

UNIVERSIDADE FEDERAL DO ESPÍRITO SANTO

CENTRO TECNOLÓGICO

DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA

RODOLFO DE MERLO VENTUROT

WANDERSON ARAUJO FERNANDES

**MODELO DE LAGRANGE APLICADO À SIMULAÇÃO DA CONVERSÃO
TERMOQUÍMICA DE PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM UM GASEIFICADOR
DOWNDRAFT**

VITÓRIA

2015

RODOLFO DE MERLO VENTUROT

WANDERSON ARAUJO FERNANDES

**MODELO DE LAGRANGE APLICADO À SIMULAÇÃO DA CONVERSÃO
TERMOQUÍMICA DE PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM UM GASEIFICADOR
DOWNDRAFT**

Projeto de Graduação apresentado ao
Departamento de Engenharia Mecânica da
Universidade Federal do Espírito Santo,
como requisito parcial para obtenção do
título de Engenheiro Mecânico.

Orientador: Prof. Márcio Ferreira Martins,
Ph. D.

VITÓRIA

2015

RODOLFO DE MERLO VENTUROT

WANDERSON ARAUJO FERNANDES

**MODELO DE LAGRANGE APLICADO À SIMULAÇÃO DA CONVERSÃO
TERMOQUÍMICA DE PARTÍCULAS DE BIOMASSA EM UM GASEIFICADOR
DOWNDRAFT**

Projeto de Graduação apresentado ao Departamento de Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Espírito Santo, como requisito parcial para obtenção do título de Engenheiro Mecânico.

Aprovado em 07 de julho de 2015

COMISSÃO EXAMINADORA

Prof. Márcio Ferreira Martins, *Ph. D.*
Universidade Federal do Espírito Santo
Orientador

Prof. José Joaquim Conceição Soares Santos, *D. Sc.*
Universidade Federal do Espírito Santo
Examinador interno

Prof. João Vitor Ferreira Duque, *M. Sc.*
Instituto Federal do Espírito Santo
Examinador externo

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter nos dado força necessária para concluirmos este trabalho, e torna tudo isso possível.

Às nossas famílias, por todo apoio e incentivo que nos deram ao longo dessa jornada, em especial aos nossos pais por sempre torcerem e acreditarem na conquista deste trabalho. Sem o apoio de vocês nós nada seríamos.

Ao nosso orientador, Márcio Martins, por toda instrução e dedicação dada no desenvolvimento deste estudo, e por ser fundamental na nossa formação acadêmica.

Aos nossos amigos do CT III, pelo acolhimento, companheiros e prestatividade incondicional durante estes cinco anos de desafios e superações.

A todos os funcionários do CT III que colaboraram diretamente ou indiretamente para o desfecho deste trabalho.

Nosso muito obrigado!

RESUMO

A gaseificação de combustíveis sólidos é composta por processos químicos, térmicos e de escoamento de fluidos, que estão intimamente ligados tornando o estudo da gaseificação altamente complexo, de modo que os parâmetros envolvidos no processo não são claramente compreendidos. Para tanto, o presente trabalho apresenta uma aplicação de um modelo lagrangeano aplicado à conversão termoquímica de partículas de biomassa, dentro de um reator de leito fixo do tipo downdraft. São utilizadas injeções de partículas simulando a biomassa na parte superior do gaseificador, e elas são acompanhadas desde a sua injeção até a sua saída. A simulação foi realizada através do software ANSYS Fluent 15.0, e utilizou um modelo axissimétrico cuja malha é composta de elementos triangulares, modelo de turbulência $k - \varepsilon$ padrão e modelagem das reações químicas homogêneas e heterogêneas, além da utilização de recursos visando uma melhoria na convergência da solução. Os resultados apresentaram um perfil de temperaturas com uma mesma tendência que o obtido experimentalmente. Também foram observadas as zonas do gaseificador, que puderam ser caracterizadas pela simulação numérica, além da composição dos gases, que apresentou como gases principais os mesmos que foram obtidos no cálculo da concentração de gases com condições idealizadas.

Palavras-chave: lagrangeano, discrete phase model, downdraft gasifier, cfd

ABSTRACT

The gasification of solid fuels is composed by chemical and thermal processes and fluid flow. These factors are strictly connected, making the study of gasification highly complex, in a way that the parameters involved in the process are not fully comprehended. Therefore, the current work shows an application of the lagrangian model applied to the thermochemical conversion of biomass particles inside of a downdraft gasifier. Injections are used to simulate the biomass in the superior part of the gasifier, and they are followed from their injection until they escape the reactor. The simulation was made using the software ANSYS Fluent 15.0, and it was used an axisymmetric model with a mesh composed by triangular elements, standard $k - \varepsilon$ turbulence model and modelling of homogeneous and heterogeneous chemical reactions, besides the use of some resources aiming an improvement in the solution convergence. The results showed a temperature profile that has the same tendency of the one obtained experimentally. There were also observed the gasifier zones, that could be characterized by the numerical simulation, and the gas composition, that has shown as the main gases the same that were obtained in the calculations of the gas concentration with idealized conditions.

Keywords: lagrangean, discrete phase model, downdraft gasifier, cfd

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Zonas do gaseificador (Fonte: Prabir, 2013).....	16
Figura 2 - Gaseificador do tipo downdraft (Fonte: Prabir, 2013).....	20
Figura 3 - Energia de ativação nas reações endotérmicas e exotérmicas (Fonte: Chemistry World, 2011).....	23
Figura 4 - Representação gráfica da equação de Arrhenius (Fonte: Cinética química, 2015)	24
Figura 5 - Gaseificadores de leito fixo (Fonte: Belgiorno et al.,2003).....	25
Figura 6 –Dimensões, em milímetros, do gaseificador simulado (adaptado de Janajreh e Al Shrah, 2013)	30
Figura 7 - Malha utilizada para a obtenção dos resultados	31
Figura 8 - Condições de contorno da fase contínua.....	32
Figura 9 - Condições de contorno para a fase discreta.....	33
Figura 10 - Comparação entre os perfis de temperaturas localizados a 3 cm do eixo no resultado numérico e o resultado experimental de Janajreh e Al Shrah (2013), obtido no centro do gaseificador	45
Figura 11 - Evaporação das partículas injetadas de água em kg/s	47
Figura 12 - Fração mássica de voláteis na partícula de madeira	48
Figura 13 – Combustão da partícula, em kg/s.....	49
Figura 14 - Fração mássica de: (A) CO e (B) H ₂	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Condições de contorno da fase contínua	32
Tabela 2 - Condições de contorno da fase discreta	33
Tabela 3 - Porcentagem em massa da madeira (Fonte: Janajreh e Al Shrah, 2013)	34
Tabela 4 - Calor específico, poder calorífico e densidade da madeira (Fonte: Janajreh e Al Shrah, 2013)	34
Tabela 5 - Cinética das reações químicas (Fonte: Blasi, 2000)	35
Tabela 6 - Métodos de solução numérica	43
Tabela 7 - Under-Relaxation Factors utilizados na solução	44
Tabela 8 - Resíduos utilizados como critério de convergência.....	44
Tabela 9 - Frações mássica para a composição do gás na saída, em porcentagem, nas malhas fina e grossa e o resultado ideal (Janajreh e Shrah, 2013).....	51

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	11
1.1. Motivação	11
1.2. Objetivo	12
1.3. Objetivo específico	12
2. ESTADO DA ARTE	13
3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	16
3.1. Processo de gaseificação	16
3.1.1. Zona de desumidificação	17
3.1.2. Zona de pirólise	18
3.1.3. Zona de oxidação	19
3.1.4. Zona de redução	19
3.2. Reações químicas	20
3.3. Cinética química	22
3.3.1. Teoria das colisões	22
3.3.2. Equação de Arrhenius	23
3.4. Características do gaseificador de leito fixo	24
3.4.1. Configuração updraft	25
3.4.2. Configuração downdraft	26
4. METODOLOGIA	28
4.1. Configuração do modelo	28
4.1.1. Modelagem computacional	28
4.1.2. Modelo geométrico	30
4.1.3. Geração da malha	30
4.1.4. Condições de contorno	31
4.1.4.1. Fase contínua	31

4.1.4.2.	Fase discreta.....	32
4.1.5.	Propriedades da madeira	33
4.1.6.	Cinética das reações químicas	34
4.2.	Equações de conservação	35
4.2.1.	Equação da continuidade	35
4.2.2.	Equação de conservação do momento	35
4.2.3.	Equação da energia.....	36
4.2.4.	Modelo de turbulência	37
4.2.5.	Transporte de espécies	38
4.2.6.	Modelo de reações químicas.....	39
4.2.7.	Modelo da fase discreta (Discrete Phase Model)	40
4.3.	Métodos de solução	42
5.	RESULTADOS E DISCUSSÕES	45
6.	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	52
7.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54

1. INTRODUÇÃO

1.1. Motivação

Atualmente, a população mundial está crescendo, assim como o consumo de energia. Somos, porém, majoritariamente dependentes de uma fonte energética de reservas limitadas, que poluem severamente o meio ambiente, e assim, pesquisas estão sendo realizadas para viabilizar economicamente e energeticamente a utilização de outras fontes de energia, como a biomassa.

A produção de energia por meio da gaseificação da biomassa tem mais de 100 anos de existência, e está intimamente ligada com o desenvolvimento socioeconômico da humanidade. Porém, até hoje não é uma tecnologia consolidada, apresentando poucos avanços tecnológicos quando comparada com outras formas de obtenção de energia, como o petróleo.

No entanto, a mudança do patamar histórico, em que a varável climática se tornou relevante e os combustíveis fósseis, finalmente, reconhecidos como fontes de energia finita, despertou o interesse do setor energético, novamente, para o processo de gaseificação da biomassa, principalmente devido às suas características sustentáveis e ambientalmente corretas.

O produto final deste processo é um gás rico em hidrogênio e monóxido de carbono sob alta temperatura, denominado gás de síntese, que pode ser consumido em uma turbina a gás de um ciclo combinado de geração termoelétrica, ou pode ser empregado em motores de combustão interna, ou até mesmo na produção de compostos petroquímicos como a gasolina e o diesel.

Com o propósito de dominar esta tecnologia, os principais projetos de pesquisa do processo de gaseificação da biomassa estão direcionados no estudo dos diversos parâmetros físico-químicos atuantes no sistema, através de uma abordagem computacional, visando a redução dos inúmeros experimentos práticos necessários para que a tecnologia finalmente se consolide.

1.2. Objetivo

O principal objetivo deste trabalho é a análise computacional da gaseificação por meio da injeção de partículas de biomassa através de um referencial lagrangeano num reator de leito fixo do tipo downdraft, com o objetivo de entender com mais clareza os parâmetros envolvidos no processo. Ou seja, contribuir, ainda que em pequena escala, para que a tecnologia seja dominada e que o mundo se torne mais sustentável.

1.3. Objetivo específico

O estudo foi realizado com o objetivo de obter as concentrações químicas dos principais componentes do gás de síntese ao longo do gaseificador, assim como o perfil de temperatura, a fim de encontrar as características de cada zona do processo de gaseificação e comparar os resultados obtidos com os encontrados pela literatura adotada.

2. ESTADO DA ARTE

A análise desenvolvida foi baseada principalmente no trabalho de Janajreh e Al Shrah (2013), que realizaram um estudo experimental de um gaseificador do tipo downdraft e uma simulação numérica do mesmo no software ANSYS Fluent. Para simular o combustível injetado eles utilizaram um modelo de fases discretas, que analisa partículas num referencial lagrangeano, ou seja, a partícula é acompanhada desde a sua injeção na malha até a sua saída. Essas partículas reagem com a fase gasosa através do modelo de reações múltiplas de superfície, onde são definidas as reações que ocorrerão entre as fases sólida e gasosa. As reações entre as espécies químicas são regidas pelo modelo Finite-Rate/Eddy-Dissipation, onde é considerado o menor de dois valores para determinar a taxa de reação química: o primeiro é baseado na equação de Arrhenius, e o segundo considera a mistura turbulenta para determinar a reação. Para a simulação da pirólise, foi utilizado o modelo Single-Rate, onde são especificados valores baseados na equação de Arrhenius que determinam a taxa de liberação dos voláteis. A geometria é axissimétrica, o modelo de turbulência utilizado é o $k-\epsilon$ padrão, que apresenta robustez, economia e precisão razoável, sendo bastante utilizado na indústria. O método de solução de segunda ordem para todas as variáveis calculadas, o que gera uma maior precisão no resultado. Assume-se que o gaseificador funciona em regime permanente.

Luan et al. (2011) realizaram uma simulação no Fluent com as configurações numéricas semelhantes às de Janajreh e Al Shrah, porém numa geometria diferente, além de ser uma análise tridimensional. O mesmo modelo de fase discreta foi utilizado, junto com o modelo de turbulência $k-\epsilon$ padrão e as reações regidas pelo Finite-Rate/Eddy-Dissipation. Ao ocorrer a pirólise na simulação da fase discreta, a partícula libera uma espécie volátil que é decomposta posteriormente nos gases que compõem a fase gasosa. Para essa decomposição, Luan et al. consideraram que ocorreu apenas a taxa de reação do modelo Eddy-Dissipation, não utilizando valores para o modelo Finite-Rate. A pirólise, por sua vez, segue o modelo chamado two-competing-rates, onde são calculados dois valores de constante de velocidade baseados na equação de Arrhenius, e ambos são utilizados como fatores no cálculo da taxa de liberação de voláteis. São analisados então a partir destas considerações o perfil de

temperaturas, concentração das espécies químicas e perfil de velocidades dentro do gaseificador, por exemplo.

Muilenburg (2011) também utilizou o software Fluent para as simulações numéricas, porém não usou injeções. Enquanto existem alguns trabalhos que visam analisar todas as zonas do gaseificador, a autora decidiu realizar a simulação buscando focar na zona de combustão de um gaseificador downdraft. Para o modelo de turbulência, foi utilizado novamente o k- ϵ padrão, o que indica uma boa aceitação deste modelo para análises em gaseificadores. As equações de conservação de massa, momento e energia foram utilizadas, e os métodos de solução foram de primeira ordem. Para a obtenção de algumas características do combustível, Muilenburg utilizou um recurso do software chamado Coal Calculator, onde são inseridos os valores das análises imediata e elementar do combustível. Foi usada uma malha desenvolvida pelo software Gambit, com elementos retangulares, para uma geometria bidimensional de dimensões 1,2 por 0,6 metros. Para as condições de contorno, foram usadas vazões extremamente altas de combustível, levando-se em conta o tamanho da geometria utilizada, chegando até a 1 kg/s. Além disso, foi avaliada uma variação de porosidade do gaseificador com o Fluent, visando simular a influência da densidade das partículas em relação à temperatura e fração média de combustível no equipamento.

Bakar (2003) desenvolveu um trabalho sobre um gaseificador downdraft também utilizando o Fluent, através de uma análise simétrica e em regime permanente, com a malha de formato retangular sendo gerada pelo software Gambit. As reações químicas foram baseadas nas equações de Arrhenius, e equações de conservação de massa, momento, energia, e espécies foram utilizadas. O autor também utilizou valores para os Under-Relaxation Factors menores dos que são usualmente utilizados pelo software na atual versão. Esses são fatores cuja diminuição tende a aumentar a estabilidade da solução, apesar de implicar num maior tempo para convergência. A radiação não foi utilizada neste modelo, e os métodos de solução, assim como Muilenburg, foram os de primeira ordem, sendo que Bakar não obteve sucesso na utilização da segunda ordem. Ele analisou então os perfis de temperatura e pressão no gaseificador.

Okuga (2007) também realizou simulações numéricas para representar a operação de uma instalação. Contudo, ele utilizou no seu estudo o software Polymath,

onde procurou prever a composição dos gases gerados pela madeira. O projeto em um gaseificador updraft tinha o objetivo de tornar o reator operável para experimentos. Os testes foram realizados em uma vazão de ar de 70 L/min e 80 L/min, com uma taxa de combustível, que eram lascas de madeira, numa vazão de 2,25 kg/h e 4,5 kg/h, respectivamente.

Rashidi também desenvolveu um trabalho simulando um gaseificador utilizando o Fluent. Ele, por sua vez, optou por utilizar um modelo de turbulência k- ϵ realizável, que apresenta formulações diferentes do modelo padrão, além de utilizar como modelo de reações químicas o Eddy Dissipation Concept, que simula interações entre a química e a turbulência do problema com mecanismos químicos detalhados. Contudo, há um grande esforço computacional para a sua utilização. O modelo de fase discreta foi novamente utilizado aqui, além da consideração da radiação térmica dentro do gaseificador.

3. FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1. Processo de gaseificação

A gaseificação é um processo complexo, que pode ser definido como a conversão termoquímica de um material carbonáceo (carvão ou biomassa) em um produto gasoso combustível, que pode ser utilizado em diversas áreas da engenharia.

A composição final percentual da mistura gasosa é inerente a diversos parâmetros como o aspecto construtivo dos reatores e o modo pelo qual o ar e o combustível entram em contato, entretanto, devido à natureza das reações termoquímicas envolvidas no processo, o produto final das reações é composto por CO, H₂, CO₂, H₂O, outros hidrocarbonetos e diversos contaminantes. Se o combustível gasoso formado não apresentar óxidos de nitrogênio, ele é chamado de gás de síntese, e este pode ser usado na produção de combustíveis líquidos como a gasolina, amônia e o Diesel.

O processo de gaseificação compreende quatro etapas bem definidas de características distintas e importantes para o resultado do produto final. Estas fases ocorrem em zonas separadas dentro do reator, de forma sequencial e simultânea ao longo da trajetória do fluxo dos materiais reagente no gaseificador. Elas são chamadas de desumidificação, pirólise, oxidação e redução, conforme mostrado na figura 1.

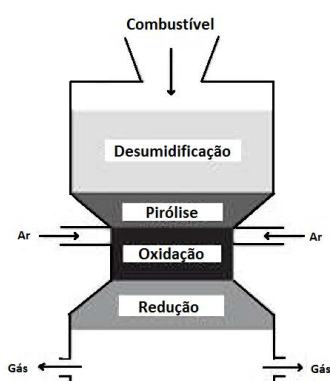


Figura 1 - Zonas do gaseificador (Fonte: Prabir, 2013)

De acordo com Okuga (2007), os principais parâmetros que afetam o processo de gaseificação da biomassa são o conteúdo energético do combustível, o seu teor de umidade, o tamanho das partículas e a temperatura do reator.

Combustíveis com alto teor de energia proporcionam uma combustão mais fácil de sustentar as reações endotérmicas, pois ele queima em temperaturas mais elevadas. Segundo Okuga (2007), lascas de madeira tem um teor de energia em torno de 20 MJ/kg, sendo fácil para gaseificar.

Quanto ao teor de umidade, sendo a água um componente não combustível na biomassa, é importante que o seu teor seja reduzido ao mínimo. Para tanto, toda água deve ser vaporizada na zona de desumidificação, antes da queima. Caso contrário, haverá dificuldade em sustentar a combustão, pois o calor liberado será utilizado para evaporar a água. Portanto, biomassa com alto teor de umidade deve ser secada antes de ser colocadas no reator. Conforme Okuga (2007), um valor de 10% de umidade é ideal para o processo de gaseificação, entretanto gaseificadores updraft são capazes de operar com combustíveis com até 50 % de umidade.

O tamanho da partícula, por sua vez, afeta a eficiência das reações de pirólise, e consequentemente a eficiência de conversão total. As partículas grandes necessitam de zonas de gaseificação maiores para atingir o resultado adequado. O tamanho de partícula máximo recomendado para ser usado em um gaseificador downdraft é um oitavo do diâmetro da garganta do reator.

Já a temperatura do reator deve ter valor adequado para garantir que o carbono seja transformado por completo e não se acumule nas cinzas, o que constitui uma perda de energia para o sistema. Além disso, a temperatura tem efeito considerável sobre a concentração dos compostos combustíveis no gás produzido no processo de transformação termoquímica, de acordo com o princípio de Le Châtelier. Assim, o reator deve ser isolado adequadamente, para que as perdas de calor sejam reduzidas.

3.1.1. Zona de desumidificação

A zona de desumidificação, também conhecida como zona de secagem, é a região do gaseificador onde a umidade é removida do material carbonáceo pelos gases quentes que fluem ascendentemente, resultantes das reações termoquímicas das zonas inferiores. A secagem ocorre à pressão atmosférica e a temperatura na faixa de 70 – 200°C (Souza Santos, 2004); logo a temperatura é suficientemente baixa

para evitar a decomposição do material, contudo suficientemente elevada para eliminar sua umidade na forma de vapor.

Aparentemente a secagem de uma partícula sólida é um processo simples, entretanto é um evento bastante complexo no qual envolve as fases líquida, sólida e gasosa. A umidade retirada dos resíduos é repassada para os gases, o que influencia no poder calorífico e na eficiência térmica global do gaseificador, portanto a gaseificação de uma biomassa muito úmida gera um gás de baixa qualidade e diversos problemas operacionais como produção de muita fumaça (Rodrigues, 2009; Ponte Filho, 1988).

A velocidade de secagem é outra variável muito importante nessa região, pois ela indica a eficiência da desumidificação (Cardoso, 2013). Ela é função de diversos fatores como a umidade e a área superficial da matéria-prima (biomassa ou carvão). Nos sólidos, as reações começam na superfície para depois alcançarem seu interior, portanto quanto maior a superfície de contato dos reagentes, maior o número de moléculas reagindo, logo, diminui-se o tempo de secagem e aumenta a velocidade da reação. Portanto, o combustível sólido deve ser colocado nos gaseificadores com geometria adequada para otimização do processo.

3.1.2. Zona de pirólise

O processo de pirólise, também conhecido como desvolatilização, é composto por reações endotérmicas, que provocam a degradação termoquímica da matéria, num ambiente com ausência total de oxidante. Para tanto, a zona de pirólise é situada acima das zonas de oxidação e redução que fornecem a energia de ativação necessária às reações, que começam a ocorrer em torno de 200°C (Martin et al., 2010). Na zona de pirólise ocorre a degradação térmica irreversível da matéria-prima que desce da zona de desumidificação.

A pirólise, em geral, é um processo bastante complexo. Primeiramente o calor é transferido para a partícula por condução, convecção e irradiação. O calor absorvido pelo material provoca o aumento da temperatura média da partícula acarretando no começo das reações principais. A energia trocada pelas reações termoquímicas e mudanças de fases geram um gradiente de temperatura não linear em função do

tempo. Além disso, produtos voláteis saem através dos poros da partícula promovendo transferência de calor e massa. Portanto, o controle dos parâmetros para a otimização do processo nesta região é bastante difícil (Rodrigues, 2009).

Os produtos das reações de pirólise são substâncias nas fases sólida e gasosa. A parte sólida consiste principalmente de cinzas e carbono, que pode ser utilizado depois como combustível. A fração gasosa é composta pelos chamados gases leves, compreendendo CO_2 , CO , CH_4 e quantidades menores de H_2 e outros hidrocarbonetos. A eficiência das reações da zona de pirólise é inerente a diversas condições de operação do processo. De tal modo que o tempo de residência, a granulometria do combustível e, em especial, a temperatura média da região interferem na qualidade e quantidade dos produtos gerados na região (Rodrigues, 2009).

3.1.3. Zona de oxidação

A zona de oxidação, também conhecida como zona de combustão, é determinada pela posição de injeção do agente gaseificante. Quando o combustível sólido alcança essa região do gaseificador, ele está praticamente transformado em coque e numa mistura gasosa, produtos das reações de pirólise. Portanto é difícil afirmar o que realmente é queimado nessa zona, entretanto é possível assegurar que os produtos produzidos na zona de pirólise são parcialmente oxidados, resultando em rápido aumento de temperatura devido às reações altamente exotérmicas, produzindo principalmente CO_2 e H_2O (Ghosh et al., 2004).

A temperatura da zona de oxidação varia entre 700°C a 2000°C , e o calor produzido nesta região abastece todas as outras zonas. Geralmente, as reações que acontecem nesta fase são simplificadas considerando-se apenas as reações de combustão total e parcial do carbono.

3.1.4. Zona de redução

A zona de redução, também conhecida como zona de gaseificação, é a região onde ocorre as reações endotérmicas em uma faixa de temperatura compreendida

entre 800 a 1100°C. Nesta fase ocorre a gaseificação do coque, com a formação de monóxido de carbono e hidrogênio (Cemig, 1986). Os gases aquecidos provenientes da zona de oxidação alcançam a região de redução, onde há deficiência de oxigênio, pois o mesmo foi totalmente consumido na zona anterior.

O ambiente pobre em oxigênio e rico em carbono sólido favorece a reação de Bourdoard e a reação entre o monóxido de carbono e a água, chamada de água-vapor.

3.2. Reações químicas

O processo de gaseificação é composto por diferentes reações termoquímicas, heterogêneas e homogêneas, ao longo do reator. A ordem que as reações acontecem depende do tipo de combustível usado e da forma construtiva do reator. Para exemplificar como as reações podem acontecer dentro do gaseificador, o gaseificador de leito fixo do tipo downdraft é adotado como exemplo (figura 2).

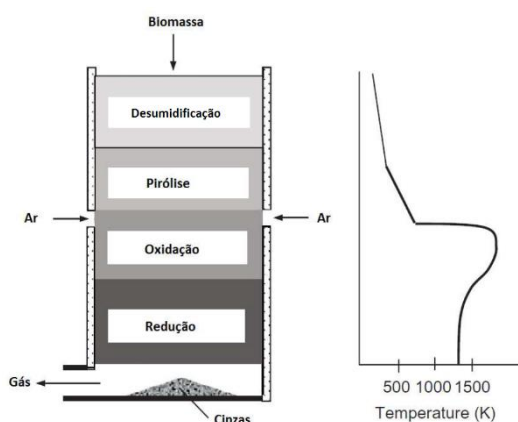
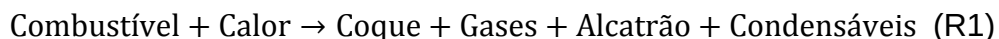


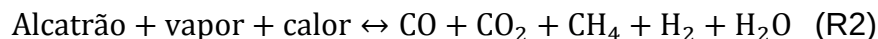
Figura 2 - Gaseificador do tipo downdraft (Fonte: Prabir, 2013)

A matéria-prima é inserida pelo topo do gaseificador, alcançando a zona de desumidificação, onde a umidade é removida da biomassa pelos gases quentes presentes no ambiente, resultando no fluxo descendente de vapor d'água e biomassa seca para a zona de pirólise.

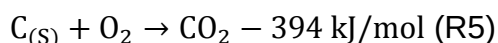
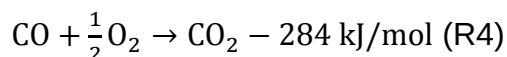
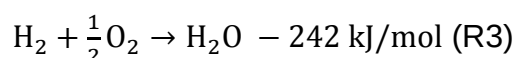
Na zona de pirólise, a temperatura mais elevada dos gases do ambiente disponibiliza a energia necessária para a degradação termoquímica da biomassa, de acordo com a reação endotérmica (R1), em gases condensáveis e não condensáveis, alcatrão e coque. (Melo, 2008)



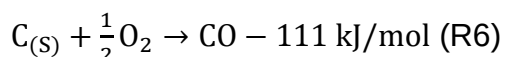
Segundo Luz Alves (2010), o alcatrão formado pela decomposição do combustível absorve parte do calor presente nos gases ascendentes e sofre craqueamento como mostra a reação (R2).



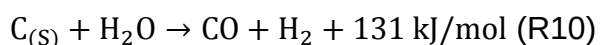
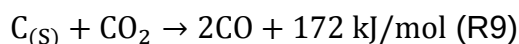
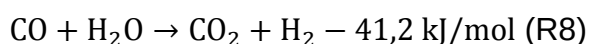
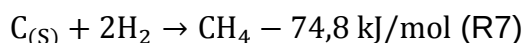
De acordo com Prabir (2013), os produtos das reações de pirólise seguem em direção à zona de oxidação, onde encontram o agente gaseificante, e sucedem diversas reações termoquímicas, como mostradas em R3, R4 e R5.



A reação de combustão do carbono sólido, proveniente do coque, é muito rápida e consome a maior parte do oxigênio do ar, tornando a região perto da fronteira entre a zona de redução e oxidação limitada em oxigênio, favorecendo reações de combustão parcial do carbono (R6), formando monóxido de carbono e liberando quantidade moderada de calor (Prabir, 2013).



A mistura de gás quente composta principalmente por CO, CO₂ e vapor d'água, juntamente com a matéria carbonácea sólida remanescente, seguem em direção à zona de redução. Nesta região do reator, o ambiente é pobre em oxigênio e rico em matéria carbonácea, a chegada dos gases quentes proporciona as condições necessárias para o desencadeamento de diversas reações químicas, como mostradas em R7, R8, R9 e R10.



A reação de Bourdoard (R9) e a reação (R10) são as principais reações que ocorrem nesta região, gerando produtos como o hidrogênio e o monóxido de carbono. A natureza endotérmica dessas duas reações reduz a temperatura neste estágio do reator (Prabir, 2013).

Dentro de um gaseificador ocorrem outras reações termoquímicas. As reações mostradas exemplificam um conjunto complexo que compõe o processo de gaseificação, entretanto elas são capazes de descrever eficientemente a formação gasosa do processo de gaseificação (Cenbio, 2002).

3.3. Cinética química

3.3.1. Teoria das colisões

Segundo a teoria cinética dos gases, as moléculas de um gás colidem frequentemente umas com as outras, portanto é admitido que as reações químicas ocorrem como consequência das colisões entre as moléculas dos reagentes. Assim, é esperado que a velocidade de reação seja diretamente proporcional à frequência das colisões moleculares (Chang, 2006).

Embora, a teoria das colisões seja de fácil entendimento, a relação entre a velocidade de reação e a frequência de colisões é bem complexa, pois nem todas as colisões conduzem a formação de produtos. Na prática, a velocidade de reação é função de vários parâmetros, de modo que apenas a ocorrência de colisões não garante que a reação ocorra.

De acordo com Chang (2006), a reação ocorre somente se a energia cinética total das moléculas for maior ou igual a energia de ativação (E_a) da reação. A energia de ativação é a energia mínima necessária para que se inicie dada reação química. Se a energia total envolvida no processo de colisão não for suficiente, as moléculas se mantêm intactas e a colisão não produz nenhuma transformação.

A reação química libera calor se os produtos forem mais estáveis que os reagentes e, nesse caso, a reação é exotérmica. Caso contrário, se os produtos forem menos estáveis que os reagentes, o sistema absorve energia do ambiente e a reação é endotérmica. A figura 3 mostra qualitativamente a variação da energia potencial à medida que os reagentes são convertidos em produtos, para uma reação endotérmica

e exotérmica, e demonstra a barreira imposta pela a energia de ativação para o começo da reação.

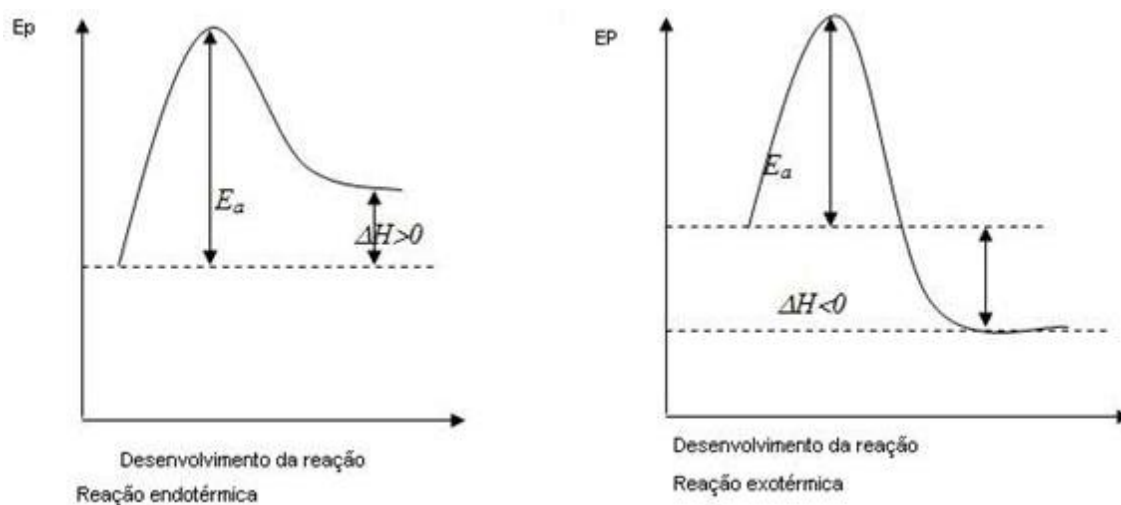


Figura 3 - Energia de ativação nas reações endotérmicas e exotérmicas (Fonte: Chemistry World, 2011)

3.3.2. Equação de Arrhenius

A dependência da constante de velocidade de uma reação em relação à temperatura pode ser expressa pela equação 3.1, conhecida como equação de Arrhenius, em que E_a é a energia de ativação (em kJ/mol), R é a constante dos gases e T é a temperatura absoluta.

$$k = Ae^{\frac{-E_a}{RT}} \quad (3.1)$$

Segundo Chang (2006), a variável A , denominada fator de frequência ou fator pré-exponencial, representa a frequência das colisões e pode ser considerada constante em um amplo intervalo de temperatura. Segundo a equação 3.1, a constante de velocidade é diretamente proporcional ao aumento da temperatura e da frequência de colisões, e obviamente inversamente proporcional a energia de ativação da reação. A equação de Arrhenius, usualmente é escrita conforme a equação 3.2.

$$\ln k = \left(-\frac{E_a}{R}\right)\left(\frac{1}{T}\right) + \ln A \quad (3.2)$$

Desta maneira, a expressão pode ser representada graficamente como uma reta, como mostrado pela figura 4.

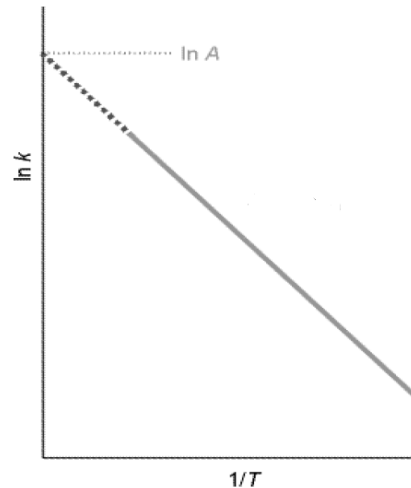


Figura 4 - Representação gráfica da equação de Arrhenius (Fonte: Cinética química, 2015)

Utilizando a equação de Arrhenius e medidas de k em diferentes temperaturas, é possível determinar a energia de ativação de uma reação.

3.4. Características do gaseificador de leito fixo

A gaseificação de leito fixo, também conhecida como gaseificação em leito móvel descendente devido ao fato de que em operação contínua, na medida em que o combustível é alimentado e as cinzas retiradas, o leito move do topo para o fundo do reator (Reddy et al., 1995). Dentre os reatores de leito fixo se destacam os gaseificadores de formato vertical, pois a gaseificação ocorre em camadas de leito, de maneira que diferentes zonas de reações estão presentes: secagem, pirólise, oxidação e redução.

Os reatores de leito fixo são relativamente mais fáceis de projetar e operar (Lucas et al., 2004). Em relação às outras configurações de gaseificadores, eles apresentam maior eficiência trabalhando com combustíveis de alta densidade e granulometria grosseira. Estes reatores são subdivididos de acordo com a direção do fluxo do gás gerado, de modo que a operação pode ser classificada como gaseificação updraft ou downdraft, se o fluxo de gás gerado for ascendente e descendente, respectivamente. Os gaseificadores de leito fixo podem ser vistos na figura 5.

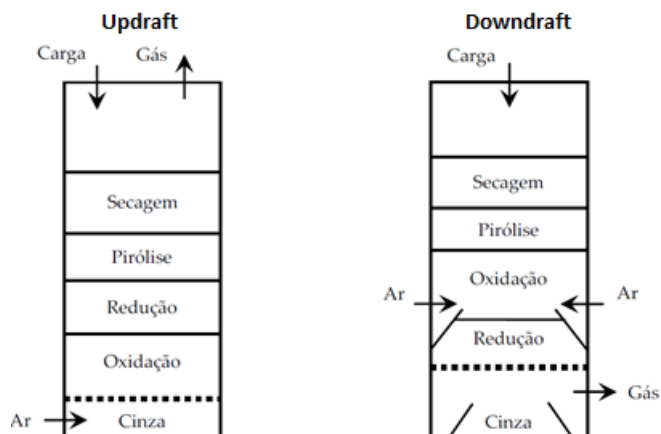


Figura 5 - Gaseificadores de leito fixo (Fonte: Belgiorno et al.,2003)

3.4.1. Configuração updraft

Os gaseificadores updraft são usados para a gaseificação do carvão há mais de 150 anos, e há dezenas em operação em todo mundo. Durante a operação o combustível sólido é alimentado pelo topo enquanto o ar e o vapor d'água são alimentados através de uma grelha, que muitas vezes está coberta por cinzas. A grelha fica na base do gaseificador. A temperatura da grelha deve ser controlada e limitada pela adição de vapor ou gás de escape, para evitar danos ao equipamento (Reed et al, 1989).

Na configuração updraft, os gases gerados são direcionados para saída do reator que fica localizada na parte de cima. Consequentemente, o alcatrão formado na zona de pirólise é carregado pelas correntes de gases quentes resultando em um produto gasoso com alto teor do mesmo. Segundo Desrosiers (1982), 5% a 20% do alcatrão e óleo são produzidos a temperaturas muito baixas para craqueamento, portanto são arrastados pelo fluxo ascendente do gás.

Segundo Reed et al (1989), esse tipo de configuração é adequado para gaseificação de biomassa com alto teor de cinza (até 25%) e alta umidade (até 60%). Ela apresenta eficiência considerável na gaseificação de combustíveis com baixo volátil como o carvão, além disso são capazes de lidar com matéria-prima composta por alto teor inorgânico (resíduos urbanos), e apresentam queda de pressão relativamente baixa e pouca tendência para formação de escória. A principal vantagem desta configuração é a elevada troca de calor interna entre os gases

formados e a carga inserida no reator, fazendo com que a temperatura de saída dos gases seja relativamente baixa.

Segundo Brammer e Bridgwater (2002), as desvantagens dos gaseificadores updraft estão relacionadas com o alto teor de alcatrão presente no gás de síntese (10 – 20%), exigindo a limpeza do gás antes da aplicação em motores e turbinas. Por isso, essa configuração é usualmente utilizada na produção de energia térmica.

3.4.2. Configuração downdraft

Na configuração downdraft, a biomassa é colocada pelo topo, enquanto o agente gaseificante é introduzido através de um conjunto de injetores pelas laterais a certa altura abaixo do topo do reator, e o gás de síntese é retirado na parte de baixo, por conseguinte a zona de oxidação fica acima da zona de redução. Tal configuração obriga o fluxo da biomassa e do agente gaseificante apresentarem o mesmo sentido como mostra a figura 5.

De acordo com Reddy et al. (1995), a diferença mais importante é que os produtos da pirólise, no gaseificador downdraft, apresentam fluxo totalmente descendente. Assim, o alcatrão que não sofreu o craqueamento adequado na zona de pirólise encontra as condições térmicas apropriadas para se decompor na zona de oxidação, por causas das altas temperaturas. Além disso, o vapor liberado da biomassa atravessa as zonas do reator atuando nas reações do processo, tais fatores produzem um gás de síntese sob alta temperatura.

Segundo Wander (2001), nesta configuração os voláteis passam necessariamente pela zona de redução e oxidação, sendo transformados em compostos de menor peso molecular, eliminando até 99% do alcatrão e condensáveis, o que significa menos limpeza antes da sua utilização em motores de combustão interna. Logo, o gás produzido pode ser empregado por meio de uma filtragem mínima.

Além disso, conforme Prabir (2013), a configuração downdraft oferece um tempo mais curto para inflamar e trazer a planta até à temperatura de trabalho em comparação com o tempo exigido pela updraft. Entretanto esse tipo de gaseificador é inadequado para combustíveis com elevado teor de cinzas devido a intensa formação

de escória, e ainda apresenta dificuldade em lidar com matéria prima de baixa densidade.

4. METODOLOGIA

4.1. Configuração do modelo

O software utilizado na realização deste trabalho foi o ANSYS Fluent (ANSYS, 2013). Ele fornece os recursos necessários para a modelagem de diversos tipos de escoamentos, transferência de calor e reações químicas em geometrias complexas. O ANSYS Fluent proporciona elevada flexibilidade na obtenção da malha para diversos tipos de geometria, e a capacidade de refiná-las em determinadas regiões com base na solução desejada.

Para a análise de escoamentos multifásicos, o software apresenta diversas modelagens, como os chamados Volume de Fluido, Mistura e Euleriano. Contudo, a ferramenta usada neste trabalho foi o Modelo de Fase Discreta, no qual o Fluent, além de resolver equações de transporte para a fase contínua, permite simular uma segunda fase discreta dentro de um referencial lagrangeano. Esta segunda fase consiste em partículas, representando o combustível, dispersas na fase contínua.

4.1.1. Modelagem computacional

O gaseificador apresenta em seu interior uma mistura de fase gasosa e fase sólida, o que caracteriza o escoamento que lá ocorre como multifásico. A abordagem utilizada nesta análise, baseada nos estudos de Janajreh e Al Shrah (2013), busca simular esta característica do escoamento através da utilização de uma fase contínua, representando o fluido escoando no gaseificador, e uma fase discreta, que são partículas injetadas na malha de forma a representar a fase sólida do combustível, que é a madeira. O software utilizado para a simulação foi o ANSYS Fluent 15.0.

A fase contínua é analisada através de um referencial euleriano, onde são calculadas as propriedades de um escoamento num determinado ponto no espaço como uma função do tempo. Ou seja, as propriedades do campo de escoamento são funções das coordenadas espaciais e do tempo (Fox et al, 2010). É através da fase contínua que são calculadas as propriedades do gás, como a concentração das espécies químicas, a sua temperatura, velocidade e pressão, por exemplo.

Já a fase discreta, que é representada por partículas que são injetadas na malha, é analisada através de um referencial lagrangeano. Ou seja, a descrição desta fase é dada através do acompanhamento da partícula, desde a sua injeção na malha até a sua eventual saída, e não por determinado ponto no espaço como no referencial euleriano.

A análise das duas fases se dá de forma alternada. É analisada primeiramente a fase contínua, que é calculada sem a interferência das partículas. Após um determinado número de iterações, a fase discreta é injetada e as iterações da fase contínua são interrompidas. A partir daí, será calculada toda a trajetória das partículas, desde a sua injeção, no topo do gaseificador, até a sua saída na parte inferior. Durante a trajetória, a partícula interage com a fase contínua, de forma a simular as reações de gaseificação que lá ocorrem. Ao chegar ao fim de sua análise, ou porque a partícula chegou a sua condição de saída, ou porque a partícula foi evaporada, no caso de partículas de água, a análise da fase discreta é finalizada por aquele momento, e então a análise da fase contínua é retomada.

A fase contínua, agora afetada pela fase discreta, novamente é calculada, até que após um determinado número de iterações as partículas sejam novamente injetadas. O processo se repete inúmeras vezes, de maneira que após diversas iterações, a injeção das partículas não cause mais alterações significativas na fase contínua. Neste momento, considera-se que o software obteve a solução numérica do problema.

Para o modelo computacional, portanto, assume-se as seguintes hipóteses:

- Pode-se considerar uma solução em regime permanente;
- O problema pode ser modelado como axissimétrico, para redução do esforço computacional;
- As partículas podem ser modeladas com um tamanho muito menor do que o tamanho das partículas reais, devido a limitações do modelo computacional utilizado;
- Não há troca de calor entre o gaseificador e o meio externo;
- As trocas de calor por radiação podem ser desprezadas dentro do gaseificador.

4.1.2. Modelo geométrico

A geometria utilizada na análise é uma adaptação da apresentada por Janajreh e Al Shrah (2013), que se basearam nas dimensões de um gaseificador da empresa Gekgasifier Inc. A geometria utilizada neste trabalho é, então, mostrada na figura 6 apenas no seu perfil, visto que o problema foi modelado como sendo axissimétrico. As dimensões estão indicadas em milímetros.

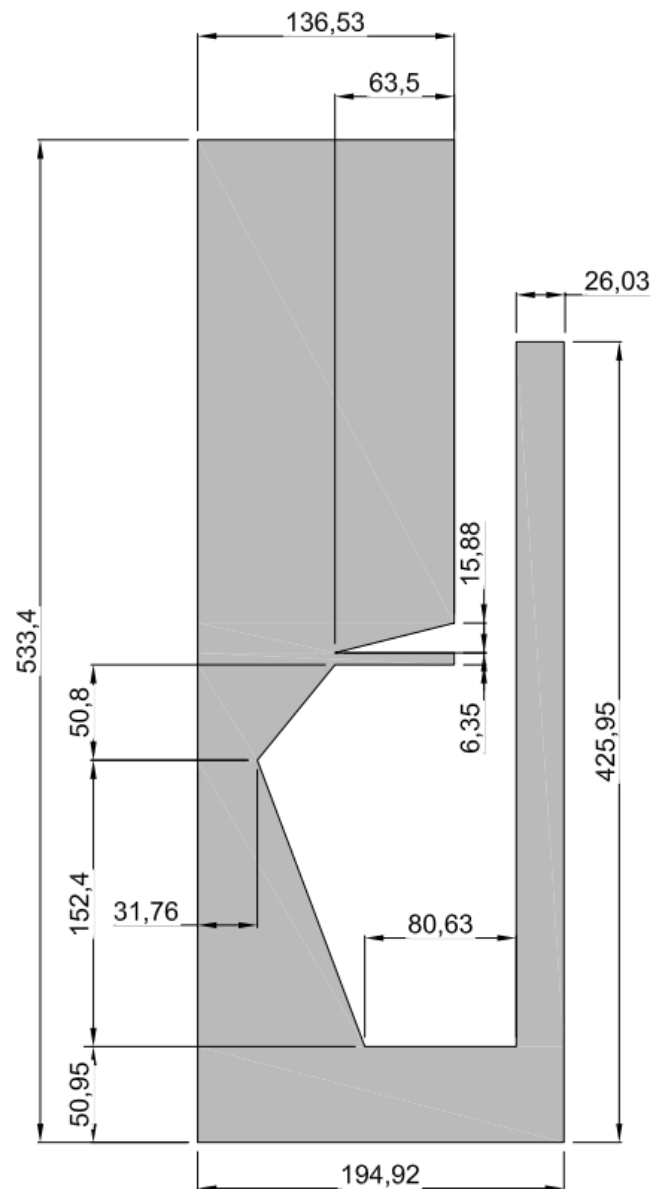


Figura 6 –Dimensões, em milímetros, do gaseificador simulado (adaptado de Janajreh e Al Shrah, 2013)

4.1.3. Geração da malha

A malha foi gerada pelo software Meshing, dentro do pacote ANSYS. Foram geradas duas malhas (uma para checar a independência do resultado), sendo que a

que foi utilizada para a obtenção dos resultados possui 6453 nós gerando 12159 elementos. A malha, mostrada na figura 7, foi refinada na região da entrada do ar, pois é uma região crítica da geometria devido às dimensões reduzidas, e são necessários mais elementos para caracterizar as propriedades destes locais com maior precisão.

Foi escolhido o tipo de malha triangular, o que significa que toda ela é composta por elementos com este formato. Isso ocorreu devido a maior simplicidade na geração de uma malha deste tipo. Além disso, nesta etapa da simulação, foram obtidos melhores valores na qualidade dos elementos, conforme indicado pelo software Meshing. A qualidade do elemento é calculada pela razão entre a área do elemento pela soma dos quadrados das suas arestas. Quanto mais próximo este valor está de 1, melhor a malha, sendo o valor médio atingido pela malha utilizada igual a 0,98.

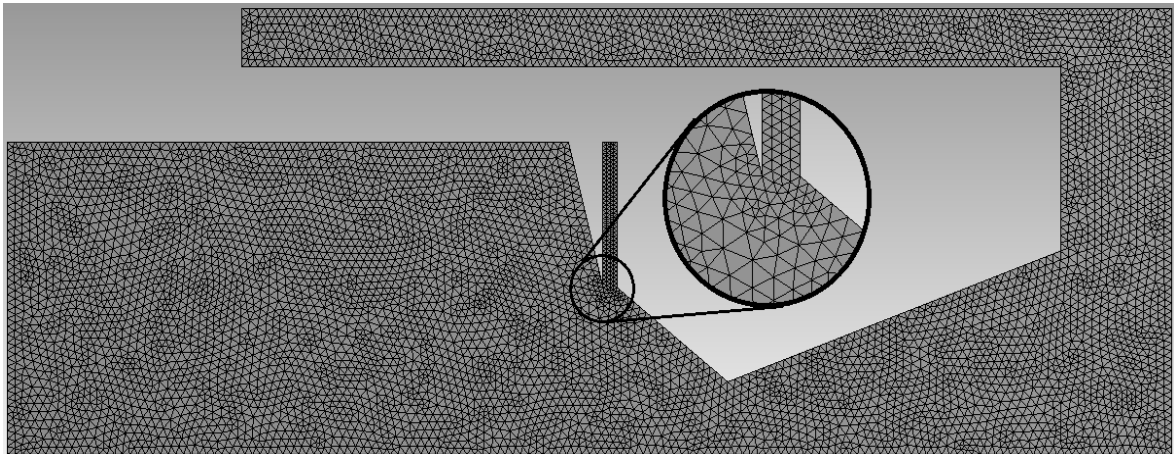


Figura 7 - Malha utilizada para a obtenção dos resultados

4.1.4. Condições de contorno

As condições de contorno foram divididas entre aquelas que se referem à fase contínua do problema e as que se referem à fase discreta, visto que cada uma delas tem um comportamento diferente em determinados contornos. A implementação das condições de contorno no software também demanda que se faça a especificação de contorno para cada fase.

4.1.4.1. Fase contínua

As condições de contorno para a fase contínua são mostradas na figura 8. A linha central é identificada como eixo, devido à característica axissimétrica do

problema. A pequena região identificada na lateral do gaseificador é a entrada de ar através de uma velocidade constante, e a linha superior da região externa do gaseificador é determinada como a saída de pressão. As linhas não identificadas representam as condições de contorno de parede do gaseificador.

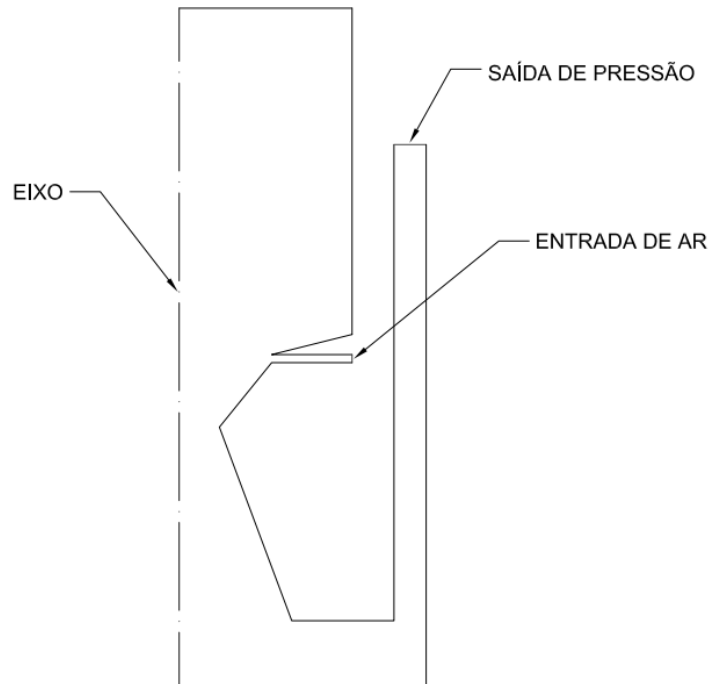


Figura 8 - Condições de contorno da fase contínua

Os valores utilizados como condição de contorno da fase contínua podem ser vistos na tabela 1.

Tabela 1 - Condições de contorno da fase contínua

Condições de Contorno	Valor	Fonte
Temperatura de entrada	167 °C	Janajreh e Al Shrah (2013)
Intensidade turbulenta	10%	
Pressão na saída	-100 Pa	
Velocidade de entrada	0,54 m/s	
Composição do ar	21% O ₂ , 79% N ₂	

4.1.4.2. Fase discreta

As condições de contorno para a fase discreta (figura 9) são caracterizadas, além do eixo na região central, pela injeção das partículas na parte superior do gaseificador, e pela saída das partículas, tanto na parte inferior, quanto na parte externa superior. As linhas não identificadas representam os locais onde a partícula reflete ao se chocar.

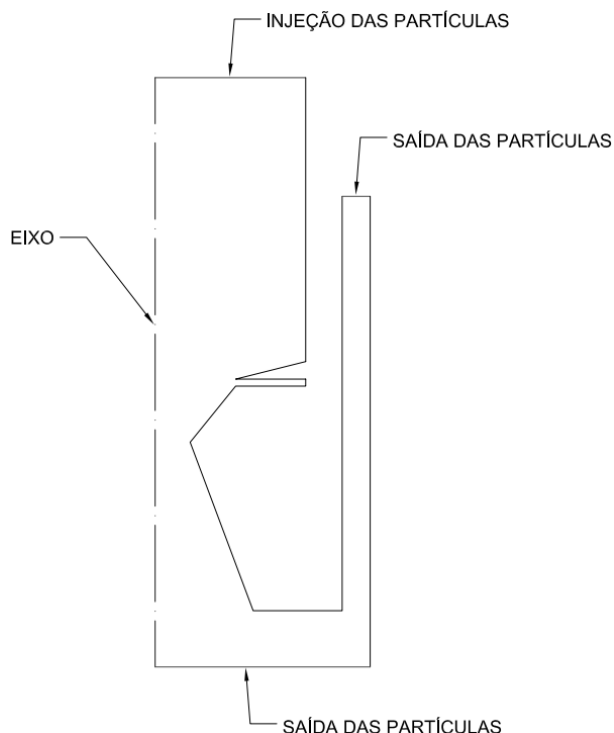


Figura 9 - Condições de contorno para a fase discreta

Além da injeção da madeira, foi simulado a injeção de uma pequena quantidade de água, representando a umidade da madeira que abastece o gaseificador. Foi estimado um valor de 10% da vazão mássica da madeira, a partir dos experimentos de Janajreh e Al Shrah (2013). Os valores utilizados para as condições de contorno da fase discreta são mostrados na tabela 2.

Tabela 2 - Condições de contorno da fase discreta

Condições de Contorno	Valor	Fonte
Temperatura de entrada das partículas	50°C	Janajreh e Al Shrah (2013)
Diâmetro das partículas	0,1 mm	
Vazão mássica da madeira	0,00188 kg/s	Okuga (2007)
Vazão mássica da água	0,000188 kg/s	
Velocidade das partículas	0,001 m/s	

4.1.5. Propriedades da madeira

As propriedades da madeira, que são representadas pelas partículas injetadas no gaseificador, foram obtidas dos estudos de Janajreh e Al Shrah (2013). Algumas propriedades da partícula são previstas pelo Fluent a partir das porcentagens em massa da madeira, obtidas experimentalmente (tabela 3). Os valores de calor específico, poder calorífico superior e densidade são mostrados na tabela 4.

Tabela 3 - Porcentagem em massa da madeira (Fonte: Janajreh e Al Shrah, 2013)

Composição imediata		Composição elementar	
Carbono fixo	31,46%	Carbono	49,59%
Voláteis	56,39%	Hidrogênio	6,28%
Umidade	9,71%	Oxigênio	43,74%
Cinzas	2,44%	Nitrogênio	0,39%

Tabela 4 - Calor específico, poder calorífico e densidade da madeira (Fonte: Janajreh e Al Shrah, 2013)

Calor específico da madeira	2,5 kJ/kg K
Poder calorífico superior da madeira	18000 kJ/kg
Densidade da madeira	400 kg/m ³

4.1.6. Cinética das reações químicas

Para a simulação das reações químicas, foram utilizados valores característicos de fator pré-exponencial e energia de ativação, devido ao fato de que o cálculo é feito baseado na equação de Arrhenius, conforme a seção 4.2.6. Os valores utilizados estão indicados na tabela 5, conforme os estudos de Blasi (2000).

A primeira reação indicada na tabela 5 representa uma molécula de material volátil que é liberada pela partícula quando ela atinge a condição para tal conforme estudado por Chan et al. (1985), que indica um fator pré-exponencial de 10^8 s^{-1} e uma energia de ativação de $140 \times 10^8 \text{ J/kmol K}$. Esta partícula, ao ser liberada, deve se decompor nas espécies que de fato compõe o material volátil da partícula. Isso é feito através do modelo de dissipação turbulenta, que considera que as reações são extremamente rápidas e a taxa de reação é controlada pela mistura turbulenta.

Tabela 5 - Cinética das reações químicas (Fonte: Blasi, 2000)

REAÇÃO	FATOR PRÉ-EXPONENCIAL	ENERGIA DE ATIVAÇÃO
$C_{0,268}H_{1,456}O_{0,639}N_{0,006}$ $\rightarrow 0,268CO + 0,371H_2O + 0,357H_2$ $+ 0,003N_2$	Modelo de dissipação turbulenta	
$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2$	$1e+18 ((m^3 \text{ mol}^{-1})^{-0,75} s^{-1})$	$166,28e+5 \text{ kJ/kmol}$
$2H_2 + O_2 \rightarrow 2H_2O$	$1e+11 (m^3 \text{ mol}^{-1} s^{-1})$	$42e+5 \text{ kJ/kmol}$
$CO + H_2O \rightarrow CO_2 + H_2$	$0,0265$	$65,8e+5 \text{ kJ/kmol}$
$C_{(s)} + O_2 \rightarrow CO_2$	$5,67e+9 s^{-1}$	$160e+5 \text{ kJ/kmol}$
$C_{(s)} + CO_2 \rightarrow 2CO$	$7,92e+4 (m^3 \text{ mol}^{-1} s^{-1})$	$218e+5 \text{ kJ/kmol}$
$C_{(s)} + 2H_2 \rightarrow CH_4$	$79,2 (m^3 \text{ mol}^{-1} s^{-1})$	$218e+5 \text{ kJ/kmol}$
$C_{(s)} + H_2O \rightarrow CO + H_2$	$7,92e+4 (m^3 \text{ mol}^{-1} s^{-1})$	$218e+5 \text{ kJ/kmol}$

4.2. Equações de conservação

4.2.1. Equação da continuidade

A equação da continuidade, também conhecida como equação da conservação de massa, é expressa pela equação 4.1 na sua forma geral.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = S_m \quad (4.1)$$

Onde ρ é a densidade do fluido, $\vec{v}$ é o vetor global de velocidade e S_m é a massa adicionada à fase contínua devido a uma segunda fase dispersa no fluido, ou alguma outra fonte determinada pelo usuário. Para geometrias bidimensionais axissimétricas, contudo, a equação da continuidade toma a forma da expressão 4.2.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho v_x) + \frac{\partial}{\partial r}(\rho v_r) + \frac{\rho v_r}{r} = S_m \quad (4.2)$$

Sendo x a coordenada axial, r a coordenada radial, v_x a velocidade axial e v_r a velocidade radial. (FLUENT, 2013)

4.2.2. Equação de conservação do momento

Para geometrias bidimensionais axissimétricas, a conservação do momento nas direções axial e radial são representadas pelas equações 4.3 e 4.4, respectivamente.

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_x) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_x) \\
& = -\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_x}{\partial x} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_x}{\partial r} + \frac{\partial v_r}{\partial x} \right) \right] \\
& + F_x
\end{aligned} \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial t}(\rho v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x}(r \rho v_x v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r \rho v_r v_r) \\
& = -\frac{\partial p}{\partial r} + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial x} \left[r \mu \left(\frac{\partial v_r}{\partial x} + \frac{\partial v_x}{\partial r} \right) \right] + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left[r \mu \left(2 \frac{\partial v_r}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \right) \right] \\
& - 2 \mu \frac{v_r}{r^2} + \frac{2}{3} \frac{\mu}{r} (\nabla \cdot \vec{v}) + \rho \frac{v_z^2}{r} + F_r
\end{aligned} \quad (4.4)$$

Onde p é a pressão, μ é a viscosidade dinâmica, F_x e F_r são forças de corpo externas nas direções axial e radial, respectivamente, e v_z representa a velocidade em redemoinho. O termo $\nabla \cdot \vec{v}$ é representado pela equação 4.5. (FLUENT, 2013)

$$\nabla \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_r}{r} \quad (4.5)$$

4.2.3. Equação da energia

A equação da energia é representada pela expressão 4.6.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot \left(k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v}) \right) + S_h \quad (4.6)$$

Onde T é a temperatura, k_{eff} é a condutividade efetiva e $\vec{J}_j$ é o fluxo de difusão de espécies químicas. Os três primeiros termos do lado direito da equação representam a transferência de energia por condução, difusão de espécies e dissipação viscosa, respectivamente. As equações 4.7, 4.8 e 4.9 se referem ao E e h_j da equação 4.6.

$$E = h - \frac{p}{\rho} + \frac{v^2}{2} \quad (4.7)$$

$$h = \sum_j Y_j h_j \quad (4.8)$$

$$h_j = \int_{T_{ref}}^T c_{p,j} dT \quad (4.9)$$

Onde Y_j é a fração mássica da espécie j . O termo S_h se refere à geração de calor advinda de reações químicas. Ele pode ser calculado com a utilização da equação 4.10.

$$S_h = - \sum_j \frac{h_j^0}{M_j} \mathcal{R}_j \quad (4.10)$$

Sendo h_j^0 a entalpia de formação, M_j é a massa molar e $\mathcal{R}_j$ é a taxa volumétrica de geração, todos referentes à espécie j (FLUENT, 2013).

4.2.4. Modelo de turbulência

A turbulência foi modelada utilizando-se o modelo $k - \varepsilon$ padrão. A energia cinética turbulenta (k) e sua taxa de dissipação (ε) podem ser obtidas das equações 4.11 e 4.12.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_k + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (4.12)$$

Onde S_k e S_ε são termos de geração definidos pelo usuário. A viscosidade turbulenta (μ_t) é calculada conforme a equação 4.13.

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.13)$$

O termo G_k representa a geração de energia cinética turbulenta devido ao gradiente da velocidade média, que pode ser vista na equação 4.14.

$$G_k = -\rho \overline{u'_i u'_j} \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \quad (4.14)$$

O termo G_b é a geração de energia cinética turbulenta devido a flutuações, e pode ser visto nas equações 4.15 e 4.16.

$$G_b = \beta g_i \frac{\mu_t}{Pr_t} \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (4.15)$$

$$\beta = -\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_p \quad (4.16)$$

Onde Pr_t é o número de Prandtl turbulento para energia, g_i é o componente do vetor gravitacional da direção i . O termo Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível da taxa de dissipação total, que é expresso pela equação 4.17.(FLUENT, 2013).

$$Y_M = 2\rho\varepsilon M_t^2 \quad (4.17)$$

O número de Mach, M_t , é calculado pela equação 4.18 e o termo a , que é a velocidade do som, pela equação 4.19.

$$M_t = \sqrt{\frac{k}{a^2}} \quad (4.18)$$

$$a \equiv \sqrt{\gamma RT} \quad (4.19)$$

Em que γ é a razão entre calores específicos e R é a constante universal dos gases perfeitos. As constantes utilizadas no modelo tem como valores padrão $C_{1\varepsilon} = 1,44$, $C_{2\varepsilon} = 1,92$, $C_\mu = 0,09$, $\sigma_k = 1,0$ e $\sigma_\varepsilon = 1,3$.

4.2.5. Transporte de espécies

Para o transporte de espécies, o software ANSYS Fluent prevê a fração mássica local de cada espécie (Y_i) através da solução da equação de convecção-difusão para a espécie i . Desta forma, utiliza-se a equação 4.20 na sua formulação geral (FLUENT, 2013).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho \vec{v} Y_i) = -\nabla \cdot \vec{J}_i + R_i + S_i \quad (4.20)$$

Onde R_i é a taxa líquida de produção da espécie i pela reação química e S_i é a taxa de criação pela adição da fase dispersa ou outra fonte definida pelo usuário. Esta equação será resolvida para $N-1$ espécies, sendo N o número total de espécies químicas contidas na fase fluida. A única espécie restante é calculada a partir da ideia de que a soma de todas as frações mássicas devem resultar em 1, sendo então o que

faltar para a unidade à partir da soma das outras. Indica-se escolher como esta espécie aquela que for a mais abundante no sistema. Para o cálculo do termo de difusão de massa ($\vec{J}_i$) em escoamentos turbulentos, utiliza-se a equação 4.21.

$$\vec{J}_i = - \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i - D_{T,i} \frac{\nabla T}{T} \quad (4.21)$$

Sendo $D_{i,m}$ o coeficiente de difusão de massa para a espécie i , $D_{T,i}$ o coeficiente de difusão térmica e Sc_t é o número de Schmidt turbulento.

4.2.6. Modelo de reações químicas

Para o cálculo das reações químicas, foi utilizado o modelo Finite-Rate/Eddy-Dissipation. Aqui, são calculados ambos os modelos descritos, e é escolhida pelo software para o cálculo da reação aquele o menor valor para a geração da espécie. No modelo Finite-Rate, a origem da espécie química i devido à reação é computada pela soma das fontes de reações de Arrhenius através das N_R reações que a espécie participa, conforme mostrado na equação 4.22.

$$R_i = M_{w,i} \sum_{r=1}^{N_R} \hat{R}_{i,r} \quad (4.22)$$

Onde $M_{w,i}$ é o peso molecular da espécie i e $\hat{R}_{i,r}$ é a taxa molar de Arrhenius de geração/destruição da espécie i na reação r . Considerando uma reação química no formato da equação 4.23, pode-se ter uma taxa de $\hat{R}_{i,r}$ dada pela equação 4.24.



$$\hat{R}_{i,r} = (v'_{i,r} - v''_{i,r}) \left(k_{f,r} \prod_{j=1}^N [C_{j,r}]^{(\eta'_{j,r} + \eta''_{j,r})} \right) \quad (4.24)$$

Sendo que N é o número total de espécies, $v_{i,r}$ é o coeficiente estequiométrico para reagentes e produtos, $\mathcal{M}_i$ é o símbolo denotando a espécie química i , k_r é a taxa constante para a reação r (f para reação direta e b para reação reversa), $C_{j,r}$ é a concentração molar da espécie j na reação r e $\eta_{j,r}$ é a taxa de expoente. O termo

da taxa constante para a reação r é calculado pela expressão de Arrhenius, mostrada na equação 4.25.

$$k_{f,r} = A_r T^{\beta_r} e^{-E_r/RT} \quad (4.25)$$

Onde A_r é o fator pré-exponencial, β_r é o expoente de temperatura e E_r é a energia de ativação da reação. Já para o modelo Eddy-Dissipation, cuja taxa de reação é controlada pela mistura turbulenta, a taxa de geração/destruição da espécie, $\hat{R}_{i,r}$, é determinada pelo menor valor entre as equações 4.26 e 4.27 (FLUENT, 2013).

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A \rho \frac{\varepsilon}{k} \min_{\mathcal{R}} \left(\frac{Y_{\mathcal{R}}}{v'_{\mathcal{R},r} M_{w,\mathcal{R}}} \right) \quad (4.26)$$

$$R_{i,r} = v'_{i,r} M_{w,i} A B \rho \frac{\varepsilon}{k} \frac{\sum_P Y_P}{\sum_j^N v''_{j,r} M_{w,j}} \quad (4.27)$$

Onde A e B são constantes empíricas de valor 4,0 e 0,5, respectivamente, $Y_{\mathcal{R}}$ é a fração mássica de um reagente particular $\mathcal{R}$, Y_P é a fração mássica de um produto particular P .

4.2.7. Modelo da fase discreta (Discrete Phase Model)

O balanço de forças se faz pela igualdade entre a inércia da partícula com as forças nela agindo, o que é mostrado na equação 4.28.

$$\frac{d\vec{u}_p}{dt} = F_D(\vec{u} - \vec{u}_p) + \frac{\vec{g}(\rho_p - \rho)}{\rho_p} + \vec{F} \quad (4.28)$$

Onde $\vec{u}_p$ é a velocidade da partícula, $\vec{u}$ é a velocidade do fluido, $F_D(\vec{u} - \vec{u}_p)$ é a força de arrasto por unidade de massa (F_D é calculado pela equação 4.29), ρ_p é a densidade da partícula, ρ é a densidade do fluido e $\vec{F}$ é um termo de aceleração adicional.

$$F_D = \frac{18\mu}{\rho_p d_p^2} \frac{C_D Re}{24} \quad (4.29)$$

Sendo C_D o coeficiente de arrasto, dado pela equação 4.30 e Re o número de Reynolds relativo, dado pela equação 4.31.

$$C_D = a_1 + \frac{a_2}{Re} + \frac{a_3}{Re^2} \quad (4.30)$$

$$Re \equiv \frac{\rho d_p |\vec{u}_p - \vec{u}|}{\mu} \quad (4.31)$$

Onde a_1 , a_2 e a_3 são constantes e d_p é o diâmetro da partícula. A trajetória da partícula é calculada à partir da sua velocidade, e é descrita pela equação 4.32.

$$\frac{dx}{dt} = u_p \quad (4.32)$$

O aquecimento/resfriamento inerte da partícula é aplicado quando a temperatura da partícula é menor que a temperatura de vaporização (T_{vap}), que é definida pelo usuário (equação 4.33), ou quando a fração volátil da partícula ($f_{v,0}$) já foi consumida (equação 4.34).

$$T_p < T_{vap} \quad (4.33)$$

$$m_p \leq (1 - f_{v,0})m_{p,0} \quad (4.34)$$

Sendo T_p a temperatura da partícula, $m_{p,0}$ a massa inicial da partícula e m_p a massa atual da partícula. Atendendo a uma das duas condições, é utilizado um balanço de energia para relacionar a temperatura da partícula, a transferência de calor por convecção e a absorção/emissão de radiação da superfície da partícula, o que é definido pela equação 4.35.

$$m_p c_p \frac{dT_p}{dt} = h A_p (T_\infty - T_p) + \varepsilon_p A_p \sigma (\theta_R^4 - T_p^4) \quad (4.35)$$

Sendo c_p o calor específico da partícula, h o coeficiente de transferência de calor por convecção, A_p a área superficial da partícula, T_∞ a temperatura local da fase contínua, ε_p a emissividade da partícula, σ a constante de Stefan-Boltzmann e θ_R a temperatura de radiação. Caso as equações 4.33 e 4.34 não sejam verdadeiras, ocorrerá a desvolatilização da partícula. O modelo de desvolatilização utilizado é o da Taxa Cinética Única (Single Kinect Rate), que assume que a taxa de desvolatilização é dependente da quantidade de voláteis restantes na partícula, e é descrito pela equação 4.36 (FLUENT, 2013).

$$-\frac{dm_p}{dt} = k [m_p - (1 - f_{v,0})m_{p,0}] \quad (4.36)$$

Onde k é definido pela equação de Arrhenius, conforme a equação 4.37.

$$k = A_1 e^{-(E/RT)} \quad (4.37)$$

A combustão na superfície da partícula ocorre quando começa a liberação de todos os voláteis da partícula (o que equivale, sem a igualdade, à equação 4.34), e vai até quando a fração combustível (f_{comb}) é consumida, conforme a equação 4.38.

$$m_p < (1 - f_{v,0} - f_{comb})m_{p,0} \quad (4.38)$$

As reações da partícula são calculadas pelo modelo de Reações Múltiplas de Superfície (Multiple Surface Reactions). A taxa de diminuição da espécie na superfície da partícula é dada pela equação 4.39.

$$\bar{\mathcal{R}}_{j,r} = A_p \eta_r Y_j \mathcal{R}_{j,r} \quad (4.39)$$

Sendo η_r o fator de efetividade, Y_j a fração mássica da espécie j na superfície da partícula. O termo $\mathcal{R}_{j,r}$, a taxa de reação na superfície da partícula por unidade de área, é dado pela equação 4.40.

$$\mathcal{R}_{j,r} = \mathcal{R}_{kin,r} \left(p_n - \frac{\mathcal{R}_{j,r}}{D_{0,r}} \right)^{N_r} \quad (4.40)$$

Onde p_n é a pressão parcial das espécies da fase gás, N_r é a ordem aparente da reação r . O coeficiente da taxa de difusão para a reação r , $D_{0,r}$, e a taxa cinética da reação r , $\mathcal{R}_{kin,r}$, são dados pelas equações 4.41 e 4.42, respectivamente (FLUENT, 2013).

$$D_{0,r} = C_{1,r} \frac{[(T_p + T_\infty)/2]^{0,75}}{d_p} \quad (4.41)$$

$$\mathcal{R}_{kin,r} = A_r T_p^{\beta_r} e^{-(E_r/RT_p)} \quad (4.42)$$

Onde $C_{1,r}$ é uma constante.

4.3. Métodos de solução

Para a obtenção da solução numérica, foram utilizados os métodos listados na tabela 6. Foram escolhidos aqueles que melhor se adaptaram a resolução do

problema após a realização das simulações, principalmente na questão da convergência da solução numérica.

Tabela 6 - Métodos de solução numérica

Pressure-Velocity Coupling	SIMPLE
Gradient	Least Squares Cell Based
Pressure	Second Order
Momentum	Second Order Upwind
Turbulent Kinetic Energy	First Order Upwind
Turbulent Dissipation Rate	First Order Upwind
Species	First Order Upwind
Energy	Second Order Upwind

Foram ajustados também os Under Relaxation-Factors na solução, conforme tabela 7, conforme eles apresentavam uma melhor estabilidade no cálculo da solução. Eles são fatores utilizados de forma a reduzir a variação de determinada propriedade de uma iteração para outra. A grande vantagem da redução destes fatores é o aumento da estabilidade da solução, que por vezes não é encontrada ou simplesmente impede que o software continue as iterações devido às grandes variações que podem ocorrer durante o cálculo numérico. Contudo, isto também pode causar um acréscimo no tempo de solução, exatamente porque o incremento de uma determinada variável passa a ser menor e a aproximação do resultado numérico final passa a ser mais lenta. Além disso, os valores dos resíduos usados como critério de convergência podem ser vistos na tabela 8. Foi utilizado também o Cloud Model, de maneira que as trajetórias das partículas são rastreadas como uma nuvem de partículas com uma média da trajetória. Outro recurso utilizado foi o Linearize Source Terms, de forma a aumentar a estabilidade da solução numérica.

Tabela 7 - Under-Relaxation Factors utilizados na solução

Pressure	0,3
Density	0,9
Body Forces	1
Momentum	0,7
Turbulent Kinectic Energy	0,8
Turbulent Dissipation Rate	0,8
Turbulent Viscosity	1
Species	0,7
Energy	0,8
Discrete Phase Sources	0,5

Tabela 8 - Resíduos utilizados como critério de convergência

continuity	0,001
x-velocity	0,001
y-velocity	0,001
energy	1e-07
k	0,001
epsilon	0,001
o2	0,001
co2	0,001
h2o	0,001
ch4	0,001
h2	0,001
n2	0,001

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Os perfis de temperatura do gaseificador obtidos através da simulação numérica podem ser vistos na figura 10. São mostrados os resultados das duas malhas com diferente quantidade de elementos, além do resultado alcançado através de experimentos por Janajreh e Al Shrah (2013).

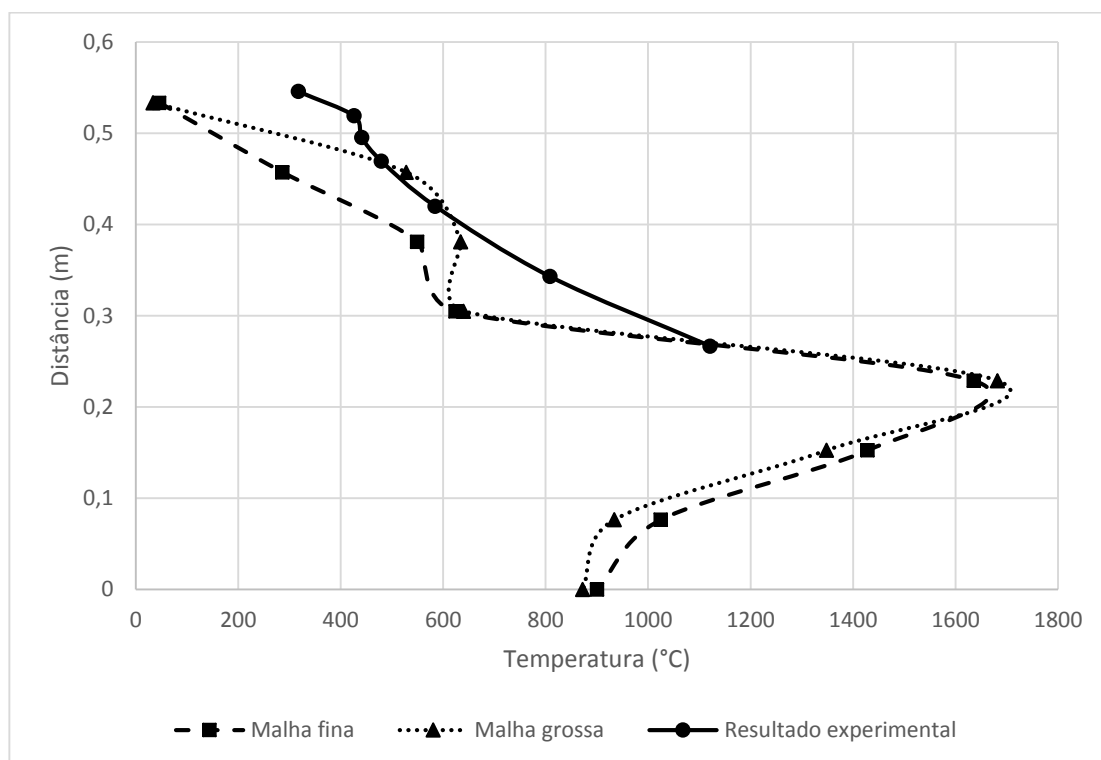


Figura 10 - Comparação entre os perfis de temperaturas localizados a 3 cm do eixo no resultado numérico e o resultado experimental de Janajreh e Al Shrah (2013), obtido no centro do gaseificador

Primeiramente, pode-se observar que os resultados para ambas as malhas apresentaram uma certa diferença. Isso pode ser justificado pela dificuldade de convergência do modelo, onde já foram utilizados alguns recursos, como diminuição dos Under-Relaxation Factors e modelo de solução de primeira ordem, visando uma melhora neste aspecto, mas ainda assim pode se notar que há uma certa limitação. Contudo, espera-se que com um tempo maior de solução se obtenha resultados melhores. O fato de que algumas regiões apresentaram uma temperatura bem semelhante já pode indicar que ambos tendem a um mesmo resultado. Um refinamento na malha, por exemplo, poderia fornecer resultados cada vez mais próximos, porém o tempo de resolução devido ao maior esforço computacional seria

extremamente alto, o que dificulta a obtenção dos mesmos. Uma alteração no formato do elemento também poderia influenciar no resultado final.

Na comparação do resultado numérico com o resultado obtido experimentalmente, as diferenças podem se dar principalmente à divergência nas condições de operação do gaseificador. Devido ao fato do experimento não apresentar as condições reais utilizadas durante o processo, foram utilizados valores de condições de contornos que provavelmente não são os mesmos que o real. Desta forma, já era esperado que os resultados não coincidisse. Apesar dessas diferenças observadas, ainda assim o comportamento do perfil de temperaturas se desenvolve de maneira semelhante ao apresentado pelo experimento, o que reforça o fato de que com uma condição de contorno mais próxima à usada experimentalmente, seria possível obter resultados melhores.

Outro motivo pelo qual podem ter sido geradas as diferenças no perfil são as alterações realizadas na geometria do problema em relação ao gaseificador real. Algumas modificações foram feitas de forma a melhorar a convergência do problema, porém de maneira que não afetasse significativamente a solução numérica em comparação com os experimentos. Contudo, ainda assim a divergência apresentada pode ter sido influenciada pelas simplificações realizadas.

As hipóteses assumidas na solução do problema também influem no resultado. A simplificação de considerar o problema como axissimétrico pode trazer erros à solução, pelo fato de que no gaseificador real espera-se que o ar seja injetado apenas através de orifícios, ao invés de ser injetado por todo entorno do gaseificador. Isso implica numa velocidade do ar menor, de maneira a manter uma vazão volumétrica constante. Desta forma, uma quantidade menor de oxigênio tem acesso à região central do gaseificador, se concentrando nas laterais.

A injeção das partículas de água simulando a umidade da madeira inserida no gaseificador é mostrada na figura 11. Cada linha que sai da parte superior do gaseificador representa uma injeção de partícula de água. Logo após a liberação das partículas, as mesmas desaparecem rapidamente. Isso representa que as partículas já não fazem mais parte da simulação, o que neste caso significa que elas evaporaram. Isso caracteriza a região de desumidificação do gaseificador, uma vez

que logo na parte de cima a água já se apresenta toda na fase vapor, se integrando à solução através da fase contínua, e não mais na fase discreta.

Pode-se observar também que na região central há uma maior permanência das partículas de água do que na periferia, o que implica que naquela região a partícula só obteve a energia necessária para sua evaporação total em uma região inferior. Isso pode se dever ao fato de que a simulação concentrou a maior parte das partículas de combustível na periferia do gaseificador, de forma que as regiões laterais apresentaram uma maior temperatura.

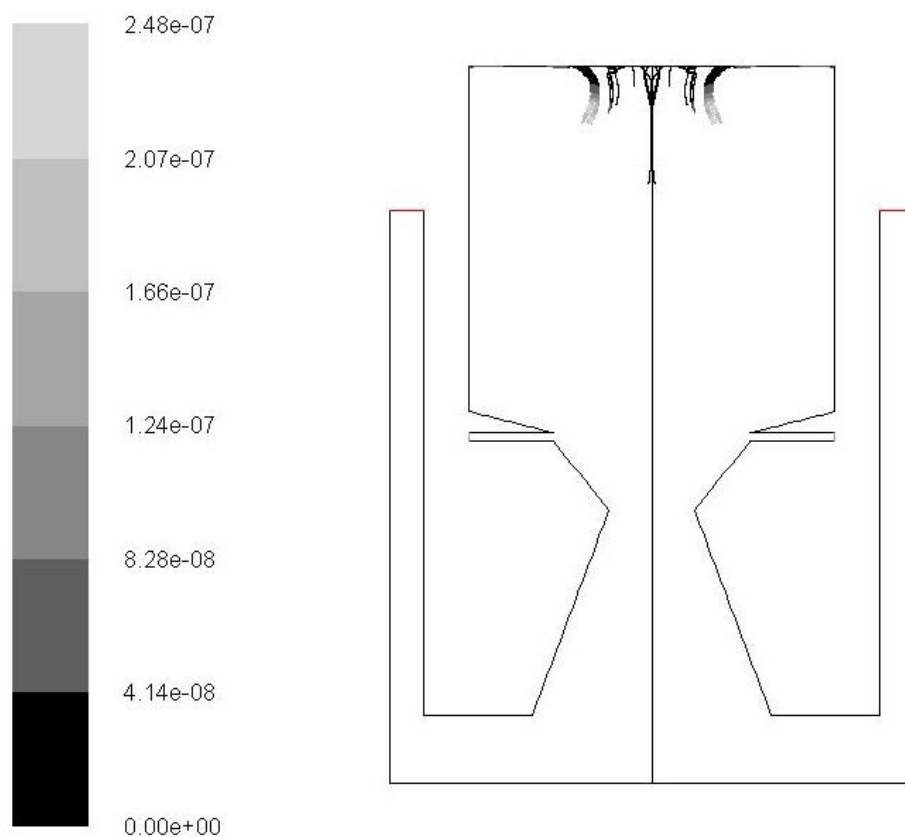


Figura 11 - Evaporação das partículas injetadas de água em kg/s

A figura 12 mostra a concentração de voláteis nas partículas de combustível injetadas. Pode-se observar que logo na região superior é mostrado seu valor máximo, 0,625, próximo ao ajustado na configuração da partícula. Porém logo em seguida, com o aumento da temperatura (mostrado na figura 10), esta concentração começa a diminuir de modo que reste apenas o material carbonáceo na partícula injetada, o que ocorre na maior parte das partículas antes de chegar à zona central do gaseificador, onde há a maior geração de calor. Este fenômeno caracteriza a zona de pirólise na simulação numérica, visto que esta região praticamente não possui oxigênio.

Neste momento há, por consequência, um aumento na fração mássica de carbono na partícula. A simulação nesta região não prevê uma quantidade significativa de reações químicas, predominando então a liberação dos voláteis que lá acontece. Assim, ocorre um aumento da espécie de material volátil, que posteriormente é fraccionada nas espécies químicas que, de fato, compõem a madeira que é gaseificada.

Outro fato a ser analisado é em relação a distribuição das injeções. A maior parte delas se concentra nas laterais do gaseificador, enquanto a região central acaba ficando mais escassa. Este fenômeno pode ocorrer devido a influência do campo de velocidades, que altera diretamente o curso da partícula, conforme a equação 4.28. Essa concentração desigual implica também numa maior geração de temperatura pelas laterais, uma vez que ali que estará concentrada a maior parte dos particulados, que gerarão calor.

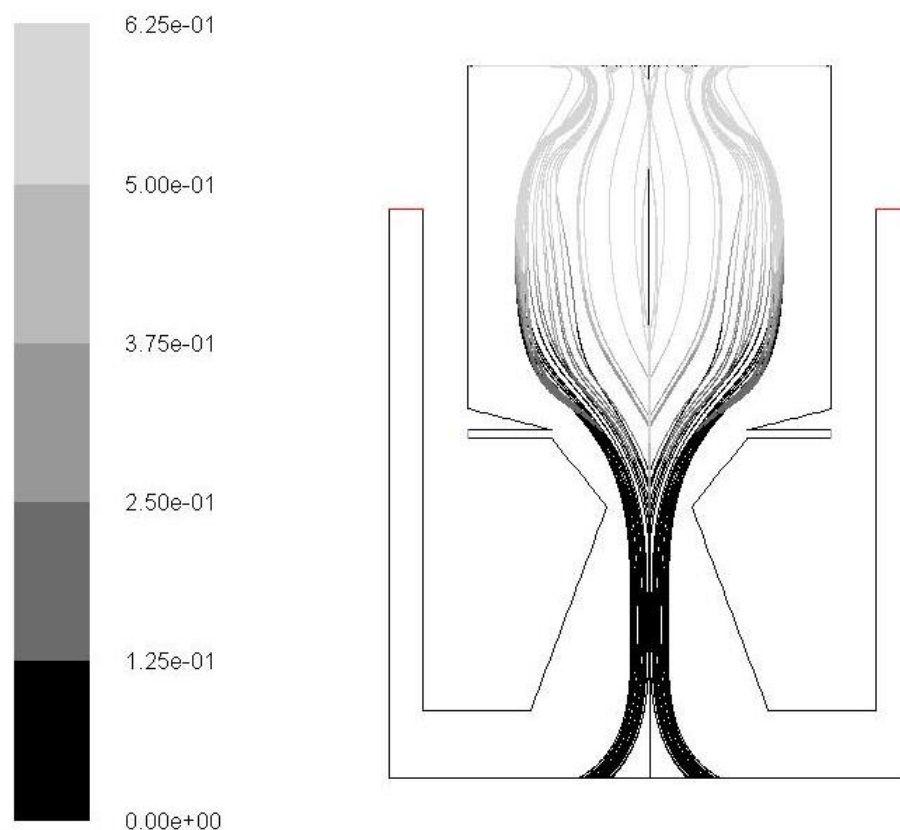


Figura 12 - Fração mássica de voláteis na partícula de madeira

O local de maior temperatura, de acordo com a figura 10, é na parte onde há a redução da seção no gaseificador. Esta região também coincide com o local onde há maior concentração de oxigênio, ou seja, é onde ocorre a maioria das reações

exotérmicas, e é esta região que fornece o calor para todo o gaseificador. Caracteriza-se então a zona de oxidação do gaseificador. A combustão da partícula é mostrada na figura 13. A maior taxa de reação se dá exatamente no estrangulamento do gaseificador, coincidindo com o local de maior temperatura. Nas regiões superior e inferior, não se pode perceber a ocorrência desta reação, uma vez que praticamente não há oxigênio e há também uma temperatura relativamente menor que o da região do estrangulamento.

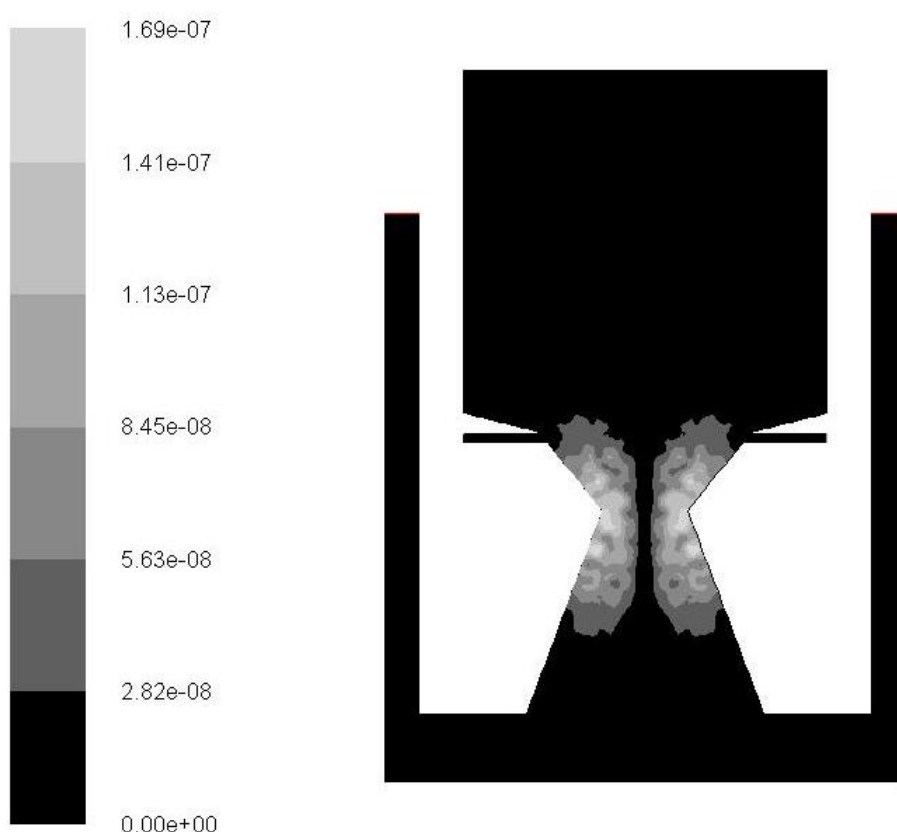


Figura 13 – Combustão da partícula, em kg/s

A figura 14 mostra a concentração de monóxido de carbono e gás hidrogênio. Ambos apresentam uma evolução semelhante. Na parte superior do gaseificador, há uma baixa concentração da espécie química, uma vez que não há alguma reação ocorrendo naquela região, exceto pela evaporação das partículas de água. Porém, com o aumento da temperatura, a pirólise começa a ocorrer, de forma que a concentração dos componentes aumenta significativamente na região onde a concentração de voláteis nas partículas injetadas cai, conforme já mostrado pela figura 12. A concentração de CO chegou a 54,6% da massa do gás e o H_2 , 4,19%. Isso indica que a maior parte dos gases liberados na gaseificação nesta simulação são originados na zona de pirólise. Pode se perceber ainda uma geração dos

componentes devido a reações heterogêneas, na região do estrangulamento do gaseificador.

Na parte inferior, com a adição principalmente do nitrogênio contido no ar, essa alta fração mássica gerada pela pirólise cai, uma vez que ele também irá compor uma fração significativa do gás de saída. Então ao acontecer a mistura dos gases na região do estrangulamento, há uma queda na concentração tanto do monóxido de carbono, quanto do gás hidrogênio.

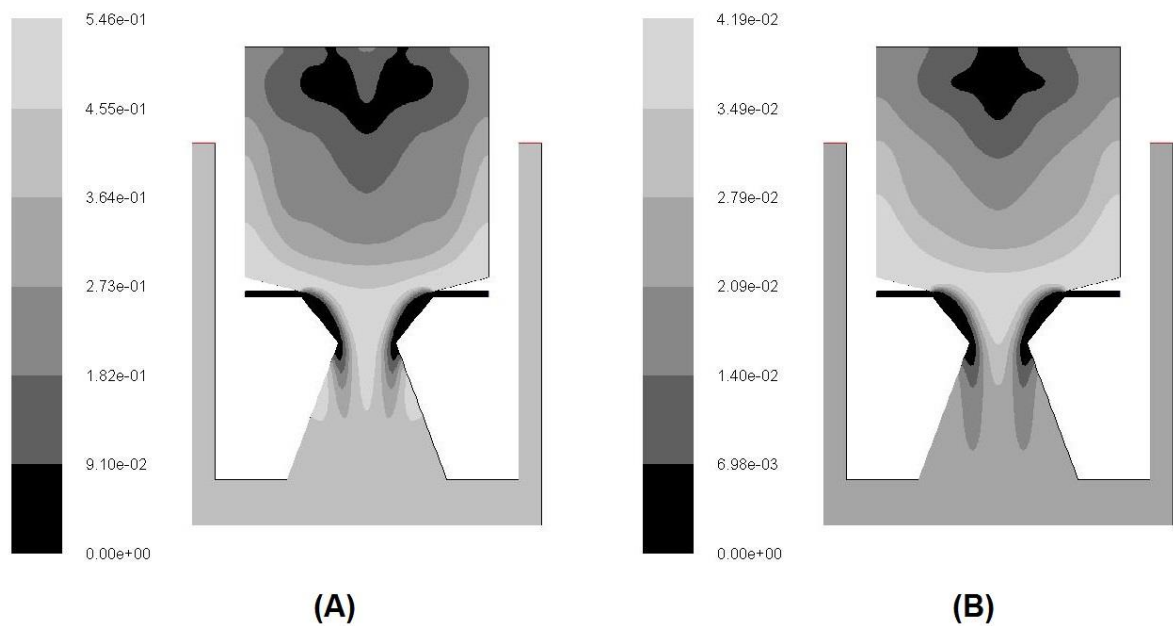


Figura 14 - Fração mássica de: (A) CO e (B) H₂

A tabela 9 mostra a comparação entre a composição do gás na saída, em termos da fração mássica, para a malha fina utilizada, a malha grossa e o resultado calculado por Janajreh e Al Shrah (2013), realizado considerando condições idealizadas. Numa comparação entre os resultados das malhas, pode-se perceber diferenças mínimas entre as composições, variando no máximo 1,18% no caso do monóxido de carbono. Isso indica uma independência deste resultado em relação à malha. Comparando o resultado numérico com o ideal calculado, algumas diferenças podem ser notadas. O componente com a diferença mais significativa foi a água. Isso pode se dar pelo fato de que a simulação das partículas de água ter sido um valor maior do que o real, que causou esta concentração maior de água na saída. Outro motivo pode ser que, como o resultado calculado é aquele considerado no equilíbrio ideal, é possível que nem mesmo a composição do gás obtida através de experimentos mostre a mesma composição. Essa concentração maior de H₂O

impacta também na fração dos outros componentes, principalmente no CO e N₂, visto que são aqueles de maior concentração. Contudo, todos os outros apresentam valores pequenos em comparação com o CO e N₂, como no resultado ideal, ainda que seja diferente dele. Ou seja, a previsão da composição do gás de saída segue a tendência da composição do gás apresentada no cálculo ideal, com os componentes de maior concentração também sendo os mais representativos na simulação numérica.

Tabela 9 - Frações mássica para a composição do gás na saída, em porcentagem, nas malhas fina e grossa e o resultado ideal (Janajreh e Shrah, 2013)

Componente	Malha fina (%)	Malha grossa (%)	Resultado ideal (%)
CO	41,73	42,91	57,59
H ₂	2,19	2,26	0,85
CO ₂	6,15	5,49	0,14
H ₂ O	8,44	7,85	2,58E-04
CH ₄	0,04	0,04	8,61E-05
N ₂	41,45	41,44	41,37
O ₂	0	0	0

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

A abordagem lagrangeana através do modelo de fase discreta é uma alternativa que o software ANSYS Fluent oferece para a simulação de escoamentos multifásicos, e que pode ser utilizado de inúmeras maneiras, como partículas inertes que não reagem com o escoamento, gotículas de água que se evaporam ao atingir a condição de temperatura ou até partículas em combustão, que foi o principal objeto de estudo deste trabalho.

A modelagem utilizada então se mostrou eficiente em diversos aspectos. A previsão das zonas do gaseificador ocorreu conforme o esperado, de forma que elas puderam ser identificadas na simulação de uma maneira bem definida. Um outro aspecto diz respeito à previsão dos gases, que apresentaram uma composição condizente com o resultado ideal apresentado por Janajreh e Al Shrah, apesar da utilização de uma condição de contorno aproximada. O perfil de temperaturas também apresentou a tendência esperada pela literatura, onde ela apresenta seu máximo próximo ao estrangulamento do gaseificador, um crescimento gradual até este ponto e uma redução após esta região, devido às reações endotérmicas.

Alguns pontos, contudo, devem ser observados. A partícula é bastante influenciada pela velocidade do fluido, e isso pode fazer com que ela saia com uma velocidade maior do que num experimento real. A velocidade do fluido é outra limitação, pois devido à hipótese de o experimento ser axissimétrico, para se manter a vazão volumétrica desejada deve-se usar uma velocidade menor do que a que poderia ser usada caso a velocidade não fosse imposta por toda a circunferência. Desta forma, o ar injetado, e por consequência, o oxigênio, se concentra bastante nas regiões laterais do gaseificador, o que gera uma temperatura maior nesta região do que em outras partes. Uma outra dificuldade encontrada diz respeito à convergência numérica. A geometria do gaseificador do tipo downdraft aumenta bastante o esforço computacional, de maneira que alguns parâmetros, como os Under-Relaxation Factors e os métodos de solução devam ser ajustados.

Para futuros trabalhos, uma abordagem que poderia ser utilizada é a utilização de um regime transiente para a fase discreta. Ele pode ser utilizado em conjunto com

um regime permanente da fase contínua, e esta combinação é prevista pelo próprio software para alguns casos. Na modelagem usada (permanente), partículas são injetadas e saem do gaseificador após percorrerem a geometria. No modelo transiente elas percorrem uma determinada distância e, diferente do regime permanente, permanecem na geometria por mais algumas iterações da fase contínua. Esta modelagem poderia ser utilizada para simular um certo acúmulo das partículas no gaseificador, de forma a aproximar ainda mais o resultado numérico do experimental.

Outra metodologia que poderia ser adotada é a utilização de um modelo tridimensional para o gaseificador, de forma a determinar com ainda mais precisão o campo de velocidades dentro do fluido. Isso permitiria, com a utilização de uma geometria adequada, usar uma velocidade do ar melhor como condição de contorno, que poderia atingir locais que o modelo axissimétrico não permite devido a uma velocidade menor do ar que entra.

Ainda em relação à velocidade do ar, outra sugestão para trabalhos futuros seria a simulação de um meio poroso, que poderia limitar a velocidade do ar na exaustão sem alterar a vazão volumétrica que entra. Isso também poderia gerar uma melhor distribuição de temperaturas e diminuir a velocidade da partícula na região do estrangulamento, o que diminuiria algumas limitações da modelagem.

Por fim, o modelo apresentado também poderia se adequar bem a outros tipos de gaseificadores. A utilização do tipo updraft, por exemplo, poderia trazer também bons resultados, visto que a geometria deste é mais simples na questão de modelagem computacional, o que poderia gerar uma melhor convergência.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

JANAJREH, I.; AL SHRAH, M. Numerical and experimental investigation of downdraft gasification of wood chips. *Energy Conversion And Management*, Abu Dhabi, v. 65, n. 1, p.783-792, jan. 2013.

FLUENT, ANSYS Fluent User's Guide, ANSYS Inc., Versão 15.0, Novembro 2013.

FLUENT, ANSYS Fluent Theory Guide, ANSYS Inc., Versão 15.0, Novembro 2013.

BAKAR, Noorhelinahani Abu. Modelling of downdraft gasifier using computational fluid dynamics software fluent. 2003. 71 f. Tese (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, University Of Strathclyde, Glasgow, 2003.

BELGIORNO, V.; DE FEO, G.; DELLA ROCCA, C.; NAPOLI, R. M. A. Energy from gasification of solid wastes. *Waste Management*, v.23, n.1, p 1-15, 2003.

BLASI, Colomba di. Dynamic behaviour of stratified downdraft gasifiers. *Chemical Engineering Science*, Napoli, v. 55, n. 15, p.2931-2944, ago. 2000.

BRAMMER, J. G.; BRIDGWATER, A. V., 2002, "The Influence of Feedstock Drying on the Performance and Economics of a Biomass Gasifier-Engine CHP System," *Biomass and Bioenergy*, Vol. 22, No. 4, pp. 271-281.

CARDOSO, M.T. Da iluminação das cidades do século XIX às biorrefinarias modernas: história técnica e econômica da gaseificação. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Energia EP/FEA/IEE/IF da Universidade de São Paulo, São Paulo, pp.1-49, 2013.

CEMIG – Companhia Energética de Minas Gerais, Gaseificação de biomassa. Belo Horizonte, Divisão de Análise e Desenvolvimento Energético, 1986.

Centro Nacional de Referência de Biomassa. Estado da Arte da Gaseificação. São Paulo: CENBIO, 2002.

CHAN, Wai-chun R.; KELBON, Marcia; KRIEGER, Barbara B.. Modelling and experimental verification of physical and chemical processes during pyrolysis of a large biomass particle. Fuel, Seattle, v. 64, n. 11, p.1505-1513, nov. 1985.

CHANG. R. General Chemistry : the essential concepts. 4. ed. São Paulo. McGraw-Hill, 2006.

Chemistry World, Fatores que alteram o equilíbrio químico, out. 2011. Disponível em: <<http://www.quimicaremix.blogspot.com.br>>. Acesso 01 jul. 2015

Cinética Química. Efeito da temperatura sobre a velocidade das reações químicas. Disponível em:<<http://www.iq.ufrgs.br/ead/fisicoquimica/cineticaquimica/mecanismos>>. Acesso 01 jul 2015.

DESROSIERS, R. Fundamental Air Gasification Engineering Parameters, SERI/PR-234-1470,1982.

FOX, Robert W.; MCDONALD, Alan T.; PRITCHARD, Philip J.. Introdução à mecânica dos fluidos. 7. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2010.

GHOSH, D.; SAGAR, A.; KISHORE, V.V. N. Scaling up biomass gasifier use: applications barrier and intervention, Washington, 2004.

LUAN, Yan-tsan; CHYOU, Yau-pin; WANG, Ting. Numerical analysis of gasification performance via finite-rate model in a cross-type two-stage gasifier. In: INTERNATIONAL PITTSBURGH COAL CONFERENCE, 28., 2011, Pittsburgh.

LUCAS, C., SZEWCZYK, D., BLASIAK, W.; MOCHIDA, S., 2004, "High-Temperature Air and Steam Gasification of Densified Biomass," Biomass and Bioenergy, Vol. 27, No. 6, pp. 563-575.

LUZ ALVES, C.D. Caracterização de um gaseificador do tipo downdraft. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Pará, Belém, 2010.

MARTIN et al. Tensão térmica e taxa de reação em um reator para gaseificação de biomassa do tipo concorrente. Revista Ceres, 2010.

MELO; B. A. Avaliação computacional de um sistema de gaseificação em leito fluidizado utilizando o software CSBF, 2008. p. 137. Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Itajubá, Instituto de Engenharia Mecânica. Itajubá, Minas de Gerais, 2008.

MUILENBURG, Marta Ann. Computational modeling of the combustion and gasification zones in a downdraft gasifier. 2011. 51 f. Tese (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, University Of Iowa, Iowa, 2011.

OKUGA, Arthur. Analysis and operability optimization of an updraft gasifier unit. 86 f. Tese (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Eindhoven University Of Technology, 2007.

PONTE FILHO, F. Gaseificadores de leito fixo: Análise e Modelo para otimização de projetos e pesquisas. Brasília: Editora do Centro Gráfico do Senado Federal, 1988.

PRABIR. B. Biomass Gasification, Pyrolysis, and Torrefaction. Practical Design and Theory. Dalhousie University Greenfield Research Incorporated, Elsevier and Book Aid International, vol. 2, 2013.

RASHIDI, Arash. CFD Simulation of Biomass Gasification Using Detailed Chemistry. 2011. 123 f. Dissertação (Doutorado) - Curso de Ciências Naturais e Matemática, Ruprecht-karls-universität, Shiraz, 2011.

REDDY. S; FARELL, A.; STANFORD, T. Evaluation and implementation of control strategies for moving-bed coal gasifiers using MGAS. The Chemical Engineering Journal v.59, n.2, p.133-141, 1995.

REED, T.; DASS, A. Handbook of Biomass Downdraft Gasifier Engine Systems, Solar Energy Research Institute (SERI), U.S. Department of Energy Solar Technical Information Program. Third Printing, 140p. 1989.

RODRIGUES, R. Modelagem e simulação de um gaseificador em leito fixo para o tratamento de resíduos sólidos da indústria calçadista. Dissertação de Mestrado – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UFRGS, 2009.

SOUZA SANTOS, M.L. Solid fuels combustion and gasification: Modeling, simulation, and equipment operation. New York: Marcel Dekker, 2004.

WANDER, P. R. Utilização de resíduos de madeira e lenha como alternativa de energia renováveis para o desenvolvimento sustentável da região nordeste do Estado do Rio Grande do Sul. 2001. 106 p. Teses (Doutorado em Energia) - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2001.