	-28,71	9,29	32,86	18,52	271,22	6,59	05
07	-242,26	23,89	43,09	48,69	8,22	-25,23	-3,96	28,87	16,27	260,44	6,47	07
08	-242,13	23,86	43,02	48,75	8,23	-25,94	-1,26	29,69	16,73	290,65	15,98	08
11	-151,65	45,36	29,28	66,39	4,33	-61,98	135,93	70,93	39,97	163,06	3,20	11
12	-151,11	45,49	29,46	66,23	4,32	-49,84	89,72	57,04	32,14	174,17	10,74	12
14	-152,34	32,67	44,05	49,94	6,01	-50,91	93,80	58,26	32,83	201,52	15,35	14
15	-151,26	43,40	45,01	50,46	4,52	-46,91	78,57	53,68	30,25	176,09	12,11	15
16	-151,00	43,43	45,03	50,45	4,52	-40,76	55,16	46,65	26,29	170,00	12,74	16
17	-233,57	22,65	34,03	57,30	8,67	-30,29	15,30	34,66	19,53	268,06	10,02	17
19	-233,34	17,42	27,42	61,32	11,27	-34,55	31,52	39,53	22,28	285,89	12,39	19
26	-141,20	31,53	28,66	65,11	6,23	-77,21	193,91	88,36	49,80	214,29	12,79	26
28	-140,61	41,81	29,32	65,98	4,69	-64,11	144,04	73,37	41,34	166,00	1,86	28
111	-72,26	21,55	27,52	63,37	9,11	-39,85	51,69	45,60	25,70	99,88	9,32	111
112	-72,29	21,36	26,89	63,92	9,18	-42,18	60,56	48,28	27,20	105,99	12,14	112
115	-72,45	20,56	42,18	48,28	9,54	-38,46	46,40	44,02	24,80	102,82	12,13	115
128	-68,36	20,46	27,60	62,81	9,59	-48,63	85,12	55,65	31,36	108,52	11,04	128
129	-68,56	20,45	27,57	62,83	9,60	-48,87	86,03	55,93	31,52	115,80	16,25	129

5.1 EFEITO DA UMIDADE: SENDO CONSTANTE A ENERGIA DISPONÍVEL NO COMBUSTÍVEL

Entre os dados disponíveis, foi possível selecionar três pares de casos, sendo que cada caso foi simulado com as mesmas condições do seu par exceto pela umidade, as condições de cada caso podem ser vistas na Tabela 35. É importante observar que em cada par de casos a energia disponível no combustível é também mantida constante e então ao variar a umidade o fluxo mássico de combustível úmido difere para cada caso de um mesmo par.

A Figura 47 mostra o efeito da umidade sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, os três pares de casos mostram um aumento da temperatura com a diminuição da umidade do combustível o qual seria o comportamento esperado.

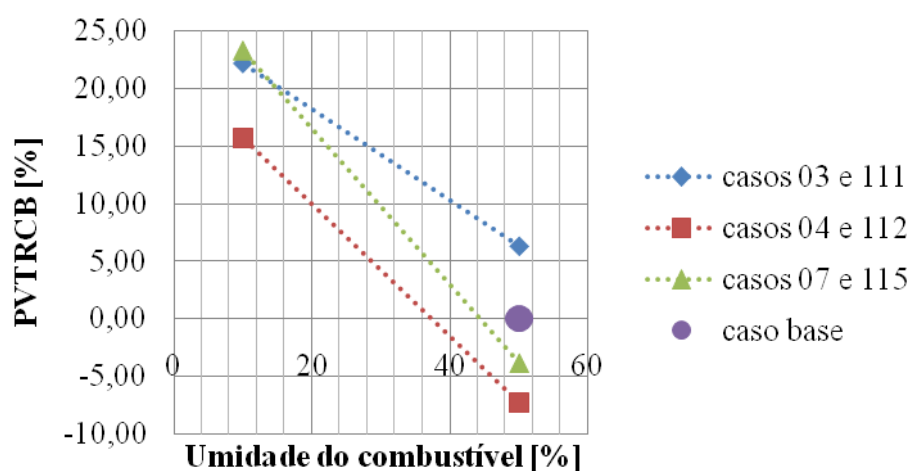


Figura 47 – Efeito da umidade do combustível sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, sendo constante a energia disponível no combustível.

Como um exemplo, a Figura 48 mostra contornos de temperatura para o par incluindo os casos 03 e 111, onde é possível observar as temperaturas maiores no caso 111 onde o combustível foi simulado com 10% de umidade em comparação ao caso 03 onde o combustível foi simulado com 50% de umidade.

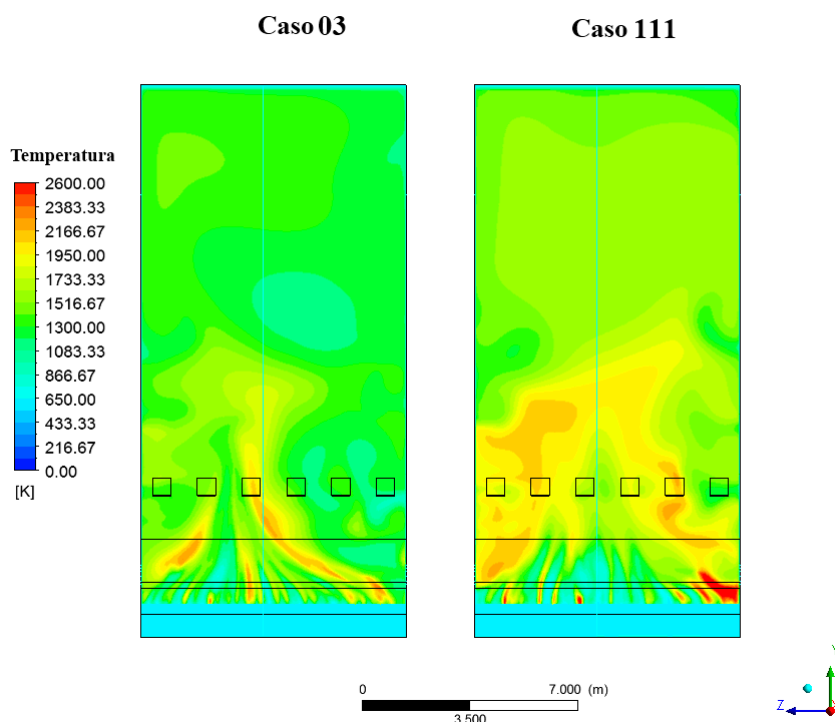


Figura 48 – Contornos de temperatura casos 03 e 111

A Figura 49 mostra o efeito da umidade do combustível sobre o calor absorvido pelas paredes d'água e pode-se observar que a maior umidade no combustível menor calor absorvido pelas paredes o qual seria uma consequência direta da menor temperatura no interior da fornalha.

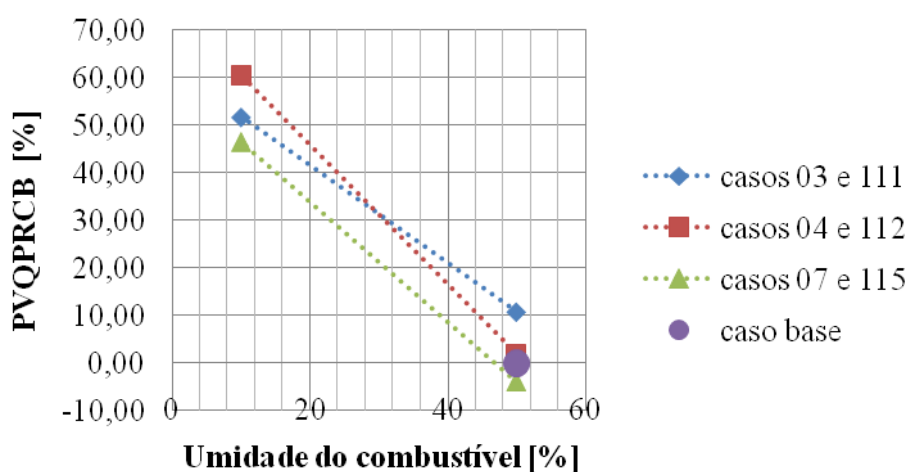


Figura 49 – Efeito da umidade do combustível sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha, sendo constante a energia disponível no combustível.

A Figura 50 mostra o efeito da umidade no combustível sobre as perdas por combustão química incompleta e observam-se maiores perdas quando a umidade é maior, mas pode ser

conferido na Tabela 37 que os valores destas perdas não são significativos. Certamente para umidades menores do combustível se tem temperaturas maiores no interior da fornalha o qual favorece as reações de combustão diminuindo as perdas por combustão química incompleta como pode ser conferido nesta figura.

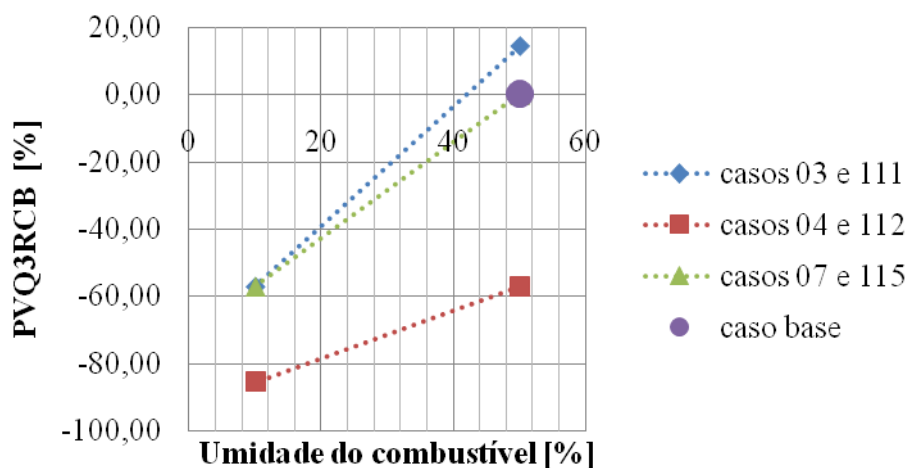


Figura 50 – Efeito da umidade do combustível sobre as perdas por combustão química incompleta, sendo constante a energia disponível no combustível.

A Figura 51 mostra o efeito da umidade do combustível sobre as perdas de calor por combustão mecânica incompleta e novamente nos três pares de casos estudados se observa aumento das perdas com o aumento da umidade o qual é consequência de ambos, baixa temperatura e maior tempo requerido para secagem. Os valores de perda de calor por combustão mecânica incompleta também podem variar pela influência do ângulo de entrada do ar pneumático o qual não foi variado neste estudo, então destaca-se a importância de ver o comportamento relativo das variáveis e não seus valores absolutos.

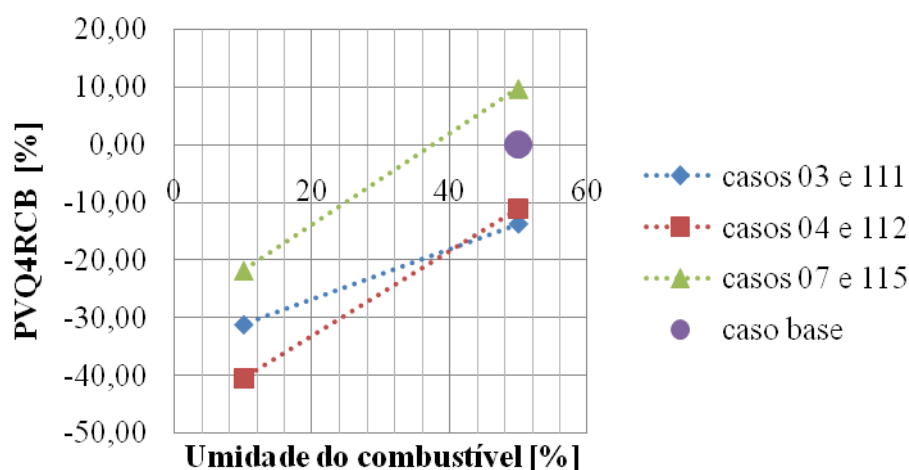


Figura 51 – Efeito da umidade do combustível sobre a combustão mecânica incompleta, sendo constante a energia disponível no combustível.

A Figura 52 mostra o efeito da umidade do combustível sobre a eficiência da combustão e observa-se nos três pares de casos estudados queda de eficiência com o aumento da umidade o qual seria o resultado esperado baseados nas observações anteriores.

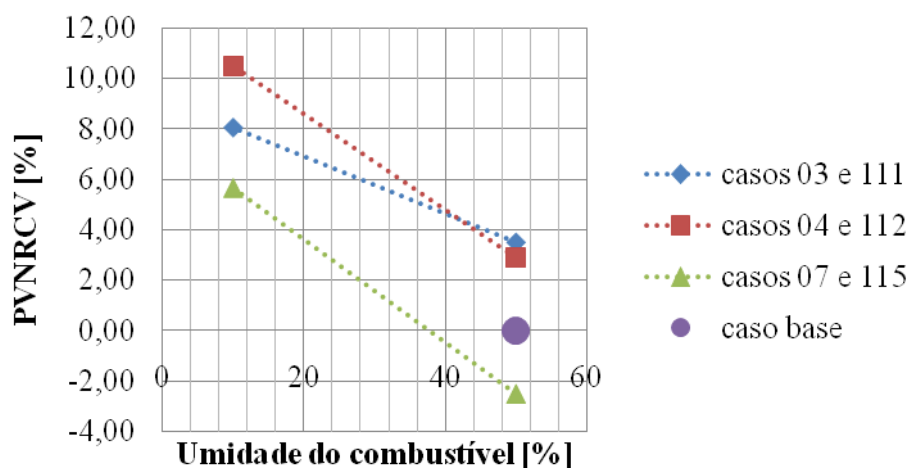


Figura 52 – Efeito da umidade do combustível sobre a eficiência da combustão, sendo constante a energia disponível no combustível.

5.2 EFEITO DA RELAÇÃO AR PRIMÁRIO/AR SECUNDÁRIO

Entre os dados disponíveis, foi possível selecionar quatro pares de casos, sendo que cada caso foi simulado com as mesmas condições do seu par exceto pela relação de ar primário/ar secundário. As condições de cada caso podem ser vistas na Tabela 35.

A Figura 53 mostra o efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, dois dos quatro pares de casos estudados mostram diminuição da temperatura na saída da fornalha ao aumentar a relação ar primário/ar secundário, já nos outros dois pares a mudança de temperatura na saída com o aumento da relação não é significativa.

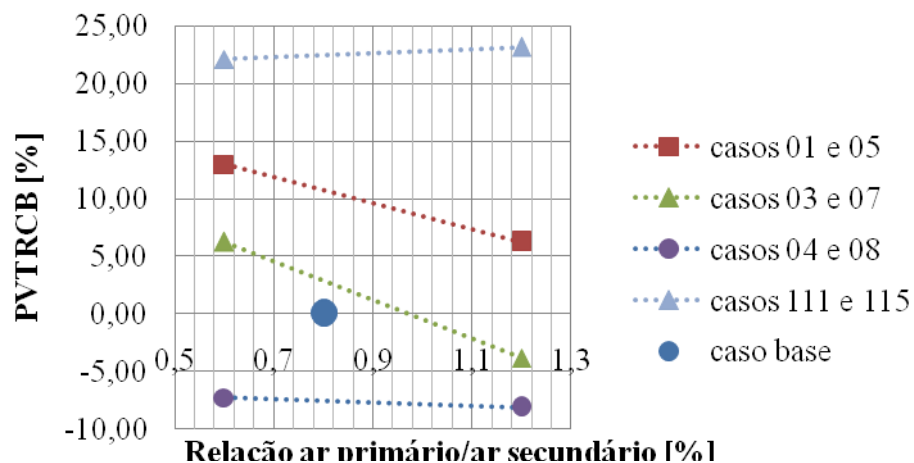


Figura 53 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha.

A Figura 54 e a Figura 55 mostram os contornos de fração mássica de O_2 para dois pares de casos, observa-se que o formato da chama na grelha de fato muda com a relação ar primário/ar secundário. Nos casos com menor fluxo de ar primário (casos 03 e 111) é possível observar mais regiões com falta de oxigênio perto da grelha.

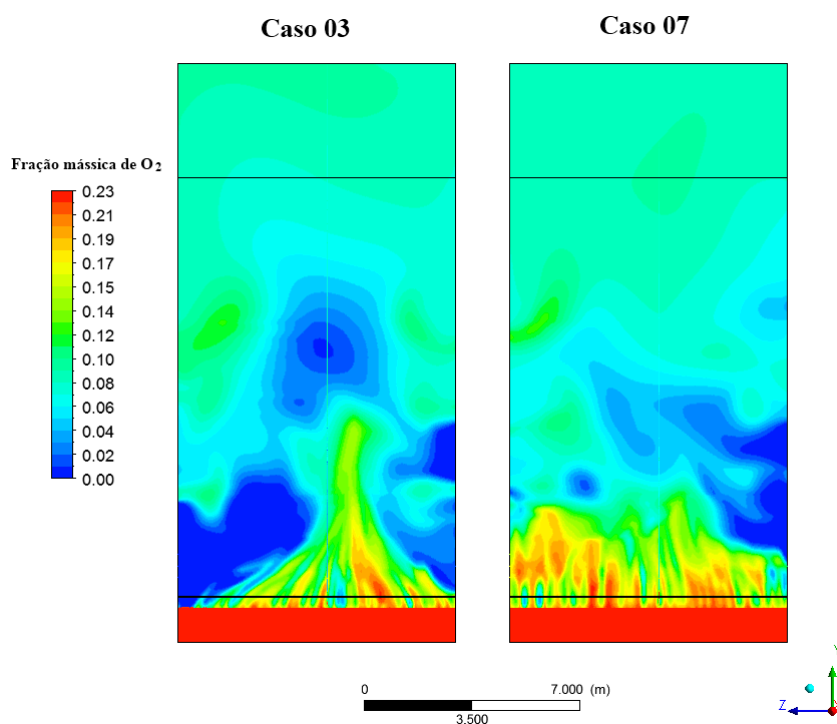


Figura 54 – Contornos de frações mássicas de O_2 para o par de casos 03 e 07

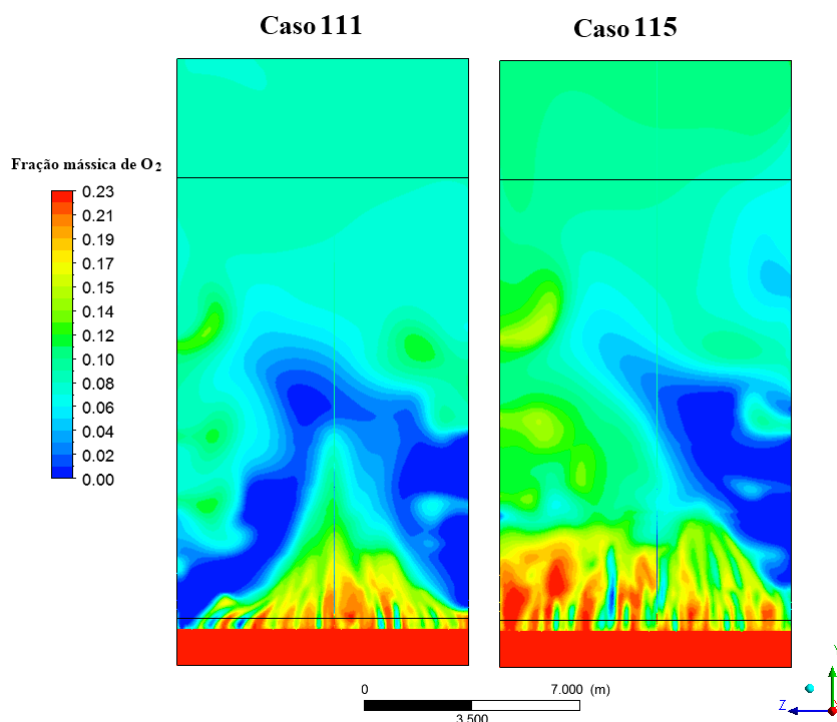


Figura 55 – Contornos de frações mássicas de O_2 para o par de casos 111 e 115

A Figura 56 mostra a influência da relação ar primário/ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes, onde nos quatro pares de casos observa-se diminuição do calor absorvido pelas paredes com o aumento da relação. A Figura 57 mostra contornos de temperaturas do par de casos 03 e 07, já a Figura 58 os correspondentes ao par de casos 01 e 05, nestas é possível observar nos casos 03 e 01 mais regiões de altas temperaturas do que os seus respectivos pares, sendo que as altas temperaturas favorecem a absorção de calor pelas paredes.

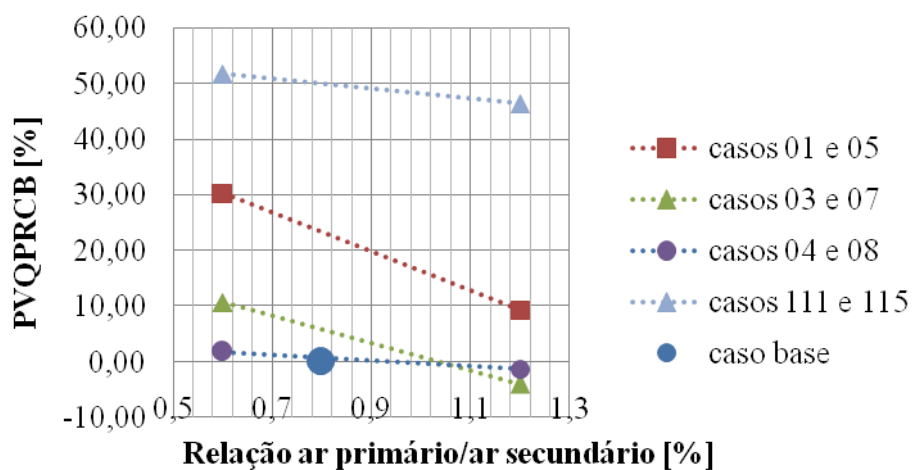


Figura 56 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha

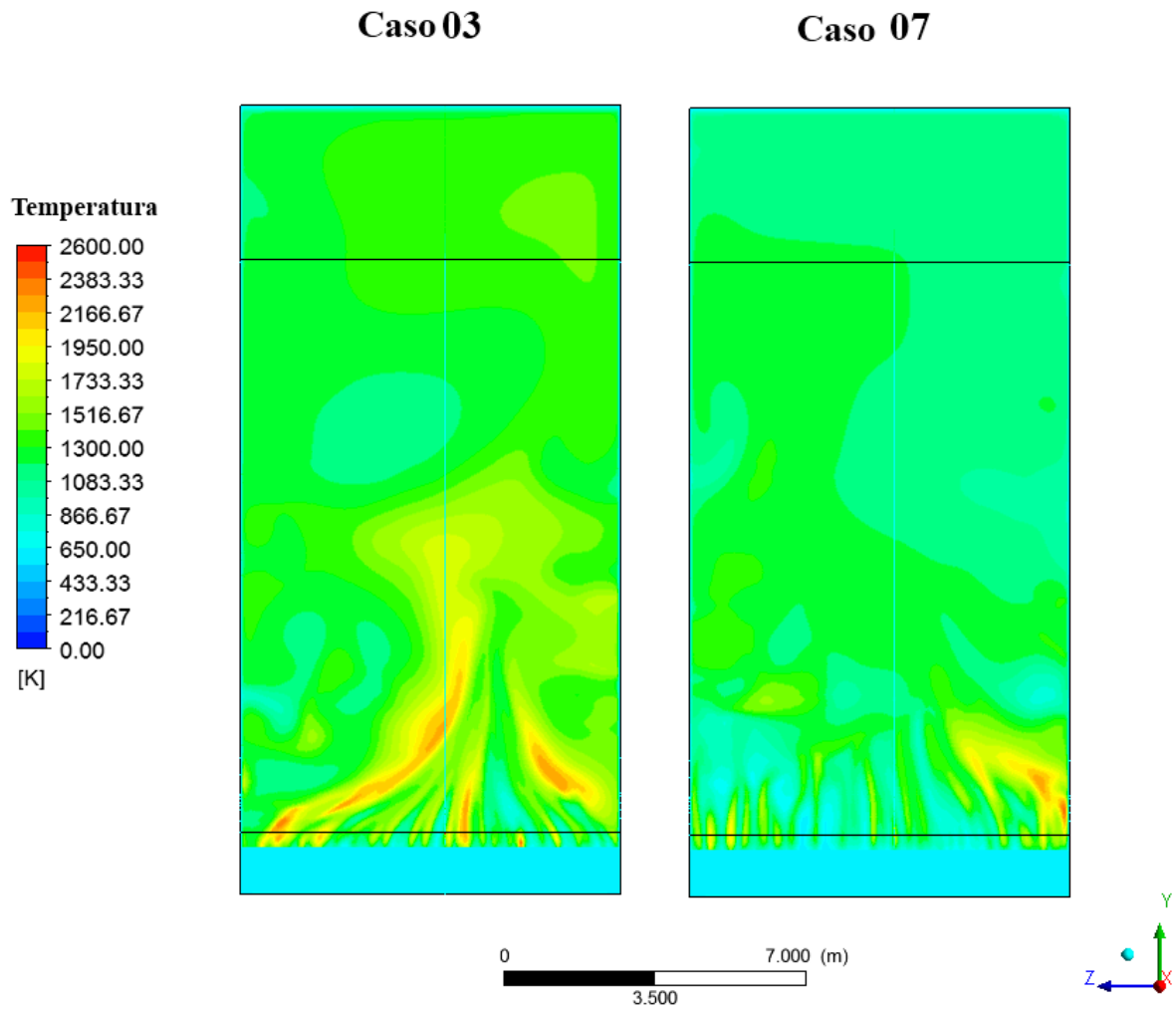


Figura 57 – Contornos de temperaturas para o par de casos 03 e 07

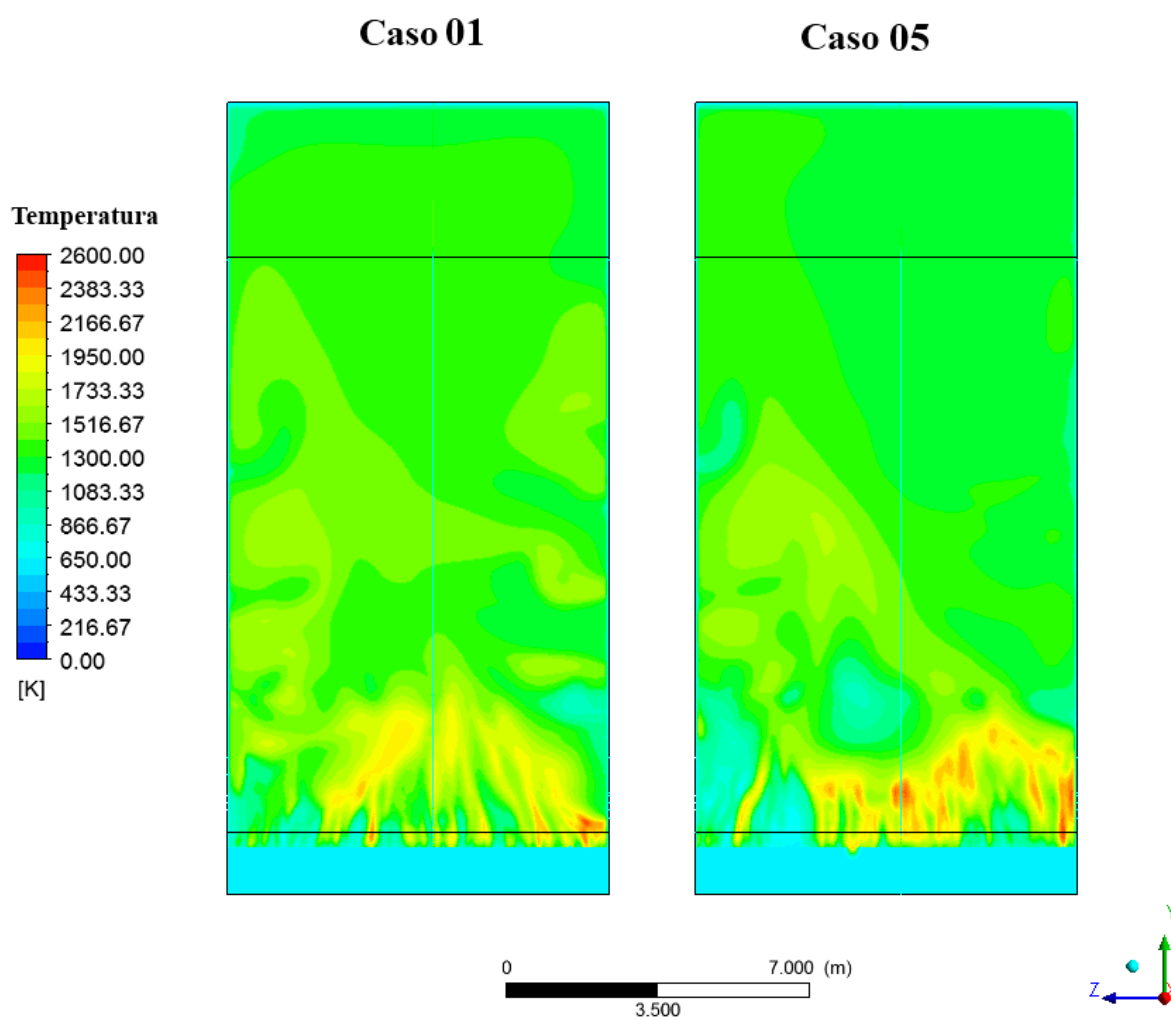


Figura 58 – Contornos de temperaturas para o par de casos 01 e 05

A Figura 59 que mostra a influência da relação ar primário/ar secundário sobre a perda de calor por combustão química incompleta, e nesta é possível observar que seis dos casos plotados apresentam perda 60% menor do que o caso base, mas é importante lembrar que esta perda representa um porcentagem inferior a 1%.

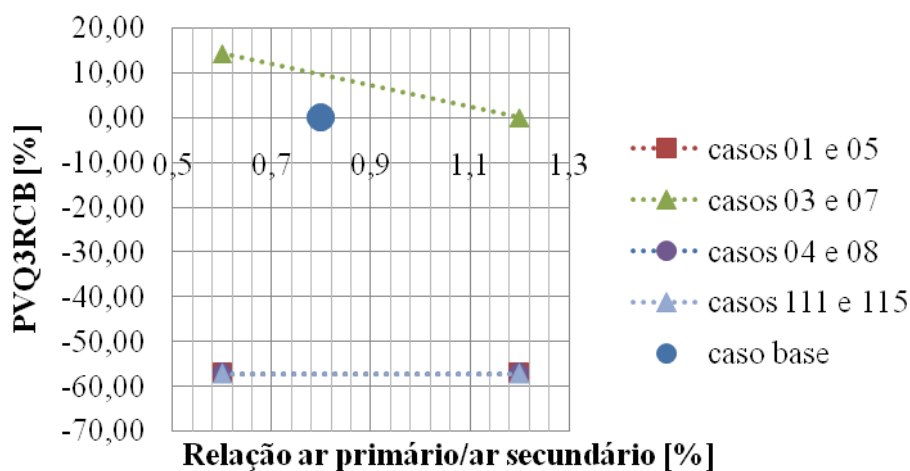


Figura 59 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a perda de calor por combustão química incompleta

A Figura 60 mostra o efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta, nesta três dos quatro pares de casos mostram aumento da perda com o aumento da relação.

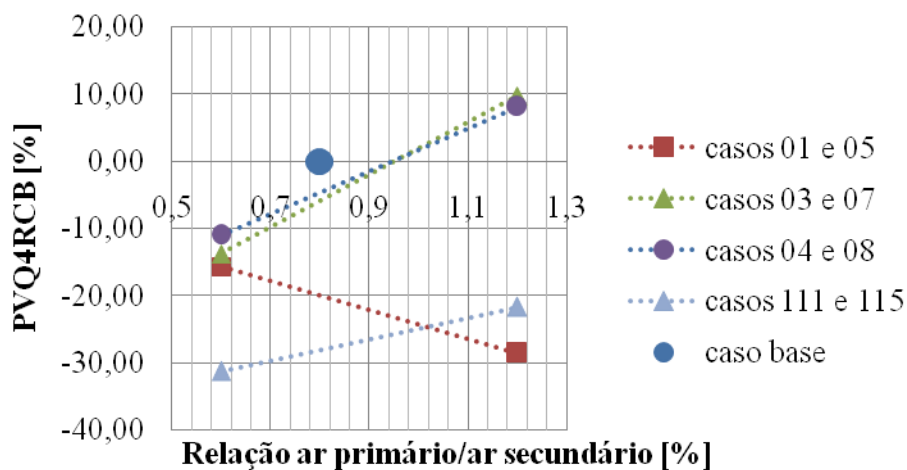


Figura 60 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a combustão mecânica incompleta

A Figura 61 mostra o efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a eficiência da combustão, nesta três dos quatro casos mostram diminuição da eficiência com o aumento da relação.

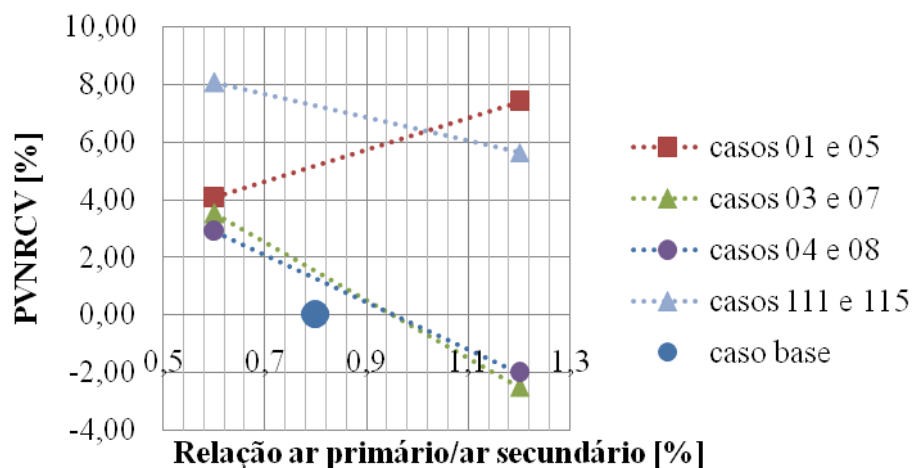


Figura 61 – Efeito da relação ar primário/ar secundário sobre a eficiência da combustão

5.3 EFEITO DO EXCESSO DE AR

Entre os dados disponíveis, foi possível selecionar cinco pares de casos, sendo que cada caso foi simulado com as mesmas condições do seu par exceto pelo excesso de ar. As condições de cada caso podem ser vistas na Tabela 35.

A Figura 62 mostra o efeito do excesso de ar sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, nos cinco pares de casos observa-se diminuição da temperatura na saída com o aumento do excesso de ar. Se observa que todos os caso simulados com bagaço e 45% de excesso de ar exibem temperatura de saída dos gases próximas do caso base, com variações de mais ou menos 10%, já os casos 26 e 28 foram simulados com palha e nestes as temperaturas são maiores do que no caso base. O comportamento mostrado nesta figura é o esperado onde a maior fluxo de gases menor temperatura para a mesma energia.

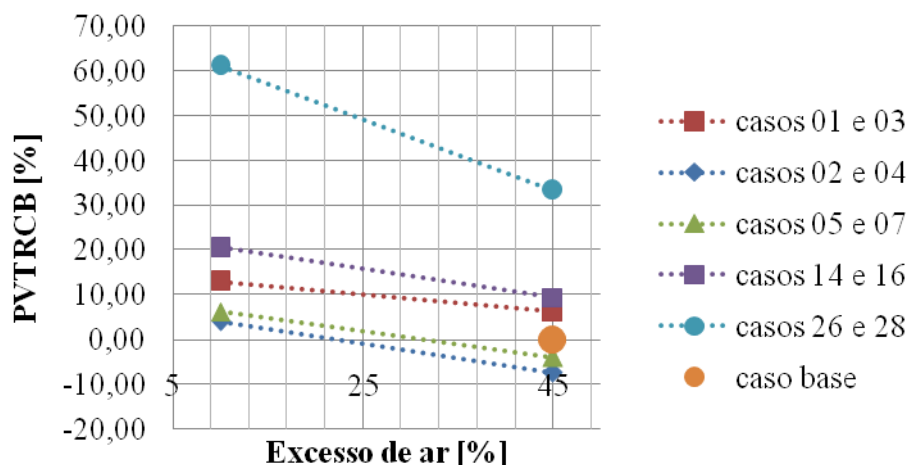


Figura 62 – Efeito do excesso de ar sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha.

A Figura 63 mostra o efeito do excesso de ar sobre o calor absorvido pelas paredes, onde os cinco casos estudados mostram diminuição do calor absorvido pelas paredes com o aumento do excesso de ar. O comportamento mostrado nesta figura é análogo ao mostrado na Figura 62.

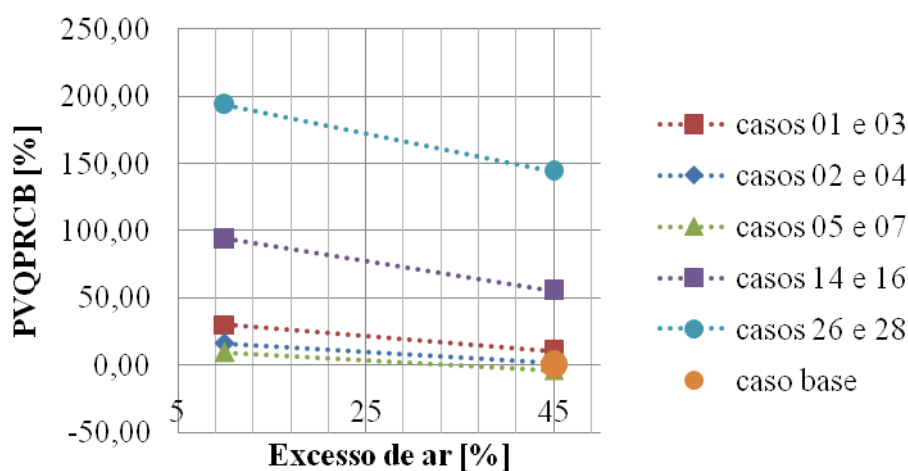


Figura 63 – Efeito do excesso de ar sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha

A Figura 64 mostra o efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão química incompleta, onde nos cinco casos é possível observar aumento da perda com o aumento do excesso de ar, mas novamente a perda por combustão química incompleta é uma porcentagem inferior ao 1% do calor disponível.

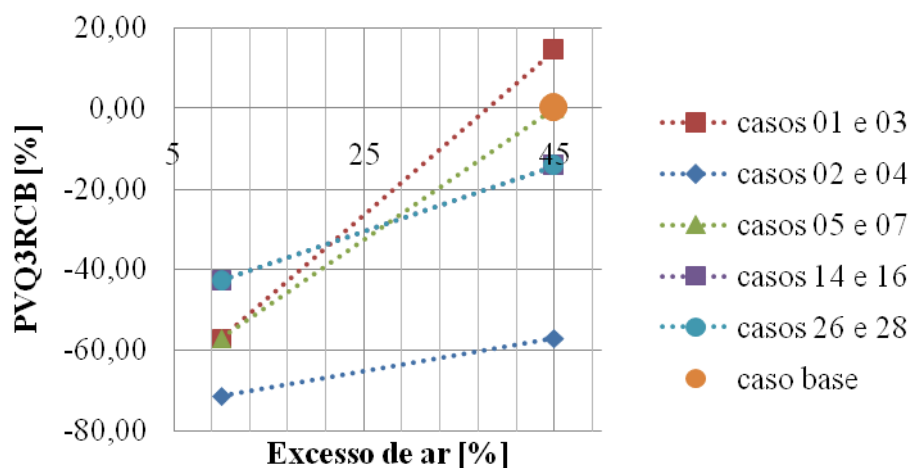


Figura 64 – Efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão química incompleta

A Figura 65 mostra o efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta, três dos cinco pares de casos apresentam um aumento marcado da perda com o aumento do excesso de ar, os outros dois casos apresentam um aumento da perda quase insignificante. O comportamento mostrado nesta figura é basicamente inverso ao da Figura 62, o qual é o esperado visto que maiores temperaturas favorecem a liberação de voláteis e queima do carbono fixo residual diminuindo a perda por combustão mecânica incompleta como é o caso das simulações com 10% de excesso de ar.

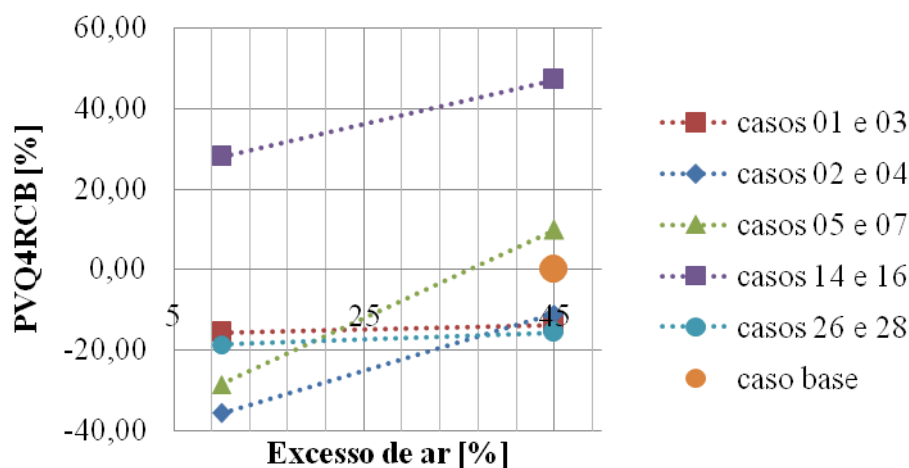


Figura 65 – Efeito do excesso de ar sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta

A Figura 66 mostra o efeito do excesso de ar sobre a eficiência da combustão, onde três dos cinco casos mostram perda marcada e os outros dos casos mostram uma perda de

eficiência leve de ao aumentar o excesso de ar, este comportamento é também o esperado baseados na mesma análise da Figura 65.

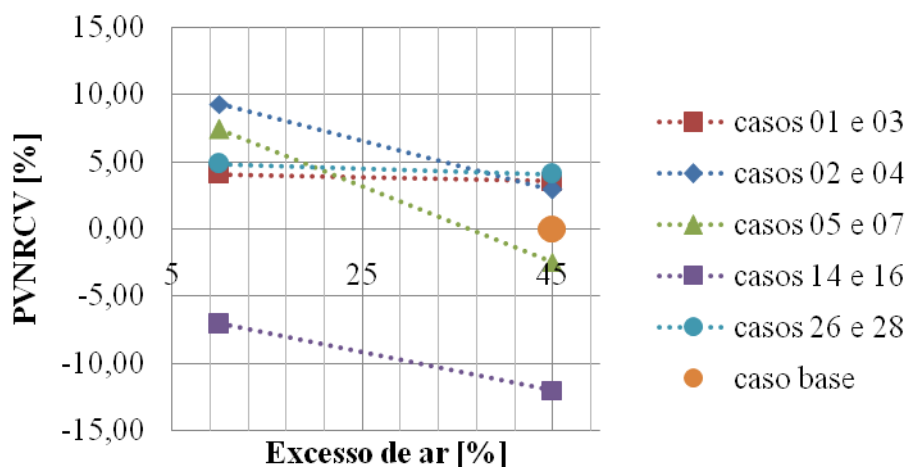


Figura 66 – Efeito do excesso de ar sobre a eficiência da combustão

5.4 EFEITO DA CONFIGURAÇÃO AERODINÂMICA DO AR SECUNDÁRIO

Entre os dados disponíveis, foi possível selecionar sete pares de casos, sendo que cada caso foi simulado com as mesmas condições do seu par exceto pela configuração dos injetores de ar secundário. Onde "atual" corresponde à configuração do caso base na qual dos 10 níveis de ar secundário os três superiores estão orientados para formar um vórtice girando em sentido horário e os sete inferiores um vórtice em sentido anti-horário e "centro" corresponde a todos os injetores apontando ao eixo central da fornalha em planos horizontais. As condições de cada caso podem ser vistas na Tabela 35.

A Figura 67 mostra o efeito da aerodinâmica do ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha, nos sete pares de casos observa-se claramente que a configuração "atual" (três níveis superiores formando um vórtice no sentido horário e os sete níveis inferiores um vórtice no sentido anti-horário) a temperatura na saída da fornalha é maior do que na configuração "centro" (todos os injetores apontando ao eixo central). A configuração de vórtices promove um maior tempo de residência dos gases quentes no interior da fornalha.

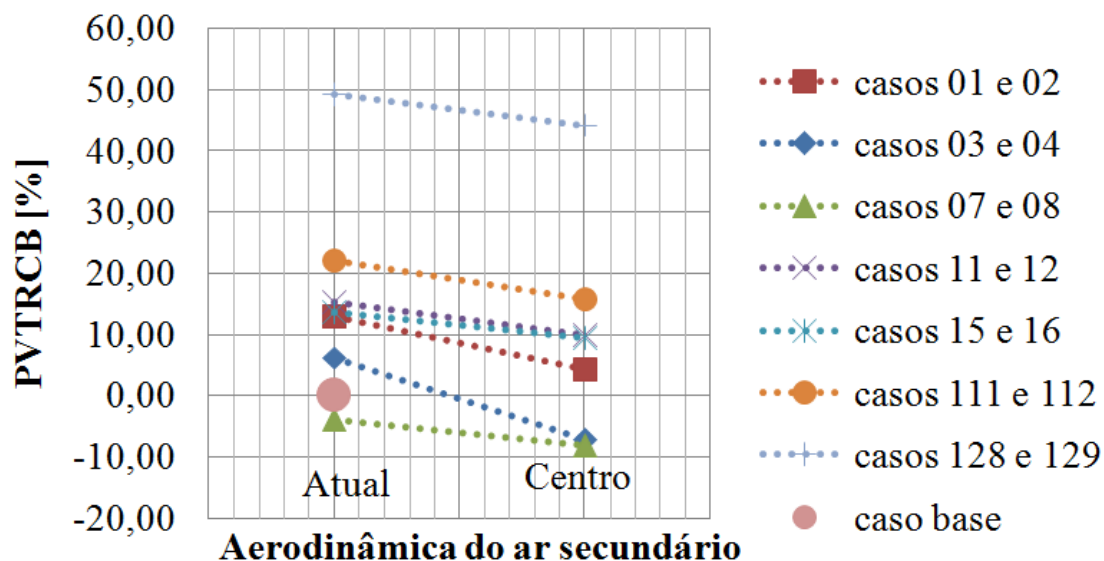


Figura 67 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a temperatura dos gases na saída da fornalha.

A Figura 68 mostra o efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha e nesta é possível observar que em quatro dos sete casos as paredes absorvem menos calor na configuração "centro".

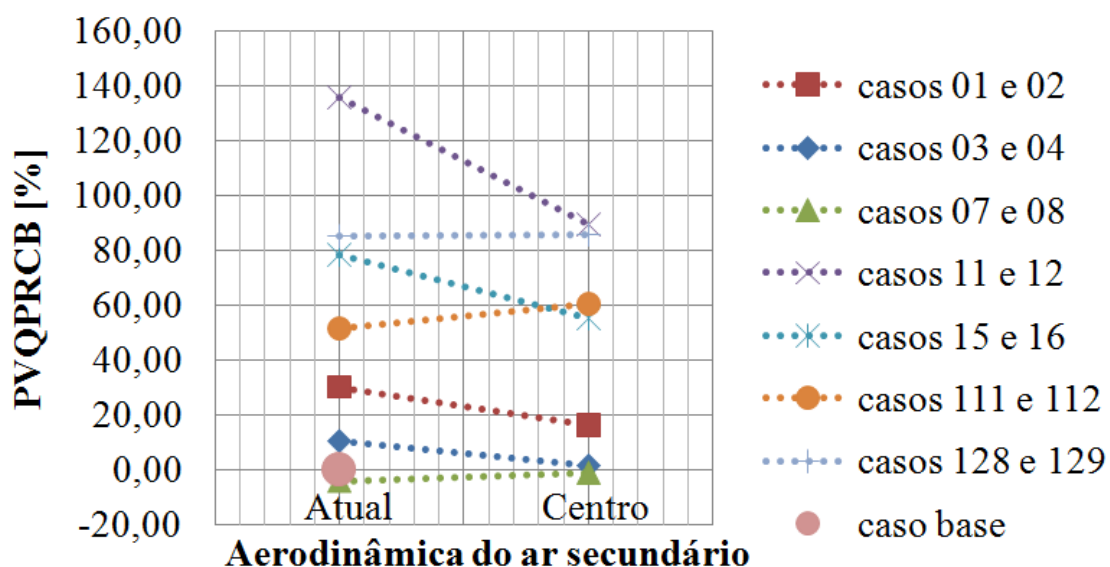


Figura 68 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre o calor absorvido pelas paredes d'água da fornalha

A Figura 69 mostra o efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor combustão química incompleta em seis dos sete pares de casos a perda é menor na configuração "centro".

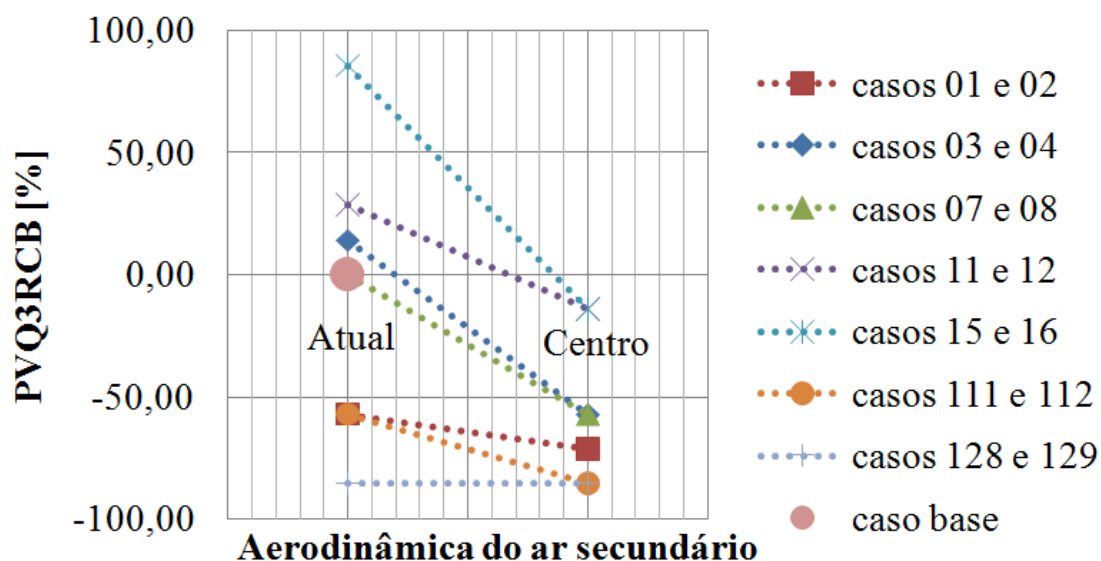


Figura 69 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor combustão química incompleta

A Figura 70 mostra o efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta, não é possível observar uma relação muito clara entre estas duas variáveis, o qual significa que outras variáveis têm forte influência sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta.

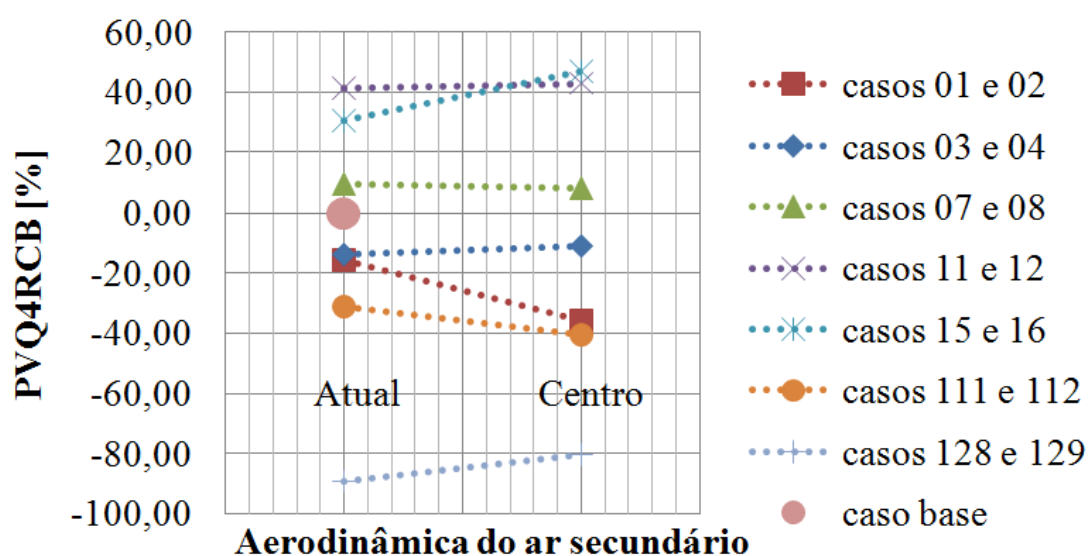


Figura 70 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a perda de calor por combustão mecânica incompleta

A Figura 71 mostra o efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a eficiência da combustão, nesta também não fica muito clara a relação entre as duas configurações aerodinâmicas estudadas e a eficiência da combustão.

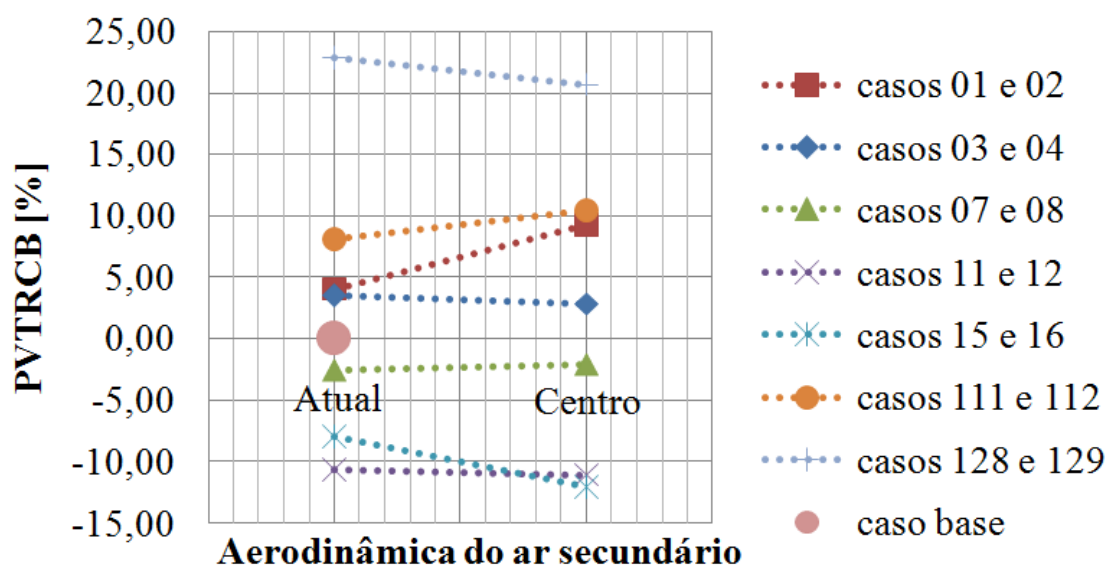


Figura 71 – Efeito da configuração aerodinâmica do ar secundário sobre a eficiência da combustão

Capítulo 6

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

6.1 CONCLUSÕES

- Foi estabelecido e apresentado um método para modelagem numérica CFD da combustão de bagaço e palha da cana-de-açúcar numa caldeira industrial no aplicativo comercial ANSYS FLUENT, incluindo funções programadas em linguagem C para representar processos que não estariam disponíveis no software como a taxa de liberação de voláteis e a queima em grelha.
- Mediante o método OFW foram determinados parâmetros cinéticos da devolatilização do bagaço e da palha da cana-de-açúcar, mas na simulação é necessário colocar especial atenção à representação matemática do final do processo da devolatilização onde o processo de liberação dos voláteis pode se tornar lento, retrasando o início da queima do carbono fixo o qual pode estar gerando previsões de não queimados sólidos acima do esperado.
- No caso das biomassas estudadas, é possível apreciar que a devolatilização é o fenômeno que acontece na maior parte do tempo que as partículas se encontram em suspensão no interior da fornalha, daí a importância de uma boa representação matemática da velocidade de liberação de voláteis, especialmente para partículas menores as quais tentem a se queimar em suspensão.

- Mediante os resultados fornecidos pelo modelo foi possível quantificar a eficiência da queima e verificar a sua variação nas diversas condições simuladas.

6.2 RECOMENDAÇÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

- Como mencionado anteriormente, o CFD fornece detalhes do processo que com outras técnicas seria impossível se obter. Mas, para ter maior confiança nestes resultados, assim como também maior controle sobre a definição de características do processo a serem incluídas no modelo, recomenda-se acompanhar a modelagem e simulações com grande número de observações experimentais.
- Neste trabalho optou-se pelo uso de malhas hexaedras multiblocos devido a que este tipo de malha normalmente consome menos memória no computador, mas ao mesmo tempo, este tipo de malha pode não representar corretamente algumas partes da geometria e isto pode provocar problemas de convergência nestas regiões, também para aplicar este tipo de malha é preciso simplificar bastante a geometria. Sugere-se em trabalhos futuros fazer um estudo de malhas, utilizando incluso outro tipo de malhas que possam representar melhor certas partes da geometria mesmo com o custo computacional em memória.
- Incluir um modelo sobre formação de NOx
- Incluir um estudo sobre a influência dos parâmetros de entrada do combustível e o ar pneumático.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABEL SEABRA, J. E. **Avaliação técnico-econômica de opções para o aproveitamento integral da biomassa de cana no Brasil**. 2008. Tese (Doutor). Universidade Estadual de Campinas

ABOYADE, A. O.; HUGO, T. J.; CARRIER, M.; MEYER, E. L.; STAHL, R.; KNOETZE, J. H.; GÖRGENS, J. F. Non-isothermal kinetic analysis of the devolatilization of corn cobs and sugar cane bagasse in an inert atmosphere. **Thermochimica Acta**, v. 517, n. 1–2, p. 81-89 2011

ALVES, M. **Estudo de sistemas de cogeração em usinas de açúcar e álcool, com utilização do bagaço e palha da cana**. 2011. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Química, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

ANSYS, I. **ANSYS FLUENT Theory Guide (Release 14.0)**: 774 p. 2011

BACKREEDY, R. I.; FLETCHER, L. M.; JONES, J. M.; MA, L.; POURKASHANIAN, M.; WILLIAMS, A. Co-firing pulverised coal and biomass: a modeling approach. **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 30, n. 2, p. 2955-2964 2005

BACKREEDY, R. I.; HABIB, R.; JONES, J. M.; POURKASHANIAN, M.; WILLIAMS, A. An extended coal combustion model. **Fuel**, v. 78, n. 14, p. 1745-1754 1999

BADZIOCH, S.; HAWKSLEY, P. G. Kinetics of thermal decomposition of pulverized coal particles. **Industrial & Engineering Chemistry Process Design and Development**, v. 9, n. 4, p. 521-530 1970

BANCO NACIONAL DE DESENVOLVIMENTO ECONÔMICO E, S.; CENTRO DE GESTÃO E ESTUDOS, E. **Sugarcane-based bioethanol : energy for sustainable development**. Rio de Janeiro: BNDES, 2008.

BARBOSA, R. D. **Secagem do bagaço de cana de açúcar em um Sistema Pneumático**. 1992. Dissertação (Mestrado). UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

BAUM, M.; STREET, P. Predicting the combustion behaviour of coal particles. **Combustion Science and Technology**, v. 3, n. 5, p. 231-243 1971

BAXTER, L. Biomass-coal co-combustion: opportunity for affordable renewable energy. **Fuel**, v. 84, n. 10, p. 1295-1302 2005

BEATÓN SOLER, P.; SILVA LORA, E. E. **Pruebas de balance térmico en calderas para bagazo**. Ediciones ISPJAM, 1991.

BEEHARRY, R. P. Extended sugarcane biomass utilisation for exportable electricity production in Mauritius. **Biomass and Bioenergy**, v. 11, n. 6, p. 441-449 1996

BELOSEVIC, S. Modeling Approaches to Predict Biomass Co-firing with Pulverized Coal. **The Open Thermodynamics Journal**, n. 4, p. 50-70 2010

BHARADWAJ, A.; BAXTER, L. L.; ROBINSON, A. L. Effects of Intraparticle Heat and Mass Transfer on Biomass Devolatilization: Experimental Results and Model Predictions. **Energy & Fuels**, v. 18, n. 4, p. 1021-1031 2004

BOOG, E. G.; CODOLO, M. C.; BIZZO, W. A. Resíduos agrícolas de cana-de-açúcar - novas perspectivas para geração de energia elétrica no estado de São Paulo. In: PANTANO FILHO, R.; ROSA, D. D. S., *et al* (Ed.). **Desenvolvimento Sustentável**. Itatiba, SP, Brasil: Berto Editora, 2008. p.197-207.

BOTHA, T.; VON BLOTTNITZ, H. A comparison of the environmental benefits of bagasse-derived electricity and fuel ethanol on a life-cycle basis. **Energy Policy**, v. 34, n. 17, p. 2654-2661 2006

BOYD, R. K.; KENT, J. H. Three dimensional furnace computer modelling. Proceedings of the 21st international Symposium on Combustion, , 1986. The Combustion Institute, Pittsburg. p.265–274.

BOYD, R. K.; KENT, J. H. Three-dimensional furnace computer modelling. **Symposium (International) on Combustion**, v. 21, n. 1, p. 265-274 1988

BRENTROP, F.; KÜSTERS, J.; KUHLMANN, H.; LAMMEL, J. Application of the Life Cycle Assessment methodology to agricultural production: an example of sugar beet production with different forms of nitrogen fertilisers. **European Journal of Agronomy**, v. 14, n. 3, p. 221-233 2001

BRIDGWATER, A. V.; TOFT, A. J.; BRAMMER, J. G. A techno-economic comparison of power production by biomass fast pyrolysis with gasification and combustion. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 6, n. 3, p. 181-246 2002

CENTENO GONZÁLEZ, F. O. **Avaliação da combustão de bagaço e palha de cana-de-açúcar numa fornalha de caldeira industrial AMD a partir da modelagem por CFD**. 2015. (Doutorado). Instituto de Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Itajuba, MG, Brasil.

CHAUHAN, M. K.; VARUN; CHAUDHARY, S.; KUMAR, S.; SAMAR. Life cycle assessment of sugar industry: A review. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 15, n. 7, p. 3445-3453 2011

CHEN, Y.; CHARPENAY, S.; JENSEN, A.; WÓJTOWICZ, M. A.; SERIO, M. A. Modeling of biomass pyrolysis kinetics. **Symposium (International) on Combustion**, v. 27, n. 1, p. 1327-1334 1998

CONVENÇÃO DAS NAÇÕES UNIDAS SOBRE MUDANÇA CLIMÁTICA, U. 2012 Disponível em: < <http://cdm.unfccc.int/Projects/projsearch.html> >.

COPERSUCAR. Cooperativa de Produtores de Cana-de-Açúcar, Açúcar e Álcool do Estado de São Paulo. 2007. Disponível em: < www.copersucar.com.br >.

CORRÊA, J. L. **Discussão dos parâmetros de projeto do Secador Ciclônico**. 2003. Tese (Doutorado). UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

CORTEZ, L. A. B.; LORA, E. E. S.; GÓMEZ, E. O. **Biomassa para energia**. Campinas: Editora Unicamp, 2008.

COVEY, G.; RAINEY, T. J.; SHORE, D. The potential for bagasse pulping in Australia. 2006. Disponível em: < <http://eprints.qut.edu.au/6782/> >.

DANTAS, G. A.; LEGEY, L. F. L.; MAZZONE, A. Energy from sugarcane bagasse in Brazil: An assessment of the productivity and cost of different technological routes. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 21, n. 0, p. 356-364 2013

DE CARVALHO MACEDO, I. The sugar cane agro-industry—Its contribution to reducing CO₂ emissions in Brazil. **Biomass and Bioenergy**, v. 3, n. 2, p. 77-80 1992

DEMIRBAS, A. Potential applications of renewable energy sources, biomass combustion problems in boiler power systems and combustion related environmental issues. **Progress in Energy and Combustion Science**, v. 31, n. 2, p. 171-192 2005

DIAS, M. O. S.; CUNHA, M. P.; JESUS, C. D. F.; ROCHA, G. J. M.; PRADELLA, J. G. C.; ROSSELL, C. E. V.; MACIEL FILHO, R.; BONOMI, A. Second generation ethanol in Brazil: Can it compete with electricity production? **Bioresource Technology**, v. 102, n. 19, p. 8964-8971 2011

DIAS, M. O. S.; MODESTO, M.; ENSINAS, A. V.; NEBRA, S. A.; FILHO, R. M.; ROSSELL, C. E. V. Improving bioethanol production from sugarcane: evaluation of distillation, thermal integration and cogeneration systems. **Energy**, v. 36, n. 6, p. 3691-3703 2011

DIXON, T. F.; MANN, A. P.; PLAZA, F.; GILFILLAN, W. N. Development of advanced technology for biomass combustion—CFD as an essential tool. **Fuel**, v. 84, n. 10, p. 1303-1311 2005

DONZELLI, J. L. **Efeitos agronômicos da palha no campo. Geração de energia por biomassa: bagaço e palha.** Projeto BRA/96/G31. Piracicaba, SP, Brasil 2005

DRUMMOND, A.-R. F.; DRUMMOND, I. W. Pyrolysis of Sugar Cane Bagasse in a Wire-Mesh Reactor. **Industrial & Engineering Chemistry Research**, v. 35, n. 4, p. 1263-1268 1996

EASTWICK, C. N.; PICKERING, S. J.; AROUSSI, A. Comparisons of two commercial computational fluid dynamics codes in modelling pulverised coal combustion for a 2.5 MW burner. **Applied Mathematical Modelling**, v. 23, n. 6, p. 437-446 1999

ENERGÉTICA, E. E. D. P. **Plano Nacional de Energia 2030 [online]** 2008 Disponível em: < http://www.epe.gov.br/PNE/20080512_8.pdf >.

ENSINAS, A. V.; NEBRA, S. A.; LOZANO, M. A.; SERRA, L. M. Analysis of process steam demand reduction and electricity generation in sugar and ethanol production from sugarcane. **Energy Conversion and Management**, v. 48, n. 11, p. 2978-2987 2007

ERLICH, C.; ÖHMAN, M.; BJÖRNBOM, E.; FRANSSON, T. H. Thermochemical characteristics of sugar cane bagasse pellets. **Fuel**, v. 84, n. 5, p. 569-575 2005

FAO. **Food and Agricultural commodities production** 2013 Disponível em: < <http://faostat.fao.org/site/339/default.aspx> >.

FIELD, M. A. Rate of combustion of size-graded fractions of char from a low-rank coal between 1 200°K and 2 000°K. **Combustion and Flame**, v. 13, n. 3, p. 237-252 1969

FLYNN, J. H.; WALL, L. A. A quick, direct method for the determination of activation energy from thermogravimetric data. **Journal of Polymer Science Part B: Polymer Letters**, v. 4, n. 5, p. 323-328 1966

GABRA, M.; PETTERSSON, E.; BACKMAN, R.; KJELLSTRÖM, B. Evaluation of cyclone gasifier performance for gasification of sugar cane residue—Part 1: gasification of bagasse. **Biomass and Bioenergy**, v. 21, n. 5, p. 351-369 2001a

GABRA, M.; PETTERSSON, E.; BACKMAN, R.; KJELLSTRÖM, B. Evaluation of cyclone gasifier performance for gasification of sugar cane residue—Part 2: gasification of cane trash. **Biomass and Bioenergy**, v. 21, n. 5, p. 371-380 2001b

GAN, G.; RIFFAT, S. B. Pressure loss characteristics of orifice and perforated plates. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 14, n. 2, p. 160-165 1997

GARCÍA-PÉREZ, M.; CHAALA, A.; YANG, J.; ROY, C. Co-pyrolysis of sugarcane bagasse with petroleum residue. Part I: thermogravimetric analysis. **Fuel**, v. 80, n. 9, p. 1245-1258 2001

GEOFF, C.; TOM, R.; DENNIS, S. The potential for bagasse pulping in Australia. **Appita journal**, 2006

GERA, D.; MATHUR, M. P.; FREEMAN, M. C.; ROBINSON, A. Effect of Large Aspect Ratio of Biomass Particles on Carbon Burnout in a Utility Boiler. **Energy & Fuels**, v. 16, n. 6, p. 1523-1532 2002

GHOSH, D.; SHUKLA, P. R.; GARG, A.; RAMANA, P. V. Renewable energy technologies for the Indian power sector: mitigation potential and operational strategies. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 6, n. 6, p. 481-512 2002

GUBBA, S. R.; INGHAM, D. B.; LARSEN, K. J.; MA, L.; POURKASHANIAN, M.; TAN, H. Z.; WILLIAMS, A.; ZHOU, H. Numerical modelling of the co-firing of pulverised coal and straw in a 300 MWe tangentially fired boiler. **Fuel Processing Technology**, v. 104, n. 0, p. 181-188 2012

HAIDER, A.; LEVENSPIEL, O. Drag coefficient and terminal velocity of spherical and nonspherical particles. **Powder technology**, v. 58, n. 1, p. 63-70 1989

HASSUANI, S. J.; VERDE LEAL, M. R. L.; DE CARVALHO MACEDO, I. **Biomass power generation. Sugar cane bagasse and trash**. Piracicaba, PS, Brasil: PNUD, CTC 2005

HO, K. **The Potential of Bagasse-Based Cogeneration in the US**. 2006. 13 MECE, Columbia University

HOFSETZ, K.; SILVA, M. A. Brazilian sugarcane bagasse: Energy and non-energy consumption. **Biomass and Bioenergy**, v. 46, n. 0, p. 564-573 2012

IBGE. **Evolução da produção da cultura de cana-de-açúcar no Brasil de 2003 a 2011** 2013
Disponível em: <
<http://www.sidra.ibge.gov.br/bda/tabela/protabl.asp?c=1612&i=P&nome=on&qtu8=137¬arodape=off&tab=1612&orc81=3&opn8=0&unit=0&pov=1&sec81=2696&OpcTipoNivt=1&opn1=2&nivt=0&opc81=1&orp=4&qtu3=27&opv=1&pop=3&opn2=0&orv=2&poc81=1&qtu2=5&sev=214&opp=1&opn3=2&qtu6=5552&ascendente=on&sep=39080&sep=29826&sep=19675&sep=43786&sep=38337&sep=35246&sep=33003&sep=30366&sep=28111&orn=1&xpon=2&qtu9=558&opn6=0&dig6=&OpcCara=44&proc=1&qtu1=1&opn9=0&cabec=on&decm=99>>.

KADAM, K. L. Environmental benefits on a life cycle basis of using bagasse-derived ethanol as a gasoline oxygenate in India. **Energy Policy**, v. 30, n. 5, p. 371-384 2002

KALTSCHMITT, M.; REINHARDT, G. A.; STELZER, T. Life cycle analysis of biofuels under different environmental aspects. **Biomass and Bioenergy**, v. 12, n. 2, p. 121-134 1997

KARTHA, S.; LARSON, E. D.; UNITED NATIONS DEVELOPMENT, P.; NORWAY. **Bioenergy primer : modernised biomass energy for sustainable development**. New York: UNDP, 2000.

KHAWAM, A.; FLANAGAN, D. R. Basics and applications of solid-state kinetics: A pharmaceutical perspective. **Journal of Pharmaceutical Sciences**, v. 95, n. 3, p. 472-498 2006

KIATKITTIPONG, W.; WONGSUCHOTO, P.; PAVASANT, P. Life cycle assessment of bagasse waste management options. **Waste Management**, v. 29, n. 5, p. 1628-1633 2009

KOBAYASHI, H.; HOWARD, J.; SAROFIM, A. F. Coal devolatilization at high temperatures. Proceedings of the Symposium (International) on Combustion, 1977. Elsevier. p.411-425.

KUO, K. K. Principles of combustion. **John Wiley & Sons, New York**, 1986

LAIDLER, K. J. The development of the Arrhenius equation. **Journal of Chemical Education**, v. 61, n. 6, p. 494 1984

LAUNDER, B. E. S. D. B. **Lectures in mathematical models of turbulence**. London; New York: Academic Press, 1972.

LEITE, R. C. D. C.; CORTEZ, L. A. B. **Estudo sobre as possibilidades e impactos da produção de grandes quantidades de etanol visando à substituição parcial de gasolina no mundo**. Campinas, SP, Brasil: CGEE - Centro de Gestão e Estudos Estratégicos 2009

LENÇO, P. C. **Caracterização do bagaço de cana-de-açúcar para geração de energia**. 2010. 181 Tese (Doutorado). Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

LORA, E. E. S.; NASCIMENTO, M. A. R. D. **Geração termelétrica planejamento, projeto e operação**. Rio de Janeiro: Interciência, 2004.

LORA, E. E. S.; SOLER, P. B.; SHESTAKOV, S. M. Pirolisis y combustión del bagazo. In: (Ed.). **Características técnicas, transporte neumático, clasificación y secado del bagazo de caña**, 1992.

LUO, M. **Combustion of bagasse in a sugar mill boiler**. 1993.

LUO, M.; STANMORE, B. The combustion characteristics of char from pulverized bagasse. **Fuel**, v. 71, n. 9, p. 1074-1076 1992

MA, L.; GHAREBAGHI, M.; PORTER, R.; POURKASHANIAN, M.; JONES, J. M.; WILLIAMS, A. Modelling methods for co-fired pulverised fuel furnaces. **Fuel**, v. 88, n. 12, p. 2448-2454 2009

MA, L.; JONES, J. M.; POURKASHANIAN, M.; WILLIAMS, A. Modelling the combustion of pulverized biomass in an industrial combustion test furnace. **Fuel**, v. 86, n. 12-13, p. 1959-1965 2007

MAGNUSSEN, B. F.; HJERTAGER, B. H. On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. **Symposium (International) on Combustion**, v. 16, n. 1, p. 719-729 1977

MANN, A. P.; PENNISI, S. N.; DIXON, T. F. Modelling of boiler tube erosion. **PROCEEDINGS- AUSTRALIAN SOCIETY OF SUGAR CANE TECHNOLOGISTS**, p. 369-375 2001

MANN, A. P.; PLAZA, F.; DIXON, T. F. Improving the prediction of convection bank heat transfer. **PROCEEDINGS- AUSTRALIAN SOCIETY OF SUGAR CANE TECHNOLOGISTS**, p. 58 2003

MEIRELLES, A. J. A. **Secagem de bagaço de cana em Leito fluidizado**. 1984. Dissertação (Mestrado). UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

MENDES, L. J. N. **Análise da deposição, crescimento e transferência de calor em depósitos de cinzas em tubos cilíndricos**. 2010. Tese (Doutorado). Programa de pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil.

MENDES, L. J. N.; BAZZO, E. Characterization and growth modeling of ash deposits in coal fired boilers. **Powder technology**, v. 217, n. 0, p. 61-68 2012

MILLER, R. S.; HARSTAD, K.; BELLAN, J. Evaluation of equilibrium and non-equilibrium evaporation models for many-droplet gas-liquid flow simulations. **International Journal of Multiphase Flow**, v. 24, n. 6, p. 1025-1055 1998

MIRZA, U. K.; AHMAD, N.; MAJEED, T. An overview of biomass energy utilization in Pakistan. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 12, n. 7, p. 1988-1996 2008

MOHEE, R.; BEEHARRY, R. P. Life cycle analysis of compost incorporated sugarcane bioenergy systems in Mauritius. **Biomass and Bioenergy**, v. 17, n. 1, p. 73-83 1999

MORSI, S.; ALEXANDER, A. An investigation of particle trajectories in two-phase flow systems. **J. Fluid Mech**, v. 55, n. 2, p. 193-208 1972

MOTHÉ, C.; MIRANDA, I. Study of kinetic parameters of thermal decomposition of bagasse and sugarcane straw using Friedman and Ozawa–Flynn–Wall isoconversional methods. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 113, n. 2, p. 497-505 2013

NASSAR, M. M.; ASHOUR, E. A.; WAHID, S. S. Thermal characteristics of bagasse. **Journal of Applied Polymer Science**, v. 61, n. 6, p. 885-890 1996

NEBRA, S. A. **Secagem Pneumática do bagaço**. 1985. Tese (Doutorado). UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

OGDEN, J.; WILLIAMS, R.; FULMER, M. Cogeneration applications of biomass gasifier/gas turbine technologies in the cane sugar and alcohol industries. Proceedings of the

energy and the environment in the 21st Century, 1990. Massachusetts, USA. 26–28 March. p.311–46.

OGDEN, J. M.; HOCHGREB, S.; HYLTON, M. Steam economy and cogeneration in cane sugar factories. **International Sugar Journal**, v. 92, p. 131-140 1990

OLIVARES GÓMEZ, E. **Projeto, construção e avaliação preliminar de um reator de leito fluidizado para gaseificação de bagaço de cana-de-açúcar**. 1996. Dissertação (Mestrado). Faculdade de Engenharia Agrícola. Departamento de construções rurais, UNICAMP

OMER, A. M. Biomass energy potential and future prospect in Sudan. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 9, n. 1, p. 1-27 2005

OZAWA, T. A new method of analyzing thermogravimetric data. **Bulletin of the chemical society of Japan**, v. 38, n. 11, p. 1881-1886 1965

RAMAJO-ESCALERA, B.; ESPINA, A.; GARCÍA, J. R.; SOSA ARNAO, J. H.; NEBRA, S. A. Model-free kinetics applied to sugarcane bagasse combustion. **Thermochimica Acta**, v. 448, n. 2, p. 111-116 2006

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. Evaporation from drops: Part I. **Chem. Eng. Prog.**, v. 48, n. 3, p. 141-146 1952a

RANZ, W. E.; MARSHALL, W. R. Evaporation from drops: Part II. **Chem. Engng. Prog.**, v. 48, n. 4, p. 173-180 1952b

REINALDO, R. F. **Estudo numérico da transferência de calor e deposição de cinzas em caldeiras com queima de carvão pulverizado**. 2004. Tese (Doutorado). Programa de pós-graduação em engenharia mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil.

RESENDE, F. L. P. D. **Comparação entre as técnicas de análise termogravimétrica e leito fluidizado para pirólise de biomassa**. 2003. Dissertação (Mestrado). Engenharia Mecânica, UNICAMP, Campinas, SP, Brasil.

RODRÍGUEZ, M. A. **Criterios de diseño de plantas termoeléctricas**. México: Limusa, 1981.

ROGERSON, J. W.; KENT, J. H.; BILGER, R. W. Conditional moment closure in a bagasse-fired boiler. **Proceedings of the Combustion Institute**, v. 31, n. 2, p. 2805-2811 2007

ROQUE-DIAZ, P.; UNIVERSITY, C.; VILLAS, L.; ZH. SHEMET, C. V.; LAVRENKO, V. A.; KHRISTICH, V. A. Studies on thermal decomposition and combustion mechanism of bagasse under non-isothermal conditions. **Thermochemica Acta**, v. 93, n. 0, p. 349-352 1985

SCHLAMADINGER, B.; APPS, M.; BOHLIN, F.; GUSTAVSSON, L.; JUNGMEIER, G.; MARLAND, G.; PINGOUD, K.; SAVOLAINEN, I. Towards a standard methodology for greenhouse gas balances of bioenergy systems in comparison with fossil energy systems. **Biomass and Bioenergy**, v. 13, n. 6, p. 359-375 1997

SEABRA, J. E. A.; MACEDO, I. C. Comparative analysis for power generation and ethanol production from sugarcane residual biomass in Brazil. **Energy Policy**, v. 39, n. 1, p. 421-428 2011

SEABRA, J. E. A.; TAO, L.; CHUM, H. L.; MACEDO, I. C. A techno-economic evaluation of the effects of centralized cellulosic ethanol and co-products refinery options with sugarcane mill clustering. **Biomass and Bioenergy**, v. 34, n. 8, p. 1065-1078 2010

SEPPO, K. **Forest Resources and Sustainable Management**. Finnish Paper Engineers' Association, 1998.

SHANMUKHARADHYA, K.; SUDHAKAR, K. Experimental investigations for the location of reaction zones in a bagasse fired furnace. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 90, n. 1, p. 299-306 2007

SHANMUKHARADHYA, K. S. Simulation and Thermal Analysis of the Effect of Fuel Size on Combustion in an Industrial Biomass Furnace. **Energy & Fuels**, v. 21, n. 4, p. 1895-1900 2007

SHANMUKHARADHYA, K. S.; RAMACHANDRAN, K. Numerical and experimental investigations for optimisation of plant capacity for bagasse fired furnace. **Journal of the Energy Institute**, v. 82, n. 2, p. 69-75 2009

SHANMUKHARADHYA, K. S.; SUDHAKAR, K. G. Effect of Fuel Moisture on Combustion in a Bagasse Fired Furnace. **Journal of Energy Resources Technology**, v. 129, n. 3, p. 248-253 2007a

SHANMUKHARADHYA, K. S.; SUDHAKAR, K. G. Investigations of effect of bagasse pyrolysis kinetics on combustion and boiler performance. **Journal of the Energy Institute**, v. 80, n. 1, p. 40-45 2007b

SHENG, C.; MOGHTADERI, B.; GUPTA, R.; WALL, T. F. A computational fluid dynamics based study of the combustion characteristics of coal blends in pulverised coal-fired furnace. **Fuel**, v. 83, n. 11–12, p. 1543-1552 2004

SIDDHARTHA BHATT, M.; RAJKUMAR, N. Mapping of combined heat and power systems in cane sugar industry. **Applied Thermal Engineering**, v. 21, n. 17, p. 1707-1719 2001

SILVA LORA, E. E.; PARAMONOV, A. P. **SBC - Steam boilers calculations (software)** 2003

SMITH, I. W. The combustion rates of coal chars: A review. **Symposium (International) on Combustion**, v. 19, n. 1, p. 1045-1065 1982

SMITH, J. D. **Foundations of a three-dimensional model for predicting coal combustion characteristics in industrial power generation plants**. 1990. thesis (PhD). Bingham Young University, Provo, Utah, Estados Unidos.

SOSA ARNAO, J. H. **Caldeiras Aguatubulares de Bagaço-Estudo do Sistema de Recuperação de Energia**. 2007. 224 Tese (Doutor). Faculdade de Engenharia Mecânica, UNICAMP

STASTNY, M.; AHNERT, F.; SPLIETHOFF, H. Three-dimensional combustion modelling of a biomass fired pulverized fuel boiler. In: SUNDEN, B. e BREBBIA, C. A. (Ed.). **Advanced Computational Methods in Heat Transfer VII**, 2002. ISBN 1853129062.

VYAZOVKIN, S. A unified approach to kinetic processing of nonisothermal data. **International Journal of Chemical Kinetics**, v. 28, n. 2, p. 95-101 1996

VYAZOVKIN, S. Evaluation of activation energy of thermally stimulated solid-state reactions under arbitrary variation of temperature. **Journal of Computational Chemistry**, v. 18, n. 3, p. 393-402 1997

VYAZOVKIN, S.; LINERT, W. False isokinetic relationships found in the nonisothermal decomposition of solids. **Chemical Physics**, v. 193, n. 1–2, p. 109-118 1995

VYAZOVKIN, S.; SBIRRAZZUOLI, N. Confidence intervals for the activation energy estimated by few experiments. **Analytica Chimica Acta**, v. 355, n. 2–3, p. 175-180 1997

VYAZOVKIN, S.; WIGHT, C. A. Isothermal and non-isothermal kinetics of thermally stimulated reactions of solids. **International Reviews in Physical Chemistry**, v. 17, n. 3, p. 407-433 1998

VYAZOVKIN, S.; WIGHT, C. A. Model-free and model-fitting approaches to kinetic analysis of isothermal and nonisothermal data. **Thermochimica Acta**, v. 340–341, n. 0, p. 53-68 1999

WILHELMY, L. Ueber das Gesetz, nach welchem die Einwirkung der Säuren auf den Rohrzucker stattfindet. **Annalen der Physik**, v. 157, n. 12, p. 499-526 1850

WOODFIELD, P. L. **Combustion instability in bagasse-fired furnaces**. 2001. Tese (Doutorado). Mechanical and Mechatronic Engineering, Graduate School of Engineering, University of Sydney, Sydney, Austrália.

WOODFIELD, P. L.; KENT, J. H.; DIXON, T. F. Temperature measurements in a bagasse-fired furnace - experimental and numerical results. Proceedings of the Australian society of sugar cane technologists, 1997. p.473-478.

WOODFIELD, P. L.; KENT, J. H.; DIXON, T. F. Computational modelling of a bagasse-fired furnace - effects of fuel moisture. Proceedings of the Australian Society of Sugar Cane Technologists, 1998. p.458-464.

WOODFIELD, P. L.; KENT, J. H.; DIXON, T. F. Computational modelling of combustion instability in bagasse-fired furnaces. **Experimental Thermal and Fluid Science**, v. 21, n. 1–3, p. 17-25 2000

ZAHIROVIC, S.; SCHARLER, R.; OBERNBERGE, I. advanced cfd modelling of pulverised biomass combustion. <http://bios-bioenergy.at>, 2004

ZAKHAROV, V. Y.; SHCHUCHKIN, I. A. Kinetics of evolution of individual gases in the course of shale thermal decomposition. **Journal of Thermal Analysis and Calorimetry**, v. 31, n. 3, p. 581-587 1986

Apêndice A

MODELOS MATEMÁTICOS NA FORMULAÇÃO CFD

Nesta secção é apresentada a formulação matemática dos diversos submodelos utilizados na abordagem CFD do problema de queima de biomassa polidispersa. A maior parte do exposto é baseada na documentação do software ANSYS FLUENT 14.0.

A.1 MODELO DE FASE CONTÍNUA

A.1.1 Forma geral das equações de conversão do fluido

A.1.1.1 Equação da conservação da massa

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

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (\text{A.1})$$

A equação (A.1) é a forma geral da equação da conservação da massa e é válida tanto para fluxos compressíveis ou 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.

A.1.1.2 Equação de conservação do momento

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

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{v}) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (\text{A.2})$$

Onde p é a pressão estática, $\bar{\tau}$ é o tensor viscoso (descrito abaixo), e $\rho \vec{g}$ e $\vec{F}$ são a força de campo (por exemplo, a gravitacional) e a força externa (por exemplo, a que surge da interação com a fase dispersa).

O tensor viscoso $\bar{\tau}$ é dado por:

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

Onde μ é a viscosidade dinâmica ou absoluta, I é o tensor unitário. O segundo termo do lado direito é o efeito da dilatação volumétrica.

A.1.1.2.1 Equações de momento para meio poroso

O modelo de meio poroso de ANSYS FLUENT pode ser útil para uma grande quantidade de aplicações, muitas delas encontradas em caldeiras, por exemplo, para representar fluxo através de leito fixo, pratos perfurados, distribuidores e banco de tubos. Quando se usa o modelo de meio poroso deve ser selecionada uma zona do domínio no qual será aplicado o modelo.

O meio poroso é modelado adicionando termo fonte S_i à equação de conservação de momento (A.2). O termo fonte é composto de duas partes: o termo de perda viscosa (o primeiro termo do lado direito da equação (A.4)) e o termo de perda inercial (o segundo termo do lado direito da equação (A.4))

$$S_i = - \left(\sum_{j=1}^3 D_{ij} \mu v_j + \sum_{j=1}^3 C_{ij} \frac{1}{2} \rho |v| v_j \right) \quad (\text{A.4})$$

Na equação (A.4) j representa o enésimo termo do vetor (x , y , ou z) ou equação de momento, $|v|$ é a magnitude da velocidade e D e C são matrizes prescritas, que podem ser

conhecidas como resistência viscosa e resistência inercial respectivamente. Este termo fonte representado na equação (A.4) contribui ao gradiente de pressão no domínio poroso, criando uma queda de pressão proporcional à velocidade do fluido (ou ao quadrado da velocidade) na célula.

A.1.1.3 Equação de conservação da energia

A equação de conservação da energia pode ser escrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\vec{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad (A.5)$$

Onde k_{eff} é a condutividade efetiva ($k + k_t$, onde k_t é a condutividade térmica turbulenta, definida de acordo com o modelo de turbulência utilizado), e $\vec{J}_j$ é o fluxo de difusão de espécies j . Os primeiros três termos do lado direito da equação (A.5) representam transferência de energia devido à condução, difusão de espécies, e dissipação viscosa respectivamente. O termo fonte S_h inclui o calor de reações químicas, e qualquer outra fonte de calor definida.

Na equação (A.5) acima:

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (A.6)$$

Onde h é a entalpia sensível para gases e é definida como:

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (A.7)$$

E para fluxo incompressível como:

$$h = \sum_j Y_j h_j + \frac{p}{\rho} \quad (A.8)$$

Nas equações (A.7) e (A.8) acima, Y_j é a fração mássica da espécie j e:

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p_j} dT \quad (A.9)$$

Onde T_{ref} é 298.15 K.

A.1.2 Equação de estado do gás ideal

Assume-se que todas as espécies gasosas envolvidas obedecem à lei dos gases perfeitos que pode ser escrita como:

$$p = n \frac{RT}{V} \quad (\text{A.10})$$

Onde R é a constante universal dos gases ideais ($8,314472 \text{ J/mol} \cdot \text{K}$), T e V são respectivamente temperatura e volume da mistura, n número total de moles na mistura e p pressão total da mistura.

A relação entre o calor específico à pressão constante c_p e o calor específico a volume constante c_v se expressa como:

$$c_p - c_v = nR \quad (\text{A.11})$$

A.2 TRANSPORTE DE ESPÉCIES E TAXA QUÍMICA FINITA PELO MODELO DE DISSIPACÃO POR VÓRTICES

A mistura e transporte de espécies são modelados por solucionar equações de conservação descrevendo convecção, difusão e fontes de reações para cada espécie componente. É possível modelar múltiplas reações químicas simultâneas, com reações acontecendo na fase principal (meio contínuo) e/ou sobre uma parede ou sobre a superfície de uma partícula, e numa região porosa.

A.2.1 Equações de transporte de espécies

A predição da fração mássica local de cada espécie é feita através da solução de uma equação de convecção-difusão para a espécie i . Esta equação de conservação toma a seguinte forma geral:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (\text{A.12})$$

Onde R_i é a taxa neta de produção da espécie i por reações químicas e S_i é a taxa de criação por adição de uma fase discreta mais qualquer fonte definida pelo usuário. Uma equação desta forma será resolvida para $N - 1$ espécies onde N é o número total de espécies químicas de fase fluida presentes no sistema. Como a fração mássica das espécies deveria somar a unidade, a enésima fração mássica é determinada por diferença, e para minimizar erros numéricos, a enésima espécie deverá ser escolhida como sendo aquela com a maior fração mássica, por exemplo, N_2 no fenômeno da combustão quando o oxidante é ar.

A.2.2 Difusão mássica em fluxos turbulentos

Em fluxos turbulentos, a difusão mássica toma a forma da equação (A.13)

$$\vec{J}_i = -\left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t}\right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (\text{A.13})$$

onde Sc_t é o número de Schmidt turbulento ($\frac{\mu_t}{\rho D_t}$ onde μ_t é a viscosidade turbulenta e D_t é a difusividade turbulenta).

A.2.3 Tratamento do transporte de espécies na equação da energia

O transporte de entalpia devido à difusão de espécies (equação (A.14)) pode ter um efeito significativo sobre o campo de entalpia e então não pode ser considerado desprezível. Em particular quando o número de Lewis (equação) para alguma espécie está longe da unidade.

$$\nabla \cdot \left[\sum_{i=1}^n h_i \vec{J}_i \right] \quad (\text{A.14})$$

$$Le_i = \frac{k}{\rho c_p D_{i,m}} \quad (\text{A.15})$$

Na equação (A.15), k é a condutividade térmica.

A.2.4 Formulação da taxa finita de reação pelo modelo de dissipação por vórtices

Muitos combustíveis são queimados rapidamente, e nestes a taxa global da reação é controlada pela mistura turbulenta. Em combustão de chamas não pré-misturadas, por exemplo, na queima de combustíveis sólidos, a turbulência lentamente dirige/mistura combustível e oxidante nas zonas de reação onde eles são queimados rapidamente. Neste caso a combustão pode ser considerada "limitada pela mistura", e as complexas, e muitas vezes desconhecidas, taxas de cinética química pode ser desprezadas com segurança.

O modelo de dissipação por vórtices calcula R_i (taxa neta de produção da espécie i por reações químicas) assumindo que esta é controlada pela turbulência, então podem ser evitados os computacionalmente custosos cálculos de cinética química por equações de Arrhenius. Este modelo é computacionalmente barato e dá resultados realísticos para mecanismos de um ou até dois passos de liberação de calor.

Este modelo é baseado no trabalho de Magnussen e Hjertager (1977) e é conhecido como *Eddy-dissipation model*. Neste, a taxa neta de produção da espécie i devida à reação r , $R_{i,r}$, é dado pela menor valor obtido pela equação (A.16) ou a (A.17)

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_{\mathcal{R}} \left(\frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad (\text{A.16})$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}} \quad (\text{A.17})$$

Nas equações (A.16) e (A.17)

Y_P = fração mássica de qualquer espécie nos produtos, P

$Y_{\mathcal{R}}$ = fração mássica de um reagente particular, $\mathcal{R}$

A = uma constante empírica igual a 4.0

B = uma constante empírica igual a 0.5

A.3 TURBULÊNCIA

O fenômeno estudado nesta pesquisa é um problema de combustão turbulenta. Para considerar as características do estado caótico e randômico do movimento turbulento, onde

velocidade, pressão e outros parâmetros variam continuamente com o tempo, são usadas técnicas estatísticas. Neste método, todas as propriedades ϕ são descompostas num valor principal estável $\bar{\phi}$ e uma componente flutuante ϕ' , como pode ser observado nesta equação:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (\text{A.18})$$

Esta suposição é considerada suficientemente racional no campo da engenharia. Resultados obtidos depois da sua aplicação podem prover informação adequada sobre o progresso do fluxo turbulento, enquanto se evita o alto custo de tempo de cálculo computacional.

Especificamente, o modelo $k - \varepsilon$ padrão e outros tipos de modificações do mesmo são empregados nesta pesquisa para estudar o problema.

A.3.1 Modelo $k - \varepsilon$ padrão

A.3.1.1 Visão geral

Proposto por Launder (1972) este modelo de turbulência de duas equações permite a determinação de ambos, uma longitude turbulenta e escala de tempo, solucionando duas equações de transporte separadas. Robustez, economia, e precisão razoável para uma ampla gama de fluxos turbulentos, explicam a sua popularidade em simulações de fluxos industriais e transferência de calor. É um modelo semi-empírico, então a derivação das equações do modelo leva considerações fenomenológicas e empíricas.

O modelo $k - \varepsilon$ padrão é um modelo baseado na modelagem das equações de transporte para energia cinética (k) e a sua taxa de dissipação (ε). O modelo de equação de transporte para k é derivado da equação exata, enquanto que o modelo de equação de transporte para ε foi obtido usando raciocínio físico e tem pouca semelhança com a sua homóloga matematicamente exata.

A.3.1.2 Equações de transporte

As equações de transporte para energia cinética (k) e a sua taxa de dissipação (ε) são:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (\text{A.19})$$

E

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (\text{A.20})$$

Nas equações (A.19) e (A.20), 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 à flutuabilidade. Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante em turbulência compressível à taxa total de dissipação. σ_k e σ_ε são os números de Prandtl turbulento para k e ε respectivamente. S_k e S_ε são termos fonte definidos pelo usuário.

A.3.1.3 Modelando a viscosidade turbulenta

A viscosidade turbulenta (μ_t) é calculada combinando k e ε como segue:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (\text{A.21})$$

Onde C_μ é uma constante.

A.3.1.4 Constantes do modelo

As constantes do modelo $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ , σ_k , e σ_ε por default possuem valores experimentais definidos por Launder (1972)

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

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

$$C_\mu = 0.09$$

$$\sigma_k = 1.0$$

$$\sigma_\varepsilon = 1.3$$

A.4 RADIAÇÃO

A equação da transferência por radiação (ETR) para um médio absorvendo, emitindo e espalhando radiação na posição $\vec{r}$ na direção $\vec{s}$ é:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (\text{A.22})$$

Onde:

$\vec{r}$ = vetor de posição

$\vec{s}$ = vetor de direção

$\vec{s}'$ = vetor de direção da dispersão

s = comprimento do trajeto

a = coeficiente de absorção

n = índice refrativo

σ_s = coeficiente de dispersão

σ = constante de Stefan-Boltzmann ($5.669 \times 10^{-8} \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}^4$)

I = intensidade da radiação

T = temperatura local

Φ = função de fase

Ω' = ângulo sólido

A.4.1 Modelo de radiação por ordenadas discretas

O modelo de radiação por ordenadas discretas, resolve a ETR para um número finito de ângulos sólidos discretos, cada um deles associado a um vetor de direção $\vec{s}$ fixo no sistema cartesiano global (x, y, z), então é possível controlar a finura da discretização angular. O modelo de ordenadas discretas transforma a equação (A.22) numa equação de transporte para a intensidade da radiação nas coordenadas espaciais (x, y, z).

O modelo de ordenadas discretas considera a ETR na direção $\vec{s}$ como uma equação de campo. Assim, a equação (A.22) é escrita como:

$$\nabla \cdot (I(\vec{r}, \vec{s}) \vec{s}) + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (\text{A.23})$$

A.4.1.1 Efeito de uma fase discreta de partículas no modelo de radiação por ordenadas discretas

O modelo de ordenadas discretas permite incluir o efeito da fase discreta de partículas sobre a radiação. Neste caso, ANSYS FLUENT considera desprezíveis todas as outras fontes de dispersão na fase gasosa.

A contribuição da fase discreta de partículas aparece na ETR como:

$$\nabla \cdot (I\vec{s}) + (a + a_p + \sigma_p)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma T^4}{\pi} + E_p + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s} \cdot \vec{s}') d\Omega' \quad (\text{A.24})$$

Onde a_p é o coeficiente de absorção equivalente devido à presença de partículas, e é dado pela equação (A.25). A emissão equivalente E_p é dada pela equação (A.26). O fator de espalhamento equivalente da partícula σ_p , definido na equação (A.27) é também usado nos termos de espalhamento.

$$a_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{pn} \frac{A_{pn}}{V} \quad (\text{A.25})$$

$$E_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{pn} A_{pn} \frac{\sigma T_{pn}^4}{\pi V} \quad (\text{A.26})$$

$$\sigma_p = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N (1 - f_{pn})(1 - \varepsilon_{pn}) \frac{A_{pn}}{V} \quad (\text{A.27})$$

Nas equações (A.25) , (A.26) e (A.27), ε_{pn} , A_{pn} e T_{pn} são respectivamente emissividade, área projetada e temperatura da partícula n . A somatória é sobre N partículas no volume V e estas quantidades são computadas durante cada passo de rastreamento das partículas. Na equação (A.27), f_{pn} é fator de dispersão associado com a n ésima partícula.

A área projetada (A_{pn}) pode ser definida como:

$$A_{pn} = \frac{\pi d_{pn}^2}{4} \quad (\text{A.28})$$

Sendo d_{pn} o diâmetro da n ésima partícula.

A.5 MODELO DE FASE DISCRETA

A.5.1 Abordagem Euleriana-Lagrangeana

Na abordagem Euleriana-Lagrangeana a fase fluida é tratada como um meio contínuo solucionando as equações de Navier-Stokes, enquanto que a parte dispersa é resolvida seguindo o rastro de um grande número de partículas através de um campo de fluxo calculado. A fase dispersa troca momento, massa e energia com a fase fluida.

Esta abordagem se aplica quando as interações partícula-partícula podem ser desprezadas, isto requer que a fase dispersa ocupe uma baixa fração volumétrica, mesmo tendo maior massa ($\dot{m}_{partículas} > \dot{m}_{fluido}$). Nesta abordagem as trajetórias das partículas são calculadas individualmente em intervalos específicos durante o cálculo da fase fluida.

A.5.2 Teoria do movimento das partículas

A.5.2.1 Equações do movimento das partículas

A.5.2.1.1 Balanço de forças da partícula

Para prever a trajetória das partículas da fase discreta, é integrado o balanço de forças sobre a partícula no marco de referência Lagrangiano. O balanço de forças iguala a inércia da partícula com as forças atuando sobre ela, e pode ser escrito (na direção x do sistema de coordenadas cartesianas) como:

$$\frac{du_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (A.29)$$

Onde $\vec{F}$ é um termo de aceleração (força/unidade de massa da partícula) adicional onde eventualmente pode ser incluída força gravitacional entre outras forças, $F_D(\vec{u} - \vec{u}_p)$ é a força de arraste por unidade de massa de partícula e:

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad (A.30)$$

Na equação (A.29), $\vec{u}$ é a velocidade da fase fluida, $\vec{u}_p$ é a velocidade da partícula, ρ é a massa específica do fluido, ρ_p é a densidade da partícula e d_p é o diâmetro da partícula. Re é o número de Reynolds relativo, o qual é definido como:

$$Re \equiv \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu} \quad (\text{A.31})$$

A.5.2.2 Dispersão turbulenta das partículas

A dispersão de partículas devido à turbulência da fase fluida pode ser prevista utilizando o modelo de rastreamento estocástico ou o modelo de rastreamento de nuvem de partículas. O modelo de rastreamento estocástico inclui o efeito das flutuações turbulentas instantâneas da velocidade sobre a trajetória das partículas através do uso de métodos estocásticos. O modelo de nuvem de partículas rastreia a evolução estatística da trajetória média da nuvem de partículas. A concentração de partículas dentro da nuvem é representada por uma Função Densidade de Probabilidade (PDF) Gaussiana.

A.5.3 Equacionamento para coeficientes de arrasto

A.5.3.1 Equacionamento para arrasto de partículas esféricas

O coeficiente de arrasto (C_D) para partículas de superfície lisa pode ser calculado como:

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (\text{A.32})$$

Onde a_1 , a_2 e a_3 são constantes que aplicam a várias faixas de Re dados por Morsi e Alexander (1972)

A.5.3.2 Equacionamento para arrasto de partículas não esféricas

Haider e Levenspiel (1989) desenvolveram uma correlação para partículas não esféricas:

$$C_D = \frac{24}{Re_{sph}} (1 + b_1 Re_{sph}^{b_2}) + \frac{b_3 Re_{sph}}{b_4 + Re_{sph}} \quad (A.33)$$

Onde:

$$b_1 = \exp(2.3288 - 6.4581\phi + 2.4486\phi^2) \quad (A.34)$$

$$b_2 = 0.0964 + 0.5565\phi \quad (A.35)$$

$$b_3 = \exp(4.905 - 13.8944\phi + 18.4222\phi^2 - 10.2599\phi^3) \quad (A.36)$$

$$b_4 = \exp(1.4681 + 12.2584\phi - 20.7322\phi^2 + 15.8855\phi^3) \quad (A.37)$$

O fator de forma ϕ é definido como:

$$\phi = \frac{s}{S} \quad (A.38)$$

Onde s é a área de superfície de uma esfera contendo o mesmo volume da partícula, e S é a área de superfície real da partícula. Para efeitos de cálculo da massa da partícula, força de arrasto e Re_{sph} , o tamanho da partícula d_p é o diâmetro de uma esfera com o mesmo volume da partícula.

A.5.4 Processos de troca de calor e massa

Quando uma partícula de biomassa entra câmara de combustão da fornalha, experimenta uma serie de fenômenos de troca de calor e massa, a abordagem matemática destes fenômenos é explicada nesta secção.

A.5.4.1 Processo de aquecimento inerte

Aplica-se quando a temperatura da partícula é menor do que a temperatura de vaporização. Aplica-se também depois que a fração volátil da partícula é consumida. Estas duas condições podem ser escritas como:

$$T_p < T_{vap} \quad (A.39)$$

$$m_p \leq (1 - f_{v,0})m_{p,0} \quad (\text{A.40})$$

Onde T_p é a temperatura da partícula, $m_{p,0}$ é a massa inicial da partícula, e m_p é a massa da partícula.

A equação (A.39) representa a primeira condição na qual se aplica o aquecimento inerte, ou seja, até que a partícula atinge a temperatura de vaporização, a partir deste ponto a partícula passa a experimentar secagem e devolatilização, depois da qual a partícula experimenta um novo processo de aquecimento inerte cuja condição está representada na equação (A.40).

Quando usada a lei de aquecimento inerte, um balanço de calor simples é usado para relacionar a temperatura da partícula com a transferência de calor por convecção e a emissão/absorção de radiação na superfície da partícula:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.41})$$

Onde:

m_p = massa da partícula (kg)

c_p = calor específico da partícula ($J/kg \cdot K$)

A_p = área de superfície da partícula (m^2)

T_∞ = temperatura local da fase contínua (K)

h = coeficiente de transferência de calor por convecção ($W/m^2 \cdot K$)

ε_p = emissividade da partícula (adimensional)

σ = constante de Stefan-Boltzmann ($5.67 \times 10^{-8} W/m^2 \cdot K^4$)

θ_R = temperatura definida na equação (A.42)

$$\theta_R = \left(\frac{G}{4\sigma} \right)^{1/4} \quad (\text{A.42})$$

A equação (A.41) assume uma temperatura uniforme através de toda a partícula, ou seja, despreza a resistência interna da partícula à transferência de calor.

Na equação (A.42) a radiação incidente (G) é fornecida em unidades de W/m^2 e é calculada como:

$$G = \int_{\Omega=4\pi} I d\Omega \quad (\text{A.43})$$

Onde I é a intensidade da radiação e Ω é o ângulo sólido.

A equação (A.41) é integrada no tempo utilizando uma forma aproximada, linearizada que assume que a temperatura da partícula muda lentamente de um momento (valor de tempo) ao próximo:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = A_p \{ -[h + \varepsilon_p \sigma T_p^3] T_p + [h T_\infty + \varepsilon_p \sigma \theta_R^4] \} \quad (\text{A.44})$$

Assim que a trajetória da partícula é computada, é integrada a equação (A.44) para obter a temperatura da partícula no próximo valor do tempo, produzindo:

$$T_p(t + \Delta t) = \alpha_p + [T_p(t) - \alpha_p] e^{-\beta_p \Delta t} \quad (\text{A.45})$$

Onde Δt é o passo de integração do tempo e:

$$\alpha_p = \frac{h T_\infty + \varepsilon_p \sigma \theta_R^4}{h + \varepsilon_p \sigma T_p^3(t)} \quad (\text{A.46})$$

$$\beta_p = \frac{A_p (h + \varepsilon_p \sigma T_p^3(t))}{m_p c_p} \quad (\text{A.47})$$

O coeficiente de transferência de calor (h) é calculado usando a correlação de Ranz e Marshall (1952b); a) :

$$Nu = \frac{h d_p}{k_\infty} = 2.0 + 0.6 Re_d^{1/2} Pr^{1/3} \quad (\text{A.48})$$

Onde:

d_p = diâmetro da partícula (m)

k_∞ = condutividade térmica da fase contínua ($W/m \cdot K$)

Re_d = número de Reynolds baseado no diâmetro da partícula e a velocidade relativa

Pr = número de Prandtl da fase contínua ($c_p \mu / k_\infty$)

Finalmente o calor ganho ou perdido pela partícula aparece no termo fonte da equação de energia da fase contínua. Durante o processo de aquecimento inerte, a partícula não troca massa com a fase contínua e não participa em qualquer reação química.

A.5.4.2 Processo de secagem

O processo de secagem não é mais do que a liberação da umidade presente na partícula de combustível. A secagem pode acontecer pelo fenômeno de vaporização ou pelo de ebulição.

A.5.4.2.1 Vaporização

Este fenômeno inicia quando a temperatura da partícula T_p atinge a chamada temperatura de vaporização, T_{vap} , e continua até que a partícula chega na temperatura de ebulição, T_{bp} , ou até que a fração massica correspondente à umidade é totalmente consumida. Estas duas condições podem ser representadas respectivamente como na equação (A.49) e a (A.50).

$$T_{vap} \leq T_p < T_{bp} \quad (A.49)$$

$$m_p > (1 - f_{v,0})m_{p,0} \quad (A.50)$$

Transferência de massa durante a vaporização

Neste trabalho foi adotado o modelo de vaporização onde a transferência de massa é controlada por difusão/convecção e está representada pela equação (A.51) que segue o trabalho de Miller *et al.* (1998)

$$\frac{dm_p}{dt} = k_c A_p \rho_\infty \ln(1 + B_m) \quad (A.51)$$

Na equação (A.51)

m_p = massa da partícula (kg)

k_c = coeficiente de transferência de massa (m/s)

A_p = área de superfície da partícula (m^2)

ρ_∞ = densidade da fase contínua (kg/m^3)

B_m = é o número de massa de Spalding dado pela equação (A.52)

$$B_m = \frac{Y_{i,s} - Y_{i,\infty}}{1 - Y_{i,s}} \quad (A.52)$$

Onde

$Y_{i,s}$ = fração mássica de vapor na superfície

$Y_{i,\infty}$ = fração mássica de vapor no meio contínuo

O coeficiente de transferência de massa k_c é dado pela equação (A.53)

$$Sh_{AB} = \frac{k_c d_p}{D_{i,m}} = 2.0 + 0.6 Re_d^{1/2} Sc^{1/3} \quad (A.53)$$

Na equação (A.53), $D_{i,m}$ é o coeficiente de difusão do vapor no meio contínuo em (m^2/s), Sc é o número de Schmidt ($\mu/\rho D_{i,m}$) e d_p é o diâmetro da partícula em (m).

Transferência de calor à partícula

A temperatura da partícula é atualizada de acordo com o balanço de calor que relaciona o cambio de calor sensível na partícula com a transferência de calor latente e convectivo entre a partícula e a fase contínua como na equação (A.54)

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) - \frac{dm_p}{dt} h_{fg} + A_p \varepsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (A.54)$$

Onde:

c_p = capacidade calorífica da partícula ($J/kg \cdot K$)

T_p = temperatura da partícula (K)

h = coeficiente de transferencia de calor por convecção ($W/m^2 \cdot K$)

T_∞ = temperatura da fase contínua (K)

$\frac{dm_p}{dt}$ = taxa de evaporação (kg/s)

h_{fg} = calor latente de vaporização (J/kg)

ε = emissividade da partícula (adimensional)

σ = constante de Stefan-Boltzmann ($5.67 \times 10^{-8} W/m^2 K^4$)

θ_R = temperatura da radiação, $\left(\frac{G}{4\sigma}\right)^{1/4}$, onde G é a radiação incidente

A.5.4.2 Ebulição

Este fenômeno inicia quando a temperatura da partícula T_p alcança a temperatura de ebulição, T_{bp} , e continua até que a fração mássica correspondente à umidade é totalmente consumida. Estas duas condições podem ser representadas respectivamente como na equação (A.55) e a (A.56).

$$T_p = T_{bp} \quad (\text{A.55})$$

$$m_p > (1 - f_{v,0})m_{p,0} \quad (\text{A.56})$$

Durante o fenômeno de ebulição é assumido que a temperatura da partícula permanece constante e então a balanço de energia nesta pode ser reduzido como na equação (A.57) e o balanço de massa ou o correspondente variação de diâmetro como na equação (A.58) como visto em Kuo (1986)

$$\frac{dm_p}{dt} h_{fg} = hA_p(T_\infty - T_p) + A_p \varepsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (\text{A.57})$$

$$\frac{d(d_p)}{dt} = \frac{2}{\rho_p h_{fg}} \left[\frac{k_\infty Nu}{d_p} (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \right] \quad (\text{A.58})$$

A energia requerida para ebulição, aparece como um termo fonte (negativo) na equação da energia para a fase gasosa e a massa de liquido evaporada entra como fonte da espécie H_2O .

A.5.4.3 Processo de volatilização

Na modelagem, o processo de volatilização é aplicado a uma partícula combustível quando ela atinge a temperatura de vaporização (T_{vap}) e continua enquanto a massa da partícula (m_p) excede a massa de não voláteis. Estas condições estão representadas nas equações (A.59), (A.60) e (A.61) a seguir:

$$T_p \geq T_{vap} \quad (\text{A.59})$$

$$T_p \geq T_{bp} \quad (\text{A.60})$$

$$m_p > (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0} \quad (\text{A.61})$$

Onde $f_{w,0}$ é a fração de umidade quando é considerada combustão úmida (caso contrário, $f_{w,0} = 0$). Como indicado nas equações (A.59) e (A.60), T_{vap} no caso de uma partícula combustível deve ser igual à temperatura de ebulição T_{bp} , e são referidas ao material combustível.

É possível selecionar entre alguns modelos de volatilização e estes são descritos a seguir.

A.5.4.3.1 Modelo de volatilização de taxa constante

Segundo Baum e Street (1971) os voláteis são liberados a uma taxa constante:

$$-\frac{1}{f_{v,0}(1-f_{w,0})m_{p,0}} \frac{dm_p}{dt} = A_0 \quad (\text{A.62})$$

Onde:

m_p = Massa da partícula (kg)

$f_{v,0}$ = fração de voláteis inicialmente presentes na partícula

$m_{p,0}$ = massa inicial da partícula (kg)

A_0 = taxa constante (s^{-1})

A.5.4.3.2 Modelo de taxa cinética única

O modelo de taxa cinética única, apresentado por Badzioch e Hawksley (1970), assume que a taxa de volatilização é diretamente proporcional à quantidade de voláteis restante na partícula:

$$-\frac{dm_p}{dt} = k[m_p - (1-f_{v,0})(1-f_{w,0})m_{p,o}] \quad (\text{A.63})$$

Onde:

m_p = massa da partícula (kg)

$f_{v,0}$ = fração mássica de voláteis inicialmente presente na partícula

$f_{w,0}$ = fração mássica da umidade (supondo combustão úmida)

$m_{p,o}$ = massa inicial da partícula

k = taxa cinética de reação (s^{-1})

Na equação (A.63) a taxa cinética de reação (k) é do tipo Arrhenius

$$k = A_1 e^{-(E/RT)} \quad (\text{A.64})$$

A solução analítica aproximada da equação (A.63) é:

$$m_p(t + \Delta t) = (1-f_{v,0})(1-f_{w,0})m_{p,o} + [m_p(t) - (1-f_{v,0})(1-f_{w,0})m_{p,o}]e^{-k\Delta t} \quad (\text{A.65})$$

A equação (A.65) é obtida assumindo que a temperatura da partícula varia só levemente entre os passos de tempo de integração discreta.

A.5.4.3.3 Modelo de duas taxas cinética que concorrem

Kobayashi *et al.* (1977) propuseram um modelo de duas taxas cinéticas que concorrem:

$$\mathcal{R}_1 = A_1 e^{-(E_1/RT_p)} \quad (\text{A.66})$$

$$\mathcal{R}_2 = A_2 e^{-(E_2/RT_p)} \quad (\text{A.67})$$

Onde $\mathcal{R}_1$ e $\mathcal{R}_2$ são as taxas que competem e podem controlar a volatilização em diferentes faixas de temperatura. As duas taxas cinéticas são ponderadas na expressão de volatilização do modelo:

$$\frac{m_v(t)}{(1 - f_{w,0})m_{p,0} - m_a} = \int_0^t (\alpha_1 \mathcal{R}_1 + \alpha_2 \mathcal{R}_2) \exp \left[- \int_0^t (\mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2) dt \right] dt \quad (\text{A.68})$$

Onde:

$m_v(t)$ = produção de voláteis até o tempo t

$m_{p,0}$ = massa inicial da partícula

α_1 e α_2 = fatores de rendimento

m_a = conteúdo de cinzas na partícula

A.5.4.4 Combustão na superfície

Depois que a fração de voláteis é completamente consumida, inicia o processo de combustão na superfície da fração combustível remanente f_{comb} . Esta condição pode ser representada pela equação:

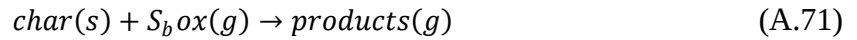
$$m_p > (1 - f_{v,0})(1 - f_{w,0})m_{p,0} \quad (\text{A.69})$$

O processo de combustão na superfície continua até que a fração combustível é consumida:

$$m_p > (1 - f_{v,0} - f_{comb})(1 - f_{w,0})m_{p,0} \quad (\text{A.70})$$

Quando a fração combustível (f_{comb}) remanente é consumida, a partícula ainda pode conter cinza residual e nesse ponto iniciará novamente o processo de aquecimento inerte.

O processo de combustão na superfície consome o conteúdo reativo da partícula segundo a reação (A.71):



Onde S_b é o requerimento de massa de oxidante por massa de *char* (carbono fixo residual).

Pode ser selecionado um entre vários modelos de reação heterogênea de superfície, estes são descritos a seguir.

A.5.4.4.1 Modelo de taxa de reação de superfície limitada por cinética/difusão

Este modelo assume que a taxa de reação da superfície é determinada pela cinética ou por uma taxa de difusão. Usam-se o modelo de Baum e Street (1971) e o do Field (1969) com um coeficiente de taxa de difusão (D_0) e uma taxa cinética de reação ($\mathcal{R}$) ponderados para produzir uma taxa de combustão de carbono residual ($\frac{dm_p}{dt}$) de:

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p p_{ox} \frac{D_0 \mathcal{R}}{D_0 + \mathcal{R}} \quad (A.72)$$

Sendo:

$$D_0 = C_1 \frac{[(T_p + T_\infty)/2]^{0.75}}{d_p} \quad (A.73)$$

$$\mathcal{R} = C_2 e^{-(E/RT_p)} \quad (A.74)$$

Na equação (A.72), A_p é a área de superfície da partícula (πd_p^2), p_{ox} é a fração parcial da espécie oxidante no gás ao redor da partícula, e a taxa cinética $\mathcal{R}$ incorpora o efeito das reações químicas sobre a superfície interna da partícula de carbono residual e difusão porosa.

A equação (A.72) pode ser exibida em termos da fração mássica de oxidante (Y_{ox}) como:

$$\frac{dm_p}{dt} = -A_p \frac{\rho R T_\infty Y_{ox}}{M_{w,ox}} \frac{D_0 \mathcal{R}}{D_0 + \mathcal{R}} \quad (A.75)$$

Igual do que no modelo anterior, neste o tamanho da partícula é considerado constante, mas é a densidade diminui.

A.5.4.4.2 Transferência de massa e calor durante a combustão do carbono residual

A reação de superfície consome a espécie oxidante na fase gasosa, isto aparece como termo fonte no cálculo da equação de transporte para esta espécie. De forma similar, a reação de superfície é uma fonte de espécies na fase gasosa, ou seja, os produtos da reação heterogênea de superfície aparecem como termo fonte na equação de transporte para essas espécies na fase gasosa. Mas, a reação de superfície também consome ou produz energia, numa quantidade determinada pelo calor da reação.

O balanço de calor na partícula durante a reação de superfície é:

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) - f_h \frac{dm_p}{dt} H_{reac} + A_p \varepsilon_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (A.76)$$

Onde H_{reac} é o calor liberado pela reação de superfície. Só uma porção $(1 - f_h)$ da energia produzida pela reação de superfície aparece como fonte de calor no termo fonte da equação da energia na fase gasosa, isto porque a mesma partícula absorve uma fração (f_h) deste calor diretamente.

Apêndice B

CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB DO CÁLCULO DO MEIO POROSO REPRESENTANDO A GRELHA

B.1 index.m

```

%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
%      By: Felipe Centeno 07/10/2013
%      porous.m
%      Arquivo principal para calcular os dados da porosidade
%      da grelha necessários para configurar o meio poroso
%      no FLUENT
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

clc
clear all
close all
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
% Dados de entrada %
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% Diametro do furo (mm)
hole_diam = 7;
% Quantidade de furos
hole_quant = 12;
% Largura horizontal (mm)
width_horiz = 95;

```

```

% Comprimento horizontal (mm)
length_horiz = 305.85;
% Inclinação da grelha
grate_angle = 5.93;
% Espesura da grelha (mm)
grate_thickness = 16.576;
% laminar fluid viscosity (kg/m.s)
viscosity = 1.831e-05;
% density (kg/m3)
phi = 1.185 ;

load case_data.txt
load height_vector.txt
load velocity_vector.txt

area_horiz = width_horiz * length_horiz;
area_inclined = area_horiz/cos(deg2rad(grate_angle));
hole_area = (pi/4)*hole_diam^2;
hole_area_total = hole_area*12;
porosity = hole_area_total/area_inclined

%graficar a queda de pressão dos casos

createfigure(height_vector, case_data)

height_total = max(height_vector) - min(height_vector);

sup_point = max(height_vector) - height_total*(2/10);
inf_point = min(height_vector) + height_total*(2/10);

YI_sup = interp1(height_vector,case_data,sup_point);
YI_inf = interp1(height_vector,case_data,inf_point);

dp_vector = YI_sup - YI_inf;
display('Quedas de pressão avaliadas pelo ANSYS')
dp_vector1 = dp_vector'

[coef_vector, formula] = createFit2(velocity_vector,dp_vector);

display('Coeficientes do polinômio quadrático')
coef2 = coef_vector(1)
coef1 = coef_vector(2)
coef0 = coef_vector(3)

display('Quedas de pressão avaliadas pelo polinômio quadrático')
dp_vector2 = polyval(coef_vector,velocity_vector)

display('Diferença entre dados do ANSYS e dados do polinômio (%)')
dif = abs((dp_vector1-dp_vector2)./dp_vector1)*100

```

```
format long
```

```
display('----- Porous Jump -----') % (Ver pag
353 ANSYS FLUENT 14.0 user guide)
% permeability of the medium (Ver pag 353 ANSYS FLUENT 14.0 user guide)
```

```
display('Permeability of the medium (alpha) [m^2]')
permeability = (grate_thickness/1000)*viscosity/abs(coef1)
```

```
% pressure-jump coefficient (Ver pag 353 ANSYS FLUENT 14.0 user guide)
display('Pressure-jump coefficient (c_2) [1/m]')
C2 = 2*abs(coef2)/((grate_thickness/1000)*phi)
```

```
display('----- Porous Media -----') % (Ver pag
231 ANSYS FLUENT 14.0 user guide. Pag 301 no pdf)
display('Direction-1 Vector (unitario na direção dos furos)')
Dir_1 = [-sin(deg2rad(grate_angle)), cos(deg2rad(grate_angle)), 0]'
```

```
display('Direction-2 Vector (unitario na direção dos furos)')
Dir_2 = [0, 0, 1]'
```

```
display('Viscous Resistance (D) [1/m^2]')
D_value = 1/permeability;
D = [D_value, D_value*1000, D_value*1000]'
```

```
display('Inertial Resistance (C) [1/m]')
C_value = C2;
```

```
C = [C_value, C_value*1000, C_value*1000]'
```

B.2 fit_plot_presure_velocity.m

```
function [COF, form] = fit_plot_presure_velocity(velocity_vector,dp_vector)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
% By: Felipe Centeno 07/10/2013
% fit_plot_presure_velocity.m
% Arquivo que calcula o polinômio quadrático que se ajusta
% aos dados de queda de pressão como função da velocidade
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

velocity_vector = velocity_vector(:);
dp_vector = dp_vector(:);
```

```

% velocity_vector2 = velocity_vector;
% velocity_vector(1) = 0;
% velocity_vector(2) = velocity_vector2(1);
% velocity_vector(3) = velocity_vector2(2);
% velocity_vector(4) = velocity_vector2(3);
% velocity_vector(5) = velocity_vector2(4);
% velocity_vector(6) = velocity_vector2(5);
% velocity_vector(7) = velocity_vector2(6);
%
% dp_vector2 = dp_vector;
% dp_vector(1) = 0;
% dp_vector(2) = dp_vector2(1);
% dp_vector(3) = dp_vector2(2);
% dp_vector(4) = dp_vector2(3);
% dp_vector(5) = dp_vector2(4);
% dp_vector(6) = dp_vector2(5);
% dp_vector(7) = dp_vector2(6);

% Criar ajuste "fit 1"
fo_ = fitoptions('method','LinearLeastSquares','Lower',[-Inf -Inf
0], 'Upper',[Inf Inf 0]);
ok_ = isfinite(velocity_vector) & isfinite(dp_vector);
if ~all( ok_ )
    warning( 'GenerateMFile:IgnoringNansAndInfs',...
        'Ignoring NaNs and Infs in data.' );
end
ft_ = fittype('poly2');

% Ajustar o modelo usando dados novos
cf_ = fit(velocity_vector(ok_),dp_vector(ok_),ft_,fo_);

COF = coeffvalues(cf_);
form = formula(cf_);

plot_presure_velocity(velocity_vector, dp_vector, cf_)

```

B.3 plot_presure_height.m

```

function plot_presure_height(height_vector1, YMatrix1)
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%
%   By: Felipe Centeno 07/10/2013
%   plot_presure_height.m
%   Arquivo que cria a figura da pressão como função da altura
%   para os diversos casos de velocidades
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% Criando figura
figure1 = figure('Color',[1 1 1]);

```



```

%
%   By: Felipe Centeno 07/10/2013
%   plot_presure_velocity.m
%   Arquivo gráfica os dados para ajustar e o polinômio
%   quadrático que ajusta os dados
%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

% Criando figura
figure1 = figure('Color',[1 1 1]);

% Criando eixos
axes1 = axes('Parent',figure1,...
    'ZColor',[0.501960784313725 0.501960784313725 0.501960784313725],...
    'YMinorTick','on',...
    'YMinorGrid','on',...
    'YGrid','on',...
    'YColor',[0.501960784313725 0.501960784313725 0.501960784313725],...
    'XMinorTick','on',...
    'XMinorGrid','on',...
    'XGrid','on',...
    'XColor',[0.501960784313725 0.501960784313725 0.501960784313725],...
    'GridLineStyle','- ',...
    'FontSize',12,...
    'FontName','Times New Roman');
box(axes1,'on');
hold(axes1,'all');

% Criando linhas
line(XData1,YData1,'Parent',axes1,'MarkerSize',8,'Marker','o',...
    'LineWidth',1,...
    'LineStyle','none',...
    'Color',[0.333333 0 0.666667],...
    'DisplayName','Original');

% Criando gráfico
h_ = plot(cf_,'fit',0.95);

set(h_(1),'Color',[1 0 0],...
    'LineStyle','- ', 'LineWidth',2,...
    'Marker','none', 'MarkerSize',6,...
    'DisplayName','Ajuste quadrático');

% Tirando a lenda que foi criada pelo gráfico
legend off;

% Criando rótulo do eixo X
xlabel('Velocidade (m/s)','FontWeight','bold','FontSize',12,...
    'FontName','Times New Roman',...
    'Color',[0 0 0]);

% Criando rótulo do eixo Y
ylabel('Queda de pressão (Pa)','FontWeight','bold','FontSize',12,...
    'FontName','Times New Roman',...
    'Color',[0 0 0]);

% Criando legenda
legend1 = legend(axes1,'show');
set(legend1,'Interpreter','none');

```

B.5 case_data.txt

855.555	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.26
855.554	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.26
855.554	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.26
855.554	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.25
855.553	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.25
855.553	330.951	729.818	1273.33	1985.43	2828.25
855.552	330.95	729.818	1273.33	1985.43	2828.25
855.552	330.95	729.817	1273.33	1985.43	2828.25
855.551	330.95	729.817	1273.33	1985.43	2828.25
855.550	330.95	729.817	1273.33	1985.43	2828.25
855.549	330.95	729.817	1273.33	1985.43	2828.25
855.549	330.95	729.816	1273.33	1985.43	2828.25
855.548	330.949	729.816	1273.32	1985.43	2828.25
855.547	330.949	729.816	1273.32	1985.43	2828.25
855.546	330.949	729.815	1273.32	1985.43	2828.25
855.545	330.949	729.815	1273.32	1985.43	2828.25
855.544	330.948	729.815	1273.32	1985.43	2828.25
855.544	330.948	729.814	1273.32	1985.42	2828.25
855.543	330.948	729.814	1273.32	1985.42	2828.25
855.542	330.948	729.814	1273.32	1985.42	2828.24
855.541	330.948	729.813	1273.32	1985.42	2828.24
855.540	330.947	729.813	1273.32	1985.42	2828.24
855.539	330.947	729.813	1273.32	1985.42	2828.24
855.538	330.947	729.812	1273.32	1985.42	2828.24
855.538	330.947	729.812	1273.32	1985.42	2828.24
855.537	330.947	729.812	1273.32	1985.42	2828.24
855.536	330.946	729.811	1273.32	1985.42	2828.24
855.535	330.946	729.811	1273.32	1985.42	2828.24
855.535	330.946	729.81	1273.32	1985.42	2828.24
855.534	330.946	729.81	1273.32	1985.42	2828.24
855.533	330.946	729.81	1273.32	1985.42	2828.24
855.532	330.945	729.809	1273.32	1985.42	2828.24
855.532	330.945	729.809	1273.32	1985.42	2828.23
855.531	330.945	729.808	1273.31	1985.41	2828.23
855.530	330.945	729.808	1273.31	1985.41	2828.23
855.529	330.944	729.808	1273.31	1985.41	2828.23
855.529	330.944	729.807	1273.31	1985.41	2828.23
855.528	330.944	729.807	1273.31	1985.41	2828.23
855.527	330.944	729.806	1273.31	1985.41	2828.23
855.526	330.943	729.806	1273.31	1985.41	2828.23
855.525	330.943	729.805	1273.31	1985.41	2828.22
855.524	330.943	729.805	1273.31	1985.41	2828.22
855.523	330.943	729.804	1273.31	1985.4	2828.22
855.522	330.942	729.803	1273.31	1985.4	2828.22

855.521	330.942	729.802	1273.3	1985.4	2828.22
855.520	330.941	729.801	1273.3	1985.4	2828.21
855.519	330.941	729.8	1273.3	1985.4	2828.21
855.517	330.94	729.799	1273.3	1985.39	2828.21
855.515	330.94	729.798	1273.3	1985.39	2828.2
855.513	330.939	729.796	1273.29	1985.39	2828.2
855.511	330.938	729.794	1273.29	1985.38	2828.19
855.509	330.937	729.792	1273.29	1985.38	2828.18
855.506	330.936	729.789	1273.28	1985.37	2828.17
855.502	330.934	729.786	1273.28	1985.36	2828.16
855.498	330.933	729.783	1273.27	1985.35	2828.15
855.493	330.931	729.779	1273.26	1985.34	2828.13
855.487	330.929	729.773	1273.26	1985.33	2828.11
855.479	330.926	729.767	1273.25	1985.31	2828.09
855.471	330.922	729.76	1273.23	1985.29	2828.06
855.460	330.918	729.751	1273.22	1985.27	2828.02
855.447	330.913	729.74	1273.2	1985.24	2827.98
855.431	330.907	729.726	1273.17	1985.2	2827.93
855.412	330.9	729.71	1273.14	1985.15	2827.87
855.385	330.889	729.687	1273.1	1985.09	2827.78
855.352	330.877	729.659	1273.05	1985.02	2827.67
855.314	330.862	729.627	1273	1984.93	2827.54
855.269	330.845	729.589	1272.93	1984.82	2827.39
855.212	330.823	729.541	1272.85	1984.69	2827.2
855.144	330.797	729.484	1272.75	1984.54	2826.98
855.066	330.768	729.418	1272.63	1984.36	2826.73
854.959	330.727	729.33	1272.48	1984.12	2826.38
854.841	330.682	729.231	1272.31	1983.85	2826
854.752	330.649	729.158	1272.18	1983.65	2825.71
854.659	330.614	729.083	1272.05	1983.45	2825.42
854.580	330.585	729.021	1271.94	1983.29	2825.19
854.524	330.565	728.979	1271.87	1983.18	2825.04
854.497	330.556	728.963	1271.85	1983.14	2824.99
854.504	330.56	728.974	1271.87	1983.18	2825.04
854.546	330.578	729.015	1271.95	1983.29	2825.21
854.619	330.606	729.079	1272.06	1983.47	2825.47
854.716	330.643	729.16	1272.21	1983.69	2825.78
854.859	330.696	729.278	1272.41	1984	2826.23
854.969	330.736	729.368	1272.58	1984.23	2826.56
855.085	330.779	729.463	1272.74	1984.48	2826.91
855.198	330.821	729.556	1272.9	1984.72	2827.26
855.310	330.864	729.646	1273.06	1984.96	2827.61
855.426	330.907	729.735	1273.2	1985.21	2827.95
855.560	330.956	729.833	1273.36	1985.47	2828.33
855.719	331.022	729.969	1273.58	1985.89	2828.93
-10.904	-568.767	-608.809	-79.166	-366.629	-450.338
-11.161	-567.727	-646.556	-872.532	-365.741	-452.378

-11.223	-567.747	-662.961	-911.229	-365.679	-453.744
-11.229	-568.319	-672.855	-937.305	-366.013	-455.147
-11.250	-56.911	-683.355	-963.618	-366.489	-456.855
-11.278	-570.117	-693.665	-98.718	-367.132	-458.808
-11.319	-571.517	-70.398	-100.645	-368.065	-461.187
-11.376	-573.302	-714.455	-102.127	-369.254	-463.949
-11.456	-575.711	-725.134	-102.955	-370.855	-467.308
-11.550	-578.428	-735.558	-103.157	-37.262	-470.981
-11.665	-581.801	-745.286	-102.551	-374.789	-475.259
-11.787	-585.499	-753.313	-101.067	-377.127	-479.824
-11.904	-58.932	-758.776	-985.592	-379.511	-484.477
-11.999	-593.071	-760.131	-941.585	-38.183	-489.049
-12.060	-596.348	-75.704	-871.167	-383.845	-493.167
-12.061	-598.537	-747.244	-759.965	-385.194	-496.239
-11.992	-599.201	-728.586	-6.145	-385.635	-497.786
-11.846	-59.771	-698.137	-455.866	-384.781	-497.184
-11.602	-593.022	-647.884	-30.825	-382.012	-493.235
-11.279	-58.507	-577.993	-187.127	-377.275	-485.784
-10.874	-573.012	-489.252	-102.369	-37.001	-473.936
-10.392	-556.485	-390.756	-0.504384	-359.885	-457.336
-0.9845	-535.699	-294.226	-0.198685	-346.951	-43.648
-0.9222	-510.235	-210.551	-0.0425301	-330.835	-411.521
-0.8526	-480.986	-144.852	0.0359964	-31.195	-383.868
-0.7763	-44.899	-0.969017	0.076101	-290.809	-354.962
-0.6919	-414.725	-0.659591	0.0917184	-267.555	-326.044
-0.6035	-379.924	-0.457966	0.0988313	-243.478	-298.737
-0.5116	-345.117	-0.325119	0.0990214	-219.058	-273.361
-0.42	-311.412	-0.241767	0.0956214	-195.249	-25.075
-0.3329	-279.345	-0.184073	0.0915588	-172.713	-230.367
-0.2533	-249.148	-0.143968	0.0868018	-151.834	-21.168
-0.1858	-221.249	-0.118625	0.0818411	-133.216	-194.179
-0.1309	-195.447	-0.100999	0.0774722	-116.728	-17.719
-0.0879	-171.348	-0.0900283	0.0732438	-102.104	-159.977
-0.0583	-149.379	-0.0824341	0.0697664	-895.683	-142.478
-0.0381	-128.779	-0.0780682	0.0662461	-784.133	-124.219
-0.0249	-109.668	-0.0744974	0.0630162	-684.532	-105.896
-0.0167	-92.0522	-0.0711803	0.0599505	-594.528	-879.994
-0.0122	-76.1477	-0.0682589	0.0569111	-512.148	-712.785
-0.0095	-61.9602	-0.0654983	0.0540155	-435.752	-563.418
-0.008	-49.7836	-0.0626138	0.0513868	-366.336	-439.611
-0.0072	-39.4128	-0.0600643	0.0487267	-302.795	-340.291
-0.0066	-30.9945	-0.0577312	0.046119	-246.935	-265.306
-0.0063	-24.5829	-0.0555641	0.0436235	-199.657	-212.117
-0.0061	-19.7816	-0.0535955	0.0412331	-160.373	-173.379
-0.006	-16.3165	-0.0517752	0.0389585	-129.037	-145.286
-0.0059	-13.8494	-0.0501079	0.0367921	-104.778	-12.428
-0.0057	-12.1521	-0.0485426	0.0347726	-0.868882	-108.413

-0.0057	-0.109684	-0.0470937	0.0328663	-0.738309	-0.961292
-0.0056	-0.101271	-0.0457379	0.0310894	-0.644413	-0.864491
-0.0055	-0.0951058	-0.0444438	0.0294606	-0.577448	-0.787336
-0.0054	-0.0903338	-0.0432024	0.0279646	-0.528887	-0.726548
-0.0053	-0.0864305	-0.0420021	0.0265895	-0.492756	-0.678986
-0.0052	-0.0830691	-0.0408326	0.0253273	-0.464893	-0.641693
-0.0051	-0.0800398	-0.0396839	0.0241726	-0.442466	-0.611732
-0.005	-0.0773111	-0.0385606	0.0230985	-0.424109	-0.589094
-0.0049	-0.0747896	-0.0374546	0.0221061	-0.40843	-0.571217
-0.0048	-0.0723774	-0.0363552	0.0211982	-0.394428	-0.555369
-0.0047	-0.0700865	-0.0352667	0.0203527	-0.381989	-0.541662
-0.0046	-0.0679361	-0.0341954	0.0195485	-0.37099	-0.530404
-0.0044	-0.0658555	-0.0331366	0.0187919	-0.360683	-0.519887
-0.0043	-0.06384	-0.0320898	0.018081	-0.350938	-0.509461
-0.0042	-0.0618918	-0.0310589	0.0174086	-0.341724	-0.498959
-0.004	-0.0599977	-0.0300443	0.0167619	-0.332894	-0.488171
-0.0039	-0.0581561	-0.0290484	0.0161352	-0.324418	-0.477056
-0.0037	-0.0563505	-0.0280717	0.0155266	-0.31616	-0.465479
-0.0036	-0.0545545	-0.0271148	0.014939	-0.30791	-0.453146
-0.0034	-0.0527928	-0.0261866	0.0143652	-0.299824	-0.440134
-0.0033	-0.0510557	-0.025281	0.0137973	-0.291846	-0.426525
-0.0032	-0.0493343	-0.0243972	0.0132354	-0.283905	-0.41228
-0.003	-0.0476186	-0.0235401	0.012682	-0.275901	-0.397163
-0.0029	-0.045907	-0.0227128	0.0121364	-0.267762	-0.381344
-0.0028	-0.0442046	-0.021905	0.0115934	-0.259561	-0.365255
-0.0026	-0.0425166	-0.0211207	0.0110524	-0.251304	-0.348948
-0.0025	-0.0408449	-0.020368	0.0105135	-0.242886	-0.332607
-0.0024	-0.0391788	-0.0196312	0.00997573	-0.234355	-0.316296
-0.0023	-0.0375201	-0.0189219	0.00944014	-0.225595	-0.300084
-0.0022	-0.0358751	-0.0182341	0.00890606	-0.216673	-0.284214
-0.002	-0.0342386	-0.0175597	0.00837292	-0.20765	-0.268557
-0.0019	-0.0326283	-0.0169148	0.00784074	-0.198449	-0.253687
-0.0018	-0.0310238	-0.0162754	0.0073086	-0.189216	-0.238987
-0.0017	-0.0294544	-0.0156595	0.00677545	-0.179847	-0.225272
-0.0016	-0.0278907	-0.0150478	0.00624134	-0.170464	-0.211726
-0.0015	-0.0263614	-0.0144607	0.00570141	-0.160992	-0.199185
-0.0015	-0.02484	-0.0138736	0.00515962	-0.151533	-0.186795
-0.0014	-0.0233975	-0.0132877	0.00459972	-0.142199	-0.175893
-0.0013	-0.0219549	-0.0127018	0.00403983	-0.132865	-0.16499
-0.0012	-0.0205408	-0.012147	0.00348116	-0.123519	-0.154933
-0.0011	-0.0191304	-0.0115962	0.00292265	-0.114171	-0.144985
-0.001	-0.0177897	-0.0109945	0.00236628	-0.105133	-0.135955
-0.001	-0.0165278	-0.010335	0.00181232	-0.0964471	-0.127964
-0.0009	-0.0152659	-0.00967561	0.00125837	-0.0877612	-0.119973
-0.0008	-0.013936	-0.00907574	0.00085422	-0.0790978	-0.110846
-0.0008	-0.0125869	-0.0084926	0.000492185	-0.0704407	-0.101399
-0.0007	-0.0112379	-0.00790946	0.000130157	-0.0617838	-0.0919523

-0.0006	-0.0101065	-0.00705434	-0.00019499	-0.0546447	-0.084756
-0.0005	-0.00906169	-0.006091	-0.000505472	-0.0481092	-0.0784547
-0.0005	-0.00801686	-0.00512768	-0.000815947	-0.041574	-0.0721536
-0.0004	-0.00696408	-0.00416727	-0.00111434	-0.0350279	-0.0656974
-0.0003	-0.00557088	-0.00333361	-0.000891418	-0.0280205	-0.0525546
-0.0002	-0.00417769	-0.00249995	-0.000668494	-0.0210132	-0.0394119
-0.0001	-0.00278447	-0.00166627	-0.000445566	-0.0140058	-0.0262689
-0.0001	-0.00139127	-0.000832607	-0.000222642	-0.00699845	-0.0131261

B.6 velocity_vector.txt

0.131
 0.263
 0.394
 0.525
 0.657
 0.788

B.7 height_vector.txt

0.0189867
 0.0220935
 0.0252002
 0.0283069
 0.0314137
 0.0345204
 0.0376271
 0.0407339
 0.0438406
 0.0469473
 0.0500541
 0.0531608
 0.0562675
 0.0593743
 0.062481
 0.0655877
 0.0686945
 0.0718012
 0.0749079
 0.0780147

0.0811214
0.0842281
0.0873349
0.0904416
0.0935484
0.0966551
0.0997618
0.102869
0.105975
0.109082
0.112189
0.115295
0.118402
0.121509
0.124616
0.127722
0.130829
0.133936
0.137043
0.140149
0.143256
0.146363
0.14947
0.152576
0.155683
0.15879
0.161896
0.165003
0.16811
0.171217
0.174323
0.17743
0.180537
0.183644
0.18675
0.189857
0.192964
0.196071
0.199177
0.202284
0.205391
0.208498
0.211604
0.214711
0.217818
0.220924
0.224031

0.227138
0.230245
0.233351
0.236458
0.239565
0.242672
0.245778
0.248885
0.251992
0.255098
0.258205
0.261312
0.264419
0.267525
0.270632
0.273739
0.276846
0.279952
0.283059
0.286166
0.289273
0.292379
0.31102
0.314126
0.317233
0.32034
0.323447
0.326553
0.32966
0.332767
0.335874
0.33898
0.342087
0.345194
0.348301
0.351407
0.354514
0.357621
0.360727
0.363834
0.366941
0.370048
0.373154
0.376261
0.379368
0.382475
0.385581

0.388688
0.391795
0.394901
0.398008
0.401115
0.404222
0.407328
0.410435
0.413542
0.416649
0.419755
0.422862
0.425969
0.429076
0.432182
0.435289
0.438396
0.441503
0.444609
0.447716
0.450823
0.453929
0.457036
0.460143
0.46325
0.466356
0.469463
0.47257
0.475677
0.478783
0.48189
0.484997
0.488104
0.49121
0.494317
0.497424
0.50053
0.503637
0.506744
0.509851
0.512957
0.516064
0.519171
0.522278
0.525384
0.528491
0.531598

0.534704
0.537811
0.540918
0.544025
0.547131
0.550238
0.553345
0.556452
0.559558
0.562665
0.565772
0.568879
0.571985
0.575092
0.578199
0.581306
0.584412
0.587519
0.590626
0.593732
0.596839
0.599946
0.603053
0.606159
0.609266
0.612373
0.61548
0.618586
0.621693
0.6248
0.627907
0.631013

Apêndice C

CÓDIGOS DA PROGRAMAÇÃO EM MATLAB DO MÉTODO OFW

C.1 calcule_ofw.m

```
function [AT, beta, set] = calcule_ofw(x_in, fuel)
% exemplos
% [AT, beta, set] = calcule_ofw([0.01 0.6 0.99], 'bagazo')
% [AT, beta, set] = calcule_ofw([0.01 0.5 0.99], 'palha')

%clear all
close all
clc

if(strcmp(fuel, 'bagazo'))

% carregando vetor de taxas de aquecimento (vetor coluna)
beta.matrix = load('beta_bagazo.txt');
% carregando matriz de fração de conversão versus temperatura
AT.matrix = load('alpha_temperature_bagazo.txt');

elseif(strcmp(fuel, 'palha'))

beta.matrix = load('beta_bagazo_palha.txt');
AT.matrix = load('alpha_temperature_palha.txt');

end
```

```

[AT.rows,AT.columns] = size(AT.matrix);
[beta.rows,beta.columns] = size(beta.matrix);

AT.alpha_matrix = AT.matrix(:,1);
AT.T_matrix = AT.matrix(:,2:AT.columns);
R = 8.3144621; % [J/mol . K]

for hh = 1:length(x_in)-1

    initial_alpha = x_in(hh);
    final_alpha = x_in(hh+1);
    set(hh) = set_function(initial_alpha,final_alpha,AT,beta,R);

end

print(set);

createfigure(set, AT,fuel)

function res_set = set_function(alpha_min,alpha_max,AT,beta,R)

    res_set.alpha_range = [alpha_min alpha_max];

    [dataAlpha, dataT] = dataset(res_set.alpha_range,AT);

    res_set.data.T = dataT;
    res_set.data.alpha = dataAlpha;

    Alpha_span = res_set.alpha_range;
    IC = dataT(1,:);
    betas = beta.matrix;

    xdata = res_set.data.alpha;
    ydata = res_set.data.T;
    lb = [0 0];
    ub = [inf inf];
    x0 = [15 15];

    MaxFunEvals_Data = 500;
    options = optimset;
    options = optimset(options,'MaxFunEvals', MaxFunEvals_Data);
    options = optimset(options,'PlotFcns',{ @ optimplotresnorm }t(Ma
et al., 2007));
    modelos = 1:17;
    % modelos = [16 17]; % bagaço
    % modelos = [9 17]; % palha

    length_modelos = length(modelos);
    print_res = zeros(length_modelos,2);
    print_res(:,1) = modelos';

    for kk = 1:1:length_modelos

```

```

display('-----')
--')
    model_index = modelos(kk);
    fun
    @(x, xdata) T_from_alpha(x, xdata, model_index, betas, R, Alpha_span, IC);
    [x_sol, resnorm, residual, exitflag, output]
lsqcurvefit(fun, x0, xdata, ydata, lb, ub, options);
    print_res(kk, 2) = resnorm;
    print_res(1:kk, :)
    pause(5);

    res_set.solver.m(kk).x_sol = x_sol;
    res_set.solver.resnorm(kk) = resnorm;
    res_set.solver.m(kk).residual = residual;

end

vector_resnorm = res_set.solver.resnorm;
[min_norm_residual, index] = min(vector_resnorm);

res_set.A = res_set.solver.m(index).x_sol(1);
res_set.E = res_set.solver.m(index).x_sol(2);
res_set.model_index = modelos(index);
res_set.norm_residual = min_norm_residual;

A_sol = res_set.A;
E_sol = res_set.E;
model_index_sol = res_set.model_index;

% Estimate ODE T as a function of alpha
fun_ode_sol = @(alpha_in, T_in)
myode(alpha_in, T_in, A_sol, E_sol, model_index_sol, betas, R);
[alpha_sol_ode_01 T_sol_ode_01] = ode45(fun_ode_sol, Alpha_span, IC);
% Solve ODE
T_sol = interp1(alpha_sol_ode_01, T_sol_ode_01, xdata);
res_set.T_model = T_sol;

% Estimate ODE alpha as a function of T
Tspan = [min(min(dataT)) max(max(dataT))];
[Tdata, Alphadata] = dataset_adT(Tspan, beta, AT);
ICalpha = Alphadata(1, :);

fun_ode_sol = @(T_in, alpha_in)
myode_adT(T_in, alpha_in, A_sol, E_sol, model_index_sol, betas, R);
[T_sol_ode alpha_sol_ode] = ode45(fun_ode_sol, Tspan, ICalpha); %
Solve ODE
alpha_sol = interp1(T_sol_ode, alpha_sol_ode, Tdata);
res_set.Tdata = Tdata;
res_set.Alphadata = Alphadata;
res_set.alpha_model = alpha_sol;
if(norm(imag(alpha_sol))~=0)
    display(['----- Imaginary part predicted (alpha from T) -----
-- '])
end

end
end

```

```

function [dataAlpha, dataT] = dataset(alpha_range,AT)

    min_index = find(AT.alpha_matrix==alpha_range(1), 1, 'first' );
    max_index = find(AT.alpha_matrix==alpha_range(2), 1, 'last' );

    dataAlpha = AT.alpha_matrix(min_index:max_index,1);
    dataT = AT.T_matrix(min_index:max_index,:);
end

function T = T_from_alpha(x,xdata,model_index,betas,R,Alpha_span,IC)

    %Tspan % Span de temperatura
    %IC % alphas em Tspan(1) length(betas)=length(IC)
    A = x(1);
    E = x(2);
    alpha = xdata;
    fun_ode = @(alpha_in,T_in)
myode(alpha_in,T_in,A,E,model_index,betas,R);
    [alpha_ode T_ode] = ode45(fun_ode,Alpha_span,IC); % Solve ODE
    T = interp1(alpha_ode,T_ode,alpha);
end

function dT_dalpha = myode(alpha_in,T_in,A,E,model_index,betas,R)

    n_betas = length(betas);

    K = zeros(1,n_betas);
    dT_dalpha = zeros(n_betas,1);

    models = reaction_models(alpha_in);
    f = models(model_index).fdalpha;
    for ii=1:1:n_betas
        K(ii) = A*exp(-E/(R*T_in(ii)));
        dT_dalpha(ii,1) = betas(ii)/(K(ii)*f);
    end
end

function dalpha_dT = myode_adT(T_in,alpha_in,A,E,model_index,betas,R)

    K = A*exp(-E/(R*T_in));
    n_betas = length(betas);

    f = zeros(1,n_betas);
    dalpha_dT = zeros(n_betas,1);

    for ii=1:1:n_betas
        models = reaction_models(alpha_in(ii));
        f(ii) = models(model_index).fdalpha;
        dalpha_dT(ii,1) = (K/betas(ii))*f(ii);
    end
end

function [dataT, dataAlpha] = dataset_adT(T_range,beta,AT)

    data_quant = 100;
    dataT = linspace(T_range(1),T_range(2),data_quant)';

```

```

alpha_matrix = zeros(data_quant,beta.rows);

for ii = 1:1:data_quant
    for jj = 1:1:beta.rows
        xx = AT.matrix(:,jj+1);
        yy = AT.matrix(:,1);
        T_ii = dataT(ii);

        if(T_ii>max(xx))
            alpha_iijj = 1;
        elseif(T_ii<min(xx))
            alpha_iijj = 0;
        else
            alpha_iijj = interp1(xx,yy,T_ii);
        end
        alpha_matrix(ii,jj) = alpha_iijj;
    end
end

dataAlpha = alpha_matrix;
end

function createfigure(set, AT,fuel)

    groups = length(set);

    Alpha_min = set(1).alpha_range(1);
    Alpha_max = set(groups).alpha_range(2);

    alpha_range = [Alpha_min Alpha_max];
    [alpha_data, Tdata] = dataset(alpha_range,AT);
    div = ones(length(alpha_data),groups-1);

    T_min_abs = min(min(Tdata));
    T_max_abs = max(max(Tdata));
    data_quant = length(alpha_data);

    T_vector = linspace(T_min_abs,T_max_abs,data_quant)';
    value = zeros(groups-1,1);
    for jj = 1:groups-1
        value(jj) = set(jj).alpha_range(2);
        div(:,jj) = value(jj)*div(:,jj);
    end

    % Create figure
    figure1 = figure('Color',[1 1 1]);

    % Create axes
    axes1 = axes('Parent',figure1,...
        'YTickLabel',{
'0','0,1','0,2','0,3','0,4','0,5','0,6','0,7','0,8','0,9','1'},...
        'YTick',[0 0.1 0.2 0.3 0.4 0.5 0.6 0.7 0.8 0.9 1],...
        'YGrid','on',...
        'XGrid','on');
    xlim(axes1,[100 1400]);
    box(axes1,'on');
    hold(axes1,'all');

```

```

plot(Tdata,alpha_data,'o')
hold on;
% plot(T_vector,div,':')

for ii = 1:groups
    display(['----- Plotting grupo = ',num2str(ii),' ----- '])
    plot(set(ii).T_model,set(ii).data.alpha)
end

% Create xlabel
xlabel('Temperatura (K)','FontWeight','bold','FontSize',12,...
    'FontName','Times New Roman');

% Create ylabel
ylabel('Fração de conversão','FontWeight','bold','FontSize',12,...
    'FontName','Times New Roman');

if(strcmp(fuel, 'bagazo'))

    % Create title
    title('Termograma da devolatilização del Bagaço da Cana-de-
Açúcar',...
        'FontWeight','bold',...
        'FontSize',14,...
        'FontName','Times New Roman');

elseif(strcmp(fuel,'palha'))

    % Create title
    title('Termograma da devolatilização da Palha da Cana-de-
Açúcar',...
        'FontWeight','bold',...
        'FontSize',14,...
        'FontName','Times New Roman');

end

% Create legend
legend1 = legend(axes1,'show');

end

function createfigure_adT(set, AT)

    groups = length(set);

    T_min_abs = min(min(AT.T_matrix));
    T_max_abs = max(max(AT.T_matrix));
    data_quant = length(AT.alpha_matrix);

```

```

div = ones(data_quant,groups-1);

T_vector = linspace(T_min_abs,T_max_abs,data_quant)';
value = zeros(groups-1,1);
for jj = 1:groups-1
    value(jj) = set(jj).alpha_range(2);
    div(:,jj) = value(jj)*div(:,jj);
end

figure1 = figure;

% Create axes
axes1 = axes('Parent',figure1);
box(axes1, 'on');
hold(axes1, 'all');

% plot experimental data
plot( AT.T_matrix, AT.alpha_matrix, 'o')
hold on;

% plot divitions
plot(T_vector,div, ':')

% plot model
for ii = 1:groups
    display(['----- Plotting grupo = ',num2str(ii),' ----- '])
    plot(set(ii).Tdata,set(ii).alpha_model)
end
end

function print(set)

[f, total_grupos] = size(set);

display(' ')
display(' ')
display(' ')
display(' ')

for ii = 1:1:total_grupos

    models = reaction_models(0.1);

    range = set(ii).alpha_range;
    Ea = set(ii).E;
    A = set(ii).A;
    model = set(ii).model_index;
    model_name = models(model).name;

display('#####')
    display(' ')
    display(['Grupo = ',num2str(ii)])
    display(' ')
    display(['Rango      alpha      =      ',num2str(range(1)), ' - ',num2str(range(2)), ''])
    display(['Ea = ',num2str(Ea), ' [J/mol]'])
    display(['ln[A] = ',num2str(log(A)), ' [ln(s^-1)]'])

```

```

        display(['A = ', num2str(A), ' [s^-1]'])
        display(['Reaction          model          =          ', num2str(model), '
[' , model_name, ' ]'])
        display(' ')

display('#####')
end

end

function models = reaction_models(alpha)

% Calculando valores de g(alpha) para todos os casos
g(1) = alpha^(1/2);
g(2) = alpha^(1/3);
g(3) = alpha^(1/4);
g(4) = (-log(1-alpha))^(1/2);
g(5) = (-log(1-alpha))^(1/3);
g(6) = (-log(1-alpha))^(1/4);
g(7) = log(alpha/(1-alpha));

g(8) = 1-(1-alpha)^(1/2);
g(9) = 1-(1-alpha)^(1/3);

g(10) = alpha^2;
g(11) = (1-alpha)*log(1-alpha)+alpha;
g(12) = (1-((1-alpha)^(1/3)))^2;
g(13) = 1-((2*alpha)/3)-(1-alpha)^(2/3);
g(14) = alpha;
g(15) = -log(1-alpha);
g(16) = ((1-alpha)^(-1))-1;
g(17) = (1/2)*(((1-alpha)^(-2))-1);

% Calculando valores de f(alpha) para todos os casos
f(1) = 2*alpha^(1/2);
f(2) = 3*alpha^(2/3);
f(3) = 4*alpha^(3/4);
f(4) = 2*(1-alpha)*(-log(1-alpha))^(1/2);
f(5) = 3*(1-alpha)*(-log(1-alpha))^(2/3);
f(6) = 4*(1-alpha)*(-log(1-alpha))^(3/4);
f(7) = alpha*(1-alpha);

f(8) = 2*(1-alpha)^(1/2);
f(9) = 3*(1-alpha)^(2/3);

f(10) = 1/(2*alpha);
f(11) = (-log(1-alpha))^(-1);
f(12) = (3*((1-alpha)^(2/3)))/(2*(1-((1-alpha)^(1/3))));
f(13) = (3/2)*(((1-alpha)^(-1/3))-1);

f(14) = 1;
f(15) = (1-alpha);
f(16) = (1-alpha)^2;
f(17) = (1-alpha)^3;

% Colocando valores de g(alpha) e f(alpha) na estrutura
for ii = 1:17
    models(ii).fdalpha = f(ii);
    models(ii).gdalpha = g(ii);
end

```

```

% Colocando nomes aos modelos na estrutura
models(1).name = 'Lei de potência P2';
models(1).ref = 'P2';

models(2).name = 'Lei de potência P3';
models(2).ref = 'P3';

models(3).name = 'Lei de potência P4';
models(3).ref = 'P4';

models(4).name = 'Avarami-Erofe`ev A2';
models(4).ref = 'A2';

models(5).name = 'Avarami-Erofe`ev A3';
models(5).ref = 'A3';

models(6).name = 'Avarami-Erofe`ev A4';
models(6).ref = 'A4';

models(7).name = 'Prout-Tompkins';
models(7).ref = 'B1';

models(8).name = 'Contração de área';
models(8).ref = 'R2';

models(9).name = 'Contração de volume';
models(9).ref = 'R3';

models(10).name = 'Difusão 1-D';
models(10).ref = 'D1';

models(11).name = 'Difusão 2-D';
models(11).ref = 'D2';

models(12).name = 'Difusão 3-D ou Equação de Jander';
models(12).ref = 'D3';

models(13).name = 'Ginstling-Brounshtein';
models(13).ref = 'D4';

models(14).name = 'Ordem zero';
models(14).ref = 'F0/R1';

models(15).name = 'Primeira ordem';
models(15).ref = 'F1';

models(16).name = 'Segunda ordem';
models(16).ref = 'F2';

models(17).name = 'Terceira ordem';
models(17).ref = 'F3';

end
end

```

C.2 alpha_temperature_bagazo.txt

0.0000000e+000	3.8410327e+002	4.6662930e+002	3.9547300e+002
1.0000000e-002	4.9482195e+002	4.9961284e+002	4.8944728e+002
2.0000000e-002	5.1098314e+002	5.1885576e+002	5.1560721e+002
3.0000000e-002	5.2178418e+002	5.2258476e+002	5.2442394e+002
4.0000000e-002	5.2590733e+002	5.2462798e+002	5.2942848e+002
5.0000000e-002	5.2808968e+002	5.2667119e+002	5.3116836e+002
6.0000000e-002	5.3027204e+002	5.2871440e+002	5.3290823e+002
7.0000000e-002	5.3245440e+002	5.3075762e+002	5.3464810e+002
8.0000000e-002	5.3463675e+002	5.3280083e+002	5.3638798e+002
9.0000000e-002	5.3681911e+002	5.3484405e+002	5.3812785e+002
1.0000000e-001	5.3900147e+002	5.3688726e+002	5.3986772e+002
1.1000000e-001	5.4126821e+002	5.3893048e+002	5.4160759e+002
1.2000000e-001	5.4414924e+002	5.4097369e+002	5.4334747e+002
1.3000000e-001	5.4528723e+002	5.4301691e+002	5.4508734e+002
1.4000000e-001	5.4665746e+002	5.4506012e+002	5.4682721e+002
1.5000000e-001	5.4852446e+002	5.4710334e+002	5.4856709e+002
1.6000000e-001	5.4934511e+002	5.4914655e+002	5.5030696e+002
1.7000000e-001	5.5080185e+002	5.5118977e+002	5.5204683e+002
1.8000000e-001	5.5225859e+002	5.5323298e+002	5.5378670e+002
1.9000000e-001	5.5371533e+002	5.5527620e+002	5.5552658e+002
2.0000000e-001	5.5517206e+002	5.5782863e+002	5.5726645e+002
2.1000000e-001	5.5662880e+002	5.5998705e+002	5.5900632e+002
2.2000000e-001	5.5808554e+002	5.6133121e+002	5.6074620e+002
2.3000000e-001	5.5954227e+002	5.6265384e+002	5.6248607e+002
2.4000000e-001	5.6099901e+002	5.6396385e+002	5.6422594e+002
2.5000000e-001	5.6245575e+002	5.6545286e+002	5.6596581e+002
2.6000000e-001	5.6391248e+002	5.6933571e+002	5.6770569e+002
2.7000000e-001	5.6691304e+002	5.7015299e+002	5.6944556e+002
2.8000000e-001	5.6943544e+002	5.7106833e+002	5.7118543e+002
2.9000000e-001	5.7235531e+002	5.7336258e+002	5.7292531e+002
3.0000000e-001	5.7406980e+002	5.7541504e+002	5.7466518e+002
3.1000000e-001	5.7633593e+002	5.7735660e+002	5.7640505e+002
3.2000000e-001	5.7860207e+002	5.7929815e+002	5.7814492e+002
3.3000000e-001	5.8086821e+002	5.8123971e+002	5.7988480e+002
3.4000000e-001	5.8313435e+002	5.8318126e+002	5.8162467e+002
3.5000000e-001	5.8540049e+002	5.8512282e+002	5.8336454e+002
3.6000000e-001	5.8766663e+002	5.8706437e+002	5.8628546e+002
3.7000000e-001	5.8960885e+002	5.8900593e+002	5.8931435e+002
3.8000000e-001	5.9320296e+002	5.9094748e+002	5.9105239e+002
3.9000000e-001	5.9600682e+002	5.9288904e+002	5.9279044e+002
4.0000000e-001	5.9663087e+002	5.9483059e+002	5.9468750e+002
4.1000000e-001	5.9807043e+002	5.9677215e+002	5.9662575e+002
4.2000000e-001	5.9902351e+002	5.9871370e+002	5.9843224e+002
4.3000000e-001	5.9997659e+002	6.0065526e+002	5.9994485e+002
4.4000000e-001	6.0092967e+002	6.0259681e+002	6.0145747e+002
4.5000000e-001	6.0188276e+002	6.0453837e+002	6.0360802e+002
4.6000000e-001	6.0283584e+002	6.0647992e+002	6.0583973e+002
4.7000000e-001	6.0378892e+002	6.0842148e+002	6.0695389e+002
4.8000000e-001	6.0474201e+002	6.1064617e+002	6.0806806e+002
4.9000000e-001	6.0569509e+002	6.1250189e+002	6.0918223e+002
5.0000000e-001	6.0664817e+002	6.1376975e+002	6.1029640e+002
5.1000000e-001	6.0760126e+002	6.1491809e+002	6.1230802e+002
5.2000000e-001	6.0855434e+002	6.1594372e+002	6.1432645e+002
5.3000000e-001	6.0950742e+002	6.1696935e+002	6.1606187e+002
5.4000000e-001	6.1046051e+002	6.1788319e+002	6.1779730e+002

5.5000000e-001	6.1141359e+002	6.1871928e+002	6.1953272e+002
5.6000000e-001	6.1236667e+002	6.1955538e+002	6.2126814e+002
5.7000000e-001	6.1337255e+002	6.2233110e+002	6.2300356e+002
5.8000000e-001	6.1468564e+002	6.2291248e+002	6.2473898e+002
5.9000000e-001	6.1655918e+002	6.2349385e+002	6.2647441e+002
6.0000000e-001	6.1774005e+002	6.2407523e+002	6.2820983e+002
6.1000000e-001	6.1834200e+002	6.2465660e+002	6.2994525e+002
6.2000000e-001	6.1875468e+002	6.2544939e+002	6.3168067e+002
6.3000000e-001	6.1916736e+002	6.2639122e+002	6.3341610e+002
6.4000000e-001	6.1976739e+002	6.2738975e+002	6.3515152e+002
6.5000000e-001	6.2095289e+002	6.2931915e+002	6.3688694e+002
6.6000000e-001	6.2250105e+002	6.3124855e+002	6.3862236e+002
6.7000000e-001	6.2310002e+002	6.3317796e+002	6.4035778e+002
6.8000000e-001	6.2375914e+002	6.3510736e+002	6.4209321e+002
6.9000000e-001	6.2592377e+002	6.3703676e+002	6.4382863e+002
7.0000000e-001	6.2808840e+002	6.3896616e+002	6.4556405e+002
7.1000000e-001	6.3025303e+002	6.4089557e+002	6.4729947e+002
7.2000000e-001	6.3241766e+002	6.4282497e+002	6.4903490e+002
7.3000000e-001	6.3458230e+002	6.4475437e+002	6.5077032e+002
7.4000000e-001	6.3674693e+002	6.4668377e+002	6.5250574e+002
7.5000000e-001	6.3891156e+002	6.4861318e+002	6.5424116e+002
7.6000000e-001	6.4245359e+002	6.5054258e+002	6.5597658e+002
7.7000000e-001	6.5061224e+002	6.5247198e+002	6.5771201e+002
7.8000000e-001	6.5839316e+002	6.5440138e+002	6.5944743e+002
7.9000000e-001	6.6672305e+002	6.5633079e+002	6.6118285e+002
8.0000000e-001	6.7800284e+002	6.5826019e+002	6.6291827e+002
8.1000000e-001	6.8351003e+002	6.6928452e+002	6.6465370e+002
8.2000000e-001	6.9813927e+002	6.7953645e+002	6.6638912e+002
8.3000000e-001	7.0365876e+002	6.9015671e+002	6.6851591e+002
8.4000000e-001	7.1989906e+002	7.0077697e+002	6.7708990e+002
8.5000000e-001	7.3483572e+002	7.0907238e+002	6.8718198e+002
8.6000000e-001	7.4503759e+002	7.2486889e+002	7.0270454e+002
8.7000000e-001	7.6251970e+002	7.3973268e+002	7.1514331e+002
8.8000000e-001	7.8242487e+002	7.5002275e+002	7.2758208e+002
8.9000000e-001	8.1108028e+002	7.7340800e+002	7.4064796e+002
9.0000000e-001	8.3777865e+002	7.9389884e+002	7.5869793e+002
9.1000000e-001	8.6110912e+002	8.2227680e+002	7.8431963e+002
9.2000000e-001	9.0154091e+002	8.4865581e+002	8.0952388e+002
9.3000000e-001	9.4514330e+002	8.8190134e+002	8.3849247e+002
9.4000000e-001	9.8073736e+002	9.2532752e+002	8.7152524e+002
9.5000000e-001	1.0413659e+003	9.9620742e+002	9.2769251e+002
9.6000000e-001	1.1012104e+003	1.0510834e+003	9.9205295e+002
9.7000000e-001	1.1764521e+003	1.1611382e+003	1.0570448e+003
9.8000000e-001	1.2005418e+003	1.2114308e+003	1.2182766e+003
9.9000000e-001	1.2237086e+003	1.2237790e+003	1.2235113e+003
1.0000000e+000	1.2237362e+003	1.2239420e+003	1.2236592e+003

C.3 alpha_temperature_palha.txt

0.0000000e+000	3.9035100e+002	3.8836646e+002	3.8432797e+002
1.0000000e-002	4.5986793e+002	4.7550582e+002	4.6863993e+002
2.0000000e-002	4.8949095e+002	4.8956822e+002	4.8561991e+002
3.0000000e-002	5.0781314e+002	5.0128384e+002	4.9251473e+002
4.0000000e-002	5.1192779e+002	5.1229725e+002	4.9940956e+002
5.0000000e-002	5.1753174e+002	5.2331065e+002	5.0630438e+002
6.0000000e-002	5.2322657e+002	5.2561255e+002	5.1319921e+002
7.0000000e-002	5.2719260e+002	5.2892915e+002	5.2009404e+002
8.0000000e-002	5.2927005e+002	5.3128725e+002	5.2698886e+002
9.0000000e-002	5.3107691e+002	5.3397522e+002	5.3421523e+002
1.0000000e-001	5.3190860e+002	5.3606908e+002	5.3857567e+002
1.1000000e-001	5.3392503e+002	5.3781038e+002	5.4052142e+002
1.2000000e-001	5.3608780e+002	5.3919438e+002	5.4246717e+002
1.3000000e-001	5.3805762e+002	5.4046436e+002	5.4441292e+002
1.4000000e-001	5.4002744e+002	5.4166431e+002	5.4409599e+002
1.5000000e-001	5.4199726e+002	5.4286426e+002	5.4469357e+002
1.6000000e-001	5.4396708e+002	5.4475919e+002	5.4810094e+002
1.7000000e-001	5.4593690e+002	5.4667056e+002	5.5028329e+002
1.8000000e-001	5.4790671e+002	5.4858194e+002	5.5110017e+002
1.9000000e-001	5.4987653e+002	5.5049332e+002	5.5191705e+002
2.0000000e-001	5.5108627e+002	5.5240470e+002	5.5273392e+002
2.1000000e-001	5.5281751e+002	5.5431608e+002	5.5355080e+002
2.2000000e-001	5.5390960e+002	5.5622746e+002	5.5460461e+002
2.3000000e-001	5.5540229e+002	5.5813884e+002	5.5645273e+002
2.4000000e-001	5.5577762e+002	5.6005022e+002	5.5830086e+002
2.5000000e-001	5.5781304e+002	5.6196160e+002	5.5956809e+002
2.6000000e-001	5.6014994e+002	5.6387297e+002	5.6081104e+002
2.7000000e-001	5.6240762e+002	5.6578435e+002	5.6205399e+002
2.8000000e-001	5.6466529e+002	5.6769573e+002	5.6340641e+002
2.9000000e-001	5.6692297e+002	5.6960711e+002	5.6492821e+002
3.0000000e-001	5.6918065e+002	5.7151849e+002	5.6645001e+002
3.1000000e-001	5.7143833e+002	5.7342987e+002	5.6797180e+002
3.2000000e-001	5.7369600e+002	5.7534125e+002	5.6949360e+002
3.3000000e-001	5.7642531e+002	5.7704018e+002	5.7101540e+002
3.4000000e-001	5.7733948e+002	5.7821940e+002	5.7253719e+002
3.5000000e-001	5.7922907e+002	5.7967355e+002	5.7405899e+002
3.6000000e-001	5.7908530e+002	5.8185133e+002	5.7558079e+002
3.7000000e-001	5.8169999e+002	5.8375686e+002	5.7710258e+002
3.8000000e-001	5.8316320e+002	5.8584468e+002	5.7862438e+002
3.9000000e-001	5.8488550e+002	5.8790918e+002	5.8014618e+002
4.0000000e-001	5.8660780e+002	5.8962902e+002	5.8166797e+002
4.1000000e-001	5.8833010e+002	5.9097516e+002	5.8318977e+002
4.2000000e-001	5.9005240e+002	5.9217455e+002	5.8471157e+002
4.3000000e-001	5.9177469e+002	5.9330053e+002	5.8623336e+002
4.4000000e-001	5.9349699e+002	5.9434991e+002	5.8775516e+002
4.5000000e-001	5.9521929e+002	5.9539930e+002	5.8927696e+002
4.6000000e-001	5.9694159e+002	5.9667322e+002	5.9079875e+002
4.7000000e-001	5.9866389e+002	5.9806572e+002	5.9232055e+002
4.8000000e-001	6.0161422e+002	5.9945823e+002	5.9384235e+002
4.9000000e-001	6.0093140e+002	6.0085074e+002	5.9536414e+002
5.0000000e-001	6.0200795e+002	6.0224325e+002	5.9688594e+002
5.1000000e-001	6.0306465e+002	6.0363575e+002	5.9840774e+002
5.2000000e-001	6.0407076e+002	6.0502826e+002	5.9992953e+002
5.3000000e-001	6.0488338e+002	6.0642077e+002	6.0145133e+002
5.4000000e-001	6.0456295e+002	6.0781327e+002	6.0297313e+002

5.5000000e-001	6.0638100e+002	6.0920578e+002	6.0449492e+002
5.6000000e-001	6.0697002e+002	6.1059829e+002	6.0601672e+002
5.7000000e-001	6.0772272e+002	6.1199080e+002	6.0753852e+002
5.8000000e-001	6.0958304e+002	6.1338330e+002	6.0906031e+002
5.9000000e-001	6.1144336e+002	6.1477581e+002	6.1058211e+002
6.0000000e-001	6.1330368e+002	6.1616832e+002	6.1210391e+002
6.1000000e-001	6.1516400e+002	6.1756083e+002	6.1362571e+002
6.2000000e-001	6.1702432e+002	6.1895333e+002	6.1514750e+002
6.3000000e-001	6.1888463e+002	6.2034584e+002	6.1666930e+002
6.4000000e-001	6.2074495e+002	6.2173835e+002	6.1819110e+002
6.5000000e-001	6.2260527e+002	6.2313086e+002	6.2083480e+002
6.6000000e-001	6.2446559e+002	6.2452336e+002	6.2357302e+002
6.7000000e-001	6.2632591e+002	6.2591587e+002	6.2520963e+002
6.8000000e-001	6.2628943e+002	6.2730838e+002	6.2684624e+002
6.9000000e-001	6.2756888e+002	6.2870089e+002	6.2848285e+002
7.0000000e-001	6.2953759e+002	6.3036171e+002	6.3011946e+002
7.1000000e-001	6.2993509e+002	6.3306344e+002	6.3039172e+002
7.2000000e-001	6.4497208e+002	6.3479488e+002	6.2826331e+002
7.3000000e-001	6.4160954e+002	6.3836373e+002	6.3307570e+002
7.4000000e-001	6.4957480e+002	6.3991291e+002	6.3709395e+002
7.5000000e-001	6.5010104e+002	6.4365555e+002	6.3948760e+002
7.6000000e-001	6.6687184e+002	6.4740889e+002	6.4792785e+002
7.7000000e-001	6.8020544e+002	6.6049731e+002	6.4901757e+002
7.8000000e-001	6.8678750e+002	6.7566966e+002	6.5949692e+002
7.9000000e-001	6.8902378e+002	6.8023659e+002	6.6997627e+002
8.0000000e-001	7.0386505e+002	6.8318553e+002	6.8045561e+002
8.1000000e-001	7.1016177e+002	6.8990480e+002	6.9093496e+002
8.2000000e-001	7.2686985e+002	7.0780870e+002	7.0244586e+002
8.3000000e-001	7.2604322e+002	7.2390122e+002	7.1243414e+002
8.4000000e-001	7.4690319e+002	7.1980520e+002	7.0969849e+002
8.5000000e-001	7.8236080e+002	7.3035153e+002	7.2837140e+002
8.6000000e-001	8.0405179e+002	7.6271514e+002	7.4688139e+002
8.7000000e-001	7.8436108e+002	7.6425515e+002	7.6260101e+002
8.8000000e-001	8.0519313e+002	7.7424988e+002	7.6767086e+002
8.9000000e-001	8.4288714e+002	8.0756046e+002	7.9174373e+002
9.0000000e-001	8.5124130e+002	8.1834406e+002	8.2473777e+002
9.1000000e-001	9.2766334e+002	8.4870517e+002	8.2153574e+002
9.2000000e-001	9.8023140e+002	9.0211301e+002	8.9006498e+002
9.3000000e-001	9.8912851e+002	9.5627749e+002	9.3606628e+002
9.4000000e-001	9.8148639e+002	1.0528819e+003	9.6742454e+002
9.5000000e-001	1.0774839e+003	1.1262702e+003	1.0647454e+003
9.6000000e-001	1.0918233e+003	1.1492079e+003	1.1877645e+003
9.7000000e-001	1.1216362e+003	1.1697168e+003	1.2130915e+003
9.8000000e-001	1.1709338e+003	1.2213086e+003	1.2234643e+003
9.9000000e-001	1.1467891e+003	1.2237366e+003	1.2235546e+003
1.0000000e+000	1.1841968e+003	1.2234753e+003	1.2237020e+003

C.4 beta_bagazo.txt

5
10
15

C.5 beta_palha.txt

5
10
15

Apêndice D

CÓDIGO FONTE DAS UDFS PROGRAMADAS

D.5 furnace.c

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

#include "auxiliar.h"

DEFINE_DPM_LAW(devol_bagazo_NEST,p,coupled)
{
    /* real tol; */
    real Tp, dry_cpp, Dp, Ap, mp, dry_Epsilonp, alpha;
    real Tinf, G, theta_R, Pr, Nu, h;
    real dry_h_fg;
    real time_step;
    real alpha_max[3], A_array[3], E_array[3], A, E;
    int model_index_array[3], part, model_index;
    struct model_str z;
    real dalpha_dt, dmp_dt, Betap, Alphap;
    real T_new, dT, MASS_new;

    Material *dry_m = P_INJECTION(p)->material;
    cphase_state_t *ci = &(p->cphase);

    struct p_properties p_prop = particle_properties(p);
    real init_state_AMpCM = p_prop.init_state_AMpCM;

    Tp = p->state.temp;
    dry_cpp = DPM_SPECIFIC_HEAT(p,Tp);
    Dp = p->state.diam;
    Ap = DPM_AREA(Dp);
```

```

mp = p->state.mass;
dry_Epsilonp = DPM_EMISSIVITY(p,dry_m);
alpha = p_prop.alpha; /* fração massica de volateis liverada */

Tinf = ci->temp;
G = ci->G;
theta_R = pow(G/(4*SIGMA_SBC),1./4.);
Pr = ci->sHeat * ci->mu / ci->tCond;
Nu = 2.0 + 0.6 * sqrt(p->Re) * pow(Pr, 1./3.);
h = Nu * ci->tCond / Dp;
dry_h_fg = MATERIAL_PROP(dry_m,PROP_latent_heat);

time_step = p->time_step;

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
/*                                     Dados do modelo providos por MATLAB
*/

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
/*
alpha_max --> fraction [0 - 1]
A_array --> [s^-1]
E_array --> [J/mol]
model_index_array --> integer [1-17]
*/

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
/*
/* Dados do Bagazo T_vol = 489 K */
alpha_max[0] = 0.1;
alpha_max[1] = 0.6;
alpha_max[2] = 1.0;

A_array[0] = 88655.1772;
A_array[1] = 88655.1772;
A_array[2] = 64561.7295;

E_array[0] = 65173.6942;
E_array[1] = 65173.6942;
E_array[2] = 60898.0233;

model_index_array[0] = 16;
model_index_array[1] = 16;
model_index_array[2] = 17;

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

part = model( alpha, alpha_max );

A = A_array[part];

```

```

E = E_array[part];
model_index = model_index_array[part];

z = dev_model(A, E, model_index, Tp, alpha, time_step);

dalpha_dt = z.k * z.f;

dmp_dt = -p_prop.init_state_VM * dalpha_dt;

Betap = Ap*(h + dry_Epsilonp* SIGMA_SBC *pow(Tp,3))/(mp*dry_cpp);
Alphap = (h*Ap*Tinf + dmp_dt*dry_h_fg + Ap*dry_Epsilonp* SIGMA_SBC
*pow(theta_R,4))/(h*Ap + dry_Epsilonp*Ap* SIGMA_SBC *pow(Tp,3));

T_new = Alphap + (Tp - Alphap)*exp(-Betap* time_step);
MASS_new = mp + dmp_dt * time_step;

if (MASS_new<=init_state_AMpCM){ /* limite de massa devolatilizada
*/
    MASS_new=init_state_AMpCM;
}

dT = T_new - Tp;

P_USER_REAL(p,4) = dT;

if(dT>=0.){
    P_MASS(p) = MASS_new;
    P_DIAM(p) = pow(6.0*P_MASS(p)/(P_RHO(p)* M_PI), 1./3.);
    P_T(p) = T_new;
}else{
    InertHeatingLaw(p);
}

}

DEFINE_DPM_LAW(devol_palha_NEST,p,coupled)
{
    /* real tol; */
    real Tp, dry_cpp, Dp, Ap, mp, dry_Epsilonp, alpha;
    real Tinf, G, theta_R, Pr, Nu, h;
    real dry_h_fg;
    real time_step;
    real alpha_max[3], A_array[3], E_array[3], A, E;
    int model_index_array[3], part, model_index;
    struct model_str z;
    real dalpha_dt, dmp_dt, Betap, Alphap;
    real T_new, dT, MASS_new;

    Material *dry_m = P_INJECTION(p)->material;
    cphase_state_t *ci = &(p->cphase);

```

```

struct p_properties p_prop = particle_properties(p);
real init_state_AMpCM = p_prop.init_state_AMpCM;

Tp = p->state.temp;
dry_cpp = DPM_SPECIFIC_HEAT(p,Tp);
Dp = p->state.diam;
Ap = DPM_AREA(Dp);
mp = p->state.mass;
dry_Epsilonp = DPM_EMISSIVITY(p,dry_m);
alpha = p_prop.alpha; /* fração massica de volateis liverada */

Tinf = ci->temp;
G = ci->G;
theta_R = pow(G/(4*SIGMA_SBC),1./4.);
Pr = ci->sHeat * ci->mu / ci->tCond;
Nu = 2.0 + 0.6 * sqrt(p->Re) * pow(Pr, 1./3.);
h = Nu * ci->tCond / Dp;
dry_h_fg = MATERIAL_PROP(dry_m,PROP_latent_heat);

time_step = p->time_step;

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
/*                                Dados do modelo providos por MATLAB
*/

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
/*
alpha_max --> fraction [0 - 1]
A_array --> [s^-1]
E_array --> [J/mol]
model_index_array --> integer [1-17]
*/

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%

/* Dados da palha T_vol = 459 K */

alpha_max[0] = 0.1;
alpha_max[1] = 0.5;
alpha_max[2] = 1.0;

A_array[0] = 256726.7848;
A_array[1] = 256726.7848;
A_array[2] = 53068.6204;

E_array[0] = 68987.7579;
E_array[1] = 68987.7579;
E_array[2] = 59233.9148;

model_index_array[0] = 17;

```

```

model_index_array[1] = 17;
model_index_array[2] = 17;

/*%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%*/

part = model( alpha, alpha_max );

A = A_array[part];
E = E_array[part];
model_index = model_index_array[part];

z = dev_model(A, E, model_index, Tp, alpha, time_step);

dalpha_dt = z.k * z.f;

dmp_dt = -p_prop.init_state_VM * dalpha_dt;

Betap = Ap*(h + dry_Epsilonp* SIGMA_SBC *pow(Tp,3))/(mp*dry_cpp);
Alphap = (h*Ap*Tinf + dmp_dt*dry_h_fg + Ap*dry_Epsilonp* SIGMA_SBC
*pow(theta_R,4))/(h*Ap + dry_Epsilonp*Ap* SIGMA_SBC *pow(Tp,3));

T_new = Alphap + (Tp - Alphap)*exp(-Betap* time_step);
MASS_new = mp + dmp_dt * time_step;

if (MASS_new<=init_state_AMpCM){ /* limite de massa devolatilizada
*/
    MASS_new=init_state_AMpCM;
}

dT = T_new - Tp;

P_USER_REAL(p,4) = dT;

if(dT>=0.){
    P_MASS(p) = MASS_new;
    P_DIAM(p) = pow(6.0*P_MASS(p)/(P_RHO(p)* M_PI), 1./3.);
    P_T(p) = T_new;
}else{
    InertHeatingLaw(p);
}

}

DEFINE_DPM_SOURCE(dpm_source,c,t,S,strength,p)
{

```

```

/*
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% */

struct p_properties p_prop;

real init_state_temp;
real state0_mass, state_mass;
real mp_dot;

int devol_species_index;

real init_state_AMpCM;

real init_devol_Cp_int, init_dry_Cp_int;
real dry_Hpyrol;

real h_pyrol_ref;

/*
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%
%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%%% */

Material *dry_m = P_MATERIAL(p);

Material *devol_m = P_INJECTION(p)->devol_species;

P_USER_REAL(p,6) = P_USER_REAL(p,6) +1.0;

p_prop = particle_properties(p);

init_state_temp = p->init_state.temp;

state0_mass = p->state0.mass;
state_mass = p->state.mass;

devol_species_index = p->injection->devol_species_index;

init_state_AMpCM = p_prop.init_state_AMpCM;

init_devol_Cp_int
MATERIAL_PROP_INTEGRAL(devol_m,PROP_Cp,298.15,init_state_temp);
init_dry_Cp_int
MATERIAL_PROP_INTEGRAL(dry_m,PROP_Cp,298.15,init_state_temp);

dry_Hpyrol = MATERIAL_PROP(dry_m,PROP_hpyrolysis);

h_pyrol_ref = (dry_Hpyrol + init_devol_Cp_int - init_dry_Cp_int);

mp_dot = (state0_mass - state_mass) * strength;

```

```

    /* Devolatilization sources */
    if(P_CURRENT_LAW(p)==8 && mp_dot>0){
        S->species[devol_species_index] += mp_dot;
        S->energy += h_pyrol_ref*mp_dot;
    }

    if(state_mass==init_state_AMpCM){
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p) = 5;
    }

    if(P_USER_REAL(p,3)==1. && state_mass==p_prop.init_state_AM){ /*
particle touch the grate */
        P_USER_REAL(p,3) = 2.; /* grate source has already been
updated */
    }

}

/* update the user scalar variables */
DEFINE_DPM_SCALAR_UPDATE(scalar_update,cell,thread,initialize,p)
{
    struct p_properties p_prop;
    real particular_step;
    /* int print; */

    p_prop = particle_properties(p);
    particular_step = p_prop.particular_step;

    P_USER_REAL(p,0) = particular_step; /* Particular step (heat-mass
trasnfer law) */
    P_USER_REAL(p,1) = initialize; /* Particular initialize (boolean)
*/

    if(initialize){
        /* dpm_par.avg_sources = 0; */
        P_USER_REAL(p,2) = 0.; /* step */

        P_USER_REAL(p,3) = 0.; /* particle touch the grate indicator
*/
        P_USER_REAL(p,5) = 0.; /* particle touch the grate indicator
*/
        P_USER_REAL(p,6) = 0.; /* particle touch the grate indicator
*/
    }else{
        P_USER_REAL(p,2) = P_USER_REAL(p,2) + 1;
    }

    if(particular_step!=6.){
        P_USER_REAL(p,4) = 0.; /* verificar DT devolatilização */
    }

}

```

```

DEFINE_DPM_BC(grate_NEST, p, t, f, f_normal, dim)
{
    struct p_properties p_prop;

    cphase_state_t *ci = &(p->cphase);
    real Tinf = ci->temp;

    p_prop = particle_properties(p);

    P_USER_REAL(p,3) = 1.; /* particle touch the grate indicator */

    p->state.temp = Tinf;

    /* Drying */
    if(P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==0    ||    P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==1    ||
P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==2 )
    {
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=1;

        p->state.mass = p_prop.init_state_AMpCMpVM;

        AddSources(p);

        p->state0.mass = p_prop.init_state_AMpCMpVM;
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=4;
    }

    /* Devolatilization */
    if(P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==3 || P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==4)
    {
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=4;

        p->state.mass = p_prop.init_state_AMpCM;

        AddSources(p);

        p->state0.mass = p_prop.init_state_AMpCM;
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=5;
    }

    /* Char combustion */
    if(P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==5)
    {
        p->state.mass = p_prop.init_state_AM;

        AddSources(p);

        p->state0.mass = p_prop.init_state_AM;
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=7;
    }

    /* Ash heating or cooling */

```

```

    if(P_CURRENT_LAW_INDEX(p)==6)
    {
        AddSources(p);
        P_CURRENT_LAW_INDEX(p)=7;
    }

    /*
    #####
    */
    /*
    #####
    */

    p->gvtp.n_trapped += 1; /* Add particle to trapped in DPM status
message */
    p->gvtp.n_incomplete -= 1; /* Subtract particle to incomplete in
DPM status message */
    return PATH_STOP;

}

```

D.5 auxiliar.h

```

struct p_properties {
    real state0_MF;
    real state_MF;

    real init_state_LF_mass;
    real state0_LF_mass;
    real state_LF_mass;

    real init_state_VF_mass;
    real state0_VF_mass;
    real state_VF_mass;

    real init_state_CF_mass;
    real state0_CF_mass;
    real state_CF_mass;

    real init_state_AF_mass;
    real init_state_AFpCF_mass;
    real init_state_AFpCFpVF_mass;
    real init_state_AMpCM;

```

```

    real init_state_AMpCMpVM;

    real init_state_LM;
    real init_state_VM;
    real init_state_CM;
    real init_state_AM;

    real alpha;
    real alpha_char;

    real state_lmf;
    real state_vmf;
    real state_cmf;

    real state0_lmf;
    real state0_vmf;
    real state0_cmf;

    real state0_temp;
    real state_temp;
    real state0_mass;
    real state_mass;

    real state0_LM;
    real state0_VM;
    real state0_CM;

    int particular_step;

    real T_vap;
    real T_boil;
    real T_vol;
} p_prop;

struct model_str {
    real f;
    real k;
    real alpha_new;
} z;

struct p_properties particle_properties(Tracked_Particle *p){

    real rho_dry, rho_moisture;
    real init_state_LF_vol;
    real init_state_LF_mass, state0_LF_mass, state_LF_mass;
    real init_state_mass, state0_mass, state_mass;
    real state0_MF, state_MF;
    real init_state_VF_daf, init_state_CF_daf, init_state_AF_daf;
    real init_state_VF_mass, init_state_CF_mass, init_state_AF_mass;
    real state0_VF_mass, state_VF_mass;
    real state0_CF_mass, state_CF_mass;
    real          init_state_AFpCF_mass,          init_state_AFpCFpVF_mass,
    init_state_AMpCM, init_state_AMpCMpVM;

```

```

real init_state_LM, init_state_VM, init_state_CM, init_state_AM;
real alpha, alpha_char;
real state0_LM, state0_VM, state0_CM;
real T_vap, T_boil, T_vol;
real particular_step;
real state_temp, state0_temp;

real state_lmf, state_vmf, state_cmf;
real state0_lmf, state0_vmf, state0_cmf;

Material *dry_m = P_INJECTION(p)->material;
Material *liq_m = P_INJECTION(p)->evaporating_material;

state_temp = p->state.temp;
state0_temp = p->state0.temp;

rho_dry = DPM_generic_property(p,dry_m,PROP_rho,state_temp); /*
ANSYS 15.0 */
rho_moisture = DPM_generic_property(p,liq_m,PROP_rho,state_temp);
/* ANSYS 15.0 */

init_state_mass = p->init_state.mass;
state0_mass = p->state0.mass;
state_mass = p->state.mass;

state0_MF = state0_mass/init_state_mass;
state_MF = state_mass/init_state_mass;

init_state_LF_vol = p->injection->liquid_fraction; /* ANSYS 15.0 */

init_state_LF_mass =
((init_state_LF_vol*rho_moisture)/((init_state_LF_vol*rho_moisture)
+(1-init_state_LF_vol)*rho_dry));

init_state_VF_daf = MATERIAL_PROP(dry_m,PROP_volatile_frac);
init_state_CF_daf = MATERIAL_PROP(dry_m,PROP_combustible_frac);
init_state_AF_daf = 1 - init_state_VF_daf - init_state_CF_daf;

init_state_VF_mass = init_state_VF_daf*( 1 - init_state_LF_mass );
init_state_CF_mass = init_state_CF_daf*( 1 - init_state_LF_mass );
init_state_AF_mass = init_state_AF_daf*( 1 - init_state_LF_mass );

init_state_AFpCF_mass = init_state_AF_mass + init_state_CF_mass;
init_state_AFpCFpVF_mass = 1 - init_state_LF_mass;

init_state_AMP_CM = init_state_mass*init_state_AFpCF_mass;
init_state_AMP_CMpVM = init_state_mass*init_state_AFpCFpVF_mass;

init_state_LM = init_state_mass*init_state_LF_mass;
init_state_VM = init_state_mass*init_state_VF_mass;
init_state_CM = init_state_mass*init_state_CF_mass;
init_state_AM = init_state_mass*init_state_AF_mass;

```

```

if(state_MF>init_state_AFpCFpVF_mass){ /* drying zone */
    state_LF_mass = state_MF - init_state_AFpCFpVF_mass; /* ANSYS
15.0 */
    state_VF_mass = init_state_VF_mass;
    state_CF_mass = init_state_CF_mass;
    alpha = 0.;
    alpha_char = 0.;
}else if(state_MF>init_state_AFpCF_mass){ /*devolatilization zone
*/
    state_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state_VF_mass = state_MF - init_state_AFpCF_mass;
    state_CF_mass = init_state_CF_mass;
    alpha = (init_state_AmpCMpVM - state_mass)/init_state_VM;
    alpha_char = 0.;
}else if(state_MF>init_state_AF_mass){ /* char combustion zone */
    state_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state_VF_mass = 0.;
    state_CF_mass = state_MF - init_state_AF_mass;
    alpha = 1.;
    alpha_char = (init_state_AmpCM - state_mass)/init_state_CM;
}else{ /* ash heating zone */
    state_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state_VF_mass = 0.;
    state_CF_mass = 0.;
    alpha = 1.;
    alpha_char = 1.;
}

```

```

if(state0_MF>init_state_AFpCFpVF_mass){ /* drying zone */
    state0_LF_mass = state0_MF - init_state_AFpCFpVF_mass; /*
ANSYS 15.0 */
    state0_VF_mass = init_state_VF_mass;
    state0_CF_mass = init_state_CF_mass;
}else if(state0_MF>init_state_AFpCF_mass){ /*devolatilization zone
*/
    state0_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state0_VF_mass = state0_MF - init_state_AFpCF_mass;
    state0_CF_mass = init_state_CF_mass;
}else if(state0_MF>init_state_AF_mass){ /* char combustion zone */
    state0_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state0_VF_mass = 0.;
    state0_CF_mass = state0_MF - init_state_AF_mass;
}else{ /* ash heating zone */
    state0_LF_mass = 0.; /* ANSYS 15.0 */
    state0_VF_mass = 0.;
    state0_CF_mass = 0.;
}

```

```

/*state_LF_T = (state_LF_mass)/(state_MF);*/
state_lmf = (state_LF_mass)/(state_MF);
state_vmf = (state_VF_mass)/(state_MF);
state_cmf = (state_CF_mass)/(state_MF);

```

```

state0_lmf = (state0_LF_mass)/(state0_MF);
state0_vmf = (state0_VF_mass)/(state0_MF);
state0_cmf = (state0_CF_mass)/(state0_MF);

```

[illegible]

```

p_prop.state_MF = state_MF;

p_prop.state_lmf = state_lmf;
p_prop.state_vmf = state_vmf;
p_prop.state_cmf = state_cmf;

p_prop.state0_lmf = state0_lmf;
p_prop.state0_vmf = state0_vmf;
p_prop.state0_cmf = state0_cmf;

p_prop.state0_temp = state0_temp;
p_prop.state_temp = state_temp;
p_prop.state0_mass = state0_mass;
p_prop.state_mass = state_mass;

p_prop.init_state_LF_mass = init_state_LF_mass;
p_prop.state0_LF_mass = state0_LF_mass;
p_prop.state_LF_mass = state_LF_mass;

p_prop.init_state_VF_mass = init_state_VF_mass;
p_prop.state0_VF_mass = state0_VF_mass;
p_prop.state_VF_mass = state_VF_mass;

p_prop.init_state_CF_mass = init_state_CF_mass;
p_prop.state0_CF_mass = state0_CF_mass;
p_prop.state_CF_mass = state_CF_mass;

p_prop.init_state_AF_mass = init_state_AF_mass;
p_prop.init_state_AFpCF_mass = init_state_AFpCF_mass;
p_prop.init_state_AFpCFpVF_mass = init_state_AFpCFpVF_mass;

p_prop.init_state_AmpCM = init_state_AmpCM;
p_prop.init_state_AmpCMpVM = init_state_AmpCMpVM;

p_prop.init_state_LM = init_state_LM;
p_prop.init_state_VM = init_state_VM;
p_prop.init_state_CM = init_state_CM;
p_prop.init_state_AM = init_state_AM;

p_prop.alpha = alpha;
p_prop.alpha_char = alpha_char;

p_prop.state0_LM = state0_LM;
p_prop.state0_VM = state0_VM;
p_prop.state0_CM = state0_CM;

p_prop.particular_step = particular_step;

p_prop.T_vap = T_vap;
p_prop.T_boil = T_boil;
p_prop.T_vol = T_vol;

return p_prop;
}

```

```

struct model_str dev_model(real A, real E, int model_index, real T,
real alpha, real time_step){

    real f, alpha_new;
    /* real g, h; */
    real R = 8.31447; /* [J . K^-1 . mol^-1] */
    real k = A*exp(-E/(R*T)); /* [s^-1] */

    /* preventing zero or imaginary part */
    if(alpha<0.001){

        alpha = 0.001;

    }else if(alpha>1.0){

        alpha = 1.0;

    }

    /* selecting reaction model */
    switch (model_index){
        case 1: /* 'P2' */
            f = 2.0*pow(alpha, 1./2.);
            break;
        case 2: /* 'P3' */
            f = 3.0*pow(alpha, 2./3.);
            break;
        case 3: /* 'P4' */
            f = 4.0*pow(alpha, 3./4.);
            break;
        case 4: /* 'A2' */
            f = 2.0*(1.0 - alpha)*pow(-log(1.0 - alpha), 1./2.);
            break;
        case 5: /* 'A3' */
            f = 3.0*(1.0 - alpha)*pow(-log(1.0 - alpha), 2./3.);
            break;
        case 6: /* 'A4' */
            f = 4.0*(1.0 - alpha)*pow(-log(1.0 - alpha), 3./4.);
            break;
        case 7: /* 'B1' */
            f = alpha*(1.0 - alpha);
            break;
        case 8: /* 'R2' */
            f = 2.0*pow(1.0 - alpha,1./2.);
            break;
        case 9: /* 'R3' */
            f = 3.0*pow(1.0 - alpha,2./3.);
            break;
        case 10: /* 'D1' */
            f = 1.0/(2.0*alpha);
            break;
        case 11: /* 'D2' */
            f = pow(-log(1.0 - alpha),-1.);
            break;
        case 12: /* 'D3' */
            f = (3.0*pow(1.0 - alpha,2./3.))/(2.0*(1.0 - pow(1.0 -
alpha,1./3.)));
            break;
        case 13: /* 'D4' */
            f = (3./2.)*((pow(1.0-alpha,-1./3.))-1.);
    }
}

```

```

        break;
        case 14: /* 'F0' */
            f = 1.0;
        break;
        case 15: /* 'F1' */
            f = 1.0 - alpha;
        break;
        case 16: /* 'F2' */
            f = pow(1.0 - alpha, 2.);
        break;
        case 17: /* 'F3' */
            f = pow(1.0 - alpha, 3.);
        break;
        default: /* default */
            f = 0.0;
        break;
    }

    alpha_new = alpha + k*f*time_step;

    if(alpha_new>0.999){
        alpha_new = 1.0;
    }

    z.f = f;
    z.k = k;
    z.alpha_new = alpha_new;

    return z;
}

int model(real alpha, real alpha_max[3]){

    int output = 0;

    if(alpha<=alpha_max[0]){
        output = 0;
    }else if(alpha<=alpha_max[1]){
        output = 1;
    }else{
        output = 2;
    }

    return output;
}

```

Apêndice E

BALANÇOS NO CASO BASE GERADOS PELO ANSYS FLUENT

E.1 BALANÇO DE MASSA GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE

Mass Flow Rate	(kg/s)
-----	-----
biomass_01	0
biomass_02	0
biomass_03	0
biomass_04	0
biomass_05	0
biomass_06	0
bottom_front	0
bottom_rear	0
front	0
inlet	33.643021
inner_bottom	0
inner_bottom-shadow	0
inner_porous	0
inner_porous-shadow	0
int_fluid_bottom	793.18744
int_fluid_top	-28197.131
int_grate_bottom	33.645874
int_grate_top	-33.83218
int_porous	-66.964729
left_bottom	0
left_porous	0
left_top	0
outlet	-104.70013
pneumatic_air_01	1.2929997
pneumatic_air_02	1.2930002

pneumatic_air_03	1.2930002
pneumatic_air_04	1.2930003
pneumatic_air_05	1.2930003
pneumatic_air_06	1.2930007
rear_porous	0
rear_top	0
right_bottom	0
right_porous	0
right_top	0
sa_lf_01	1.0510004
sa_lf_02	1.0509995
sa_lf_03	1.0510001
sa_lf_04	1.0510001
sa_lf_05	1.0510001
sa_lf_06	1.0510001
sa_lf_07	1.0510001
sa_lf_08	1.0509995
sa_lf_09	1.0509995
sa_lf_10	1.0509995
sa_lr_01	1.0510005
sa_lr_02	1.0510004
sa_lr_03	1.051
sa_lr_04	1.051
sa_lr_05	1.051
sa_lr_06	1.0509999
sa_lr_07	1.051
sa_lr_08	1.0510004
sa_lr_09	1.0510004
sa_lr_10	1.0510004
sa_rf_01	1.0510004
sa_rf_02	1.0509995
sa_rf_03	1.0510001
sa_rf_04	1.0510001
sa_rf_05	1.0510001
sa_rf_06	1.0510001
sa_rf_07	1.0510001
sa_rf_08	1.0509995
sa_rf_09	1.0509995
sa_rf_10	1.0509995
sa_rr_01	1.0510005
sa_rr_02	1.0510004
sa_rr_03	1.051
sa_rr_04	1.051
sa_rr_05	1.051
sa_rr_06	1.0509999
sa_rr_07	1.051
sa_rr_08	1.0510004
sa_rr_09	1.0510004
sa_rr_10	1.0510004
top	0
DPM Mass Source	21.259783

Net	0.00067996979

E.2 BALANÇO DE NITROGENIO GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE

Flow Rate Mass fraction of n2	(kg/s)
-----	-----
inlet	25.823368
sa_lf_01	0.80671608
sa_lf_10	0.80671591
sa_lr_01	0.80671632
sa_rf_01	0.80671608
sa_rr_01	0.80671626
sa_rr_10	0.80671632
sa_rf_02	0.80671591
sa_rf_03	0.80671602
sa_rf_04	0.80671602
sa_rf_05	0.80671602
sa_rf_06	0.80671602
sa_rf_07	0.80671602
sa_rf_08	0.80671591
sa_rf_09	0.80671591
sa_lr_10	0.80671632
sa_rf_10	0.80671591
sa_rr_02	0.80671632
sa_rr_03	0.80671626
sa_rr_04	0.80671626
sa_rr_05	0.80671626
sa_rr_06	0.80671626
sa_rr_07	0.80671626
sa_rr_08	0.80671632
sa_rr_09	0.80671632
sa_lf_02	0.80671591
sa_lf_03	0.80671602
sa_lf_04	0.80671602
sa_lf_05	0.80671602
sa_lf_06	0.80671602
sa_lf_07	0.80671602
sa_lf_08	0.80671591
sa_lf_09	0.80671591
sa_lr_02	0.80671632
sa_lr_03	0.80671626
sa_lr_04	0.80671626
sa_lr_05	0.80671626
sa_lr_06	0.80671626
sa_lr_07	0.80671626
sa_lr_08	0.80671632
sa_lr_09	0.80671632
pneumatic_air_01	0.99246782
pneumatic_air_02	0.99246818
pneumatic_air_03	0.99246818
pneumatic_air_04	0.9924683
pneumatic_air_05	0.992468
pneumatic_air_06	0.99246842
outlet	-63.280056
-----	-----
Net	0.76679629

E.3 BALANÇO DE ENERGIA GERADO NO ANSYS FLUENT PARA O CASO BASE

Total Heat Transfer Rate	(w)
-----	-----
biomass_01	1908.8438
biomass_02	5485.7559
biomass_03	4974.7847
biomass_04	7977.3735
biomass_05	6859.2178
biomass_06	-836.12659
bottom_front	-349230.81
bottom_rear	0
front	-5473872.5
inlet	8374648
inner_bottom	33101.129
inner_bottom-shadow	-33101.137
inner_porous	330.36292
inner_porous-shadow	-330.36298
int_grate_top	0
left_bottom	-74390.289
left_porous	0
left_top	-5582303
outlet	2.6620141e+08
pneumatic_air_01	327205.62
pneumatic_air_02	327187.78
pneumatic_air_03	327185.66
pneumatic_air_04	327191.5
pneumatic_air_05	327196.78
pneumatic_air_06	327143.91
rear_porous	0
rear_top	-5998821
right_bottom	-71089.734
right_porous	0
right_top	-5264315.5
sa_lf_01	355643.03
sa_lf_02	355653.62
sa_lf_03	355660.78
sa_lf_04	355672.09
sa_lf_05	355643.75
sa_lf_06	355674.28
sa_lf_07	355737.97
sa_lf_08	355462.47
sa_lf_09	355438.53
sa_lf_10	355500.66
sa_lr_01	355388.69
sa_lr_02	355393.94
sa_lr_03	355358.84
sa_lr_04	355225.75
sa_lr_05	355082.59

sa_lr_06	355037.91
sa_lr_07	355116.41
sa_lr_08	355688.31
sa_lr_09	355706.59
sa_lr_10	355694.88
sa_rf_01	355494.44
sa_rf_02	355421.44
sa_rf_03	355383.78
sa_rf_04	355410.78
sa_rf_05	355389.91
sa_rf_06	355357.75
sa_rf_07	355332.53
sa_rf_08	355715.53
sa_rf_09	355712.62
sa_rf_10	355691.53
sa_rr_01	355799.84
sa_rr_02	355741.94
sa_rr_03	355703.53
sa_rr_04	355720.69
sa_rr_05	355723.12
sa_rr_06	355752
sa_rr_07	355759.31
sa_rr_08	355500.34
sa_rr_09	355500.62
sa_rr_10	355553.16
top	-3480183.8
DPM Enthalpy Source	-2.42268e+08

Net	22224776

Apêndice F

REPORTES DE ENTRADAS DO ANSYS FLUENT

F.1 AJUSTES DO SOLVER

Fluent
 Version: 3d, pbns, spe, rke (3d, pressure-based, species, realizable
 k-epsilon)
 Release: 15.0.0
 Title:

Solver Settings

Equations

Equation	Solved
Flow	yes
Turbulence	yes
vol	yes
o2	yes
co2	yes
h2o	yes
co	yes
Energy	yes
Discrete Ordinates	yes

Numerics

Numeric	Enabled
Absolute Velocity Formulation	yes

Relaxation

Variable	Relaxation Factor
Density	1
Body Forces	1
Turbulent Kinetic Energy	0.8
Turbulent Dissipation Rate	0.8
Turbulent Viscosity	0.80000001
Species	0.95
Energy	0.95
Discrete Ordinates	1
Discrete Phase Sources	0.25

Linear Solver

		Solver	Termination	Residual
Reduction	Variable	Type	Criterion	Tolerance

	Flow	F-Cycle	0.1	
	Turbulent Kinetic Energy	Flexible	0.1	0.7
	Turbulent Dissipation Rate	Flexible	0.1	0.7
	vol	Flexible	0.1	0.7
	o2	Flexible	0.1	0.7
	co2	Flexible	0.1	0.7
	h2o	Flexible	0.1	0.7
	co	Flexible	0.1	0.7
	Energy	F-Cycle	0.1	
	Discrete Ordinates	Flexible	0.1	0.7

Pressure-Velocity Coupling

Parameter	Value
Type	Coupled
Pseudo Transient	no
Flow Courant Number	50
Explicit momentum under-relaxation	0.75
Explicit pressure under-relaxation	0.75

Discretization Scheme

Variable	Scheme
Pressure	PRESTO!
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	Second Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	Second Order Upwind
Species	Second Order Upwind
Energy	Second Order Upwind
Discrete Ordinates	Second Order Upwind

Solution Limits

Quantity	Limit
Minimum Absolute Pressure	1
Maximum Absolute Pressure	5e+10

Minimum Temperature	273
Maximum Temperature	3000
Minimum Turb. Kinetic Energy	1e-14
Minimum Turb. Dissipation Rate	1e-20
Maximum Turb. Viscosity Ratio	100000

F.2 RESUMO DE CONDIÇÕES DE CONTORNO NO CASO BASE (caso-00)

Fluent

Version: 3d, pbns, spe, rke (3d, pressure-based, species, realizable k-epsilon)

Release: 15.0.0

Title:

Boundary Conditions

Zones

name	id	type
outlet	106	outflow
int_grate_top	99	porous-jump
bottom_front	95	wall
bottom_rear	96	wall
front	97	wall
inlet	100	mass-flow-inlet
inner_bottom	101	wall
inner_porous	102	wall
left_bottom	103	wall
left_porous	104	wall
left_top	105	wall
rear_porous	108	wall
rear_top	109	wall
right_bottom	110	wall
right_porous	111	wall
right_top	112	wall
sa_lf_01	113	mass-flow-inlet
sa_lf_10	114	mass-flow-inlet
sa_lr_01	115	mass-flow-inlet
sa_rf_01	116	mass-flow-inlet
sa_rr_01	117	mass-flow-inlet
sa_rr_10	118	mass-flow-inlet
top	119	wall
sa_rf_02	120	mass-flow-inlet
sa_rf_03	121	mass-flow-inlet
sa_rf_04	122	mass-flow-inlet
sa_rf_05	123	mass-flow-inlet

sa_rf_06	124	mass-flow-inlet
sa_rf_07	125	mass-flow-inlet
sa_rf_08	126	mass-flow-inlet
sa_rf_09	127	mass-flow-inlet
sa_lr_10	128	mass-flow-inlet
sa_rf_10	129	mass-flow-inlet
sa_rr_02	130	mass-flow-inlet
sa_rr_03	131	mass-flow-inlet
sa_rr_04	132	mass-flow-inlet
sa_rr_05	133	mass-flow-inlet
sa_rr_06	134	mass-flow-inlet
sa_rr_07	135	mass-flow-inlet
sa_rr_08	136	mass-flow-inlet
sa_rr_09	137	mass-flow-inlet
sa_lf_02	138	mass-flow-inlet
sa_lf_03	139	mass-flow-inlet
sa_lf_04	140	mass-flow-inlet
sa_lf_05	141	mass-flow-inlet
sa_lf_06	142	mass-flow-inlet
sa_lf_07	143	mass-flow-inlet
sa_lf_08	144	mass-flow-inlet
sa_lf_09	145	mass-flow-inlet
sa_lr_02	146	mass-flow-inlet
sa_lr_03	147	mass-flow-inlet
sa_lr_04	148	mass-flow-inlet
sa_lr_05	149	mass-flow-inlet
sa_lr_06	150	mass-flow-inlet
sa_lr_07	151	mass-flow-inlet
sa_lr_08	152	mass-flow-inlet
sa_lr_09	153	mass-flow-inlet
pneumatic_air_01	154	mass-flow-inlet
pneumatic_air_02	155	mass-flow-inlet
pneumatic_air_03	156	mass-flow-inlet
pneumatic_air_04	157	mass-flow-inlet
pneumatic_air_05	158	mass-flow-inlet
pneumatic_air_06	159	mass-flow-inlet
inner_porous-shadow	3	wall
inner_bottom-shadow	2	wall

Setup Conditions

outlet (saída)

Condition	Value
Flow rate weighting	1
External Black Body Temperature Method	0
Black Body Temperature (k)	300
Internal Emissivity	1
Discrete Phase BC Type	4
Discrete Phase BC Function	none

int_grate_top (grelha)

Condition	Value
Face Permeability (m2)	1e+10
Porous Medium Thickness (m)	0
Pressure-Jump Coefficient (C2) (1/m)	0

Discrete Phase BC Type
Discrete Phase BC Function

4
grate_NEST::libudf_200

front (Paredes)

Value	Condition			

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

300	External	Radiation	Temperature	(k)
0	Wall	Roughness	Height	(m)
0.5	Wall	Roughness	Constant	
2	Discrete	Phase	BC	Type
	Normal			
	((polynomial angle 1))			
	Tangent			
	((polynomial angle 1))			
	Discrete	Phase	BC	Function
none	Impact	Angle		Function
	((polynomial angle 1))			
	Diameter			Function
	((polynomial 1.8e-09))			
	Velocity	Exponent		Function
	((polynomial 0))			
	Radiation	BC		Type
3				
1	X-Component	of	Radiation	Direction
0	Y-Component	of	Radiation	Direction
0	Z-Component	of	Radiation	Direction
0				
	Theta	Width	of	Beam (deg)
9.9923854e-07				
	Phi	Width	of	Beam (deg)
9.9923854e-07				
	(((constant . 0) (profile)))			
	(((constant . 0) (profile)))			
(1)				
	Apply	Direct	Irradiation	Parallel to the Beam?
yes				
	Use	Beam	Direction	from Solar Load Model Settings
no				
	Use	Direct	and Diffuse	Irradiation from Solar Load Model Settings
no				
	(0 0 0 0 0)			
	(((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)) ((constant . 0) (profile)))			
	Rotation		Speed	(rad/s)
0				
	X-Position	of	Rotation-Axis	Origin (m)
0				
	Y-Position	of	Rotation-Axis	Origin (m)
0				
	Z-Position	of	Rotation-Axis	Origin (m)
0				

0	X-Component	of	Rotation-Axis	Direction
0	Y-Component	of	Rotation-Axis	Direction
1	Z-Component	of	Rotation-Axis	Direction
0	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
1	Convective		Augmentation	Factor
no	Enable	Thermal		Stabilization?
0	Scale			Factor
1	Stabilization			Method

inlet (entrada de ar primário)

Condition	Value
-----	-----
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	33.643
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)	544.15
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 (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	3

```

Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)      1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)    1
Turbulent Intensity (%)                3.234
Turbulent Length Scale (m)            1
Hydraulic Diameter (m)                 2.506
Turbulent Viscosity Ratio              10
Specify Species in Mole Fractions?    no
((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0.23243) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
External Black Body Temperature Method 0
Black Body Temperature (k)             300
Internal Emissivity                    1
Discrete Phase BC Type                 4
Discrete Phase BC Function             none
is zone used in mixing-plane model?    no

```

sa_lf_01 (entradas de ar secundário)

Observe-se que sao 40 entradas de ar secundário e a orientação muda)

Condition	Value
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	1.051
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)	625.15
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Direction Specification Method	0
Coordinate System	0
X-Component of Flow Direction	0.429093
Y-Component of Flow Direction	0
Z-Component of Flow Direction	0.90326
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 (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	3.085
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.143
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

```

((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0.23243) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
External Black Body Temperature Method 0
Black Body Temperature (k) 300
Internal Emissivity 1
Discrete Phase BC Type 2
Discrete Phase BC Function none
is zone used in mixing-plane model? no

```

pneumatic_air_01 (entradas de ar pneumático)

Observe-se que são 6 entradas de ar pneumático e todas foram simuladas iguais á aqui descrita.

Condition	Value
Reference Frame	0
Mass Flow Specification Method	0
Mass Flow Rate (kg/s)	1.293
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)	544.15
Supersonic/Initial Gauge Pressure (pascal)	0
Direction Specification Method	0
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 (m)	0
Y-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Z-Coordinate of Axis Origin (m)	0
Turbulent Specification Method	3
Turbulent Kinetic Energy (m2/s2)	1
Turbulent Dissipation Rate (m2/s3)	1
Turbulent Intensity (%)	3.43
Turbulent Length Scale (m)	1
Hydraulic Diameter (m)	0.0397
Turbulent Viscosity Ratio	10
Specify Species in Mole Fractions?	no

```

(((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0.23243) (profile )) ((constant . 0)
(profile )) ((constant . 0) (profile )) ((constant . 0) (profile )))
External Black Body Temperature Method 0
Black Body Temperature (k) 300
Internal Emissivity 1
Discrete Phase BC Type 2
Discrete Phase BC Function none
is zone used in mixing-plane model? no

```